



- 要闻
- 科研进展
- 通知公告
- 工作动态
- 媒体聚焦
- 科技动态
- 专家视野
- 区域新政

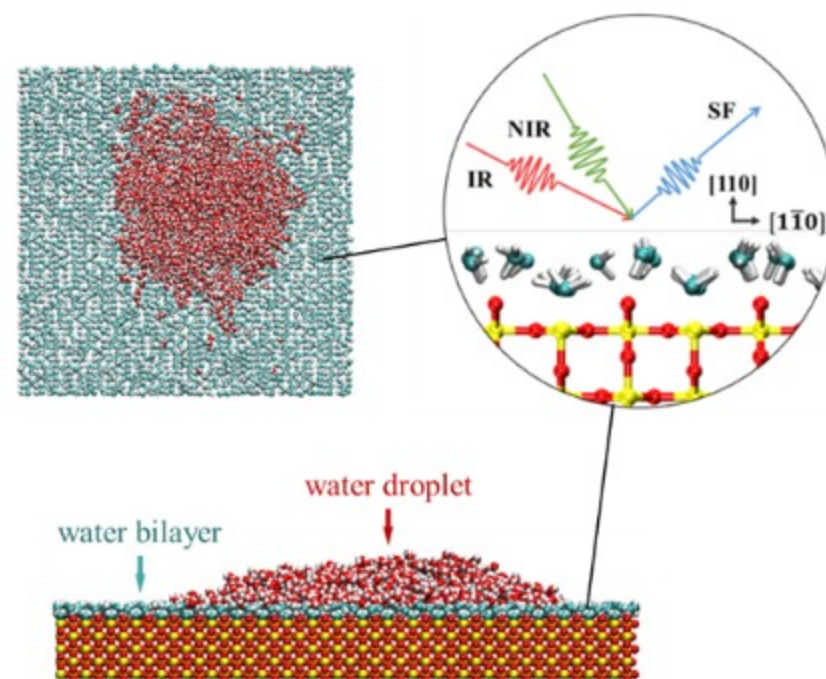
首页 > 科研进展

上海高研院在二氧化钛 (TiO₂) 表面亲疏水难题上取得新进展

文章来源: 上海高等研究院 | 发布时间: 2022-08-30 | 【打印】 【关闭】

二氧化钛(TiO₂)材料,因其优秀的光催化性能,广泛应用于化妆品、抗污染和催化体系等,1997年日本科学家藤岛昭等在Nature发表文章首次报道了常温下紫外照射的TiO₂表面发生从疏水到亲水的湿润转变,近20多年来,许多课题组提出了很多不同的机制解释这一亲疏水转变现象,包括表面氢缺陷、表面水解离产生OH⁻、表面污染物吸附/解离等,但是长期以来,该领域一直存在争议,特别是,该领域实际上还有一些基本问题,例如,常温下TiO₂表面到底是亲水还是疏水的基本问题,还没有完全清楚。

中国科学院上海高等研究院王春雷研究员、高懿研究员、美国宾夕法尼亚大学J. Francisco教授与复旦大学刘坤超实验课题组合作,以TiO₂的Rutile晶型110面为例,通过表面和频共振光谱理论和实验发现常温下该表面上由于强的TiO₂/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湿润的双层有序水现象。这为理解常温TiO₂表面湿润性提出了全新机制:TiO₂表面自身是超亲水的,但表面吸附的有序水层体现出疏水现象。这解决了本征TiO₂表面的亲疏水性问题的基本问题。进一步的,基于这一新机理,我们可以理解紫外照射TiO₂发生从疏水到亲水的湿润转变的机制:表面OH⁻或者氢缺陷会破坏表面有序水层,进而增强表面水层的亲水性,而表面吸附甲醛乙醚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,该工作已发表在美国皇家化学会旗舰期刊《Chemical Sciences》(IF=9.9),论文的共同第一作者为中国科学院上海应用物理研究所博士研究生屈孟杨、中国科学院理论物理所博士后黄刚、复旦大学博士后刘鑫怡。



以TiO₂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。

2009年王春雷等首次理论预言了常温下不完全湿润的有序单层水现象(Phys. Rev. Lett. 2009, 103, 137801),体现出宏观疏水和微观亲水共存于一个表面,即分子尺度亲水性。十多年来,许多课题组后续工作在理论和实验在不同材料上都发现该现象,如贵金属Pt和Pd,氧化物SiO₂和Al₂O₃,滑石和胺基自组装单分子层表面等,表明该现象广泛存在,而TiO₂体系是该理论的又一个实例(但该表面上是双层水结构),并用该理论解决了领域长期存在的问题。本研究得到了国家自然科学基金优秀青年项目、面上项目以及中国科学院青年科学促进会的支持,文章链接: <http://dx.doi.org/10.1039/D2SC02047E>。