

---

# 研究揭示电催化二氧化碳和硝酸盐共还原制甲胺反应机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/23723.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！*

研究揭示电催化二氧化碳和硝酸盐共还原制甲胺反应机制。

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员肖建平团队，在二氧化碳和硝酸盐C-N偶联转化为高附加值产物研究方面取得新进展，揭示了CoPc-NH<sub>2</sub>催化剂上C-N偶联生成甲胺的反应机理。相关成果发表在ACS Catalysis上。

二氧化碳是导致温室效应的主要气体之一，对全球气候变化造成的负面影响不容忽视。电催化二氧化碳还原反应制高附加值化学品或燃料，是缓解环境和能源问题的一种有效方法。此外，氮氧化物(NO<sub>x</sub>)的转化处理也是一种缓解环境和能源问题的方法。所以，电催化NO<sub>x</sub>和二氧化碳共还原不仅实现了含N和含C废物的同时转化，还通过C-N偶联制备了高附加值化学品，是一种绿色、可持续的物质能源转化方式，也是缓解温室效应以及实现双碳目标的重要手段之一。

本工作中，肖建平团队基于自主开发的图论和反应相图分析算法，并结合动力学能垒计算，得出CoPc-NH<sub>2</sub>是所研究的催化剂中生成甲胺活性最高的催化剂。并且，其更倾向于通过解吸的HCHO和NH<sub>2</sub>OH进行C-N偶联。同时，团队还发现了C-N偶联之后得到的中间体，如果通过PCET脱水过程进行转化，将比通过分子内脱水转化更有利于后续甲胺的生成。

另外，团队通过微动力学模拟，了解了电催化二氧化碳和硝酸盐共还原过程中几种产物法拉第效率随电压变化的趋势，并提出了增加C-N偶联的两个关键中间体的浓度和分压，可能有助于提高甲胺的选择性。

该工作从理论角度为甲胺的产生提供了新的见解，有望为催化剂或反应器设计提供帮助。(来源：中国科学报 孙丹宁)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acscatal.3c01592>

作者：肖建平等 来源：《ACS催化》

---

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