
研究揭示钴基析氧催化剂活性位动态生成机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40321.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！

电解水析氧反应（OER）动力学缓慢，是制约绿色制氢效率的因素之一。钴（Co）基（氧）氢氧化物因资源丰富、性能良好而备受关注，但其在反应过程中会发生复杂的结构重构和价态演化，真实活性位的形成机制仍不明确，且OER过程前多个氧化还原过程在催化剂活化中的作用尚不明晰。

近日，中国科学院大连化学物理研究所科研团队发展了原位原子力显微镜——扫描电化学显微镜（AFM-SECM）纳米成像方法，实时揭示了Co基（氧）氢氧化物催化剂在OER过程中的动态结构重构行为，阐明了真实活性位的形成机制，并实现了催化剂活化过程中“活性位生成”与“晶格氧化调控”两类过程的功能解耦。

团队构筑了具有氯（Cl）局域配位

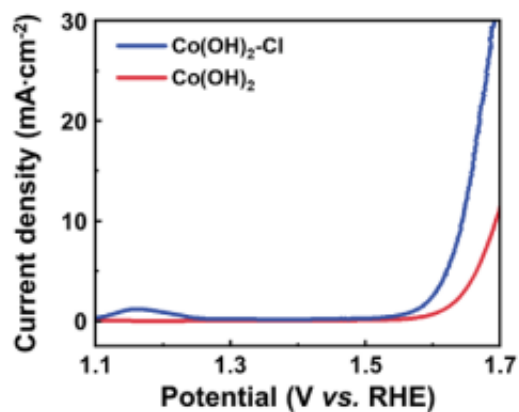
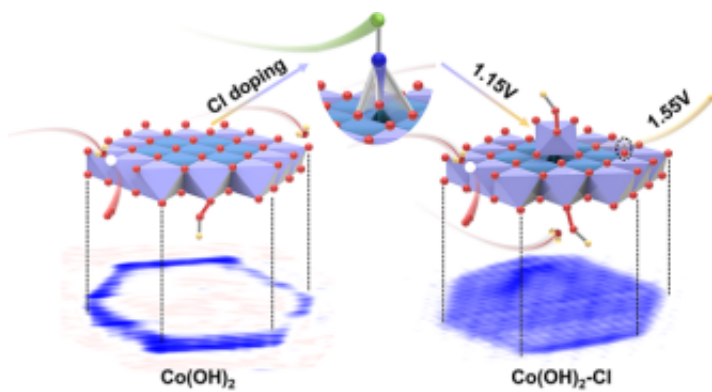
结构的氢氧化钴（Co(OH)₂）模型催化剂，并利用自主发展的AFM-SECM联用平台，在纳米尺度原位追踪催化剂结构演化、界面电荷传输和活性分布特征。研究发现，活化过程中Cl⁻脱除可诱导局域结构重构和电荷重新分布，驱动四面体Co位点向端位Co-OH活性结构转变。

结合原位X射线吸收谱、原位X射线衍射和原位拉曼光谱等多种表征手段，团队进一步揭示了Co基催化剂的两阶段活化机制：在较低电位区间，催化剂发生由四面体Co向八面体Co的结构转变，并形成大量端位Co-OH活性结构；在更高电位区间，催化剂主要发生晶格深度氧化和电子结构调控。研究表明，第一阶段对应真实活性位的生成，是催化活性提升的决定因素；第二阶段则主要增强活性中心的氧化能力，对新增活性位贡献有限。这一发现突破了此前将催化活性提升简单归因于高价Co形成的传统认知。单颗粒尺度活性成像表明，该过程不仅激活催化剂边缘位点，还使活性扩展至原本惰性的基面区域。理论计算进一步证实，动态生成的端位Co-OH结构能够优化反应中间体的吸附与转化行为，降低反应能垒，是催化活性提升的本征来源。

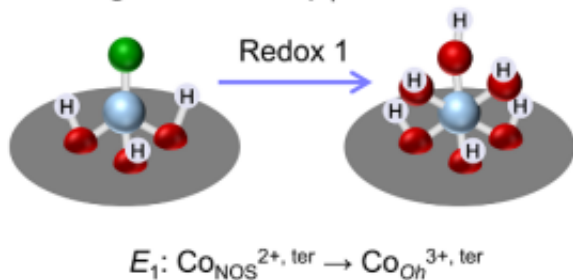
该研究从动态结构演化角度揭示了Co基析氧催化剂的真实活性来源，建立了活性位生成与电子结构调控之间的关联机制，为理解电催化反应中的动态重构过程提供了新思路，也为高效析氧催化材料的理性设计提供了理论支撑。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、中国科学院等的支持。

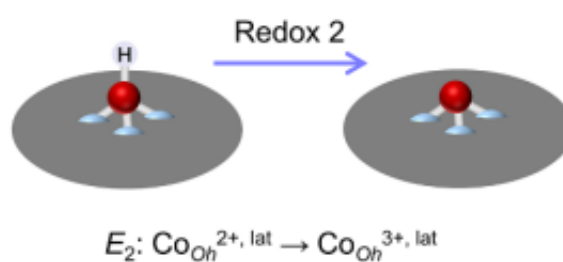
[论文链接](#)



generation of $\mu_1\text{-OH}$ sites



deprotonation of $\mu_3\text{-OH}$



E

研究揭示钴基析氧催化剂活性位动态生成机制

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](https://www.iikx.com)转发