

合肥研究院在构筑富含磷空位缺陷的磷化亚铜催化剂及其电催化固氮研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/8615.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！

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所环境与能源纳米材料中心采用掺杂氧诱导策略构筑的富含磷空位缺陷的磷化亚铜催化剂，在电催化固氮的性能与机理探究方面取得进展。相关结果以全文形式发表在Journal of Materials Chemistry A 杂志上。

增强催化剂活性与选择性的关键是如何在催化剂表面合理设计与构筑针对特定催化反应的活性位点，其中通过缺陷工程改变催化剂的物理化学性质，调节催化剂对反应物或反应中间体的吸附与活化过程，是光/电催化研究领域的重要研究方向。空位缺陷就是其中一种比较常用的手段，空位缺陷可作为催化反应的活性中心进一步增强催化剂的内在性能。其中阴离子空位缺陷工程由于可以增加活性位点的数目，同时对催化剂的电子结构和材料带隙具有很好的调节作用，从而提高催化剂的性能而受到广泛关注。然而当前大多数阴离子空位研究集中在氧空位缺陷上，主要是因为其较低的形成能，而具有较高形成能的硫、氮和磷阴离子空位缺陷却少有报道，这是因为较高形成能的阴离子空位催化剂结构稳定性相对较差；但是从理论计算的结果来看，各种氮硫空位缺陷的催化剂对氮气的吸附与活化都显示出很好的活性。因此，在催化剂上构筑较高形成能的阴离子空位缺陷，同时也保证材料的稳定性和高催化活性是科研工作者一直追求的目标。

为此，研究人员通过掺杂氧诱导的策略，成功合成了具有丰富表面磷空位的氧掺杂磷化亚铜纳米片（图a）。电化学实验表明：在-0.3 V（相较于标准氢电极）条件下，其合成氨产率为 $28.12 \mu\text{g h}^{-1}\text{cm}^{-2}$

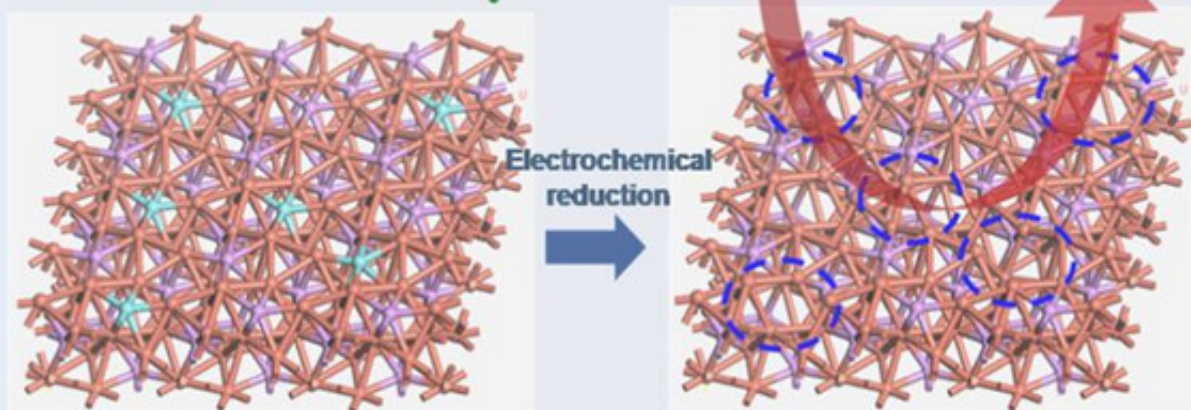
（图b），法拉第效率为17.5%，该性能约为纯磷化亚铜催化剂的3.4倍。进一步采用理论计算深入探究了磷空位缺陷对于合成氨反应的作用机理，研究结果显示：纯的磷化亚铜虽然可以吸附氮气，但是无法对 N_2

进行进一步加氢，所以在实验上表现出固氮性能较差。当表面有空位存在时，空位作为亲电中心更利于与富电子的氮气结合，从而有利于固氮性能的提升。本工作为设计和构筑具有阴离子空位缺陷的高效电化学固氮催化剂提供了一种有效策略，对于实验和理论设计都具有一定的指导意义。

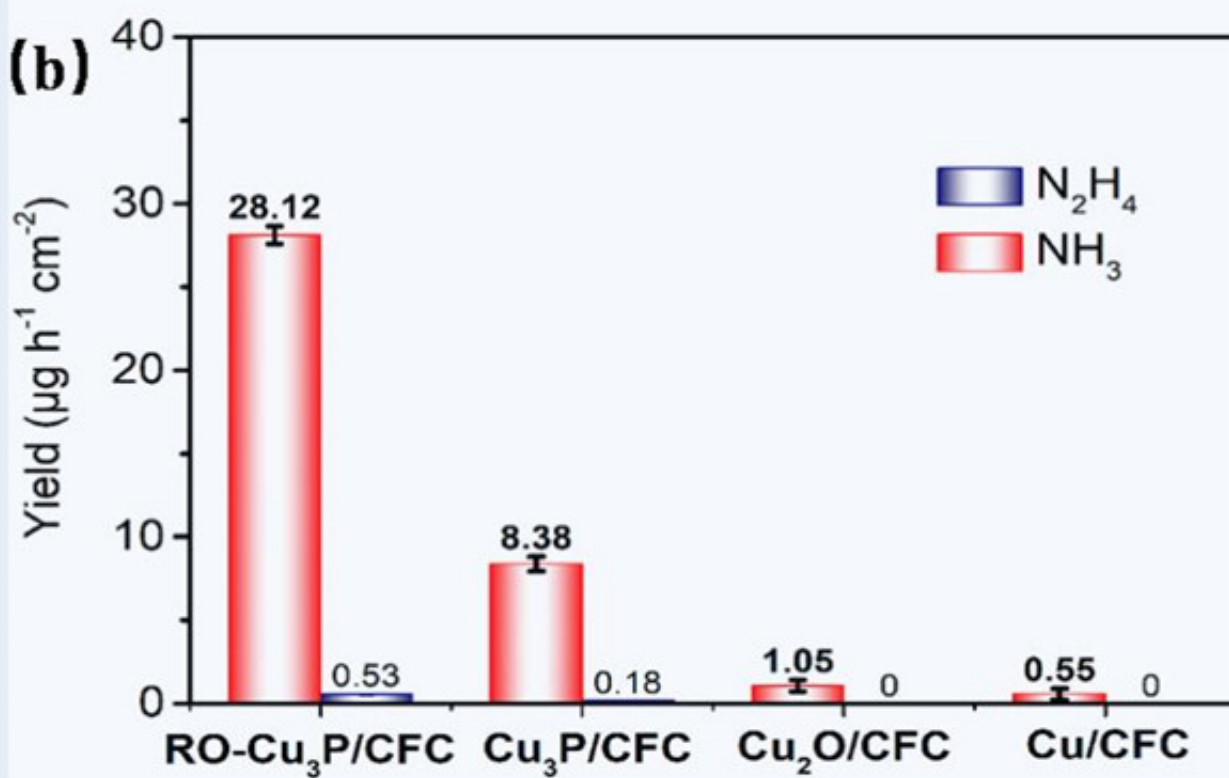
该项工作得到安徽省青年项目自然科学基金和中国博士后科学基金项目的资助。

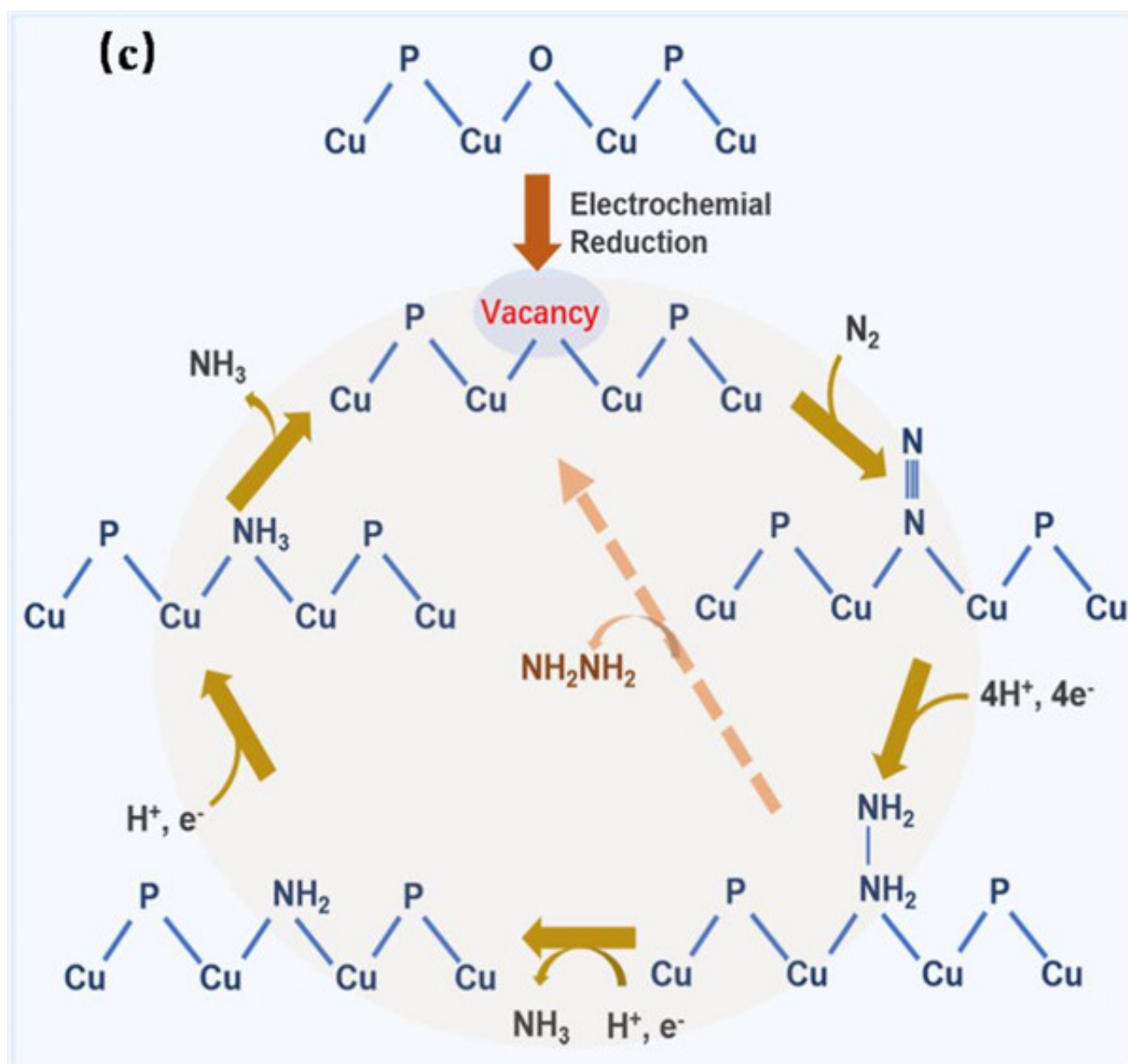
[文章链接](#)

(a) Surface Vacancy



(b)





(a)催化剂构筑示意图；(b)不同催化剂电极电催化合成氨与水合肼的产率；(c)掺杂氧诱导磷离子缺陷位电催化合成氨反应路径示意图。

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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