

Катализаторы реакции восстановления кислорода в щелочных электролитах: влияние метода синтеза, состава каталитической системы и природы носителя на их активность

Буланова А.В., Шафигулин Р.В.

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П.Королева,

г. Самара

av.bul@yandex.ru

Нехватка энергии в мире и загрязнение окружающей среды стали основными факторами, сдерживающими развитие промышленности, которая остро нуждается в освоении новых возобновляемых источников энергии, являющихся альтернативой традиционных энергоносителей. Поэтому в последние годы ученые ускорили разработку новых источников энергии и новых «чистых» технологий производства электроэнергии. Среди них водородная энергетика рассматривается как наиболее идеальный возобновляемый источник энергии для человека в будущем благодаря разнообразным формам ее использования и своим преимуществам в области экологической безопасности. Переход к водородной энергетике позволит существенно улучшить экологическую ситуацию, а также решить ряд других проблем, и здесь топливные элементы (ТЭ) играют ключевую роль. Стоимость ТЭ существенно зависит от применяемых в них платиновых катализаторов, поэтому разработка недорогих эффективных, устойчивых к деградации электрокатализаторов играет важную роль в создании ТЭ нового поколения.

Исследования посвящены поиску эффективных неплатиновых катализаторов реакции восстановления кислорода (ORR), протекающей в щелочных топливных элементах (ТЭ).

Синтезированы катализаторы ORR на различных носителях, содержащих в качестве активной фазы переходные металлы (Ni, Co, Cr, Cu), а также допированных фталоцианинами этих металлов с использованием различных методов. Некоторые синтезированные образцы содержали небольшое количество палладия. Изучены активность синтезированных катализаторов, оценено влияние метода синтеза, природы носителя, состава катализаторов на эффективность ORR.

При выполнении физико-химических исследований катализаторов применяли современное оборудование; квантохимические расчеты проводили на суперкомпьютере с использованием программного обеспечения Gaussian 09. Моделирование осуществлялось методом теории функционала плотности (DFT), при использовании функционала b3lyp. Используемый базис - 6-311G**.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 19-53-80033 БРИКС_т.