

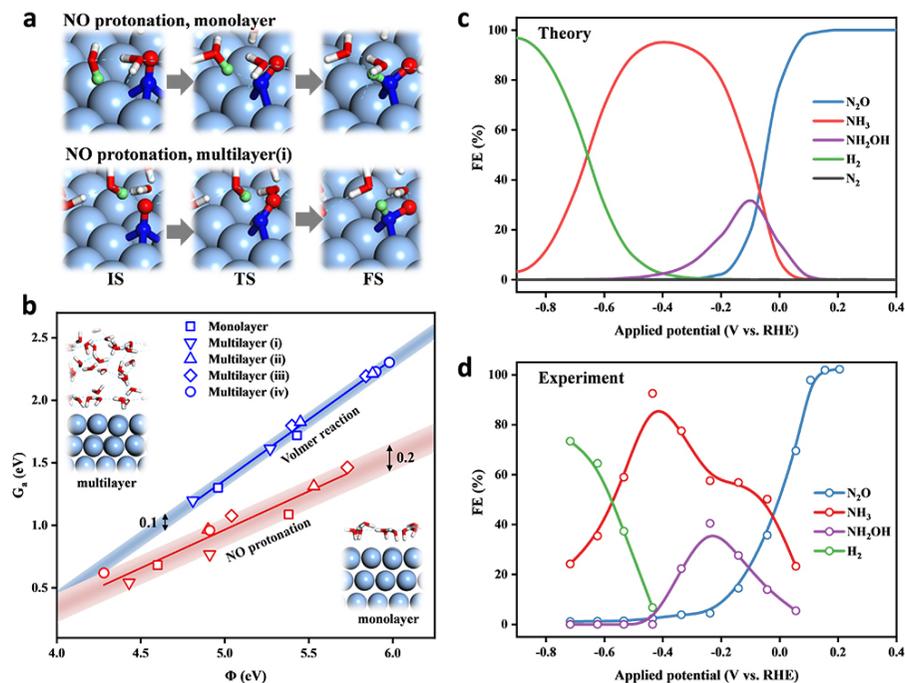


[首页](#) | [概况简介](#) | [科技布局](#) | [人才队伍](#) | [科技动态](#) | [成果发布](#) | [规章制度](#) | [人才招聘](#) | [新闻动态](#) | [联系我们](#)

研究人员揭示电催化一氧化氮还原反应的电势依赖性

时间：2021年08月02日 14:11 栏目：科技动态 浏览次数：8

近日，大连化物所催化基础国家重点实验室理论催化创新特区研究组（05T8组）肖建平研究员团队在电催化人工氮循环研究方面取得新进展，揭示了电催化一氧化氮还原反应的电势依赖性。



氮氧化物 (NO_x) 是一种常见的环境污染物，传统的去除 NO_x 的方式是将其转化为氮气直接排放到空气中，即热催化脱硝技术。肖建平团队在前期的工作中提出并实现了一氧化氮 (NO) 高效电催化还原生成氨气 (Angew. Chem. Int. Ed., 2020)，建立了一条新型电催化人工氮循环路径。在此基础上，该团队继续研究实现 NO_x 直接电还原得到 N_2 路线的可能性。实验研究发现，该路线在各种电势下都很难实现，因此理解反应产物的电势依赖性尤为重要。

本工作中，团队利用 Ag 电极作为模型催化剂，结合第一性原理计算与微观动力学模拟，首先验证了电催化能垒计算中采用单层水模型的可靠性；随后，考虑完整的 NO 还原反应网络，计算得到其所有的能量信息；最后建立了微动力学模型。研究发现，计算得到的产物选择性随外加电势的变化趋势与实验结果一致：随着电势降低，NO-NO 的热化学耦合反应受到抑制而氨气的选择性升高；进一步降低电压，电催化析氢反应 (HER) 就会占主导作用，这是由于 HER 的电荷转移系数越大，受电势的影响越强。该模型还有助于理解其他电催化还原反应的电势依赖性，为实现电催化 NO_x 转化的选择性控制提供了理论基础。

相关研究以 “Unveiling Potential Dependence in NO Electroreduction to Ammonia” 为题，于近日发表在《物理化学快报》(The Journal of Physical Chemistry Letters) 上。该工作的第一作者是大连化物所 05T8 组 2018 级联合培养博士研究生龙军。以上工作得到中科院洁净能源创新研究院合作基金、国家自然科学基金，国家重大研发计划等项目的支持。(文/图 龙军)

文章链接: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c01691>



依托单位:



共建单位:



Copyright © 中国科学院洁净能源创新研究院 版权所有. 辽ICP备05000861号-5 Dalian National Laboratory For Clean Energy, CAS. All Rights Reserved.