

安丽-未来三年研究计划

稀土助力 PEM 电解池高效高稳定性产出绿氢

1、总体目标

本项目针对 PEM 电解池分解水制氢阳极 OER 半反应催化剂耐酸性低、稳定性差的科学难题，拟计划结合稀土元素丰富的电子结构、独特的得失电子能力和空轨道排布等特性，引入不同类型稀土元素影响催化剂电子分布状况、成键状态与催化剂的晶体结构类型，或对稀土基材料晶型修饰调控，构筑得到原子掺杂、异质界面和单相组分这三种形式的稀土促进型功能导向催化材料。结合多种原位表征技术，建立“催化剂结构可控构建-催化行为机制探究”自反馈体系，发展稀土促进型催化剂新体系，揭示活性起源。利用稀土的独特优势，提高酸性 OER 催化材料的耐酸性和抗腐蚀性，提升材料整体的稳定性，攻克阻碍 PEM 电解池的快速发展的关键科学问题。

2、研究背景

能源危机和环境问题的日益加剧，一度掀起开发可替代传统化石燃料的新型清洁能源的热潮。立足于无碳能源产业发展，在我国“碳达峰”、“碳中和”重大战略目标的背景下，围绕碳减排、碳零排和碳无排等相关技术的研发愈发重要，其中具备重量轻、能量高、无污染等特点的氢能作为低碳能源正脱颖而出，逐渐成为各国实现清洁可持续能源的重要抓手。电解水制氢被公认为是获得绿氢的重要途径。相较于碱性水分解制氢，质子交换膜（PEM）电解水制氢具有更大的工作电流密度、更高产氢效率和产氢纯度。而在电解水过程中，相对于析氢半反应（HER），阳极的析氧半反应（OER）通常受限于复杂的四电子转移吸附过程和相互竞争的吸附氧-晶格氧机理，成为整体电解水高效进行的最大阻碍，为此酸性 OER 催化剂的研发成为推进该领域快速发展的关键。针对于酸性 OER，最大的难点在于催化剂的耐酸性和抗腐蚀性问题，即使是目前公认的贵金属催化剂也会面临酸性条件下不能长久稳定的难题。因此，在不影响酸性 OER 催化剂高效率的同时，解决其稳定性问题，实现活性和稳定性的平衡，构造具有实际应用潜力的酸性 OER 电极成为我们研究的重中之重。

稀土元素是我国的战略资源，具有独特的 4f 电子结构、氧化还原能力和配位不饱和等性质，为其合成过程中的定向诱导作用和辅助附近作用提供了极大的可能性。稀土材料作为典型的基质材料或者辅助体，特殊性体现在：1、由于镧系收缩导致原子半径和离子半径随着原子序数的增加而逐渐减小，存在明显尺寸效应；2、根据软硬酸碱理论，稀土元素表现出极强的亲氧性能进而实现对不需氧体系的充分保护；3、稀土元素电子轨道中，s 电子参与成键，f 电子辅助成

键，结合独特的电子结构进行配位与掺杂；4、结合变价稀土元素的优势，影响催化剂的电子构型。通过稀土的引入，实现原子掺杂、异质界面、单相组分这三种类型的稀土功能材料的调控合成，提高酸性 OER 催化剂的耐酸性和抗腐蚀性，开展以“PEM 电解水制氢高效长期实施”为导向的新型稀土功能材料的设计合成研究，实现稀土资源的高值化利用。

3、研究内容：

(1) 稀土促进型新型功能材料合成体系创新

基于稀土丰富的电子结构、独特的氧化还原性和特殊的空轨道等特点，利用稀土离子种类的多样性和特异性及离子在材料形成过程中的诱导作用，引入稀土元素，调控催化剂晶体结构、电子云密度、成键形式等精细结构，实现稀土功能材料体系从原子掺杂、异质界面到单相组分的调控合成。通过构筑不同结构模型与界面存在形式，调变体系中稀土与非稀土组分的相互作用，充分发挥稀土元素的电子诱导作用。在此思路指导下，发展多种类型稀土促进型材料，为制备低碳、无碳催化剂提供思路加持。

(2) 酸性 OER 性能测试及结构-性能构效关系研究

将设计合成的稀土功能材料构筑成目标电极，采用多次测试平均计算误差棒的方法收集催化数据，结合常规三电极体系，通过线性扫描伏安 (LSV) 曲线得到过电位、转换频率 (TOF)、质量/比活性等基础电化学参数，评价材料的催化性能；采用多次测试平均计算误差棒的方法收集催化数据，构建结构-性能构效关系；利用原位表征技术与同位素标记手段，示踪同位素参与的反应路径并检测其流动信息，监测表面元素价态及化学组分的变化情况，研究酸性环境电催化氧析出反应路径；进一步借鉴密度泛函理论，揭示反应决速步骤与氧析出反应机制，反馈指导稀土功能新材料的合成调控。

(3) PEM 电解池组装及电解能力评估

通过酸性 OER 半电极的研究，发现稀土元素的引入可以提高材料对酸的耐受性和抗腐蚀性，耐酸催化剂的研发也是限制 PEM 电解池领域长足发展的关键科学问题之一。为此，我们拟计划将构筑得到的稀土辅助的目标 OER 电极与高性能贵金属基 HER 电极组装成 PEM 电解池，并测评电解池的阳极氧催化性能及 PEM 电解池整体的电解能力。此外，拓展到稀土辅助功能材料基 OER 电极与 HER 电极共同组装成 PEM 电解池，对整体电解槽的电解能力进行实时检测，评估其实际应用价值和潜力。

4、工作方式：

本项目将基于课题组目前已有研究成果，依托兰州大学优势测试平台，立足稀土功能材料研究室、稀有同位素前沿科学中心、配位化学与功能材料研究所和

甘肃省有色金属化学与资源利用重点实验室，开展以“PEM 电解水制氢高效长期实施”为导向的新型稀土功能材料的设计合成研究。同时积极与美国布朗大学、美国弗吉尼亚大学、新加坡南洋理工大学、香港理工大学、上海应用物理研究所等国内外知名大学和研究机构保持长期稳定的合作交流关系，确保项目顺利完成。

5、预期成果：

(1) 预计通过三年时间，发展功能导向的稀土材料精准合成的新方法，通过稀土离子定向诱导的策略，制备得到单相组分、原子掺杂、异质界面这三种模式的稀土功能新材料，探索其在 PEM 电解水制氢技术中的抗腐蚀、抗酸性作用和催化能力，结合原位表征手段和第一性原理计算，反馈指导稀土功能材料的设计合成，构筑目标电极并组装 PEM 电解池，测评电解池的整体电解能力，进一步拓展制备绿氢的相关技术。

(2) 根据项目的研究成果，预计发表 2-5 篇国际高水平 SCI 论文，申请 2-3 项国家发明专利，形成自主知识产权。

(3) 通过项目的实施与完成，培养 2-6 名硕士研究生，并指导 2-8 名本科生，助力优秀人才的培养与发展。