

---

# 二氧化碳如何高效“变身”工业原料？

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10751.html>

*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

二氧化碳如何高效“变身”工业原料？。能源短缺和全球变暖已成为人类面临的两大难题。由于化石能源的过量使用，一方面人类赖以生存的传统化石燃料正消耗殆尽；另一方面大气中二氧化碳（CO<sub>2</sub>）浓度升高，导致全球的温室效应，给地球带来了不可逆的生态环境问题。若利用可再生能源将CO<sub>2</sub>转变成工业燃料，既解决了其在大气中浓度过高的问题，也缓解了新能源替代化石能源短缺的迫切需求。

CO<sub>2</sub>电催化还原为碳基燃料和化工原料被科学家们认为是一种重要的潜在技术途径。然而，目前CO<sub>2</sub>还原电催化剂性能不足和系统成本高昂制约了该技术的应用。如何设计高效的催化剂，以提高反应的能量转换效率以及产物选择性是亟待解决的重要问题。

南方科技大学材料科学与工程系教授梁永晔团队、化学系副教授王阳刚团队与合作者共同发展了分子分散电催化剂的体系以及分子工程调控方法，构建了基于金属酞菁的高性能CO<sub>2</sub>还原电催化剂，使得一氧化碳（CO）产物选择性在大电流密度下接近100%，接近工业CO<sub>2</sub>还原的要求。相关研究成果8月11日在线发表于《自然—能源》。

## 寻找最佳催化剂

自19世纪末期以来，大气中CO<sub>2</sub>的浓度已从280 ppm增加至目前的400 ppm，探索有效消耗CO<sub>2</sub>并将其高效转化为人类可用之物的技术，成为全球科学家们关注的重点。

CO<sub>2</sub>电催化还原，因可以使用来自可再生能源的电能在常温常压的反应条件下，便可将CO<sub>2</sub>一步转化为如CO、碳氢化合物等高附加值碳基燃料及化学品，被认为是非常有前途的技术方法。

将CO<sub>2</sub>还原为重要的工业原料‘一氧化碳’是相对较成熟的技术，目前反应选择性与能量转换效率较其他产物的转化高。但离实际应用仍需要解决大电流密度工作条件下的催化剂产物选择性以及稳定性的问题。论文通讯作者之一梁永晔告诉《中国科学报》。

的确，在CO<sub>2</sub>电催化还原的应用中，催化剂是关键环节，其必须具有高的选择性、低的过电位和好的稳定性，从而才能够高效产生有价值的碳基产品。近年来，CO<sub>2</sub>还原电催化剂是一个研究热点，并取得了诸多研究进展。

梁永晔介绍，目前较好的催化剂包括基于贵金属如金、银的材料，以及单原子电催化剂等，但还存在诸多不足，比如催化剂成本过高而难以广泛应用，或材料结构复杂、选择性不够理想等。

---

最近，诸如酞菁钴(CoPc)等金属大环配合物分子被研究发现可作为催化剂在气体扩散电极下将CO<sub>2</sub>转化为CO。但在大电流下，它们的稳定性较差。此外，由于对单原子催化剂以及金属大环配合物催化剂的结构与催化性能关系认识不足，制约了催化剂性能的优化。梁永晔说。

针对这些问题，前期，梁永晔团队研究发现酞菁钴-碳纳米管(CoPc/CNT)的复合催化剂展现出了比纯CoPc分子更高的CO<sub>2</sub>还原催化性能，而且这种复合方法还可揭示一系列MePc(Me = Mn, Fe, Co)分子的本征活性，大大提高了CO<sub>2</sub>还原成CO的电催化性能。

这一次，梁永晔团队在過去的基础上，继续有了新的探索发现。

接近工业要求的理想催化剂

纯金属大环配合物的CO<sub>2</sub>还原电催化剂存在分子导电性差、易聚集等问题制约了其催化性能，而热解制备的单原子催化剂结构复杂、难调控也限制了此类催化剂的研究进展。

基于以上现状，梁永晔团队首先通过将金属大环配合物分子级分散于导电碳纳米管上得到分子分散型电催化剂(MDE)，双球差电镜表征揭示其结构与单原子电催化剂类似。具有明确Ni-N<sub>4</sub>结构的酞菁镍(NiPc)分子MDE对CO<sub>2</sub>还原为CO具有高选择性，催化活性和选择性要优于Ni单原子催化剂和聚集型的NiPc分子。

但在应用时，发现该催化剂稳定性较差。梁永晔说，为此，他们进一步使用分子工程手段，通过在酞菁(Pc)上引入不同的取代基来调控其催化性能。

研究发现，引入吸电子特性的氰基(CN-)取代可提高其活性，但稳定性仍然不好。而引入给电子特性的甲氧基(OMe-)取代可以有效提高稳定性，并可进一步改善其选择性，实现近乎100%的CO选择性。

接着，研究人员继续将催化剂应用于气体扩散电极装置进行测试，发现NiPc-OMe MDE在还原电流密度在10至300 mA cm<sup>-2</sup>范围内的CO产物选择性可以达到99.5%以上，且在150 mA cm<sup>-2</sup>的还原电流下能稳定工作40小时。

梁永晔表示，这样的结果接近工业CO<sub>2</sub>还原的要求，具有产业化的前景。

为了找到现象背后的科学原理，梁永晔与王阳刚团队、俄勒冈大学教授冯振兴团队进行合作，进一步结合理论计算和原位同步辐射表征，深入揭示了取代基调控催化性能的机理。

研究发现，具有Ni-N<sub>4</sub>结构的酞菁镍分子分散型电催化剂(NiPc MDEs)的CO<sub>2</sub>还原起峰电位与Ni中心的部分还原紧密相关，而不简单取决于理论计算中的反应能垒。CN-取代可以使分子更容易被还原，因此具有更正的起峰电位。此外，OMe-取代可以提高催化过程中Ni-N键强度以及促进CO中间体脱附，从而提高了催化稳定性。

机理的揭示也将为相关电催化剂的设计与优化提供指导。

目前测试的电流密度以及工作时间受到器件工艺的限制，仍需进一步优化其测试条件，以测试在更大电流密度以及更长工作时间的性能。梁永晔说，下一步，他们将继续优化催化剂设计，实现更高的催化活性，并进一步探索制备其他还原产物的条件。同时，加强在实际应用器件中的研究

---

, 推动此类催化剂的应用。(来源: 中国科学报 韩扬眉)

相关论文信息: <https://doi.org/10.1038/s41560-020-0667-9>

版权声明: 凡本网注明来源: 中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品, 网站转载, 请在正文上方注明来源和作者, 且不得对内容作实质性改动; 微信公众号、头条号等新媒体平台, 转载请联系授权。邮箱: [shouquan@stimes.cn](mailto:shouquan@stimes.cn)。

作者: 梁永晔等 来源: 《自然—能源》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有, 请勿用于商业用途, [爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发