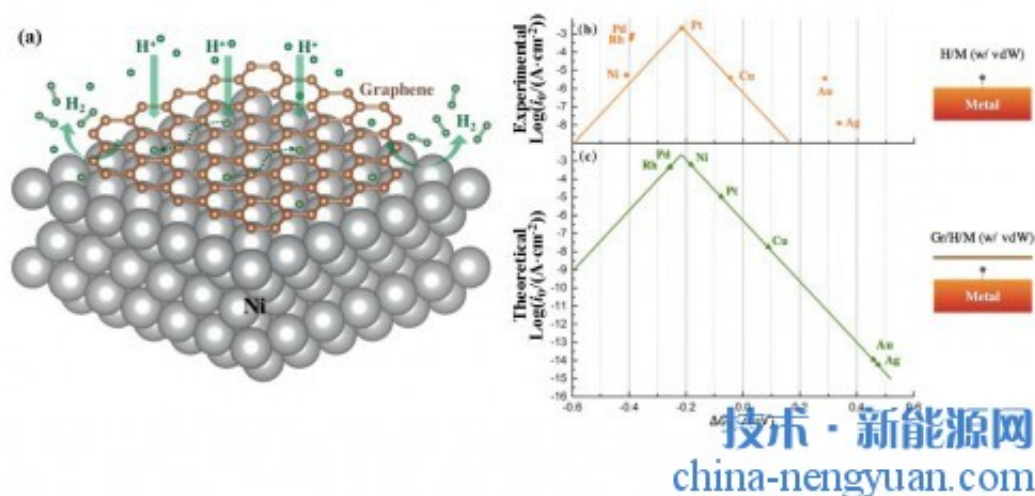


中国科大预言石墨烯覆盖下镍表面可成为理想产氢平台



(a) 石墨烯加强镍表面催化析氢反应示意图；(b) 范德瓦耳斯力修正的不同金属表面的析氢催化活性的火山型曲线；(c) 理论预言的石墨烯覆盖后不同金属表面的析氢催化活性的火山型曲线。

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室博士陈伟、崔萍与同行合作，在二维材料受限催化理论研究方面取得新进展，预言石墨烯覆盖下镍表面可成为理想产氢平台。该研究成果发表在9月2日出版的《纳米快报》(Nano Letters)上。共同第一作者为中国科大2016届本科毕业生周逸浓和量子信息与量子科技前沿协同创新中心量子博士后陈伟。

近年来，中科院大连化学物理研究所包信和研究团队提出了受限催化的概念。在此基础上，中国科大研究团队进一步提出了临界催化的概念，即选取本身已经具有一定催化活性的廉价金属材料，通过二维材料的修饰引入受限催化，从而大幅加快氢生成的速率。通过第一性原理计算，该团队发现当氢原子位于石墨烯和不同金属的界面时，其吸附能比在没有石墨烯覆盖的金属上都有一定程度的减弱。特别突出的是，金属镍面的吸附能因为石墨烯的覆盖，其相应的析氢能力被调控到火山型曲线的峰值附近，成为具有高催化活性的催化剂材料。同时，计算表明氢在界面处的扩散速率仍非常快，这一性质也确保生成物的快速收集。该研究作为清洁能源氢气的廉价制备以及其它一些工业上重要的化学反应提供了新思路。

上述研究得到了基金委、中科院、科技部和教育部的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/98865.html>