

大连化物所提出二维硫化钼限域铈原子的距离协同催化效应

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/9446.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组研究员邓德会、副研究员于良团队提出二维硫化钼（ MoS_2 ）限域铈原子的距离协同效应，利用铈单原子之间的距离来调控二维 MoS_2 面内硫原子的电子结构和催化活性，从而实现高效电催化析氢（HER）性能。该工作为深入认识二维 MoS_2 限域单原子的催化活性调控机制以及设计新型高效电解水析氢催化剂提供了新思路。

MoS_2 作为一种典型的二维过渡金属硫族化合物，其边缘结构具有适中的氢吸附强度而显示良好的HER活性，因而被广泛认为是一种有潜力的、可替代贵金属Pt的非贵金属HER催化剂。然而，位于 MoS_2 面内的大量S原子对HER反应却是惰性的，而边缘活性位的数目又非常有限。因此，开发能够有效激发并优化 MoS_2 面内S活性的手段对于增加 MoS_2 的催化活性位数目、提高其催化HER活性具有重要意义，但却极具挑战性。

邓德会团队

长期聚焦二维催化材料

的表界面调控研究，在国际上率先提出并实现

MoS_2 晶格限域的金属杂原子来激发其面内S原子的催化活性（[Energy Environ. Sci.](#), 2015, 8, 1594；[Nat. Nanotechnol.](#), 2016, 11, 218；[Nat. Commun.](#), 2017, 8, 14430；[Nano Energy](#), 2019, 61, 611；[Chem. Rev.](#), 2019, 119,

1806）。该策略能够有效地提高 MoS_2

催化HER的性能。然而，如何精确调控并优化面内硫的活性仍是亟待解决的关键问题。该团队最新的研究显示 MoS_2

晶格限域单原子Rh之间的距离协同效应能够有效调控并优化面内S原子的反应活性，从而显著提高其HER催化活性。研究团队通过控制Rh原子的浓度来改变Rh原子间的平均距离，发现Rh原子间距与HER活性之间存在奇特的“

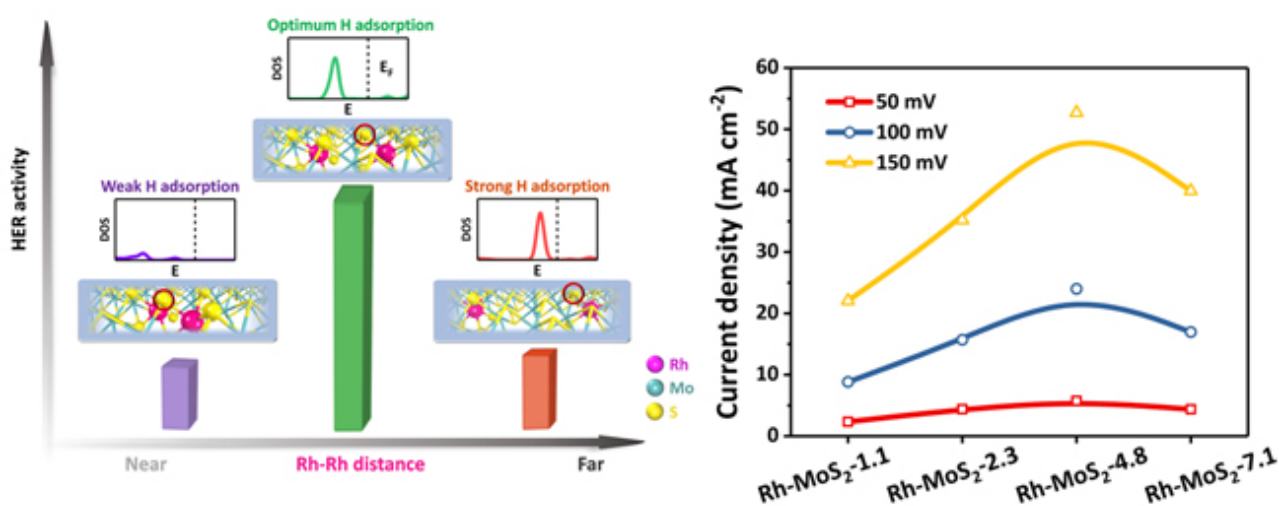
火山型曲线”关系。当 MoS_2

晶格内Rh原子的质量分数达到适中的4.8%时，催化剂的HER反应活性达到最高，产生10 mA cm^{-2} 电流密度仅需67

mV过电位。该活性超过了绝大多数已报道的MoS₂基材料在酸性体系下的催化活性，并接近了商业化40% Pt/C催化剂的活性。同时，密度泛函理论（DFT）计算发现，MoS₂晶格限域Rh原子激发了Rh近邻S原子的活性，且Rh原子间距与S原子对氢的吸附自由能之间也呈现出“火山型曲线”关系，即当限域的Rh原子间距适中时，面内S原子活性位对氢的吸附能最优（更接近0 eV），达到最高的HER催化活性。该工作揭示了MoS₂限域Rh单原子之间的距离协同效应对面内S原子电子结构及催化活性的调控与优化机制，为设计与优化MoS₂基新型催化剂提供了借鉴。

相关研究成果发表于《德国应用化学》（Angew. Chem. Int. Ed

）上。上述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（2011iChEM）的资助。



二维MoS₂限域Rh原子的距离协同效应对HER活性的影响

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](http://www.iikx.com)转发