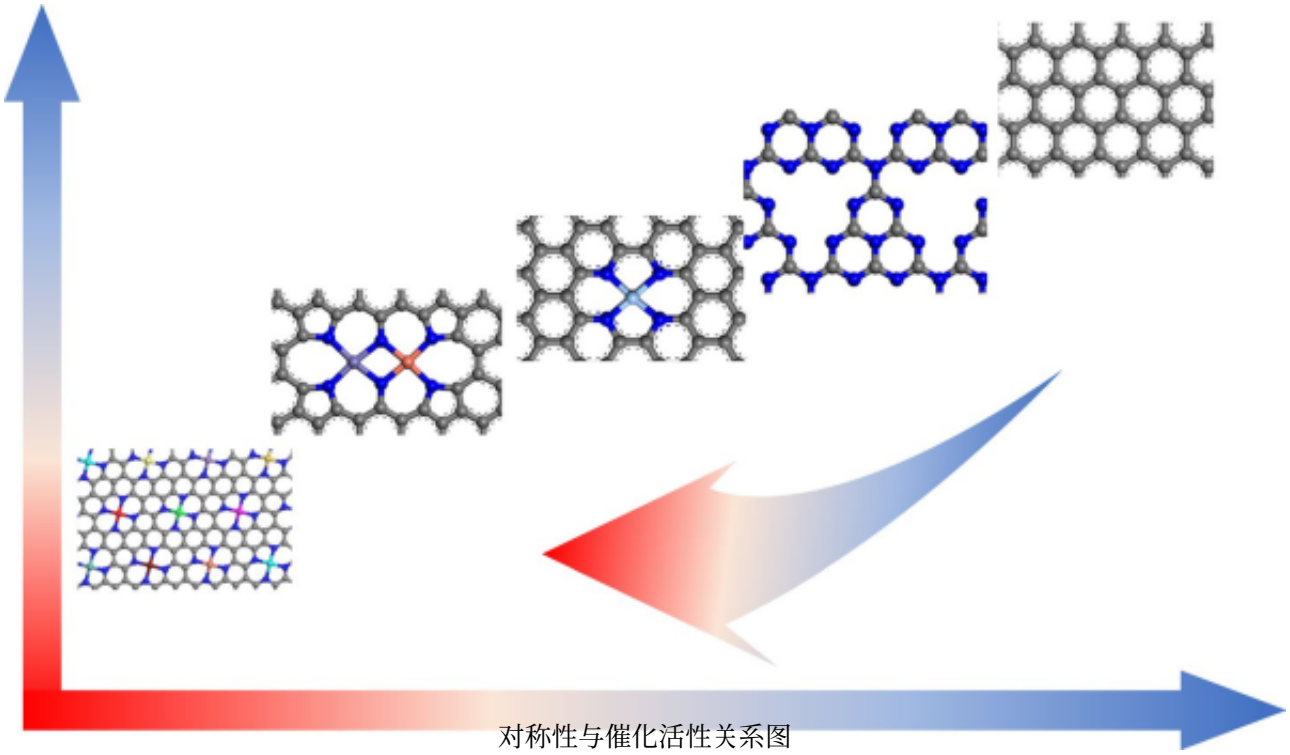
深圳先进院发展出用于可持续能量转换的高效低成本催化剂

电催化氧还原和析氧反应（ORR/OER）是水分解、燃料电池、金属空气电池、二氧化碳还原等一系列清洁能源技术的关键反应之一。同时，加快氧还原（ORR）和氧析出（OER）反应，实现高稳定的双功能氧催化是实现可持续能量转化与存储的关键。目前，常用的方法是将具有ORR和OER催化活性的材料进行混合制备双功能催化剂，但这种类型催化剂均一性较差，且难以对电子结构进行合理优化，导致活性和稳定性依旧欠缺。

3月31日，中国科学院深圳先进技术研究院碳中和技术研究所唐永炳、郑勇平团队研发出双功能碳基高效催化材料。相关研究成果以High-entropy single-atom activated carbon catalysts for sustainable oxygen electrocatalysis为题，发表在《自然-可持续性》（Nature Sustainability）上。该研究发现碳材料局部对称性与其活性呈现强相关性，即局部结构对称性越低，其催化活性则会增强。研究通过引入高熵催化剂使碳材料局部对称性最小化，降低离域电子芳香性，从而激活碳骨架原本惰性的π-电子网络，增强了催化剂位点之间的协同作用，使中间态产物与催化位点的作用强弱适中，ORR/OER可逆过程更易发生。

该工作同时从理论与实验上剖析了对称性最小化在电催化活性提升方面的作用，将有助于开发高效、低成本的催化材料以满足特定的应用需求。该成果有望在燃料（金属）电池、二氧化碳还原、氮还原等清洁能源领域为催化材料的合理设计提供理论指导。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、广东省自然科学基金、深圳市科技计划与中国博士后科学基金等的支持。中国科学技术大学参与研究。

此外，唐永炳、郑勇平团队从理论计算与材料设计出发，结合实验研究，近期在能量转换材料设计方向取得了连续成果（Adv. Mater. 2023, 2300381；Angew. Chem. Int. Ed. 2023, e202301711；Adv. Mater. 2022, 2202714）。



对称性与催化活性关系图

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/194041.html