研究揭示电催化一氧化氮还原反应电势依赖性

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/14895.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！

研究揭示电催化一氧化氮还原反应电势依赖性。近日，中国科学院大连化学物理研究所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，揭示了电催化一氧化氮（NO）还原反应的电势依赖性。相关研究结果发表在《物理化学快报》上。

氮氧化物（NOx）是一种常见的环境污染物，传统去除NOx的方式是将其转化为氮气（N2）直接排放到空气中，即热催化脱硝技术。在前期工作基础上，该团队希望研发实现NOx直接电还原得到N2的路线。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。

研究中，团队利用银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，电催化析氢反应就会占主导作用，这是由于该反应电荷转移系数越大，受电势影响越强。

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NOx转化的选择性控制提供了理论基础。（来源：中国科学报龙军）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c01691

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。
作者：肖建平等 来源：《物理化学快报》

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