

Povzetek

Nanodimenzioniran TiO_2 ima velik tehnološki potencial kot fotokatalizator za uporabo na različnih področjih: za čiščenje zraka in vode, v fotovoltaiki, za pridobivanje vodika z razklopom vode in za pripravo samo-čistilnih površin različnih materialov. Njegovo široko praktično uporabo omejuje razmeroma širok prepovedan pas, saj večinoma absorbira le UV svetlobo, ki predstavlja le majhen delež energije sonne svetlobe. V zadnjem času zato po svetu merilo potekajo številne raziskave v smeri razvoja fotokatalitskega TiO_2 z obširnim prepovedanim pasom, ki ustreza vzbujanju z energijo vidne svetlobe. Za vse vrste aplikacij pa je bistveno poznati funkcionalne lastnosti fotokatalizatorja oziroma poznati dejavnike, ki vplivajo na te lastnosti. Fotokatalitska aktivnost TiO_2 je odvisna od morfoloških, površinskih in optičnih lastnosti materiala, na katere pa v veliki meri vplivajo različni parametri pri sintezi. Cilj doktorskega dela je bil sintetizirati čim bolj aktiven fotokatalizator na osnovi TiO_2 pod sonno in/ali vidno svetlobo ter ugotoviti kako sintezni pogoji vplivajo na končne lastnosti fotokatalizatorja. Vzorce sem sintetiziral po dveh različnih postopkih: obarjanje hidratiziranega TiO_2 iz raztopine TiOSO_4 z nadaljnjo uporabo hidrotermalne obdelave, kjer je potekla kristalizacija amorfne faze ter sol-gel sinteza s hidrolizo titanovega tetraizopropoksida s segrevanjem pri visoki temperaturi, da se je amorfna faza pretvorila v kristalino. Za različne fotokatalitske aktivnosti pod vidno svetlobo sem vzorce dopiral z različnimi elementi, kot so dušik, izbrane kovine prehoda (Fe, Cu, Zn in Mn) in redke zemlje (Ce, La in Gd).

Vzorcem sem določil strukturne, morfološke, površinske in optične lastnosti, fotokatalitsko aktivnost pa sem izmeril po treh metodah: (a) simulacija razgradnje hlapljivih organskih snovi (fotokatalitska oksidacija izopropanola v aceton), (b) simulacija razgradnje NO_x v zraku in (c) simulacija razgradnje v vodi topnih snovi (razgradnja metilenskega modrega). Antibakterijsko aktivnost vzorcev sem določil z Gram negativnimi (*E. coli*) in Gram pozitivnimi bakterijami (MRSA).

Potrdil sem, da sintezni pogoji odločilno vplivajo na končne lastnosti TiO_2 . Ugotovil sem, da nizke vrednosti pH in dodajanje izopropanola v avtoklav favorizirajo kristalizacijo rutila, ki se je izkazal za najbolj fotokatalitsko aktivno kristalno modifikacijo, tako pod simulirano sonno, kot tudi pod vidno svetlobo. Razlogi za višjo aktivnost rutila so v preiskavi. Določil sem tudi vpliv nekaterih dopantov na strukturno sestavo vzorcev. Vzorci, ki sem jih dopiral z dušikom, Fe in Mn so prav tako kristalizirali pretežno v rutilni modifikaciji, medtem ko je prevladujoča modifikacija v vzorcih, dopiranih s Ce, anataz. Z La in Gd dopirana vzorca sta vsebovala približno 75 mas.% rutila in 25 mas.% anataza. Rutil ima obliko večjih nanopalk, anataz in brookit pa sferičnih delcev. Vzorci z večjim deležem rutila so imeli nižjo specifično površino od vzorcev, ki so vsebovali tudi anataz in brookit. Dopiranje je praviloma nekoliko zmanjšalo fotokatalitsko aktivnost. Od vseh vzorcev se je kot najbolj fotokatalitsko aktiven izkazal nedopiran vzorec, sintetiziran pri nizki vrednosti pH in z dodatkom izopropanola.

Pri dopiranju s Cu in Zn sem pokazal, da oba elementa tvorita okside na površini TiO_2 in se ne vgradita v kristalno rešetko TiO_2 . Vzorcem, ki sem jim dodajal le Zn, imajo višjo fotokatalitsko aktivnost od vzorcev z dodanim Cu. Slednji pa imajo višjo antimikrobno aktivnost, tako v primeru Gram negativnih kot Gram pozitivnih bakterij. Vzorcem, ki sem jim dodajal Cu, sem določil tudi optične lastnosti pri osvetljevanju z UV in vidno svetlobo. Dobljeni hibridni material je namreč izkazal fotokromnost, ki sem jo razločil s prehajanjem $\text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{Cu}^+ \rightarrow \text{Cu}^0$.

V doktorskem delu sem uspel povezati sintezne parametre s končnimi lastnostmi TiO_2 in kontrolirano pripraviti nedopiran TiO_2 s fotokatalitsko aktivnostjo, višjo od komercialnega P25, tako pri osvetljevanju z UV (1250 vs. 900 ppm/h pri oksidaciji izopropanola v aceton) kot pri osvetljevanju z vidno svetlobo (95 vs. 40 ppm/h pri oksidaciji izopropanola v aceton).

Ključne besede: TiO_2 , sinteza, dopiranje, fotokataliza, antibakterijsko delovanje, fotokromnost