



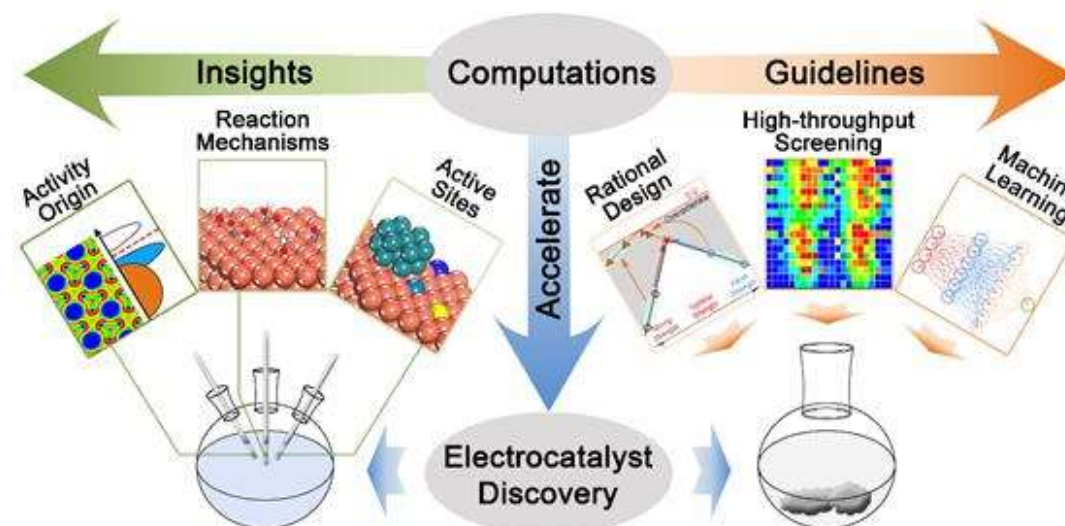
当前位置: 首页 | 科技动态 | 科研动态

东南大学物理学院王金兰教授团队受邀在Chem上发表综述论文

发布日期: 2022-09-09 访问次数: 61

【东大新闻网9月7日电】(通讯员 凌崇益)近日,物理学院王金兰教授团队受邀在国际顶级期刊《Chem》(Cell姊妹刊)上发表题为“*How Computations Accelerate Electrocatalyst Discovery*”的综述论文。物理学院的凌崇益副教授和王金兰教授分别为文章的第一作者和通讯作者。

随着全球能源短缺以及环境问题的日益严峻,清洁能源的开发已是迫在眉睫。电化学能量转换,能够在电能驱动下、将空气中的小分子(H_2O 、 CO_2 、 N_2 等)转化为增值产物(H_2 、 $C_xH_yO_z$ 、 NH_3 等),从而实现能源与重要化学原料的绿色、可持续生产,因此被视为解决当前能源短缺与环境问题的潜在方案之一。缺少高效、稳定、价格低廉的电催化剂是限制这一技术实际应用的关键问题,因此电催化剂的研发一直是该领域研究的重点和难点。在过去的十几年中,电催化剂的研发取得了长足进步,而理论计算在这个过程中发挥着不可或缺的作用。



有鉴于此，物理学院王金兰教授团队围绕“计算如何助力电催化剂研发”，结合一些经典例子，从理解和指导实验两个方面，总结和介绍了理论计算在电催化剂研发过程中的重要作用。文章首先总结了理论计算方法与模型的发展，介绍了不同方法与模型的优势与缺点。其次，在理解实验方面，作者提出利用理论计算能够帮助确定活性中心原子结构、描述反应机理以及构建活性描述符以理解活性起源，并介绍了基于这些理解而取得的重要研究进展。在指导实验方面，文章结合一些研究结果，介绍了如何基于理论计算构建的“结构-性能”关系进行催化剂的理性设计，以及设计“突破固有线形关系限制”的高效催化剂的设计原则。此外，文章也介绍了利用高通量以及机器学习等技术手段从大量候选材料中来筛选高效电催化剂、指导实验合成等方面的研究进展。

作者还总结和展望了理论计算在电催化领域中面临的挑战和重要机遇。其中最主要的问题在于方法和模型的发展，以实现真实电化学环境下的催化反应模型，从而对催化剂的活性、选择性、稳定性等进行定量描述与评估。此外，作者也提出，机器学习在高效电催化剂筛选方面已经展现出巨大优势，其优点在于“数据驱动”所赋予的高效率，而其缺点也在于“数据驱动”所导致大量、高质量数据的依赖。基于此，作者呼吁研究者们能在自己的研究工作中尽可能的提供准确、细节、可重复的计算和实验数据，这必然会促进电催化剂研发取得更重要的进展。

该工作得到了国家重点研发计划，国家自然科学基金重点项目和中央高校基本科研业务费的资助。

原文链接：<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2451929422001528>

供稿：物理学院

科研院