

## 宁波材料所在二硫化钼电催化行为研究方面取得新进展

二硫化钼 ( $\text{MoS}_2$ )

在固体润滑、光电子器件、电化学催化等领域具有广泛的应用，而镧系元素 (Ln) 掺杂可以对其各类物理化学性质起到不同的调控作用。Ln- $\text{MoS}_2$

基功能材料、涂层和器件在实际使役环境中的性能和寿命在很多时候与其表面的氧还原反应 (ORR) 密切相关。比如，表面ORR会增加Ln- $\text{MoS}_2$

基纳米器件和涂层周围金属部件的电偶腐蚀

风险，而与此同时，Ln- $\text{MoS}_2$

基催化剂在燃料电

池领域的应用潜力极大依赖于其阴极

反应 (即ORR) 的活性。系统预测Ln- $\text{MoS}_2$ 表面ORR活性规律并清晰揭示其背后的微观量子化学机理，可以给各类Ln- $\text{MoS}_2$ 体系的实际应用设计、精准性能调控和有效防护提供重要指导。

近期，中国科学院海洋新材料与应用技术重点实验室和中国科学院宁波材料技术与工程研究所前沿交叉科学研究中心的研究人员利用第一性原理计算方法，探索了所有15种Ln- $\text{MoS}_2$  (Ln =

La ~ Lu) 体系的ORR活性，不仅发现了Ln杂质对 $\text{MoS}_2$

表面ORR活性的极大促进作用，还观察到ORR活性与Ln杂质原子序数存在一种双周期的依赖关系。本研究工作中，

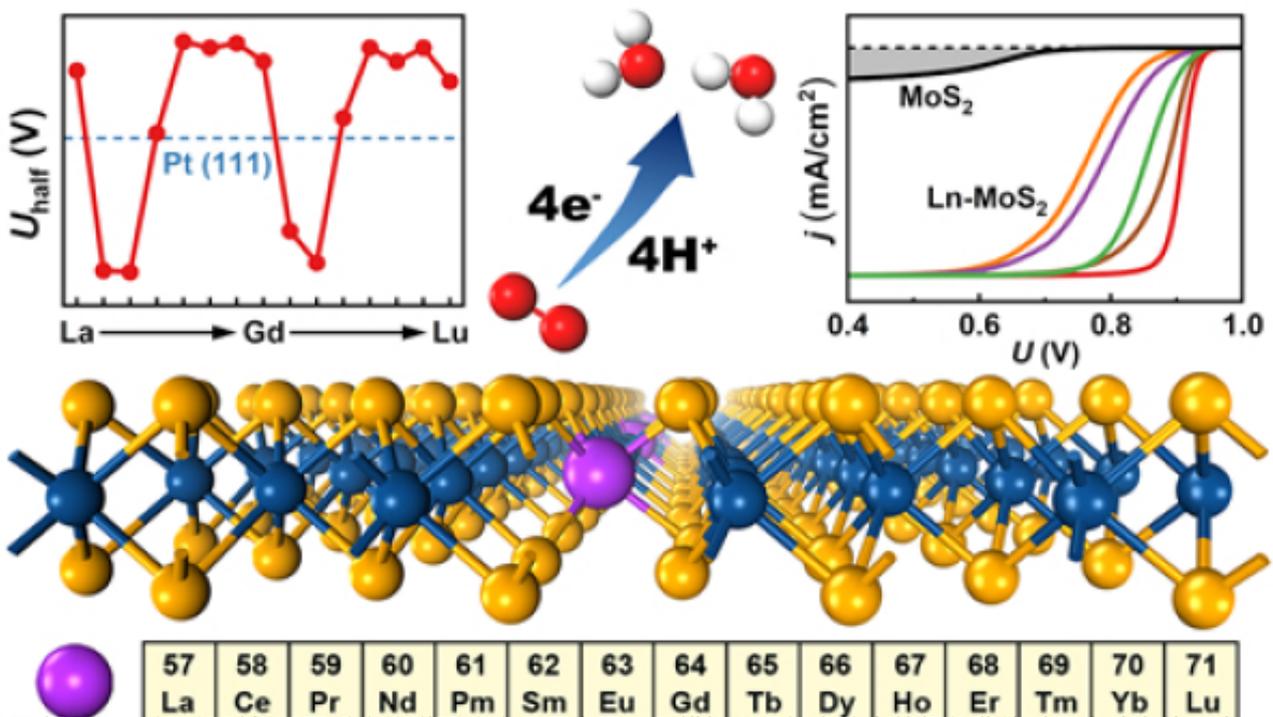
研究人员也通过热力学统计的方法精确模拟了疏松固/液界面上的水环境效应，然后通过构建动力学反应方程组，成功发展了一种电流-电势极化曲线的模拟方法，所得到的极化电流曲线不仅可定量揭示ORR活性，也可以直接对比/指导实验测量。深入的机理分析表明，Ln- $\text{MoS}_2$

表面ORR活性的增强来源于一种特殊的缺陷电子态配对机制，它会选择性地增强两种ORR中间产物吸附 (OH和OOH吸附基团)，从而显著减小ORR能垒；而双周期规律则来源于Ln元素中4f-5d6s轨道杂化程度和Ln-S原子成键能力上类似的双周期规律。在此分析基础上，研究人员也为Ln-

$\text{MoS}_2$

体系提出了一种普适的轨道化学机理，对各类电子结构、杂质稳定性、吸附物稳定性和电化学活性中同时出现的双周期规律进行了统一阐述。

相关成果发表于《自然—通讯》(Nat. Commun. 2023, 14, 3256)。该研究得到国家自然科学基金、中国工程物理研究院表面物理与化学重点实验室学科发展基金和国家重点研发项目的资助。



镧系元素掺杂二硫化钼对氧还原反应的增强效应 (图中显示了模拟所得的电流电势极化曲线以及半波电势所表现出的双周期趋势)

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/197187.html>