

研究人员实现精准调控单原子的第二壳层配位数

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/29345.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！

研究人员实现精准调控单原子的第二壳层配位数。近日，中国科学技术大学教授曾杰团队研究发现，氧化镍负载的铈单原子催化剂在阳极水氧化反应中的活性与铈单原子的第二壳层铈-氧-镍配位数呈火山型曲线关系，第二壳层配位数适中的单原子催化剂表现出最优异的活性。相关成果日前发表于《德国应用化学》。

精准构建单原子催化剂金属中心原子的配位环境对阐明单原子催化剂结构和催化活性间的关系非常重要。然而，即使是具有相同组成和化学性质的单原子催化剂，关于局部配位环境影响的争论也相当复杂，需要更多地关注第二配位壳层的调节。对于氧化物载体，由于其结构的稳定性，精准调控负载在氧化物载体上单原子的第二壳层配位环境仍然面临挑战。

在此工作中，研究人员通过不同的键合策略，创制了三种氧化镍负载的铈单原子催化剂，铈单原子第二壳层铈-氧-镍配位数分别为3、4、5。电化学测试表明，铈第二壳层配位数为4的单原子催化剂表现出最优异的活性，在过电势300毫伏时，可以达到0.4毫安每平方厘米的本征电流密度，分别是第二壳层配位数为3和5的单原子催化剂的3.1和2.2倍，催化活性和铈-氧-镍配位数之间呈现火山型的关系。

随后，研究人员对此现象进行了电化学原位谱学和理论计算研究。原位谱学结果表明，铈单原子是发生阳极水氧化反应的主要活性位点。理论计算结果表明，铈单原子催化剂的高活性归因于适中的配位数减弱了对氧氧氢中间体的吸附，使得反应决速步的能垒最低，从而提高了阳极水氧化的活性。

研究人员介绍，研究通过调控键合策略实现了在氧化物载体表面精准调控单原子的第二壳层配位数，深入理解了单原子催化剂第二壳层配位数和催化活性之间的火山型关系，为设计高效的水氧化催化剂提供了新思路。（来源：中国科学报 王敏）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202410520>

作者：曾杰等 来源：《德国应用化学》

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

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