
大连化物所揭示光电催化分解水中空穴储存层的水合结构

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12998.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院院士、中科院大连化学物理研究所太阳能研究部研究员李灿和大连化物所研究员施晶

莹团队在太阳

能光电催化分解水制氢研究

方面取得新进展，揭示了保护氮化钽（ Ta_3N_5

）光阳极的空穴储存层——水铁矿的水合结构与其空穴储存功能之间的构效关系。

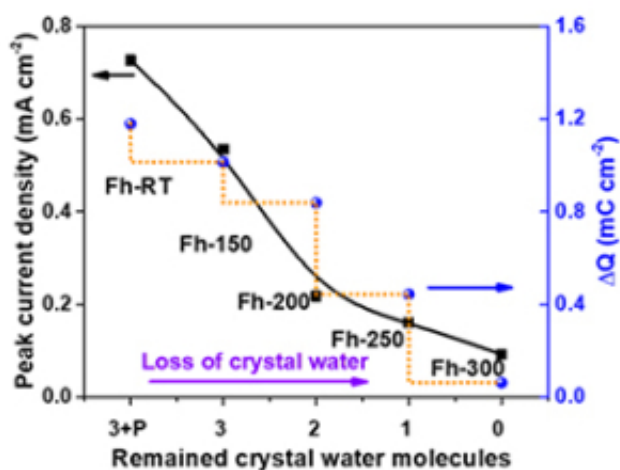
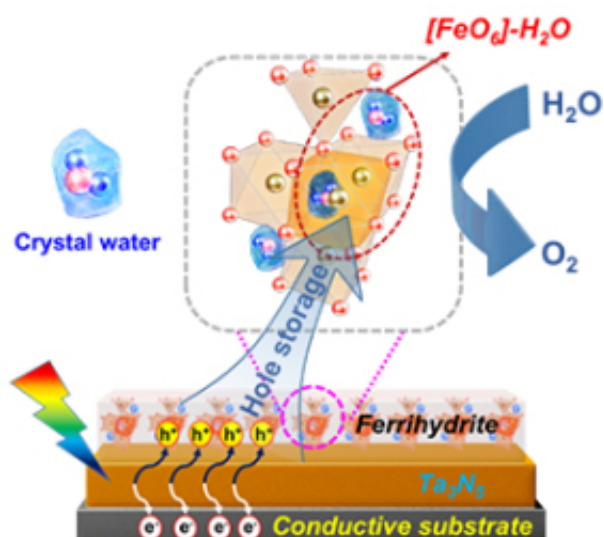
光电催化分解水是利用太阳能获取绿色氢能的理想途径之一。光阳极上水氧化产氧半反应是太阳能光电催化分解水的决速步骤，其反应过程动力学缓慢，且宽光谱响应半导体吸光材料极易因光生空穴氧化而被破坏。针对该难题，在前期工作中，该团队发现并提出了“空穴储存层”的新概念及新策略，以水铁矿（Ferrihydrite, Fh）作为一种典型的“空穴储存层”材料，构建了基于窄带隙半导体 Ta_3N_5 的高效稳定的光阳极体系（[Angew. Chem. Int. Ed.](#)2014；[Energy Environ. Sci.](#)2016；[Chem. Eur.](#)

[L](#)

2015）。空穴储存层可及时、有效地转移吸光半导体氮化钽中产生的光生空穴，从而抑制其光腐蚀，实现稳定的光电催化水氧化反应；通过其与氧化钛等修饰层的联用，使氮化钽基光阳极产生接近理论极限的水氧化光电流，创造并多年保持同类体系中的最高太阳能转换效率。然而，学界尚不清楚作为“空穴储存层”的水铁矿的微观结构。

该研究中，研究人员通过Fh热处理脱水过程及系统的结构表征分析，发现水铁矿内部拥有三类含化学结晶水的铁氧簇结构单元，伴随焙烧处理下的水合结构演化，其在氮化钽光阳极体系中的“空穴储存”功能被逐渐调变（弱化），进一步利用精确升温失重测定、XRD、XPS、穆斯堡尔谱等技术进行深入研究，确定了结晶水对维持水铁矿结构和空穴储存功能具有重要作用，并揭示了水铁矿的空穴储存能力与其水合结构的构效关系，为光电极界面修饰层的理性设计提供了重要参考。

相关研究成果发表在《德国应用化学》（[Angew. Chem. Int. Ed.](#)）上，并被选为热点文章（Hot Paper）。研究成果得到国家自然科学基金委“人工光合成科学中心”项目、科学技术部重点研发项目、中科院战略性先导科技专项“能源化学转化的本质与调控”等的资助。



大连化物所揭示光电催化分解水中空穴储存层的水合结构

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发