

# 用于催化的金属纳米材料非常规相的电子结构调控



能源和环境

碳中和

节能/发电/管理/储存 (电池)

## 机会

大气中温室气体（主要是二氧化碳）排放量的不断增加，迫切需要可持续的方法来固定二氧化碳并减少化石资源消耗。电催化二氧化碳还原反应（CO<sub>2</sub>RR）是一种将CO<sub>2</sub>转化为高附加值化学品和燃料（如一氧化碳）的有前景的方法，而一氧化碳是通过费托合成等工艺生产高价值化学品的重要原料。然而，现有的电催化剂，特别是金、银、钯等贵金属纳米材料，面临重大挑战。一个关键问题是CO<sub>2</sub>分子在贵金属表面的吸附能力弱，这阻碍了在宽电位窗口内实现高效、选择性电还原CO<sub>2</sub>为单一产物的目标。这一限制导致法拉第效率不理想、选择性差以及电流密度不足，阻碍了CO<sub>2</sub>RR在碳中和能源循环中的实际应用。因此，迫切需要能够增强CO<sub>2</sub>吸附、改善反应动力学并保持高选择性和稳定性的新型电催化剂设计。

## 技术

本专利通过公开一种用于CO<sub>2</sub>RR的异质结构电催化剂来解决现有问题，该催化剂包含沉积在含金纳米载体上的镧系氧化物纳米材料。核心创新在于构建金属-氧化物界面（特别是非常规相金载体与镧系氧化物之间的界面），以调控电子结构并创造优越的活性位点。含金纳米载体具有4H/面心立方（4H/fcc）的异质晶相，例如4H/fcc金纳米棒，其具有独特的电子特性。镧系氧化物纳米材料，优选具有面心立方（fcc）相的氧化铈（CeO<sub>x</sub>）纳米颗粒，沉积在该金载体上。这种结构形成了部分覆盖的构型，其中Au-CeO<sub>x</sub>界面作为反应位点。该技术涉及一种合成方法：首先通过使用特定表面活性剂和还原剂的湿化学法制备4H/fcc Au纳米棒；随后，通过涉及镧系前体（如六水合硝酸铈）和还原剂（如六亚甲基四胺）在约100°C下短时间受控反应，在这些纳米棒上生长CeO<sub>x</sub>纳米颗粒。该过程可精确控制CeO<sub>x</sub>厚度（例如3 nm或10 nm）。界面处的电子相互作用促进了从Au到CeO<sub>x</sub>的电荷转移，这已通过XPS和DFT计算证实。这种调控降低了CO<sub>2</sub>RR中速率决定步骤（即COOH中间体形成）的能垒，从而优化了生成CO的整体反应路径。

## 优势

- 在宽电位窗口（-0.5V至-0.8V vs. RHE）内实现极高的CO选择性，法拉第效率超过97%。
- 增强电催化活性，提供高的CO分电流密度（例如，在-0.8V vs. RHE下达到15.3 mA cm<sup>-2</sup>）。
- 改善反应动力学，其塔菲尔斜率（74.1 mV dec<sup>-1</sup>）低于原始Au纳米棒。
- 表现出优异的长期稳定性，在连续运行12小时后仍能保持性能。
- 利用合理设计的金属-氧化物界面优化Au载体的电子结构，解决了CO<sub>2</sub>吸附弱的问题。

备注

IDF: 1657

IP状态

专利已授权



技术成熟度等级 (TRL) ?

4

发明人

范战西教授

王娟博士

查询: kto@cityu.edu.hk

Develop  
Concept

Proof  
Concept

Follow-on  
Funding

Build Value

- 合成方法相对简单、快速（涉及短时间加热），并可控制催化剂形貌和界面性质。
- CeO<sub>x</sub>纳米结构中氧空位的存在有助于局部pH管理并促进反应中间体。

## 应用

- 用于电催化二氧化碳还原反应器的电极，以生产可持续燃料和化学品原料（如CO）。
- 集成到碳捕集与利用（CCU）系统中，将工业CO<sub>2</sub>排放转化为有价值的产品。
- 用于需要受控CO生成的燃料电池技术或合成气生产系统。
- 作为基础研究平台，用于研究异质结构催化剂在各种还原反应中的构效关系。
- 通过调整金属-氧化物组分，可能适用于其他电催化过程，如氧还原或氮还原反应。

