Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Tetranuclear oxo-titanium clusters with different carboxylate aromatic ligands : optical properties, DFT calculations, and photoactivity.

Autorzy

Maciej Janek

Aleksandra Radtke

Tadeusz M. Muzioł

Maria Jerzykiewicz

Piotr Piszczek

Rok wydania

2018

Czasopismo

Materials

Numer woluminu

11

Strony

1661/1-1661/17

DOI

10.3390/ma11091661

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Titanium(IV) oxo-clusters of the general formula (Ti4O2(OiBu)10(O2CR')2) (R' = C13H9 (1), PhCl (2), PhNO2 (3)) were studied in order to estimate their potential photoactivity. The structure of the resulting tetranuclear Ti(IV) oxo-complexes was then determined via single crystal X-ray diffraction, infrared and Raman spectroscopy, and electron spin resonance (ESR). An analysis of diffuse reflectance spectra (DRS) allowed for the assessment of band gap values of (1)–(3) microcrystalline samples complexes. The use of different carboxylate ligands allowed the band gap of tetranuclear Ti(IV) oxo-clusters to be modulated in the range of 3.6 eV–2.5 eV. Density functional theory (DFT) methods were used to explain the influence of substitutes on band gap and optical activity. Dispersion of (1)–(3) microcrystals in the poly(methyl methacrylate) (PMMA) matrixes enabled the formation of composite materials for which the potential photocatalytic activity was estimated through the study on methylene blue (MB) photodegradation processes in the presence of UV light. The results obtained revealed a significant influence of carboxylate ligands functionalization on the photoactivity of synthesized tetranuclear Ti(IV) oxo-complexes.

Słowa kluczowe

titanium(IV) oxo-clusters, photoactivity, band gap modification, photoluminescence, DFT calculations, composite materials

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:
https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.3390/ma11091661

Strona internetowa wydawcy

http://www.mdpi.com/journal/metals

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-09 03:01:36
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/RCtogZj.