

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ФОТОКАТАЛИЗАТОРА ВОЛЬФРАМА ВИСМУТА ПУТЕМ МОДИФИКАЦИИ ЦЕРИЕМ

Рузибова М.М.¹, Стрижевская А.А.², Кадирова З.Ч.³, Хужамбердиев М.И.³

¹Ташкентский химико-технологический институт

²Национальный Университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека, Ташкент

³Узбекско-японский молодежный центр инноваций, Ташкент

hmirabbos@gmail.com

Актуальность

Интерес к фотокаталитическим соединениям на основе Bi_2WO_6 обусловлен возможностью использования их для разложения органических загрязнителей (ацетальдегид, хлороформ, красители и др) под действием видимого света. Bi_2WO_6 обладает высокой активностью, стабильными свойствами, которые обусловлены структурными особенностями: октаэдрами WO_6 , заключенными между слоями $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$. Эта особенность приводит к быстрому разделению электронов и дырок, сгенерированных облучением, что препятствует их рекомбинации [1].

Цель

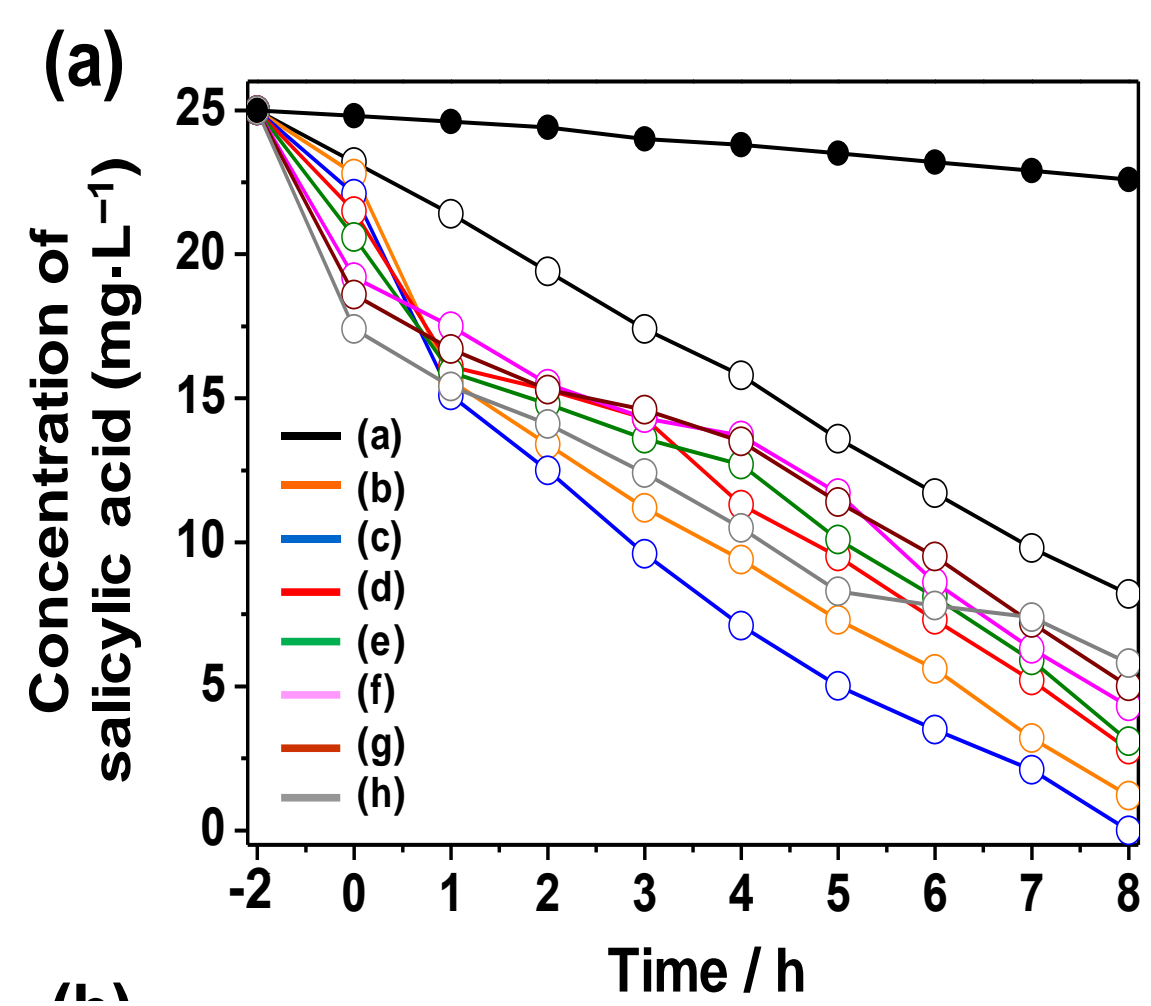


Рис.1. Разложение салициловой кислоты в растворе образцами порошков Bi_2WO_6 допированных церием в различных концентрациях: (a) 0 mol%, (b) 0.5 mol%, (c) 1 mol%, (d) 2 mol%, (e) 4 mol%, (f) 6 mol%, (g) 8 mol%, and (h) 10 mol%.

Экспериментально установлено, что частичное замещение атомов висмута на Ce^{3+} в структуре фотокатализатора Bi_2WO_6 вызывает усиление фотокаталитической активности разложения салициловой кислоты в растворе.

Целью работы являлось компьютерное моделирование методом DFT и молекулярной динамики наночастиц Bi_2WO_6 с заданными структурными параметрами и шириной запрещенной зоны.

Методы

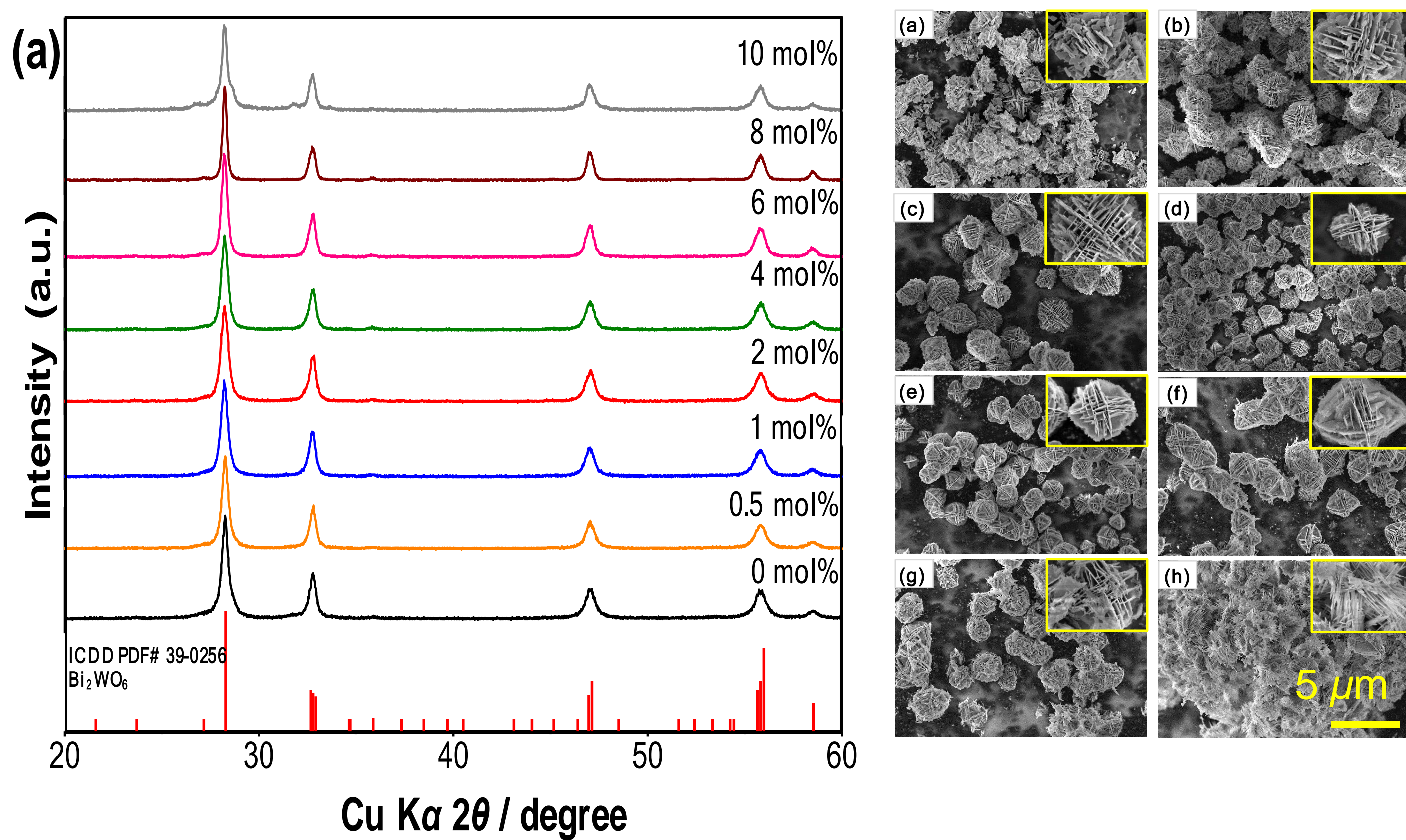


Fig. 2. РФА и СЭМ образцов порошков Bi_2WO_6 допированных церием в различных концентрациях: (a) 0 mol%, (b) 0.5 mol%, (c) 1 mol%, (d) 2 mol%, (e) 4 mol%, (f) 6 mol%, (g) 8 mol%, and (h) 10 mol%.

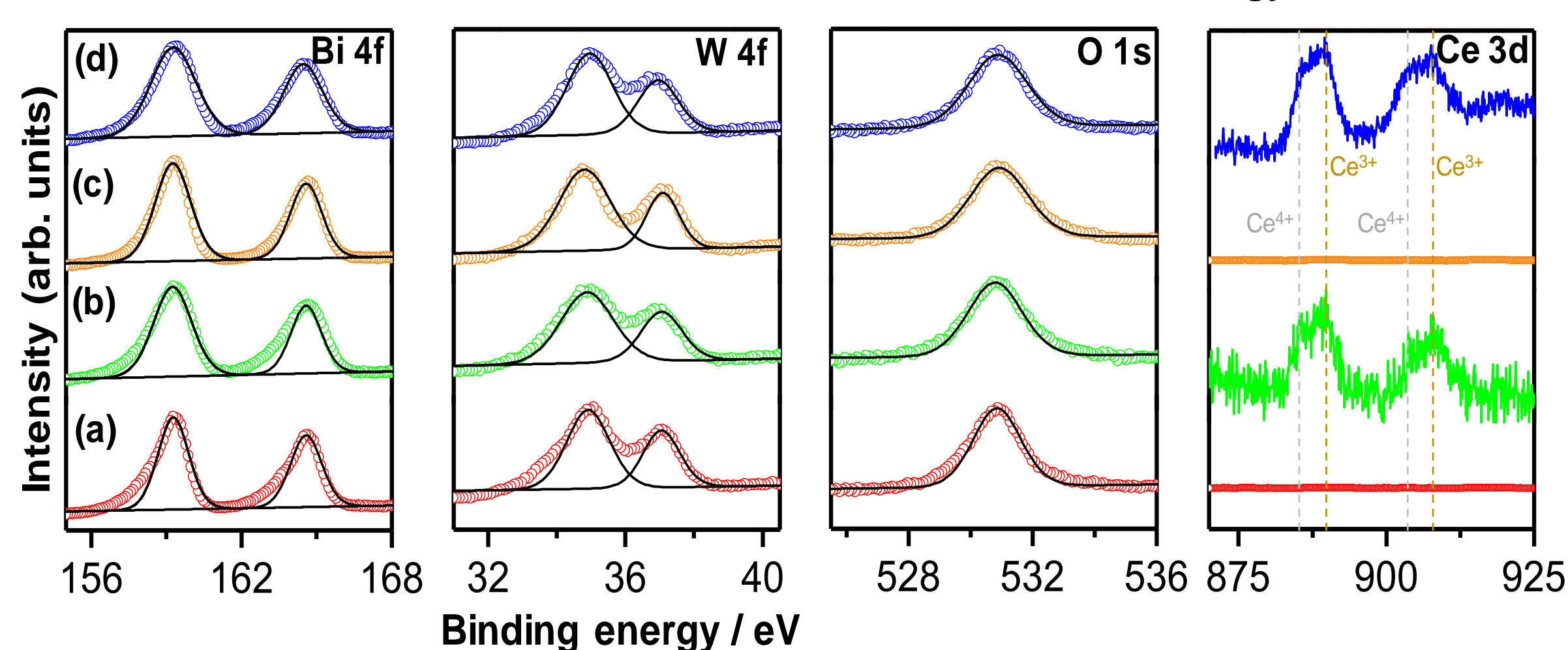
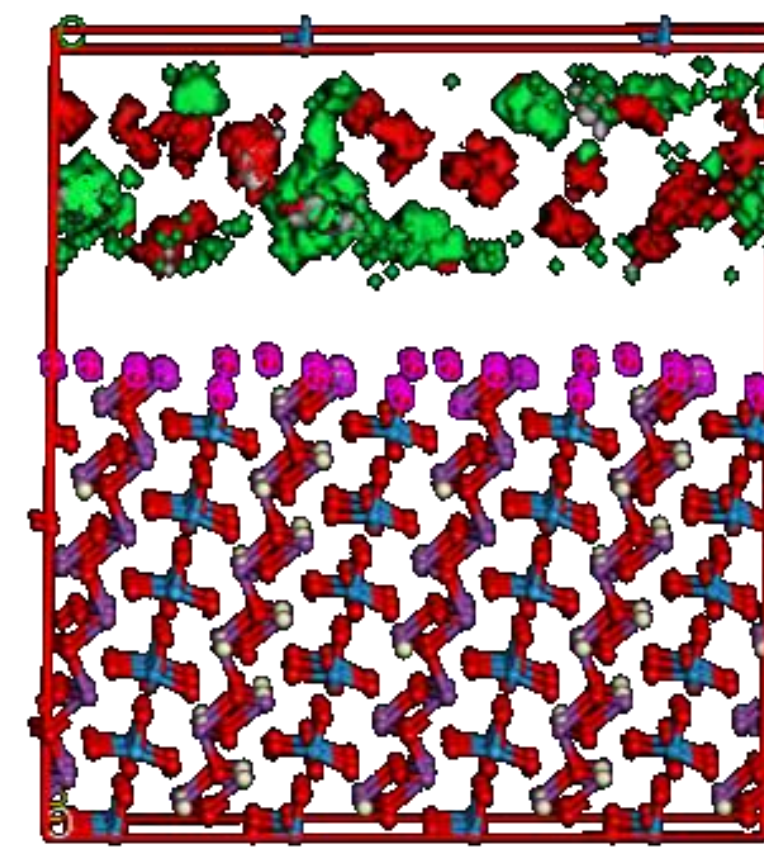
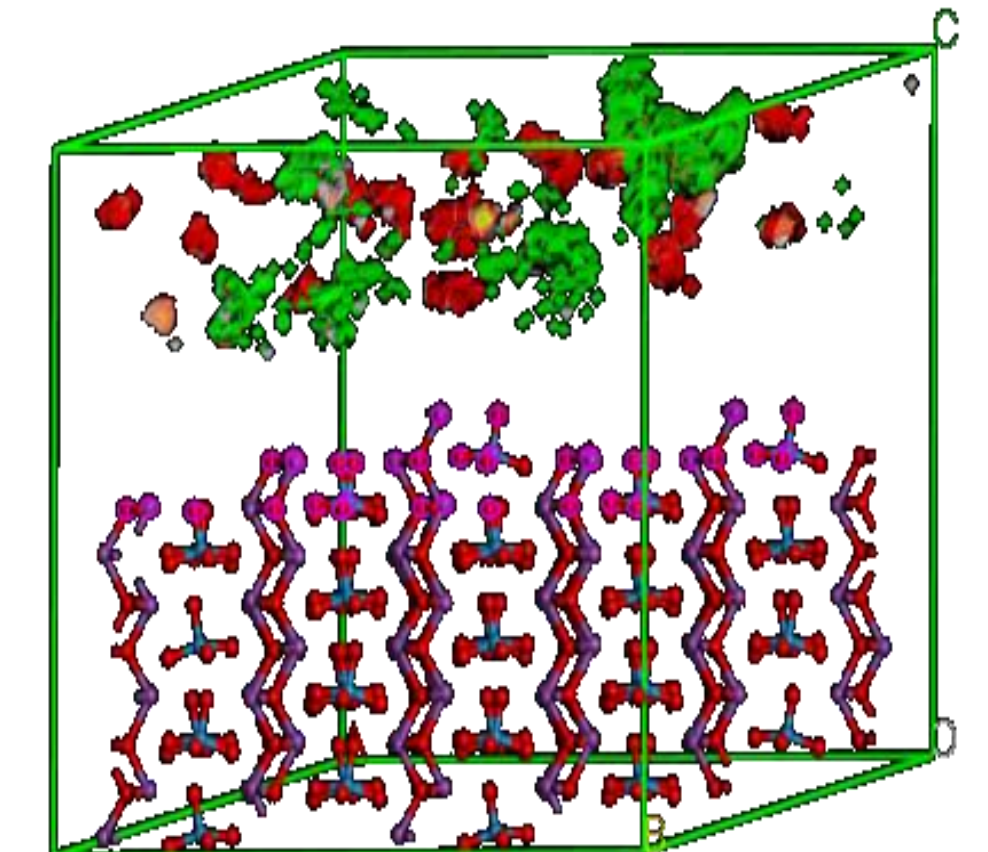


Рис. 3. Спектры XPS для Bi 4f, W 4f, O 1s, Ce 3d для недопированных (a,c) and 2 mol% Ce-допированных (b,d) образцов Bi_2WO_6 .

Результаты



$\text{Bi}_2\text{WO}_6/\text{Ce}$



Bi_2WO_6

Рис.4. Распределение плотности молекул адсорбированной салициловой кислоты (красный) и молекул воды (зеленый)

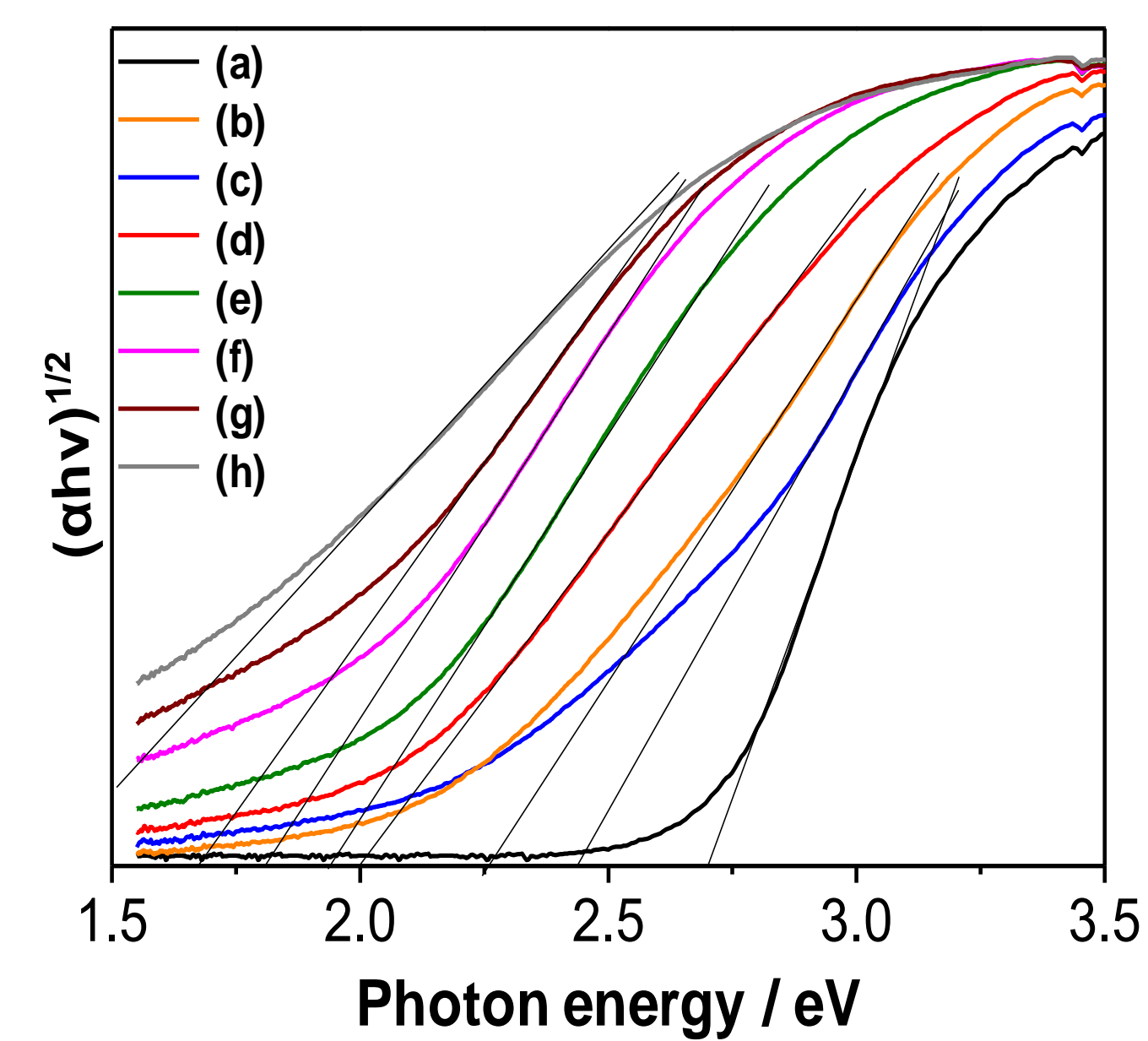
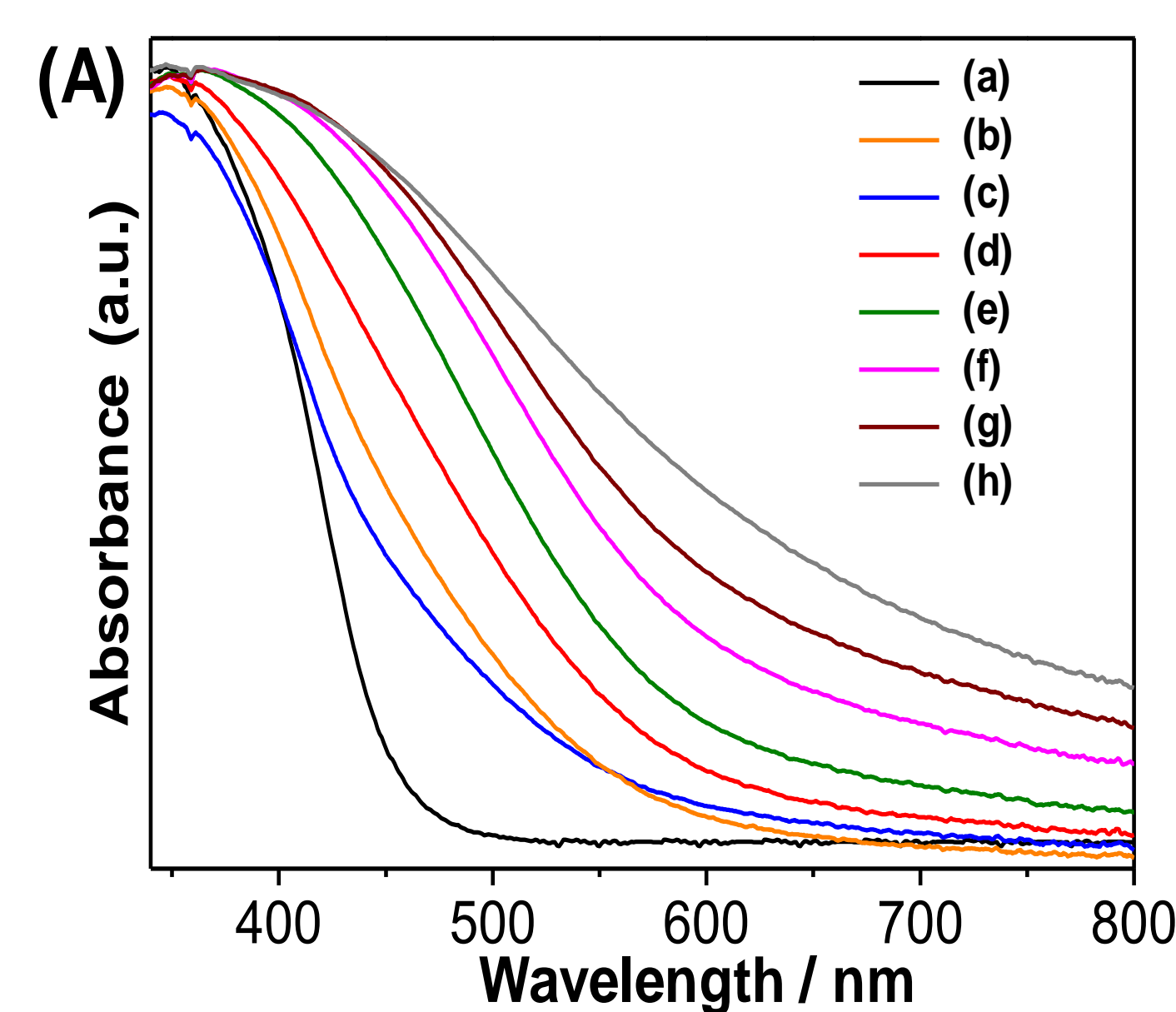


Рис. 5 Электронные спектры диффузного отражения образцов порошков Bi_2WO_6 допированных церием: (a) 0 mol%, (b) 0.5 mol%, (c) 1 mol%, (d) 2 mol%, (e) 4 mol%, (f) 6 mol%, (g) 8 mol%, (h) 10 mol%.

Используя экспериментально установленные корреляции в ряду «условия синтеза – структура – фотокаталитическая активность», показано, что частичное замещение атомов висмута на Ce^{3+} приводит, как к изменению ширины полупроводниковой зоны, так и улучшает сродство и способность к адсорбции на поверхности катализатора органических молекул в газовой фазе. Данные расчетов подтверждают ранее предложенный механизм разделения зарядов фотокаталитического процесса [1].

Выводы

Под воздействием облучения, частицы Bi_2WO_6 могут поглощать видимый свет с образованием дырки, которая переходит в валентную зону. В то же время допирование Bi_2WO_6 ионами Ce^{3+} не только расширяет спектр поглощенного излучения, но также увеличивает эффективность разделения электронов и дырок, что улучшает фотокаталитическую способность. Дырки, сгенерированные излучением, могут как напрямую разлагать органические вещества, так и взаимодействовать с водой, образуя гидроксильный радикал ($\cdot\text{OH}$), также разлагающий органические молекулы.

Литература

- [1] Hojamberdiev M., Katsumata K., Matsushita N., Okada K. Preparation of Bi_2WO_6 -and BiOI -allophane composites for efficient photodegradation of gaseous acetaldehyde under visible light//Applied Clay Science.-2014.-V. 101.-P. 38-43.