

二氧化钛-石墨炔复合光催化剂研究取得进展

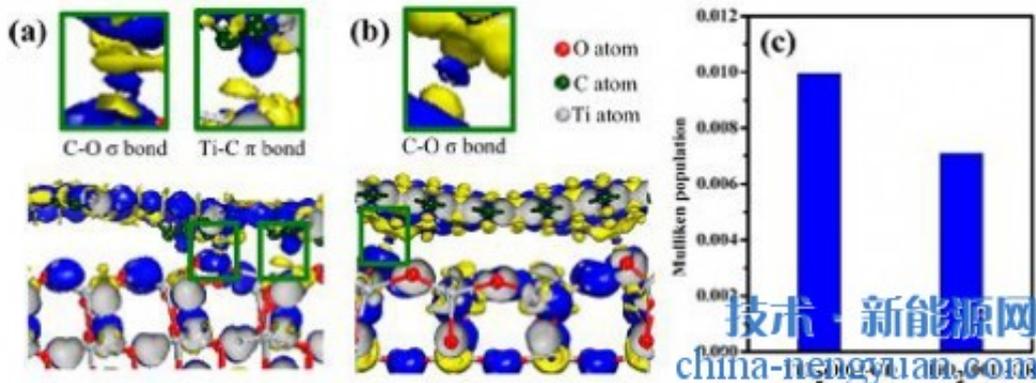


图1. 复合物界面处的电子差分密度图: (a) GD-TiO₂(001), (b) GR-TiO₂(001); (c) 复合物中GD和GR表面上的 Mulliken 电荷

利用半导体光催化氧化处理各种污染物是一种环境治理的有效方法。TiO₂被认为是最具应用潜力的半导体光催化剂；然而其光吸收仅限于紫外区，且光照后产生的电子与空穴易于复合而失去活性。为抑制复合，除传统的掺杂及共吸附，碳材料作为电子的良受体也吸引了大家的目光，石墨烯（GR）已被证明可有效抑制复合。最近，碳家族又增加了一个新成员—石墨炔（GD），是由1,3-二炔键将苯环共轭连接形成平面网络结构的全碳分子，具有大的共轭体系和宽面间距。

在国家自然科学基金和国家重点实验室课题的支持下，中科院过程工程研究所王丹研究员的研究团队利用水热法使TiO₂与GD通过Ti-O-C形成复合材料，表现出比纯TiO₂、TiO₂-碳纳米管以及TiO₂-GR复合材料更优越的光催化性能。同时，由于C杂质能级的引入减小了TiO₂的带隙宽度，使其展示出优良的可见光催化活性。该成果发表在国际期刊Small (Small, 2012, 8, 265-271) 上。

在以往成果的基础上，该团队采用基于密度泛函理论的第一原理方法计算了TiO₂与二维碳材料复合物的化学结构与电子特性。结果表明，TiO₂(001)-GD复合物的电子结构、电荷分离和氧化能力都优于纯TiO₂(001)和TiO₂(001)-GR复合物，是一种极具应用潜力的光催化剂。通过实验进一步验证了理论计算结果，在光催化降解亚甲基蓝的实验中，TiO₂(001)-GD的降解反应速率常数是纯TiO₂(001)的1.63倍，是TiO₂(001)-GR的1.27倍，对高效光催化剂设计与开发具有重要意义。该成果发表在国际期刊ACS Nano (ACS Nano, 2013, 7, 1504-1512) 上。

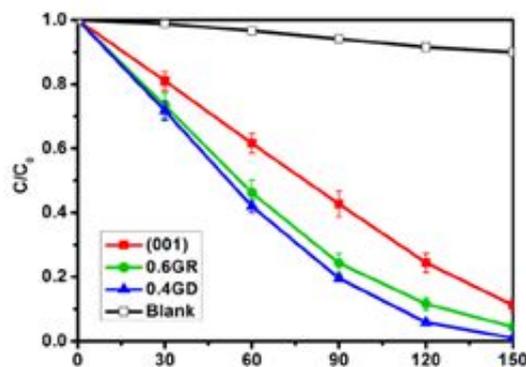


图2. 亚甲基蓝的光催化降解曲线

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/49827.html>