

碳基催化剂电催化析氢研究取得新进展

2019-10-12

分享到: QQ空间 新浪微博 腾讯微博 人人网 微信

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还有很大的差距。本工作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 ΔG_{H^*} 值至非常接近于0 eV，有望进一步提高碳基材料的析氢催化活性。本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

[我校8位教师当选中国科学院院士
1位当选中国科学院外籍院士](#)

[我校老年大学获邀参演《筑梦夕阳红——2020安徽老年大学协会春晚》](#)

[我校4位教师当选中国青年科技工作者协会理事](#)

[中国科大举行“华米运动健康基金”捐赠仪式](#)

[党委副书记、纪委书记毕金初为新提任中层干部作专题辅导报告](#)

[2019年度中国科大-合工大-安大哲学类研究生学术论坛成功举办](#)

[舒歌群书记做学校学习贯彻党的十九届四中全会精神宣讲团首场宣讲...](#)

[第三届校园学生书画大赛颁奖典礼暨展览开幕式圆满举办](#)

[我校跃动青春文艺季系列活动之合唱团年轮新年音乐会成功举办](#)

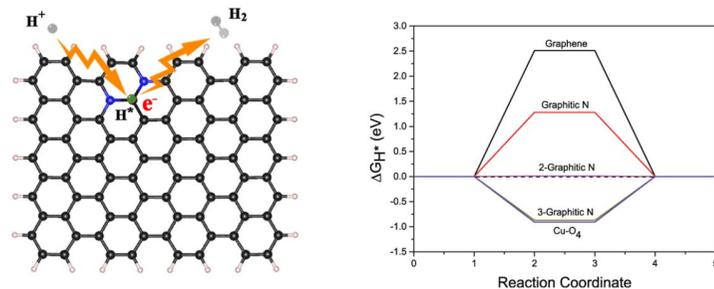
[中国科大研制耐受温度变化的超弹性和抗疲劳碳纳米纤维气凝胶](#)

中国科学院
中国科学技术大学
中国科大历史文化网
中国科大新闻中心
中国科大新浪微博
瀚海星云
科大校友新创基金会
中国高校传媒联盟
全院办校专题网站
中国科大60周年校庆
中国科大邮箱

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化学期刊Angew. Chem. Int. Ed. DOI: 10.1002/anie.201908210。

中国科学技术大学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陈乾旺教授为论文通讯作者，中国科学技术大学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，该研究得到了国家自然科学基金等的资助。



双石墨型氮掺杂于一个石墨烯晶格六元环结构的电催化析氢反应示意图及吉布斯自由能计算结果 [图中黑色小球代表碳原子，蓝色小球代表氮原子，与两个石墨型氮原子相连的碳原子是电催化析氢活性位点，相关吉布斯自由能计算结果给出双石墨型氮掺杂于一个石墨烯晶格六元环的结构(2-Graphitic N)的

ΔG_{H^*} 为0.01eV.]

文章链接:

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/anie.201908210>

(合肥微尺度物质科学国家研究中心、化学与材料科学学院、科研部)

中国科大新闻网



中国科大官方微博



中国科大官方微信



Copyright 2007 - 2008 All Rights Reserved 中国科学技术大学 版权所有 Email: news@ustc.edu.cn

主办: 中国科学技术大学 承办: 新闻中心 技术支持: 网络信息中心

地址: 安徽省合肥市金寨路96号 邮编: 230026