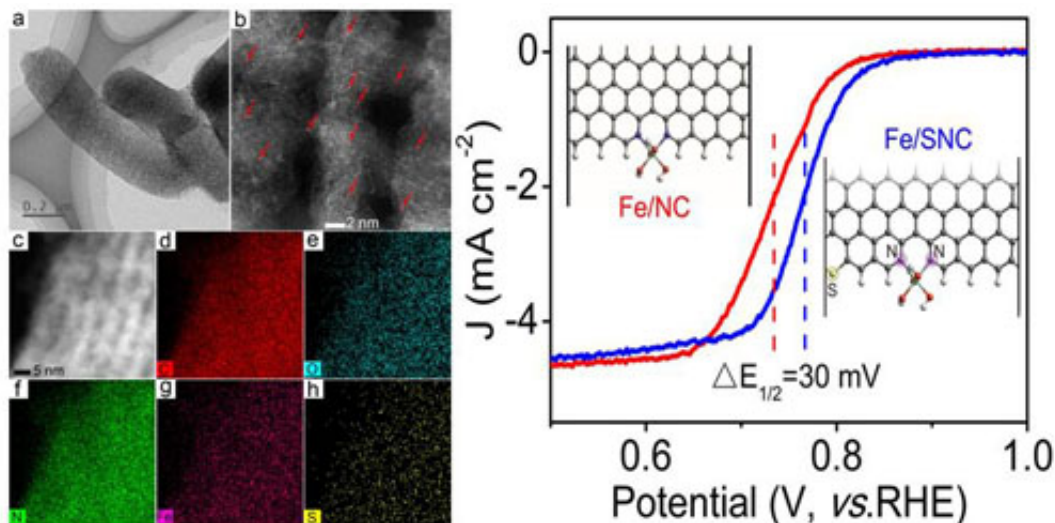


新疆理化所等在非贵金属氧还原催化剂研究中取得进展



C-S-C结构促进Fe-N-C活性位催化ORR反应效率

作为可持续能源利用技术，燃料电池与金属-空气电池中阴极上氧气还原反应（ORR）的催化剂决定了能量转化效率以及电池成本。作为有望取代传统贵金属铂催化剂的Fe-N-C材料，因具有多相复杂的结构，对其活性位的定性以及定量一直是这类非贵金属催化剂研究的难题。

中国科学院新疆理化技术研究所胡广志研究团队与瑞典于默奥大学Thomas Wagberg研究团队以及北京大学郭少军研究团队开展合作，利用硬模板夹芯合成法成功制备了表面功能化负载Fe-N-C催化活性中心的新型ORR催化剂材料，并通过Fe前驱体含量调控优化材料表面活性位的含量，实现在碱性条件下优于商业铂碳的ORR催化性能。球差电镜面扫描结果显示，元素Fe、N、C均匀分布在材料表面，通过对⁵⁷Fe的Mößbauer谱解析证明Fe只与N配位形成Fe-N结构；通过X-射线精细吸收谱（EXAFS）进一步证明Fe周围N的配位数是2，因此合成的材料活性中心主要以FeN₂存在；采用X光电子能谱有效定量了合成材料表面FeN₂含量。密度泛函计算表明，在碱性条件下，由于对中间产物O*和OH*吸附作用较弱，以及较强的电子传输能力，FeN₂结构催化ORR活性高于常规FeN₄结构。

该研究工作中单一的FeN₂活性结构为建立材料催化ORR反应的半波电位(E_{1/2})与活性位数量间的数学关系提供了理想模型。结合Butler-Volmer方程，为预测此类材料的催化性能提供了理论支持与实验证明。相关成果发表在《纳米能源》（Nano Energy）上。

科研人员进一步通过引入杂原子硫，在Fe-N-C附近形成的C-S-C结构，由于S的电负性，降低了附近活性中心Fe的电子云密度，从而促进材料对O₂的吸附活化，进一步提高了材料在酸性条件下催化ORR活性。研究结果发表在国际学术期刊《德国应用化学》（Angewandte Chemie International Edition）上。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/114058.html>