

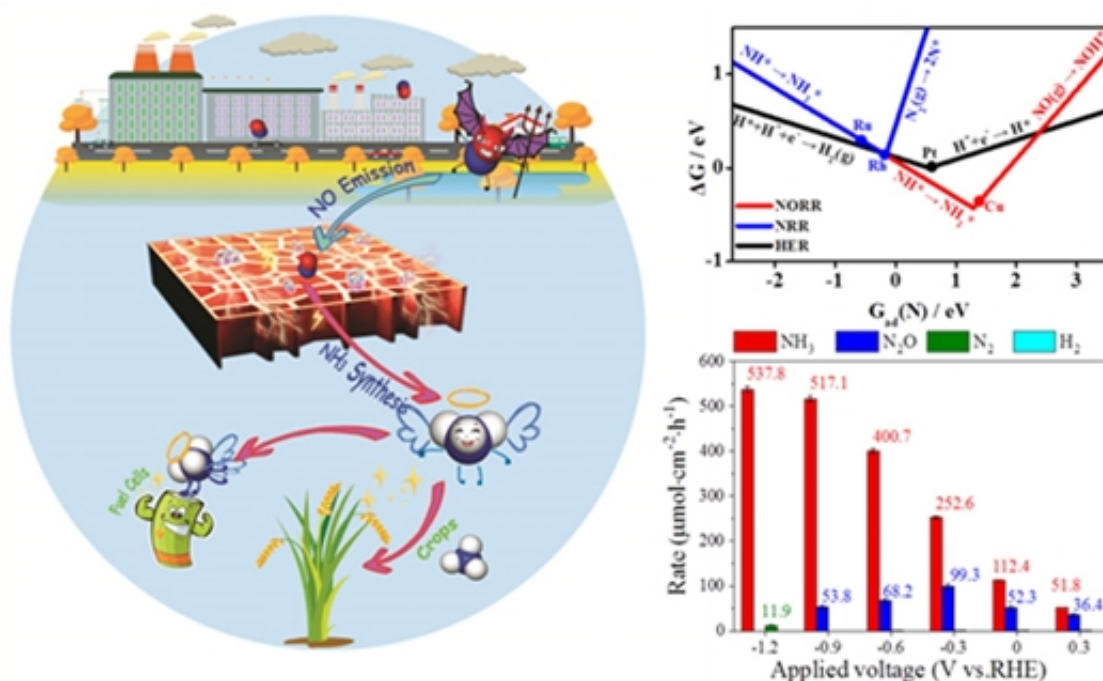
科学家提出电催化一氧化氮还原合成氨新策略

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/8980.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！

科学家提出电催化一氧化氮还原合成氨新策略。



近日，中科院大连化学物理研究所肖建平研究员团队和邓德会研究员团队合作，提出将工业废气和汽车尾气中排放的一氧化氮电催化还原合成氨气的新策略，为脱硝和电催化合成氨提供了新的思路，相关研究成果发表在德国《应用化学》上。

一氧化氮是一种有害的大气污染物，通常来自化石燃料的燃烧，如火电厂锅炉烟气、汽车尾气等，一氧化氮的去除在工业烟气处理中是必不可少的。同时，合成氨在工业上是一个非常重要的化工过程，氨气是化工生产中一种基础的化学物质，可以用来制备化肥、硝酸、炸药等，还可作为燃料电池的燃料。传统的合成氨方法主要是哈伯法，但此过程在高温高压下才能进行，需要消耗大量的能量。电催化氮气还原合成氨可以在常温常压下进行，但是由于氮气分子非常稳定，氮—氮三键难以断裂，面临着低活性和低选择性的难题，难以得到实际应用。为变废为宝，在一氧化氮和氨之间架起一座切实可行的桥梁，该团队提出了将烟气中的一氧化氮电催化还原合成氨的新策略。

研究人员首先基于密度泛函理论计算研究，考虑了数十种不同的一氧化氮还原反应路径，发现一氧化氮还原在热力学上比氮气还原和析氢（竞争反应）都更容易进行。他们通过基于描述符的方法筛选出最优的过渡金属催化剂——铜。电催化动力学计算表明，在Cu表面上，氮气在不同的还原产物（氨气、氢气、一氧化二氮、氮气）中的生成能垒最低，因此最易于生成氨气。一氧化氮电催化实验表明，铜和铂具有相近的氨气产率，但是铜的选择性更优，因此选择铜电极。相对于铜Foil电极，铜Foam由于具有丰富的孔隙结构，催化性能得到进一步提高。选用铜Foam，在电压为-0.9伏时，可得到 $517.1 \mu\text{mol}/(\text{cm}^2 \cdot \text{h})$ 的氨气产率和93.5%的法拉第效率，且具有100小时运行稳定性。这是目前在电催化合成氨中得到的最高的氨气产率和选择性，氨气产率更是达到了传统热催化合成氨产率的量级。同位素标记实验证明氨气生成全部来自于一氧化氮还原。

研究人员通过微观动力学模拟计算了一氧化氮还原的TOF理论值，发现随着电压的改变，TOF理论值与实验上的氨气产率呈很好的线性关系，证明了一氧化氮还原机理的正确性。（来源：中国科学报 刘万生 龙军 李佳怡）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202002337>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：肖建平等 来源：《应用化学》

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