物理所等揭示二硫化钼中晶界在催化析氢中的重要作用

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/5027.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！

物理所等揭示二硫化钼中晶界在催化析氢中的重要作用。氢能作为一种理想的绿色能源，是世界各国发展的战略和科学研究的热点。而通过电解水来制氢，有效且可再生循环，其关键在于催化剂。近年来，二硫化钼催化剂由于其催化活性高、稳定性好、资源丰富、成本低等特点在析氢反应中崭露头角。单层二硫化钼是由两层硫原子将一层钼原子夹杂在中间形成类似三明治的结构，是一个具有直接带隙的半导体。已有的研究结果表明，二硫化钼的催化活性主要来自于钼截止的边界，基面内催化活性很低。如何激活二硫化钼基面的催化活性，提升其在制氢应用中的潜力从而推动氢能的发展，成为最近几年国际上广受关注的科学问题。

近期，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心纳米物理与器件重点实验室N07组博士生祝建琦在导师张广宇的指导下，与北京大学教授江颖及南开大学教授张立新课题组合作，发展了一种全新的激活和优化二硫化钼基面催化活性的方法。他们以大面积、高质量的单层二硫化钼为实验对象，结合前期发展的表面诱导相变技术，研究了一系列具有不同晶畴和相畴密度的样品的析氢催化活性。通过对基面不同区域的电催化局域测量，他们发现2H-2H畴区边界和2H-1T相边界都可作为基面上有效的催化活性位点;且相较之下，2H-1T相边界比2H-2H畴区边界更具催化活性。进一步的扫描隧道显微镜表征和第一性原理计算，分别从实验和理论上都证实了2H-1T相边界为氢的吸附和释放提供了优越的位点。进而，他们成功制备出了一种新型基于两级结构的多晶混相二硫化钼催化剂。这种两级结构富含2H-2H畴区边界和2H-1T相边界，具有优异的催化性能，开启过电位仅为0.1 V，当阴极电流为10 mA/cm2时过电位低至136 mV。不仅如此，这种二硫化催化剂还具有极好的稳定性，并可以同时适用于酸性或碱性的环境。

最后，他们将催化剂尺寸升级，制备出了基于四英寸晶圆尺度单层二硫化钼催化剂，展示了大面积单层二硫化钼在催化析氢中的实际应用潜力。这种基于晶界调控的单层二硫化钼催化剂高效、可控，为将来工业化制氢的发展提供了新的思路。该工作发表于《自然-通讯》(Nature Communications 10, 1348, (2019))。该项研究工作得到国家自然科学基金、中科院战略性先导科技专项、中科院前沿科学重点研究项目、国家重点研发计划的资助。

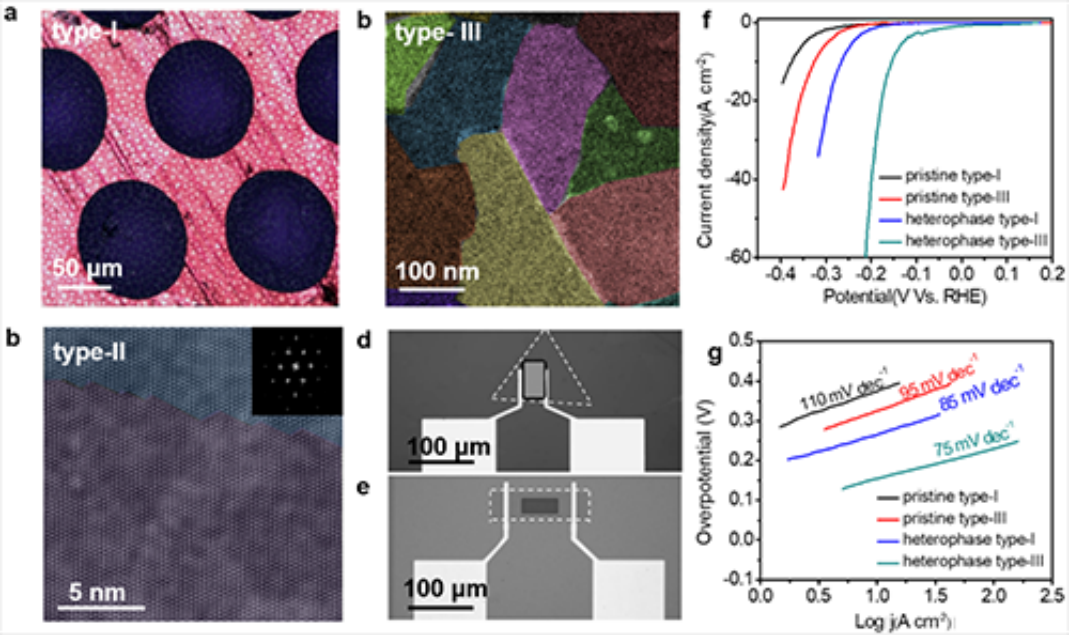


图1.(a)单层二硫化钼单晶(b)近单晶单层二硫化钼2H-2H畴区边界(c)多晶单层二硫化钼边界(d，e)二硫化钼析氢催化器件(f，g)2H-2H畴区边界与2H-1T相边界催化性能。

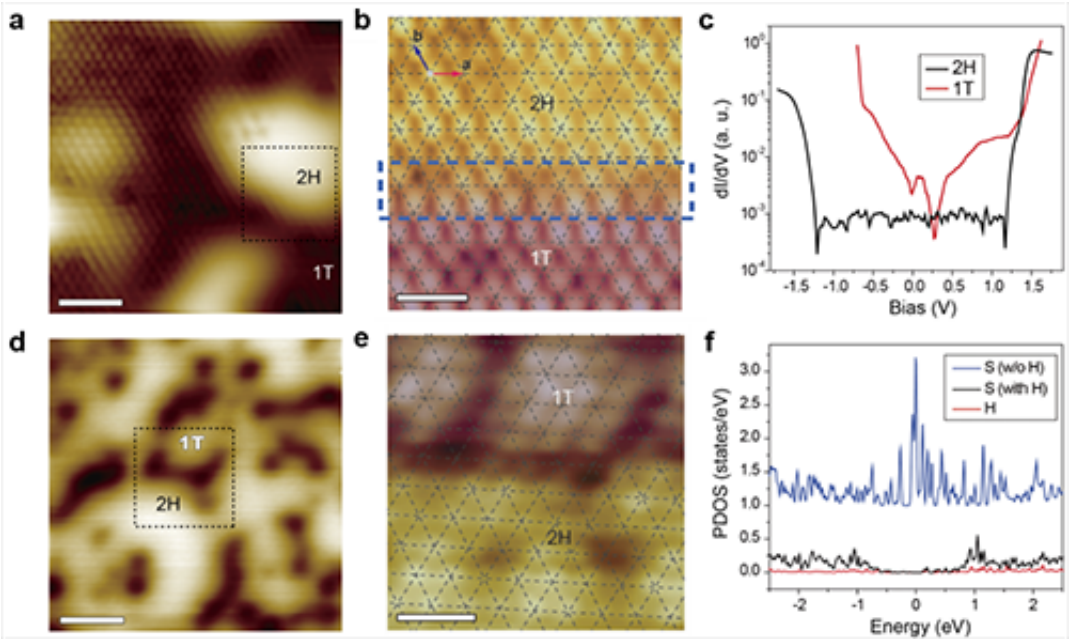


图2.(a-c)多相二硫化钼的STM表征(d，e)氢化处理后样品STM表征(f)相边界原子的态密度。

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