
钛氧团簇异构体动力学及构效关系研究取得新进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/2815.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

钛氧团簇异构体动力学及构效关系研究取得新进展。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员吴凯丰团队和中国科学院福建物质结构研究所研究员张健、张磊团队合作，报道了首例钛氧团簇中的异构体现象，并通过超快动力学研究了两个异构体在光电化学与光催化应用中的构效关系。相关工作发表于《德国应用化学》(Angew. Chem. Int. Ed.)上。

分子体系中存在很多的同分异构体现象，微小的结构差异可带来功能上的巨大差别。无机晶体也存在不同的晶相，比如TiO₂常见的晶相有锐钛矿、金红石和板钛矿等；这些不同的晶相也存在很大的功能差异，就光催化性能而言普遍发现锐钛矿要优于金红石。福建物构所团队长期专注于钛氧团簇的合成与应用，这些团簇可以被看作是分子与晶体之间的过渡形态，然而团簇中的同分异构现象鲜有报道。

在该工作中，福建物构所团队合成出首例钛氧团簇中的异构体。在这对异构体中，{Ti(Ti₅)}五边形单元或互相垂直排布，或互相平行排布，分别可形成PTC-49V和PTC-49H团簇。这对异构体的光电化学与光催化性能呈现出显著的差异，例如同样条件下的光催化产氢效率PTC-49V比PTC-49H高出33倍。为解释这一差异并揭示相关的构效关系，吴凯丰团队研究了PTC-49V和PTC-49H的激发态动力学和它们到电荷受体的电荷转移动力学，发现前者到乳酸(光催化牺牲试剂)的空穴转移速率要比后者高出1-2个数量级，可有效解释两者的光催化性能差异。

PTC-49V中的{Ti₈O₁₄}结构单元在锐钛矿TiO₂也同样存在，因此PTC-49V可看做是锐钛矿TiO₂的分子模型。该研究中发现的构效关系也为锐钛矿TiO₂优异的光催化性能提供一个可能的分子层面的全新视角。

该工作得到国家重点研发计划的资助。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发