

---

# 研究提出硝酸盐电催化还原制氨反应的选择性描述符

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34985.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！*

研究提出硝酸盐电催化还原制氨反应的选择性描述符。

近日，中国科学院院士、中国科学院大连化学物理研究所研究员包信和、研究员高敦峰团队与复旦大学教授汪国雄团队合作，在电化学合成氨研究方面取得新进展，提出了羟基吸附作为铜基催化剂上硝酸盐电催化还原制氨反应的选择性描述符，为高效催化剂和电解质的理性设计提供了新思路。相关成果发表在《美国化学会-催化》。

---

还原反应机理对比。大连化物所供图

与能源密集型的哈伯-博施合成氨工艺相比，硝酸盐电催化还原反应（NO<sub>3</sub>RR）利用可再生电能，将废水中的NO<sub>3</sub>-污染物转化为氨，是温和条件下合成氨的重要途径。然而，铜基催化剂虽然表现出较好的NO<sub>3</sub>RR性能，但仍存在反应过电位高、易产生亚硝酸盐副产物、能量效率较低等瓶颈问题。

本工作中，团队采用铜纳米立方体作为模型催化剂，研究了NO<sub>3</sub>RR产物分布对电极电势和NO<sub>3</sub>-浓度的关系。研究发现，随着电极电势的负移和NO<sub>3</sub>-浓度的降低，氨的选择性显著提升。原位谱学表征和理论计算结果表明，这种依赖性源于催化剂表面羟基物种（\*OH）的吸附状态变化。具体而言，负移电极电势和降低NO<sub>3</sub>-浓度均可削弱\*OH吸附，进而促进水解离产生吸附氢物种（\*H），从而有利于硝酸根及其含氮中间产物的加氢反应。

基于对上述反应机理的认识，团队提出了羟基吸附可作为铜基催化剂上硝酸盐电催化还原制氨反应的选择性描述符，并将其应用于指导催化剂和电解液理性设计中，有效抑制了低过电位下亚硝酸盐副产物的生成。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acscatal.5c03512>

作者：包信和等 来源：《美国化学会—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](https://www.iikx.com)转发