

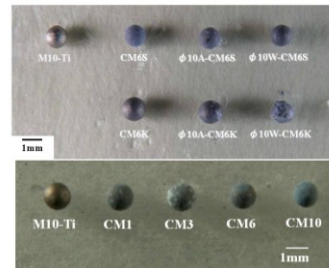
-光催化剂-

通俗意义上讲触媒就是催化剂的意思，光触媒顾名思义就是光催化剂。催化剂是加速化学反应的化学物质，其本身并不参与反应。光催化剂就是在光子的激发下能够起到催化作用的化学物质的统称。

Powders and solutions of photocatalyst



TiO₂/Ti composite photocatalyst film balls



1. 起源

光催化技术是在 20 世纪 70 年代诞生的基础纳米技术，在中国大陆我们会用光触媒这个通俗词来称呼光催化剂。典型的天然光催化剂就是我们常见的叶绿素，在植物的光合作用中促进空气中的二氧化碳和水合成为氧气和碳水化合物。总的来说纳米光触媒技术是一种纳米仿生技术，用于环境净化，自清洁材料，先进新能源，癌症医疗，高效率抗菌等多个前沿领域。

2. 材料

世界上能作为光触媒的材料众多，包括二氧化钛 (TiO₂)，氧化锌 (ZnO)，氧化锡 (SnO₂)，二氧化锆 (ZrO₂)，硫化镉 (CdS) 等多种氧化物硫化物半导体，其中二氧化钛 (Titanium dioxide) 因其氧化能力强，化学性质稳定无毒，成为世界上最当红的纳米光触媒材料。在早期，也曾经较多使用硫化镉 (CdS) 和氧化锌 (ZnO) 作为光触媒材料，但是由于这两者的化学性质不稳定，会在光催化的同时发生光溶解，溶出有害的金属离子具有一定的生物毒性，故发达国家目前已经很少将它们用作为民用光催化材料，部分工业光催化领域还在使用。二氧化钛是一种半导体，分别具有锐钛矿 (Anatase)，金红石 (Rutile) 及板钛矿 (Brookite) 三种晶体结构，其中只有锐钛矿结构和金红石结构具有光催化特性。

二氧化钛是氧化物半导体的一种，是世界上产量非常大的一种基础化工原料，普通的二氧化钛一般称为体相半导体以与纳米二氧化钛相区分。具有 Anatase 或者 Rutile 结构的二氧化钛在具有一定能量的光子激发下[光子激发原理参考光触媒反应原理]能使分子轨道中的电子离开价带 (Valence band) 跃迁至导带 (conduction band)。从而在材料价带形成光生空穴 [Hole⁺]，在导带形成光生电子 [e⁻]，在体相二氧化钛中由于二氧化钛颗粒很大，光生电子在到达导带开始向颗粒表面活动的过程中很容易与光生空穴复合，从而从宏观上我们无法观察到光子激发的效果。但是纳米的二氧化钛颗粒由于尺寸很小，所以电子比较容易扩散到晶体表面，导致原本不带电的晶体表面的 2 个不同部分出现了极性相反的 2 个微区-光生电子和光生空穴。由于光生电子和光生空穴都有很强的能量，远远高出一般有机污染物的分子链的强度，所以可以轻易将有机污染物分解成最原始的状态。同时光生空穴还能与空气中的水分子形成反应，产生氢氧自由基亦可分解有机污染物并且杀灭细菌病毒。这种在一个区域内 2 个微区截然相反的性质并且共同达到效果的过程是纳米技术典型的应用，一般称之为二元论。该反应微区称之为二元协同界面。

从上面介绍我们可以看到，二氧化钛的光催化反应过程，很大程度依靠第一步的光子激发，所以有足够激发二氧化钛的光子，才能提供足够的能量，我们也可以知道，光催化反应并不是凭空产生的它也是需要消耗能量的，符合能量守恒原则，它消耗的是光子，也就是光能。如果是太阳光照射光触媒就利用太阳能，灯光就是利用光能。联合国将光触媒开发列为 21 世纪太阳能利用计划的重要组成部分。

3. 能激发二氧化钛的光子

什么样的光子能激发二氧化钛呢？从理论结构上来说，锐钛二氧化钛的导带与价带之间的间隙[我们称之为能隙]是 3.2eV 而金红石二氧化钛为 3.0eV，所以金红石需要光能大于 3.0eV 的光子而锐钛需要大于 3.2eV 的光子。光子的能量 E 与波长 λ (Lambda) 与之具有反比关系 $E = h C / \lambda$ ，所以可以知道波长小于 380nm 的光可以激发锐钛型二氧化钛。虽然锐钛矿需要略多的能量来激发，但是同样的锐钛矿的二氧化钛光触媒具有更强的氧化能力，所以被更为广泛的使用。有研究表明接近 7nm 粒径时，锐钛矿要比金红石更为稳定，这也是很多纳米光触媒采用锐钛型的原因。