
大连化物所等揭示Fe单原子活性中心的配位结构变化

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12171.html>

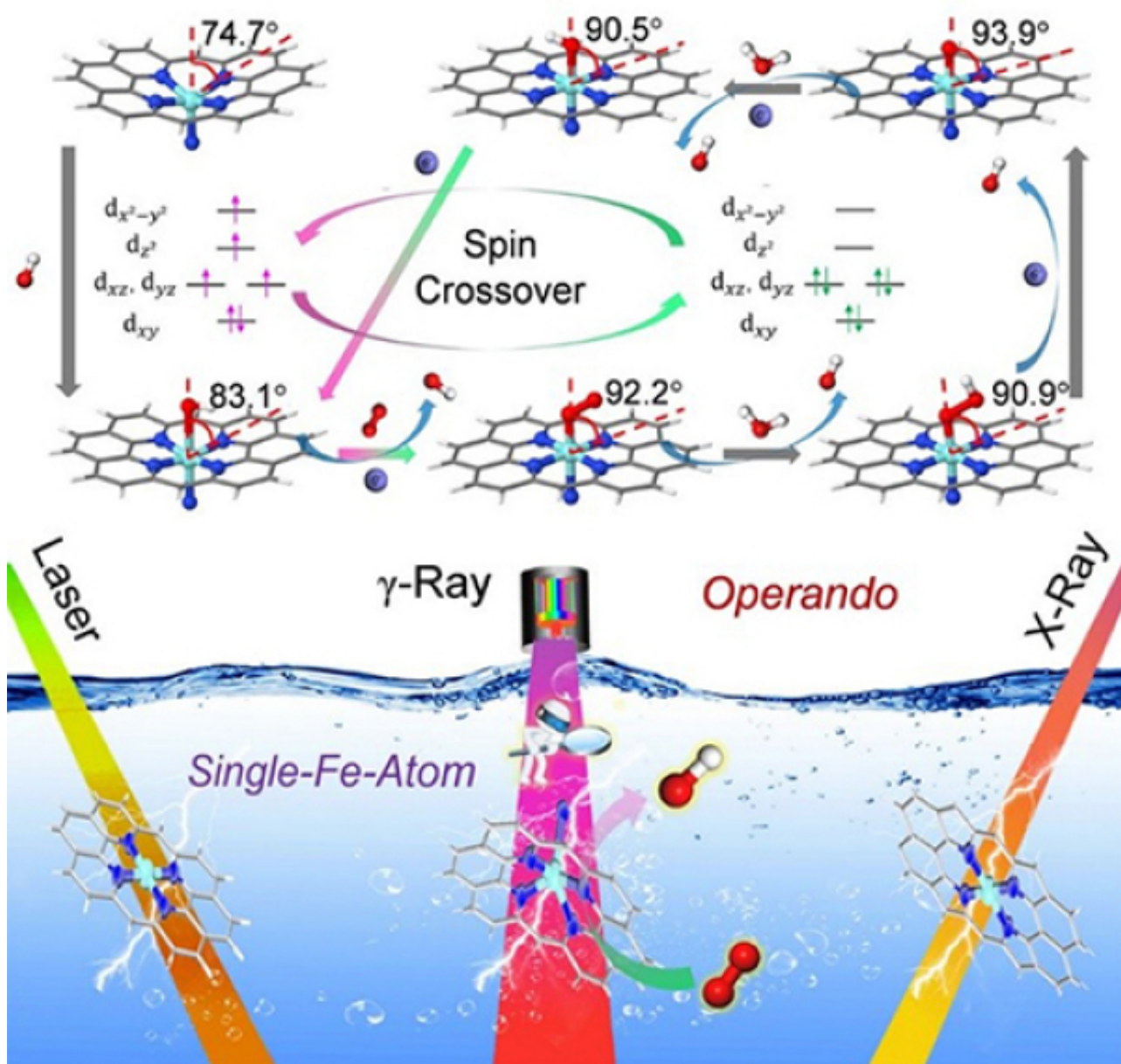
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所催化与新材料研究室研究员黄延强团队、能源研究技术平台穆斯堡尔谱研究组研究员王军虎团队与新加坡南洋理工大学教授刘彬、清华大学教授李隽合作，从实验和理论上揭示了Fe单原子材料催化中心电子态和配位结构在电催化氧还原反应（ORR）中的动态循环。

作为连结多相催化与均相催化的“桥梁”，单原子催化剂为从原子层面阐明催化剂的构-效关系、揭示催化反应机理提供了契机。然而，单原子催化剂在实际反应条件下活性位点的精准探测仍具有挑战性。因此，单原子催化中心微环境（配位环境和电子结构）的精细调控和高分辨原位表征装置的开发具有重要意义。

该研究利用配体交换的合成策略，构筑了一系列具有特定电子结构和配位环境的模型单原子Fe催化剂；开发出可用于单原子催化体系表征的原位⁵⁷Fe穆斯堡尔谱技术，实现了在电催化ORR反应条件下对不同单原子Fe物种电子结构和配位环境的定量探测；结合原位X射线吸收光谱、原位拉曼光谱、同步辐射核共振振动能谱和DFT理论计算等手段，揭示了Fe单原子材料在电催化ORR反应中催化位点电子态和配位结构的动态循环。该研究为揭开催化电子循环的黑匣子和高效单原子催化剂的开发提供了新的思路和契机。

相关研究成果发表在Cell旗下的Chem上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金委、中科院战略性先导科技专项（B类）“能源化学转化的本质与调控”等项目的支持。



大连化物所利用原位穆斯堡尔谱揭示Fe单原子活性中心的配位结构变化

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发