

# 邹晓新——未来三年研究计划

## 大电流密度水裂解电催化材料的合成与机制

### 1. 研究背景与研究目标

氢气是重要的化工原料，主要用于石油化工和合成氨工业，年需求量达到 5500 亿立方米（2017 年数据）；氢气也是潜在的绿色能源载体，其有效利用可以降低我们对化石燃料（如石油等）的依赖，也可以减轻化石燃料过度使用造成的环境问题。电解水被广泛认为是非常有前景的绿色制氢路线，其原料是丰富的水，为可持续制氢提供了可能，产物是氢气和氧气，也不会对环境造成二次污染；而且电解水制氢所需电能可以通过转化风能、太阳能等可再生能源获得。然而，由于高能耗问题，电解水制氢在工业制氢中所占比重仅为 3-5%。因此，推动电解水制氢技术发展的关键是催化材料的革新，即大力发展高活性、廉价的水裂解电催化材料，以最大限度地提高水裂解效率，降低水裂解成本。

可满足工业电解水制氢的水裂解电催化材料应具备：（1）原料廉价；（2）制备工艺简单；（3）大电流密度下活性和稳定性高。大电流密度（1000 mA/cm<sup>2</sup> 级）是工业电解水器件的现实需求。

目前，贵金属催化材料活性高，但储量稀少、价格昂贵（图 1）。比如，Pt 基材料是目前活性最高的水裂解析氢（水还原）催化剂，而 IrO<sub>x</sub> 材料则是高活性的水裂解析氧（水氧化）催化剂。此外，需要说明的是，即使 Pt 和 IrO<sub>x</sub> 这样的贵金属催化剂在工业需求的 1000

mA/cm<sup>2</sup>级电流密度条件下也很低效。随着相关研究的推进，非贵金属水裂解催化材料的研究已经取得了一些重要进展，在 10 mA/cm<sup>2</sup>级电流密度下，很多非贵金属水裂解催化剂的催化活性已经接近，甚至超过了贵金属催化剂。然而，在 1000 mA/cm<sup>2</sup>级电流密度下，能高效、稳定催化水裂解反应的材料还鲜有报道。由此可见，大电流密度下适用的水裂解催化材料的研究尚处于实验探索阶段，很多材料和化学问题尚待解决，该类催化材料的研究还任重道远。

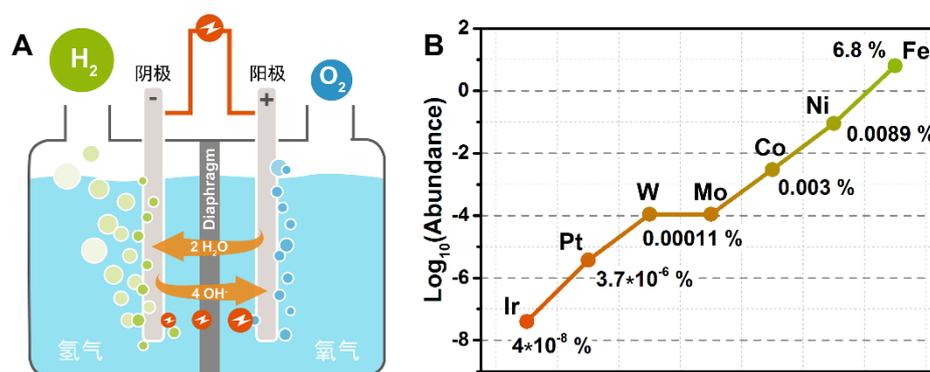


图 1 (A) 电解水器件示意图；(B) 几种金属元素的地壳丰度比较。

未来三年，申请人拟集中开展大电流密度非贵金属水裂解电催化材料的合成化学和水裂解催化机制研究。深入探究非贵金属水裂解电催化材料在大电流密度下高效水裂解催化本质，并对比分析贵金属催化材料（如 Pt）相关性质，总结大电流密度水裂解催化材料的一般构筑规则。在材料合成基础上开展相关机制研究，将丰富无机合成化学、表面物理化学和催化化学的基础内容，可能形成新的材料设计理念，为水裂解催化材料带来新的发展契机。

## 2. 拟解决的关键科学问题

**—同步优化水裂解催化材料的传荷、传质和催化活性位点性质：**通过理论计算与实验探讨相结合，阐明催化晶体结构、形貌结构、优势晶面、电子结构等对其传荷、传质和催化活性位点性质的影响规律，探寻可同步优化传荷、传质和催化活性位点性质的有效策略。

**—揭示水分子在材料表界面高效转化机理：**揭示水分子在催化材料表界面的化学转化微观机制，及关键反应中间体与活性位点的化学相互作用，提出有效的调控方法，改善材料的大电流密度水裂解催化性能。

**—水裂解催化材料的绿色合成化学：**以大电流水裂解催化材料的绿色合成为目标，发展低温（或室温）、无有机溶剂的、可放大的新合成方法和新合成路线。利用理论建模和实验相结合的方法，研究材料合成过程中涉及的化学和反应问题，深入理解催化材料的合成过程与机制。

### 3. 研究内容

以发展可适用于工业水裂解制氢的催化材料为目标，在已有工作基础上，拟继续开展大电流密度水裂解催化材料的合成化学与催化机制研究。拟开展的研究内容主要包括：（1）含硼烯化合物的合成化学及其在大电流密度催化水裂解方面的应用；（2）大电流密度导电硫化物基水裂解催化材料的纳米结构设计与性能优化；（3）大电流密度下，水裂解催化本质探究及高效水裂解催化材料一般构筑规则的建立。