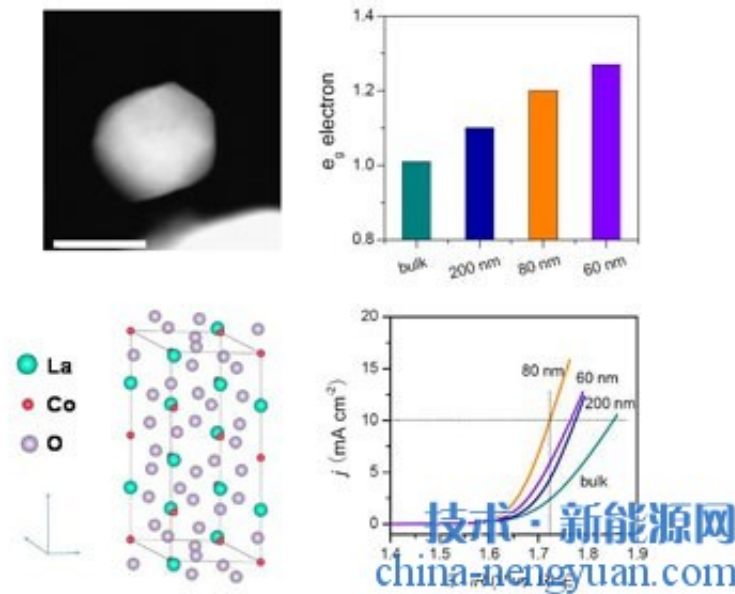


中国科大等基于自旋态精细调控实现高效电解水催化产氧



LaCoO₃体系的电催化产氧性能

优化过渡金属氧化物的催化性能实现高效电解水，是当前能源化学领域的一个研究难点；调控电子强关联过渡金属氧化物的自旋态，是凝聚态物理领域的一个经典课题。当二者相遇，是否会碰出“火花”？近日，中国科学技术大学周仕明课题组、曾杰课题组与南开大学胡振芃课题组密切合作，在钙钛矿钴氧化物中为它们创造了相遇机会并成功捕获到它们碰撞出的“火花”。相关成果发表在5月17日出版的《自然·通讯》上（Nature Communications 7, 11510, 2016）。

研究表明，过渡金属氧化物的电解水催化性能与其晶体结构及电子结构密切相关。特别是对具有钙钛矿结构的过渡金属氧化物而言，电催化产氧性能与其过渡金属离子的3d电子中 e_g 轨道有效填充数紧密相连。当 e_g 轨道的有效电子填充约为1.2时，其催化性能达到最好。作为一种典型的电子强关联体系，钙钛矿过渡金属氧化物往往呈现出各种奇特的电子序态，其晶格、电荷、自旋和轨道各自自由度之间相互关联。并且，这些自由度之间的相互作用在能量上相当，其电子态易受到各种外加场如磁场、电场、温场、压力场等影响，因而表现出电子态的外场可控性，这为研究人员调控钙钛矿过渡金属氧化物的电子态提供了思路。

基于此，周仕明课题组、曾杰课题组和胡振芃课题组通力合作，在LaCoO₃体系的自旋态转变与电解水催化性能优化之间搭上了桥梁。通过改变LaCoO₃

纳米颗粒的尺寸，研究人员能够精细控制其自旋态转变行为，成功实现了Co离子 e_g 轨道有效电子填充数从1.0到1.3的调控。特别是当颗粒尺寸在约80 nm时，其 e_g 轨道电子数约为1.2，此时产氧催化性能达到了最优，并与其他报道的具有 $e_g 1.2$ 电子组态高效催化剂的性能相当。

同行评议对该工作给予了高度评价，认为“该工作委实有趣，采用的调控催化性能策略简单明了，为通过改变材料的电子结构进而优化其电解水催化性能提供了新的思路”。

该研究得到了国家重大科学研究计划、国家自然科学基金等项目的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/93619.html>