二氧化钛表面亲疏水研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/19844.html

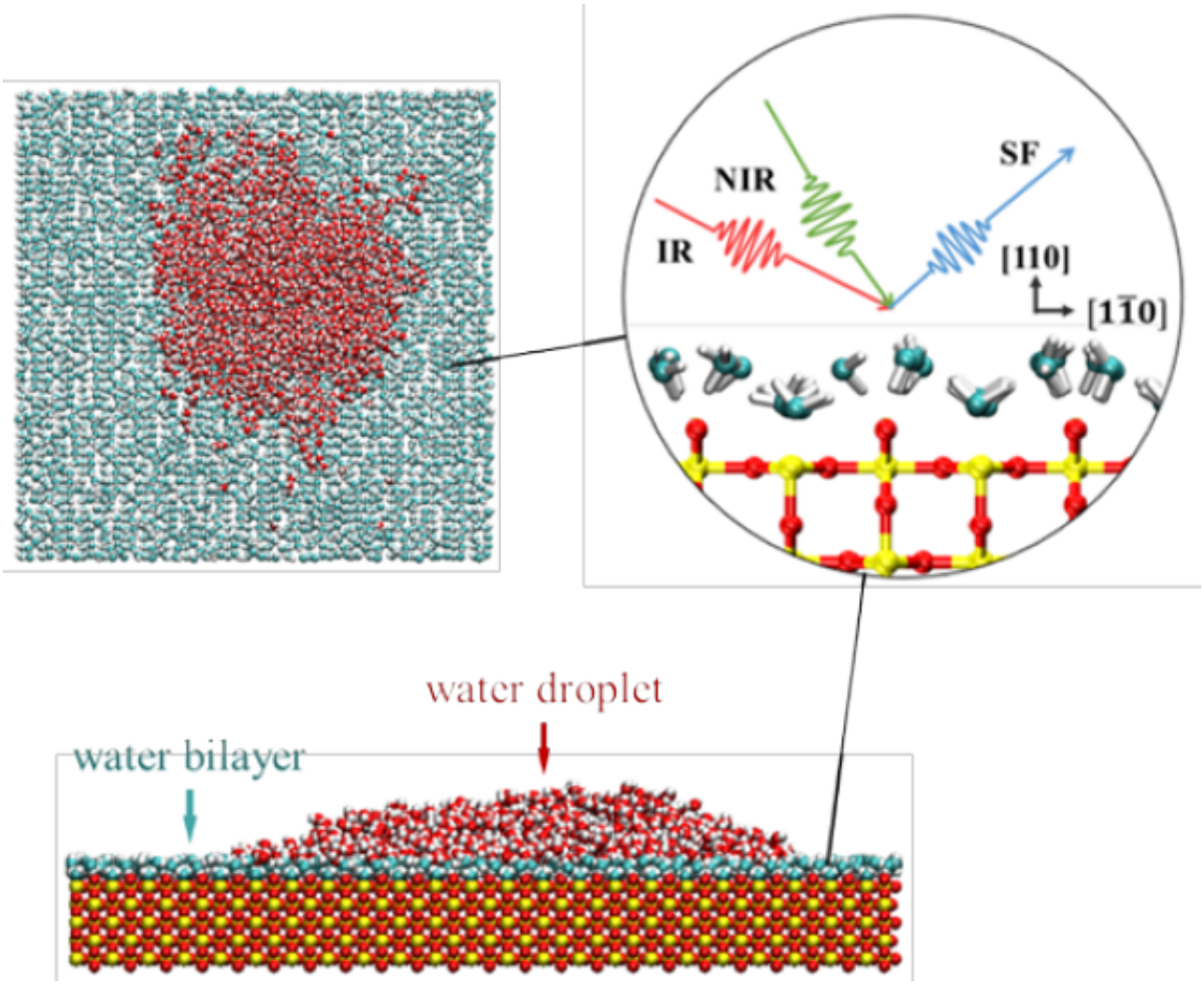
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

二氧化钛（TiO_2）材料因优秀的光催化性能，应用于化妆品、抗菌除污和催化体系等。1997年，日本科学家藤岛昭等在《自然》上首次报道了常温下紫外照射的TiO_2表面发生从疏水到亲水的浸润转变。近年来，许多课题组提出了较多不同的机制解释这一亲疏水转变现象，包括表面氧缺陷、表面水解离产生OH、表面污染物吸附/解离等，但该领域一直存在争议。实际上，该领域有一些基本问题，例如，常温下TiO_2表面到底是亲水还是疏水的基本问题，尚不完全清楚。

中国科学院上海高等研究院研究员王春雷、高嶷，联合美国宾夕法尼亚大学教授J. Francisco、复旦大学刘韡韬实验课题组、中科院上海应用物理研究所、中科院理论物理研究所，以TiO_2的Rutile晶型110面为例，通过表面和频振动光谱理论计算和实验发现常温下该表面上由于强的TiO_2/水的相互作用存在双层有序水，进而基于传统力场+机器学习训练力场的经典分子动力学模拟进一步发现，该有序水导致水层上水滴存在（接触角约25度），即出现了常温不完全浸润的双层有序水现象。这为探究常温TiO_2表面浸润性提出了全新机制：TiO_2表面自身是超亲水的，但表面吸附的有序水层体现出弱疏水现象。这解决了本征TiO_2表面的亲疏水性问题的基本问题。进一步，基于这一新机理，我们可以探索紫外照射TiO_2发生从疏水到亲水的浸润转变的机制：表面OH或者氧缺陷会破坏表面有序水层，进而增强表面水层的亲水性。而表面吸附甲酸乙酸分子可以有效的驱替表面水分子，造成表面更加疏水，这解释了该材料在空气中放置时间久以后接触角更大（约45度）的现象。

相关研究成果发表在*Chemical Sciences*上。

论文链接



以TiO_2的Rutile晶型110表面为例，通过和频共振光谱实验和理论发现常温下该表面上有序双层水结构，且该有序结构导致水层上水滴存在。

研究团队单位：上海高等研究院

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转发