
单原子电催化剂设计领域取得新进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38235.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！

广东工业大学教授张山青团队联合澳大利亚同步辐射中心和香港城市大学在单原子电催化剂设计领域取得新进展，提出了一种机器学习指导的配位工程策略，精准调控M-N-C单原子催化剂的局部配位结构，实现了高效氧还原反应（ORR）。近日，相关成果发表于《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society）。

论文共同通讯作者张山青表示，通过结合密度泛函理论计算与机器学习算法，研究团队解析了312种M-N-C单原子催化剂模型的构效关系，并发现了一个低维可解释描述符 $E_{emb}/\sin(CN)$ （其中， E_{emb} 为金属嵌入能， CN 为配位数），为理性设计高性能电催化剂提供了新范式。

单原子催化剂以其原子级分散的活性位点和卓越的催化性能成为催化研究的前沿，研究团队创新性地融合高通量DFT计算与机器学习数据挖掘，系统筛选了26种过渡金属中心与12种配位构型的组合，从复杂数据中提炼出关键描述符 $E_{emb}/\sin(CN)$ ，该描述符同时量化了金属-载体相互作用强度与配位几何环境，统一解释了前过渡金属（如Mn、Fe）需高配位削弱过强氧吸附、后过渡金属（如Cu、Pd）可通过低配位增强中间体结合的规律。

基于此设计原则，研究团队通过缺陷工程策略精准合成了富含Cu-N₃基元的Cu-SA/N-C催化剂，实验表征证实其局部配位结构以吡咯型氮为主，与传统Cu-N₄位点相比表现出显著优化的ORR活性：半波电位达0.886 V（vs. RHE），超越商业Pt/C（0.872 V），锌空气电池峰值功率密度达191.3 mW cm⁻²，并具备长期稳定性。

该研究突破了单原子催化剂黑箱式试错设计的瓶颈，建立了理论筛选-算法挖掘-缺陷工程-性能验证的全链条理性设计范式，不仅为ORR催化剂开发提供了可迁移的方法论，更彰显了可解释机器学习在加速下一代能源转换材料创制中的巨大潜力。

相关工作作为可持续电催化体系的设计提供了新思路，有望推动单原子催化从基础研究向器件应用转化。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c20189>

作者：张山青等 来源：《美国化学会志》

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