碳基催化剂电催化析氢研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学技术大学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/7066.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！

碳基催化剂电催化析氢研究取得进展。近年来电解水制氢受到广泛关注，寻找能替代贵金属的廉价高效的电催化剂成为当下研究热点。石墨烯由于具有良好的导电性、优异的化学稳定性以及易于化学修饰等优点，引起了科研人员的广泛关注，人们致力于将其发展成为高活性的电解水制氢催化剂。

已有研究结果表明通过氮等杂原子掺杂可以调控杂原子近邻碳原子的电子结构，增强该碳原子活性位点与反应中间体的吸附作用，进而提高石墨烯等碳基材料的电催化析氢性能，然而传统的吡啶、吡咯和石墨型氮掺杂模式对于石墨烯等碳基催化剂的性能调控，效果不佳，与报道的高活性的金属基催化剂相比仍有很大的差距。中国科学技术大学科研人员通过密度泛函理论计算(DFT)揭示在一个石墨烯晶格六元环内进行双石墨型氮掺杂可以显著改变材料中碳原子(与两个氮原子结合的碳原子)的电子结构，降低碳活性位点的ΔGH*值至非常接近于0eV，有望进一步提高碳基材料的析氢催化活性。

该研究采用金属有机框架化合物Cu-BTC作为前驱体，通过煅烧和溶剂热处理得到类石墨烯粒子聚集体，经CV循环后，其酸性电催化析氢性能逐渐提高，达到最优值时，在10 mA/cm2电流密度下其过电位仅为57mV，塔菲尔斜率为44.6 mV/dec，显示出与已报道的高活性金属基催化剂和Pt/C催化剂可比的电催化析氢性能。红外光谱、X射线光电子能谱、X射线近边吸收精细结构和固态核磁共振的表征结果表明该碳基材料形成了双石墨型氮掺杂于一个石墨烯晶格六元环的新结构，与两个相邻的石墨型氮键合的碳原子是催化活性位点，该键合方式有利于增强H在C活性位点上的吸附，从而提高催化活性。

研究成果以Dual Graphitic-N Doping in a Six-Membered C-Ring of Graphene-Analogous Particles Enables an Efficient Electrocatalyst for the Hydrogen Evolution Reaction
为题在线发表在国际期刊德国《应用化学》。

中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心和化学与材料科学学院材料系教授陈乾旺为论文通讯作者，中国科大博士研究生林志宇和博士后杨阳为论文共同第一作者。合肥同步辐射国家实验室、上海同步辐射光源和合肥稳态强磁场中心对于实验结果的表征分析提供了重要的帮助，该研究得到国家自然科学基金等的资助。

相关论文信息：https://doi.org/10.1002/anie.201908210

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转发