

科学研究 学术动态

学术动态 (</Scientific/news.html>)

自然科学 (</Scientific/natural.html>)

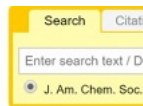
社会科学 (</Scientific/social.html>)

研究机构 (</Scientific/institute.html>)

南京师大学报 (<http://xuebao.njnu.edu.cn/>)

化科院教师在燃料电池催化剂的研究方面取得重要进展

近日，化科院李亚飞教授课题组在燃料电池催化剂的设计方面取得重要进展。相关研究成果以“PtTe Monolayer: Two-Dimensional Electrocatalyst with High Basal Plane Activity toward Oxygen Reduction Reaction”为题发表在J. Am. Chem. Soc. (JACS, 《美国化学会志》)上。论文链接：<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.8b08682>。JACS是化学领域具有重要影响力的刊物之一，2018年的影响因子为14.357。这也是该课题组近一个月来第二次以南京师范大学为第一通讯单位在JACS发表论文。



Navigation: [Home](#) [Browse the Journal](#) [Articles ASAP](#) [Current Issue](#) [Submission & Review](#) [Open Access](#) [About the Journals](#)

Communication

PtTe Monolayer: Two-Dimensional Electrocatalyst with High Basal Plane Activity toward Oxygen Reduction Reaction

Yu Wang[†], Yafei Li^{†*}, and Thomas Heine^{‡§}

[†] Jiangsu Collaborative Innovation Centre of Biomedical Functional Materials, Jiangsu Key Laboratory of New Power Batteries, School of Chemistry and Materials Science, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China
[‡] Theoretical Chemistry, School of Science, TU Dresden, Bergstraße 66c, 01062 Dresden, Germany
[§] Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Institute of Resource Ecology, Leipzig, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig, Germany

J. Am. Chem. Soc., Article ASAP
DOI: 10.1021/jacs.8b08682
Publication Date (Web): October 1, 2018
Copyright © 2018 American Chemical Society

Cite this: J. Am. Chem. Soc. XXXX, XXX, XXX-XXX
RIS Citation GO

(http://www.njnu.edu.cn/wzattach/t_094414_661137.jpg)

燃料电池可以将化学能直接转换为电能，是满足未来能源需求的一种理想解决方案。但在燃料电池的阴极发生的氧还原反应(ORR)存在较大的过电势，动力学过程缓慢，严重影响燃料电池的整体性能，非常依赖于铂(Pt)等高效电催化剂的使用。但Pt基催化剂成本昂贵，极大的限制了燃料电池大规模商业化。在过去的几十年间，研究人员一直致力于开发一些非贵金属甚至不含金属的电催化剂来取代Pt，但这些非Pt催化剂仍然面临活性和耐久性的差的问题，很难真正替代Pt基材料。近年来单原子催化剂概念的提出让我们意识到如果能在不牺牲催化性能的前提下大幅度的提高Pt基催化剂中Pt原子的利用率，将会为Pt基催化剂带来新的希望。

基于上述科学问题，李亚飞教授课题组和德国德累斯顿工业大学Thomas Heine教授合作，通过密度泛函理论计算出单层PtTe这种新颖的无机二维材料。计算表明，单层PtTe有良好的热力学、动力学以及化学稳定性，并且具有较低的剥离能，可以通过机械或者液相剥离实验上早已合成的PtTe体相材料制得。PtTe单层由于含有铂原子内层，整体上体现金属特性，十分有利于电催化过程。基于计算氢电极模型的计算显示PtTe单层的Te表面有高的氧还原活性以及选择性。特别的是，基于平均场方法(mean-field)的微观动力学模拟(micro-kinetic)进一步指出其理论半波电位高达0.90 V，比Pt(111)面的理论值高出50 mV以上。因此，该材料是一个非常前景的燃料电池阴极催化剂。该研究工作为二维铂基ORR催化剂的理论和实验研究提供了新思路。

该研究工作得到了基金委优秀青年科学基金、江苏省杰出青年基金、江苏省生物医药功能材料协同创新中心、江苏省新型动力电池重点实验室和江苏省优势学科等项目的资助。本论文的第一作者为化科院2018届博士生王彧，于2013年在化科院取得学士学位，同年加入李亚飞教授课题组，2018年博士毕业后进入新加坡南洋理工大学从事博士后工作。王彧博士在南师大学期间发表以第一作者（含共同第一作者）身份发表SCI收录论文17篇，其中影响因子大于10的9篇，包括J. Am. Chem. Soc. (1篇)、Nat. Commun. (4篇)、Chem (1篇)、Adv. Mater. (1篇)、Energy Environ. Sci. (1篇)和ACS Energy Lett. (1篇)。

化科院供稿
2018.10.08

发布时间：2018/10/08



NNU · 南京师范大学 (</index.html>)
NANJING NORMAL UNIVERSITY



信息公开 (<http://xxgk.njnu.edu.cn/>)