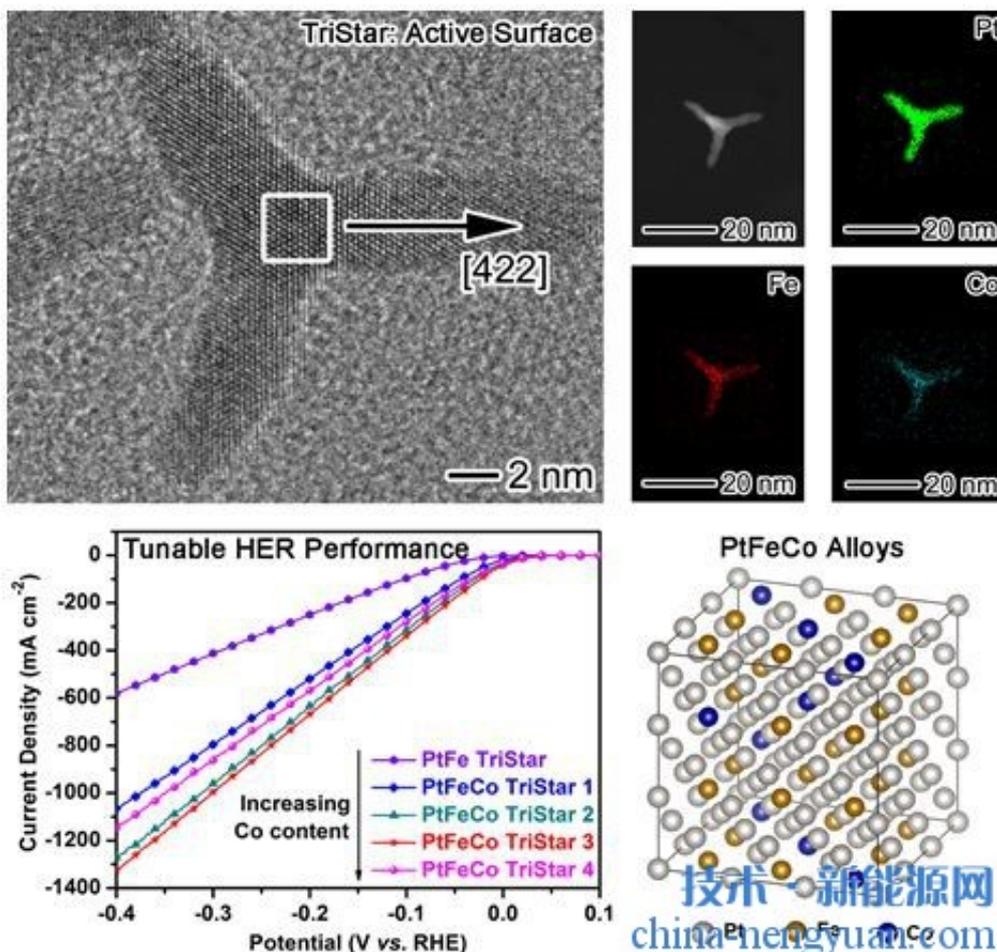


## 中国科大开发出铂基合金三叉星纳米材料



氢能是一种广受关注的清洁可再生能源技术。制约该技术发展的瓶颈是如何实现低成本、高效能电催化剂的设计与开发。针对该瓶颈，中国科学技术大学教授熊宇杰课题组设计和开发出一系列化学组分可调且具有三叉星状的三元合金PtFeCo纳米结构，在降低贵金属铂用量的同时，获得了显著增强的电催化析氢反应活性。该研究成果近日发表在《先进材料》（Advanced Materials 2016, 28, 2077）上，并被Wiley旗下中文学术新闻网站Materials Views China报道。论文的共同第一作者为博士生杜娜娜、高级工程师王成名和博士生王翕君。

研究表明，提高材料电催化活性的关键在于表面结构和电子结构的调控。但如何同步调控这两个参数，是相关材料设计与制备的重大挑战。近年来，熊宇杰课题组针对催化剂设计发展了一类界面电荷极化作用机制，基于原子精度可控的界面形成方法，可以通过界面维度控制来调变活性位点的数目及活性程度（J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 14650; Angew. Chem. Int. Ed. 2014, 53, 12120; Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 14810）。

在该工作中，研究人员进一步将作用机制推广到合金体系中的原子间电荷极化，用于调控Pt催化位点的电子密度，从而获得可调变的电子结构。他们首先合成了一系列三元合金PtFeCo纳米结构，不仅实现了铂基纳米合金晶格中Fe和Co原子比例的精准调控，而且构筑了具有高催化活性的三叉星状结构，为多角度系统研究电催化析氢反应中的构效关系提供了绝佳平台。该系统研究表明，纳米合金中电子结构和表面结构的同步优化，对电催化HER性能的提升起到了至关重要的作用。其合作者江俊课题组通过理论模拟计算，揭示了合金晶格中Co原子的引入可以诱导产生原子间电荷极化，调控原子电子密度，同时调制了金属Pt原子位点的d-带中心，有利于提高催化位点的活性。基于该认识，研究人员建立了合金化学组成与电催化HER性能之间的构效关系。

基于该构效关系，研究人员获得了一种Pt<sub>81</sub>Fe<sub>28</sub>Co<sub>10</sub>三叉星纳米结构，在-400mV电压下的电流密度高达1325mA cm<sup>-2</sup>，是商用铂炭催化剂的4倍以上，远优于其他同源铂基催化剂。与此同时，该催化剂的稳定性与其他铂基催化剂相比，也得到进一步改善。该三元合金PtFeCo三叉星状纳米结构的构筑，从实验和理论层面上系统清晰地阐释了基于元

素组成、电子结构和表面结构三位一体的协同调控机制，为低成本、高性能合金催化剂的理性设计与构筑开辟了新的路径。该研究提出的晶格工程思路，将拓展人们对电能-化学转化中电子运动“微观引擎”的控制能力，对原子精度上的电催化剂设计具有推动作用。

该研究工作得到了科技部“973”计划、国家自然科学基金、国家青年千人计划、中科院百人计划、合肥大科学中心精进用户基金、中国科大重要方向项目培育基金等项目的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/92173.html>