

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

不同取代基巯基偶氮苯甲酸 TiO₂ 光催化降解的密度泛函理论研究

[罗世霞 1](#) [张思亭 1](#) [张笑一 1](#) [朱淮武 1](#) [胡继伟 2](#) [卫钢 3](#)

(1 贵州师范大学化学与材料科学学院, 贵州贵阳 550001 2 贵州师范大学贵州省山地环境信息系统和生态环境保护重点实验室, 贵州贵阳 550001 3 联邦科学与工业研究组织材料科学与工程分部, 林德菲尔德, 新南威尔士州2070, 澳大利亚)

摘要 以 TiO₂ 为光催化剂, 对含六种不同取代基的巯基偶氮苯甲酸进行了光催化降解实验, 并采用量子化学密度泛函理论 B3LYP/6-31G**计算了巯基偶氮苯甲酸的电子结构, 研究了巯基偶氮苯甲酸中推、拉电子取代基对其光催化降解活性的影响. 结果表明, 拉电子基 (-COOH 或-SO₃H) 的引入使巯基偶氮苯甲酸的偶极矩增大, 绝对电负性减小, 最高占有轨道能量升高, HOMO-LUMO 能隙和 C-N 键的键级降低, 从而提高了巯基偶氮苯甲酸的光催化降解活性, 而分子中推电子基团的影响则相反.

关键词 [巯基偶氮苯甲酸](#); [光催化降解](#); [电子结构](#); [取代基](#)