研究阐明铁磁耦合增强双原子纳米酶类过氧化氢酶活性机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41632.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！

研究阐明铁磁耦合增强双原子纳米酶类过氧化氢酶活性机制。近日，中国科学院合肥物质科学研究院与生物物理研究所合作，利用稳态强磁场实验装置所属磁性测量系统，制备出具有高效类过氧化氢酶活性的铁双原子纳米酶py-Fe-DA，揭示了氮配位结构通过调控相邻铁位点的自旋状态和磁耦合方式，促进H_2O_2沿自旋有利路径分解的内在机制。

研究通过空位诱导与静电吸附相结合的级联策略构筑相邻铁双原子活性位点，并通过调控热解温度获得具有不同氮配位结构的铁双原子纳米酶pr-Fe-DA和py-Fe-DA。催化性能测试结果表明，py-Fe-DA能够高效催化H_2O_2分解并持续释放O_2，其类过氧化氢酶比活性达到100.13 U · mg^{-1}，约为pr-Fe-DA（41.67 U · mg^{-1}）的2.4倍，在目前已报道的CAT-like纳米酶中处于最高水平。

研究依托稳态强磁场实验装置及密度泛函理论计算发现，氮配位环境的改变能够调节铁中心的自旋状态及相邻铁位点间的磁耦合方式。py-Fe-DA中相邻铁位点形成的铁磁耦合利于反应过程中的自旋匹配，为H_2O_2分解和O_2生成提供了自旋有利的反应路径，并降低了关键反应步骤的能垒，从而赋予其更高的CAT-like催化活性。在胶原诱导性关节炎小鼠模型中，py-Fe-DA展现出良好的治疗效果。

这项研究将磁耦合引入CAT-like活性的关键描述符体系，深化了对双原子纳米酶催化机制的认知。相关成果为通过配位与磁耦合工程调控自旋依赖反应路径、设计高性能抗氧化纳米酶提供了新的理论依据，也为类风湿关节炎等氧化应激相关疾病的纳米催化治疗提供了全新治疗策略。

相关研究成果发表在《德国应用化学》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

py-Fe-DA的自旋调控类过氧化氢酶催化及类风湿关节炎治疗示意图

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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