

相关文章链接

学校召开新生“科学与社会”研讨课程启动会

丁仲礼副院长来我校调研

中国科大获机器人世界杯一金一银

中国科大研究发现氮气与氧气在纳米二氧化钛表面光催化形成硝酸盐

物理学院布置落实“科学与社会新生研讨课”工作

我校各学院全面启动研究生课程体系改革与建设工作

学校召开第五十四次校长工作会议

我校手球队在“两岸四地大学生手球赛”中获得佳绩

中国科学院国际组织任职及后备人员培训班在我校开班

校医院召开院士保健工作座谈会

友情链接

中国科学院

中国科学技术大学

中国科大新浪微博

瀚海星云

中国科大新闻中心

中国科大优酷视频空间

科大校友新创基金会

中国高校传媒联盟

全院办校专题网站

中国科大50周年校庆

中国科大邮箱

■ 首页 ■ 新闻博览

中国科大揭示二氧化钛表面光催化反应微观机理

2013-07-31

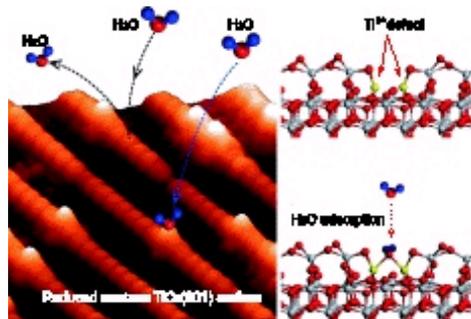
近期，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室单分子科学研究团队取得新进展，研究成果揭示了锐钛矿二氧化钛（ TiO_2 ）表面催化活性和微观反应机理。该成果以“Role of point defects on the reactivity of reconstructed anatase titanium dioxide (001) surface”为题，发表在7月30日出版的*Nature Communications*上。

TiO_2 是太阳能转化研究中的重要材料体系，其在光催化分解水制氢气和人工光合作用等方面展现出迷人的前景，针对这一材料体系的研究成为国际上新能源材料研究领域中的热点方向。寻找新的催化材料和高效的能量转换机理是其中重要的科学问题。

TiO_2 的锐钛矿相和金红石相是两种得到广泛研究的晶相。其中，金红石由于结构稳定、易于单晶生长，过去的研究主要针对 TiO_2 的金红石相。比较而言，锐钛矿相的 TiO_2 稳定性低，直觉判断其化学活性应该比金红石相高，有许多理论计算也支持这一观念。特别是理论预言锐钛矿 TiO_2 (001)表面是所有晶面中活性最高的。近几年，有大量的材料学家投入到合成富含(001)面的锐钛矿 TiO_2 纳米晶，并研究其光催化性质，但实验得到的光催化效率与理论预言存在很大的差异。

针对这一问题，王兵教授等采用脉冲激光沉积技术，制备了高质量的锐钛矿 TiO_2 (001)再构单晶薄膜，利用扫描隧道显微术（STM）微观表征和原子操纵的方法，清晰地揭示出了该表面的结构和化学活性位点；结合赵瑾教授等的理论计算和分析，提出了新的表面结构模型，澄清了这一表面缺陷结构及化学活性位的长期争论。该研究结果表明，锐钛矿 TiO_2 (001)再构表面表现为完全氧化的形式，纠正了过去关于该表面部分氧化的结构模型；+3价态的缺陷位是该表面活性位点。这一发现为进一步设计和提高 TiO_2 的催化活性及研究光化学反应提供了极有价值的信息。

近年来，该研究团队在分子尺度的催化反应及光化学微观机理研究中开展了深入细致的工作，揭示了诸如 CO 、 CO_2 、 O_2 和 H_2O 分子的吸附和微观反应机理，并纠正了过去的一些错误观点，相关工作在*J. Am. Chem. Soc.*发表了多篇论文。通过发展新的实验技术，该团队于2012年首次观测到了单个水分子在金红石 TiO_2 (110)表面的光催化分解过程，并揭示了其微观物理、化学机制，相关工作发表在2012年的*J. Am. Chem. Soc.*，并被*Nature China*以“Catalysis: Seeking split”为题作为亮点工作报道。该团队的系列工作为理解分子尺度光催化微观反应机理提供了新的视角，将是深入开展光分解水制氢及人工光合作用研究所必要的科学基础。



上述研究得到中国科学院、科技部、国家基金委和教育部的支持。

