



新闻动态

科技新闻

当前位置：首页 | 新闻动态 | 科技新闻

中国科大在单原子层电催化剂方面取得新进展

来源：科研部 发布时间：2021-01-14 浏览次数：121

近日，中国科学技术大学国家同步辐射实验室闫文盛教授团队与孙治湖副教授，韦世强教授团队合作，通过Co离子掺杂在单层MoS₂中引入长程铁磁性，进而活化基面惰性原子的策略，制备出了单原子层催化剂。研究成果以“Single-atom-layer catalysis in MoS₂ monolayer activated by long-range ferromagnetism: beyond the single-atom catalysis”为题发表在著名学术期刊《德国应用化学》上（Angew. Chem. Int. Ed. 2021, doi.org/10.1002/anie.202014968）。

近年来，单原子催化剂（Single-atom catalysts）由于其优异的性能得到了人们的广泛关注。但是，单原子催化剂较低的负载量成为限制其实际应用的发展瓶颈。基于二维单层晶体的天然结构优势发展的单原子层催化剂（Single-atom-layer catalysts）为解决这一发展瓶颈问题提供了有效方案。然而，二维单层晶体通常只有边界位点具有催化活性，而基面原子是惰性的。单层MoS₂由于空间反演对称性的破缺具有较强的自旋轨道耦合，如果实现其长程铁磁性，将会增加d电子的去局域特征，从而使基面的大部分S原子被激活（图1）。

该团队利用先前在单层二维材料中，实现的过渡金属替代位掺杂方法（Nature commun. 2019, 10, 1584），在单层MoS₂中引入了本征室温铁磁性。在此基础上，原位同步辐射显微红外光谱和电化学测试进一步表明，该策略可以活化单层Co-MoS₂中50%以上的基面S原子用于析氢反应（HER）。单个基面位点的活性与边缘位点的活性相当。电化学微电池器件（On-chip micro-cell）测试结果显示，伴随着基面活性位点密度的显著增加，Co-MoS₂单层的质量活性达到28571 A g⁻¹，比多层膜高出两个数量级（图2）。而且，该单原子层催化剂的交换电流密度为75mA cm⁻²，超过了目前报道的大多数MoS₂基催化剂。实验表征和理论计算结果显示，大部分基面S原子被活化是由于d电子的去局域化特性和费米能级附近S-p电子密度的增加导致S原子氢吸附能力提升所致。

该项研究得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、合肥大科学中心高端用户培育基金和中国博士后科学基金等基金资助。

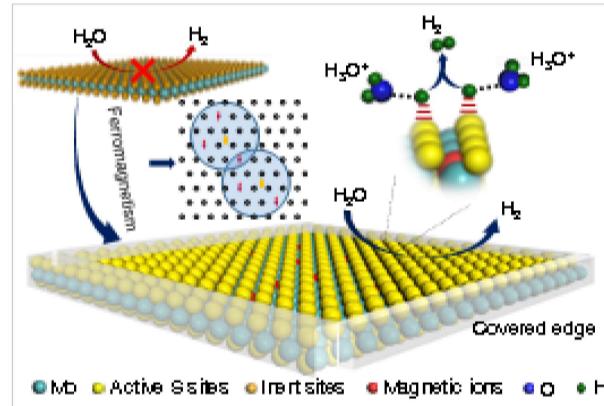


图1 长程铁磁性激活基面原子的示意图

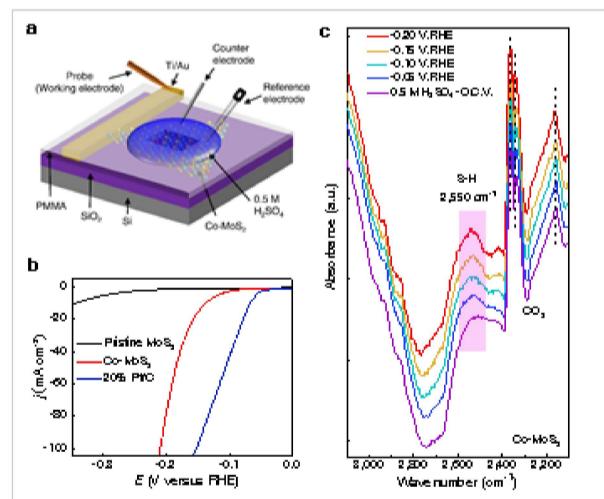


图2 电化学微电池测量结果以及原位同步辐射红外光谱表征

论文链接：<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202014968>

(国家同步辐射实验室、科研部)

