

Ni-bevattende bimetaal-nanodeeltjies as katalisators vir elektrochemiese waterspalyting

M van den Berg,¹ R Malgas-Enus,² CGCE van Sittert¹

¹Laboratorium vir Toegepaste Molekuulmodellering, Navorsingsfokusarea: Chemiese Hulpbronveredeling, Noordwes-Universiteit, Suid-Afrika

²Departement Chemie en Polimeerwetenskappe, Universiteit van Stellenbosch, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: CGCE van Sittert **E-pos:** Cornie.VanSittert@nwu.ac.za

Ni-containing bimetallic nanoparticles as catalysts for electrochemical water splitting: Three unique Ni-containing bimetallic bulk structures for each secondary metal used were identified and optimised. A nanoparticle was cut from each optimised bulk structure and optimised. Structural and electronic properties and stability and activity for electrochemical water splitting of each of the nanoparticles was investigated. All calculations were done with CASTEP.

Die waterstofvrystellingsreaksie (WVR) kan in 'n suur of 'n alkaliese medium plaasvind. Die alkaliese WVR is van groot belang vir waterelektroliseerders omdat kontaminasie van H₂ en korrosie van waterelektroliseerders en elektrodes uitgeskakel word (Li et al., 2020). Die alkaliese WVR benodig egter ekstra energie om die kovalentbindings in die watermolekule te breek. Hierdie vereiste van die alkaliese WVR veroorsaak dat die reaksiekinetika vir die dissosiasie van water vertraag word (Li et al., 2020). Dus is dit krities om meer doeltreffende alkaliese WVR-katalisatore te ontwerp om die energieverperring te verlaag en die waterstofadsorpsie vir die H-H-bindingsvorming te verbeter. Alhoewel verskeie hoogsaktiewe nie-edelmetaalverbindinge as katalisatore in 'n alkaliese medium vir die suurstofvrystellingsreaksie (SVR) geïdentifiseer is (Zeng & Zhang, 2010; Greeley et al., 2006), is daar 'n gebrek aan nie-edelmetaalekwivalente vir die waterstofvrystellingsreaksie (WVR). Hierdie gebrek vertraag die ontwikkeling van koste-effektiewe waterspalytingstoestelle in alkaliese oplossings (Gong & Dai, 2015). Nikkel is al bykans 'n eeu gelede as 'n katalisator vir SVR en WVR in alkaliese oplossing geïdentifiseer (Gong & Dai, 2015; Stoney, 1909). In 'n poging om die elektrokatalitiese aktiwiteit en stabiliteit van Ni vir bogenoemde reaksies te verhoog kan twee moontlike benaderings gebruik word, naamlik die byvoeging van 'n sekondêre metaal of die verhoging van die kontakoppervlakte. In hierdie navorsing is die "Site Occupation Disorder (SOD)"-program gebruik om verskillende Ni-bevattende bimetaalstrukture, naamlik Ni-Co, Ni-Cr, Ni-Mn en Ni-Zn, te bou. Unieke konfigurasies vir elke Ni-bevattende bimetaalstruktuur is met behulp van SOD geïdentifiseer. Drie unieke konfigurasies, een met die hoogste, laagste en middelste relatiewe energie, vir elke bimetaal is geïdentifiseer en geoptimeer. 'n Bimetaal-nanodeeltjie met 55 atome is uit elk van die geoptimeerde uitgebreide strukture gesny en weer geoptimeer met behulp van die CASTEP-module binne Material Studio 2020-sagteware. Elkeen van die nanodeeltjies se strukturele en elektroniese eienskappe, sowel as stabiliteit en aktiwiteit vir elektrochemiese waterspalyting is ondersoek. Die benadering in hierdie navorsing stel navorsers in staat om 'n groter, herhaalbare spektrum van verskillende nanodeeltjies met bimetaalstrukture vir die ontwikkeling van WVR-katalisatore te ondersoek.

Bronnelys

- Gong, M., Dai, H., 2015, A mini review of NiFe-based materials as highly active oxygen evolution reaction electrocatalysts, *Nano Research* 8, 23-39. <https://doi.org/10.1007/s12274-014-0591-z>.
- Greeley, J., Jaramillo, T.F., Bonde, J., et al., 2006, Computational high-throughput screening of electrocatalytic materials for hydrogen evolution, *Nature materials* 5, 909-913. <https://doi.org/10.1038/nmat1752>.
- Li, Z., Niu, W., Yang, Z., et al., 2020, Boosting alkaline hydrogen evolution: the dominating role of interior modification in surface electrocatalysis, *Energy and Environmental Science* 13, 3110-3118. <https://doi.org/10.1039/D0EE01750G>.
- Stoney, G.G., 1909, The tension of metallic films deposited by electrolysis, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 82, 172-175. <https://doi.org/10.1098/rspa.1909.0021>.
- Zeng, K., Zhang, D., 2010, Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications, *Progress in energy and combustion science* 36, 307-326.4 <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2009.11.002>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).