

基于深度学习的二氧化碳还原催化层结构表征与传质分析

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42735.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！

基于深度学习的二氧化碳还原催化层结构表征与传质分析。 本文聚焦于电化学二氧化碳还原反应（CO₂RR）中催化层（CL）的微观结构表征与质量传输机制，提出了一种基于深度学习（DL）的多尺度分析框架。研究通过优化样品预处理技术与语义分割模型，实现了CL孔隙结构的精准提取，并结合数值模拟与电化学实验，揭示了离聚物/催化剂（I/C）比例对质量传输和CO生成性能的影响。

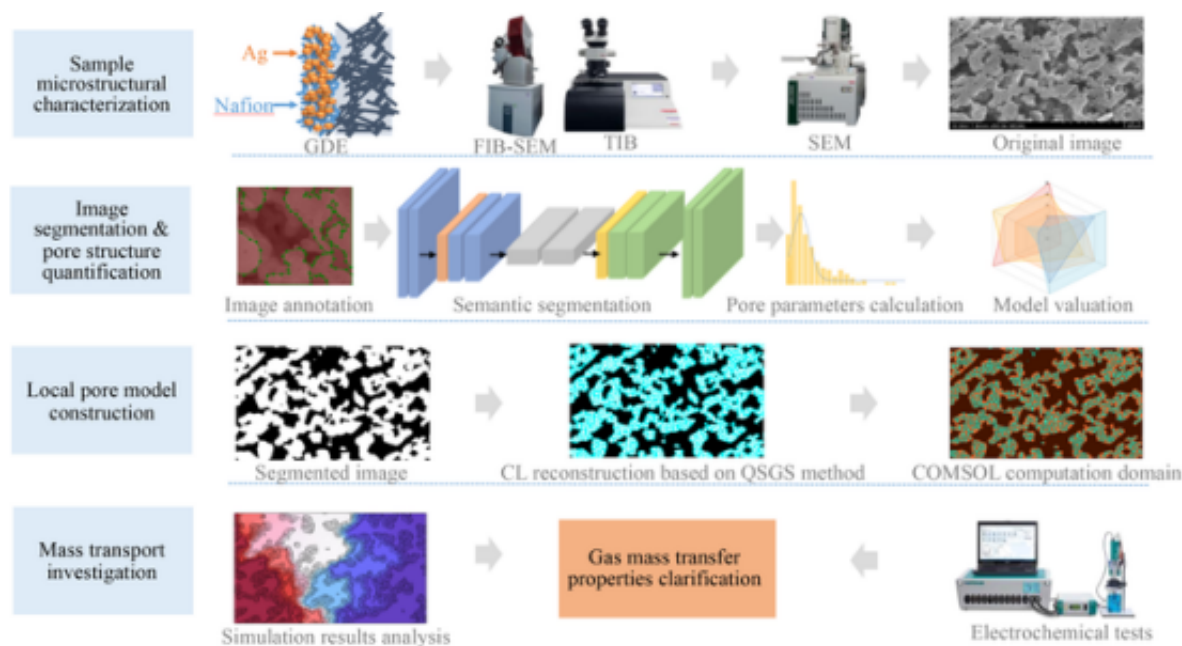


图1.研究框架

电化学二氧化碳还原反应（CO₂RR）是实现碳中和的关键技术，可将CO₂转化为高附加值化学品和燃料。然而，CO₂在催化层（CL）中的质量传输过程是反应速率的限制步骤，其效率直接取决于CL的微观多孔结构，如催化剂分布、离聚物含量等。传统研究多采用连续介质模型将CL视为均匀介质，忽略了其复杂异质结构，导致传输机制分析存在偏差。同时，现有表征技术如聚焦离子束扫描电子显微镜（FIB-SEM）易引发银催化剂（Ag）塑性变形，而阈值分割等传统图像分析方法精度不足，难以准确提取孔隙参数。

针对上述挑战，本研究构建了结构表征-质量传输模拟-性能验证的多尺度框架，通过深度学习语义分割技术提升CL微观结构解析精度，量化离聚物含量对孔隙网络和质量传输的影响，为优化C/O2RR催化层设计提供了新方法。

为解决银催化层（Ag CL）在高能量离子束下的结构变形问题，研究对比了聚焦离子束（FIB）与三离子束（TIB）的预处理效果。结果显示，FIB在30keV能量下导致Ag颗粒产生压缩和孔隙坍塌，而TIB在7keV能量下可获得光滑无损伤的截面，成为最优预处理方案。基于此，研究采集了I/C比例为0.2、0.4、0.6的CL样品的扫描电子显微镜（SEM）图像，并构建了包含150张图像的数据集，标注为Ag催化剂和背景（孔隙与离聚物）两类。

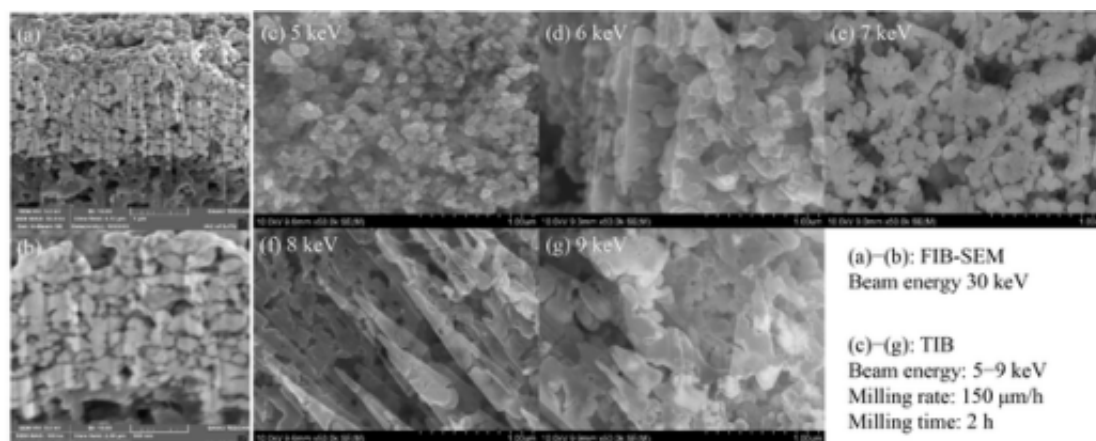


图2.银催化层（Ag CL）样品的预处理效果

研究评估了5种语义分割模型（Segformer、DeepLabV3plus、PSPNet、UNet、FastSCNN）与3种传统方法（阈值二值化、Otsu算法、K-means聚类）的性能。结果表明，DeepLabV3plus模型的平均准确率（aAcc）超过91.29%，孔隙识别召回率为92.02%，显著优于传统方法（aAcc72.35% – 77.42%）。通过压汞法（MIP）验证，该模型提取的孔隙率与实验值高度吻合，且能精准表征5nm以下微孔结构，解决了传统方法在评估亚微米级孔隙时存在的问题。

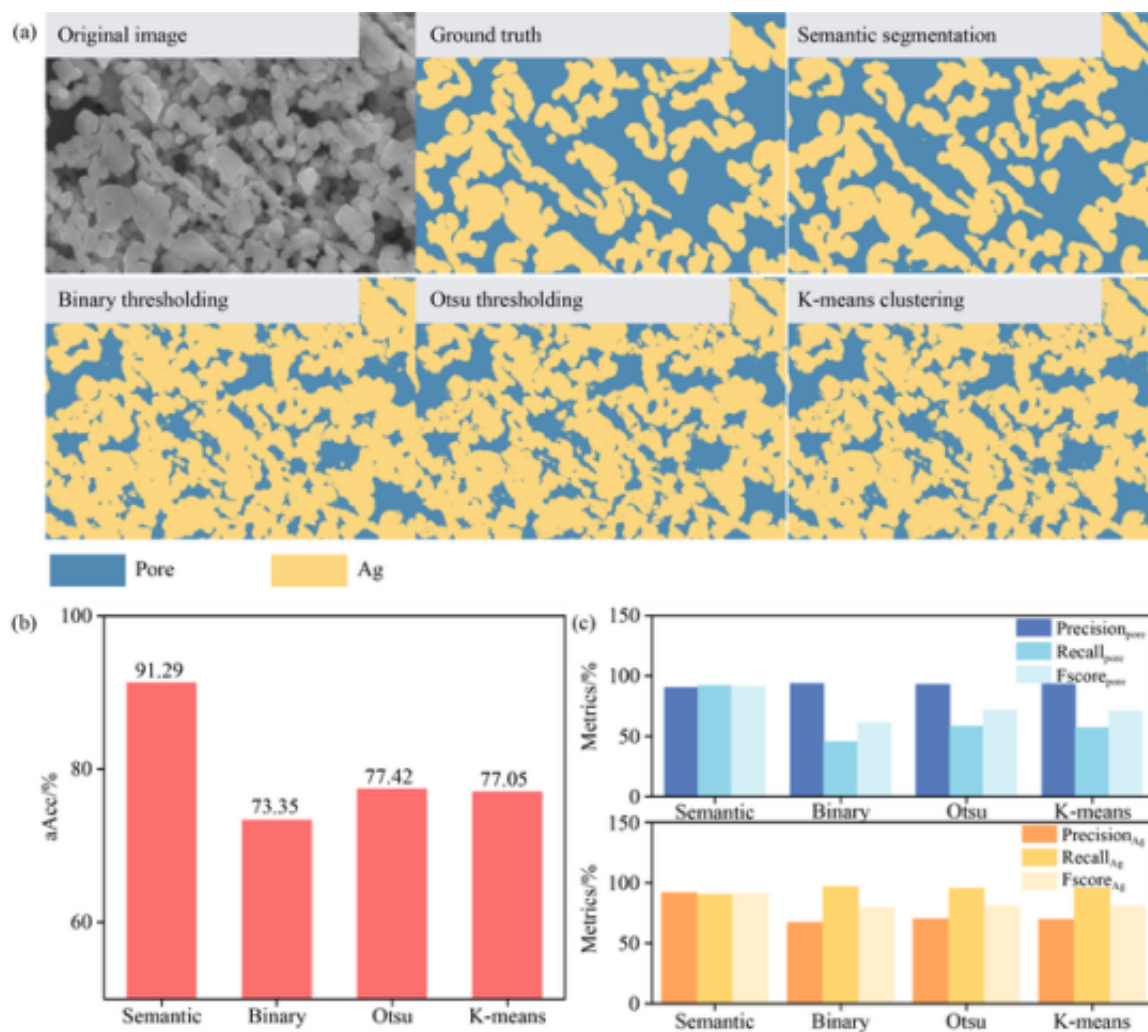


图3.不同分割方法的比较

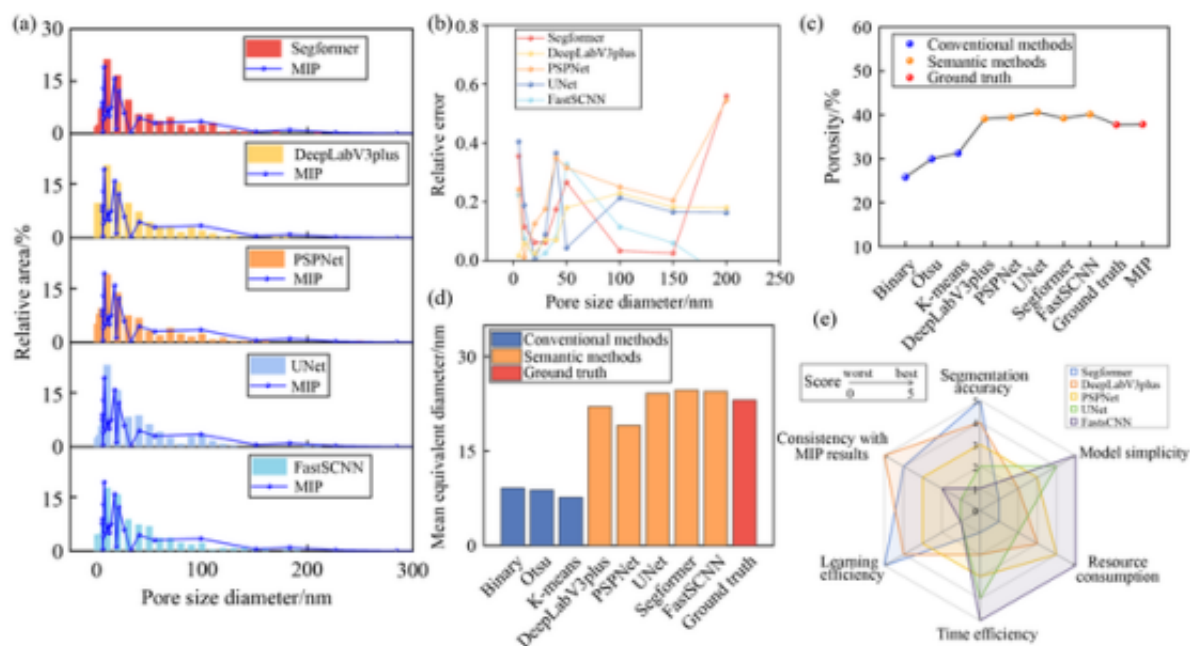


图4.催化层（CL）孔隙结构定量结果

基于语义分割结果，研究采用四参数随机生长（QSGS）方法重构了CL的微观结构，输入参数包括孔隙率、孔径分布及I/C比例。通过COMSOL数值模拟发现，I/C=0.2的CL具有最开放的孔隙网络，气体扩散距离达672.88nm，为I/C=0.6组（321.38nm）的两倍，且CO₂有效扩散系数最高。压力场与速度场分析显示，低离聚物含量减少了孔隙阻塞，促进了气体对流，而高I/C比例（0.6）因离聚物填充导致传输阻力增加，最大气体流速从470nm/s降至26nm/s。

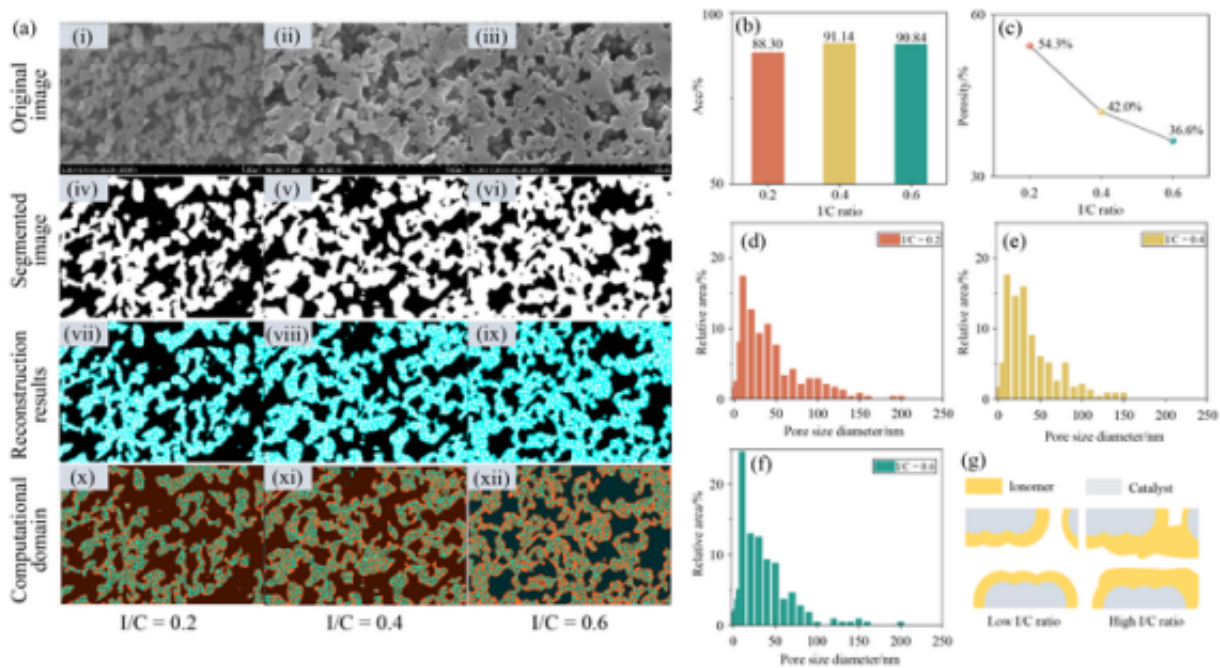


图5.离聚物/催化剂（I/C）比例为0.2、0.4和0.6的催化层系统表征及基于QSGS的重构。

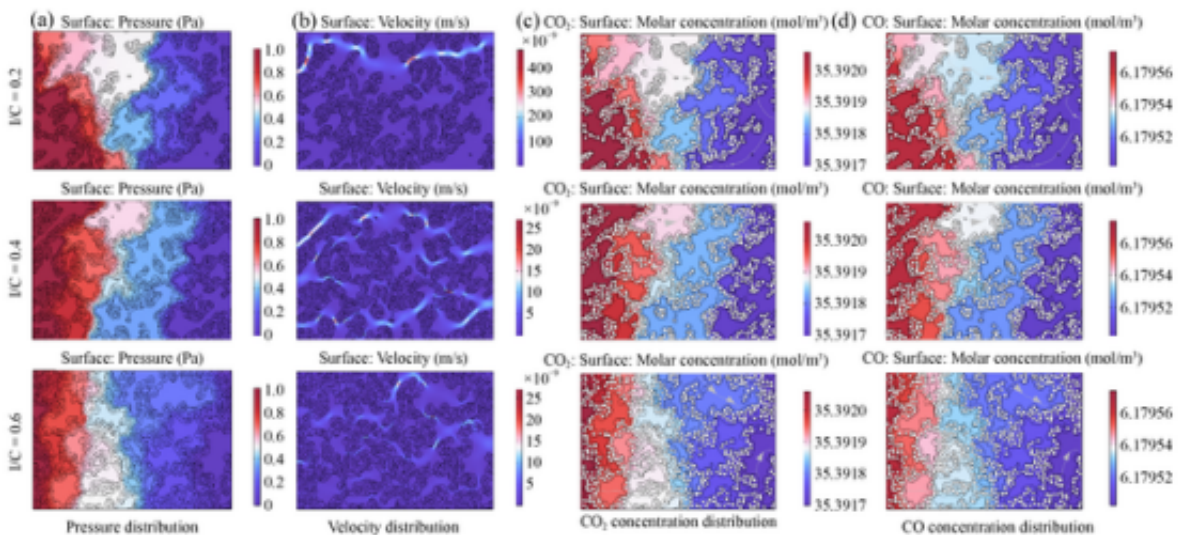


图6.离聚物/催化剂（I/C）比例为0.2、0.4和0.6的局部催化层孔隙模型模拟结果

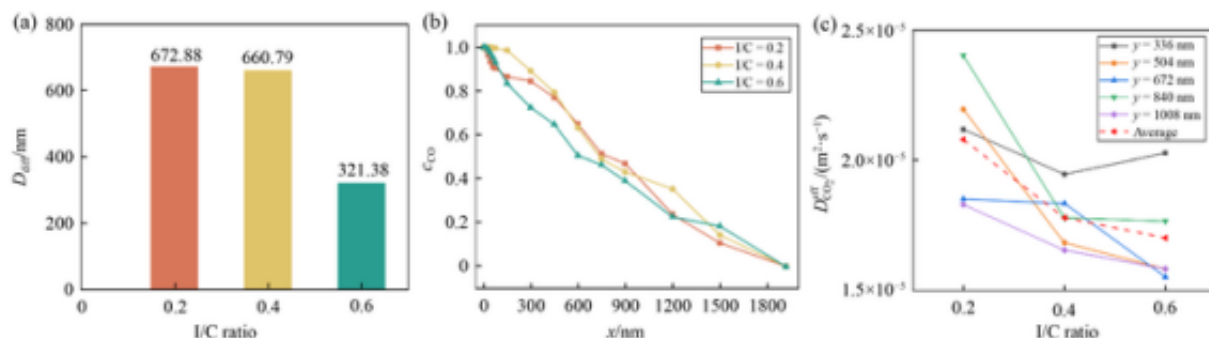


图7.催化层不同离聚物含量下的局部质量传输模拟结果

实验还采用膜电极组件（MEA）电解池评估了不同I/C比例的CL性能。结果显示，I/C=0.2的CL在250 mA/cm²电流密度下CO的法拉第效率（FE）达89%，电池电压仅2.63V，显著优于I/C=0.4和I/C=0.6。这一结果与模拟结论一致，证实了低离聚物含量通过优化孔隙结构平衡了质量传输与反应动力学，提升了CO₂RR的选择性和能量效率。

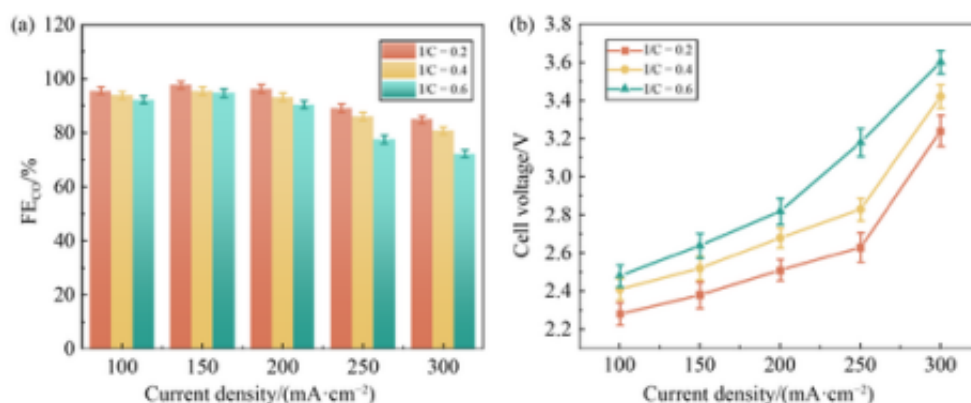


图8.不同离聚物/催化剂（I/C）比例下二氧化碳还原反应（CO₂RR）膜电极组件（MEA）的电化学性能

本研究建立了基于深度学习的CO₂RR催化层多尺度分析框架，通过7keV TIB预处理与DeepLabV3 plus语义分割模型，将结构表征精度提升13.87%–18.94%，实现了CL微观孔隙与质量传输的定量关联。研究发现，离聚物/催化剂比例为0.2时，CL的孔隙率、孔径分布及连通性最优，可延长气体扩散距离并降低传输阻力，使CO生成率翻倍。该框架不仅为CL微观结构解析提供了高精度工具，还为设计高选择性、高稳定性的CO₂RR电极材料提供了定量依据。未来研究可进一步结合多物理场耦合模拟，探索动态工况下的结构-性能关系，推动CO₂电解技术的实际应用。（来源：EngineeringJournals微信公众号）

相关论文信息：<https://journal.hep.com.cn/fie/EN/10.1007/s11708-025-1029-x>

作者：沈水云等 来源：《工程·能源》

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