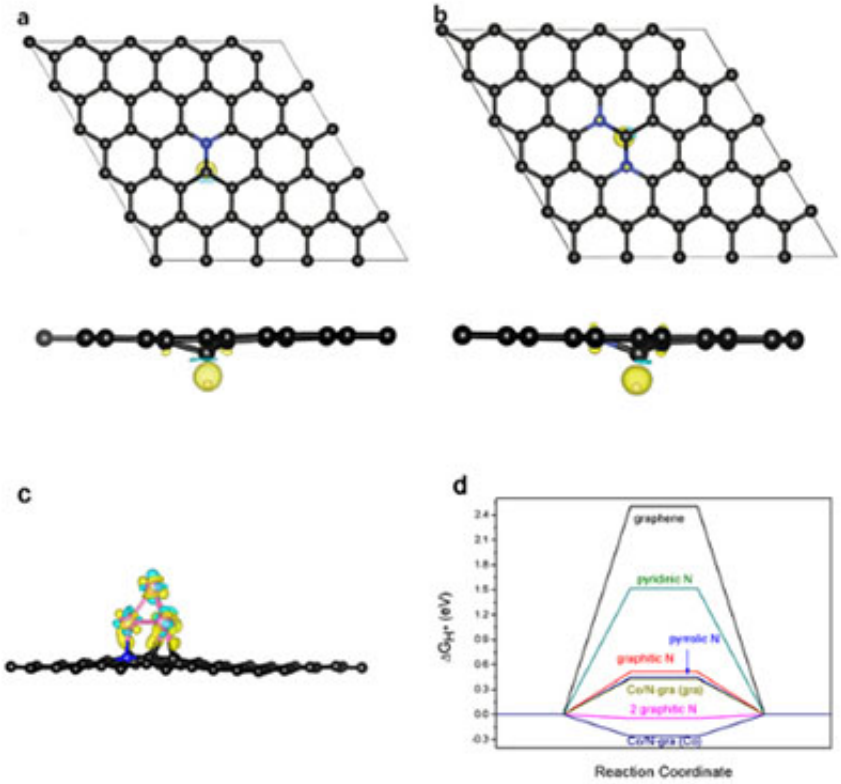
非贵金属析氢催化剂研究获进展



a. 氮掺杂石墨烯模型，氮原子旁边的碳原子是吸附位点；b. 两个氮原子掺杂的吸附模型；c. 金属团簇与石墨烯之间存在电荷转移；d. 计算得到的各个模型自由能△GH*

近日，中国科学院合肥物质科学研究院强磁场科学中心、中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室（筹）与材料系双聘研究员陈乾旺课题组发现，氮掺杂石墨烯层包覆的合金粒子作为酸性条件下电解水制氢（HER）催化剂，表现出优异的性能和循环稳定性。相关研究成果以Non-precious alloy encapsulated in nitrogen doped graphene layers derived from MOFs as an active and durable hydrogen evolution reaction catalyst 为题发表在《能源与环境科学》上（Energy & Environmental Science, 2015, 8, 3563 - 3571）。

氢能被认为是环境友好的清洁能源，寻找高效、廉价的电解水制氢反应（HER）催化剂是近年来研究的热点和难点。3d族过渡金属因为储量丰富，具有取代贵金属Pt催化剂的潜力，然而，在酸性条件下电解水的较低效率和不稳定性制约了它们的实际应用。

科研人员发现，通过分解金属有机框架化合物（MOF）前驱体所制备的氮掺杂石墨烯层包覆的FeCo合金复合粒子，表现出优异的HER催化活性和稳定性。该催化剂在0.5M的H2SO4电解质中，在电流密度为10mA/cm2的条件下，电解水阴极过电位仅为262千伏，并且在循环10000次之后依然保持较高的活性。科研人员通过密度泛函理论计算表明，石墨烯中掺杂氮原子量的提高有利于提供更多的吸附位点和降低HER反应的活化能。同时合金@石墨烯复合结构间存在着电荷从金属向石墨烯层的转移，这种协同作用会降低析氢反应的吉布斯自由能，促进析氢反应的进行，进一步提升了材料的催化活性。此外，石墨烯层还提升了合金颗粒在酸性溶液中的耐腐蚀性和耐氧化性，从而提高了催化剂的循环稳定性。

该研究为制备廉价、高效的非贵金属电解水催化剂提供了一种新的途径，也可为用MOF作前驱物制备其它金属、合金@碳复合材料催化剂提供借鉴。

该文的第一作者为博士生杨阳。该研究工作得到国家自然科学基金委、中国科学院、苏州纳米科技协同创新中心的支持。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/87071.html