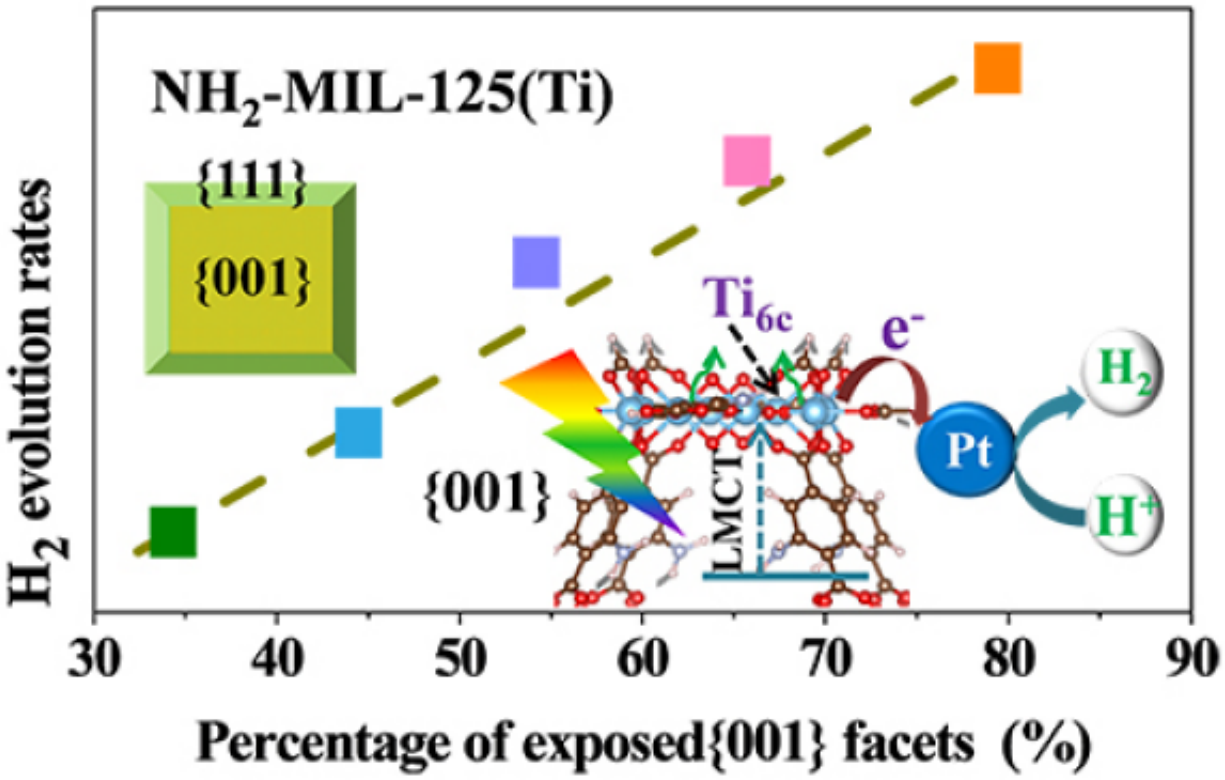
大连化物所发现MOF类光催化剂的电荷分离和制氢活性具有晶面依赖性



近日，中国科学院大连化学物理研究所太阳能研究部太阳能制储氢材料与催化研究组研究员章福祥等，在MOF材料晶面诱导光催化电荷分离与分解水制氢活性研究中取得新进展。该研究通过控制合成了不同{001}/{111}晶面暴露比例的NH2-MIL-125(Ti)片，发现其光催化分解水制氢半反应活性高度依赖于暴露{001}晶面比例，并利用理论计算和多种表征技术等揭示了其背后的结构影响本质，发现具有丰富饱和配位Ti原子（Ti6c）的{001}晶面更有利于捕获和传递光生电子，进而促进电荷分离。

利用太阳能光催化分解水制绿氢是转化太阳能到化学能的理想途径之一，其中，光生电荷分离困难是制约太阳能高效转化的核心因素。虽然晶面效应对无机半导体光催化剂电荷分离和催化活性的影响已被广泛研究报道，但在金属有机框架（MOFs）类材料光催化中相关研究较少。

本工作以具有宽光谱可见光响应的NH2-MIL-125(Ti)明星MOF光催化材料为研究模型，控制合成了一系列不同{001}/{111}晶面暴露比例的NH2-MIL-125(Ti)片，发现了{001}/{111}晶面暴露比例与光催化水分解产氢性能存在线性相关性，其中具有最高{001}晶面暴露比的MIL(Ti)-80%材料产氢性能最好。此外，该团队通过理论模拟与测试表征相结合证实发现，相比于低配位（Ti4c和Ti5c）Ti4+为主的{111}晶面，具有丰富饱和配位Ti4+（Ti6c）的{001}低指数晶面更利于捕获和传递光生电子，进而促进电荷分离和光催化活性。该工作不仅实验证实了MOF类光催化材料晶面微观结构对其光生电荷分离具有显著影响，而且表明了利用低指数晶面构筑高效MOF类光催化制氢体系的可行性。

相关研究成果以Saturated Ti-Coordinated {001} Facets-Dependent Photocatalytic Water Reduction over NH2-MIL-125(Ti) Sheets: Observation and Unraveling of Facets Effect为题，发表在《应用催化B：环境》（Applied Catalysis B: Environmental）上。研究工作得到国家自然科学基金、中国科学院国际合作项目、大连市支持高层次人才创新创业项目等的支持。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/198369.html