

Co₃O₄/C 催化氧化还原反应的活性及机理

李赏, 朱广文, 邱鹏, 荣刚, 潘牧

武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室, 湖北武汉 430070

LI Shang*, ZHU Guangwen, QIU Peng, RONG Gang, PAN Mu

State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Progressing, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, Hubei, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

Download: PDF (598KB) HTML (1KB) Export: BibTeX or EndNote (RIS) Supporting Info

摘要 采用液相控制沉淀法制备了平均粒径约为 10 nm 的 Co₃O₄/C 催化剂, 运用 X 射线衍射和透射电镜对催化剂进行了表征, 通过循环伏安法和线性扫描伏安法测试了催化剂催化氧化还原反应的性能. 结果表明, 在酸性条件下, Co₃O₄/C 对氧还原反应具有电催化活性. 利用 Koutecky-Levich 理论计算得到了交换电流密度为 1.1×10⁻⁹ A/cm², 电子转移数为 2.0569, 表明氧还原过程是两电子还原过程. 利用 Materials Studio 分子模拟软件对 Co₃O₄ 表面上氧吸附过程进行了模拟, 计算得到了 O 和 Co 原子吸附前后的态密度、电子密度、键长和吸附能. 结果表明, 几何构型的限制使得 O 在 Co 活性点上只能发生端基吸附, 吸附后 O 2p 轨道和 Co 3d 轨道重叠杂化, 生成新的化学键. 这主要是通过 Co 原子周围的电子向 O 原子周围富集来弱化 O₂ 中的 π 键, 并活化未吸附端 O 原子, H⁺ 易从另一侧与未吸附端 O 原子形成新的化学键, 发生二电子反应.

关键词: 液相控制沉淀法 氧还原反应 电催化 反应机理 吸附模式 碳 四氧化三钴

Abstract: The Co₃O₄/C catalyst with nanoparticles was synthesized by a liquid control precipitation method. X-ray diffraction and transmission electron microscopy were used to characterize the structure and morphology of the catalyst. The electrocatalytic activity of the catalyst was investigated by line-scan voltammetry and cyclic voltammetry using rotating disk electrode technique. The results indicated that the Co₃O₄/C has electrocatalytic activity for the oxygen reduction reaction (ORR). The exchange current density of Co₃O₄/C catalyst obtained by the Koutecky-Levich theory is 1.1 ×10⁻⁹ A/cm². The overall electron transfer number for the ORR was determined to be ~2, suggesting that the ORR catalyzed by Co₃O₄/C is a 2- electron transfer pathway. The process of oxygen adsorption on the surface of Co₃O₄/C was simulated through Materials Studio to explore the catalytic mechanism. The state density, electron density, bond length, and adsorption energy of O and Co were calculated. Restricted by the geometric configuration, O₂ can only be adsorbed by the Pauling adsorption mode. After adsorption, the O 2p orbit and Co 3d orbit hybridize with each other and form a new chemical bond. The π bond of O₂ is mainly weakened by the electron transfer from Co to O. At the same time, the other O atom is activated. H⁺ can easily bond with the other O and the catalytic reaction occurs through 2- electron transfer pathway.

Keywords: liquid control precipitation method, oxygen reduction reaction, electrocatalysis, reaction mechanism, adsorption mode:carbon, cobaltous oxide

收稿日期: 2010-10-19; 出版日期: 2011-02-23

引用本文:

.Co₃O₄/C 催化氧化还原反应的活性及机理[J] 催化学报, 2011,V32(4): 624-629

.Electrocatalytic Activity of Co₃O₄/C for Oxygen Reduction and the Reaction Mechanism[J] , 2011,V32(4): 624-629

链接本文:

http://www.chxb.cn/CN/10.3724/SP.J.1088.2011.01012 或 http://www.chxb.cn/CN/Y2011/V32/I4/624

没有本文参考文献

- [1] 王后锦^{1,2}, 吴晓婧^{1,2}, 王亚玲^{1,2}, 焦自斌¹, 颜声威¹, 黄浪欢^{1,2}. 二氧化钛纳米管阵列光电催化同时降解苯酚和 Cr(VI)[J]. 催化学报, 2011,32(4): 637-642
- [2] 赵鹞, 冯宏枢, 谢建新, 沈俭. 通过聚苯的磺化和碳化制备酸性树脂-碳复合材料[J]. 催化学报, 2011,32(4): 688-692
- [3] 张海艳^{1,2}, 林瑞^{1,3}, 曹春晖^{1,3}, 马建新^{1,2,3}. 用于质子交换膜燃料电池抗 CO 的 Pt-CeO₂/C 催化剂的制备和表征[J]. 催化学报, 2011,32(4): 606-611
- [4] 王喜照^{1,2}, 郑俊生^{1,2,a}, 符蓉^{1,3}, 马建新^{1,2,b}. 微波功率和微波作用时间对脉冲微波辅助化学还原合成的 Pt/C 催化剂性能的影响[J]. 催化学报, 2011,32: 599-605
- [5] 陈明英¹, 翁维正^{1,a}, 华卫琦², 伊晓东¹, 万惠霖^{1,b}. 合成气制 C₂ 含氧化合物 Rh-Mn/SiO₂ 催化剂上 CO 吸附的红外光谱研究[J]. 催化学报, 2011,32(4): 67: 681
- [6] 陈立静, 王婷, 陈锋*, 张金龙. 以酚醛树脂为碳源的碳改性 TiO₂ 可见光光催化剂[J]. 催化学报, 2011,32(4): 699-703

Service

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ Email Alert
- ▶ RSS

作者相关文章

- [7] 赵景月, 邹秀晶, 汪学广, 刘合之, 李林, 鲁雄刚, 丁伟中. 低水碳比条件下 $\text{Ni}/\text{CeO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 催化剂上液化石油气的预重整[J]. 催化学报, 2011,32(3): 456-462
- [8] 方向青, 王钰宁, 邓秀娟, 吴海虹, 吴鹏, 刘月明, 何鸣元. Ti-MWW 催化氯丙烯环氧化反应动力学行为[J]. 催化学报, 2011,32(2): 333-339
- [9] 翟新磊, 徐金光, 徐秀峰, 邹旭华, 齐世学, 祁彩霞, 安立敦. 吸附柱色谱法制备负载型纳米金催化剂[J]. 催化学报, 2011,32(2): 374-378