
大连化物所等提出单原子催化剂协同双位机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/9952.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室研究员王晓东和中科院院士张涛团队与清华大学教授李隽

合作，在单原子催化机制研究方面取得新进展，发现 Ir_1/FeO_x

单原子催化剂上Ir单原子与临近载体Fe位之间存在“双金属活性位”的协同催化过程。

2011年，“单原子催化（SAC）”概念被提出后（[Nat. Chem.](#), 2011, 3, 634），科研人员可以更加明确地了解单原子中心与其周围载体原子间的化学键和电子结构，为设计、合成新型高分散催化剂以及探索其催化应用提供了有益的指导（[Nat. Rev. Chem.](#), 2018, 2, 65）。

该团队在前期的工作中制备出 Ir_1/FeO_x

单原子催化剂，并发现单原子Ir中心在水煤气变换反应中起主导作用（[J. Am. Chem. Soc.](#), 2013, 135, 15314），然而对 Ir_1/FeO_x 的微观催化机制却一直没有更深入的认识。

该团队结合第一性原理计

算及实验表征发现，在水煤气变换过程中， H_2O 容易在单原子Ir与载体之间解离，形成Ir-OH与Fe-

OH。随后Ir上吸附的CO与Fe结合的氧原

子反应形成 CO_2 ，进而促进Ir-

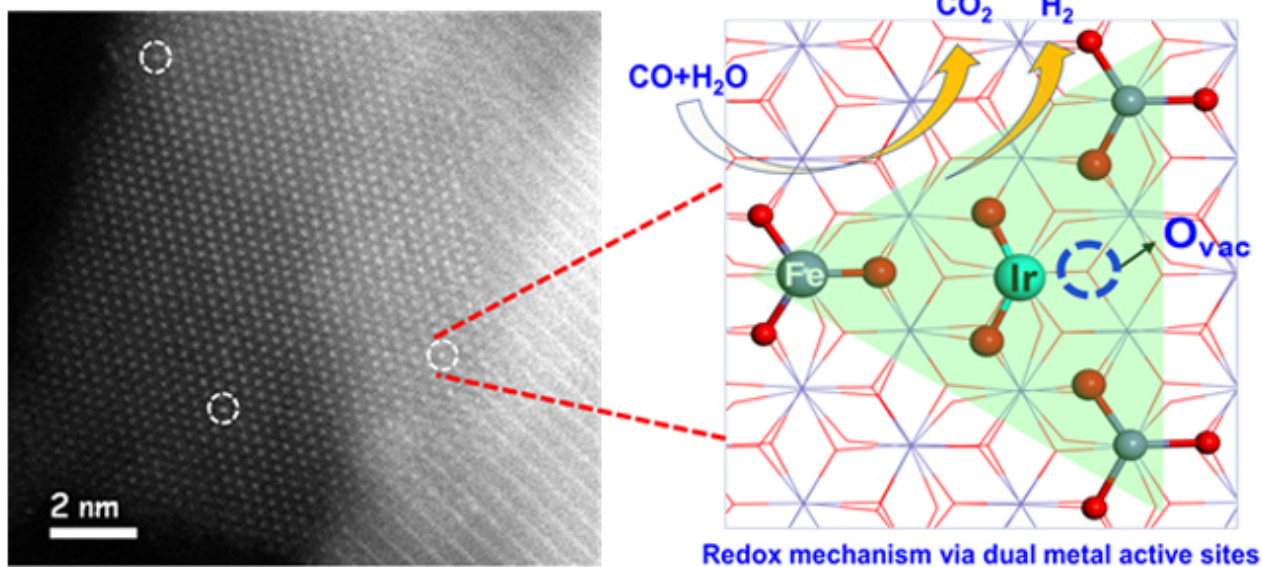
OH中H向Ir位的转移，降低 H_2

产生的能垒。基于Ir单原子和临近载体Fe原子间的协同化合价变化这一微观过程，该团队提出了单原子催化剂“双金属活性位”的协同催化机制。该工作为明确单原子-

载体相互作用提供了新的理论依据，也有助于设计出高活性的双位单原子或团簇催化剂。

该研究成果发表在《[德国应用化学](#)》（[Angew. Chem. Int.](#)

Ed.）上。上述研究工作得到国家自然科学基金项目、中科院青年创新促进会项目等的资助。



Ir_1/FeO_x 单原子催化剂“双金属活性位”的催化作用机制

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](http://www.iikx.com)转发