科学家设计高活性和酸稳定性非贵金属催化剂

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/17376.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！

科学家设计高活性和酸稳定性非贵金属催化剂。

电解水是清洁能源开发利用的重要过程，而制备非贵金属电解水催化剂是清洁能源开发利用中亟待破解的关键难题。目前，在电解水材料的开发中，设计高活性且具有酸性环境中超长的电解稳定性的材料是面临的一大挑战。

中国科学院大连化学物理研究所研究员肖建平团队与日本理化学研究所教授中村龙平团队合作，通过在金属氧化物Co3O4中掺入Mn元素，制备了尖晶石构型的Co2MnO4材料，理论计算和实验验证其在电解水过程中实现了超高效安培级电流密度电解水活性，并同时实现在酸性环境中超长的电解稳定性（大于1500小时）。相关研究成果于2月15日发表于《自然—催化》杂志。

研究人员表示，目前，能够在一定程度上同时实现高活性，且具有酸性环境中超长的电解稳定性这两个目标的电催化材料往往含有贵金属铱，这远远无法满足人类可持续的发展需求。因此，从地球中储量更为丰富的材料中设计高效且高稳定性的电解水催化剂是当前研究的重点。

肖建平团队基于第一性原理密度泛函理论计算，从分子和原子的角度揭示了催化过程。论文通讯作者肖建平解释，通过建立催化活性趋势来理解不同材料或特定材料的不同构型的催化活性是理论研究的最新范式。理论上，催化活性趋势的建立往往基于表面重要中间物种之间的相互线性关联，由此可以将催化活性通过描述符的方式表达，从而建立活性的火山型趋势。

肖建平团队通过反应相图的研究方法，首次发现尖晶石金属氧化物表面的电解水过程随着中间物质吸附强度的改变，反应活性保持不变，其活性趋势呈现一种反常截顶的火山型曲线。该结果证明了本研究中的Co2MnO4材料在各种构型环境下皆可体现高效电解水活性，同时说明了其在部分表面溶解重构的过程中仍能够维持高电催化活性的根本原因。

同时，理论研究提出的双通道溶解模型，进一步解释了Co2MnO4材料在酸性环境中体现超长的电解稳定性的主要原因。

在理论活性研究中，肖建平团队通过电荷外插值法，计算了电解水过程中每个电化学过程在不同工作电压下的反应能垒。由此通过微观动力学模拟得到理论速率，发现其完美拟合实验结果，证实了理论计算结果可靠性。

为了进一步理解该材料酸性环境中超长的电解稳定性，肖建平团队建立了材料在特定电催化化境下的双通道溶解模型，也由此，在今后的理论催化剂设计中，不仅可以预测活性趋势，还能够准确把握其催化稳定性。

中村龙平团队经过实验测试表明，Co2MnO4材料展现出超高电催化活性，且与现有的电解水电催化材料相比，该材料不仅在活性，更是在稳定性上有极大的优势。是目前为止最好的酸稳定非贵金属催化剂。

审稿人指出，这是非贵金属催化电解水领域的一个关键突破和领域的飞跃。(来源：中国科学报 韩扬眉）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41929-021-00732-9

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：肖建平等 来源：《自然—催化》

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