



科研动态

 现在位置: [首页](#) > [新闻动态](#) > [科研动态](#)

- > [上海硅酸盐所在金属有机电...](#)
- > [高性能陶瓷和超微结构国家...](#)
- > [上海硅酸盐所在纳米催化非...](#)
- > [高性能陶瓷和超微结构国家...](#)
- > [上海硅酸盐所生物材料与组...](#)
- > [九三学社上海硅酸盐所支社...](#)
- > [上海硅酸盐所等联合承办第...](#)
- > [上海硅酸盐所等联合承办第...](#)
- > [上海硅酸盐所在金属有机骨...](#)
- > [上海硅酸盐所在氟基电池研...](#)
- > [上海硅酸盐所等举办2021年...](#)
- > [上海硅酸盐所等承办第三届...](#)
- > [泰国驻华使馆公使衔参赞参...](#)
- > [上海硅酸盐所中试基地和人...](#)
- > [上海硅酸盐所多项科研成果...](#)

上海硅酸盐所提出“亚稳相催化”设计策略

 发布时间: 2021-12-07 15:36 | [【小中大】](#) | [【打印】](#) | [【关闭】](#)

工业大规模电解水制氢主要采用碱性电解水制氢技术,其制氢工艺简单,产品纯度可达99.9%,被视为最具有潜力的大规模制氢技术。然而,超高电流下,超低过电位与低成本之间的权衡仍然是工业电解水制氢的一个巨大挑战。在该研究领域,计算电化学方法、机器学习、电化学实验表征紧密结合,为设计高活性析氢电催化剂奠定了重要基础。

近期,中国科学院上海硅酸盐研究所刘建军研究员团队和复旦大学叶明新、沈剑锋教授团队合作,提出了“聚阴离子掺杂诱导亚稳相催化”的催化剂结构设计策略,通过磷酸根掺杂亚稳相 β -NiMoO₄激活费米能级处活性电子态,有效降低碱性电解质水分解生成H^{*}能垒,进一步促使H^{*}耦合生成H₂脱附,表现出最佳的氢吸附自由能(-0.046eV),高效提升催化剂本征稳定性和活性。研究发现,磷酸盐取代的 β -NiMoO₄在1000mAcm⁻²的超高工业电流密度下保持200h的长期稳定,过电位仅为-210mV。相关工作发表在Nature Communications 2021, 12, 5960。

基于“亚稳相催化”设计理念,刘建军研究员团队与上海硅酸盐所王家成研究员团队合作构建Fe/N共掺石墨烯基底(Fe-N-C)、纳米级钌(Ru)纳米粒子(NPs)和单个Ru原子组成复合二维材料,Fe/N共掺石墨烯基底从热力学稳定性上可以促使Ru-NPs高效分散形成小尺寸NPs和单原子(SAs),Ru纳米粒子降低水解离能垒,Ru单原子协同促进H^{*}源快速结合生成H₂脱附,协同提高碱性析氢催化活性。在10mAcm⁻²(η_{10})电流下具有超低过电位(9mV),优于碱性条件下商用的HER电催化剂。相关工作发表在Advanced Science 2021, 20, 2001881。

亚稳相1T-MoS₂具有高析氢催化活性,设计更广泛的金属相过渡金属硫属化物(TMDs)面临巨大的挑战。通过高通量计算筛选与机器学习结合,建立了电子带隙、相稳定性、空位形成能、氢吸附能的多级筛选策略,筛选出完美的单层VS₂和NiS₂,过渡金属离子空位(TM-空位)ZrTe₂和PdTe₂,硫族离子空位(X-空位)MnS₂,CrSe₂,TiTe₂和VSe₂等催化剂。基于半监督机器学习方法,建立了1T-TMDs材料的HER催化活性描述符 $\Delta G_{H^*}=0.093-(0.195*LEf+0.205*LEs)-0.15*V_{tmx}$ (其中0.195*LEf + 0.205*LEs为局部电负性,V_{tmx}为价电子数)。该工作以发表于Journal of Physical Chemistry Letters 2021, 12, 2102上。

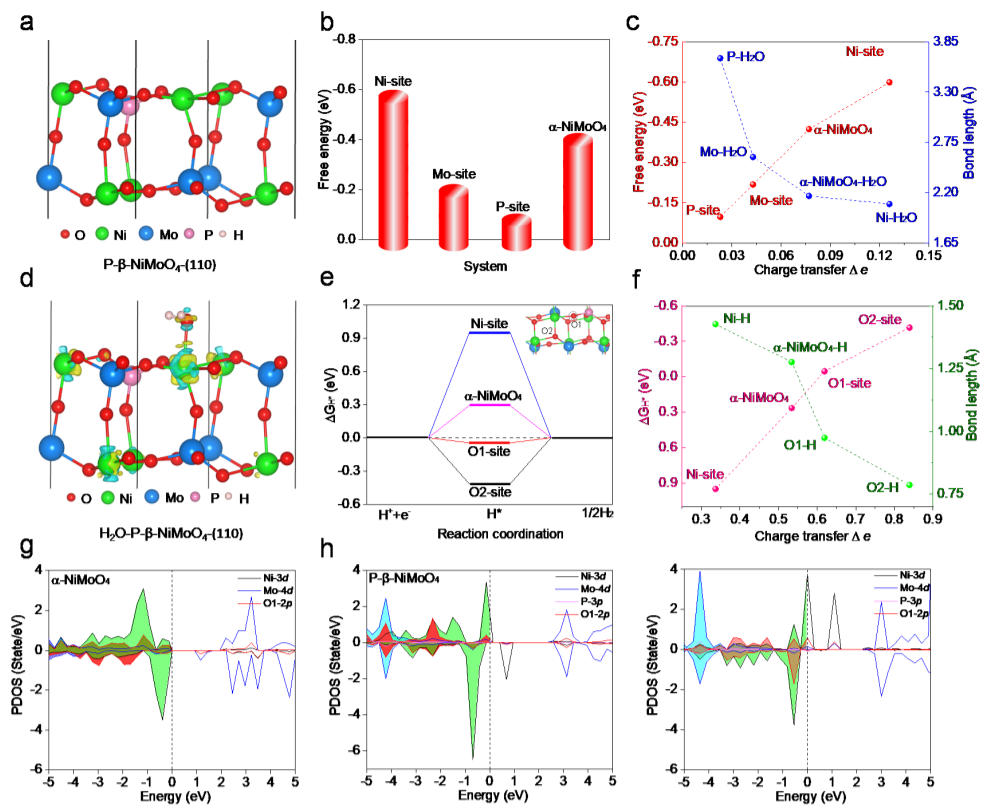
相关研究工作得到国家自然科学基金委员会和上海科学技术委员会等项目的资助和支持。

附文章链接:

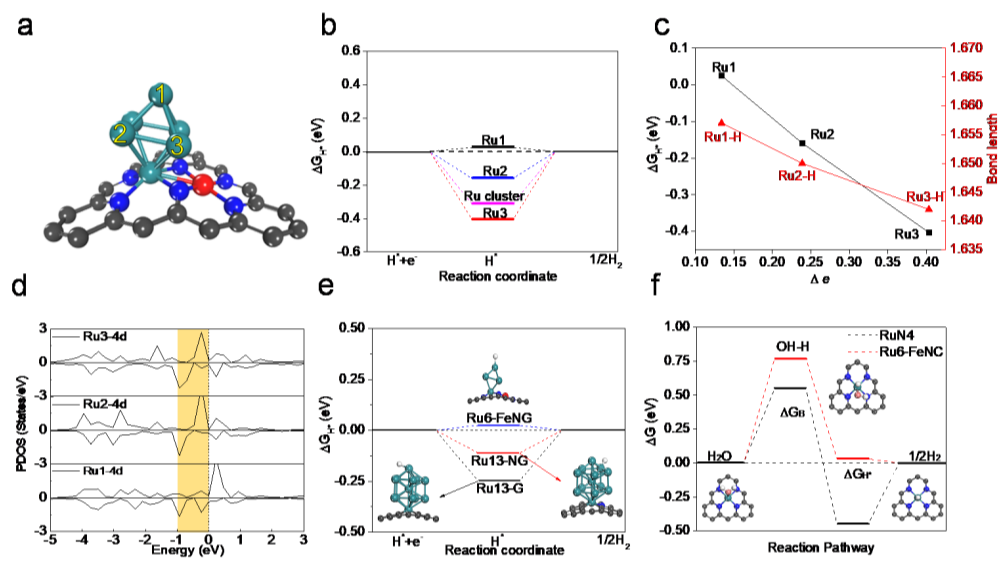
<https://www.nature.com/articles/s41467-021-26256-1>

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/adv.202001881>

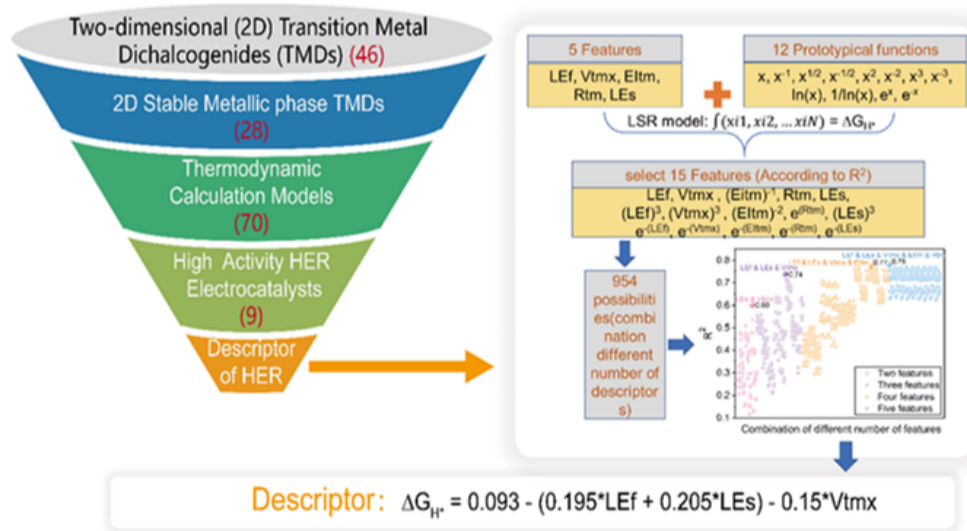
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcl.0c03839>



磷酸根掺杂亚稳相 β -NiMoO₄高效促进碱性介质水分解生成H*源，进一步耦合生成H₂脱附，实现碱性条件下超高电流、超低电位电解水制氢



碱性/中性条件Ru单原子和团簇协同催化，有效降低碱性条件水分解能垒，促使H*耦合生成H₂脱附，实验验证10mAcm⁻²电流下过电位制氢仅有9mV。



多级高通量计算与机器学习进行金属相TMDs高活性析氢催化剂的筛选与描述符的构建。