
研究揭示电化学合成氨中活性位点自发单原子化机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41705.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！

研究揭示电化学合成氨中活性位点自发单原子化机制。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员肖建平团队，在电化学合成氨催化剂动态结构演变方面取得新进展。团队利用机器学习势（MLP）驱动的巨正则系综蒙特卡洛（GCMC）模拟，揭示了电化学一氧化氮还原反应（eNORR）过程中催化剂活性位点自发单原子化的动态演化机制，为理解实际工况下催化活性位点的真实结构提供了新视角。相关成果发表在《国家科学评论》。

电化学一氧化氮还原反应是合成绿色氨的技术路线之一。实验表明，铁催化剂对电化学合成氨具有较好的活性和选择性。

本工作中，团队发现铁的电化学性能并非源于其本征活性，而是源于其在工况条件下自发单原子化的自适应能力。团队采用机器学习势驱动的巨正则蒙特卡洛模拟，系统探索了约250万种可能的活性结构，模拟了它们随电极电位升高而发生结构演化的过程。微观动力学模拟表明，反应过程中铁（Fe）表面将被吸附态的氮（N*）物种覆盖，进而通过自发单原子化形成FeNx活性构型。统计分析表明，孤立的FeNx构型中的Fe顶位比桥位和空位具有更高的氨合成活性。基于这些自发单原子化的活性位点，团队重现并解释了不同产物法拉第效率随电极电位变化的实验规律，验证了活性位点模型的可靠性。

该工作揭示了催化剂在反应条件下的结构自适应行为，为设计适用于更多反应体系的活性位点提供了参考。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwag417>

作者：肖建平等 来源：《国家科学评论》

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