
大连化物所揭示电催化- 氧化氮还原反应的电势依赖性

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/14886.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在电催化人工氮循环研究方面取得新进展，揭示了电催化-氧化氮还原反应的电势依赖性。

氮氧化物（NO_x）是常见的环境污染物

，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.](#)

），建立了新型电催

化人工氮循环路径。在此基础上，团队进

一步实现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。

科研团队利用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，验证了电催化能垒计算中采用单层水模型的可靠性；考虑完整的NO还原反应网络，计算得到其所有的能量信息；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）便占主导作用，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

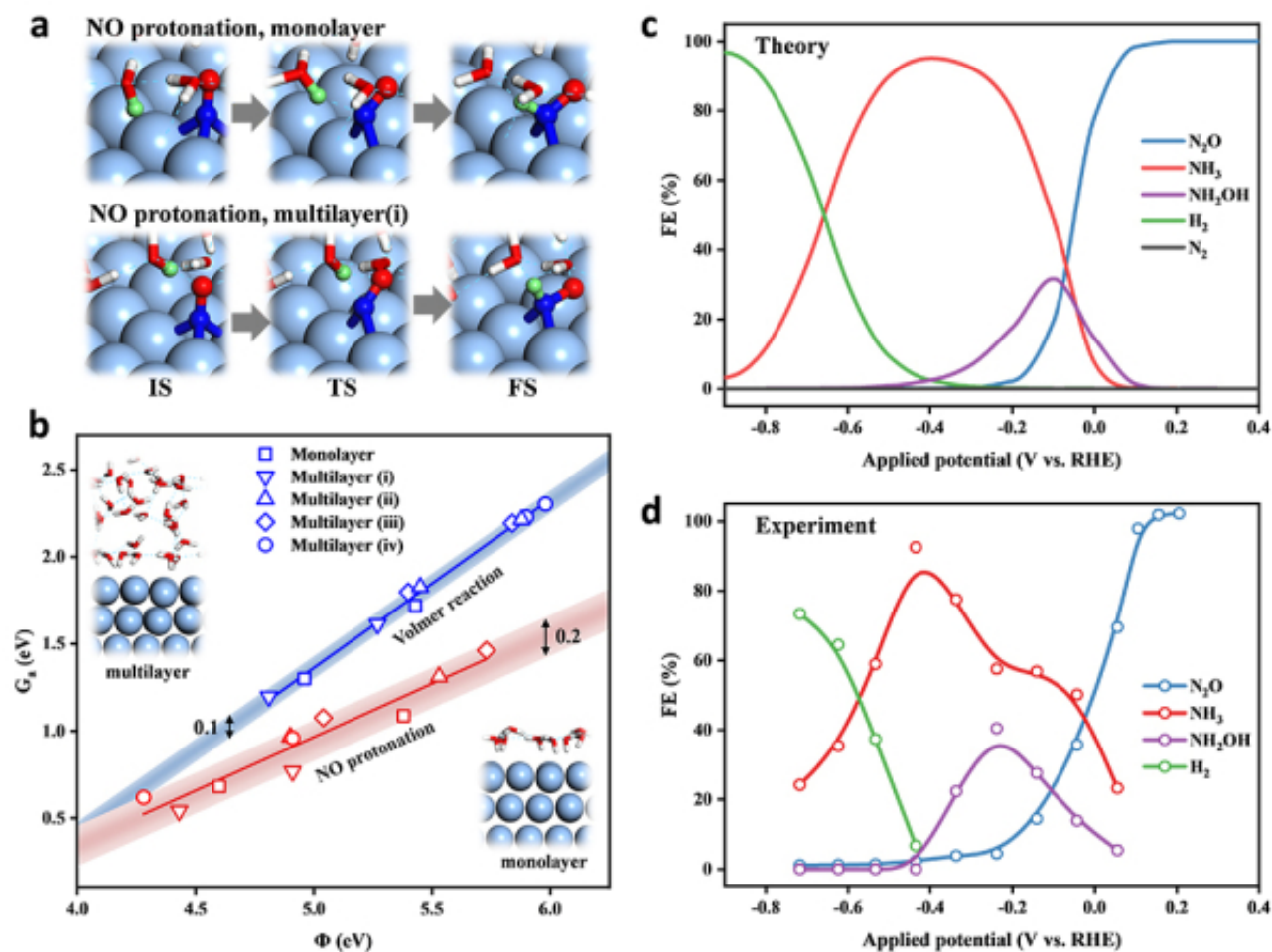
助于理解其他电催化还原反应的

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。

相关研究成果以 *Unveiling Potential Dependence in NO Electroreduction to Ammonia*

为题，发表在《物理化学快报》上。研究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的支持。

[论文链接](#)



a-b、验证单层水模型计算电化学能垒的可靠性；c-d理论和实验法拉第效率对比

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](https://www.iikx.com)转发