

# 新型纳米光催化材料

——制备、表征、理论及应用

潘春旭 黎德龙 江旭东 等/著



科学出版社

# 新型纳米光催化材料

——制备、表征、理论及应用

潘春旭 黎德龙 江旭东 等 著



科学出版社

北京

## 内 容 简 介

随着工业社会的不断发展,环境污染和能源短缺成为 21 世纪首先需要解决的问题。在众多环境污染治理方法中,基于纳米氧化物的光催化技术被认为是未来环境净化的主流技术。它具有节能、高效、绿色环保的优势,在去除空气中有害物质、废水中有机污染物的光催化降解,以及除臭、杀菌和防霉等方面都有重要应用前景。本书是依据作者所在课题组近 10 年来在科技部国家重大科学研究计划(973)项目的支持下在纳米光催化材料领域的研究成果撰写而成的一本专著。本书较为全面系统地介绍了纳米光催化材料的制备、表征、机理、理论计算、性能和应用等内容。第 1 章主要介绍了纳米 TiO<sub>2</sub> 的结构、制备、性能和应用;第 2 章简要介绍了微弧氧化技术及其在 TiO<sub>2</sub> 薄膜制备和光催化领域的应用;第 3 章至第 32 章按照纳米光催化材料的制备、性能、表征和理论顺序撰写。附录一综述了目前发展的先进光催化表征和测试技术。

本书对从事纳米光催化材料研究的科研工作者具有参考价值,也对从事纳米光催化技术应用与开发的工程技术人员具有指导意义。

### 图书在版编目(CIP)数据

新型纳米光催化材料:制备、表征、理论及应用/潘春旭等著. —北京:科学出版社, 2017.9

ISBN 978-7-03-054455-1

I. ①新… II. ①潘… III. ①光催化-纳米材料 IV. ①TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017) 第 222026 号

责任编辑:钱 俊 / 责任校对:邹慧卿  
责任印制:张 伟 / 封面设计:无极书装

**科学出版社** 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

**北京京华虎彩印刷有限公司** 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2017 年 9 月 第 一 版 开本: 720 × 1000 B5

2017 年 9 月第一次印刷 印张: 39 1/2

字数: 776 000

**定价: 249.00 元**

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

# 前 言

随着工业文明的长足发展与社会的日益进步，环境能源问题成为 21 世纪首待解决的问题，严重制约了人类文明的可持续发展。其中发展中国家环境污染日益严重，危害着人民群众的身体健康和正常生活，治理和控制各种污染已刻不容缓。传统的治理手段，诸如焚烧、掩埋、吸附等具有一定效果，但也存在效率低、容易造成二次污染等严重缺陷，且对于水污染、大气污染效果不大，亟待研究开发新型高效的治理手段。

光催化是指利用半导体吸收太阳能并将其转化成化学能的特性来降解有机物，这种方式效率高且不会造成二次污染，是环境治理的新方向，引起了研究者的关注，而光催化技术的关键是合适的催化剂的选择与制备。在众多光催化材料中，过渡金属氧化物  $\text{TiO}_2$  基纳米光催化材料具有生产工艺简单、成本低廉、无二次污染、无毒、无刺激性、能广谱净化有机污染物和杀灭各种有害细菌等突出特点，在光催化、光电转换、气敏传感等领域具有广泛的应用前景，成为当前国际热门研究领域。但在其应用过程中仍存在以下突出问题：①量子效率较低；② $\text{TiO}_2$  半导体的能带结构 ( $E_g=3.2\text{ eV}$ ) 决定其只能吸收利用紫外线，难以采用可见光驱动光催化；③光催化反应机理尚不十分明确，使得改进和开发新型高效特别是可见光敏感光催化材料的研究工作盲目性较大。目前，纳米光催化材料的主要发展趋势是：通过调控体相、界面的化学组成和微结构，探索提高光催化效率的新途径，实现多功能集成和开发新型可见光敏感的光催化材料及光催化技术。

本书作者所在研究团队，包括教授、副教授、高级工程师、博士后、博士研究生等 20 多人，长期从事纳米光催化材料的研究，特别是在国家重大科学研究计划项目“纳米材料与结构在环境气体污染物检测与治理中的应用基础研究”（项目编号：2009CB939700）的资助下，经过 5 年多以及后续的研究，取得一批具有创新性的研究成果，在国内外学术刊物上发表了近百篇学术论文。其中，有 3 篇进入 ESI 高引用率论文排序，总他引 2000 多次；还有 150 多篇(次)论文被国际科技媒体 *Vertical News* 和(或)*High Beam Research* 等撰文进行了报道，也曾被 *Chemical Reviews* 等刊物引用与评述。作为该项目课题 4 和课题 5 的重要研究骨干(其中潘春旭教授为课题 5 负责人)，我们认为有必要对该项目的研究内容进行总结和梳理，写成具有系统性的专著，让更多人了解我们的研究工作，并使这些研究成果为社会

服务，产生更大的社会效益和经济效益，而这是单篇学术论文所不能达到的效果。

本书的内容涉及纳米光催化材料的制备、表征、机理、理论计算、性能和应用等，还全面地介绍了一些最新的研究成果，内容完整、全面、丰富，涵盖新型纳米光催化材料的制备、表征、光催化过程与机理的研究(理论和实验)，以及光催化材料的评价方法和表征平台等。本书内容新颖，主要部分是基于作者多年的研究成果。在多年研究工作中，作者提出并发现了一系列具有重要科研价值的理论和方法，无论是在纳米光催化材料的制备方法、表征手段还是机理解释上都有独到的见解。这些研究成果也在同行中得到了广泛认可和高度评价。本书所涉及的光催化领域是近年来国际上的关注热点，每年都有大量的文章发表。我们研究团队也一直持续地在开展这方面的研究工作，就在本书截稿时还发现了一些新的现象，取得了一些新的成果，而没有被收录进来，例如我们目前正在进行的激光与纳米光催化材料相互作用的机理、微结构转变与光催化性能等方面的研究，以及氢化  $\text{TiO}_2$  纳米材料在微波吸收领域的应用等。

本书的编写基于完整的科研思路，从材料的制备到表征，再延伸到性能评价、机理解释等。无论是领域专家还是初学者都能从中获取知识，受到启发。本书力求做到理论严谨、结构合理、文字精练和图片清晰，按照纳米光催化材料的制备、性能、表征和理论顺序撰写。为了便于读者查阅，在本书的最后列出了已经发表的与本书内容相关的刊物论文。

本书共 32 章，由潘春旭、黎德龙和江旭东统筹整理和编排。具体的贡献如下：黎德龙(第 1, 15 章)、黎德龙和罗成志(第 16 章)、江旭东(第 2, 4, 5 章)、江旭东和王永钱(第 3 章)、江旭东和吴文惠(第 25 章)、魏建红(第 6 章)、吴俊(第 7 章)、张峻(第 8~10 章, 第 26 章)、黄祥平(第 11,12 章)、罗成志(第 13 章)、刘曰利(第 14 章)、吴伟(第 17 章)、杨涵(第 18~20 章)、张豫鹏(第 21, 22, 24 章)、田芳和张豫鹏(第 23 章)、祁祥和任龙(第 27 章)、祁祥和韩卫家(第 28,29 章)、刘华忠(第 30,31 章)和刘明亮(第 32 章)。每章的参考文献由黎德龙和吴俊整理。

由于作者水平有限，书中难免有不妥之处，恳请读者批评指正。

潘春旭

2017 年 8 月于珞珈山

# 目 录

## 前言

第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 TiO <sub>2</sub> 的结构特征与光催化原理	2
1.2.1 TiO <sub>2</sub> 的结构特征	2
1.2.2 TiO <sub>2</sub> 的光催化原理	4
1.3 TiO <sub>2</sub> 基纳米材料的制备方法	5
1.3.1 溶胶-凝胶法	6
1.3.2 水热法	6
1.3.3 化学气相沉积法	7
1.3.4 化学气相水解法	7
1.3.5 粉末固定化 TiO <sub>2</sub> 薄膜的制备	7
1.3.6 TiO <sub>2</sub> 沉积薄膜的制备	8
1.3.7 “原位”TiO <sub>2</sub> 薄膜的制备	9
1.4 TiO <sub>2</sub> 基纳米材料的掺杂与改性原理及方法	10
1.4.1 纳米 TiO <sub>2</sub> 材料的复合改性	11
1.4.2 纳米 TiO <sub>2</sub> 材料的掺杂改性	13
1.5 TiO <sub>2</sub> 光催化机理的研究现状与进展	22
1.5.1 通过“原位”傅里叶变换红外光谱研究 TiO <sub>2</sub> 光催化的反应路径	23
1.5.2 利用扫描隧道显微镜在原子尺度研究物质在 TiO <sub>2</sub> 表面的吸附作用	26
1.5.3 利用高分辨透射电子显微镜在原子尺度研究光催化过程和机理	28
1.5.4 其他关于 TiO <sub>2</sub> 光催化机理的研究	28
1.6 TiO <sub>2</sub> 基纳米材料的应用	29
1.6.1 污水处理	29
1.6.2 空气净化	30
1.6.3 杀菌消毒	31
参考文献	33
第 2 章 微弧氧化技术介绍	41
2.1 引言	41
2.2 微弧氧化技术及其发展历程	42
2.3 微弧氧化的原理	43

2.4	微弧氧化薄膜的微结构特征	44
2.5	微弧氧化的特点	45
2.6	微弧氧化薄膜的性能及其应用	46
2.6.1	机械性能	46
2.6.2	耐腐蚀性	47
2.6.3	生物相容性	47
2.6.4	光催化性能	48
2.6.5	微弧氧化薄膜的应用	48
2.7	微弧氧化 TiO <sub>2</sub> 薄膜及其在光催化领域的研究进展与现状	49
2.7.1	微弧氧化技术制备 TiO <sub>2</sub> 薄膜的研究现状	49
2.7.2	微弧氧化 TiO <sub>2</sub> 薄膜在光催化性能方面的研究	52
2.8	微弧氧化金属氧化物薄膜的制备	54
2.8.1	实验材料与微弧氧化电源	54
2.8.2	微弧氧化装置与金属氧化物薄膜的制备过程	56
	参考文献	57
<b>第 3 章</b>	<b>半导体复合微弧氧化 TiO<sub>2</sub> 薄膜的制备及其光催化性能</b>	<b>61</b>
3.1	引言	61
3.2	TiO <sub>2</sub> /YAG: Ce <sup>3+</sup> 复合薄膜及其光催化性能	61
3.2.1	TiO <sub>2</sub> /YAG: Ce <sup>3+</sup> 复合薄膜的制备与表征	61
3.2.2	TiO <sub>2</sub> /YAG: Ce <sup>3+</sup> 复合薄膜的形貌及其微结构特征	63
3.2.3	TiO <sub>2</sub> /YAG: Ce <sup>3+</sup> 复合薄膜的成膜机理	66
3.2.4	TiO <sub>2</sub> /YAG: Ce <sup>3+</sup> 复合薄膜的光催化性能	66
3.3	TiO <sub>2</sub> /Eu <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 复合薄膜及其光催化性能研究	68
3.3.1	TiO <sub>2</sub> /Eu <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 复合薄膜的制备与表征	68
3.3.2	TiO <sub>2</sub> /Eu <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 复合薄膜的形貌及其微结构特征和成膜机理	69
3.3.3	TiO <sub>2</sub> /Eu <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 复合薄膜的光催化性能	71
	参考文献	73
<b>第 4 章</b>	<b>基于化学热处理的微弧氧化法制备高含量取代型非金属掺杂 TiO<sub>2</sub> 光催化薄膜</b>	<b>75</b>
4.1	引言	75
4.2	高含量取代型 N 掺杂 TiO <sub>2</sub> 薄膜及其光催化性能	76
4.2.1	Ti 基体表面离子渗氮处理及 N 掺杂 TiO <sub>2</sub> 薄膜的制备与表征	76
4.2.2	化学热处理渗 N 层的微结构特征	77
4.2.3	高含量取代型 N 掺杂 TiO <sub>2</sub> 微弧氧化薄膜的微结构特征	79
4.2.4	高含量取代型 N 掺杂 TiO <sub>2</sub> 微弧氧化薄膜的成膜机理	81
4.2.5	高含量取代型 N 掺杂 TiO <sub>2</sub> 微弧氧化薄膜的光催化性能	82
4.3	高含量取代型 C 掺杂 TiO <sub>2</sub> 薄膜及其光催化性能	84

4.3.1	Ti 基体表面气相渗碳及 C 掺杂 TiO <sub>2</sub> 薄膜的制备与表征	84
4.3.2	化学热处理渗碳层的微结构特征	84
4.3.3	高含量取代型 C 掺杂微弧氧化薄膜的微结构特征	86
4.3.4	高含量取代型 C 掺杂微弧氧化薄膜的成膜机理	87
4.3.5	高含量取代型 C 掺杂 TiO <sub>2</sub> 薄膜的光催化性能	88
	参考文献	90
<b>第 5 章</b>	<b>微弧氧化薄膜的微结构特征：一种纳米晶金属氧化物薄膜</b>	<b>93</b>
5.1	引言	93
5.2	微弧氧化纳米晶薄膜制备及热处理工艺	93
5.3	微弧氧化 TiO <sub>2</sub> 薄膜的微结构特征及其光催化性能	95
5.3.1	微弧氧化 TiO <sub>2</sub> 薄膜的微结构特征及其形成机理	95
5.3.2	高温处理对 TiO <sub>2</sub> 纳米晶薄膜微结构和光催化性能的影响	98
5.4	微弧氧化 MgO 纳米晶薄膜的微结构特征及其腐蚀性能	101
5.4.1	Mg 基体表面微弧氧化 MgO 薄膜的微结构特征	101
5.4.2	高温处理对 MgO 纳米晶薄膜微结构和腐蚀性能的影响	103
5.5	微弧氧化 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 纳米晶薄膜的微结构特征及其腐蚀性能	105
5.5.1	Al 基体表面微弧氧化 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 薄膜的微结构特征	105
5.5.2	高温处理对 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 纳米晶薄膜微结构和腐蚀性能的影响	107
	参考文献	109
<b>第 6 章</b>	<b>导电高分子敏化的 TiO<sub>2</sub> 光催化材料及其光催化性能</b>	<b>110</b>
6.1	引言	110
6.2	聚苯胺改性 TiO <sub>2</sub> 光催化材料及其光催化性能	111
6.2.1	聚苯胺改性 TiO <sub>2</sub> 的结构与形貌	111
6.2.2	聚苯胺改性 TiO <sub>2</sub> 的光电性能	115
6.2.3	聚苯胺改性 TiO <sub>2</sub> 的光催化性能及机理	116
6.3	聚苯胺改性的磁性 TiO <sub>2</sub> 纳米光催化材料及其光催化性能	118
6.3.1	聚苯胺与 CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 共改性 TiO <sub>2</sub> 的结构与形貌	118
6.3.2	聚苯胺与 CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 共改性 TiO <sub>2</sub> 的光电性能	120
6.3.3	聚苯胺与 CoFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> 共改性 TiO <sub>2</sub> 的光催化性能及光催化机理	121
6.3.4	PCT 三元复合材料的回收实验	125
6.4	聚吡咯改性的 Ag 复合 TiO <sub>2</sub> 纳米纤维光催化材料及其光催化性能	126
6.4.1	PPy-Ag-TiO <sub>2</sub> 复合光催化材料的制备与表征	126
6.4.2	PPy-Ag-TiO <sub>2</sub> 复合光催化材料的光电性能	130
6.4.3	PPy-Ag-TiO <sub>2</sub> 复合光催化材料的光催化性能及光催化机理	133
	参考文献	135
<b>第 7 章</b>	<b>非溶液法制备 Au 纳米颗粒修饰的 ZnO/NiO 异质结构及其优异的光催化性能</b>	<b>139</b>
7.1	引言	139



7.2	实验材料与方法	141
7.3	Au 纳米颗粒修饰 ZnO/NiO 异质结构的微结构特征及其光催化性能	141
	参考文献	149
<b>第 8 章</b>	<b>纳米 Cu<sub>2</sub>O 复合电纺 TiO<sub>2</sub> 亚微米纤维及其光催化性能研究</b>	<b>152</b>
8.1	引言	152
8.2	Cu <sub>2</sub> O 复合电纺 TiO <sub>2</sub> 亚微米纤维的制备	153
8.3	不同比例纳米 Cu <sub>2</sub> O/TiO <sub>2</sub> 亚微米纤维复合产物的形貌与微结构表征	154
8.4	不同比例纳米 Cu <sub>2</sub> O/TiO <sub>2</sub> 亚微米纤维复合产物的光催化性能	157
8.5	纳米 Cu <sub>2</sub> O 颗粒尺寸与复合物电子传输及光催化性能的关系	158
	参考文献	160
<b>第 9 章</b>	<b>(001)活性面暴露锐钛矿+金红石混晶纳米 TiO<sub>2</sub> 的制备与光催化性能研究</b>	<b>162</b>
9.1	引言	162
9.2	(001)活性面暴露 TiO <sub>2</sub> 的研究现状与进展	163
9.2.1	(001)活性面暴露 TiO <sub>2</sub> 的制备	163
9.2.2	(001)活性面暴露 TiO <sub>2</sub> 的改性研究	167
9.2.3	(001)活性面暴露 TiO <sub>2</sub> 的其他应用	168
9.3	(001)活性面暴露锐钛矿+金红石混晶纳米 TiO <sub>2</sub> 的制备	168
9.4	HF 含量与纳米锐钛矿 TiO <sub>2</sub> (001)面暴露比例的关系	169
9.5	不同(001)面暴露比例纳米锐钛矿 TiO <sub>2</sub> 的光催化性能	171
9.6	NH <sub>4</sub> F 添加量与混晶纳米 TiO <sub>2</sub> 晶型比例及纳米锐钛矿 TiO <sub>2</sub> (001)面暴露比例的关系	171
9.7	不同混晶比例(001)面暴露纳米 TiO <sub>2</sub> 的光催化性能	174
	参考文献	176
<b>第 10 章</b>	<b>热氧化法制备 Mo+C 共掺杂 TiO<sub>2</sub> 及其光催化性能研究</b>	<b>180</b>
10.1	引言	180
10.2	掺杂 TiO <sub>2</sub> 提高光催化性能的研究现状与进展	181
10.2.1	金属掺杂 TiO <sub>2</sub> 的研究现状与进展	181
10.2.2	非金属掺杂 TiO <sub>2</sub> 的研究现状与进展	182
10.3	掺杂 TiO <sub>2</sub> 的制备与测试	184
10.4	Mo+C 共掺杂 TiO <sub>2</sub> 的结构特征及吸收光谱	185
10.5	Mo+C 共掺杂 TiO <sub>2</sub> 的性能	187
10.5.1	C 单掺杂 TiO <sub>2</sub> 与 Mo+C 共掺杂 TiO <sub>2</sub> 的光电性能	187
10.5.2	C 单掺杂 TiO <sub>2</sub> 与 Mo+C 共掺杂 TiO <sub>2</sub> 的光催化性能	188
	参考文献	189
<b>第 11 章</b>	<b>TiO<sub>2</sub> 金红石单晶纳米棒的合成及其性质</b>	<b>193</b>
11.1	引言	193

11.2	TiO <sub>2</sub> 物相及形貌特性	194
11.3	乙醇和 pH 值对产物形貌及晶型的影响	197
11.4	反应温度的影响	199
11.5	反应时间的影响	200
11.6	TiO <sub>2</sub> 纳米棒的紫外-可见光吸收谱特性	200
11.7	TiO <sub>2</sub> 纳米棒的 N <sub>2</sub> 吸附解附特性	201
11.8	TiO <sub>2</sub> 纳米棒的生长机理	202
11.9	TiO <sub>2</sub> 纳米棒的光催化性能	203
11.9.1	棒状纳米 TiO <sub>2</sub> 在可见光下对 RB 的降解特性	203
11.9.2	RB 在紫外线下对 RB 的降解特性	203
11.9.3	不同光源下 RB 的降解动力学特性	204
11.9.4	在不同光源下催化性能与 P25 的比较	204
	参考文献	205
<b>第 12 章</b>	<b>TiO<sub>2</sub> 三维结构的合成及其光催化性质</b>	<b>208</b>
12.1	引言	208
12.1.1	TiO <sub>2</sub> 多维结构材料的制备现状	208
12.1.2	粉末粒度和形貌的控制	210
12.1.3	热力学平衡态下对晶体生长的控制	211
12.1.4	晶体生长的主要理论	212
12.2	三维结构的微结构特征	215
12.2.1	产物的物相特征	215
12.2.2	产物的微观形貌特征	216
12.3	三维结构氮气的吸附特性	220
12.4	三维结构的紫外-可见光吸收谱特征	221
12.5	各因素对生长形貌晶型的影响	223
12.5.1	水乙醇混合溶液	223
12.5.2	无水乙醇溶液	223
12.5.3	模板上沉积微米球的形貌特征	225
12.6	生长机理探讨	225
12.7	光催化行为评估	228
12.7.1	在可见光下对 RhB 的降解曲线	228
12.7.2	在紫外线下对 RhB 的降解曲线	228
	参考文献	230
<b>第 13 章</b>	<b>三维网络状 ZnO/CNFs/NiO 异质结构的制备及其优异光催化性能</b>	<b>233</b>
13.1	引言	233
13.2	三维网络状 ZnO/CNFs/NiO 异质结构的制备及表征方法	234
13.3	三维网络状 ZnO/CNFs/NiO 异质结构的微结构特征	235

13.4	三维网络状 ZnO/CNFs/NiO 异质结构的生长过程	238
13.5	三维网络状 ZnO/CNFs/NiO 异质结构的光催化性能	239
	参考文献	242
<b>第 14 章</b>	<b>一维钛酸纳米带材料的结构调控与光催化性能研究</b>	<b>244</b>
14.1	引言	244
14.1.1	一维钛酸盐纳米材料的组成和结构	244
14.1.2	一维钛酸盐纳米材料的形成机理与假设	245
14.1.3	一维钛酸盐纳米材料的物性研究	246
14.2	一维钛酸纳米带的组成与结构分析	252
14.2.1	合成工艺对产物结构的影响	253
14.2.2	一维钛酸纳米带的物理性能研究	258
14.2.3	一维钛酸纳米带材料的形成过程	264
14.3	一维钛酸纳米带的贵金属纳米晶表面修饰及其光催化效应	265
14.3.1	Pt 沉积一维钛酸纳米材料的结构及光催化效应	265
14.3.2	Au/钛酸纳米带异质结材料的结构及光催化效应	272
14.3.3	贵金属沉积在一维钛酸纳米带表面的光催化机理	277
14.4	一维钛酸纳米带的 Mo+C 共掺杂及其光催化效应	279
14.4.1	水热法合成掺杂改性的一维钛酸纳米带	279
14.4.2	Mo+C 共掺杂一维钛酸纳米带的光学特性	280
14.4.3	Mo+C 共掺杂一维钛酸纳米带材料的光催化机理研究	283
	参考文献	284
<b>第 15 章</b>	<b>电纺 TiO<sub>2</sub>/CuS 微-纳复合纤维的制备及其微结构与性能表征</b>	<b>287</b>
15.1	引言	287
15.2	制备与表征	287
15.2.1	CuS/TiO <sub>2</sub> 微-纳复合纤维的制备	287
15.2.2	CuS/TiO <sub>2</sub> 微-纳复合纤维的表征	288
15.3	微结构特征与机理	288
	参考文献	291
<b>第 16 章</b>	<b>基于高温原子短程热扩散机制的异质结复合光催化材料的制备</b>	<b>293</b>
16.1	引言	293
16.2	“基于高温热扩散机制”异质结光催化复合材料的制备	294
16.2.1	“基于高温热扩散机制”异质结制备的基本原理与工艺	294
16.2.2	ZnO/TiO <sub>2</sub> 复合纤维的制备	294
16.2.3	ZnO 纳米针/TiO <sub>2</sub> 纳米薄膜复合材料的制备	295
16.2.4	ZnO/NiO 异质结多孔材料的制备	296
16.2.5	ZnO/石墨烯复合材料的制备	296
16.2.6	光电流测试	297

16.2.7	光催化性能测试	297
16.3	ZnO/TiO <sub>2</sub> 复合纤维的微结构表征及其光催化性能	298
16.3.1	ZnO/TiO <sub>2</sub> 复合纤维的微结构特征	298
16.3.2	ZnO/TiO <sub>2</sub> 复合纤维的光催化性能	300
16.3.3	ZnO/TiO <sub>2</sub> 复合纤维的光催化降解机理	301
16.4	ZnO 纳米针/TiO <sub>2</sub> 纳米薄膜复合材料的微结构表征及其光催化性能	302
16.4.1	ZnO 纳米针/TiO <sub>2</sub> 纳米薄膜复合材料的微结构特征	302
16.4.2	ZnO 纳米针/TiO <sub>2</sub> 纳米薄膜复合材料的光催化性能	305
16.4.3	ZnO 纳米针/TiO <sub>2</sub> 纳米薄膜复合材料的光催化降解机理	308
16.5	ZnO/NiO 异质结多孔材料的微结构表征及其光催化性能	308
16.5.1	ZnO/NiO 异质结多孔材料的微结构特征	308
16.5.2	ZnO/NiO 异质结多孔材料的光催化性能	312
16.5.3	ZnO/NiO 异质结多孔材料的光催化降解机理	313
16.6	ZnO/石墨烯复合材料的微结构表征及其光催化性能	316
16.6.1	ZnO/石墨烯复合材料的微结构特征	316
16.6.2	ZnO/石墨烯复合材料的光催化性能	317
16.6.3	ZnO/石墨烯复合材料的光催化降解机理	318
	参考文献	321
第 17 章	磁性铁氧体-半导体复合纳米材料的制备与光催化应用研究进展	324
17.1	引言	324
17.2	磁性铁氧体-半导体复合纳米材料概述	325
17.2.1	磁性铁氧体	325
17.2.2	半导体光催化材料	326
17.2.3	铁氧体-半导体复合纳米材料的结构类型	327
17.2.4	磁性铁氧体-半导体复合体系的电荷转移机制	328
17.3	磁性铁氧体-半导体复合纳米材料的制备	329
17.3.1	种子生长法	329
17.3.2	层层沉积法	330
17.3.3	其他方法	331
17.4	磁性铁氧体-半导体复合纳米材料在光催化领域的应用	332
17.4.1	磁性铁氧体-金属氧化物半导体复合光催化剂	332
17.4.2	磁性铁氧体-金属硫化物半导体复合光催化剂	336
17.4.3	多半导体壳层复合光催化剂	337
17.5	总结与展望	338
	参考文献	339
第 18 章	TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的可控生长和生长机理	348
18.1	引言	348

18.2	不同电解液体系中 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备	348
18.2.1	HF/H <sub>2</sub> O 电解液中 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备	348
18.2.2	HF/乙二醇电解液中 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备	351
18.2.3	NH <sub>4</sub> F/丙三醇/H <sub>2</sub> O 电解液中 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备	354
18.3	TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列形貌与结构的控制	356
18.3.1	外加电场类型对 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列形貌与结构的影响	356
18.3.2	外加直流电场电压值对 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列形貌与结构的影响	360
18.3.3	阳极氧化时间对 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列形貌与结构的影响	362
18.3.4	电解液中的电解质含量对 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列形貌与结构的影响	364
18.4	不同形貌的 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的光电性能	369
	参考文献	370
<b>第 19 章</b>	<b>碳修饰 TiO<sub>2</sub> 纳米管阵列的制备及其光催化性能</b>	<b>371</b>
19.1	引言	371
19.2	碳修饰 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备	372
19.2.1	TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备与热处理	372
19.2.2	碳单质与 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的复合	373
19.2.3	碳修饰 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的形貌、结构与元素成分	377
19.3	碳修饰 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的性能	378
19.3.1	TNT 与 C-TNT 样品的光学性能	378
19.3.2	TNT 与 C-TNT 样品的光催化性能	379
19.3.3	TNT 与 C-TNT 样品的光电性能	381
	参考文献	382
<b>第 20 章</b>	<b>氮掺杂 TiO<sub>2</sub> 纳米管阵列的制备及其光催化性能</b>	<b>384</b>
20.1	引言	384
20.2	氮掺杂 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备	385
20.2.1	Ti 金属的离子渗氮处理	385
20.2.2	氮掺杂 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的制备	386
20.3	氮掺杂 TiO <sub>2</sub> 纳米管阵列的性能	388
20.3.1	TNT 和 N-TNT 样品的光学性能	389
20.3.2	TNT 和 N-TNT 样品的光催化性能	389
20.3.3	TNT 和 N-TNT 样品的光电性能	391
	参考文献	392
<b>第 21 章</b>	<b>静电纺丝法制备高光催化活性的 TiO<sub>2</sub>-Bi<sub>2</sub>WO<sub>6</sub> 纳米异质纤维</b>	<b>394</b>
21.1	引言	394
21.2	Bi <sub>2</sub> WO <sub>6</sub> -TiO <sub>2</sub> 复合纳米纤维的制备	395
21.3	Bi <sub>2</sub> WO <sub>6</sub> -TiO <sub>2</sub> 复合纳米纤维的形貌结构表征	395
21.4	Bi <sub>2</sub> WO <sub>6</sub> -TiO <sub>2</sub> 复合纳米纤维的光催化性能	398

21.5	$\text{Bi}_2\text{WO}_6\text{-TiO}_2$ 复合纳米纤维的光催化降解机理	399
	参考文献	401
<b>第 22 章</b>	<b><math>\text{TiO}_2</math>/石墨烯复合材料的制备及其光催化性能</b>	<b>402</b>
22.1	引言	402
22.2	热处理法制备具有高光催化性能的石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 复合材料	403
22.2.1	石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 光催化复合粉体的制备	403
22.2.2	石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 光催化复合薄膜的制备工艺	404
22.3	热处理法制备石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 复合粉体及其可见光光催化性能	404
22.3.1	石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 复合粉体的微结构特征	404
22.3.2	石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 复合粉体的光催化性能	405
22.3.3	石墨烯对光催化性能的影响分析	406
22.4	高催化活性的石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 层状复合材料及光催化性能	407
22.4.1	石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 复合薄膜的微结构特征	408
22.4.2	石墨烯/ $\text{TiO}_2$ 复合薄膜的光催化性能	409
	参考文献	409
<b>第 23 章</b>	<b>利用 Raman 光谱测定锐钛矿相 <math>\text{TiO}_2(001)</math> 面暴露比例</b>	<b>412</b>
23.1	引言	412
23.2	(001)活性面暴露 $\text{TiO}_2$ 纳米片的制备	413
23.3	XRD 测定 $\text{TiO}_2(001)$ 活性面暴露比例的原理	414
23.4	Raman 光谱测定 $\text{TiO}_2(001)$ 面暴露比例的原理	415
23.5	Raman 法与 XRD 法的对比讨论	417
23.6	不同晶面暴露比例 $\text{TiO}_2$ 的光催化性能	420
	参考文献	422
<b>第 24 章</b>	<b>二步水热法制备 N+Ni 共掺杂(001)面暴露的 <math>\text{TiO}_2</math> 纳米晶及其光催化性能</b>	<b>424</b>
24.1	引言	424
24.2	N+Ni 共掺杂(001)面暴露 $\text{TiO}_2$ 纳米晶的制备	425
24.3	N+Ni 共掺杂(001)面暴露 $\text{TiO}_2$ 纳米晶的微结构表征	425
24.4	N+Ni 共掺杂(001)面暴露 $\text{TiO}_2$ 纳米晶的光催化性能	428
24.5	N+Ni 共掺杂(001)面暴露 $\text{TiO}_2$ 纳米晶的形成机制与光催化机理	429
	参考文献	432
<b>第 25 章</b>	<b>正电子湮没技术在 <math>\text{TiO}_2</math> 光催化研究中的应用</b>	<b>434</b>
25.1	引言	434
25.2	正电子寿命谱的基本原理	434
25.3	$\text{TiO}_2$ 的氢化处理及其氧空位关联体的正电子寿命谱研究	436
25.3.1	氢化 $\text{TiO}_2$ 的正电子寿命谱测试方法	436

25.3.2	氢化 TiO <sub>2</sub> 的吸收光谱和微结构表征	436
25.3.3	氢化 TiO <sub>2</sub> 中氧空位关联体的正电子寿命谱	440
25.3.4	氢化 TiO <sub>2</sub> 中氧空位关联体及其对光催化性能的影响	442
25.4	利用正电子湮没寿命谱研究 TiO <sub>2</sub> 在光催化过程中的缺陷变化	444
25.4.1	样品制备	444
25.4.2	TiO <sub>2</sub> 光催化过程中缺陷变化的正电子寿命谱特征	445
25.4.3	TiO <sub>2</sub> 光催化过程中缺陷变化的其他表征验证	448
	参考文献	450
<b>第 26 章</b>	<b>锐钛矿纳米 TiO<sub>2</sub> 光催化降解过程的 HRTEM 研究</b>	<b>452</b>
26.1	引言	452
26.2	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 光催化降解亚甲基蓝的 HRTEM 研究	453
26.2.1	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 光催化降解亚甲基蓝不同阶段的微结构特征	453
26.2.2	金红石纳米 TiO <sub>2</sub> 光催化降解亚甲基蓝的研究	456
26.2.3	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 吸附亚甲基蓝的模拟计算	457
26.2.4	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 降解亚甲基蓝的机理研究	460
26.2.5	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 循环降解亚甲基蓝的失效测试	460
26.3	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 光催化降解罗丹明 B 的 HRTEM 研究	462
26.4	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 光催化降解甲基橙的 HRTEM 研究	463
26.5	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 降解不同有机染料的光催化对比测试	465
26.6	锐钛矿纳米 TiO <sub>2</sub> 降解不同有机染料的机理研究	466
	参考文献	468
<b>第 27 章</b>	<b>上转换纳米晶/TiO<sub>2</sub>/石墨烯复合材料及其宽光谱吸收光催化特性</b>	<b>471</b>
27.1	引言	471
27.2	石墨烯基三元复合材料的制备	471
27.2.1	上转换材料的制备	471
27.2.2	三元复合材料的制备	472
27.3	石墨烯基三元复合材料的表征	472
27.4	石墨烯基三元复合材料的光催化性能研究	474
27.4.1	石墨烯基三元复合材料的光电响应	475
27.4.2	石墨烯基三元复合材料的染料吸附能力	475
27.4.3	石墨烯基三元复合材料的光降解性能测试	476
	参考文献	477
<b>第 28 章</b>	<b>TiO<sub>2</sub>、CdS 纳米粒子共混的三维石墨烯凝胶及其宽光谱吸收特性</b>	<b>478</b>
28.1	引言	478
28.2	TiO <sub>2</sub> 和 CdS 纳米粒子共混的三维石墨烯凝胶的制备	479
28.3	CdS/P25/graphene 气凝胶的微结构特征	480
28.4	CdS/P25/graphene 气凝胶的性能测试	482

28.5	光催化反应机理分析	487
	参考文献	488
<b>第 29 章</b>	<b>MoS<sub>2</sub> 助催化 TiO<sub>2</sub> 纳米粒子的三维多孔石墨烯复合凝胶的光催化性能增强</b>	<b>491</b>
29.1	引言	491
29.2	MoS <sub>2</sub> 助催化 TiO <sub>2</sub> 纳米粒子的三维多孔石墨烯复合凝胶的制备	492
29.3	MoS <sub>2</sub> /P25/石墨烯气凝胶的结构与形貌表征	493
29.4	MoS <sub>2</sub> /P25/石墨烯气凝胶的性能测试	495
29.4.1	光学性能表征	495
29.4.2	光电化学性能表征	497
29.4.3	光催化降解的表征	500
29.5	MoS <sub>2</sub> /P25/石墨烯气凝胶的光催化机理分析	502
	参考文献	503
<b>第 30 章</b>	<b>TiO<sub>2</sub> 第一性原理研究中的理论基础和计算方法</b>	<b>506</b>
30.1	引言	506
30.2	玻恩-奥本海默(BO)近似	507
30.3	密度泛函理论	509
30.4	交换-关联能近似	511
30.4.1	局域密度近似	511
30.4.2	广义梯度近似	512
30.4.3	杂化泛函	513
30.4.4	LDA+U 方法	514
30.5	赝势平面波方法	515
30.6	QUANTUM ESPRESSO 程序包简介	517
	参考文献	519
<b>第 31 章</b>	<b>甲醛(HCHO)在 TiO<sub>2</sub> 表面吸附的第一性原理研究</b>	<b>521</b>
31.1	引言	521
31.2	计算方法与结构模型	522
31.3	HCHO 在金红石型 TiO <sub>2</sub> (110)面的吸附	524
31.4	HCHO 在锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)面的吸附	526
31.5	HCHO 在锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (001)-(1×1)表面的吸附	529
31.6	HCHO 在锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (001)-(1×4)重构面的吸附	531
31.7	电子结构分析	533
31.8	振动频率分析	537
	参考文献	538
<b>第 32 章</b>	<b>氢对 O<sub>2</sub> 分子在锐钛矿型 TiO<sub>2</sub>(101)面吸附与解离的影响</b>	<b>543</b>
32.1	引言	543



32.2	计算方法和模型	544
32.3	O <sub>2</sub> 分子吸附在表面氢化的锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)面	545
32.3.1	O <sub>2</sub> 分子在有一个 H 原子的锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)表面吸附	545
32.3.2	O <sub>2</sub> 分子在有两个 H 原子的锐钛矿 TiO <sub>2</sub> (101)表面吸附	547
32.3.3	O <sub>2</sub> 分子解离后的吸附构型	549
32.4	吸附 O <sub>2</sub> 分子在氢化锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)面的解离过程	551
32.5	O <sub>2</sub> 分子和 O 原子在表面和亚表面都有 H 原子的锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)面的吸附	552
32.6	O <sub>2</sub> 分子在表面和亚表面都有 H 原子的锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)面的解离过程	555
32.7	O <sub>2</sub> 分子和 O 原子在亚表面有两个 H 原子的锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)面的吸附构型	557
32.8	O <sub>2</sub> 分子在亚表面有两个 H 原子的锐钛矿型 TiO <sub>2</sub> (101)面的解离过程	559
32.9	讨论与分析	560
	参考文献	562
附录一	TiO <sub>2</sub> 基光催化材料的先进表征技术：研究现状与展望	566
附录二	发表论文列表	610