

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

B掺杂对K₂La₂Ti₃O₁₀光催化分解水制氢活性的影响[杨亚辉¹](#) [2](#) [陈启元¹](#) [李洁¹](#)

(1 中南大学化学化工学院, 湖南长沙 410083; 2 中南大学资源加工与生物工程学院, 湖南长沙 410083)

摘要 通过溶胶-凝胶法制备了层状钙钛矿复合氧化物K₂La₂Ti₃O₁₀及B掺杂的K₂La₂Ti₃O₁₀, 并采用X射线衍射和紫外-可见漫反射光谱等对制得样品进行了表征. 以I⁻为电子给体, 分别在紫外和可见光辐射下研究了所制得样品光催化分解水的产氢活性; 采用第一性原理, 计算了B掺杂对K₂La₂Ti₃O₁₀半导体能带结构和态密度的影响, 从电子结构的变化揭示了掺杂引起光催化活性差异的原因. 结果表明, B的掺入能够提高K₂La₂Ti₃O₁₀的光解水产氢活性且存在合适的B掺杂浓度. 当B与Ti的摩尔比为0.01:1时, 紫外光催化分解水产氢速率为151.7 μmol/(L·h), 比未掺杂B的K₂La₂Ti₃O₁₀产氢速率提高166%; 当B与Ti的摩尔比为0.02:1时, 可见光催化分解水产氢速率为85.2 μmol/(L·h), 为未掺杂B的K₂La₂Ti₃O₁₀产氢速率的5.2倍.

关键词 [钙钛矿复合氧化物](#); [硼](#); [光催化活性](#); [水](#); [氢气](#); [第一性原理](#)