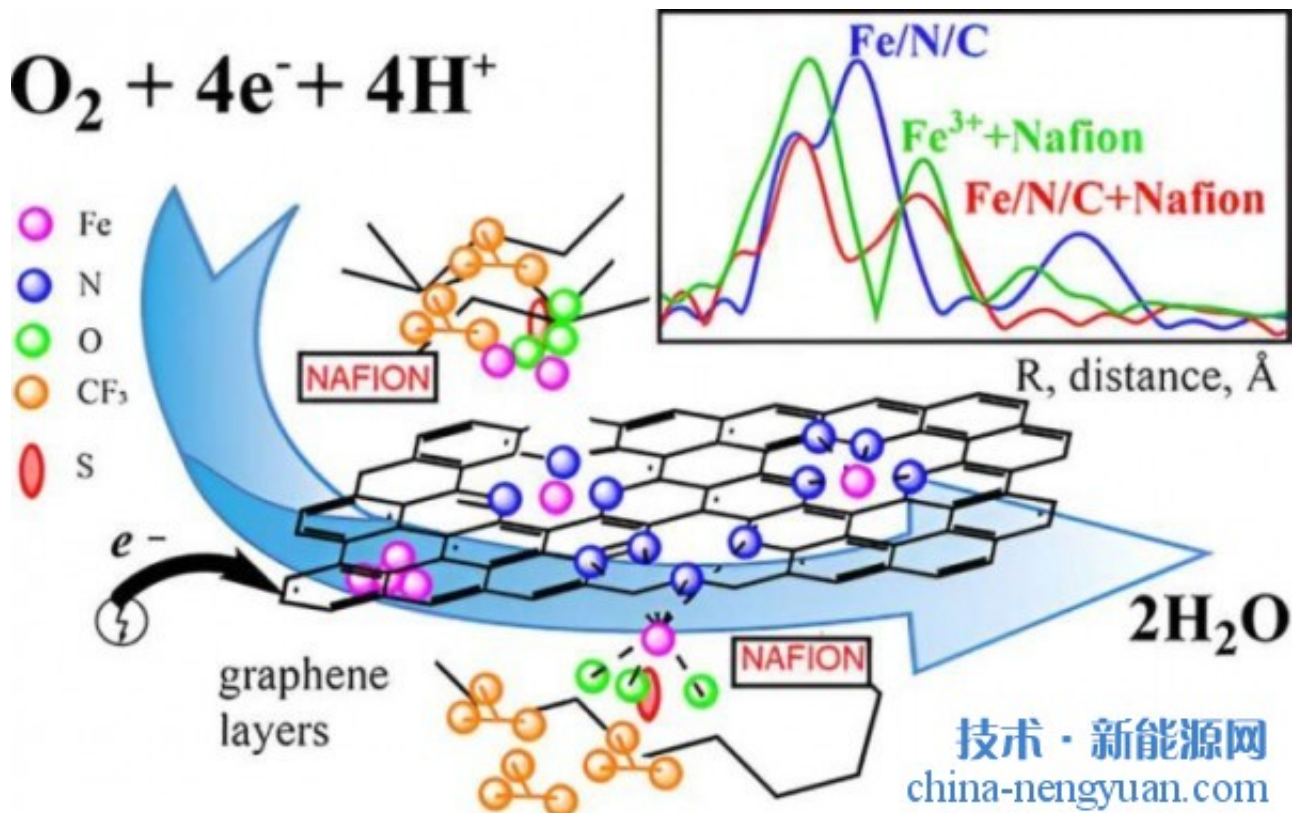


## 新的光谱仪有助于识别廉价的氢燃料电池催化剂材料



新光谱仪帮助识别替代廉价的氢燃料电池的催化剂材料。

燃料电池正迅速成为一种可行的清洁能源，可以替代汽油、煤和石油等常用的化石燃料。化石燃料是不可再生的能源，会向大气中释放二氧化碳。

然而，燃料电池依靠电化学反应而不是燃烧，产生无碳电力。将这项技术扩大到商业可行的障碍之一是目前对铂族金属(PGM)作为催化剂的依赖。由于其成本高且供应有限，PGMs通常占燃料电池生产成本的46%。

为了解决这一特殊的挑战，普渡大学、美国能源部橡树岭国家实验室和布鲁克海文国家实验室的研究人员研究了铁掺杂碳(Fe-N-C)催化剂，将其作为PGM催化剂的有效替代品。

在这项研究中，研究人员在国家同步加速器光源II (NSLS-II) 的内壳层光谱 (ISS) 光束线上使用了一种新开发的高分辨率X射线光谱技术，该光源是位于布鲁克海文的美国能源部科学办公室用户设施。研究人员能够通过添加离子聚合物Nafion来分析这种催化剂材料的电子结构，Nafion是一种控制带电粒子（离子）运动所需的材料。

最近发表在《ACS应用能源材料》杂志上的研究结果为研究人员提供了对这些材料行为的新见解，有助于他们进一步寻找具有高活性、选择性和稳定性的低成本PGM替代品。

普渡大学物理学教授、这篇论文的主要作者Yulia Pushkar说：

“多个研究小组对Fe-N-C系统进行了深入研究。”

“然而，在这类极具前景的材料中，真正的催化中心的基础从未完全建立起来，它包含一个铁原子，但在氧化还原反应中的表现与铂一样好。这个问题的挑战和神秘性引起了我的注意。”

更环保、更清洁的燃料替代品

为什么这些催化剂如此重要，更多地了解燃料电池的工作原理有助于更好的理解。燃料源，如氢气，将在负极（“阳极”）侧进入系统。然后，阳极处的催化剂将氢分子分裂成带正电的质子和带负电的电子。电子通过外部电路释放，而质子通过不让电子通过的电解质材料。在阴极，即电池的正极，催化剂将质子和电子与空气中的氧气结合。这种反应被称为氧还原反应，释放能量，并产生唯一的副产品——水。

氢的能量密度也很高，是汽油的三倍。能够有效利用氢气的力量可能是减少碳排放途径上的重要一步。然而，找到合适的材料来扩大催化剂生产是一个重大挑战。

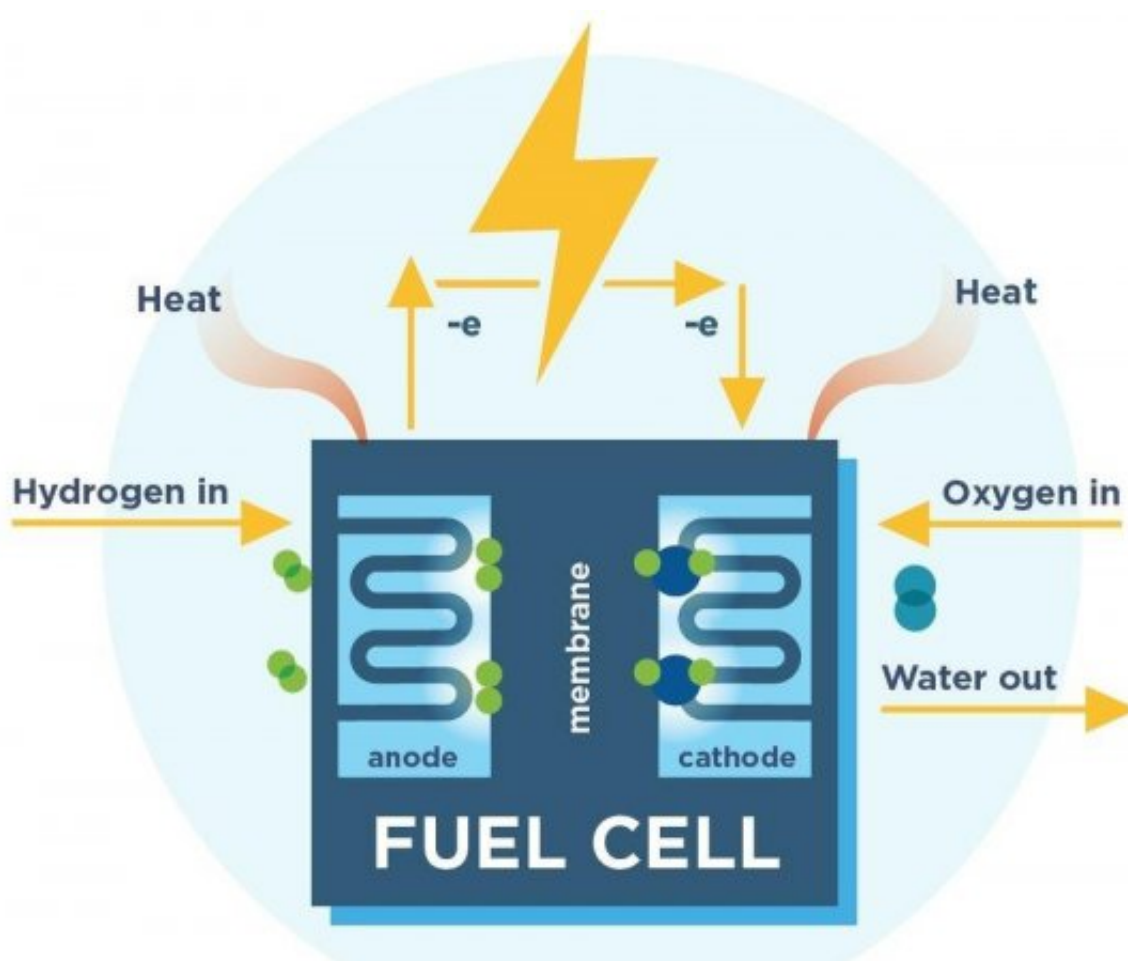
目前几种氢动力燃料电池技术正在开发中，但质子交换膜燃料电池似乎是最有前途的。它们易于制造，在相对较低的温度下运行，并且性能高效。然而，用于这些燃料电池的最有效的催化剂材料是由PGM制成的，PGM是极好的电催化剂，但其有限的供应和高成本阻碍了大规模生产。

研究人员一直在努力寻找低成本的替代品，这些替代品不仅具有可比的性能，而且稳定可靠。这在电动汽车等性能要求相当高的应用中尤其重要。

为了解决这个问题，该团队决定更仔细地研究Fe-N-C，这是一类被称为金属氮掺杂碳的催化剂材料中一种很有前途的候选者。Fe-N-C是通过将铁原子插入石墨烯片中产生的，石墨烯片是以六边形晶格模式排列的碳原子。为了进一步提高性能，石墨烯中的一些碳原子随后被氮原子取代。

Fe-N-C催化剂的性能与目前使用的PGM催化剂相当，但其耐久性较差。该团队需要了解这种催化剂降解背后的机制，以提高其稳定性。

为了提高稳定性，该团队还研究了如果他们在Fe-N-C催化剂中添加一种名为Nafion的聚合物会发生什么。Nafion是一种常用的离聚物，是一种稳定、高导电的聚合物，可耐受酸性环境，存在于大多数燃料电池中。



以更高的分辨率窥视

为了准确了解Fe-N-C催化剂内发生的反应，该团队使用了几种强大的基于同步加速器的X射线光谱技术。研究人员在先进光子源的束线20-BM上进行了X射线吸收近边缘结构（XANES）和扩展X射线吸收精细结构（EXAFS）研究，先进光子源是美国能源部科学办公室位于美国能源部阿贡国家实验室的用户设施。该团队在NSLS-II的ISS光束线上进行了X射线发射光谱（XES）。XES是一种为研究人员提供有关材料电子结构的有价值信息的技术。

ISS首席束线科学家Eli Stavitski说：

“使用XES，可以揭示与催化活性相关的材料化学状态的微小变化。”

“传统的X射线光谱对自旋态不敏感，自旋态是分子中电子排列产生的磁矩。”

“然而，XES提供了这种见解。我们确定活性配合物以高自旋构型存在，这意味着它具有更多的电子动量。在这些实验中，我们还探测了Fe-N-C催化剂中铁原子的氧化态和周围配体。我们能够看到驱动催化反应时氧化态的变化及其精确测定。这对理解反应机制至关重要。”

这是使用光束线新的高分辨率X射线光谱仪的首批实验之一。它是在NSLS-II设计和建造的，由ISS光束线科学家Denis Leshchev领导该项目。光谱仪的核心是晶体分析仪——超纯薄硅片，经过精确切割、抛光至完美，并弯曲成一种形状，使光子能够像强大的X射线透镜一样聚集成小而紧密的斑点。Pushkar的团队开发了一种独特的大型硅晶体分析仪组件，当与光束线的强X射线束、精密机械和探测器相结合时，这项实验成为可能。

Leshchev说：

“当来自NSLS-II的X射线束与样品相互作用时，样品会发射出特征X射线，传统上用于对样品的元素组成进行指纹识别。”

“通过X射线光谱分析，X射线束和样品之间的相互作用，该技术不仅探测元素的存在，还探测它们的原子环境。这种新的高分辨率光谱仪进一步增强了实验解析这些相互作用细节的能力，并为材料的原子性质与其催化性能之间的联系提供了详细的见解。”

“这种设置可以更精确地表征与能源相关的材料，如催化剂和其他电池材料。”

“传统的X射线吸收光谱是许多同步加速器的常见技术。它现在正在扩展到高分辨率光谱。我们很高兴现在能够为我们的用户提供这种能力。”

该团队使用这些技术研究了在Nafion存在和不存在的情况下，Fe-N-C催化剂在氧化还原反应中的行为。他们发现，添加Nafion会引起显著的变化，特别是在铁原子的氧化态及其与相邻原子的相互作用方面。

他们发现，Fe-N-C催化剂中具有催化活性的铁原子往往处于一种特定的状态——被氮原子包围的铁离子（Fe<sup>3+</sup>）高自旋中心。当这些催化剂与Nafion混合时，离聚物释放出一些与石墨片结合过强的铁原子，使它们能够参与催化过程。Nafion是实验和工业燃料电池中的重要成分，因为它将质子带到催化位点以形成水。了解Nafion催化剂的相互作用对于优化燃料电池性能至关重要。

Pushkar说：

“我们仍在回答导致我们进行这项研究的核心问题。”

“但我们发现了这个系统中的另一层复杂性。Nafion（目前是一种不可或缺的成分）与系统中的铁核心的强烈相互作用导致了铁配体环境的重组。”

这一观察结果对于设计更好的催化剂很重要，因为它解决了哪些形式的铁实际上在催化氧化还原反应过程中最有效的问题。这样的实验有助于使燃料电池研究人员更接近一种具有高性能和稳定性的理想催化剂，同时提高成本和可用性，使这种清洁能源替代品能够对减少碳排放产生重大影响。

（素材来自：氢能新闻 全球氢能网、新能源网综合）

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/209245.html>