大连化物所通过纳米反应器缺陷工程策略实现低电位电化学固氮

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8450.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！

近日，中国科学院大连化学物理研究所微纳米反应器与反应工程学研究组研究员刘健团队与澳大利亚伍伦贡大学超导和电子材料研究所梁骥团队合作，通过缺陷工程铁掺杂的策略，开发了铁掺杂$W_{18}O_{49}$
纳米反应器，在低电位下同时实现了较高的NH_3
产率和较高的法拉第效率，为电催化高效固氮提供了新思路。

与传统的哈伯-博世法固氮相比，室温下的电催化氮气还原过程具有高能效、低排放等优点，吸引了越来越多研究者们的兴趣。通常，竞争析氢反应（HER）和室温电化学氮还原反应（NRR）的能垒使得难以同时实现高的法拉第效率和
高的NH_3
产率。在某种程度上，这是由于有限的氮吸附位置、缓慢的NRR动力学和在高过电位下占主导地位的HER导致的。此外，在更节能的电催化NRR的低过电位下达到这个目标甚至更具挑战性。

研究团队选用对HER具有极低选择性的$W_{18}O_{49}$
作为调控对象，通过纳米
反应器缺陷工程铁掺杂的策略很好地控制了$W_{18}O_{49}$中的氧空位状态。结合*Ab initio*计算发现，利用$W_{18}O_{49}$
固有的低氢气结合能，通过缺陷工程调控，得到最大化的活性位点（W）的暴露，极大地削弱了与固氮竞争的HER，并降低了室温下电化学氮还原反应的能垒。因此，在相对可逆氢电极-0.15 V的极低电位下，优化铁掺量的$W_{18}O_{49}$同时获得了较高的NH_3产率（24.7 $\mu g/(h*mg_{cat.})$）和较高的法拉第效率（20.0%）。*Ab initio*
计算进一步
证实了研究团队提出的
铁掺杂策略和调整后的氧空位状态能够共同优
化$W_{18}O_{49}$
的电子状态和表面结构，从而提高氮气的吸附强度，进而获得低电位的反应路径。该工作为各类电化学反应过程催化剂的设计与调控提供了新思路。

上述工作于近日发表在《德国应用化学》（*Angew. Chem. Int. Ed*.）杂志上。该工作得到国家自然科学基金、中科院洁净能源创新研究院合作基金项目等的资助

。

图：铁掺杂氧化钨（$W_{18}O_{49}$）纳米棒电催化氮气还原制氨

研究团队单位：大连化学物理研究所

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