大连化物所等发现二氧化碳电催化还原制甲酸双火山曲线

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/11937.html

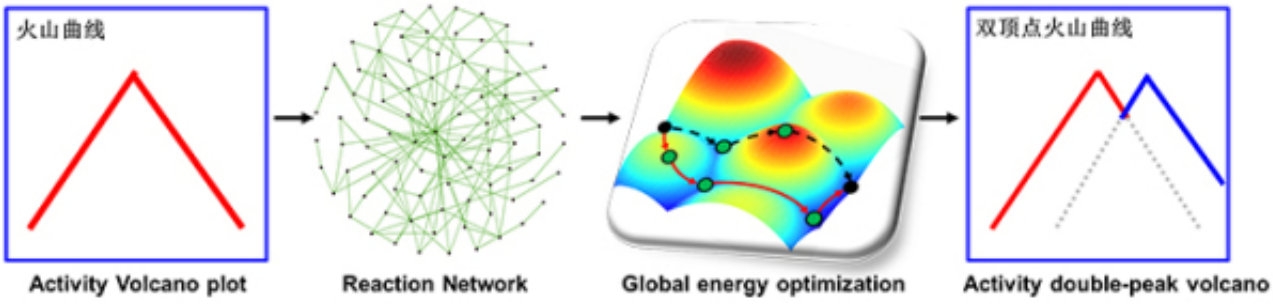
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所催化基础国家重点实验室理论催化创新特区研究组研究员肖建平团队与浙江大学教授侯阳、美国纽约州立大学布法罗分校教授武刚合作，在二氧化碳电催化还原制甲酸的研究中取得进展。

在固体催化材料表面发生的化学反应均遵循Sabatier原理，即当催化剂的反应性较强时，反应受到脱附、扩散、耦合等基元步骤的影响，活性较低；当催化剂的反应性较弱时，反应物难以吸附和解离活化，也会致使催化活性相对较低。因此，为达到催化反应的最优反应活性，需选择一个适中的反应性。

研究证明，二氧化碳电催化还原制备甲酸过程遵循甲酸根（HCOO*）反应机理，即二氧化碳先质子化得到甲酸根（HCOO*），甲酸根再质子化得到甲酸（HCOOH）。以往研究人员普遍认为，二氧化碳先质子化得到羧基（COOH*）的过程仅产生CO，而不会得到甲酸。但是，此次理论研究表明，通过反应网络和能量最优算法分析，在低电压下大量的金属表面均是通过羧基（COOH*）过程得到甲酸，这解释了金属Pd上面二氧化碳电催化还原的特殊现象。该理论研究结果也与碱式碳酸铅表面的双火山曲线一致（*Nature Communications*，2020）。

该研究揭示了在具有反应复杂网络的情况下，由于反应路径的差异，传统的火山型曲线难以存在，取而代之的应该是多个顶点共存的火山型曲线。相关研究成果发表在《先进材料》（*Advanced Materials*）上。研究工作得到国家自然科学基金、中科院战略性先导科技专项（B类）“功能纳米系统的精准构筑原理与测量”和辽宁省“兴辽英才计划”等项目的支持。



大连化物所等发现二氧化碳电催化还原制甲酸双火山曲线

研究团队单位：大连化学物理研究所

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转发