
中国科大提出硼配位铜单原子催化剂高效制备甲烷

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/23711.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！

中国科大提出硼配位铜单原子催化剂高效制备甲烷。

近日，中国科学技术大学教授曾杰研究团队与电子科技大学教授夏川团队及中国科学院大连化学物理研究所研究员肖建平团队合作，提出了一种硼配位掺杂提升铜单原子催化剂产甲烷性能的策略。相关成果日前发表于《自然—通讯》。

将二氧化碳电催化还原为高附加值的燃料和化学品，为能源和环境问题提供了一种可持续的解决方案。在二氧化碳还原的众多产物中，甲烷不仅具有最高的热值，同时也是制造包括芳烃在内的许多化工产品的重要原料。此外，甲烷作为天然气的主要成分，与现有的储存、分配和消费基础设施具有良好的兼容性。因此，将二氧化碳高选择性电化学转化为甲烷是一种兼顾环境与能源问题的有效途径。

二氧化碳深度还原至甲烷的关键步骤为表面吸附的一氧化碳中间体质子化生成氢化碳氧中间体。主要竞争反应过程包括一氧化碳中间体二聚生成二碳产物以及一氧化碳中间体从催化剂表面直接脱附生成气态一氧化碳。铜基单原子催化剂可以抑制一氧化碳中间体偶联，有望实现将二氧化碳高效还原为甲烷。然而，典型四氮原子配位铜单原子结构对一氧化碳中间体吸附太弱，一氧化碳中间产物易直接脱附，且伴随着过高的产氢副反应。

在此次研究中，研究人员提出了硼配位掺杂的策略，用低电负性硼原子部分取代四氮原子配位铜单原子结构中的氮原子，以促进单原子位点对关键中间体的吸附，进而提升铜单原子催化剂二氧化碳产甲烷性能。

研究人员首先基于全局能量优化分析的计算策略以及不同二氧化碳电催化还原反应中间体的吸附能，预测了一系列硼、氮配位的铜单原子位点甲烷路径的热力学趋势，结果表明硼配位原子的引入将提升铜单原子位点对于关键一氧化碳中间体的吸附，进而促进二氧化碳电催化还原到甲烷的过程。紧接着，研究人员利用共掺杂热解的方式成功制备出了硼-氮共配位的铜单原子催化剂。

电催化测试结果表明，与四氮原子配位铜单原子结构相比，硼、氮共配位的铜单原子结构对甲烷产物表现出优异的性能，在-1.46伏时显示出73%的峰值甲烷法拉第效率，在-1.94伏时显示了-462毫安每平方厘米的最大甲烷偏电流密度。相关实验进一步表明硼、氮共配位的铜单原子结构具有更高的本征活性、硼-氮共配位的铜单原子催化剂的结构稳定性。

研究人员介绍，该项工作为提高铜基材料对特定二氧化碳电还原产物选择性提供了一条切实可行的指导思路。(来源：中国科学报 王敏)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-023-39048-6>

作者：曾杰等 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](https://www.iikx.com)转发