电催化一氧化氮还原合成氨和羟胺具有结构敏感性

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/27388.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！

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一氧化氮还原合成氨和羟胺选择性研究方面取得新进展，发现了电催化一氧化氮还原合成氨和羟胺具有结构敏感性，为电催化高效可控合成羟胺和电合成催化剂的设计提供理论指导。相关成果发表在《美国化学会杂志》。

羟胺是电催化经C-N偶联合成氨基酸、尿素等高值化学品的关键前驱体，因此，高选择性地合成羟胺变得非常重要。

本工作中，肖建平团队基于自主开发的恒电势模拟方法，并结合微动力学模拟，对不同晶型钴（hcp-Co，fcc-Co）及单原子钴（Co- SAC）的电催化合成氨的新路线（eNORR）进行了系统的研究。理论计算表明，六方紧密堆积钴相对于面心立方钴更有利于电子和质子的转移，同时具有更低的反应能垒。研究还发现，单原子钴可以高选择性地合成羟胺，主要是因为其带正电的活性中心使得关键中间体的吸附强度发生了改变。

该研究提出调控催化剂的局部结构和电子结构是有效调控eNORR的活性和选择性的关键。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/jacs.4c01986

作者：肖建平等 来源：《美国化学会杂志》

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