

研究开发出质子交换膜燃料电池铁氮-碳非贵金属催化剂

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34950.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！

研究开发出质子交换膜燃料电池铁氮-碳非贵金属催化剂

。质子交换膜燃料电池（PEMFC）被誉为“氢气的充电宝”，具有高效率、快启动、零排放等优势，在交通、便携式电源和固定式发电等领域具有应用潜力。近日，中国科学院过程工程研究所王丹、张锁江团队等合作，基于纳米级中空多壳层结构（HoMS），创新性开发出“高曲率内壳层活化位点+带负电外壳层防护促脱”的曲面单原子铁催化剂（CS Fe/N-C），构建出独特的“外护内催”微环境。实验结果表明，CS Fe/N-C可在PEMFC中替代铂等贵金属催化剂，并具备优异的输出性能与长期稳定性。

目前，PEMFC的催化剂多为铂（Pt）等贵金属，储量有限、价格高昂，严重制约了PEMFC的规模化生产。铁/氮-碳（Fe/N-C）材料因成本低、活性较高，被视为PEMFC中贵金属催化剂的有力替代者，但其活性位

点对含氧中间体结合过强，限制了反应动力学；Fe在H₂O₂

与·OH等活性氧环境中易发生Fenton反应，导致脱金属和性能衰退。此外，现有Fe/N-C多以堆叠石墨烯或块体碳为载体，活性位点暴露受限，影响了Fe/N-C材料的市场化应用。

面对上述难题，研发团队创新性地设计合成了二维碳层上具有大量纳米Fe/N-C

HoMS的三维催化剂CS Fe/N-C。该纳米Fe/N-C HoMS直径约10 nm，高约4

nm，约有五个壳层。Fe单原子主要分散于内壳层，面密度高达1.6 No.

nm⁻²

，97.6%位于内部四个椭球面壳层上。同步辐射XAS表明，内壳层Fe原子价态接近+2，配位构型为FeN₄C₁₀

；穆斯堡尔谱进一步揭示其以高活性的低自旋态D1为主，占比达57.9%。理论计算显示，单纯提升Fe-N₄

位点曲率反而会增强中间体结合强度，抑制其脱附而降低催化活性；而引入铁原子缺失的氮掺杂碳外层后，外层氮原子对内层吸附中间体的氧原子产生显著静电排斥（0.63 – 1.55

eV），有效削弱结合强度，打破了 ΔG_{*OH} 、 ΔG_{*O} 与 ΔG_{*OOH}

间的线性关系，促使催化性能大幅提升。该策略使得CS Fe/N-C的过电位显著降至0.34

V（优于平面结构的0.61

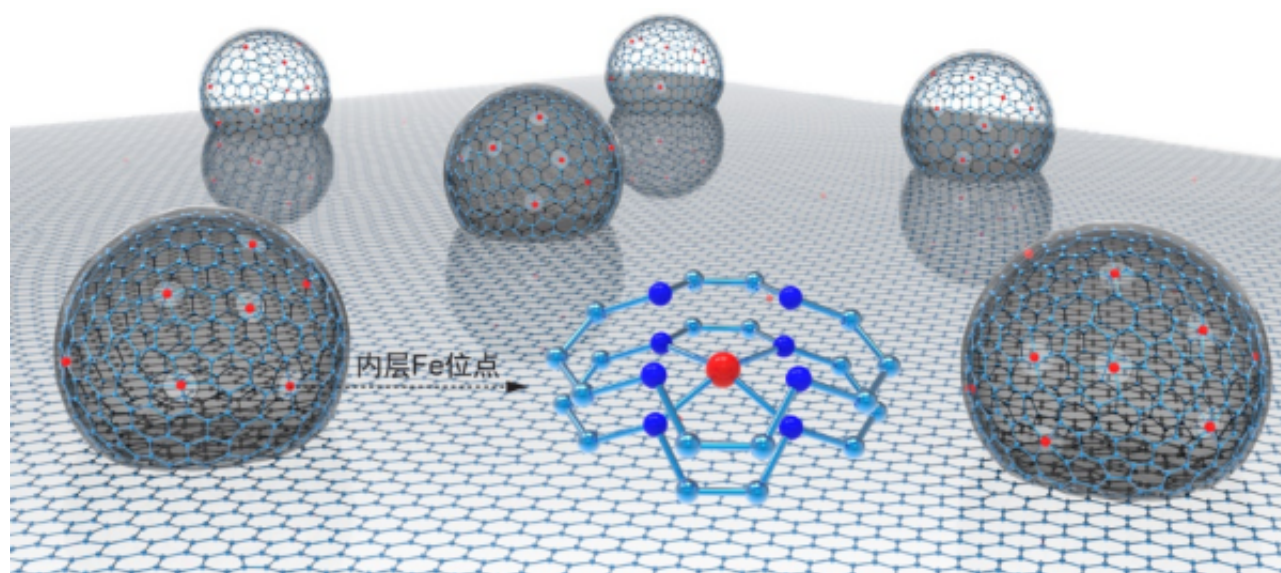
V），并有效抑制了2e⁻路径（H₂O₂）的生成，提升了反应选择性与稳定性。在5

cm²单电池测试中，该催化剂展现出目前报道的最优综合性能：在1.0 bar

H₂-air条件下，峰值功率密度达0.75 W cm⁻²；经303小时恒压运行后，仍保持86%的初始电流。

该研究构建了可叠加、模块化的单原子催化剂设计思路，通过“内层催化位点+外层防护促脱”协同优化吸附-反应-促脱防护三要素，使非贵金属催化剂在PEMFC中具有优异性能，为未来高性能燃料电池催化剂设计提供了新范式。

相关工作于8月13日发表在《自然》（Nature）上（DOI：10.1038/s41586-025-09364-6）。



CS Fe/N-C的构建

研究团队单位：过程工程研究所

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](https://www.iikx.com)转发