

Filléres katalizátor a hidrogénfejlesztéshez? – Meglepetést hozott az MTA EK lendületes alapkutatása

Tapasztó Levente és munkatársai az MTA EK MFA 2D Nanoelektronika Lendület kutatócsoportjában elsőként figyeltek meg egy különleges kémiai reakciót, melyben egy kétdimenziós kristályba beépülő oxigénatomok váratlanul megnövelték a vízbontás katalízisének hatékonyságát.

https://mta.hu/tudomany_hirei/filleres-katalizator-a-hidrogenfejleszteshez-meglepetest-hozott-az-mta-ek-lenduletes-alapkutatasa-109017

2018. OKTÓBER 2.

Ritkán adódik olyan lehetőség, hogy egy kémiai reakciót az egyedi atomok szintjén, folyamatában figyelhetünk meg, mivel a kémiai reakciók általában túl gyorsak és rendezetlenek ehhez. A magyar kutatóknak most mégis éppen ezt sikerült megvalósítaniuk. Megfigyelték, amint az atomi vékony, „kétdimenziós” molibdén diszulfid (2D MoS₂) kristályokba egyedi oxigén atomok épülnek be, egyenként cserélve le a kristályrács kénatomjait. Emellett feltárták a megfigyelt reakció egy nagyon ígéretes alkalmazási lehetőségét is. Kimutatták ugyanis, hogy a 2D anyagba beépülő egyedi oxigénatomok meglepően hatékonyan katalizálják a hidrogénfejlesztést, ahogy azt a *Nature Chemistry* folyóiratban most megjelent cikkükben részletesen leírják.

Jobb katalizátor kerestetik

A víz elektrokémiai bontásának mindmáig legjobb katalizátora, a platina, túl drága az ipari léptékű alkalmazásokhoz. A költségek csökkentésére két stratégiát is aktívan vizsgálnak a kutatók. Egyrészt olyan alternatív anyagokat keresnek, amelyek hasonlóan hatékony katalizátorok, de jóval olcsóbbak, másrészt csökkenteni próbálják a katalizátorszemcsék méretét, így a felhasznált anyag mennyiségét. A méretcsökkentés azért hatékony, mert a katalizátorszemcséknek csak a felülete aktív, így a méretük

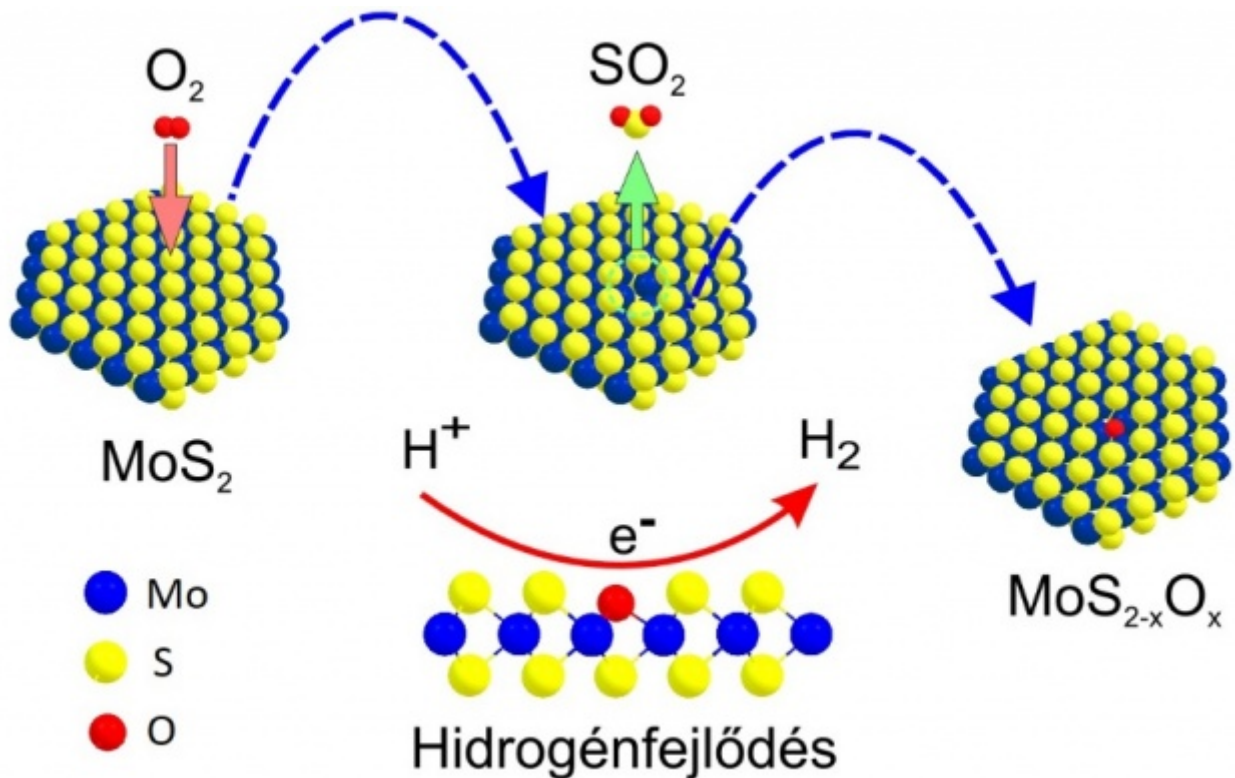
csökkentésével a passzív térfogat aránya nagyságrendekkel csökkenthető az aktív felületek javára.

Az MTA Energiatudományi Kutatóközpontban Tapasztó Levente vezetésével működő 2D anyagok kutatására fókuszáló Lendület és ERC kutatócsoport most ezen a területen ért el áttörést, méghozzá úgy, hogy a két megközelítést ötvözték. Platina helyett a jóval olcsóbb molibdén-diszulfidot és annak is az atomi vékony, úgynevezett kétdimenziós (2D) változatát alkalmazták. A molibdén-diszulfid már régóta a platina egyik lehetséges alternatívájának számít a hidrogénfejlesztés katalizálására, azonban eddig nem sikerült a platinát megközelítő aktivitást elérni ezzel az anyaggal. Ennek elsődleges oka, hogy a MoS_2 kristályok esetében nem a teljes felületük, csak az élek aktívak. A magyar kutatók atomi szinten voltak képesek módosítani a MoS_2 kristályok felületét, így aktiválva azt. Ehhez a MoS_2 kristály kénatomjai közül néhányat oxigénatomra cseréltek ki egy speciális oxidációs reakció segítségével.

Amikor megéri a fióknak dolgozni

Ez a reakció akár levegőn is végbemegy – igaz, csak több hónapos időskálán. Amikor egy fiókban pihenő mintát több hónap után ismét megvizsgáltak, felfigyeltek rá, hogy a szerkezetében az első vizsgálat óta atomi léptékű változások mentek végbe. Részletes vizsgálatokkal sikerült bizonyítaniuk, hogy nem másról van szó, mint hogy a levegő oxigénje lassan, egyenként lecserélte a MoS_2 kristály kénatomjait. Korábban a MoS_2 -nek ez az oxidációs reakciója nem volt ismert.

A felfedezést a kutatócsoport két egyedülálló eredménye tette lehetővé. Egyrészt egy általuk kifejlesztett módszerrel képesek a MoS_2 -nek akár, milliméteres átmérőjű 2D kristályait előállítani, másrészt egy speciális mérési konfigurációban sikerül elérni a hibák atomi szerkezetének minden korábbinál részletesebb felbontását pásztázó alagútmikroszkóp segítségével.



A 2D molibdén-diszulfid kristályok oxigénhelyettesítési reakciójának lépései, illetve a hidrogénfejlesztés katalizálásának sematikus vázlatára. *Forrás: MTA EK MFA/Tapasztó Levente*

Az igazi meglepetés azonban nem is annyira ez az új reakció volt, hanem az, hogy a kénatomok részleges oxigénnel cserélésével létrejövő 2D kristály a hidrogénfejlesztés sokkal jobb katalizátorának bizonyult, mint az eredeti tiszta anyag. A kutatóknak sikerül azonosítaniuk, hogy a kristályok megnövekedett katalitikus aktivitásáért ezek az egyedi oxigénatomok felelősek. Megmutatták, hogy az oxigénatomok kénatomokhoz képest nagyobb elektronegativitása az oxigénatomokra lokalizált negatív többlettöltést eredményez, ez pedig fontos szerepet játszik a katalitikus folyamatban. Természetesen szabad formában az oxigénatomok nem alkalmasak a hidrogénfejlesztés katalizálására, azonban egy 2D kristályba beágyazva már nagyon is hatékony katalizátorok lehetnek. Egyedi oxigénatomoknál kisebb és olcsóbb katalizátort pedig nehéz lenne elképzelni.

A hír alapjául a következő, a Nature Chemistry című folyóiratban megjelent publikáció szolgált:

Pető János, Ollár Tamás, Vancsó Péter, Zakhar Popov, Magda Gábor Zsolt, Dobrik Gergely, Chanyong Hwang, Pavel B Sorokin, Tapasztó Levente:

[„Spontaneous doping of the basal plane of MoS₂ single layers, through oxygen substitution under ambient conditions”](#)

További információ

Tapasztó Levente osztályvezető, MTA Energiatudományi Kutatóközpont Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet

tapaszto.levente@energia.mta.hu