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转发