表界面协同的理论研究

傅钢

厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室

厦门市思明南路422号，361005，Email: gfu@xmu.edu.cn

多相催化是借助高性能材料，在分子和原子水平上对分子的化学键进行重排、对化学态进行重组，其根本是分子在催化剂表面以及载体（或配体）与其形成的多相界面上的相互作用。因此，界面区域的结构、电子特性、以及热力学和动力学特征可能是认识相关催化过程的关键。我们将着重讨论几个重要的表界面催化体系：：1）合金界面对反应的影响；2）有机胺修饰对Pt基催化剂加氢的选择性影响；3）金属氧化物界面对反应活性的促进机制。我们将密切结合理论和实验，从原子分子水平上阐明界面协同的科学内涵。

**参考文献：** *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 3440; *Nature Mater.* **2016**, 15, 564; *Science*, **2016**, *352*, 797-800; *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 2122–2131；*Nature Comm.* **2018**, 9, 3367；*Chem,* **2018***, 4, 1080.*

**傅钢个人简介**：男，1974年12月生。1997年本科毕业于厦门大学；2004年在厦门大学获得理学博士学位，导师为万惠霖院士和徐昕教授。2004年留校任教，2008年晋升为副教授，2016年晋升为教授。2011-2012年作为访问教授前往法国里昂高等师范学院与Philippe Sautet教授进行合作交流。目前主要的研究领域是纳米表界面催化的理论研究，从事多相催化的理论研究，主要运用密度泛函理论，从实际复杂的催化体系中抽提模型，应用密度泛函理论深入研究复杂催化体系表界面电子结构及其协同催化机制。深入认识表面有机配体对催化加氢选择性的调控机制，发展了表面配位化学的概念；先后在Science(2篇)、Nature Mater.(1篇)、Nature Commun.(4篇)、J. Am. Chem. Soc. 3篇)、Angew. Chem. Int. Ed.(2篇)、Chem (2篇)、ACS Catal. (2篇)等刊物上发表论文50余篇。