

研究揭示Cu-N-C单原子催化剂在电催化氧还原过程中的动态演变机理

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/15661.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，中国科学院院士张涛、中科院大连化学物理研究所催化与新材料研究室研究员王爱琴、研究员杨小峰等与中科院院士田中群、厦门大学教授李剑锋等合作，在氮碳载体上设计并构筑了均匀分散的铜单原子催化剂（Cu-N-C SAC），将其应用于碱性电催化氧还原反应中，并通过原位X射线吸收光谱技术揭示其在反应过程中的可逆动态演变。

2011年，张涛、李隽、刘景月等首次在国际上报道了Pt₁/FeO_x

单原子催化剂，提出的“单原子催化”迅速成为催化研究的前沿领域。与均相催化剂中的金属有机配合物类似，单原子催化剂的局域配位环境对其催化性能有重要影响。在前期工作中，张涛和王爱琴团队利用先进表征技术研究了氧化物负载的单原子催化剂以及金属-氮-碳单原子催化剂的局域配位环境对催化性能的影响，为深入理解单原子催化机理提供了基础。

然而，基于静态结构解析的“构效关系”并不能完全反映出反应过程中的真实催化机理。基于此，该合作团队构筑了均匀分散的静态Cu-N₄

单原子催化剂，其在电催化碱性氧还原反应中表现出与贵金属Pt可比的催化活性；利用对金属中心配位环境敏感的XANES技术，观测到静态Cu-N₄

位点在反应过

程中存在结构可逆演变；进

一步通过FDMNES计算方法，确定Cu-N₄

在反应过程中首先被外加电位驱

动生成新的催化活性位点Cu-N₃

，并进一步在氧还原反应过程中重构为HO-Cu-

N₂结构。该研究为后续单原子催化剂的动态研究以及催化剂设计提供了新思路。

该工作发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society

）上。上述研究工作得到国家自然科学基金、中科院B类战略性先导科技专项“能源化学转化的本质与调控”、洁净能源国家实验室（DNL）合作基金、上海光源BL14W线站重点课题等的资助。

[论文链接](#)

