

---

# 电催化共还原硝酸根和二氧化碳合成尿素研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34777.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！

## 电催化共还原硝酸根和二氧化碳合成尿素研究取得进展

。近期，中国科学院合肥科学物质研究院固体物理研究所在常温常压电催化尿素合成领域取得进展，团队以三聚氰胺热解的二维g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>为载体，构筑了N配位结构的铜单原子催化剂（Cu-N<sub>3</sub> SAs），实现了高效的电催化尿素合成。

尿素作为应用最广泛的有机小分子之一，在农业施肥、医药制备和化工生产等领域发挥着不可替代的作用。目前，工业上主要通过Bosch-Meiser工艺合成尿素，但该工艺存在着高能耗、高污染等弊端。因此，开发以清洁能源驱动的可持续尿素合成方法至关重要。近年来，电催化技术因其反应条件温和、工业应用前景广阔而备受关注。然而，利用电催化共还原二氧化碳和硝酸根合成尿素仍面临着诸多挑战：涉及多电子反应过程、复杂的C-N耦联反应机制，且存在竞争性副反应，如二氧化碳还原反应、析氢反应及硝酸根还原反应等，这些会极大地降低尿素合成的性能。

基于此，研究人员利用

三聚氰胺热解产生的含有不饱和氮配位的二维g-

C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>作为载体，通过浸渍-热解串联策略合成了具有Cu-N<sub>3</sub>构型的Cu-N<sub>3</sub> SAs。结合X射线精细结构吸收光谱、X射线光电子能谱，确定了催化剂中铜原子的配位结构和电子价态。研究发现，Cu-N<sub>3</sub> SAs表现出显著的电催化共还原NO<sub>3</sub><sup>-</sup>和CO<sub>2</sub>合成尿素的性能，在-0.9 V (vs.

RHE) 的条件下获得19597.65 ± 1821.24mg

h<sup>-1</sup>mg<sub>Cu</sub><sup>-1</sup>

的产率和55.4 ± 1.89%的法拉第效率。进一步利用原位红外、原位质谱以及原位X射线吸收光谱技术，研究人员系统探究了铜单原子在电催化尿素合成过程中的结构演变与表面中间体吸附过程。

结果显示，铜单原子催化剂中的Cu-N<sub>3</sub>

结构会在电场的作用下重构为N<sub>2</sub>-Cu-Cu-N<sub>2</sub>结构，从而展现出高效的尿素合成性能。

密度泛函理论分析结果

表明，铜单原子的重构行为主要是发生在单层g-

C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的环内，而不是多层g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>

之间。此外，电催化共还原硝酸根和二氧化碳合成尿素时，第一次C-N耦联是\*CO和\*NH中间体形成\*CONH的过程。原位电化学重构形成的铜双位点结构增强了\*CO的吸附，促进了多电子转移过程，并降低了\*CONH中间体形成能垒。

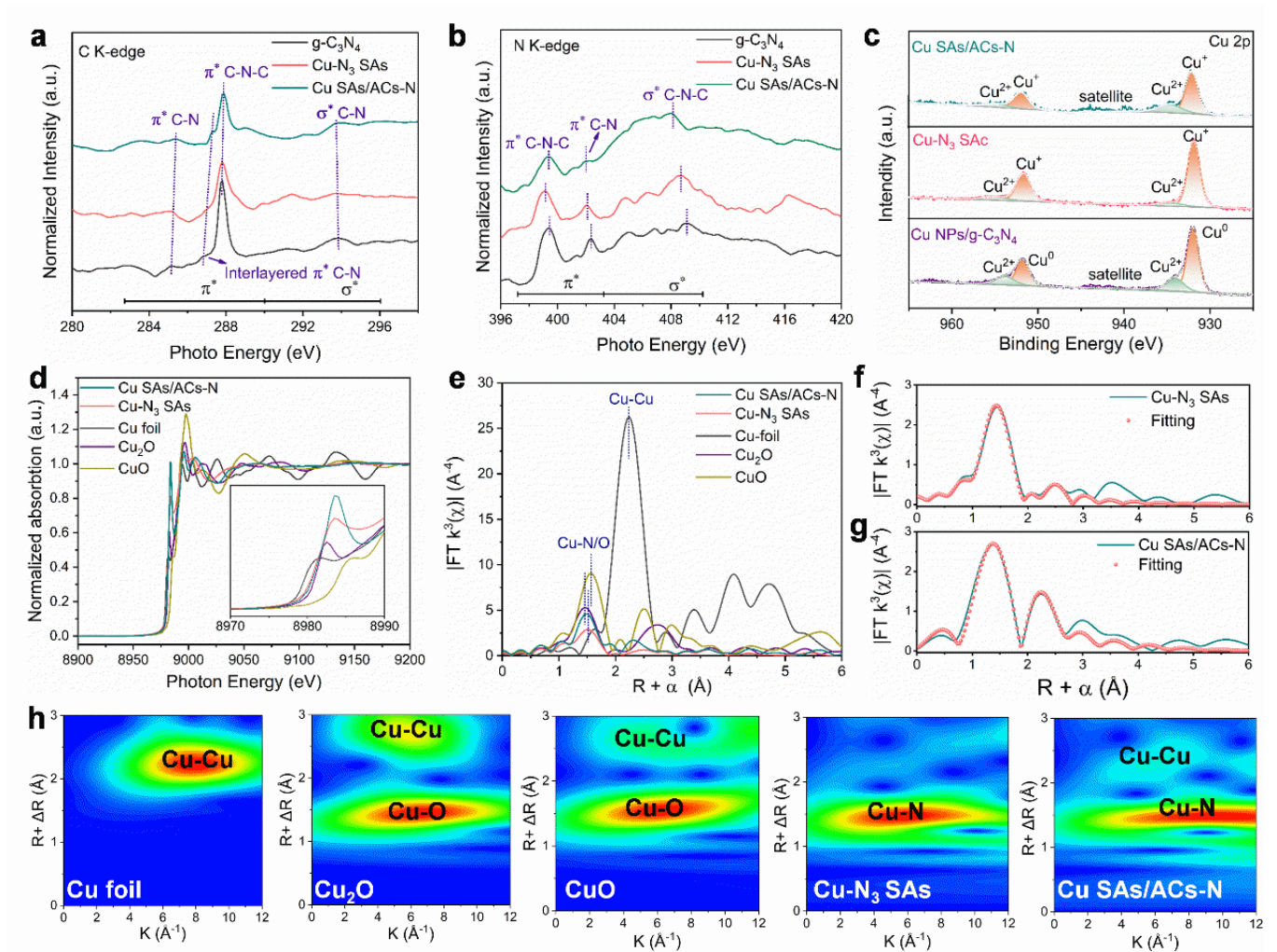
该研究为理解高效尿素电合成中真实催化活性位点的动态演变提供了重要理论指导。

相关研究成果以 In-Situ Electrochemical Reconstruction of Copper Single-Sites to Dual-Sites for Ambient Urea

Synthesis

为题，发表在发表在《德国应用化学》上。研究工作得到国家自然科学基金和安徽省自然科学基金的支持。

[论文链接](#)



Cu-N<sub>3</sub> SAs及其对比样的C K边XANES光谱

研究团队单位：合肥物质科学研究院

---

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