

含钡钙钛矿材料高温氧活化机制被揭示

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/18086.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！

含钡钙钛矿材料高温氧活化机制被揭示。氧交换反应是透氧膜和众多能源转化装置（如：燃料电池与电解池、金属空气电池）中的关键反应。然而，因复杂的四电子传递过程与多种氧物种有关，并随着物质组成和结构以及反应条件的变化而变化，导致对氧活化机理的认识始终不足。阐明氧活化机理对设计和制备高活性的能量转换器件新材料具有重要意义。

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员杨维慎、朱雪峰团队与研究员刘伟、肖建平合作，揭示了含钡钙钛矿氧化物表面具备高温氧活化的特点及其输运机制，发现了在高温富氧条件下，含钡材料表面析出的氧化钡纳米粒子对氧活化具有超高活性，该粒子也是氧交换反应的活性位点。相关研究成果发表在《科学进展》上。

目前，研究人员普遍认为， ABO_3 结构的钙钛矿材料具有高氧活化能力，其活性中心与B位可变价金属离子有关。然而，在富氧气氛中，钙钛矿的A位碱土元素（即Ba、Sr和Ca）的偏析已被广泛报道，也就是材料表面暴露的主要是A位碱土元素而不是B位可变价金属元素。

$Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$ （BSCF）是杨维慎团队于2000年首次合成的具有国际领先水平的透氧膜材料，是国际透氧膜材料性能对标的代表性材料，也作为电催化材料被广泛应用到固体氧化物燃料电池和电解水等领域。但是，BSCF钙钛矿具有优异性能的本质原因仍在探索中。

研究中，团队对氧渗透动力学进行了深入分析，发现钡的掺入能够显著加快氧表面交换反应速率。团队利用环境电镜直接观测到BSCF材料在高温富氧气氛中表面会析出氧化钡纳米粒子，并且利用电化学测试证明了氧化钡以及能够析出或分解得到氧化钡的含钡材料对氧活化过程具有很高的催化活性。最终结合计算发现，析出的氧化钡纳米粒子能够显著降低氧还原过程中氧分子吸附解离以及氧析出过程中氧离子复合脱附过程的能垒，从而加了快气-固界面的氧交换反应动力学。

审稿人认为，BaO作为氧表面反应催化剂的概念对钙钛矿的应用具有重要意义。该研究将为透氧膜材料以及电催化材料的优化设计提供科学基础。（来源：中国科学报韩扬眉）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/sciadv.abn4072>

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：杨维慎等 来源：《科学进展》

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://iikx.com)转发