

---

# 科学家证明从电催化脱硝转向合成氨过程的必要性

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/21626.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！*

科学家证明从电催化脱硝转向合成氨过程的必要性。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氮氧化物（NO<sub>x</sub>）转化研究方面取得新进展，揭示了过渡金属电催化脱硝的机理限制并强调了合成氨的重要性。相关成果发表在《自然—通讯》上。

NO<sub>x</sub>的处理是一个重要的环境问题，也是实现高效二氧化碳电还原的必要前提。团队在前期的工作中开发了基于图论的反应网络研究新型算法，应用这个算法开展了一氧化氮电还原的研究，提出了合成氨的新线路，并持续在该方向上开展了多维度的研究。

该工作中，团队继续讨论了脱除NO<sub>x</sub>的另一条重要的路线：NO<sub>x</sub>转化为环境友好的N<sub>2</sub>，即直接电催化脱硝。

科研人员使用了反应相图来分析系列金属催化剂上反应机理的演变，并以Pd和Cu为例，研究了电势和pH效应。综合理论分析和实验结果发现，在所有金属上N<sub>2</sub>都是通过N<sub>2</sub>O\*进一步转化生成的，且与N<sub>2</sub>O相比，N<sub>2</sub>选择性较低。

该工作还揭示了低N<sub>2</sub>选择性的起源。一方面，从能量的角度来看，所有金属表面反应性对N<sub>2</sub>的产生非常不利：金属表面对N<sub>2</sub>OH\*的吸附始终太弱，抑制了N<sub>2</sub>O\*质子化活性；此外，O\*和OH\*吸附能之间的强关联性使得强反应性金属表面上的活性位点被O\*/OH\*毒化，或者导致N<sub>2</sub>O\*在吸附较弱的金属上很难解离，这两种性质协同使所有金属对N<sub>2</sub>O更具选择性。研究发现，相比于N\*-NO偶联，N\*质子化使得Cu表现出高NH<sub>3</sub>选择性。另一方面，电位、pH和NO分压等实验条件的优化可以略微提高N<sub>2</sub>的选择性，但不足以超过N<sub>2</sub>O或NH<sub>3</sub>。对NO电催化还原中低N<sub>2</sub>选择性的深入理解可以作为未来催化剂设计的提供参考。更重要的是，氨合成的特殊活性为建立反向人工氮循环提供了一条可行的途径，这可以在非集成式氨合成中发挥关键作用。

基于上述研究，团队建议未来可探索设计能打破金属催化剂构效关系的新催化剂，或者发展非集成氨合成的新路线。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-023-35785-w>

作者：肖建平等 来源：《自然—通讯》

---

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](http://www.iikx.com)转发