
研究揭示有序金属间化合物催化剂动态自优化机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41710.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！

研究揭示有序金属间化合物催化剂动态自优化机制。近日，中国科学院广州能源研究所研究员王晨光、副研究员罗密团队成功构建了一种具有动态自优化特征的L10-PtCo@Co-shell核壳催化剂。该催化剂通过有序L10-PtCo金属间化合物核与超薄Co富集壳层的协同设计，实现了工作过程中可控的结构演化。相关成果发表于《先进功能材料》（Advanced Functional Materials）。

Operando-XAFS测试示意图。研究团队供图

论文第一作者罗密介绍，研究团队采用操作态X射线吸收精细结构谱（operando XAFS）、原位拉曼光谱及密度泛函理论（DFT）计算，从原子尺度揭示了工作条件下Co原子的迁移、表面合金化及活性位点演变规律，阐明了稳定有序核—动态重构表面的协同作用机制。

质子交换膜水电解因效率高和高电流密度优势备受关注，但其酸性运行环境对催化剂的活性和结构稳定性提出严苛要求。传统催化剂设计多聚焦于维持静态稳定结构，然而实际工况下，元素迁移、原子重排和表面重构难以避免。这些动态变化既可能引发结构失活，也可能催生更有利的工作态结构。因此，捕捉催化剂在真实工作条件下的动态演化并建立其与性能的关联，成为电催化领域的关键科学问题。

针对上述挑战，研究团队在国家重点研发计划、国家自然科学基金等项目资助下，提出动态预催化剂设计理念。他们构建了以有序L10-PtCo为核、Co富集层为壳的核壳结构，使稳定核与动态表面实现功能分工，在工作条件下发生可控重构。依托上海光源BL20U1线站，团队实时追踪了催化剂局域结构的变化。结果表明，随着工作电位的施加，Co-Pt配位数逐渐上升，而Co-Co配位数持续下降，表明表面Co原子逐步向颗粒内部迁移并与Pt形成更充分的异原子配位，表面由初始的Co富集状态演变为高度合金化的PtCo结构。结合原位拉曼光谱和DFT计算，进一步证实动态重构形成的Pt-Co邻位结构能够优化氢中间体的吸附行为，并促进反应动力学。

与此同时，理论计算显示L10-PtCo核具有较高的Co原子扩散能垒，可有效抑制Co的无序迁移和溶出，从而维持核结构的长程有序性。由此，催化剂在工作状态下形成了动态重构表面-稳定有序核的协同构型。

该研究表明，催化剂工作过程中的结构重构并不必然导致失活。通过合理设计初始非平衡结构，可将原本不可控的原子迁移转化为有方向、可利用的动态自优化过程，使催化剂从初始预催化形态逐步演化为更稳定、更高效的工作态结构。

该研究将催化剂设计理念从传统的静态结构优化拓展至工作条件下的动态结构优化，为深入理解真实反应环境中催化剂的结构演化与催化机制，以及指导高活性、高稳定性催化材料的理性设计提供了新思路。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/adfm.77600>

作者：王晨光等 来源：《先进功能材料》

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