# 研究揭示单原子合金催化二氧化碳电还原制一氧化碳机理

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/21820.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！*

**研究揭示单原子合金催化二氧化碳电还原制一氧化碳机理**

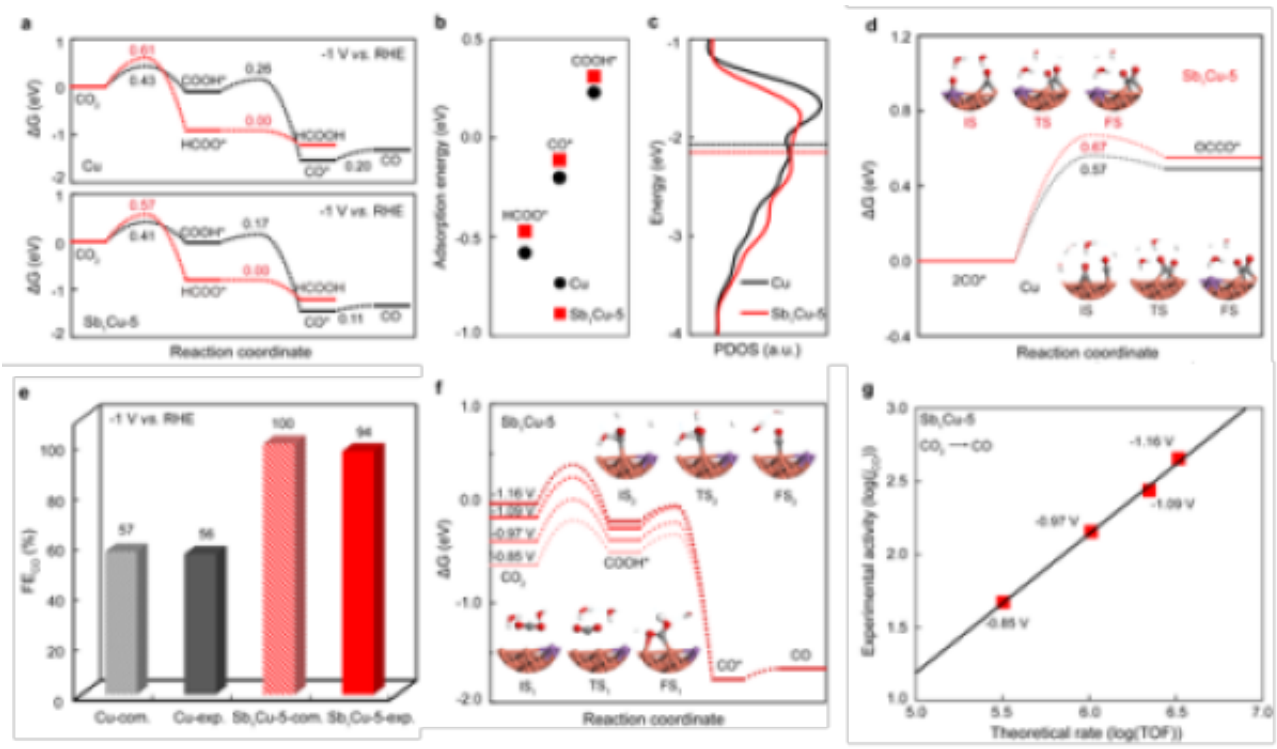
。近日，中国科学院大连化学物理研究所理论催化创新特区研究组研究员肖建平团队与中国科学技术大学教授曾杰团队、电子科技大学教授夏川团队合作，在二氧化碳（$CO_2$）转化制一氧化碳（CO）研究中取得新进展，研发出单原子合金催化剂$Sb_1Cu$，实现了$CO_2$高活性、高选择性还原制备CO，并探究了该过程的理论机理。

利用可再生能源实现$CO_2$高效电还原，是减缓温室效应并实现“双碳”目标的重要手段之一。肖建平团队的前期工作发现了$CO_2$电催化还原制甲酸的双顶点活性趋势（*Nature Communications*、*Advanced Materials*），揭示了单原子合金$Pb_1Cu$电催化$CO_2$还原制甲酸的高活性原因（*Nature Nanotechnology*）。

本工作探究了单原子合金催化剂$Sb_1Cu$电催化$CO_2$还原表现出高CO选择性的原因。研究发现，$Sb_1Cu$电催化$CO_2$到CO的活性位为与单原子Sb相邻的Cu位点，并揭示了$Sb_1Cu$相比于Cu可以有效减弱CO*的吸附能，降低CO*的覆盖度，抑制C-C偶联反应，从而提升了CO的选择性。通过电荷外插值法，该研究计算了不同工作电势下的反应能垒，通过微观动力学模拟得到的理论速率也和实验结果有较好的吻合。该研究为设计高活性和特定选择性电催化材料提供了新思路。

相关研究成果以*Selective $CO_2$ electrolysis to CO using isolated antimony alloyed copper*为题，发表在《自然-通讯》（*Nature Communications*）上。研究工作得到国家重点研发计划、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”、中科院洁净能源创新研究院合作基金、榆林创新院人工智能科技专项等的支持。

论文链接




研究揭示单原子合金催化二氧化碳电还原制一氧化碳机理

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