高活性析氢催化剂设计获进展

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/9575.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！

高活性析氢催化剂设计获进展。

中国科学院上海硅酸盐研究所研究员刘建军团队和新加坡南洋理工大学教授范红金团队合作研究，在二维硫属化合物二硫化钼（MoS2）面内催化结构设计方面获重要进展。研究人员理论计算发现，催化吸附位点（S）与相连接的过渡金属组成区域活性中心，首次提出区域电负性概念进行催化剂设计，选择不同过渡金属原子掺杂MoS2面形成不同局域结构，通过不同TM—S化学键特征调控MoS2基面电荷转移能力，实现析氢催化活性优化。相关研究成果近日发表于《自然—通讯》，并得到国际审稿人积极评价。

设计低成本、高活性析氢催化剂高效制氢是建立氢能源系统的重要组成部分，MoS2具有制备简单、结构稳定、催化活性可调的优势，因此被视为非常有潜力的酸性电解水制氢催化剂。然而，其高活性位点大部分限定在有限的边界处，如何实现MoS2面内位点活化是推动其实际应用的关键。

为此，研究人员基于理论计算、实验合成与电化学表征紧密合作，发现具有中心硫空位的三角钴掺杂MoS2基面中表现出卓越的析氢催化性能，在每平方厘米10毫安电流密度下过电势仅为75毫伏，在电流密度每增大或者减少10倍的情况下，电位的移位是57毫伏，是目前报道二维MoS2电解水制氢催化性能优异的材料之一。

同时，刘建军团队系统研究了MoS2四种经典掺杂缺陷与边界结构不同过渡金属元素对电子态和阴阳离子电催化活性的调控，提出区域电负性作为一个催化活性描述符，建立了配位环境、掺杂原子电负性、原子半径和价电子数与区域电负性的定量关系，为高活性筛选提供理论基础。相关成果发表于美国化学学会主编的《材料化学》。（来源：中国科学报 黄辛）

相关论文信息：

https://doi.org/10.1038/s41467-020-16111-0

https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b04377

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：刘建军等 来源：《自然—通讯》

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