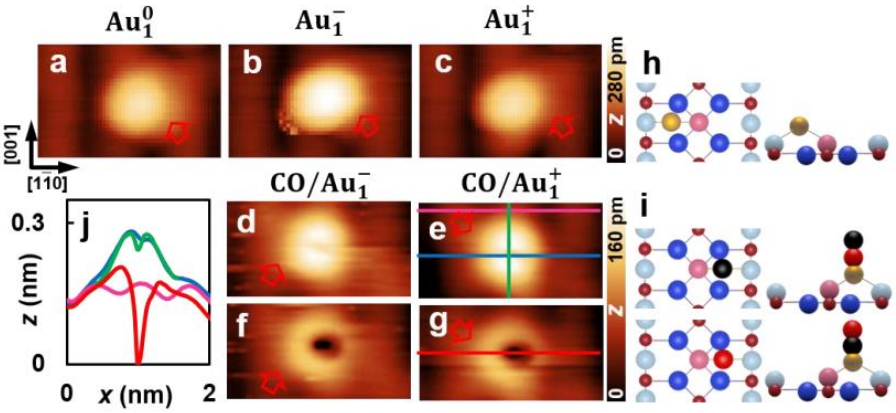
Názov výsledku: Štúdium katalýzy aktivovanej jedným atómom: Oxidácia CO na adatóme Au na oxidovanom povrchu TiO2
Anglicky názov výsledku: Study of tip-activated single-atom catalysis: CO oxidation on Au adatom on oxidized rutile TiO2 surface

Autori: Yuuki Adachi, Ján Brndiar, Martin Konôpka, Robert Turanský, Qiang Zhu, Huan Fei Wen, Yasuhiro Sugawara, Lev Kantorovich, Ivan Štich, Yan Jun Li
Typ a číslo projektu: APVV-21-0272

Anotácia výsledku:
Študovali sme oxidačnú reakciu molekuly CO katalyzovanú jedným atómom zlata (Au_1) na oxidovanom povrchu TiO_2 (O-TiO_2). Napriek tomu, že táto reakcia je kľúčová pre skleníkovú recykláciu, jej mechanizmus na atomárnej úrovni stále nie je známy. Použitím metód atomárnej silovej mikroskópie (AFM) sa nám podarilo ukázať, že nabitie atómov Au_1 na povrchu TiO_2 zohráva významnú úlohu pri adsorpcii CO na Au_1. Identifikovali sme dve adsorpčné geometrie na Au_1 (obr. 1). Ukázali sme, že použitím hrotu AFM mikroskopu dokážeme plne kontrolovať redox stav Au1, adsorpčnú geometriu CO molekuly, adsorpciu a desorpciu molekuly CO na povrchu, ako aj aktivovať Eley-Rideal oxidačnú reakciu medzi CO molekulou a susedným adatómom kyslíka. Na rozdiel od presvedčenia v komunite, že štandardné metódy teórie funkcionálu hustoty (DFT) popisujú všetky systémy korektne minimálne na kvalitatívnej úrovni, sme ukázali, že pre tento systém sú metódy DFT v príkrom nesúlade s experimentálnymi výsledkami, a že príčinou je, že Au1 je nielen silne korelovaný, ale súčasne aj relativistický.



Obr. 1. Adsorpcia CO na Au_1 /O-rutile TiO_2 (110) povrchu.
AFM obrazy Au_1, a-c, a CO/Au_1,d-g, adatóm kyslíka O_{ad} v blízkosti Au_1 je znázornený šípkou v paneloch a-c. h, i, Schematické modely adsorpcie Au1 a CO/Au1 . j, Riadkové skeny CO/Au_1+ v oboch adsorpčných geometriách. Ružová čiara odpovedá povrchu.

Hlavné scientometrické výstupy:
[1] ADACHI, Yuuki - BRNDIAR, Ján - KONÔPKA, M. - TURANSKÝ, Robert - ZHU, Qiang - WEI, Huan Fei - SUGAWARA, Yasuhiro - KANTOROVICH, Lev - ŠTICH, Ivan - LI, Yanjun. Tip-activated single-atom catalysis: CO oxidation on Au adatom on oxidized rutile TiO2 surface. In Science Advances, 2023, vol. 9, no. 39, art. no. eadi4799. (2022: 13.6 - IF, Q1 - JCR, 4.598 - SJR, Q1 - SJR). ISSN 2375-2548. Dostupné na: https://doi.org/10.1126/sciadv.adi4799. Typ: ADCA