

钙钛矿阳极A位离子有序性对高温析氧反应的影响机制获揭示

近日，中国科学院大连化学物理研究所副研究员宋月锋等联合复旦大学教授汪国雄团队、美国佐治亚理工学院教授刘美林团队，在固体氧化物电解池阳极高温析氧反应研究方面取得进展。合作团队聚焦钙钛矿阳极A位离子有序性对高温阳极高温析氧反应性能的影响，揭示了 $\text{PrxBa}_{2-x}\text{Co}_2\text{O}_{5+\delta}$ 体系中离子有序-无序转变对微观结构及电催化性能的影响。

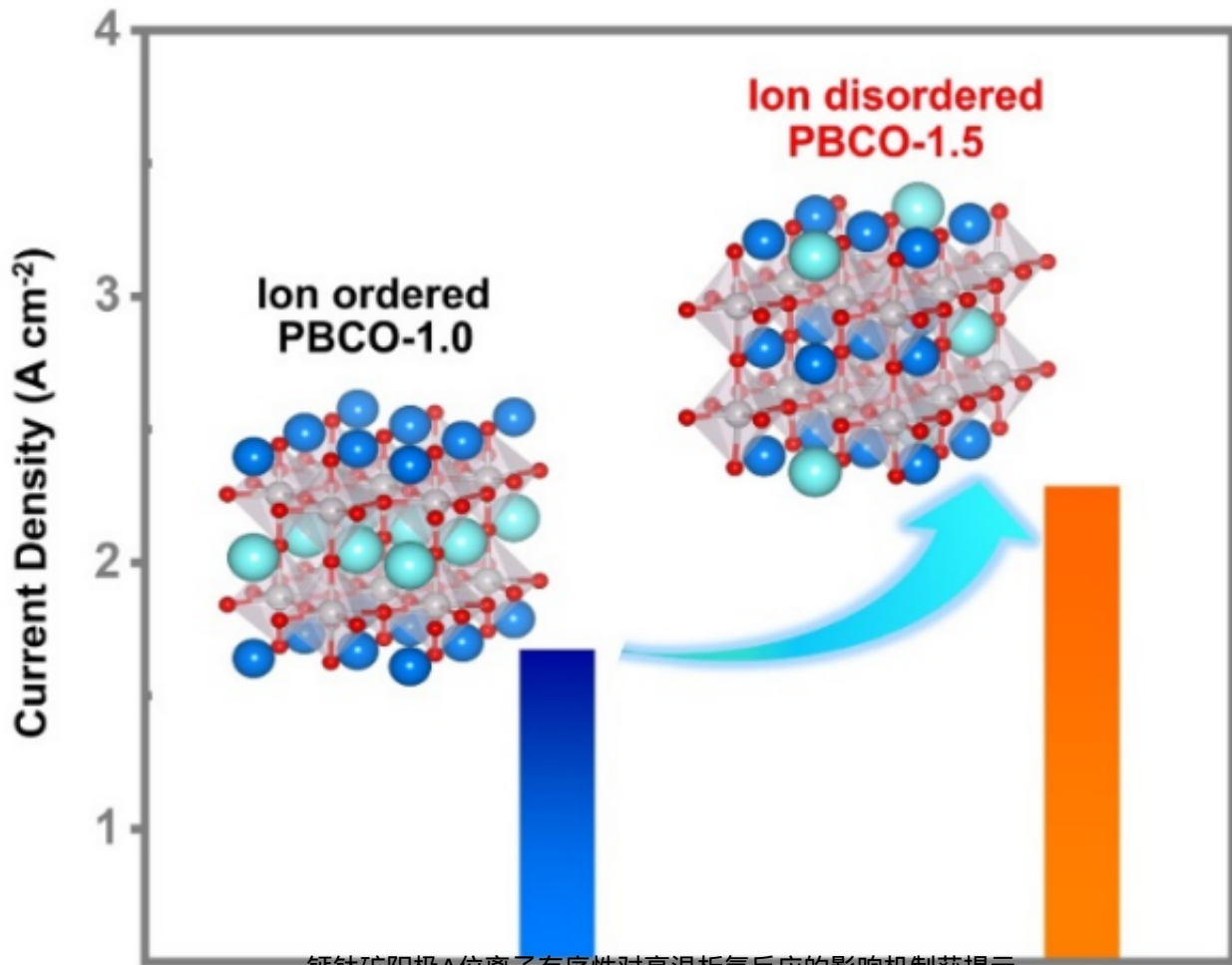
固体氧化物电解池具有电流密度高、法拉第效率高、过电势低等优势，被认为是二氧化碳减排和能源转换的关键技术之一。钙钛矿氧化物是常见的固体氧化物电解池阳极材料，但阳极离子有序性对阳极高温析氧反应速率的影响尚不明确。

该研究制备两种不同镨（Pr）含量的 $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$ （PBCO-1.0）和 $\text{Pr}_{1.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Co}_2\text{O}_{5+\delta}$ （PBCO-1.5）阳极材料，结合同步辐射X射线粉末衍射、高角环形暗场扫描透射电子显微镜、X射线吸收谱和 ^{18}O 同位素交换实验等手段，剖析了A位离子有序-无序转变诱导的电子结构变化以及对高温阳极高温析氧反应动力过程的影响。

研究表明，随着Pr含量从1.0增加到1.5， $\text{PrxBa}_{2-x}\text{Co}_2\text{O}_{5+\delta}$ 晶体由有序四方相转变为无序正交相。这一转变打破了钴-氧局部配位环境的对称性，增强了Co 3d与O 2p之间的轨道杂化，提升了氧离子迁移效率，加速了表面氧交换反应速率。电化学测试表明，在800 °C、1.6 V条件下，PBCO-1.5阳极的电流密度达2.29 A cm⁻²，表现出优异的高温阳极高温析氧反应性能和稳定性。

上述研究从实验和理论两方面阐明了钙钛矿A位离子有序性对高温阳极高温析氧反应路径和速率调控机制，为高性能固体氧化物电解池阳极材料的理性设计提供了参考。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（JACS）上。研究工作得到国家重点研发计划和国家自然科学基金等的支持。



钙钛矿阳极A位离子有序性对高温析氧反应的影响机制获揭示

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/232325.html>