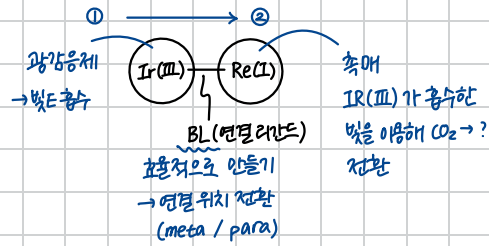


전자의 움직임 추적 (\* 구조가 모든 것을 제어한다)

## <광촉매 분자 구조>



## <과정>

분자 내부

① 빛이 Ir(III) 타격  
→ 내부 분자가 들뜬 상태가 됨

② 분자 내 전자 이동 발생

①에서 들뜬 분자가 Ir(III) → Re(I) 이동

\* 연결 위치 차이

i) para: 68 pcos

ii) meta: 25 pcos

→ 원인: 입체 장애

meta: 입체 장애 → 구조가 고정됨

→ 전자가 건너뛰기 좋음

Sacrificial Electron Donor (SED)

전자를 공급하여 반응을 원활하게 진행

자신을 화학적으로 소비 → 희생성 (희생)

para: 분자 간 간격이 넓어서 자유롭게 회전

→ 전자가 이동하기 최적의 구조를 찾을 때까지 시간 소요

분자 외부

③ '희생성 전자 공여체' 투입

(OERs)

→ 이 과정을 거치면 촉매: 일전자 환원체 상태

② 내부 이동에 비해 속도 훨씬 느림 (1.4 ns)

\* ③ 과정 이후 구조적 변화가 한번 더 발생 가능

→ 연결 리간드가 완전히 평평한 구조가 됨 (예측)

분자 내에서 전자가 이동하기 편해짐

∴ 새로운 구조가 이산화탄소 변환에 실질적으로 도움이 되는 전자를 받아들이기 쉽게 만들어줌<sup>(2)</sup>