

عنوان مقاله:

مطالعه اثر همزمان ناخالصی فلزهای واسطه 3d و نقص تهی‌جای اکسیژن روی TiO_2 آناتاز و روتیل

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 19، شماره 1 (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 12

نویسندگان:

سید محمود اسفندفرد - گروه شیمی، بخش علوم پایه، دانشگاه پیام نور، تهران

محمدرضا الهی فرد - گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه اردکان

رضا بهجت منش اردکانی - گروه شیمی، بخش علوم پایه، دانشگاه پیام نور، تهران

هادی کارگر - گروه شیمی، بخش علوم پایه، دانشگاه پیام نور، تهران

خلاصه مقاله:

در این کار، ابتدا انرژی تشکیل نقص تهی‌جای اکسیژن در ساختارهای 2TiO آناتاز و روتیل، در اثر جایگزینی Ti با فلزهای 3d، مورد بررسی قرار گرفت. سپس اثر همزمان ناخالصی فلزهای واسطه 3d و نقص تهی‌جای اکسیژن روی پایداری آناتاز نسبت به روتیل و همچنین ساختار الکترونی آنها مطالعه شد. محاسبه های سامانمند انرژی شکل گیری، پایداری بلورینی، ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی نمونه‌های 2TiO آناتاز و روتیل آلاییده به فلزهای واسطه 3d همراه با نقص اکسیژن و نیز بدون نقص اکسیژن، با استفاده از FHI-aims، که یک بسته نرم‌افزاری بر پایه نظریه تابعی چگالی توسعه یافته است، انجام شده‌اند. نتیجه های این پژوهش نشان داد که ناخالصی‌های کاتیونی جایگزین شده می‌توانند بر انرژی تشکیل نقص تهی‌جای اکسیژن اثر قابل ملاحظه ای بگذارند به گونه ای که همه ناخالصی‌ها به جز Mn و Zn انرژی تشکیل نقص تهی‌جای اکسیژن را به گونه قابل توجهی کاهش دادند که خود عامل افزایش غلظت نقص و در نتیجه افزایش فعالیت فوتوکاتالیزگری است. همچنین محاسبه های این پژوهش نشان می‌دهند که از میان همه ناخالصی ها، تنها Fe می‌تواند در حضور نقص اکسیژن، از استحاله آناتاز به روتیل جلوگیری کند. تجزیه و تحلیل نتایج محاسبه های ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی ساختارها نشان می‌دهد که حضور نقص تهی‌جای اکسیژن در هر دو ساختار آناتاز و روتیل، علاوه بر ایجاد ترازهای پر در زیر نوار هدایت که منجر به بروز نیمه هادی از نوع n می‌شود، گاف انرژی را نیز افزایش می‌دهد. همچنین همزمان با نقص تهی‌جای اکسیژن، عناصر واسطه 3d جایگزین شده، ترازهای ناخالصی ایجاد می‌کنند که با روند منظمی از نوار هدایت به سمت نوار ظرفیت با افزایش عدد اتمی ناخالصی جابه‌جا می‌شوند. در اینجا، با عناصر Fe، Ni، Co و Cu ترازهای ناخالصی در وسط گاف نواری ظاهر می‌شوند که باعث گسترش ناحیه برانگیختگی به سمت مرئی خواهند شد. آنالیز محاسبه های چگالی حالت‌های الکترونی جزیی نشان می‌دهد که اوربیتال های 3d عناصر واسطه سهم اصلی را در ترازهای ناخالصی دارند.

کلمات کلیدی:

فوتوکاتالیزگرهای مبتنی بر TiO_2 ، آناتاز و روتیل، نقص تهی‌جای اکسیژن، فلزهای واسطه، چگالی حالت‌های الکترونی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1157630>



