

---

# 研究实现高选择性电催化合成氨

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36198.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！**

**研究实现高选择性电催化合成氨。**近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员章福祥团队联合研究员肖建平团队，在双原子电催化剂（DACs）的理性设计与构筑方面取得新进展。研究团队基于具有优异导电性和水稳定性的金属有机框架材料（cMOF），通过对铜-镍（Cu-Ni）双原子活性中心的精准调控，实现了在工业级电流密度下接近100%选择性地高效合成氨，并揭示了硝酸根电还原合成氨过程中的协同接力催化机制。相关成果发表在《美国化学会志》。

双原子催化剂凭借双金属活性位点间的协同作用，可有效突破单原子催化剂（SACs）在多电子反应中的性能瓶颈。然而，DACs在结构均一化、位点精确控制及电子结构调节方面仍存在挑战。

针对这一难题，研究团队以结构明确、水稳定且导电性能优异的MOF为模型平台，提出并验证了在导电MOF中实现双原子位点精确构筑与调控的理性设计策略，为发展高效、可扩展的电催化体系提供了新思路。

本工作中，研究团队合成了一系列 $Cu_xNi_y$ -DBCO导电MOF，通过系统调节Cu/Ni比例，实现了对硝酸根电还原制氨（NO<sub>3</sub>RR）活性和选择性的精准优化。研究发现，NO<sub>3</sub><sup>-</sup> → NO<sub>2</sub><sup>-</sup>（R1）和NO<sub>3</sub><sup>-</sup> → NH<sub>3</sub>（R2）两个关键反应步骤的相对速率决定了整体合成氨性能。原位光谱表征与密度泛函理论计算揭示，Cu位点优先还原硝酸根生成亚硝酸根中间体（NO<sub>2</sub><sup>-</sup>），而Ni位点可进一步高效将残余的NO<sub>2</sub><sup>-</sup>转化为NH<sub>3</sub>，两者形成协同接力催化路径，实现高效且选择性突出的NO<sub>3</sub><sup>-</sup> → NH<sub>3</sub>转化过程。

基于该高性能催化剂，研究团队进一步构筑了可充电Zn – NO<sub>3</sub>-电池，实现了35.6 mW cm<sup>-2</sup>的领先功率密度与优异的同时产氨性能，展示了导电MOF在可再生能源转化与储能领域的应用潜力。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c11655>

作者：章福祥等 来源：《美国化学会志》

---

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](http://www.iikx.com)转发