

新型电催化剂在全解水中的应用：突破与展望

蒋佳栋

福建师范大学，湖南省衡阳市，350000；

摘要：电催化剂作为能源转换与存储的核心材料，近年来在分类、性能评价、研究进展、挑战与未来展望等方面取得了显著进展。文章系统梳理了过渡金属基催化剂、碳基催化剂及杂化催化剂的分类与特性，深入探讨了其在全解水中的催化活性、稳定性与选择性评价。同时，总结了高效能催化剂开发、结构优化与新型合成方法的研究突破，分析了成本限制、环境可持续性及技术集成等挑战与解决方案。最后，展望了分子级设计、多功能催化剂及跨学科合作的未来发展方向，为电催化技术的进一步创新与应用提供了理论支撑与实践指导。

关键词：新型电催化剂；全解水；突破；展望

DOI：10.69979/3029-2735.25.1.080

引言

随着全球能源需求增长与环境问题日益严峻，开发高效、清洁的能源转换技术成为当务之急。电催化剂作为电解水、燃料电池等能源技术的核心组件，其性能直接决定了能量转换效率与成本。近年来，电催化剂的研究在材料设计、性能评价与规模化应用等方面取得了显著进展，但仍面临成本高、稳定性差及技术集成复杂等挑战。

1 新型电催化剂的分类与特性

1.1 过渡金属基催化剂

过渡金属基催化剂的核心优势在于其d轨道电子构型的可变性，这种特性使其在电催化反应中表现出优异的电子转移能力。以铁、钴、镍为代表的过渡金属，通过调控其配位环境与晶格结构，能够显著优化催化活性与选择性。例如，尖晶石型氧化物（如 Co_3O_4 ）因其稳定的晶体框架与可调的电子性质，在析氧反应（OER）中展现出高效催化性能^[1]。此外，过渡金属硫化物的层状结构及其暴露的活性边缘，也为析氢反应（HER）提供了理想的催化平台。这些特性使得过渡金属基催化剂在能源转换领域具有广阔的应用前景。

1.2 碳基催化剂

碳基催化剂的研究焦点在于其表面化学与电子结构的精确调控。石墨烯、碳纳米管等多维碳材料通过缺陷工程与杂原子掺杂，可引入丰富的活性位点并优化电

子传输路径。例如，氮掺杂碳材料中，氮原子的孤对电子能够调节碳基体的局部电子密度，从而增强其对反应中间体的吸附能力。同时，碳基催化剂的导电性与化学稳定性使其在苛刻的电化学环境中仍能保持高效性能。然而，其催化活性往往受限于活性位点的密度与分布，因此，如何通过微观结构设计实现性能的最大化，仍是当前研究的核心挑战。

1.3 杂化催化剂

杂化催化剂的设计理念在于通过不同功能材料的协同作用，突破单一材料的性能局限。例如，金属-有机框架（MOFs）与碳基材料的复合体系，不仅保留了MOFs的高比表面积与可调孔隙结构，还引入了碳基体的导电性与机械稳定性。此外，过渡金属与碳基材料的杂化体系，能够通过界面电子转移与协同催化机制，显著提升催化活性。值得注意的是，杂化催化剂的性能优化依赖于界面特性的精确调控，包括界面化学键的形成、电子结构的匹配以及传质过程的优化^[2]。

2 电催化剂在全解水中的性能评价

2.1 催化活性

催化活性的高低直接决定了电催化剂的效率，其核心在于降低电化学反应的能垒。过电位和塔菲尔斜率是衡量催化活性的关键指标。过电位越低，说明催化剂在驱动反应时所需的额外能量越少，效率越高；塔菲尔斜率则揭示了反应速率与电位之间的关系，斜率越小，表明催化剂对反应中间体的吸附与脱附过程越高效。例如，

铂基催化剂在析氢反应中因其低过电位和小塔菲尔斜率而被广泛使用^[3]。然而，催化活性不仅依赖于材料的本征性质，还与其微观结构、表面缺陷以及电子传输能力密切相关。因此，优化催化活性需要从材料设计、结构调控以及反应机制等多方面入手。

2.2 稳定性与耐久性

稳定性与耐久性是电催化剂从实验室走向实际应用的必经考验。催化剂的化学稳定性决定了其在苛刻电化学环境中的耐受能力，而结构稳定性则关乎其在长时间反应中的性能保持。例如，过渡金属基催化剂在酸性或碱性电解质中可能发生溶解或相变，导致活性下降；碳基材料则可能因氧化或腐蚀而丧失导电性。耐久性通常通过长时间恒电位或循环伏安测试来评估，其关键在于揭示材料在反应中的退化机制。为提高稳定性，研究人员常通过表面包覆、掺杂或构建复合结构等手段增强催化剂的抗腐蚀与抗氧化能力。

2.3 选择性

选择性反映了催化剂在复杂反应体系中对目标反应路径的调控能力。在全解水反应中，析氢反应(HER)与析氧反应(OER)同时发生，而副反应(如析氯反应或碳氧化反应)的存在可能降低能量转换效率。选择性的优化依赖于催化剂表面活性位点的电子结构与化学环境^[4]。例如，通过调控催化剂的晶面取向或引入特定功能基团，可以增强对目标反应中间体的吸附能力，同时抑制副反应的发生。此外，电解质组成、电位窗口等外部因素也对选择性产生显著影响。因此，选择性评价需结合实际应用条件进行综合考量。

3 研究进展与突破

3.1 高效能催化剂的开发

近年来，单原子催化剂(SACs)因其原子级分散的活性位点和极高的原子利用率，成为研究热点。SACs通过将金属原子锚定在氮掺杂碳基体或其他载体上，不仅最大化暴露了活性位点，还显著减少了贵金属用量。例如，锚定在氮掺杂碳基体上的铂单原子在析氢反应(HER)中表现出接近铂纳米颗粒的催化活性，而铂用量却大幅降低，有效解决了贵金属成本高的问题^[5]。

二维材料，如过渡金属硫化物(TMDs)，因其独特的层状结构和可调的电子性质，在电催化领域展现了巨

大潜力。以二硫化钼(MoS₂)为例，其边缘活性位点在析氢反应中表现出优异的催化性能。通过调控层间距、引入缺陷或掺杂杂原子，可以进一步提升其活性。例如，氮掺杂的MoS₂在析氢反应中展现出更低的过电位和更高的稳定性。

复合催化剂的开发也取得了重要进展。例如，将过渡金属氧化物与碳基材料复合，不仅保留了氧化物的高催化活性，还引入了碳基材料的导电性和机械稳定性。这种复合设计通过界面协同效应，显著提升了催化剂的整体性能。

高效能催化剂的开发离不开先进的表征技术和理论计算。例如，X射线吸收光谱(XAS)和密度泛函理论(DFT)计算帮助研究人员深入理解催化反应的微观机制，从而指导催化剂的设计与优化。未来，随着材料科学与催化理论的深度融合，高效能催化剂的开发将朝着更高效、更经济、更可持续的方向发展。

3.2 催化剂结构优化

通过精确调控材料的形貌、晶面取向和孔隙结构，可以显著提高活性位点的暴露率和反应物的传质效率。例如，多级孔结构的引入不仅增大了催化剂的比表面积，还为反应物与产物的扩散提供了高效路径。这种设计在电催化反应中尤为重要，因为反应的效率往往受限于反应物的传质速度。

表面缺陷工程通过引入空位、掺杂或构建界面，可以有效调节材料的电子分布，从而增强其催化活性。以过渡金属氧化物为例，氧空位的引入能够显著提升其在析氧反应(OER)中的性能^[6]。氧空位不仅增加了材料的导电性，还能优化反应中间体的吸附能，从而降低反应能垒。此外，掺杂杂原子(如氮、磷)也可以调节材料的局部电子密度，增强其对反应中间体的吸附能力。

晶面调控是不同晶面通常具有不同的原子排列和电子结构，因此选择合适的晶面可以显著提升催化活性。例如，某些过渡金属硫化物的边缘晶面在析氢反应中表现出更高的活性，而基底晶面的活性则相对较低。通过调控晶面取向，可以最大化暴露高活性晶面，从而提高整体催化性能。

3.3 新型合成方法

新型合成方法的开发为催化剂的制备提供了更多可能性。水热法、溶剂热法和气相沉积法等技术，能够

精确控制材料的形貌、尺寸和组成。例如，通过模板法制备的多孔碳材料，具有均匀的孔径分布和高比表面积，适用于多种电催化反应。此外，绿色合成方法的兴起，如生物启发合成和低能耗制备技术，不仅降低了制备过程的能耗与污染，还提高了催化剂的可持续性。这些新型合成方法不仅拓展了催化剂的制备手段，更为其性能优化提供了技术支撑。

4 挑战与解决方案

4.1 成本与资源限制

电催化剂的广泛应用常被高昂成本和稀缺资源所限制。以铂、钌为代表的贵金属催化剂性能卓越，但其价格昂贵且储量有限，难以大规模推广。针对这一问题，研究人员正积极探索低成本替代材料，如铁、钴、镍等过渡金属基催化剂，以及碳基材料。此外，通过优化制备工艺，如单原子催化剂技术，可以大幅减少贵金属用量，同时保持高效催化性能。资源限制的解决不仅需要材料创新，还需建立高效的回收与循环利用体系，以实现资源的可持续利用。

4.2 环境与可持续性

电催化技术的环境友好性与可持续性是其走向实际应用的重要前提。传统催化剂的制备过程往往伴随高能耗和污染排放，而催化剂在使用过程中也可能因降解或流失对环境造成二次污染^[7]。为此，绿色合成方法成为研究热点，例如利用生物模板或低温制备技术，不仅降低了能耗和污染，还提高了催化剂的生物相容性。此外，催化剂的循环利用技术，如电化学再生和生物降解，也为减少环境负担提供了可行路径。可持续性不仅关注技术本身，还需从全生命周期角度评估其环境影响。

4.3 技术集成与规模化

电催化技术的规模化应用面临技术集成与系统优化的挑战。实验室中表现优异的催化剂在实际应用中往往因反应条件复杂性和系统集成度不足而大打折扣。例如，在全解水反应中，催化剂需同时满足析氢和析氧的高效协同，而实际系统中还需考虑电解质选择、反应器设计以及能量管理等问题。技术集成需要从材料、器件到系统层面进行多层次优化，如开发多功能催化剂、设计高效反应器以及构建智能能量管理系统。此外，规模化生产中的质量控制和成本控制也是实现技术落地的关键环节。

键环节。

5 未来展望

5.1 分子级设计

电催化剂的未来发展将更加聚焦于分子级设计，通过精准调控材料的原子排列与电子结构，实现催化性能的定向优化。单原子催化剂（SACs）因其原子级分散的活性位点和极高的原子利用率，已成为研究热点。例如，锚定在氮掺杂碳基体上的铂单原子，在析氢反应中展现出接近铂纳米颗粒的活性，而用量却大幅减少。借助先进的表征技术（如X射线吸收光谱）与计算模拟，研究人员能够深入揭示催化反应的微观机制，从而指导分子级设计。这种设计不仅关注活性位点的本征性质，还需考虑其与反应物、产物的相互作用，以实现催化效率的最大化。

5.2 多功能催化剂

多功能催化剂的开发是未来电催化技术的重要方向。单一功能的催化剂难以满足复杂反应体系的需求，而多功能催化剂通过集成多种催化活性，能够同时驱动多个反应步骤，从而提高整体效率。例如，将析氢与析氧活性位点集成于同一材料中，可实现全解水反应的高效协同。多功能催化剂的设计需兼顾各功能组分的兼容性与协同效应，通过界面工程与结构调控，实现性能的最优化。此外，多功能催化剂在能源存储与转换、环境修复等领域的应用潜力也值得深入探索。

5.3 跨学科合作

电催化技术的突破离不开跨学科合作。材料科学、化学、物理学、生物学等多学科的交叉融合，为电催化剂的设计与优化提供了新的思路与方法。例如，生物启发合成技术借鉴自然界的高效催化机制，为绿色催化剂的开发提供了新途径；机器学习与人工智能的应用，能够加速材料筛选与性能预测，缩短研发周期。跨学科合作不仅拓展了电催化研究的边界，还为解决复杂能源与环境问题提供了综合解决方案。未来，跨学科合作将成为推动电催化技术创新的重要驱动力。

6 结论

电催化剂的研究在材料设计、性能优化与规模化应用等方面取得了重要进展，但仍需解决成本、环境可持续性及技术集成等挑战。未来的发展方向将聚焦于分子

级设计、多功能催化剂开发及跨学科合作，通过精准调控材料结构与性能，实现电催化技术的高效、绿色与可持续发展。电催化技术的突破不仅有助于推动能源转型与环境保护，还将为全球可持续发展目标的实现提供重要支撑。

参考文献

- [1] 孙尚聪, 张旭雅, 刘显龙, 等. 光催化全解水助催化剂的设计与构建[J]. 物理化学学报, 2020, 36(3): 64-74.
- [2] 杨贵东, 严孝清, 许堡荣. 新型全解水光催化剂的制备及其性能研究[C]//第十九届全国催化学术会议论文集. 2019: 1-1.
- [3] 王磊. 二维高分子全解水光催化剂的设计、合成以及机理研究[D]. 安徽: 中国科学技术大学, 2019.
- [4] 李亚斐. 铁基过渡金属催化剂的制备及电解水性能研究[D]. 新疆维吾尔自治区: 石河子大学, 2022.
- [5] 康伟, 李璐, 赵卿, 等. 新型析氢析氧电化学催化剂在固体聚合物水电解体系的应用[J]. 化学进展, 2020, 32(12): 1952-1977.
- [6] 蒋帅虎. 电催化全解水中钴类催化剂性能提升的相关策略研究[D]. 四川: 电子科技大学, 2020.
- [7] 双功能全分解水电催化剂研究取得新进展[J]. 低温与特气, 2018(4): 8.