新研究发展二电子氧还原单原子催化剂理性设计策略

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/22567.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！

新研究发展二电子氧还原单原子催化剂理性设计策略。

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员章福祥、博士范文俊与西北工业大学教授段志遥等合作，提出通过构筑载体与分子催化剂杂化型单原子催化剂(HSAC)，实现理性开发目标催化剂的新思路。

合作团队以电催化氧化还原反应(ORR)为模型，基于分子催化剂结构明确、微观结构可调等特性，通过理论模拟优化筛选与高通量实验相结合，可高效优化出钴基杂化单原子目标催化剂(Co-HSAC)，其在碱性ORR中合成双氧水选择性高于95%，在流动池300 mA/cm2下稳定25小时以上。相关成果发表在《自然—通讯》上。

自2011年张涛院士等人原创性提出单原子催化概念以来，单原子催化剂的设计开发在热催化、电催化、光催化、生物质转化等领域受到了广泛关注。然而，目标单原子催化剂的理性设计开发仍然受到活性位点结构不明确、构效关系不十分清晰等因素制约。

该工作中，合作团队充分利用分子催化剂结构明确、具有可调性等特点，通过密度泛函理论计算与实验验证相结合，从具有不同单金属活性中心的酞菁分子催化剂中，筛选出酞菁钴分子催化剂作为电催化ORR选择性还原至双氧水的潜力催化剂，继而利用轴向配位与碳纳米管连接，有效构筑出Co-HSAC目标单原子催化剂，实现了高电流密度下高选择性ORR还原。此外，合作团队通过原位XAFS等测试表征，阐述了其微观结构动态变化，获得了明确催化结构与性能的关系。

研究结果表明：这种杂化型单原子催化剂HSACs不仅发挥了分子催化剂自身结构可调优点，而且可通过与载体不同连接方式进一步调变其电子结构与性能，充分发挥了单原子催化剂兼顾均相催化和多相催化优势的特点。

HSACs有望成为一种独特类型的单原子催化剂广泛应用于各类催化反应，其研究范式也有望拓展至其它杂化型双/多原子催化剂的理性开发应用。(来源：中国科学报 孙丹宁)

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41467-023-37066-y

作者：章福祥等 来源：《自然—通讯》

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转发