

分子模拟技术在金属析氢反应教学中的应用

谢克锋^{1*}, 李磊磊², 安 宁¹, 马陇君¹, 刘国华¹

¹兰州交通大学化学化工学院, 甘肃 兰州

²兰州市第六十五中学教务处, 甘肃 兰州

收稿日期: 2025年9月9日; 录用日期: 2025年10月20日; 发布日期: 2025年10月30日

摘 要

基于模型认知的分子模拟技术能够从微观结构层面理解材料科学教学中的难点问题。文章首先采用 Materials Studio 07 版本软件模拟计算探讨了学生较难理解的不同金属析氢反应过电位差异理论机制。然后将所学知识联系到金属的腐蚀极化曲线和标准氢电极中电极材料选择问题, 引导学生应用所学知识理解实际问题。最后结合碳达峰与碳中和目标, 基于所学知识学生提出了绿电电解水制绿氢减小 CO₂ 排放的方案, 激发了学生的学习兴趣, 为学生了解最新科研动态开启一扇窗。

关键词

分子模拟, 析氢腐蚀, 过电位, 模型认知

The Application of Molecular Simulation Technology in the Teaching of Hydrogen Evolution Reaction of Metals

Kefeng Xie^{1*}, Leilei Li², Ning An¹, Longjun Ma¹, Guohua Liu¹

¹School of Chemistry and Chemical Engineering, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou Gansu

²Department of Educational Administration, Lanzhou Sixty-Fifth Middle School, Lanzhou Gansu

Received: September 9, 2025; accepted: October 20, 2025; published: October 30, 2025

Abstract

Molecular simulation technology based on model cognition can understand the difficult problems in the teaching of materials science from the microstructure level. In this paper, Materials Studio 07

*通讯作者。

文章引用: 谢克锋, 李磊磊, 安宁, 马陇君, 刘国华. 分子模拟技术在金属析氢反应教学中的应用[J]. 创新教育研究, 2025, 13(10): 564-574. DOI: 10.12677/ces.2025.1310827

software is used to simulate the mechanism for the difference in overpotential of different metal hydrogen evolution reactions that are difficult for students to understand. Then, the knowledge is related to the corrosion polarization curve of the metal and the selection of the electrode material in the standard hydrogen electrode, and the students are guided to apply the knowledge to understand the practical problems. Finally, combined with the goal of carbon peak and carbon neutralization, based on the knowledge learned, students proposed a scheme for reducing CO₂ emissions by green electrolysis of water to produce green hydrogen, which stimulated students' interest in learning and opened a window for students to understand the latest scientific research trends.

Keywords

Molecular Simulation, Hydrogen Evolution Corrosion, Overpotential, Model Cognition

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

科技创新是推动社会经济发展的主要动力，高等学校是培养创新型人才的主要阵地。目前处在知识大爆炸的时代，随着科学技术的快速发展，对材料科学微观结构认识更加清晰，与之对应的相关原理和理论研究更加深入。将最新科学研究成果和研究方法引入大学教学是提高学生科研素养的有效途径，有助于加深学生对基本原理的理解和掌握，并拓展知识范围和深度，为学生了解最新科技发展动态开启一扇窗。

基于量子力学的分子模拟技术是研究材料科学的重要工具，可以将材料研究的尺度深入到原子/分子层次，被广泛应用于新型材料设计、材料微观结构和性能模拟等方面。分子模拟技术在教学中也被应用，如田亚利等将 GaussView 软件应用于分子结构和晶体结构模拟教学[1]，潘睿等将 Materials Studio 软件应用于金属材料教学[2]，徐刚将 Discovery Studio 软件应用于生物有机化学教学[3]，曲家利等将分子动力学模拟用于高分子玻璃化转变过程本科教学实验[4]，郭勇等将 Gaussian 03 软件应用于芳香类有机污染物稳定性教学[5]。分子模拟技术能够不仅让学生直观看到分子和材料的原子层次的空间结构，并可以通过模拟计算获得分子轨道、红外光谱、紫外光谱和表面静电势等，同时相应也可以计算得到材料的能带、电荷分布和弹性常数等性质。使学生能更加容易认识分子(材料)的空间结构，加深学生对分子(材料)结构与性质之间关系的理解和掌握。本文将 Materials Studio 07 版本软件(简称 MS07)应用于《金属腐蚀与防护》课程析氢腐蚀教学中，加深学生对金属析氢反应的理解、掌握和应用。

2. 《金属腐蚀与防护》课程金属析氢反应教学中的问题

析氢反应是 H⁺离子在金属电极表面通过还原反应生成 H₂ 的电极过程。此过程包括四个基元步骤：(1) 水合 H⁺离子向金属表面扩散；(2) 水合 H⁺离子在金属表面发生放电反应，生成吸附于金属表面的 H 原子；(3) H 原子从金属表面脱附结合为 H₂；(4) H₂ 分子离开金属表面进入气相。对于大多数金属电极而言，第二步反应 H⁺离子与电子结合的电化学步骤最缓慢，是控制步骤，其他步骤对金属析氢反应过程影响不大。但少数金属如 Pt，第三步反应复合脱附步骤进行的最缓慢，是控制步骤。缓慢的速控步骤使整个析氢反应过程受到阻碍，导致电极电位向负方向移动，产生一定过电位。

在一定反应电流密度范围，析氢过电位和电流密度对数呈线性关系，服从 Tafel 公式($\eta_H = a_H - b_H \lg i$)，

Tafel 常数 a_H 与电极材料、表面状态、溶液组成、浓度和温度有关。不同金属材料析氢反应过电位差别很大, 说明不同金属电极表面对 H^+ 离子还原反应有着不同催化作用。Tafel 斜率 b_H 是一个主要与温度有关的常数, 对于大多数金属, $b_H = 4.6 RT/nF$, n 速控步骤参加反应的电子数。当 $n = 1$, $T = 298\text{ K}$ 时, $b_H \approx 0.118\text{ V}$ 。不同的金属, a_H 有较大的差异。根据 a_H 的大小, 将金属分为高、中、低氢过电位金属三类, 详细分类见表 1。

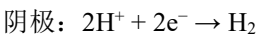
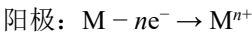
Table 1. Hydrogen evolution corrosion metal classification
表 1. 析氢腐蚀金属分类

类别	a_H / V	主要金属
高氢过电位金属	1.0~1.5	Pb, Tl, Hg, Cd, Zn, Ga, Bi, Sn
中氢过电位金属	0.5~1.0	Fe, Co, Ni, Cu, W, Au
低氢过电位金属	0.1~0.5	Pt, Pd

《金属腐蚀与防护》课程根据 Tafel 常数 a_H 将金属析氢反应过电位分为高、中、低氢过电位三类。但是高、中氢过电位金属大多数为活泼金属, 在酸性条件下它们与 H^+ 离子反应容易产生氢气, 而低氢过电位金属 Pt 和 Pd 为惰性金属, 它们与 H^+ 离子不发生反应, 对学生理解这个知识点造成困惑。

3. 金属析氢反应教学问题分析

金属在酸性条件下发生析氢腐蚀, 若金属标准电极电势小于 0 V , 在酸性条件下作为阳极失去电子变为金属离子, 而电子通过外电路传输到阴极, 此时 H^+ 离子在阴极得到电子变为 H_2 。相应的电极反应如下:



在活泼金属发生腐蚀的时候, 金属不仅作为阳极被腐蚀, 也提供阴极析氢反应的电子导体。但是对于惰性金属 Pt 和 Pd, 其本身在酸性条件下不会发生腐蚀。作为析氢反应电极, 它充当了电子导体和析氢反应载体的作用。

显然, 在酸性条件下析氢反应中, 活泼金属作为阳极发生与 H^+ 离子发送反应, 而惰性金属不与 H^+ 离子发生反应。但是不管是活泼金属还是惰性金属, 作为阴极析氢反应载体时, 金属起到电子导体的作用, 阴极反应速率与金属活性没有直接的关系, 这也是学生学习金属腐蚀过程中容易混淆的。对于不同金属对析氢反应速率的影响, 我们通过分子模拟探索金属表面析氢反应机理。让学生理解阴极金属不仅是析氢反应的电子导体和载体, 而且作为催化剂影响析氢反应活化能。斯坦福大学 Jens K. Nørskov 教授[6]提出的计算氢电极方法为理解金属表面析氢反应的微观机制提供了有效工具。本文通过 MS07 软件中 CASTEP 模块模拟不同金属表面析氢反应路径, 旨在让学生理解不同金属表面析氢反应过电位差异的分子机制, 加深学生对金属析氢反应的理解和掌握。

4. 应用分子模拟技术改进金属析氢腐蚀教学

4.1. 模型选取

根据 Tafel 常数 a_H 将金属析氢腐蚀过电位分为高、中、低三类, 在此我们从三类中分别选取一种金属, 分别为 Zn、Fe 和 Pt。具体的过程为: (1) 打开 MS07 软件, 创建新的 Project; (2) 打开 File < Import < Structure < metals 文件夹, 选取需要的金属结构文件; (3) 导入结构后, 点击鼠标右键 < Display Style <

Ball and stick 显示模式修改为球棍模型；(4) 打开 Build < Crystals < Rebuild Crystal，查看空间群(Space Group)和晶胞参数(Lattice Parameters)，软件操作界面如图 1 所示。三种金属的元胞结构如图 2 所示，它们相应的晶胞参数在表 2 中列出。

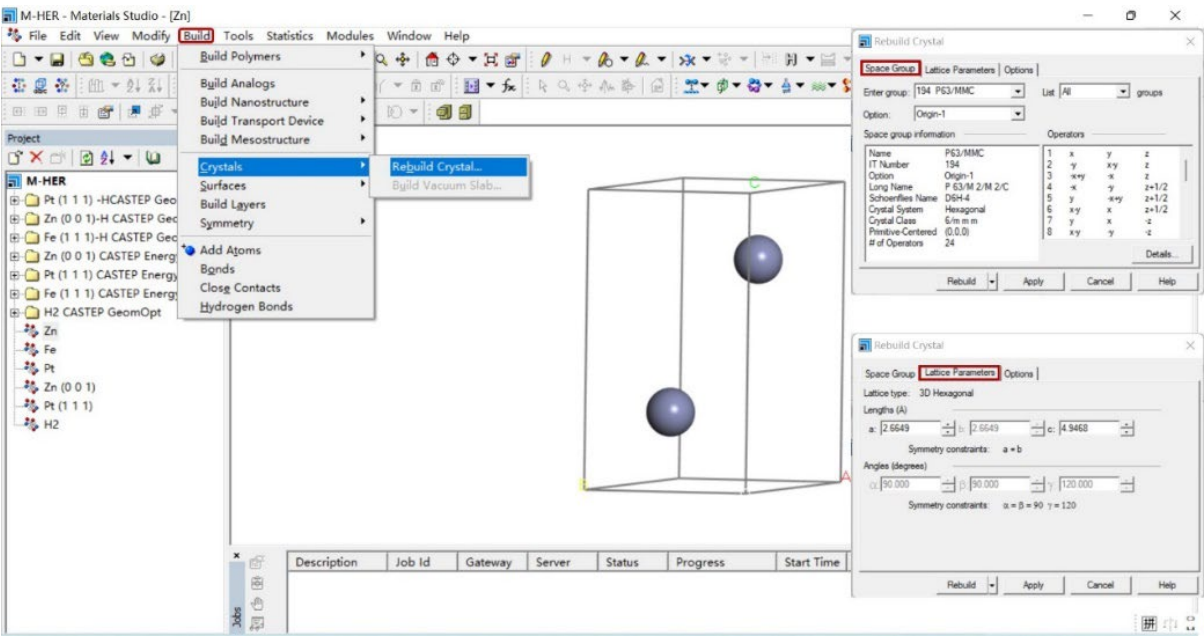


Figure 1. Scheme of crystal structure modeling by MS software
图 1. MS 软件晶体结构建模示意图

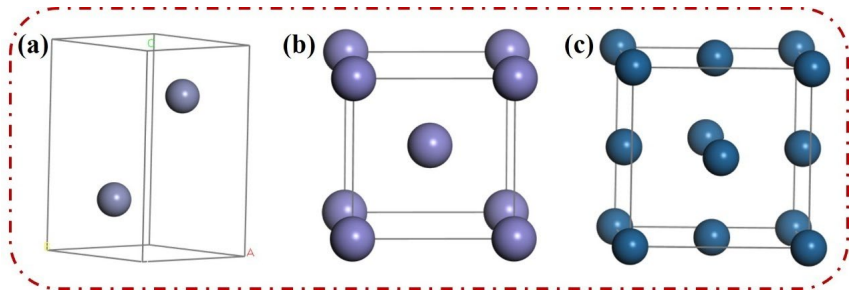


Figure 2. The cell structure of the three metals (a) Zn, (b) Fe, (c) Pt
图 2. 三种金属的元胞结构(a) Zn, (b) Fe, (c) Pt

Table 2. Crystal cell parameters of three metals
表 2. 三种金属的晶胞参数

金属	晶系	点群	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$\alpha/^\circ$	$\beta/^\circ$	$\gamma/^\circ$
Zn	六方	P63/MMC	2.6649	2.6649	4.9468	90.00	90.00	120.00
Fe	立方	IM-3M	2.8664	2.8664	2.8664	90.00	90.00	90.00
Pt	立方	FM-3M	3.9239	3.9239	3.9239	90.00	90.00	90.00

然后，在 MS 软件中构建金属的表面，具体操作为：打开 Build < Surface < Cleave Surface 进入晶面设置表面。并在表面上方通过分别取所研究三种金属稳定暴露晶面作为金属表面，它们分别是 Zn (001)，Fe (111)和 Pt (111)面。然后，打开 Build < Build Surface 进入真空层设置界面，在 Z 方向上设置 15 Å 的

真空区域, 以避免二维模型相邻周期结构之间相互作用。最后, 打开 Build < Symmetry < Supercell 进入超胞设置界面, 建立 $2 \times 2 \times 1$ 的超胞。将构建好的超胞优化, 然后在金属表面吸附 H 原子。 H^+ 离子在三种金属表面吸附并通过阴极去极化反应的电子变为 H 原子, 两个 H 原子结合产生 H_2 , 除了 Pt 以外的大多数金属析氢反应决速步骤为 H^+ 离子在金属表面的得电子过程, 即电化学活化控制。H 原子在三种金属表面吸附的结构如图 3 所示。

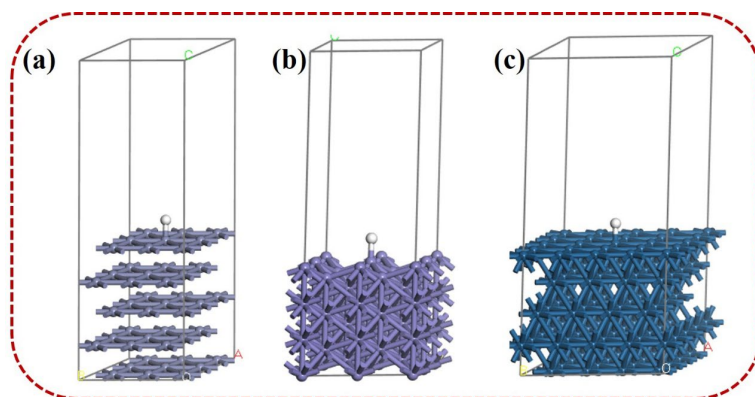


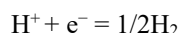
Figure 3. The adsorption structure of H atom on three kinds of metal surfaces (white sphere represents H) (a) Zn (001), (b) Fe (111), (c) Pt (111)

图 3. H 原子在三种金属表面吸附结构(白色球代表 H) (a) Zn (001), (b) Fe (111), (c) Pt (111)

4.2. 计算方法和参数设置

在三种金属表面析氢反应快慢可以用反应过程的吉布斯自由能变化值(ΔG_{H^*})衡量。我们通过理论计算三者 ΔG_{H^*} 。计算采用 MS07 软件的 CASTEP 模块完成, 首先我们对 H 原子在金属表面吸附构象进行结构优化, 得到最稳定吸附构象。具体 MS07 软件操作过程为: 打开 Modules < CASTEP < Calculation 进入计算设置界面: 计算方法为 Geometry Optimization (几何优化), 具体参数设置界面如图 4(a)、图 4(b)所示, 具体参数可通过每个面板上的 More 选项设置。采用泛函为广义梯度近似(GGA)的 PBE 泛函, 通过一系列不同截断能(cutoff)和 K 点数值的收敛性测试, 截断能设置为 500 eV, K 点设置 $3 \times 3 \times 1$ 。结构优化收敛标准为能量为 5×10^{-5} eV/atom, 受力为 0.1 eV/Å, 位移为 5×10^{-3} Å。参数设置完成后, 点击 Job Control, 按照图 4(c)设置计算节点, 在此我们选择在自己个人电脑计算, 并设置适当的 CPU 调用核数。点击 Run 开始运行, 随后会出现结构优化过程中能量的变化曲线(图 4(d))和结构优化收敛参数的曲线(图 4(e)), 图 4(e)中显示收敛阈值有三个标准, 分别是能量变化值(Energy Change)、最大位移(Max. Displacement)和最大受力(Max. Force), 在图中分别对应蓝、黄、紫色三条点线, 相应颜色的三条虚线是其收敛阈值, 当三条点线的数值均在三条虚线下方时, 结构优化完成, 得到体系稳定结构。通过计算文件可以提取稳定结构的结构参数和能量, 用于析氢反应机理的研究。

H^+ 在金属表面的电化学反应如下:



首先, 读取稳定构象的能量, 计算 H 原子在金属表面的吸附能(ΔE_{H^*}), 计算公式为:

$$\Delta E_{H^*} = E_{surface+H} - E_{surface} - \frac{1}{2}E_{H_2} \quad (1)$$

上式中 $E_{surface+H}$ 为 H 原子吸附在金属表面的体系总能量, $E_{surface}$ 为单纯金属表面的能量, E_{H_2} 为气态氢气分子能量。

H 原子在金属表面吸附过程的吉布斯自由能变化值(ΔG_{H^*})计算公式为:

$$\Delta G_{H^*} = \Delta E_{H^*} + \Delta E_{ZPE} - T\Delta S \quad (2)$$

上式中, ΔE_{ZPE} 为 H 原子吸附在金属表面的体系零点振动能(量子系统在 0 K 时的谐振子基态能), ΔS 为其熵变(化学反应过程中体系混乱度的变化), T 为绝对温度。根据 Jens K. Nørskov 教授研究成果[7], 此公式可以简化为:

$$\Delta G_{H^*} = \Delta E_{H^*} + 0.24 \quad (3)$$

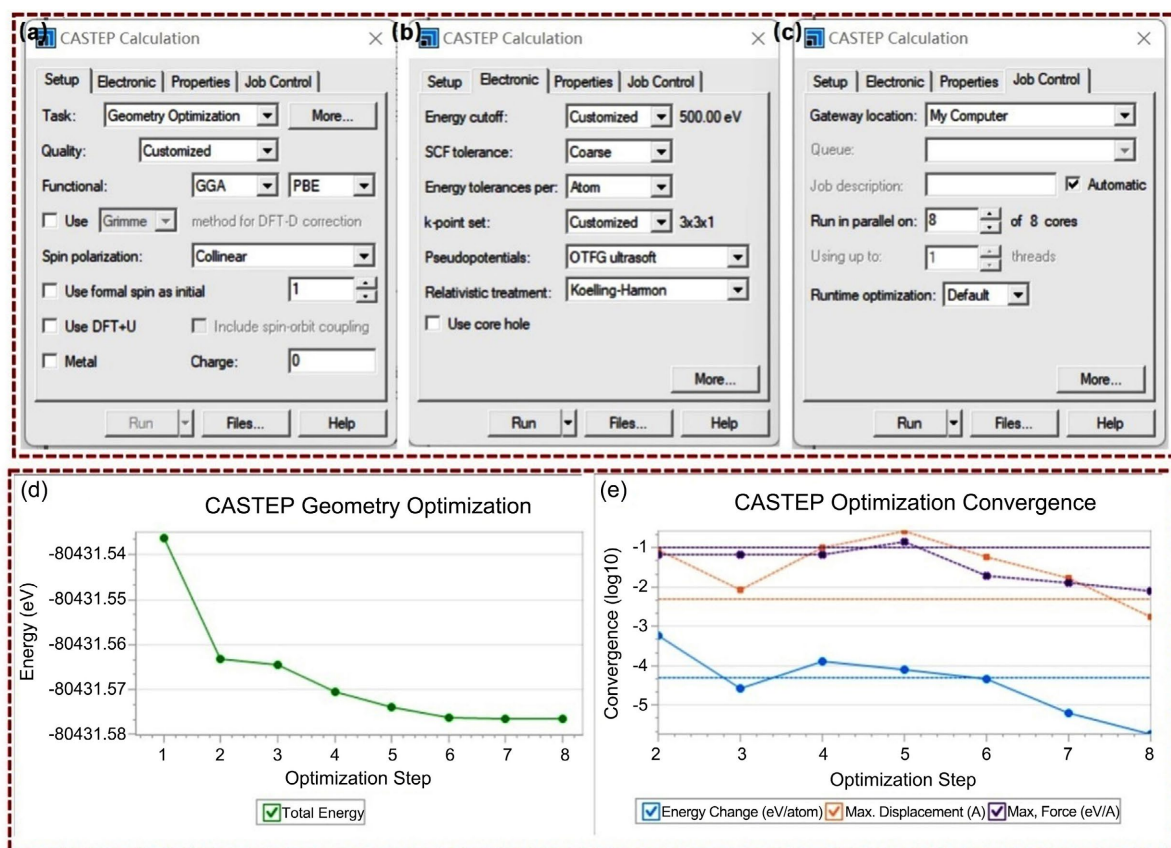


Figure 4. Structural optimization parameters (a)~(c), optimization process energy curve (d) and convergence parameter curve (e)

图 4. 结构优化参数(a)~(c)、优化过程能量曲线(d)和收敛参数曲线(e)

4.3. 析氢反应机理分析

4.3.1. H 原子在金属表面的吸附结构

H 原子分别在 Zn (001), Fe (111)和 Pt (111)面吸附, 设置的初始结构分别为图 5(a)~(c), H 原子在金属表面以顶位(top)方式吸附, 它们相应的 M-H 键长分别为 1.580 Å、1.630 Å 和 1.580 Å。我们采用 MS07 的 CASTEP 模块对设置的初始结构进行几何优化计算, 得到最优的结构, 分别为图 5(d)~(f)。最优结构中, H 原子在 Zn (001)和 Pt (111)面还是以顶位方式吸附, 相应的 M-H 键长分别为 1.667 Å 和 1.572 Å。但是, H 原子分别 Fe (111)面吸附变为桥位(bridge)吸附, H 原子处于表面 Fe-Fe 键上方, 与两个 Fe 原子均产生吸附, 相应的 Fe-H 键长为 1.646 Å 和 1.907 Å。从 M-H 键长可以看出, H 在 Zn (001)相互作用较弱, 而在 Fe (111)和 Pt (111)面相互作用较强。

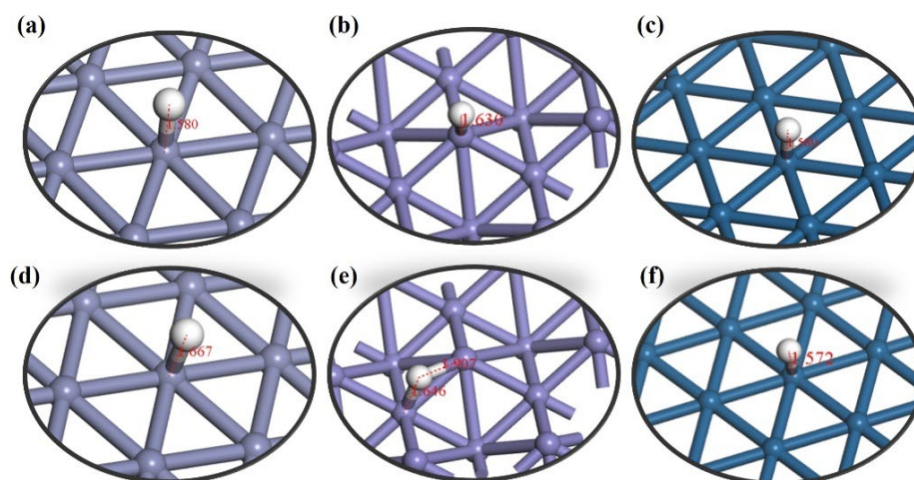


Figure 5. Initial structures (a)~(c) and optimal structures (d)~(f) of H adsorption on three metal surfaces
图 5. H 原子在三种金属表面吸附的初始结构(a)~(c)和最优结构(d)~(f)

4.3.2. H 原子在金属表面的差分电荷密度

在 H 原子在三种金属表面吸附的最优结构基础之上,通过 VASP 软件计算了 H 原子吸附之后的差分电荷密度图。差分电荷密度的定义为: $\Delta\rho = \rho(M-H) - \rho(M) - \rho(H)$, 式中右边三项分别为 H 原子吸附在金属表面结构的电荷密度、金属表面结构和 H 原子的电荷密度。通过差分电荷密度图可以看出 H 原子在金属表面吸附过程中电荷得失区域。图 6 给出了 H 原子在三种金属表面吸附的差分电荷密度图,黄色区域表示电子聚集区域,蓝色区域表示电子流出区域。图 6(a)表示 H 原子吸附在 Zn (001)面时,电子在 H 原子和 Zn-H 键聚集,Zn (001)表面失去电子。图 6(b)中 H 原子在 Fe (111)以桥位吸附在表面两个 Fe 原子上,从图上电荷也聚集在两个 Fe-H 键,由于表面吸附较强,Fe 表面电荷流出对其内部电荷的转移产生显著影响。图 6(c)为 H 原子吸附在 Pt (111)面的差分电荷密度图,电荷聚集区域主要分布在 Pt-H 键上,而 H 和 Pt (111)均有一定程度的电荷流出,并且 Pt 表面电荷流出对其内部电荷的转移也产生显著影响。从差分电荷密度图上也可以看出, H 原子在 Zn (001)面相互作用较弱,在 Fe (111)面和 Pt (111)面相互作用较强。

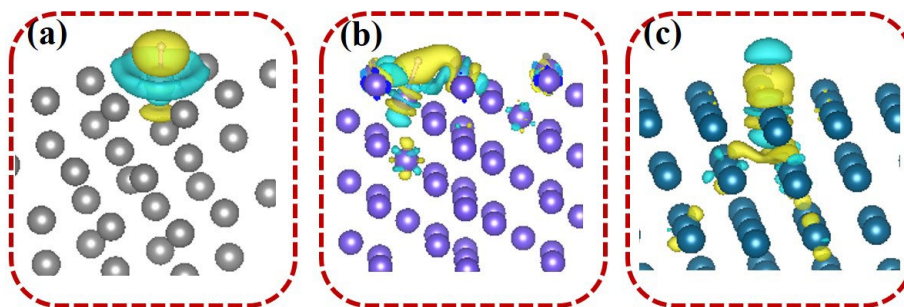


Figure 6. Differential charge density diagram of H atom adsorbed on metal surface (a) Zn (001), (b) Fe (111), (c) Pt (111)
图 6. H 原子在金属表面吸附的差分电荷密度图 (a) Zn (001), (b) Fe (111), (c) Pt (111)

4.3.3. 析氢反应吉布斯自由能变化值分析

吉布斯自由能够反映反应方向性和趋势。首先通过 MS07 计算得到了氢原子在三种金属表面的吸附能,结果如图 7(a)所示, H 原子在 Zn (001)表面吸附能为 0.75 eV,吸附过程能量升高,说明 H 原子在

Zn(001)表面吸附困难。而 H 原子在 Fe(111)和 Pt(111)表面吸附能分别为 -1.08 eV 和 -0.45 eV ，二者均放出能量，H 原子很容易吸附在这两种金属表面。然后通过公式(3)计算了三种金属表面析氢反应吉布斯自由能变化值(ΔG_{H^+})，在 Pt(111)面上，析氢反应吉布斯自由能为 -0.21 eV ，而在 Zn(001)和 Fe(111)表面，对应的析氢反应吉布斯自由能分别为 0.99 eV 和 -0.84 eV 。斯坦福大学 Jens K. Nørskov 教授[7]提出酸性条件金属表面析氢反应分为两个基元反应：(1) H^+ 离子在金属电极表面得电子生成 H 原子并吸附在电极表面；(2) 吸附在电极表面的 H 原子结合生成 H_2 。从图 7(b)上可以看出，这两步反应对应的吉布斯自由能是相反的，如果第一步为负值(曲线向下)，而第二步为正值(曲线向上)。综合考虑，吉布斯越接近于 0，对两步反应都有利。从图上可以看出， H^+ 离子得到电子生成 H 原子吸附在 Pt(111)面的反应吉布斯自由能变化值为负值，反应能够自发进行。但是，吸附的 H 原子脱附生成 H_2 的反应吉布斯自由能为正值(需要向上爬坡)，但是数值为 0.21 eV ，吉布斯自由能变化值较小，反应比较容易进行。而在 Zn(001)和 Fe(111)表面，由于吉布斯自由能变化值均远离 0，表明析氢反应两个基元反应中会有其中一个反应非自发进行，从而析氢反应速率较慢。因此，Pt(111)表面析氢反应速率最快，析氢过电位最低。

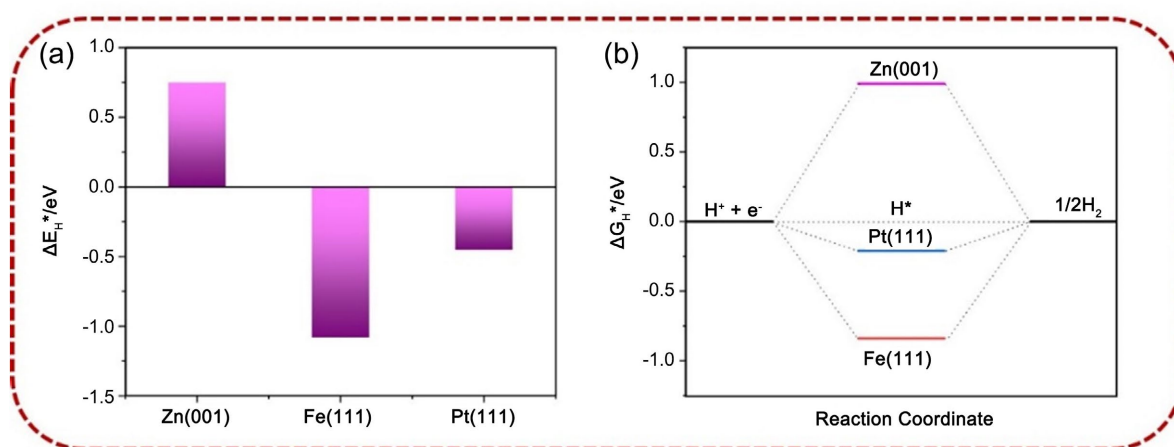


Figure 7. The adsorption energy of hydrogen atoms on the metal surface (a) and Gibbs free energy of hydrogen evolution reaction (b)

图 7. 氢原子在金属表面吸附能(a)和析氢反应吉布斯自由能(b)

4.4. 析氢反应的应用

我们通过分子模拟理解了不同金属表面影响析氢反应速率的原因，接下来引导学生进一步理论联系实际，用所掌握知识理解金属的腐蚀极化曲线和标准氢电极。

《金属腐蚀与防护》课本上给出了 Zn、Fe 和 Pt 三种金属的腐蚀极化图(图 8(a))，图中下方红色和绿色曲线是 Fe 和 Zn 作为阳极的极化曲线。上方黑色、红色和绿色曲线上 Zn、Fe 和 Pt 三种金属作为析氢腐蚀阴极的极化曲线。Fe 和 Zn 既可以作阳极，又可以作阴极，而除了王水外，Pt 不能够和常见酸中 H^+ 离子反应，因而 Pt 只能作析氢反应的阴极载体。在图 8(a)中阴极和阳极极化曲线交点对应的横坐标为腐蚀电流，腐蚀电流是阳极和阴极动力学共同作用的结果，析氢过电位主要影响阴极极化曲线的斜率。从图中可以看出阳极为 Fe，阴极析氢反应的电极为 Pt 时腐蚀电流最大，阴阳极为 Fe 的腐蚀电流次之，阴阳极为 Zn 的腐蚀电流最小。三种金属析氢反应腐蚀电流的差异分子机制的来源可以通过我们上述计算的不同金属表面析氢反应的吉布斯自由能变化值来解释。Pt 电极表面析氢反应吉布斯自由能变化值最小，析氢反应速率最快，因而腐蚀电流最大，而 Zn 电极表面析氢反应吉布斯自由能变化值最大，析氢反应速

率最慢,因而腐蚀电流最小。在生活中,常常在 Fe 管表面镀一层 Zn(镀锌管)来阻止 Fe 管的腐蚀,就是利用 Zn 表面较小的腐蚀电流。从图 8(a)的腐蚀极化图进一步拓展,让学生思考为何标准氢电极使用价格昂贵的 Pt 作为电子导体,而不是其他廉价金属。学生在高中已经建立起了标准氢电极概念。在标准氢电极中规定氢气压力为 100 kPa,水溶液中 H^+ 离子活度为 1,结构如图 8(b)所示。由于标准氢电极为气体电极,还规定了铂黑作为电子导体和电化学反应载体。但是即使学习了大学物理化学中电化学相关知识,学生还是不理解为何规定 Pt 为电子导体,而不是价格较便宜的 Ag 或者 Cu,此二种金属也不会与 H^+ 离子发生反应。引导学生用本文所掌握不同金属表面析氢反应吉布斯自由能变化值的差异来理解这个困惑,在 Pt 表面,析氢反应吉布斯自由能变化值最小,析氢反应最容易发生。

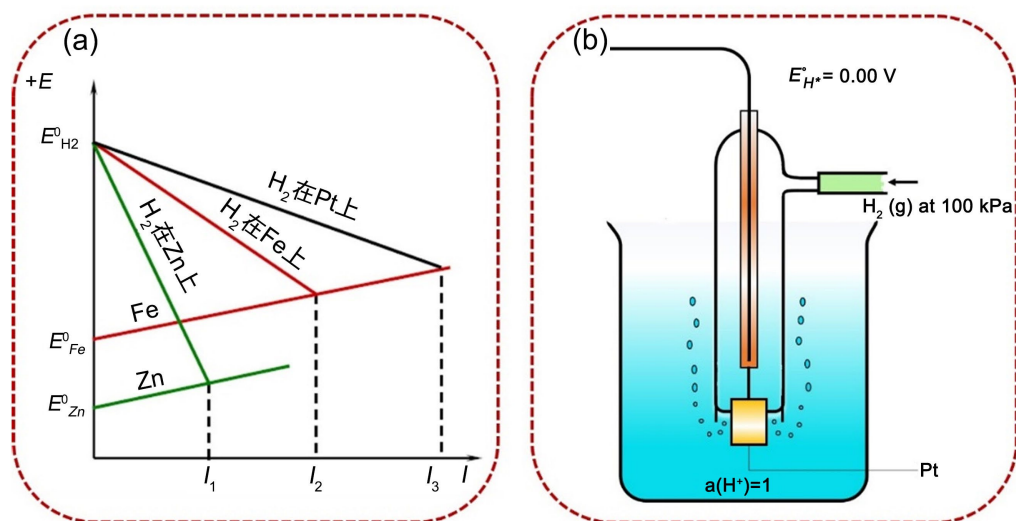


Figure 8. Three kinds of metal hydrogen evolution reaction corrosion polarization diagram (a) and standard hydrogen electrode diagram (b)

图 8. 三种金属析氢反应腐蚀极化图(a)和标准氢电极示意图(b)

5. 教学拓展

进一步结合贯彻新发展理念、构建新发展格局、推动高质量发展的内在要求。结合碳达峰与碳中和目标,引导学生思考在减少 CO_2 排放问题上,我们能提出什么方案。2020 年 9 月 22 日,习主席在第七十五届联合国大会上宣布,中国力争 2030 年前二氧化碳排放达到峰值,努力争取 2060 年前实现碳中和目标(即碳达峰与碳中和)。可再生能源使用是减少 CO_2 排放的有效手段,常见可再生能源风能和太阳能主要用于发电,产生的电能简称绿电,它们 CO_2 排放量接近于零。但是,由于太阳能和风能的不稳定性,绿电波动性较大,从而影响电网安全。绿电并网增大调峰、调频难度,风电的间歇性、随机性增加了电网调频的负担。绿电储存是其面临的一个重大问题,绿电通过电解水制备氢气(简称绿氢)是一种可行的能源转化方法。绿电电解水制备绿氢的关键技术为电催化剂。Pt 是析氢反应最好的催化剂,但是由于其价格昂贵,限制了大规模应用。科学家致力于开发价格低廉和高效电解水制氢催化剂,单原子催化剂是一种高效电解水制氢催化剂。来自新加坡国立大学和北京化工大学的科学家[8]通过将 Pt 原子锚定在 NiFe 层状双氢氧化物上而制备了单原子催化剂。采用了多种轴向配体(分别为卤素离子和氢氧根)来提升析氢反应活性。当轴向配体为 Cl 原子时, Pt-Cl 单原子催化剂具有最佳析氢反应活性,其性能接近于 Pt(111),促进了析氢反应进行(结果如图 9 所示,蓝色球为 Pt 原子,绿色球代表卤素或者氧原子)。单原子 Pt 负载的载体上,可提高贵金属 Pt 的分散性和原子利用率,从而提高析氢反应活性的同时减小催化剂成本。

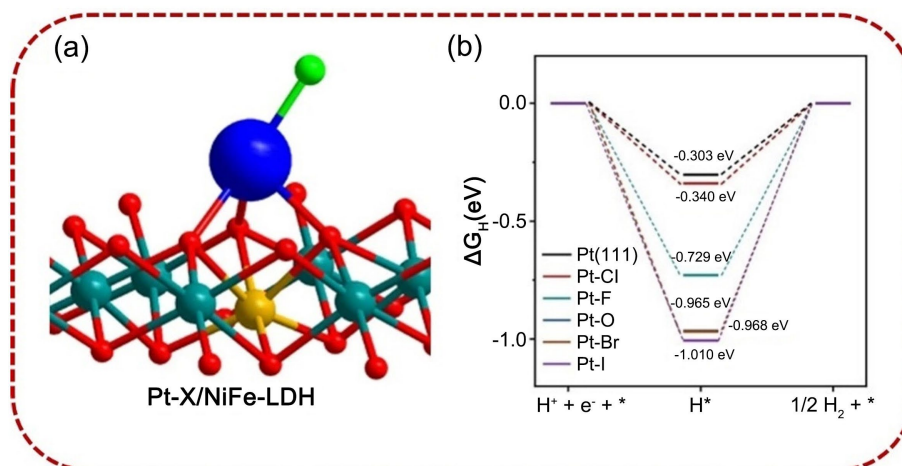


Figure 9. (a) NiFe layered double hydroxide supported Pt single atom; (b) Gibbs free energy of hydrogen evolution reaction [8]
图 9. (a) NiFe 层状双氢氧化物负载 Pt 单原子示意图; (b) 催化剂析氢反应的吉布斯自由能[8]

6. 教学实践与效果

本教学设计在《金属腐蚀与防护》课程的“电化学腐蚀机理”章节中实施，具体安排在“析氢反应过电位”知识点的讲解之后，作为理论教学的延伸与深化。教学过程中，教师首先通过 PPT 展示 Materials Studio 软件界面、建模流程、计算参数设置及结果分析，引导学生理解不同金属表面析氢反应的微观机制。课堂中穿插互动环节，鼓励学生就模拟结果展开讨论。学生反馈表明，该教学设计显著提升了他们对抽象概念的理解能力。课堂讨论中，学生重点关注了 H 原子在不同金属表面的吸附位点与吉布斯自由能变化之间的关系，并就“为何 Pt 的析氢过电位最低”等问题展开热烈讨论。课后收集的匿名问卷显示，92% 的学生认为“分子模拟辅助教学有助于理解析氢反应机理”，88% 的学生表示“通过模拟计算直观感受到金属表面结构与催化性能的关联”。此外，有学生课后提出进一步探索的建议，如“是否可模拟合金表面的析氢行为”等，体现出该教学方式有效激发了学生的科研兴趣与创新思维。综上所述，本教学设计通过分子模拟技术将抽象理论可视化、量化，显著提升了教学质量与学生参与度。

7. 结语

通过分子模拟计算探讨了《金属腐蚀与防护》中不同金属析氢反应过电位差异原因，解决了学生对此问题的困惑，加深了学生对析氢反应知识理解。同时理论联系实际，将所掌握知识应用于理解金属的腐蚀极化曲线和标准氢电极中电极材料选择问题。进一步针对碳达峰与碳中和目标，用所掌握知识提出解决方案。最后，引导学生了解最新研究动态，通过单原子 Pt 负载于载体上可降低催化剂成本，使绿电电解水制绿氢在实际过程中可行。通过学以致用，激发了学生学习兴趣。联系国家战略需求和最新科研动态，为学生认识未来开启了一扇窗。

基金项目

兰州交通大学 2025 年研究生教育教学质量提升工程项目(编号: JG202517)。

参考文献

- [1] 田亚利, 张聪杰. Gauss View 软件在分子和晶体结构模拟中的使用探究[J]. 化学教学, 2015(6): 90-93.
- [2] 潘睿, 郑倩, 彭蜀, 等. Materials Studio 软件在“金属”教学中的应用[J]. 化学教育, 2020, 41(7): 51-55.
- [3] 徐刚. 分子模拟软件 Discovery Studio 在生物有机化学教学中的新应用[J]. 化工高等教育, 2021, 38(1): 133-137.

-
- [4] 曲家利, 周丽霞, 隋刚, 等. 高分子玻璃化转变过程的分子动力学模拟本科教学实验[J]. 高分子通报, 2020(3): 63-66.
 - [5] 郭勇, 王沛芳, 饶磊, 等. 分子模拟在芳香类有机污染物教学中的应用[J]. 教育现代化, 2018, 5(49): 253-255.
 - [6] Medford, A.J., Moses, P.G., Jacobsen, K.W. and Peterson, A.A. (2022) A Career in Catalysis: Jens Kehlet Nørskov. *ACS Catalysis*, **12**, 9679-9689. <https://doi.org/10.1021/acscatal.2c02217>
 - [7] Nørskov, J.K., Bligaard, T., Logadottir, A., Kitchin, J.R., Chen, J.G., Pandalov, S., *et al.* (2005) Trends in the Exchange Current for Hydrogen Evolution. *Journal of The Electrochemical Society*, **152**, 23-26. <https://doi.org/10.1149/1.1856988>
 - [8] Zhang, T.Y., Jin, J., Chen, J.M., *et al.* (2022) Pinpointing the Axial Ligand Effect on Platinum Single-Atom-Catalyst towards Efficient Alkaline Hydrogen Evolution Reaction. *Nature Communications*, **13**, Article No. 6875.