
制备限域MOF材料用于高性能电解水反应

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/20580.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！

制备限域MOF材料用于高性能电解水反应。 近日，中科院大连化学物理研究所研究员肖建平团队与中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员张涛团队、浙江大学研究员侯阳团队在电解水材料设计中取得新进展。研究人员制备了限域环境下的NiFe MOF材料，实现了超低过电位（106 mV）和超高电解稳定性（大于150小时）的电解水过程。相关成果发表在《自然—通讯》上。

电解水（OER）是实现清洁能源转化中的重要过程。有机金属骨架（MOFs）材料被认为是一种极具潜力的电解水材料，然而，其电导率较差的特性阻碍了其作为电催化材料的发展进程。

在本工作中，侯阳团队通过将NiFe MOF材料封装在限域石墨烯层间，解决了MOF材料电导率差的本质问题。与此同时，肖建平团队通过OER截顶式反应相图的建立，证明了限域环境提高了NiFe MOF材料的本征催化活性。

肖建平团队以第一性原理密度泛函理论计算为研究手段，首先对限域环境下NiFe MOF材料中的活性位点的电子结构进行研究。团队从限域对电子轨道的态密度影响可以推断出，限域环境让MOF材料上的活性位点可体现出更强的成键能力，根据传统OER活性趋势的推断，这可能是增强OER催化活性的本质原因。团队进一步对OER催化过程进行研究，通过材料表面重要中间物种之间的相互线性关联，在MOF材料中也得到了二维截顶式反应相图。这与之前该团队得到的在CoMn材料上所体现出的OER活性趋势高度一致。

此外，在MOF材料的体系中，团队发现体现出高活性的限域NiFe MOF材料的主要活性位点也处于反常截顶的活性火山型曲线的顶点平台上，证明了该材料高OER活性的本质。同时，一系列NiFe MOF材料的理论活性趋势能够和实验活性趋势完美契合，证明了理论模型的准确性。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-022-33847-z>

作者：肖建平等 来源：《自然—通讯》

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](http://www.iikx.com)转发