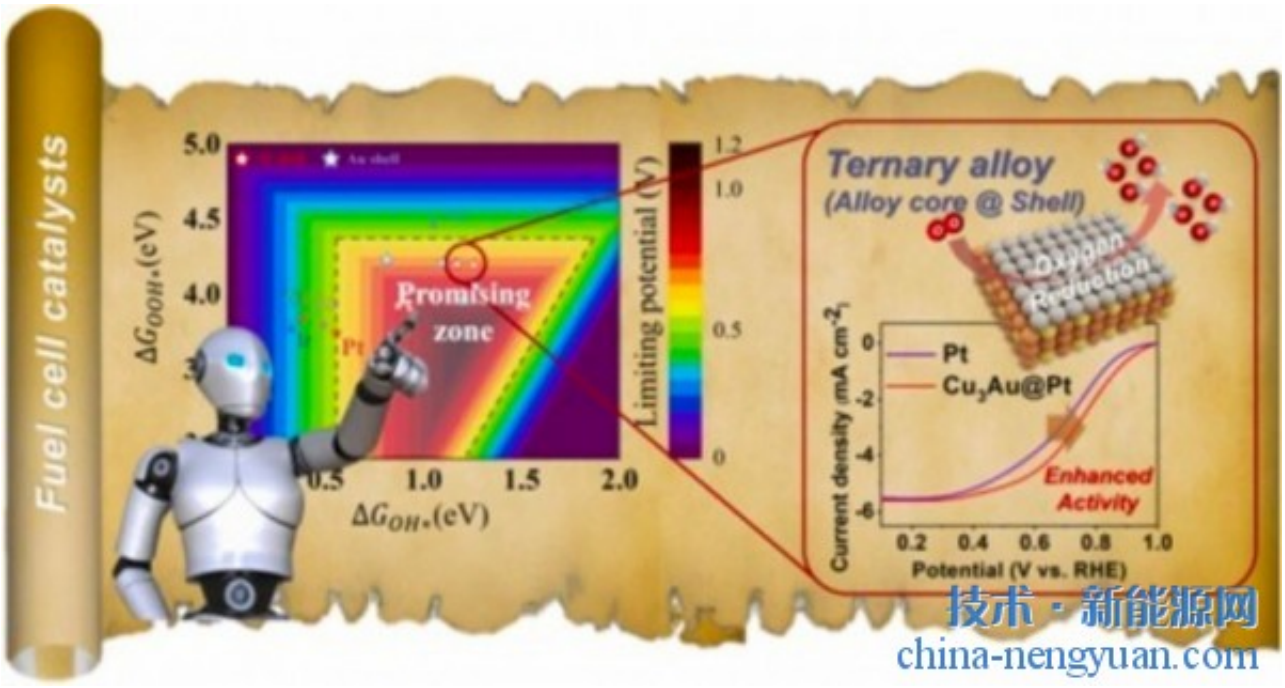
利用人工智能更高效、更经济地开发氢燃料电池催化剂



用于氢燃料汽车的质子交换膜氢燃料电池(PEMFCs)使用昂贵的铂催化剂来促进阳极的氧还原反应。为了开发比铂更高效、更经济的催化剂材料，需要探索大量的元素组合和成分，世界各地的研究人员仍在实验室中进行大量的试验和试错工作。

韩国科学技术研究院(KIST，校长Seok Jin Yoon)宣布，计算科学研究中心的Donghun Kim博士和Sang Soo Han博士，材料建筑研究中心的Jong Min Kim博士，以及韩国科学技术院(KAIST，校长Kwang Hyung Lee)材料科学与工程系的Hyuck Mo Lee教授提出了一种新的基于人工智能的催化剂筛选方法，并成功开发了一种基于三元元素基合金(Cu-Au-Pt)的新型催化材料，这种材料更便宜，性能是纯铂催化剂的两倍多。

该团队开发了Slab Graph卷积神经网络(SGCNN)人工智能模型，以准确预测催化剂表面吸附物的结合能。这并不是人工智能首次应用于材料发现。SGCNN模型是由专门用于预测固体材料体积性质的CGCNN模型发展而来，用于预测催化材料的表面性质。

然而，预测体积性质和表面性质之间有很大的区别。当您能够快速准确地预测催化剂的表面特性时，您可以更有效地筛选满足材料稳定性、性能和成本三重底线的催化剂。事实上，当使用这种方法开发燃料电池阳极反应催化剂时，能够在一天内探索近3200种三元候选材料的潜力，而使用密度泛函理论(DFT)吸附能模拟计算通常用于预测催化剂性能，这需要花费数年的时间。

研究人员通过对10种催化剂的实验验证，开发了一种新型三元(Cu-Au-Pt)合金催化剂，该催化剂在大约3200种候选材料中脱颖而出，具有超过铂催化剂的潜力。与纯铂催化剂相比，该催化剂只使用了37%的铂元素，但其动态电流密度是纯铂催化剂的两倍多。该催化剂还表现出优异的耐久性，经过5000次稳定性测试后几乎没有衰退。

KIST的Kim博士说：“ 未来，我们计划继续构建高质量的吸附能数据，并进行更复杂的AI建模，这将进一步提高催化材料开发的成功率。 ”

新方法的优点是不仅可以立即应用于氢燃料电池的催化剂，而且可以应用于各种催化反应，如水电解制氢，这对实现氢经济至关重要。该团队计划通过材料和系统优化进一步降低单位成本并提高所开发催化剂的性能。

（素材来自：KIST 全球氢能网、新能源网综合）

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/201747.html