



科研之窗

通知公告

学院新闻

科研之窗

学术活动

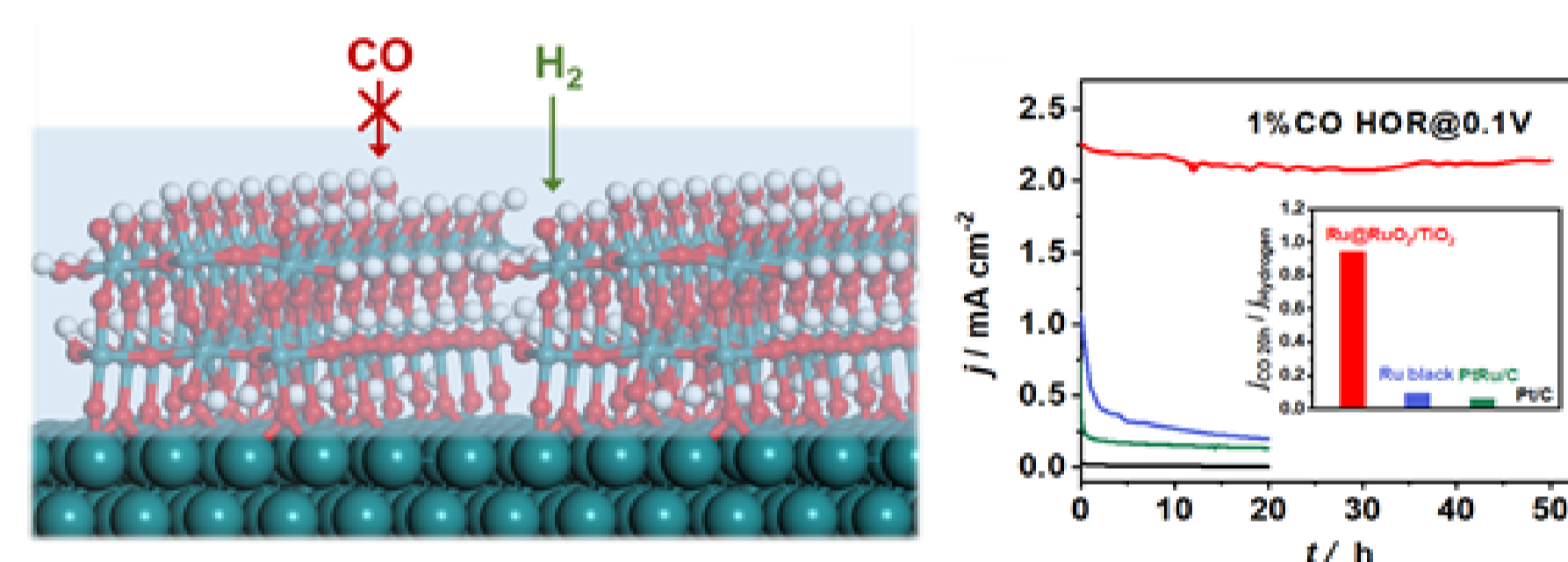
物资共享

首页 · 科研之窗 · 正文

燃料电池阳极催化剂抗CO毒化新策略

发布日期:2022-05-27 浏览次数:2292次

近日, 我院孙世刚院士、周志有教授课题组在燃料电池阳极抗毒化催化剂方面取得新进展。该工作通过在金属钌表面构筑水合二氧化钌修饰层, 阻碍一氧化碳的扩散和吸附动力学, 有效提高了金属钌催化剂的抗中毒能力, 相较传统PtRu/C催化剂实现了两个数量级的性能提升, 为解决燃料电池阳极的氢气氧化抗中毒问题提供了新思路, 相关成果以“High CO-Tolerant Ru-Based Catalysts by Constructing an Oxide Blocking Layer”为题发表在*J. Am. Chem. Soc.* (2022, DOI: 10.1021/jacs.2c00602)。



贵金属电催化剂的毒化是影响燃料电池性能的一个瓶颈问题。但前工业氢气来源于化石燃料重整氢和副产氢, 但往往含有微量的一氧化碳、硫化氢等, 其在贵金属表面强烈吸附会导致催化剂中毒而失活。传统抗CO毒化策略是通过在Pt催化剂表面引入第二元的亲氧金属 (如Ru), 利用双功能机制促进表面吸附的CO氧化脱除。然而, 燃料电池阳极的工作电位低, CO氧化速率很慢, 难以抵消其累积速率, 工况条件下几个ppm的CO就会产生严重的毒化问题。为解决这一难题, 研究团队另辟蹊径, 制备了无定型水合氧化钌包裹的金属钌电催化剂, 利用水合氧化钌层对CO扩散与吸附的阻碍作用, 提高催化剂对CO的耐受性。在水溶液测试条件下, 该催化剂可在含1% CO的氢气中稳定工作50小时, 抗毒化性能比商业PtRu/C提高了两个数量级。对照实验表明, 该催化剂的抗毒化机制难以采用传统的双功能机制与吸附能调控来解释。为了进一步认识氧化物阻隔层提高抗毒化性能的机制, 研究团队利用从头算分子动力学方法进行模拟。结果表明氧化物修饰层可以使得金属钌表面的界面水覆盖度上升, 而高覆盖度的界面水使得CO的近表面扩散与吸附的能垒都显著上升, 从而阻碍其吸附。电化学原位红外光谱实验结果表明, 在金属氧化物修饰层存在时界面水的覆盖度显著增加, 证实了从头算分子动力学模拟的理论预测。该研究提供了一种通过构筑表面氧化物阻隔层而提高燃料电池阳极催化剂抗毒化的新策略。

该工作主要在周志有教授的指导下完成。实验部分主要由王韬博士后与2020届博士生陈丽娜完成, 理论模拟工作由傅钢教授课题组2018级博士生李来阳完成。研究工作得到了国家重点研发计划 (2020YFB1505804) 和国家自然科学基金 (21875194、92045302、22021001) 的资助。

论文链接: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.2c00602>

上一条: 二维正交螺旋促进手性自发拆... 下一条: 表面致密FeN4位点助力高性能...