

新闻博览

首页 / 新闻博览 / 正文

© 2024年03月01日

中国科大在催化剂稳定性研究中取得新进展

近日，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物理系曾杰教授研究团队研究发现钴氧化物负载的铈单原子催化剂在酸性电化学析氧反应中的稳定性与近邻铈原子之间的距离密切相关。相关成果以“Distance effect of single atoms on stability of cobalt oxide catalysts for acidic oxygen evolution”为题发表在《自然·通讯》上，我校曾杰教授、周仕明副教授为通讯作者，张志荣特任副研究员、贵州师范大学贾传义副教授、马沛宇博士后为该论文的共同第一作者。

设计开发高活性、低成本的电化学析氧催化剂对质子交换膜电解水技术的发展具有重要意义。钴基尖晶石氧化物具有较高的电化学析氧活性，被认为是一类非常有发展前景的非贵金属电化学析氧催化剂。然而，在质子交换膜电解水的酸性条件下，钴基尖晶石氧化物中的钴原子容易发生溶解，从而导致尖晶石氧化物结构崩塌，这严重限制其在质子交换膜电解水技术中的应用。通过向钴基尖晶石氧化物中引入铈单原子，可以提升钴基尖晶石氧化物的稳定性。然而，钴基尖晶石氧化物的稳定性与近邻铈原子之间的距离密切相关。因此，亟需从原子尺度探究钴基尖晶石氧化物稳定性研究中的单原子距离效应。

基于此，研究人员通过在钴基尖晶石氧化物 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 中引入不同距离的铈单原子，揭示了铈单原子稳定 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 时的距离效应。研究表明，铈单原子对 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 的稳定效应是局域性的，当近邻铈原子之间的距离较远时，铈单原子对 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 的稳定效应相对独立，不能稳定整个载体；当近邻铈原子之间的距离较近时（ $d = 0.6\text{nm}$ ），近邻铈原子对 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 的稳定效应重合，此时铈单原子可以稳定整个载体。

首先，研究人员建立了不同距离铈单原子的结构模型，研究了不同距离铈单原子对 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 中钴原子迁移能的影响。结果发现，随着铈原子之间的距离从 1.14nm 逐渐降低至 0.56nm ，钴原子的迁移能从 1.63eV 提升到 1.83eV （图1a, b, c, d）。以上结果表明，当铈原子之间的距离较远时，其对 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 的稳定效应较弱；当铈原子之间的距离足够近时，近邻铈原子对钴原子的稳定效应会相互叠加，从而稳定整个 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 催化剂（图1e）。

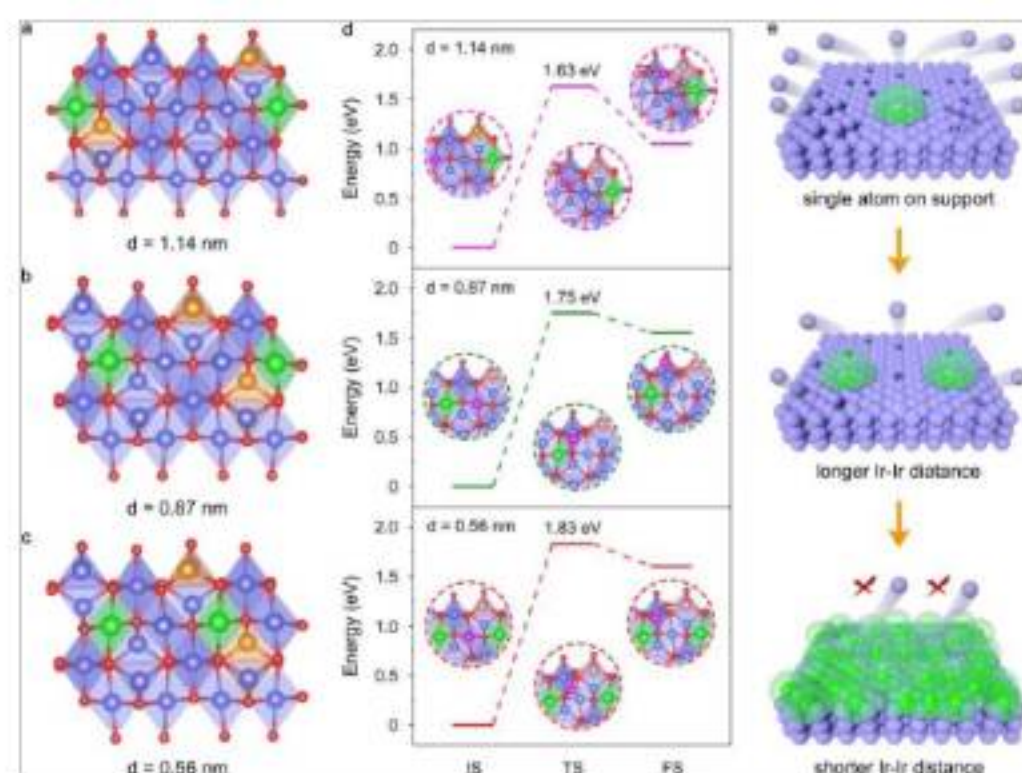


图1. 不同距离铈单原子对钴原子迁移能的影响。

为了探究不同距离铈单原子对 $\text{Cu}_0.3\text{Co}_2.7\text{O}_4$ 的稳定效应，研究人员对系列催化剂进行了酸性电化学析氧稳定性评估。结果表明，随着铈单原子之间的距离从 1.1nm 缩短到 0.6nm ，催化剂的稳定性逐渐提高。当铈单原子距离为 0.6nm 时，该催化剂在1000圈测试后性能仍然保持稳定（图2a, b），且电解液中几乎不存在溶解的钴物种（图2c）。此外，该催化剂在 10mA cm^{-2} 的电流密度下可以稳定运行60小时，表明其优异的稳定性（图2d）。

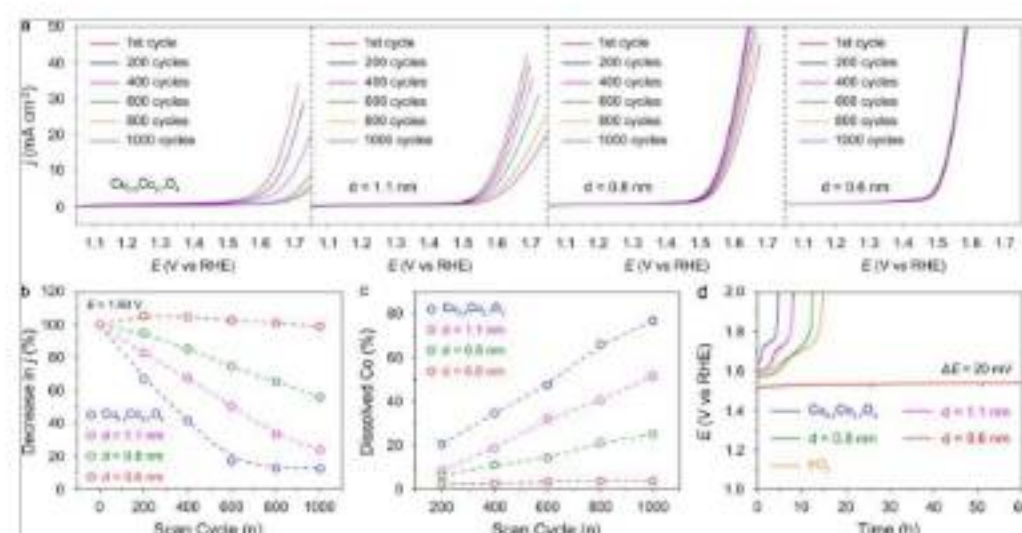


图2. 不同距离铈单原子的电化学析氧稳定性评估。

以上研究通过理论模拟和电化学稳定性评估证明铈单原子对钴基尖晶石氧化物的稳定效应与近邻铈原子之间的距离密切相关，这为酸性电化学析氧催化剂的理性设计提供了新的思路。此项工作得到国家重点研发计划项目、中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划项目、国家自然科学基金项目等项目的支持。

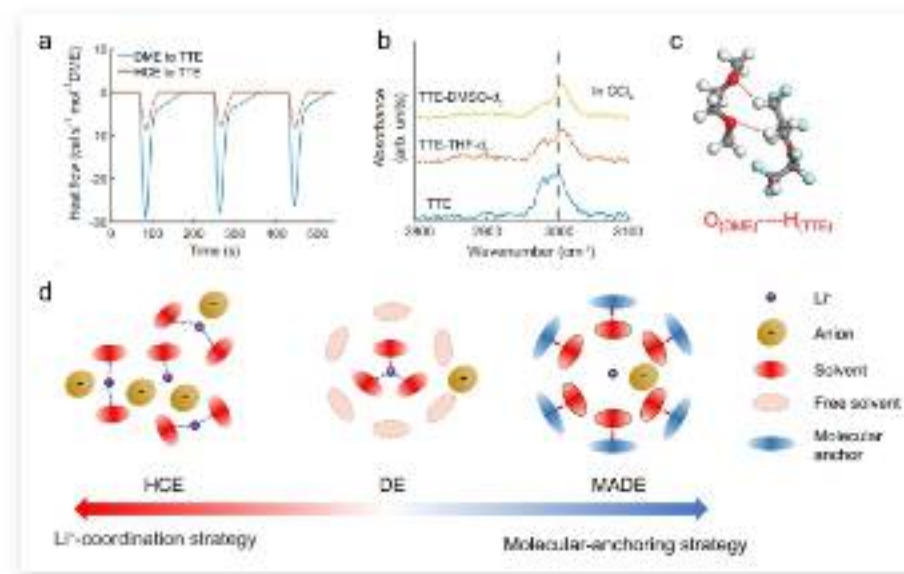
论文链接：<https://www.nature.com/articles/s41467-024-46176-0>

(合肥微尺度物质科学国家研究中心、化学与材料科学学院、科技部)

分享本文



相关新闻



中国科大在锂电池高安全性电解液的研究...

近日，中国科学技术大学化学与材料科学学院、合肥微尺度物质科学国家研究中心任晓迪教授团队联合火灾科...

03.13 “核光同行 学有所成”——国家同步辐射...

03.13 科普漫画《火团团大冒险》新书发布会成...

03.13 化材植梦，科技树人——化学与材料科学...

03.13 高新园区举行2024年植树主题团日活动