
中国科大酸性电解水单原子分散催化剂调控研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/4734.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！

中国科大酸性电解水单原子分散催化剂调控研究取得进展。随着环境问题和能源问题日益突出，新能源汽车成为世界各大汽车厂商及研发机构的研究热点，而其中燃料电池汽车以其高效率和近零排放被普遍认为具有广阔的发展前景。燃料电池常用的燃料是氢气，要想大规模发展燃料电池技术，就要大力发展低成本制H₂的方法。如今，绝大多数的氢气制备是通过“甲烷水蒸气重整”的工艺，但面临着CO₂温室气体释放，对环境不友好。而电解水制氢工艺过程简单，无碳排放污染，是有望取代“甲烷水蒸气重整”，成为制备氢燃料的下一代清洁方法。目前，电解水面临的最大问题是制氢成本。工业上电解水制氢成本是33-38元/千克，1kg氢气产生相同能量所对应的汽油成本是25-29元。因此，未来要想实现燃料电池技术取代内燃机，就必须大力发展高效廉价的催化剂来降低制氢成本。

酸性电解水的过电势主要来自于氧析出的阳极部分，而开发出高效廉价的酸性条件下的氧析出催化剂是所有电解水技术中最困难也是最有挑战性的，可以和“非Pt氧还原催化剂的开发”并称为氢能高效利用领域的两大圣杯。氧析出(OER)常用的商用催化剂是IrO₂。与铱(Ir)(240-250元/克)相比，钌(Ru)(19.5-20.5元/克)地球储量更丰富，价格更廉价。然而，在强酸、强氧化性环境中，RuO₂在高的工作电位下极易被氧化为RuO₄，导致其失活。其中，Ru失活的最主要原因是RuO₂中的晶格氧参与了产物氧气的析出。因此，开发出一种高活性和高稳定的Ru单原子催化剂从而避免OER反应过程中催化剂晶格氧参与，是解决上述问题最有潜力的途径。

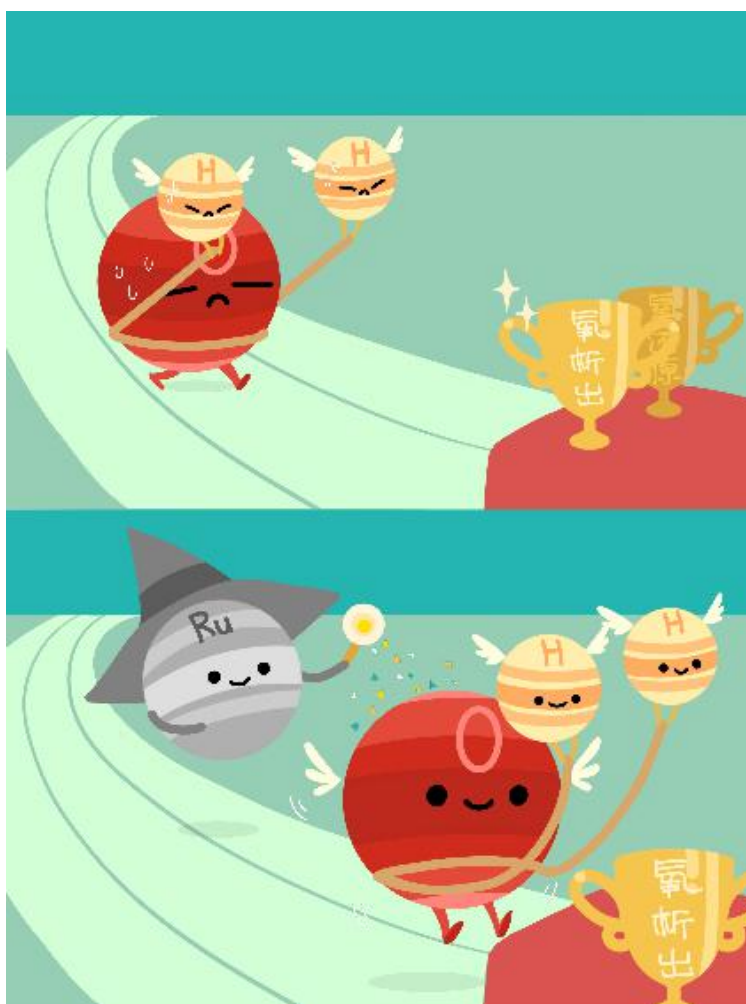
中国科学技术大学教授吴宇恩领导的团队利用表面缺陷工程技术捕获和稳定单原子的方法成功制备了Ru单原子合金催化剂。首先，利用抗氧化能力和抗溶解能力强的Pt基合金为载体，通过酸刻蚀和电化学浸出的方法在合金表面制造出丰富的缺陷位用于稳定和捕获单原子Ru。进一步通过来自于Pt-skin壳体的压缩应力调控分散在金属载体上的单原子Ru的电子结构，优化Ru与含氧中间体的结合能力，从而使该Ru单原子合金催化剂在酸性OER中具有更好的活性、抗过氧化和抗溶解能力。在酸性OER中，该Ru单原子合金催化剂相对于商业Ru基催化剂的过电位降低了~30%，稳定性提高了~10倍。

中国科大教授李微雪团队为该工作提供了理论支持。通过密度泛函理论研究表明，Pt-skin壳体的压缩应变调制了原子级分散的Ru的电子结构，优化了与氧中间体的成键强弱，得到了OER活性与合金基底晶格之间的火山曲线关系。电荷转移分析表明单原子Ru抗过氧化能力的提高主要来自于与其配位的PtCu合金，其金属性配位环境提供了丰富电子、阻止了活性组分Ru1的过渡氧化。

该工作为如何解决Ru基催化剂在酸性氧化性条件下不稳定这一难题提供了新的思路。研究成果

以Engineering the electronic structure of single atom Ru sites via compressive strain boosts acidic water oxidation electrocatalysis 为题，作为封面文章发表于国际期刊《自然-催化》(Nat. Cat. 2019, 10.1038/s41929-019-0246-2)。

该论文第一作者是博士么艳彩、博士后胡素磊和陈文星，通讯作者是李微雪、吴宇恩。论文第一单位是中国科大。该工作得到国家自然科学基金委、科技部、中组部、中科院、安徽省科委、中国科大领军人才计划等联合资助。



上图：氧析出和氧还原反应被称为氢能高效利用领域的两大圣杯。然而，在酸性氧析出运行环境中，不仅需要高过电位而且催化剂的稳定性很差，这就导致氧析出的动力学极其缓慢。

图2：《自然-催化》本期封面文章：酸性电解液的环境中，在外加电位作用下，水分子吸附到活性位点单原子Ru上，在单原子Ru的催化下，电解水产生氧气。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发