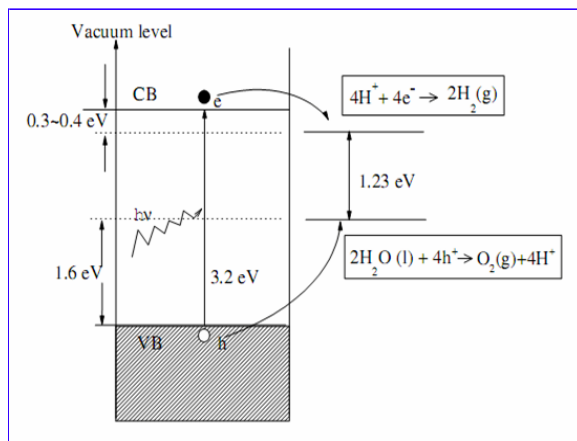




## 半导体所在提高TiO<sub>2</sub>光催化效率的研究工作中取得新进展

2009-02-10 | 【大 中 小】



从能源角度考虑,氢能是一种可再生的绿色能源。但是传统的制氢方法,要消耗大量的常规能源,限制了氢能的推广利用。早在1972年,日本科学家就提出用光照TiO<sub>2</sub>分解水来制备H<sub>2</sub>。TiO<sub>2</sub>由于其具有强的催化活性,好的化学稳定性以及高的光生载流子寿命等特性而成为目前研究最多的半导体光催化材料。但是由于TiO<sub>2</sub>是一种宽禁带半导体材料(E<sub>g</sub>=3.2eV),只能吸收太阳光谱中的紫外光部分,而紫外光只占太阳光总能量的5%左右,所以如何提高TiO<sub>2</sub>对可见光的光响应是目前该领域的研究热点。

光催化是同时利用光生载流子的还原-氧化能力来降解周围环境中的有毒污染物以及分解水来制备H<sub>2</sub>和O<sub>2</sub>。原则上,要提高TiO<sub>2</sub>的光催化效率,不仅要调整其带隙满足大约在2.0~2.2 eV范围内的要求,还要保证其光生载流子仍具备分解水的还原-氧化能力,即调整后的TiO<sub>2</sub>的导带底的位置不得低于H<sub>2</sub>O的氢电极电位;价带顶的位置不得高于H<sub>2</sub>O的氧电极电位。

基于以上考虑,半导体所李京波研究员、博士生盖艳琴应用第一性原理计算,采用补偿的施、受主共掺杂的方法,通过分析TiO<sub>2</sub>的价带顶和导带底的波函数特点以及掺杂元素化学特性,得出Mo+C共掺杂到TiO<sub>2</sub>中,能够满足带隙要求的同时,保证了材料的价带顶位置向高能方向移动,而导带底位置几乎不变;同时这种补偿的共掺杂的方法消除了由单独掺杂所引入的载流子复合中心,提高了光生载流子的寿命;以及施、受主对之间强的库仑束缚能,保证了材料的热稳定性。该研究成果,为实现高效率的TiO<sub>2</sub>基的光催化材料提供了新的思路。

该工作与李树深研究员、夏建白院士、美国再生能源国家实验室魏苏淮教授合作。相关成果发表在2009年的在2009年2月9日的《物理评论快报》 Physics Review Letters 102, 036402 (2009)上。

该项目得到中科院“百人计划”、国家自然科学基金委和科技部973项目的支持。

### 新闻动态

[图片新闻](#)

[所内新闻](#)

[学术交流](#)

[科研进展](#)

[黄昆半导体科学技术论坛](#)



所长信箱  
DIRECTOR-MAIL

图书信息中心

半导体学报

黄昆科学奖

半导体之声

政务公开

科学传播

所级中心



版权所有 © 中国科学院半导体研究所 [京ICP备05085259号](#)  
通信地址：北京市海淀区清华东路甲35号 北京912信箱 (100083)  
电话：010-82304210