

新疆理化所在极性材料光催化研究方面取得系列进展

极性材料由于分子基元在晶体中的各向异性使得晶胞中一些基团的正、负电中心并非重合，存在本征偶极矩，产生自发极化电场。目前这类材料主要应用于非线性光学、铁电、功能性陶瓷与薄膜等。

中国科学院新疆理化技术研究所环境科学与技术研究室的科研人员在具有内建电场的硼氧结构基元的极性光催化材料的制备及应用方面取得系列进展。研究人员分析了该类材料对氯酚类污染物的去除能力，结合开尔文探针力显微实验证实了内建电场的存在（*Chemistry of Materials*, 2014, 26, 3169）；借助密度泛函理论（DFT）手段确证了极性材料电子结构及光生电荷转移过程（*Journal of Materials Chemistry A*, 2015, 3, 12179）；考察了在不同金属离子半径作用下导致的不同极化场对有机污染物降解性能的影响（*Applied Catalysis B: Environmental*, 2016, 181, 436）。

近日，该实验室科研人员又设计和制备了B-O结构基元与具有d⁰电子构型的金属离子复合的极性光催化材料，发现该类材料在去除卤代烃类方面具有优异的性能。10分钟对难降解氟取代酚类仍然具有高达83%的去除能力。该实验结果归因于具有d⁰电子结构金属离子形成的金属多面体与B-O结构多面体的协同作用增大了材料宏观极化电场，提高了载流子的分离能力。该工作发表于《应用催化B:环境》（*Applied Catalysis B: Environmental*, 2017, DOI:10.1016/j.apcatb.2017.01.016）。

但是，是否材料极性越大其活性越高，值得科研人员进行进一步研究。为此，科研人员又合成了极化能力不同的四种等构的极性材料。科研人员通过X-射线粉末衍射、紫外可见漫反射、单晶结构解析、光电化学、离子色谱、高效液相色谱、原子力显微、开尔文探针力显微及理论计算等分析详细考察了材料的单晶结构、光响应范围、电荷转移过程、吸附能、降解过程及降解过程中的化学组成变化及其降解机理。有意义的是，实验发现了光催化活性虽然与其极化能力有着一定的联系，但并不尽然。对于部分材料随着极化能力增加而增加，而当极化能力增加到一定程度时其活性还与材料的表面电势变化及吸附能紧密相关。该工作发表于《材料化学》（*Chemistry of materials*, 2016, DOI:10.1021/acs.chemmater.6b04082）。

上述工作受到国家、中科院及地方政府相关机构经费支持。

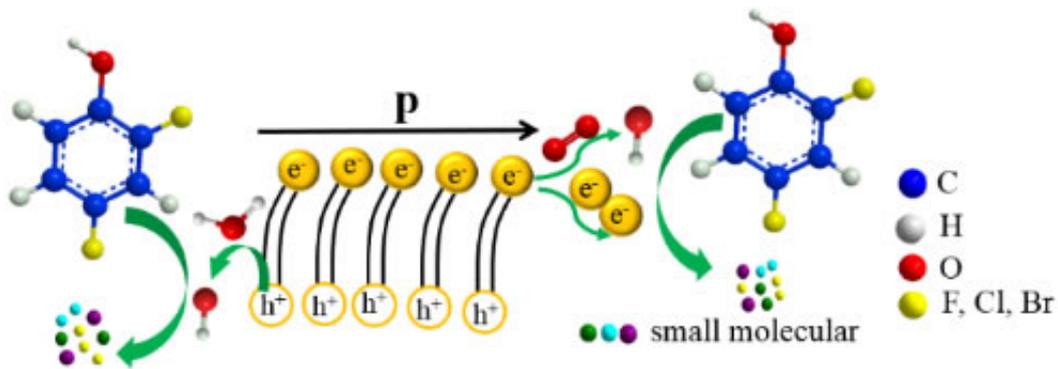


图1：在极化电场作用下卤代酚类脱卤示意图

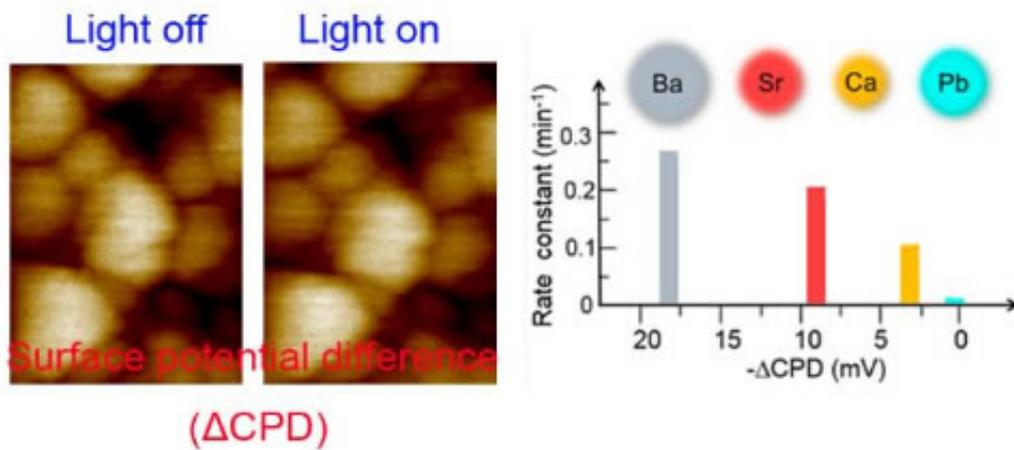


图2：表面电势变化与光催化活性之间关系图

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/103807.html>