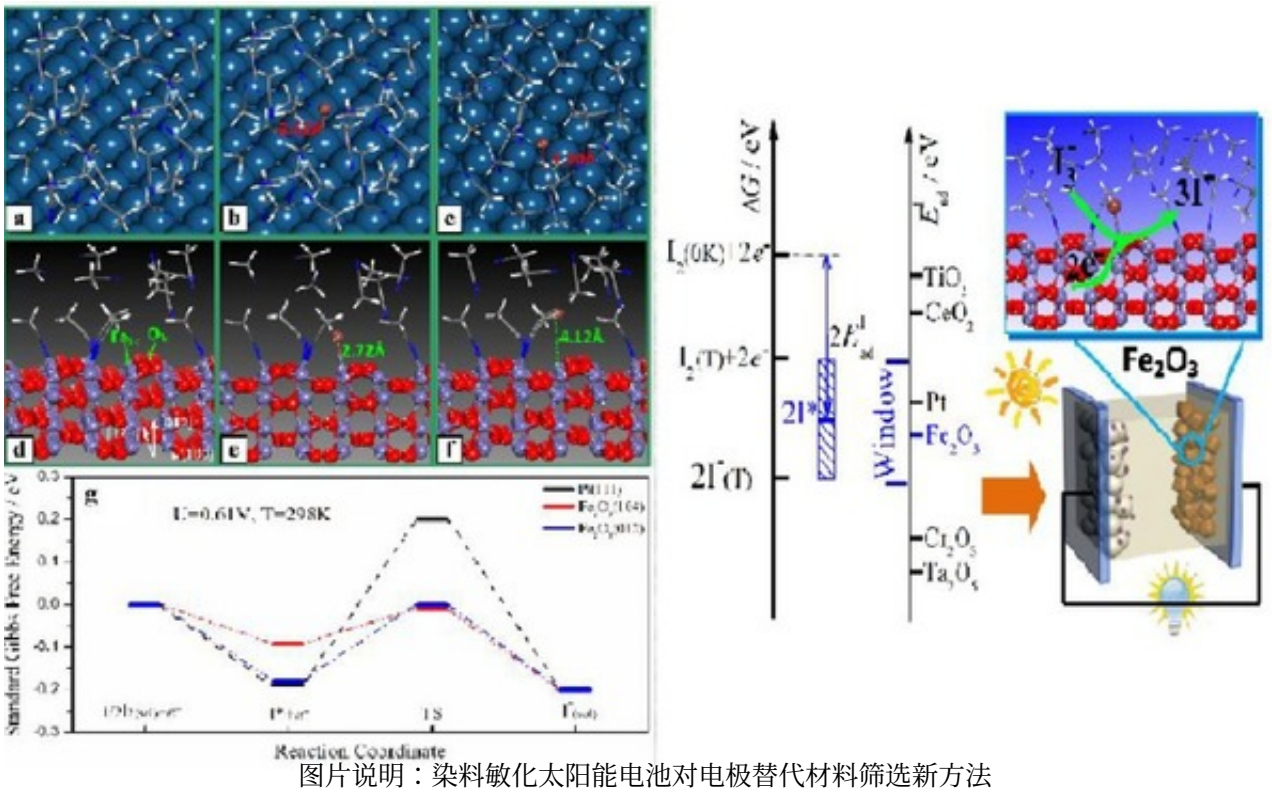
华东理大教师在新型太阳能电池材料的设计筛选方面取得重要突破

3月13日，最新一期的国际著名学术期刊《自然—通讯(Nature Communications)》在线发表了华东理工大学材料学院杨化桂教授和化学学院王海丰副教授有关新型太阳能电池材料的设计筛选新方法的研究成果：“ Rational Screening Low-Cost Counter Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells ”(Nat. Commun., 4, 1583, DOI: 10.1038/ncomms2547)。该研究成果由杨化桂课题组与王海丰副教授共同合作完成，博士研究生侯宇和王栋为该研究成果的共同第一作者。



图片说明：染料敏化太阳能电池对电极替代材料筛选新方法

杨化桂教授与王海丰副教授合作，借助第一性原理计算及相关热力学分析，首次提出了一种针对对电极材料电催化性能的筛选策略。首先利用密度泛函理论计算方法，以Pt为模型材料，结合微动力学研究了对电极表面碘三离子还原反应的基本催化机理，并确定了基元反应的决速步骤及影响催化活性的关键参数——碘原子在催化界面的吸附能。随后，通过模拟真实固液（乙腈）界面环境，建立了吸附能与催化活性的关联关系，并最终在国际上首次构建了能够高效地预测对电极材料催化活性的筛选方法。该筛选策略的提出实现了对电极替代材料的快速筛选，减少了繁杂的实验研究及费用，并降低了实验过程中所产生的环境污染等问题。

更为重要的是，在理论预测的基础上，他们成功开发了具有特定表面结构及高催化活性的Fe2O3催化剂，其电池性能与贵金属铂达到了相同水平，实验结果与理论预测结果完全一致，进一步证明了他们发展的理论计算方法的可靠性。这一研究成果不仅为今后其它新型太阳能电池替代材料的开发提供了重要途径，同时有利于对电极材料催化机理的进一步探索，也为新型太阳能电池未来的大规模工业化发展提供了重要的理论依据及应用基础，在解决能源危机和环境污染问题方面向前迈进一大步。

多位太阳能电池领域的专家均对这项原创性工作给予了极高的评价，认为该工作阐明了一个太阳能电池及其相关领域的重大科学问题——对电极催化机理，将理论计算与实验技术相结合，提出了筛选对电极材料的总体设计指导原则，具有非常重大的科学意义。更为重要的是，成功开发出了一种如此普遍的低成本对电极替代材料（Fe2O3），这一非凡的发现无疑将对电催化剂领域及太阳能电池领域产生重大的影响。

杨化桂教授2009年初进入华东理工大学工作，目前课题组主要研究方向为太阳能转换与储存新型材料和器件（光伏，电催化，光电催化及光热化学等）的理论设计、制备和应用基础研究。2005年在新加坡国立大学获博士学位，2005年至2007年作为研发工程师任职于美国通用电气（GE）公司，2007年至2008年在澳大利亚昆士兰大学功能纳米材料中心从事博士后研究。迄今已在Nature (2008, 453, 638)，Nat. Commun.(2013, 4, 1583)，Angew. Chem. Int. Ed. (2012, 51, 3611; 2011, 50, 3764;2004, 43, 5206;2004, 43, 5930)，J. Am. Chem. Soc.(2010, 132, 13162;2009, 131, 4078; 2009, 131, 12868; 2005,

127, 270)等国际SCI收录期刊发表学术论文50余篇，论文被SCI他引共计3000余次，单篇最高引用700余次。

王海丰副教授主要从事利用密度泛函理论（DFT）计算研究多相（光电）催化材料电子结构、固体结构及表/界面特性、催化反应解析、多相催化基础理论及高效金属催化剂理论筛选等领域的工作。2008年8月至2010年8月于英国女王大学进行博士联合培养；2010年9月至2011年10月获华东理工大学优秀博士论文培育计划资助，2012年3月获工业催化专业博士学位；2012年3月至今任职于工业催化研究所/胡培君教授国家千人计划团队，并获华东理工大学青年英才计划（2012）。迄今已在在Nat. Commun.，Angew. Chem. Int. Ed.（3篇），J. Catal.，J. Phys. Chem. C（3篇）等国际重要学术刊物发表SCI论文近20篇。

上述研究得到了国家自然科学基金委、教育部、上海市科委的资助。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/45135.html