
科研人员开发出具有凸出位点结构的“悬浮”式单原子催化剂

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31486.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中心研究员乔波涛

、副研究员张

波与催化基础国家重点实验

室二维材料化学与能源应用研究组研究员

吴忠帅团队，联合香港城市大学教授刘彬、福建师范大学教授于广涛等，在新型单原子催化剂构建方面取得进展。

自2011

年中国科学院院士张涛团队等提出“单原子催化”概念以来，科研人员已发展出丰富的单原子催化剂制备与调控策略。基于此，科研人员尝试在原子级水平上研究非均相催化过程。单原子催化因而成为非均相催化领域的前沿。由于单原子催化剂的活性位点往往以嵌入载体表面甚至晶格内部的形式存在，可能在化学反应过程中引入空间位阻，导致单原子催化剂性能下降。精确设计和可控合成在一定程度上远离载体表面的单原子活性位点十分重要。

该团队开发了新颖的具有“悬浮”式位点的Re单原子催化剂，并结合实验和理论计算证明该催化剂中Re单原子通过垂直于NiO表面的邻菲罗啉配体配位而“悬浮”于载体NiO表面。进一步，理论计算表明，该催化剂独特结构

的热力学稳定性来源于quasi- CH_3ReO_3

-phen结构与NiO载体之间的氢键和静电相互作用间的协同。该团队将这一催化剂应用于葡萄糖电催化氧化反应中发现，具有垂直配体的“悬浮”式Re单原子催化剂展现出比非垂直结构Re单原子催化剂更优异的反应性能。为剖析这一过程的催化机理，该团队利用DFT计算了葡萄糖到葡萄糖二酸产物的氧化过程网络，为探讨这种具有独特结构的单原子催化剂的催化行为奠定了理论基础。

上述研究证明了在面对大分子的催化反应中实现构建具有垂直配体配位结构的单原子催化剂的可能性，为降低单原子催化剂的反应位阻提供了新的设计思路。这一成果对开发适用于涉及大分子转化过程的单原子催化剂具有重要意义。

相关研究成果以Suspended Single Rhenium Atoms on Nickel Oxide for Efficient Electrochemical Oxidation of

Glucose为题，发表在《美国化学会志》（JACS）上。研究工作得到国家重点研发计划和国家自然科学基金等的支持。

[论文链接](#)

科研人员开发出具有凸出位点结构的“悬浮”式单原子催化剂

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