

中国科大提出光解水制氢的新机制

近日，中国科学技术大学教授杨金龙研究组提出了一种新的光解水的催化机制，使得利用红外光进行光解水制氢成为可能，为今后全频谱利用太阳能铺平了道路。该成果发表在最新一期的《物理评论快报》上。

利用太阳光分解水制氢，为人类提供清洁燃料，被视为化学的圣杯。水分解是吸热反应，传统理论要求光催化剂的能隙至少要大于反应吸热(1.23eV)，因而占太阳光能量近一半的红外光无法被吸收用来分解水制氢。

杨金龙研究组提出具有内禀电偶极矩的二维纳米催化剂，可突破传统理论对催化剂能隙的限制，用红外光也可以分解水产生氢气。这种催化剂存在偶极内电场，吸附在催化剂两个表面上的水分子会感受到不同的静电势，从而导致两个表面上水的氧化还原电势变得不再相同。如果氧化和还原分别发生在不同的表面，催化剂受到的能隙限制原则上将不再存在。

在这一新的光解水机制中，不仅紫外光和可见光，红外光也可以用来促使水分解产生氢气。另外，这种催化剂的光激发是一个电荷转移过程，电子和空穴分别产生在两个不同的表面，催化剂固有偶极电场有效促进了光生电子空穴对的空间分离，并做功帮助水分解产生氢气。基于这一机制，他们设计了一种双层氮化硼纳米体系，其两个表面分别用氢和氟修饰。理论计算与模拟表明这是一种有效的红外光催化分解水体系。

这一工作大大扩展了太阳能转化为化学能中可利用的太阳光频谱范围，有望对未来新能源技术的发展产生重要影响。英国物理学会（IOP）的物理世界网站发专文对此成果进行了介绍和评价。

上述研究得到了中国科学院、科技部、教育部和国家基金委的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/56913.html>