
研究阐明镍与钴加速黄铁矿形成的作用机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40731.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！

研究阐明镍与钴加速黄铁矿形成的作用机制。

硫化物 (S_2^-)

是水体黑臭演化的主要驱动因子。传统去除技术多通过氧化将硫化物转化为硫酸盐，但硫酸盐在厌氧条件下易被

重新还原为硫化物，难以实现长期稳

定管控。黄铁矿 (FeS_2)

因在近地表环境中具有极高稳定性，被视为水体硫化物长期固定的理想矿物载体。常温下黄铁矿成核速率极低，极大限

制了该固硫路径的工程应用。微量镍离子 (Ni^{2+}) 与钴离子 (Co^{2+})

可显著加速 FeS_2 形成，但其调控黄铁矿成核的微观机制尚不明确。

近日，中国科学院烟台

海岸带研究所研究团队系统揭示了 Ni 与 Co 加速

FeS_2 形成的分子机制，构建了涵盖电子释放、 S_8

环打开、d 带中心调控及反应能垒变化在内的完整催化路径。

体系动力学对比实验发现，纯硫化亚铁 (FeS) 反应体系中，黄铁矿首次检出时间为 156h，Ni 掺杂使黄铁矿成核时间缩短至 28h，成核速率提升约 5.5 倍，优于 Co 掺杂体系。实验证实， FeS 是黄铁矿形成的反应前体。多硫化物追踪明确

五硫化物 (S_5^{2-})

为矿化路径下的核心优势活性中间体。表征分析表明，Ni、Co 元素以原子级均匀分布形成 (Fe,Ni) S 与 (Fe,Co)

S 固溶体，未出现独立 NiS 和 CoS 相。晶

体场理论显示， Ni^{2+}

进入 FeS 八面体位点可获得更高的晶体场稳定化能，热力学驱动力更强，这是 Ni 掺杂体系矿化效率显著优于 Co 掺杂体系的核心原因。DFT 计算进一步表明，Ni、Co 掺杂均可调控 Fe 原子 d 带中心向费米能级上移，促进 S_8 环打开并增强对 S_5^{2-}

的吸附。其中，Ni 掺杂降低反应能垒 0.48eV，而 Co 掺杂仅降低 0.19eV。Co 虽释放电子能力更强，但过度稳定的中间体导致后续转化受阻。

该研究系统阐明了痕量 Ni、Co 加速黄铁矿形成的作用机制，在分子层面完善了硫化物矿化过程的痕量金属调控理论，明确了多硫化物路径的优势活性物种与反应限速步骤。研究成果可为天然地质过程中微量元素掺杂机制提供理论参考，并为工业废水深度处理、污染沉积物修复等场景的

高效固硫材料设计与工艺优化提供科学依据。

相关研究成果发表在《化学工程杂志》(Chemical Engineering Journal)上。研究工作得到国家重点研发计划的支持。

研究团队单位：烟台海岸带研究所

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