

## 新闻博览

首页 / 新闻博览 / 正文

© 2024年02月08日

## 中国科大在单原子催化剂位点特异性金属载体相互作用研究中取得新进展

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心和化学物理系曾杰教授研究团队利用位点特异性金属载体相互作用，构筑出可以高效电催化水氧化的单原子催化剂。相关成果以“Site-specific metal-support interaction to switch the activity of Ir single atoms for oxygen evolution reaction”为题发表在《自然·通讯》上，我校曾杰教授、张志荣特任副研究员为通讯作者，魏杰特任副研究员、博士生唐桦、圣利为该论文的共同第一作者。

金属载体相互作用 (MSI) 在很大程度上会影响单原子催化剂的电子性质，从而影响催化性能。目前，调控金属载体相互作用的手段一般是更换载体或者对催化剂进行氢气还原处理，这会引起载体的变化或者降低催化剂的稳定性。因此，亟需发展一种能够在不改变载体的前提下调控金属载体相互作用的方法。

基于此，研究人员采用电化学沉积策略有效地调节了锚定在Ni层状双氢氧化物 (Ni LDH) 上的Ir单原子的位点特异性金属载体相互作用。阴极沉积驱动Ir原子锚定在三重中空位上 (Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-T)，阳极沉积驱动Ir原子锚定在氧空位位点上 (Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-V)。Ir原子与载体之间的强金属载体相互作用诱导活性位点从Ni位点切换到Ir位点，优化了中间体的吸附强度，从而提高了催化活性。

根据电化学沉积原理及X射线吸收精细结构表征结果，Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-T在Ir位点与Ni LDH的配位氧之间具有更多的共价键，且Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-T的Ni 2p XPS峰向高结合能偏移，表明Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-T中Ir单原子具有更强的金属-载体相互作用。电催化水氧化反应测试结果表明，具有强金属-载体相互作用的Ir单原子催化剂的质量活性和本征活性分别提高了19.5倍和5.2倍。

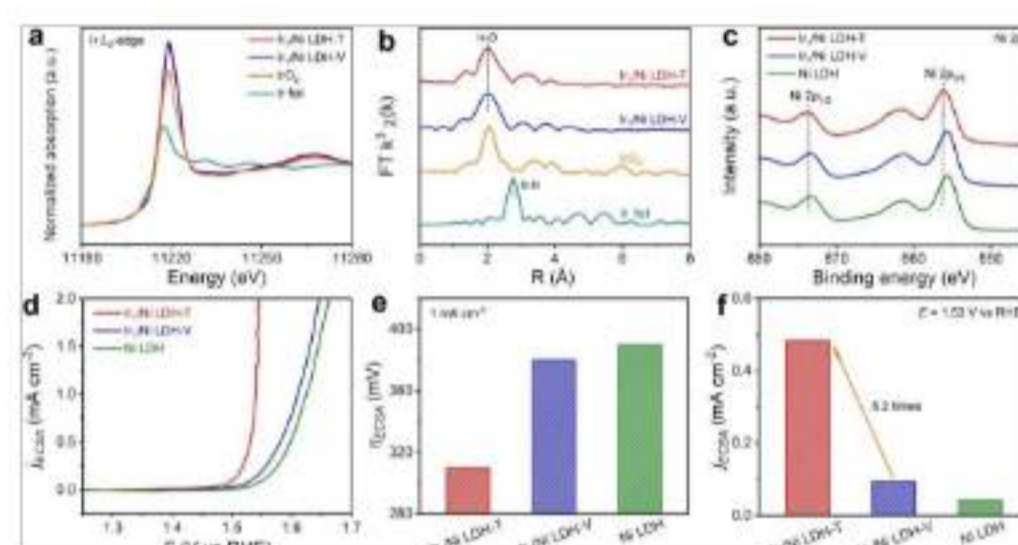


图1. (a) X射线吸收谱近边结构, (b) X射线吸收谱扩展边结构, (c) Ni 2pX射线光电子能谱。电化学活性面积校正的 (d) 极化曲线, (e) 过电位和 (f) 电流密度。

氧同位素标记原位拉曼光谱表明，在水氧化反应过程中，Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-V和Ni LDH中的<sup>18</sup>O标记氧很容易与电解液中<sup>16</sup>O原子交换，表明这两种催化剂中Ni是主要的活性位点。而Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-T中<sup>18</sup>O标记的Ni<sup>3+</sup>-O不会被<sup>16</sup>O交换，表明Ir是主要的活性位。此外，理论计算揭示了Ir<sub>1</sub>/Ni LDH-T中更强的MSI优化了含氧中间体的吸附能，从而提升了反应性能。

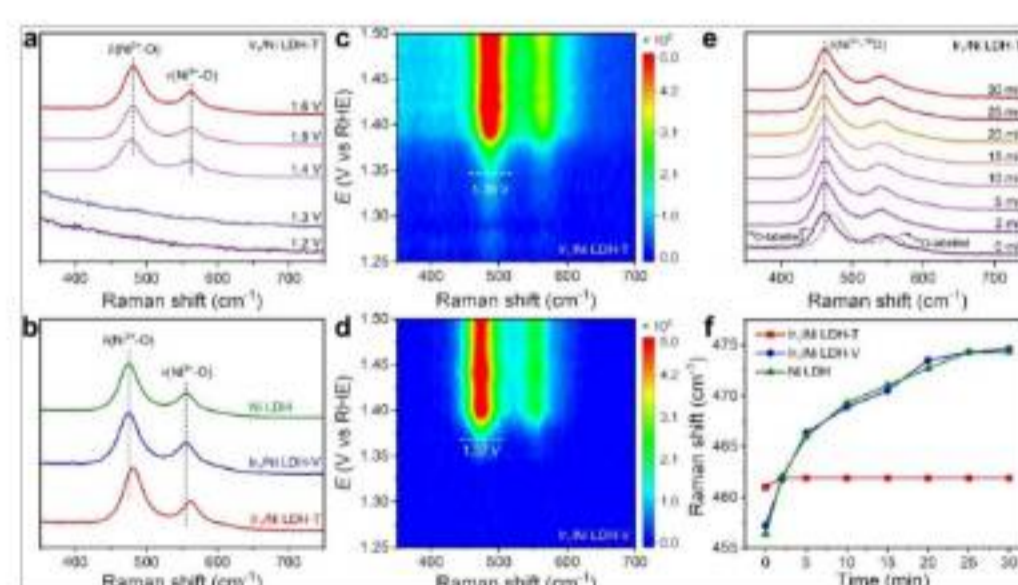


图2.原位拉曼光谱对反应机理的研究。

以上研究通过电化学沉积策略精准调控单原子的配位环境实现了催化剂的位点特异性金属载体相互作用，为设计高效的水氧化催化剂提供了新的思路。此项工作得到国家重点研发计划项目、中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划项目、国家自然科学基金项目等项目的支持。

论文链接: <https://www.nature.com/articles/s41467-024-44815-0>

(合肥微尺度物质科学国家研究中心、化学与材料科学学院、科研部)

## 分享本文



## 相关新闻



## 巾帼逐梦 竞绽芳华——我校举办庆祝“三...

阳春三月，万象更新。为庆祝第114个“三八”国际劳动妇女节，3月8日下午，校工会在东区田径场举办“巾帼...

03.11 中国科学技术大学在氧化物界面超导研究...

03.11 中国科大揭示信号蛋白PII调控蓝细菌碳氮...

03.11 中国科大在中红外波段量子纠缠的制备与...

03.11 湖南省教育厅来我校调研交流