

锐意创新 协力攻坚
严谨治学 追求一流

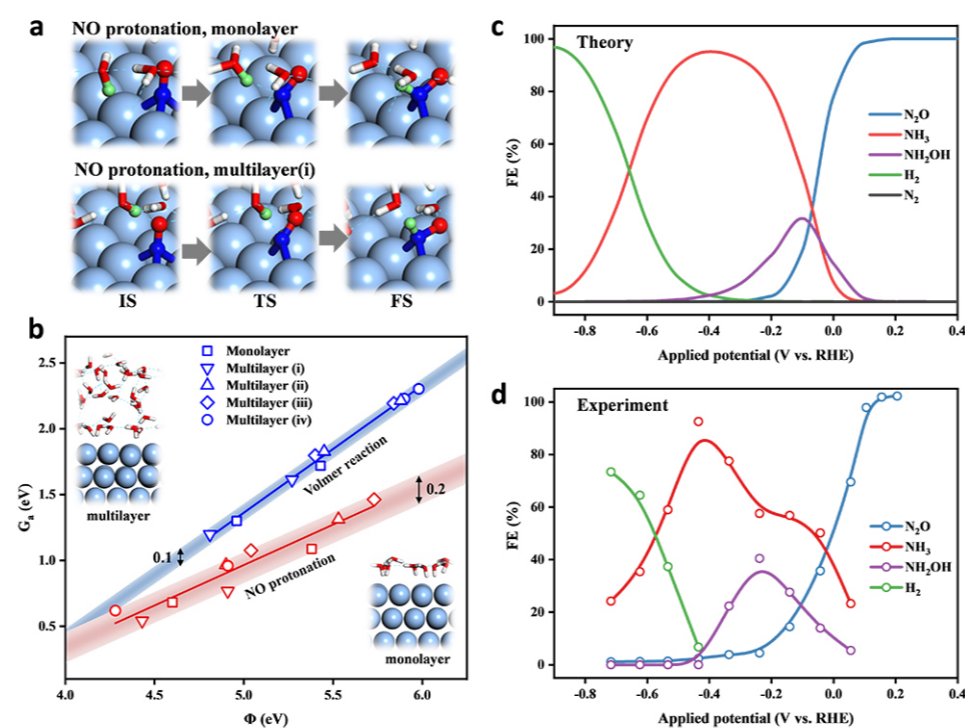
请输入关键字

[首页](#) (</>) > [新闻动态](#) (</>) > [科研进展](#) (</>)

我所揭示电催化一氧化氮还原反应的电势依赖性

发布时间: 2021-07-27 | 供稿部门: 05T8组 | [【放大】](#) | [【缩小】](#) | [【打印】](#) | [【关闭】](#)

近日, 我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.* (<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202002337>), 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N₂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我所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> (<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c01691>).

(<http://www.dicp.cas.cn/>)

地址: 辽宁省大连市沙河口区中山路457号 邮编: 116023
电话: +86-411-84379163 / 9198 传真: +86-411-84691570
邮件: dicp@dicp.ac.cn (<mailto:dicp@dicp.ac.cn>)



(<https://bszs.cmethod=shov>)

