

## 合肥研究院等在双轴应力调控二维材料析氢方面获进展

近日，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所纳米材料与器件技术研究部与新加坡南洋理工大学合作，在双轴应力调控二维材料析氢方面取得新进展。相关研究成果发表在Advanced Materials上。

由于固有的拉伸应变和增强的局部电场具有高度弯曲表面的纳米材料，已被证明可有效调节自身表面的物理化学状态。研究表明，过渡金属二硫化物（TMD）中的应力可激活惰性基面、提高催化性能，如二硫化钼（MoS<sub>2</sub>）。然而，与传统的单轴应力相比，多维度应力和TMDs层数对局域电子结构、空穴的影响有待探索。

鉴于此，研究人员提出新型自硫化策略来诱导原位形成层数可调的双轴应变MoS<sub>2</sub>纳米壳，并剖析了双轴应力和层数如何影响其局部电子构型和活性中心结构。电化学测试和密度泛函理论（DFT）计算表明：可优化MoS<sub>2</sub>纳米壳中的应变程度、层数和Mo配位条件以实现增强的析氢反应（HER）活性；双轴应变和S空位有助于促进氢吸附步骤；具有4个配位数的特定Mo位点的双层MoS<sub>2</sub>纳米壳表现出高效的理论催化活性。该工作为制备具有微调层数的双轴应变TMDs电极以及提高电催化性能开辟了新的有效途径。

研究工作得到国家自然科学基金、中科院交叉创新团队和新加坡科技研究局的支持。

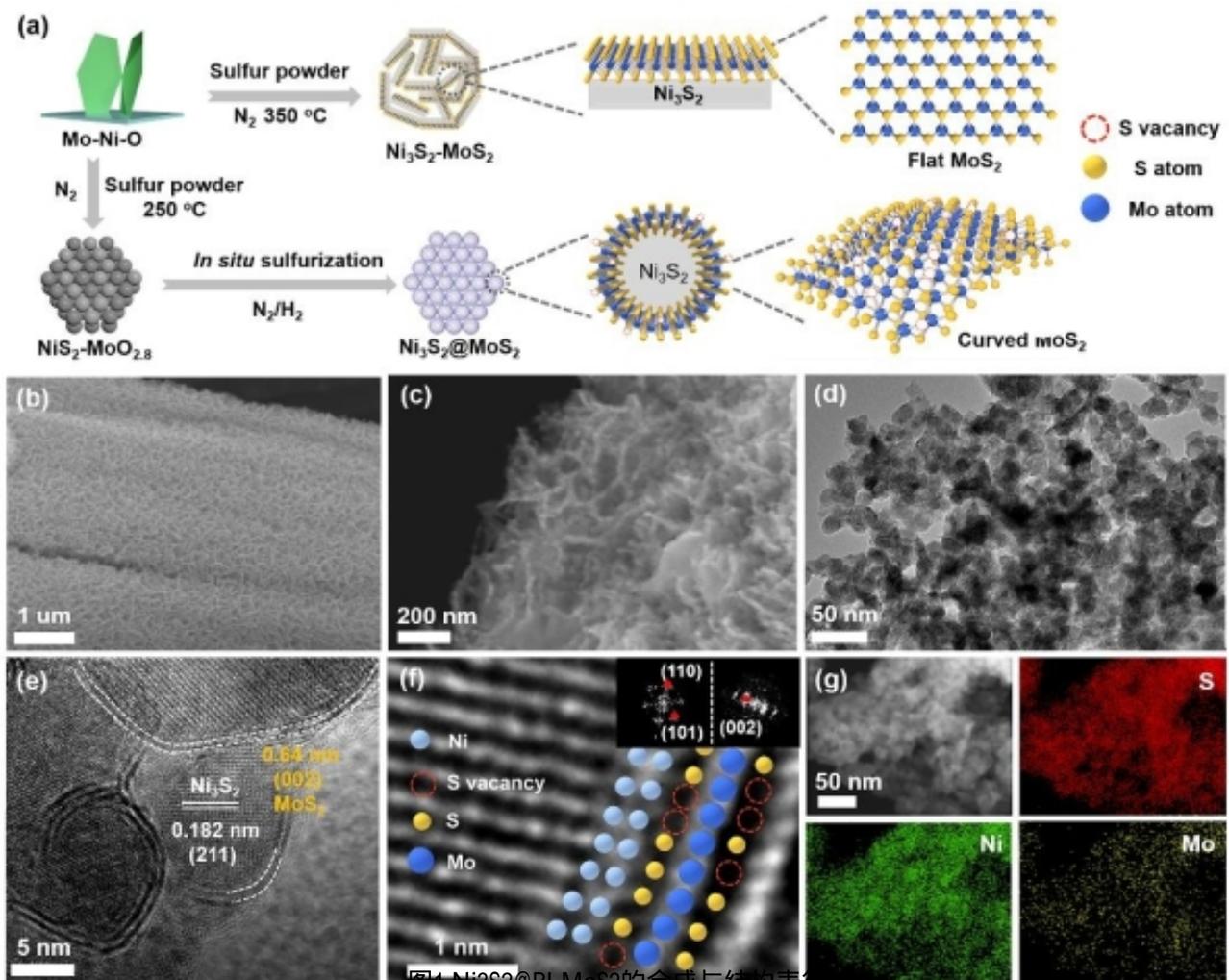


图1. Ni<sub>3</sub>S<sub>2</sub>@BLMoS<sub>2</sub>的合成与结构表征

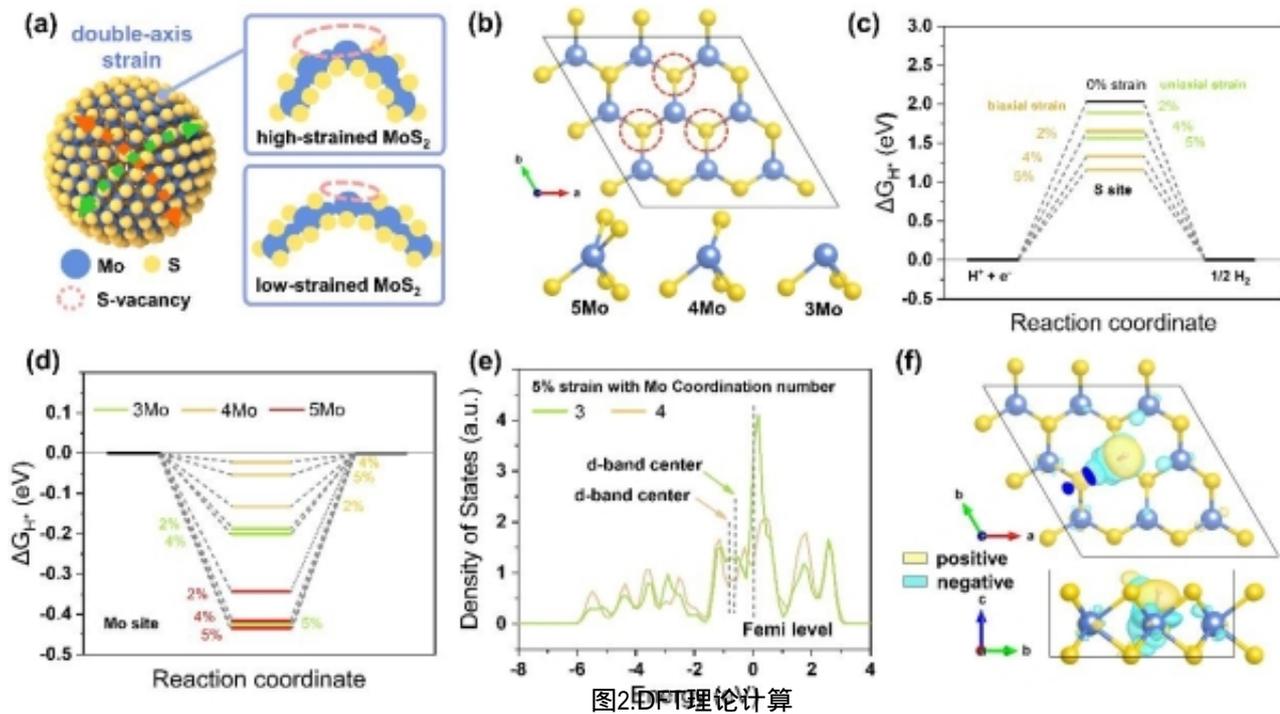


图2 DFT理论计算

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/188182.html>