大连化物所实现二维硫化钼共限域钴硒双原子“里应外合”高效催化电解水析氢

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/10426.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催化基础国家重点实验室二维材料与能源小分子转化创新特区研究组研究员邓德会团队，在酸性电解水析氢（HER）催化剂研究中取得新进展，基于二维硫化钼（MoS_2）的三原子层结构特性，将Co和Se分别限域在其内层和表层晶格中，实现Co/Se“里应外合”协同调控MoS_2的催化性能，提升了其在催化酸性HER中的活性和稳定性。该研究为深入挖掘MoS_2的催化析氢潜力以及设计廉价、高效HER催化剂提供了新思路。

MoS_2是一种地球储量丰富且具有独特的几何和电子结构的二维材料，在电催化HER中表现出较好的催化性能，具有替代贵金属铂基催化剂的潜力。然而，常规MoS_2只在其边缘硫位点上显示一定的催化HER活性，而大量的处于二维面内的硫原子却是惰性的且未被充分利用。此外，边结构的低稳定性限制了MoS_2的催化性能。调控激发面内硫原子的活性、增加活性边结构数量并同时提高整体结构的稳定性，是最大化提高其HER催化性能的有效途径，然而却极具挑战。

研究团队前期提出并实现通过MoS_2晶格限域金属杂原子来调控面内惰性硫原子的催化活性（*Energy Environ. Sci.*，2015，8，1594）。该策略能够有效提高MoS_2的面内HER活性，但不可避免地过度活化边结构，导致边结构硫位点吸附氢过强。该团队最新研究发现，将Co和Se分别限域在MoS_2三原子层的内层和表层晶格中（分别替代Mo和S），能够同时实现面内和边活性的调控优化以及结构稳定性的提高。该催化剂显示了优异的酸性HER催化性能：其在1000 mA cm^{-2}的大电流密度下的过电位仅为382 mV，低于商业化Pt/C催化剂的671 mV，且能够稳定保持360 h而无明显的活性衰减，这超过了目前已报道的异质原子掺杂MoS_2催化剂的HER性能。密度泛函理论研究发现，内层限域的Co可以激发面内惰性硫的活性，而表

层限域的Se则提供了一种稳定化效应，两者协同“里应外合”，一方面适度减弱了活性位点的氢吸附强度（吸附能更接近0 eV），降低了过电位；另一方面提高了掺杂结构的稳定性，从而促进了面内和边活性位点的大量形成。

邓德会团队聚焦二维催化材料的表界面调控研究，已在二维材料电解水催化剂方面取得系列研究进展（*Adv. Mater.*，2020，32，1908126；*Angew. Chem. Int. Ed.*，2020，59，10502；*Nano Energy*，2020，72，104700；*Nano Energy*，2019，61，611；*Chem. Rev.*，2019，119，1806；*Nano Energy*，2018，52，494；*Nat. Commun.*，2017，8，14430；*Nat. Nanotechnol.*，2016，11，218；*Energy Environ. Sci.*，2016，9，123；*Angew. Chem. Int. Ed.*，2015，54，2100；*Energy Environ. Sci.*，2015，8，1594；*Energy Environ. Sci*
.，2014，7，1919；发明专利10余件）。在此基础上，该团队近期研制了基于非贵金属整体式催化剂电极的便携式氢氧仪并实现量产，已获得中国GB、欧盟RoHS、欧盟CE和美国FDA认证。此外，该研究为便携式氢氧仪催化剂电极的优化升级提供重要借鉴。

相关研究成果发表在《自然·通讯》（*Nature Communications*）上。研究工作得到国家科技部重点研发计划项目，国家自然科学基金基础科学中心项目、重大项目，中科院前沿科学重点研究项目，中科院洁净能源创新研究院合作基金项目，教育部能源材料化学协同创新中心的资助。

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