

网站搜索
Search

关键词:

搜索类别:

中国科学院-当日要闻

- 中国科学院义务开展中小企业创新发展培训
- 工信部副部长陈求发到中科院视察探月工程二...
- CNNIC圆满完成温家宝总理在线交流CN...
- 路甬祥再次当选国际科学院委员会联合主席
- 七部委号召科技人员服务企业
- 路甬祥致全院创新文化建设十周年总结交流大...
- 新华网专访白春礼: 应对金融危机, 科学思想...
- 建设中关村国家自主创新示范区动员大会在京...
- 人民日报: 明确定位责任 推进廉政建设
- 中国科学院召开党风廉政建设工作会议

《自然》报道半导体所光催化研究成果

半导体研究所

最近, 中科院半导体所李京波小组与美国的合作者通过“剪裁”二氧化钛的能带结构, 设计了一种增强二氧化钛的光催化效率的有效方法。该成果的学术论文于3月17日成为《自然》杂志网站中的“亮点论文”。

2月24日, 《自然》-亚洲材料主编Martin Vacha、记者Adam J. Dickie分别采访了李京波小组在光催化材料研究中取得的重要进展。

据介绍, 用钼碳共掺杂方法进行“人工剪裁”二氧化钛能带的优点为: 在二氧化钛掺杂氮, 或者过渡金属能够减小二氧化钛的光学带隙, 但是单独掺杂会使得光激发的电荷局域化并阻碍电化学反应的继续进行。对于钼碳共掺的方法, 理论上使用超原胞, 同时有一个钛和一个氧原子被取代形成彼此钝化的钼碳对, 科研人员尝试了很多原子对, 只有钼碳能够减小二氧化钛带隙的同时还保证了二氧化钛仍具有高的催化活性, 由此发现, 这种彼此钝化的原子对消除了单独掺杂时对载流子的局域效应, 从而允许电荷转移参与水分解反应。

科研人员用钼碳共掺杂方法进行设计, 期望在这种彼此钝化的共掺杂体系中, 载流子寿命会比单独掺杂时有所增长。这种设计原理也适用于很多半导体材料和催化剂材料, 随着第一性原理理论的发展和计算机性能的提高, 计算机辅助的材料设计是可能实现的, 并且已经成为加速科学发现的一个非常重要的工具。

二氧化钛是用来生产燃料电池中所需氢气的一种常用的光催化剂, 它是一种光活性材料, 在环境和能源领域中充当重要的角色, 它不仅能够利用太阳能把水分解成氢气和氧气, 从水中制氢, 可作为清洁燃料, 而且可以用于有机污染物的降解, 具有高效率 and 潜在的广泛应用性, 成为能从环境中降解并除去有毒化学污染物的最有效途径之一。

由于二氧化钛的带隙为3.2 eV 只能吸收太阳光谱中的紫外部分, 而这部分只占太阳光能量的5%左右, 所以不能充分的利用太阳能。科研人员提出的新掺杂方法是利用第一性原理计算的理论分析, 发现特殊的共掺杂施受主对, 比如“钼碳共掺”形成的新的杂质带, 能够充分吸收太阳的可见光部分, 从而提高二氧化钛分解水的催化效率。

