

[首页](#)[团队简介](#)[研究人员](#)[研究方向](#)[论文成果](#)[仪器设备](#)[招生信息](#)[新闻动态](#)[联系我们](#)

## 新闻动态



当前位置：[首页](#) > [新闻动态](#) > [新闻中心](#) > 正文

[新闻中心](#)[科研动态](#)

### 研究所博士研究生何威在国际权威期刊《Journal of Hazardous Materials》发表学术论文

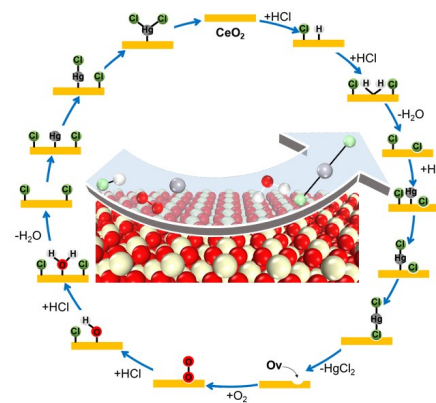
作者：何威 发布者：陈艳容 日期：2020-04-29

2020年4月13日，国际权威期刊《Journal of Hazardous Materials》在线刊发了课题组博士研究生何威题为“Insight into the effect of facet-dependent surface and oxygen vacancies of CeO<sub>2</sub> for Hg removal: From Theoretical and Experimental studies”的文章，冉景煜教授为该论文通讯作者。《Journal of Hazardous Materials》是中科院SCI一区top期刊，2018年影响因子7.650。

论文采用实验与密度泛函理论计算（DFT）结合的方法，从原子层面揭示了CeO<sub>2</sub>表面上汞的催化氧化机理。采用水热法制备了具有（110）和（111）面的CeO<sub>2</sub>纳米棒和纳米颗粒，结合实验和DFT结果，纳米棒显示出比纳米颗粒更好的活性。研究发现在通过氯化氢和氧气进行汞氧化时，氧气的作用不仅是补充晶格氧，而且还可以产生表面氧作为氯化氢活化的

活性中心。因此提出一种同时具有L-H和M-K反应机理的反应路径，可分为四个部分：（i）晶格氧活化氯化氢，（ii）在缺陷表面上的汞氧化，（iii）吸附氧活化氯化氢和（iv）化学计量表面上的汞氧化。该研究为发展形貌调控和氧空位配比用于提升汞氧化效率提供了一种新的思路。

<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.122646>



[上一篇：重庆大学能源与环境研究所举行2020年秋季开学典礼](#)

[下一篇：重庆大学能源与环境研究所深入企业开展公益性节能诊断服务](#)

## 联系我们

地址：重庆市沙坪坝区沙正街174号重庆大学动力工程学院

邮编：400044

电话：023-65103101

邮箱：zqyang@cqu.com

(C) Copyright Chongqing University All Rights Reserved.

重庆大学 版权所有2018 (渝ICP备15007027号-4)

技术支持：重庆巨软科技