
谢和平团队有效预测固体氧化物燃料电池阴极活性

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/19904.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！

谢和平团队有效预测固体氧化物燃料电池阴极活性。9月5日，深圳大学谢和平院士与其博士生翟朔分别为通讯和第一作者，香港理工大学教授倪萌、南京工业大学教授邵宗平为共同通讯作者在《自然—能源》上发表研究成果。他们将机器学习、理论计算与陶瓷固体氧化物开发相结合，开发了一个经过实验验证的阴极材料机器学习筛选技术，快速、有效地从庞大的钙钛矿组分中筛选高活性固体氧化物燃料电池阴极材料。

实现煤炭清洁高效利用对我国能源结构改革具有重要战略意义。然而，燃煤电厂受卡诺循环限制，单位发电量的煤炭消耗量较高，且难以破解二氧化碳排放的技术瓶颈。谢和平团队提出并正在攻关的近零碳排放直接煤燃料电池发电技术可打破卡诺循环的限制，不通过燃烧，而是将改性煤炭的化学能通过电化学氧化过程直接转换为电能，同时在系统内原位实现二氧化碳二次利用，具有能量转换效率高、实现近零碳排放的特点。

针对传统的材料设计、表征和测试方法需要漫长研究周期的问题，谢和平团队将机器学习技术应用于针对固体氧化物燃料电池高活性阴极材料筛选的攻关研究。为了构建准确的机器学习模型，需要高质量的数据集、准确的钙钛矿氧化物描述符和合适的回归模型，但目前学界还缺乏具有代表性的、能够准确反映高温下氧还原反应机理的物理描述符。为此，该研究引入了与高温下钙钛矿氧化物氧还原反应动力学反应速率强烈相关的路易斯酸性强度（ISA）作为描述符，并验证了8种不同回归模型的有效性。

最终，他们从机器自动生成、预测的6871种不同钙钛矿氧化物中筛选出了4种钙钛矿阴极并成功合成。特别是，SCCN（ $\text{Sr}_{0.9}\text{Cs}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{Nb}_{0.1}\text{O}_3$ ）、 $\text{Ba}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{Cs}_{0.2}\text{Co}_{0.6}\text{Fe}_{0.3}\text{Mo}_{0.1}\text{O}_3$ （BSCCFM）在700 °C下的面积比电阻ASR仅为0.0101和0.0113 $\Omega \text{ cm}^2$ ，接近于机器学习的预测值。在三维可视化示意图中，4种阴极材料的本性活性 $\text{Lg}(\text{ASR})$ 符合与ISA描述符的大致线性趋势。通过弛豫时间分布（DRT）模型与等效电路模型对其电化学交流阻抗谱进行分析与量化，4种钙钛矿氧化物阴极的中频电阻呈现出较大的差异，并且具有显著的热激活特征，即表面氧转移相关过程为氧还原反应动力学的决定步骤。

实验表征与密度泛函理论（DFT）计算阐明了钙钛矿氧化物路易斯酸性调控策略提升本征活性机理，揭示了路易斯酸性在A位和B位离子的极化分布引起电子对的偏移，进而降低了氧空位的生成能和迁移能垒的机制。

该项研究成功将机器学习与高活性固体氧化物燃料电池阴极材料的开发相结合，实现了快速、有效地从庞大的钙钛矿组分中筛选高活阴极材料。作者表示，与高通量DFT计算方法相比，该方法无需建立分子模型，仅通过分子式对回归模型进行训练即可预测材料性能，打破了阴极材料开发

效率低的技术壁垒，未来机器学习的发展还需要加快材料数据库的建设。

该成果为谢和平团队正在攻关的近零碳排放直接煤燃料电池发电技术提供了理论依据与技术支持。

相关论文信息：<https://www.nature.com/articles/s41560-022-01098-3>

作者：陈欢欢 来源：中国科学报

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](https://www.iikx.com)转发