

首页

概况简介

研究系统

职能部门

科研成果

人才队伍

科学传播

党建文化

信息公开

请输入关键字



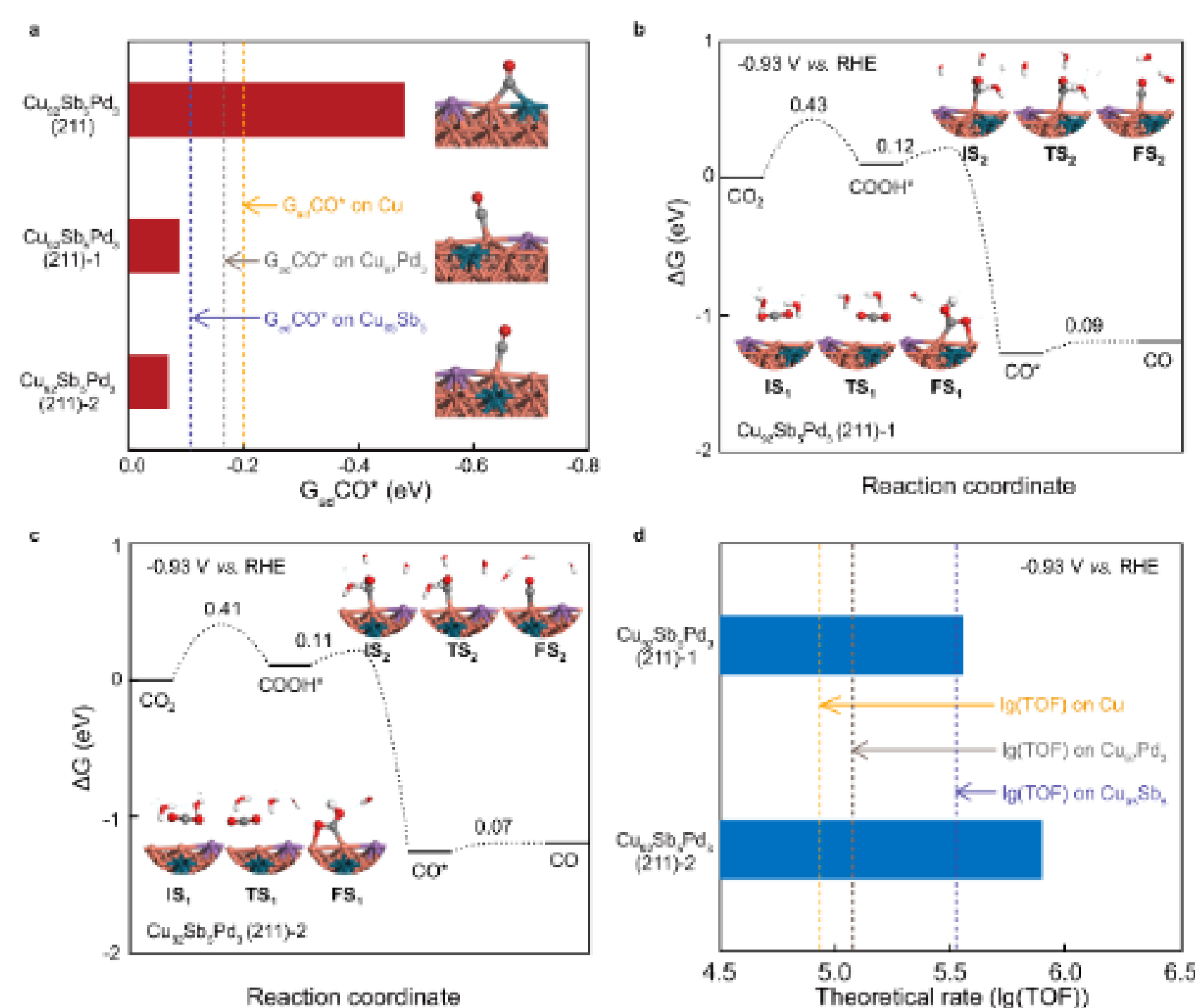
首页 > 新闻动态 > 科研进展

我所揭示三组分单原子合金催化二氧化碳电还原制一氧化碳反应的机理

发布时间: 2024-07-18 | 供稿部门: 511组 | 【放大】 【缩小】 | 【打印】 【关闭】

近日, 我所催化基础国家重点实验室计算和数据驱动催化研究组 (511组) 肖建平研究员团队与电子科技大学夏川教授团队合作在二氧化碳 (CO_2) 转化制一氧化碳 (CO) 研究中取得新进展, 研发出三组分单原子合金催化剂 $\text{Cu}_9\text{Sb}_5\text{Pd}_3$, 在 $-402\text{mA}/\text{cm}^2$ 下实现了 100% ($\pm 1.5\%$) 的高 CO 选择性, 在中性电解质中活性达到 $-1\text{A}/\text{cm}^2$, 并揭示了该反应的机理。

利用可再生能源实现 CO_2 高效电还原, 不仅有助于减少温室气体排放, 同时也为生产多种化学中间体和燃料提供了一条可持续途径。肖建平团队在前期工作中发现了 CO_2 电催化还原制甲酸的活性趋势 (*Nat. Commun.*, 2020; *Adv. Mater.*, 2021); 揭示了 CO_2 电催化还原的“双通道”机理 (*Nat. Nanotechnol.*, 2021); 设计了电催化 CO_2 到多碳产物高活性催化剂 (*Nat. Commun.*, 2023); 研究了电还原 CO_2 制 CO 的机理 (*Nat. Commun.*, 2023); 提出铜基单原子配位调控电催化还原 CO_2 到甲烷的设计新策略 (*Nat. Commun.*, 2023)。



本工作中, 肖建平团队探究了单原子合金催化剂 $\text{Cu}_9\text{Sb}_5\text{Pd}_3$ 电催化 CO_2 还原表现出高 CO 选择性的原因。研究发现, Pd 和 Sb 单原子的共掺杂作用, 降低了 Cu 基催化剂的表面能, 提高了 Cu 基催化剂稳定性; 改变了电荷分布, 降低了 d -band 中心, 减弱了 CO^* 的吸附, 提升了 CO 的选择性。通过电荷外插值法, 肖建平团队计算了工作电势下的 CO_2 还原反应的反应能垒, 并通过微观动力学模拟得到了 CO^* 覆盖度、 CO 法拉第效率, 模拟结果与实验结果有较好的吻合。该研究为设计高活性和特定选择性电催化材料提供了新思路。

相关研究成果以“Turning copper into an efficient and stable CO evolution catalyst beyond noble metals”为题, 于近日发表在《自然-通讯》(*Nature Communications*) 上。该工作得到国家自然科学基金、榆林创新院能源专项、中国科学院B类先导专项“功能纳米系统的精准构筑原理与测量”、我所创新基金等项目的资助。(文/图 董雪)

文章链接: <https://www.nature.com/articles/s41467-024-50436-4>



DICP

地址: 辽宁省大连市沙河口区中山路457号 邮编: 116023
电话: +86-411-84379198 传真: +86-411-84691570
邮件: xxgk@dicp.ac.cn



官方微信



化学之美

