

УДК 544.72

ВИЗНАЧЕННЯ КОНСТАНТ ІОНІЗАЦІЇ ПОВЕРХНЕВИХ ГІДРОКСИЛЬНИХ ГРУП МОДИФІКОВАНОГО ДІОКСИДУ ТИТАНУ В ЙОГО ВОДНИХ СУСПЕНЗІЯХ

Р.С. Петришин *, З.М. Яремко, М.М. Солтис

Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна

Обґрунтовано новий підхід до визначення констант іонізації поверхневих гідроксильних груп модифікованого діоксиду титану в його водних суспензіях. Він базується на застосуванні 2–pK моделі до опису експериментально знайденої залежності різниці рН водних суспензій та вихідних розчинів від рН вихідних розчинів, на основі яких ці суспензії приготовлені. Крім констант іонізації поверхневих гідроксильних груп, цей підхід дозволяє оцінити їх загальну концентрацію та частки позитивно і негативно заряджених поверхневих гідроксильних груп.

ВСТУП

Фізико-хімічні та технологічні властивості водних суспензій оксидів металів, зокрема агрегативно-седиментаційна стійкість, головним чином обумовлені інтенсивністю міжфазної взаємодії. Одним із наслідків такої взаємодії є формування на твердій поверхні подвійного електричного шару і надання суспензіям електроповерхневих властивостей. На прикладі багатьох оксидів металів раніше було показано [1], що агрегативна стійкість їхніх водних суспензій суттєво залежить від інтегральних показників електроповерхневих властивостей, а саме: дзета-потенціалу частинок, густини поверхневого електричного заряду, точки нульового заряду, ізоелектричної точки, різниці констант іонізації поверхневих гідроксильних груп, ступеня іонізації поверхневих груп в умовах ізоелектричного стану.

Очевидно, що цілеспрямоване регулювання агрегативної стійкості водних суспензій оксидів металів вимагає знань про їхні електроповерхневі властивості. Оскільки сьогодні з метою одержання водних суспензій з необхідними технологічними властивостями у промисловості використовують модифіковані порошки, то кожна партія таких порошоків має свій індивідуальний набір інтегральних показників електроповерхневих властивостей. Тому виникає потреба надійного визначення характеристик електроповерхневих властивостей водних суспензій. Основою для

оцінювання інтегральних показників електроповерхневих властивостей водних суспензій є відомості про константи іонізації поверхневих гідроксильних груп. В цій статті запропоновано новий підхід до визначення констант іонізації поверхневих гідроксильних груп модифікованого діоксиду титану в його водних суспензіях.

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА

У дослідженнях використано порошок діоксиду титану рутильного типу з поверхнею, модифікованою неорганічними оксидами (4 % Al_2O_3 та 2 % SiO_2) і прищепленими вуглеводневими ланцюгами. Частинки порошку мають округлу форму з середнім діаметром 0.23 мкм. Питома поверхня порошку діоксиду титану, визначена методом BET за адсорбцією азоту, дорівнює 14.6 м²/г. Максимальна величина електричного заряду на поверхні частинок, розрахована за результатами потенціометричного титрування, дорівнює 3.86 Кл/г. Наведені характеристики досліджуваного порошку діоксиду титану визначені і описані в [2].

Для приготування суспензій використовували бідистильовану воду з питомою електропровідністю ≤ 0.2 мСм/м. Суспензії готували шляхом перемішування на механічній мішалці протягом двох годин з метою досягнення рівноваги певної наважки порошку діоксиду титану в водних розчинах з різним рН. Для підтвердження досягнення

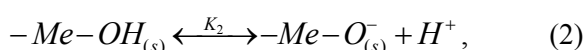
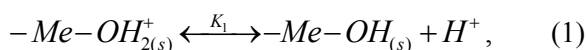
* контактний автор petryshyn_roman@list.ru
ХФТП 2013. Т. 4. № 2

рівноваги були проведені вимірювання рН суспензій після перемішування протягом 6 і 12 год. Одержані результати знаходились в межах статистичної похибки, яка складала 1–2 %. Кислотно-основний баланс у вихідних розчинах регулювали додаванням розчинів КОН чи НСІ.

Вимірювання рН середовища проводили за допомогою рН-метра рН-150М зі скляним та хлорсрібним електродами в спеціальній термостатованій комірці за температури 25 ± 0.1 °С. Час термостатування дорівнював десять хвилин. Перед кожною серією вимірювань прилад перевіряли за буферними розчинами. Точність вимірювань дорівнювала ± 0.05 . Дзета-потенціал частинок діоксиду титану вимірювали методом макроелектрофорезу [3]. Для визначення розмірів частинок діоксиду титану використали седиментаційний аналіз [4].

ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Визначення інтегральних показників електроповерхневих властивостей суспензій ґрунтується на знанні констант іонізації поверхневих гідроксильних груп K_1 і K_2 , які характеризують такі поверхневі рівноваги



де $-Me-OH_{2(s)}^+$ – поверхнева група, яка виникає на поверхні внаслідок адсорбції іонів водню з рідкої об'ємної фази; $-Me-OH_{(s)}$ – нейтральна поверхнева гідроксильна група; $-Me-O_{(s)}^-$ – поверхнева група, яка виникає на поверхні внаслідок дисоціації гідроксильної групи і переходу іонів водню у рідку об'ємну фазу, H^+ – іони водню в об'ємній фазі суспензій, K_1 і K_2 – константи іонізації, які є кількісною мірою кислотності та основності поверхневих гідроксильних груп. Методи визначення кислотно-основних характеристик поверхні розроблені поки що недостатньо [5], тому їх вдосконалення залишається актуальною задачею.

Для характеристики електроповерхневих властивостей водних суспензій нами запропонований новий підхід до експериментального визначення констант

кислотно-основних поверхневих рівноваг (1) і (2) K_1 і K_2 , який полягає в тому, що експериментально визначають залежність рН суспензій від рН вихідних розчинів, на основі яких ці суспензії готували (рис. 1 а). Використовуючи ці результати, будують експериментально знайдену залежність різниці рН суспензій (pH_{susp}) і рН вихідного розчину (pH_{sol})

$$\Delta pH_e = pH_{susp} - pH_{sol}$$

від рН вихідного розчину (рис. 1 б).

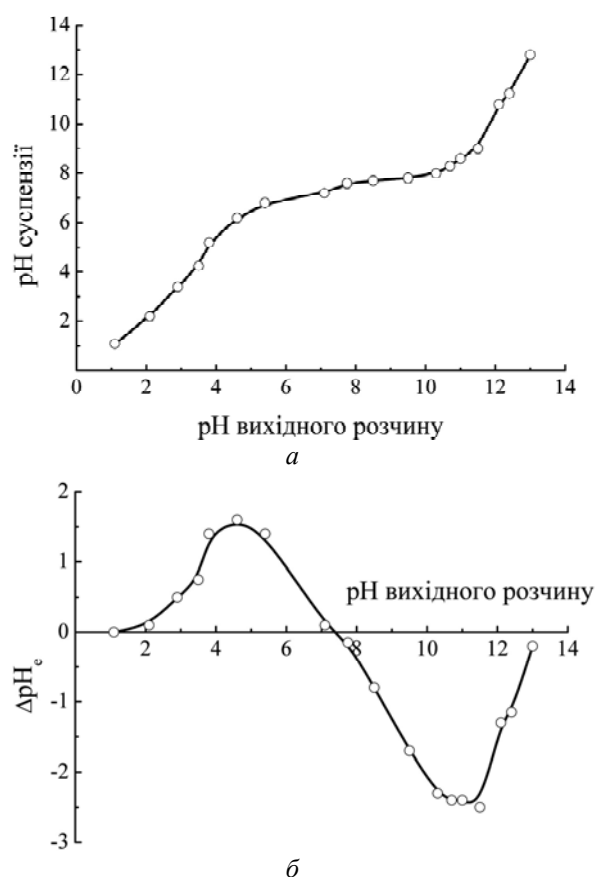


Рис. 1. Залежність рН суспензій (а) і різниці рН суспензій і рН вихідних розчинів, ΔpH_e (б) від рН вихідних розчинів

На основі поверхневих рівноваг (1) і (2) різницю рН суспензій і рН вихідних розчинів, ΔpH_e можна розрахувати теоретично.

Виходячи з визначення констант K_1 і K_2 , маємо:

$$K_1 = \frac{[H^+][-Me-OH_{(s)}]}{[-Me-OH_{2(s)}^+]}, \quad (3)$$

$$K_2 = \frac{[H^+][-\text{Me}-O_{(s)}^-]}{[-\text{Me}-OH_{(s)}]} \quad (4)$$

Зміну концентрації іонів водню H^+ під час приготування суспензій визначають за рівнянням

$$[H^+] = [H^+]_0 + \Delta[H^+], \quad (5)$$

де $[H^+]$ – рівноважна концентрація іонів водню у суспензії, $[H^+]_0$ – концентрація іонів водню у вихідному розчині, $\Delta[H^+]$ – різниця концентрації іонів H^+ у суспензії і вихідному розчині, яку визначають за формулою

$$\begin{aligned} \Delta[H^+] &= \Delta[H^+]_1 + \Delta[H^+]_2 = \\ &= \{[-\text{Me}-OH_{2(s)}^+]_0 - [-\text{Me}-OH_{2(s)}^+]\} + \\ &+ \{[-\text{Me}-O^-] - [-\text{Me}-O^-]_0\}, \end{aligned} \quad (6)$$

де $\Delta[H^+]_1$ – зміна концентрації H^+ , пов'язана з поверхневими групами $-\text{Me}-OH_{2(s)}^+$; $\Delta[H^+]_2$ – зміна концентрації H^+ , пов'язана з поверхневими групами $-\text{Me}-O_{(s)}^-$; $[-\text{Me}-OH_{2(s)}^+]_0$, $[-\text{Me}-O^-]_0$ – концентрації позитивно та негативно заряджених груп на гіпотетичній поверхні до її взаємодії з водними розчином. Звичайно, на поверхні порошку діоксиду титану в сухому стані знаходяться тільки нейтральні групи, але серед них можуть бути такі що легко (миттєво) іонізуються, наприклад, гідроксильні групи, на яких сконденсовані іони лужних металів, що підтверджено літературними даними [6]. Звичайно, що наявність таких сконденсованих іонів буде впливати на встановлення рівноваг (1) і (2), тому ці групи $[-\text{Me}-OH_{2(s)}^+]_0$ та $[-\text{Me}-O^-]_0$ можна розглядати, як такі, що характеризують початковий стан поверхні.

Загальна концентрація поверхневих гідроксильних груп дорівнює

$$C_s = [-\text{Me}-OH] + [-\text{Me}-O^-] + [-\text{Me}-OH_2^+]. \quad (7)$$

Частку відповідних поверхневих груп (α^- – негативно заряджених, α^+ – позитивно заряджених та α^0 – нейтральних) можна визначити, комбінуючи рівняння (3), (4) та (7)

$$\alpha^- = \frac{K_1 \cdot K_2}{[H^+]K_1 + K_1K_2 + [H^+]^2}, \quad (8)$$

$$\alpha^+ = \frac{[H^+]^2}{[H^+]K_1 + K_1K_2 + [H^+]^2}, \quad (9)$$

$$\alpha^0 = \frac{K_1 \cdot [H^+]}{[H^+]K_1 + K_1K_2 + [H^+]^2}. \quad (10)$$

Підставивши рівняння (8–10) в (6), можна розрахувати величини $\Delta[H^+]_1$ і $\Delta[H^+]_2$:

$$\Delta[H^+]_1 = C_s \left(\alpha_0^+ - \frac{[H^+]^2}{[H^+]K_1 + K_1K_2 + [H^+]^2} \right), \quad (11)$$

$$\Delta[H^+]_2 = C_s \left(-\alpha_0^- + \frac{K_1K_2}{[H^+]K_1 + K_1K_2 + [H^+]^2} \right) \quad (12)$$

і знайти теоретично концентрацію іонів H^+ у суспензії

$$[H^+] = [H^+]_0 + C_s \left(\alpha_0^+ - \alpha_0^- + \frac{K_1K_2 - [H^+]^2}{[H^+]K_1 + K_1K_2 + [H^+]^2} \right), \quad (13)$$

де α_0^+ , α_0^- – відповідно частка позитивно та негативно заряджених груп до взаємодії поверхні з водними розчином.

Рівняння (13) дозволяє теоретично розрахувати різницю рН суспензій і рН вихідних розчинів:

$$\begin{aligned} \Delta pH_t &= pH_{susp} - pH_{sol} = -\{ \lg[H^+]_{susp} - \lg[H^+]_{sol} \} = -\lg \left\{ \frac{[H^+]_{susp}}{[H^+]_{sol}} \right\} = \\ &= -\lg \left\{ 1 + \frac{C_s}{[H^+]} \left(\alpha_0^+ - \alpha_0^- + \frac{K_1K_2 - [H^+]^2}{[H^+]K_1 + K_1K_2 + [H^+]^2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Встановлений аналітичний вираз для різниці рН суспензій та рН вихідних розчинів у вигляді функції ΔpH_i (14) дозволяє оцінити її параметри $(K_1, K_2, Cs, \alpha_0^-, \alpha_0^+)$ з експериментальних результатів ΔpHe , використовуючи метод найменших квадратів, коли визначають мінімум функції

$$F = \sum_{i=1}^n [\Delta pHe(i) - \Delta pHi(i)]^2 = \min, \quad (15)$$

де n – кількість експериментальних точок визначення рН суспензій.

Оскільки сума (15) є функцією багатьох змінних $(K_1, K_2, Cs, \alpha_0^-, \alpha_0^+)$, то пошук її мінімуму проведено методом послідовних наближень з використанням чисельних методів оптимізації [7]. Мінімум функції (15) досягається за таких значень змінних: $pK_1 = 4.3$, $pK_2 = 7.9$, $Cs = 3 \cdot 10^{-4}$ моль/л і $\alpha_0^- - \alpha_0^+ = 0.1$. Проаналізуємо одержані результати щодо їхньої достовірності.

Найпростіша перевірка значень pK_1 і pK_2 полягає у визначенні за їхніми значеннями положення точки нульового заряду за рівнянням $pH_0 = 0.5(pK_1 + pK_2)$ та порівняння її з експериментально знайденою. Розрахована за цим рівнянням величина pH_0 дорівнює 6.1, що добре узгоджується з величиною $pH_0 = 6.2$, яка знайдена експериментально із залежності дзета-потенціалу від рН суспензії (рис. 2 а). Залежність дзета-потенціалу частинок діоксиду титану від рН середовища має типовий вигляд для водних суспензій амфотерних оксидів із ізоелектричною точкою $pH_0 = 6.2$, а з віддаленням рН суспензій від ізоелектричної точки дзета-потенціал частинок діоксиду титану спочатку зростає, досягаючи максимальних значень для $pH \approx 3$ і $pH \approx 8$, а потім спадає. Як відомо [1], агрегативна стійкість водних суспензій оксидів металів добре корелює з електроповерхневими властивостями суспензій, зокрема з дзета-потенціалом. Знайдена експериментально залежність радіуса частинок від рН середовища має максимум в області ізоелектричної точки (рис. 2 б) і підтверджує це положення.

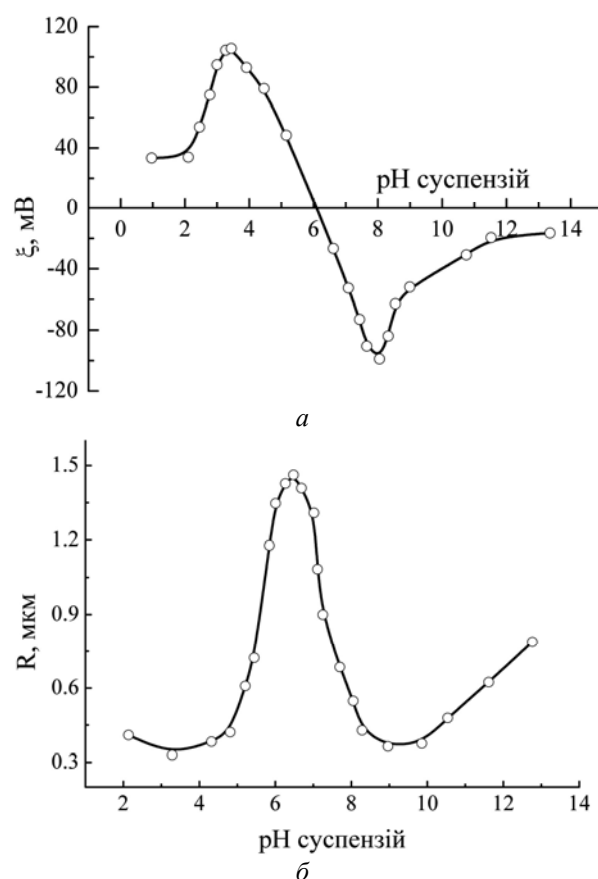


Рис. 2. Залежності дзета-потенціалу (а) та радіуса (б) частинок діоксиду титану від рН суспензій

Щодо абсолютних значень констант іонізації та їхнього порівняння з літературними результатами також можна відмітити певну узгодженість, а саме: pK_1 коливається в межах від 2.0 до 4.1, а pK_2 – в межах від 7.1 до 9.6 [8–11]. Таке коливання значень pK_1 і pK_2 зумовлене, очевидно, різними способами одержання порошків діоксиду титану, суспензії яких характеризуються ізоелектричною точкою в межах від $pH = 3.6$ до $pH = 6.7$ [12].

Знайдена поверхнева концентрація гідроксильних груп $Cs = 3 \cdot 10^{-4}$ моль/л у перерахунку на одиницю поверхні дає величину 6 OH/nm^2 . В обґрунтуванні цієї величини, очевидно, треба перевірити, чи не перевищує вона максимально можливу кількість груп-ОН на одиниці поверхні діоксиду титану. Аналіз кристалічної структури діоксиду титану рутильної модифікації показує, що на одну гідроксильну групу, яка знаходиться на грані

[100], припадає 0.2025 nm^2 , на грані [010] – 0.1358 nm^2 і на грані [111] – 0.1723 nm^2 [13], тобто на 1 nm^2 площі цих граней відповідно знаходиться біля 4, 7 і 5 груп-ОН. Оскільки співвідношення граней на дисперсних частинках є невідомим, то можна прийняти, що їхня поява є рівноймовірною, і середня кількість груп-ОН на поверхні знаходиться в межах від 5 до 6.

Оскільки досліджуваний зразок діоксиду титану модифікований оксидами алюмінію та кремнію, то очевидно, що частина його поверхні вкрита цими оксидами. Для алюмосилікатів теоретичний розрахунок кількості поверхневих груп-ОН дає 13 груп-ОН на nm^2 , а експериментальні дослідження різних зразків алюмосилікатів показують, що кількість поверхневих груп-ОН коливається в межах від 5.4 до 10.5 nm^2 [14]. Таким чином, знайдена величина добре узгоджується як з теоретичними розрахунками, так і експериментальними вимірюваннями.

Кількість поверхневих груп-ОН можна також оцінити за максимальною густиною поверхневого заряду, яка для досліджуваного зразка діоксиду титану дорівнює 0.264 Кл/м^2 [15]. Якщо прийняти, що кожна поверхнева група-ОН має заряд рівний елементарному заряду ($1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$), то кількість груп-ОН на 1 nm^2 дорівнює 1.7. Ця величина дещо менша від знайденої, але треба прийняти до уваги, що заряд кожної групи-ОН характеризується ефективною величиною, яка, звичайно, є меншою від елементарного заряду. Для досліджуваного зразку діоксиду титану ефективний заряд поверхневої групи-ОН дорівнює $0.28 e$.

Мінімум функції (15) досягається за багатьох значень α_0^- і α_0^+ , але за умови, що $\alpha_0^- - \alpha_0^+ = 0.1$. За фізичним змістом величини α_0^- і α_0^+ визначають, відповідно частку негативно та позитивно заряджених груп на поверхні до взаємодії поверхні з водним розчином. Очевидно, що така поверхня є гіпотетичною, бо треба очікувати, що в сухому вигляді на поверхні порошку діоксиду титану знаходяться тільки нейтральні групи, а величини α_0^- і α_0^+ відповідають тим групам, які легко (миттєво) іонізуються при контакті з водою, наприклад гідроксильні групи, на яких конденсовані

іони лужних металів чи галогенів із маточних розчинів. Важливим висновком для одержаних результатів є той факт, що для досліджуваного зразка діоксиду титану характерна перевага частки негативно заряджених груп над позитивно зарядженими на 0.1. Загалом, для кожного зразка порошку діоксиду титану ця різниця буде своєю в залежності від умов синтезу.

Використовуючи рівняння (8–10) можна обчислити частки поверхневих гідроксильних груп (рис. 3). Позитивно заряджені поверхневі групи суттєво переважають у кислому середовищі для $\text{pH} < 3$, а негативно заряджені групи – у лужному середовищі для $\text{pH} > 10$. В околі ізоелектричної точки переважають нейтральні поверхневі групи.

Залежності часток позитивно та негативно заряджених поверхневих гідроксильних груп від pH середовища дають змогу передбачити питомий електричний заряд поверхні σ_0 за умови, що кожна заряджена гідроксильна група має елементарний електричний заряд. Для аналізу агрегативної стійкості суспензій частіше використовують поверхневий потенціал подвійного електричного шару φ_0 , який пов'язаний з питомим електричним зарядом σ_0 співвідношенням

$$sh\left(\frac{ze\varphi_0}{2kT}\right) = \frac{\sigma_0}{C_s e \sqrt{8\epsilon\epsilon_0 R T C_0}}, \quad (16)$$

де R – універсальна газова стала; C_0 – концентрація іонів в об'ємній фазі; z – валентність протиіонів; e – заряд електрона.

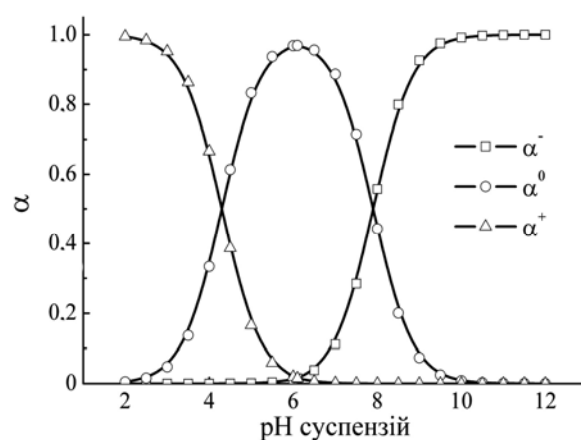


Рис. 3. Залежність часток поверхневих гідроксильних груп діоксиду титану від pH суспензій

Питомий поверхневий заряд розраховували за сумою концентрацій позитивно і негативно заряджених гідроксильних поверхневих груп з врахуванням знаку заряду, а поверхневий потенціал – за співвідношенням (16). Як видно з рис. 4, положення точки нульового заряду добре узгоджується з положенням максимуму на залежності радіуса частинок від рН середовища (рис. 2 б), а величина експериментально знайденого дзета-потенціалу дисперсних частинок є меншою від поверхневого потенціалу, що добре узгоджується із теоретичними положеннями.

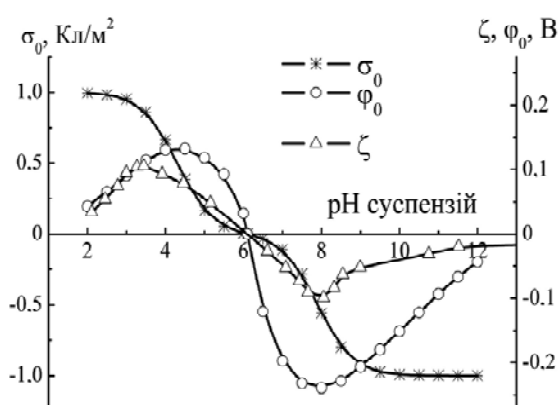


Рис. 4. Залежність питомого поверхневого заряду σ_0 , поверхневого потенціалу ϕ_0 та дзета-потенціалу ζ від рН суспензій

ВИСНОВКИ

Запропонований підхід для визначення електроповерхневих властивостей водних суспензій, зокрема констант іонізації K_1 і K_2 , на основі дослідження залежності відхилень рН суспензій від рН вихідних розчинів ΔpH_e від рН вихідних розчинів ($\Delta\text{pH}_e = f(\text{pH розчину})$) є обґрунтованим і доступним в експериментальному виконанні. Знайдені головні інтегральні показники електроповерхневих властивостей суспензій діоксиду титану (положення точки нульового заряду, величини констант поверхневих рівноваг $\text{p}K_1$ і $\text{p}K_2$, концентрація поверхневих гідроксильних груп) добре узгоджуються з результатами інших незалежних експериментальних досліджень. Саме можливість охарактеризувати початкові умови на поверхні порошку діоксиду титану, визначивши величини $[-\text{Me} - \text{OH}_2^+]_0$ та $[-\text{Me} - \text{O}^-]_0$, відрізняє запропонований підхід від інших.

ЛІТЕРАТУРА

1. Голикова Е.В., Чернобережский Ю.М., Йогансон О.М. О корреляции агрегативной устойчивости и интегральных электроповерхностных характеристик дисперсий оксидов // Коллоидн. журн. – 2000. – Т. 62, № 5. – С. 596–605.
2. Tkachenko N.H., Yaremko Z.M., Bellmann C. Effect of 1-1-charged ions on aggregative stability and electrical surface properties of aqueous suspensions of titanium dioxide // Colloid Surf. A. – 2006. – V. 279, N 1–3. – P. 10–19.
3. Духин С.С., Дерягин Б.В. Электрофорез. Москва: Наука, 1978. – 328 с.
4. Яремко З.М., Солтыс М.Н., Федущинская Л.Б., Гаврилив В.Д. К расчету дисперсионного состава суспензий по данным седиментационного анализа // Укр. хим. журн. – 1982. – Т. 48, № 6. – С. 589–592.
5. Ageeva Yu.S., Gorichev I.G., Izotov A.D. et al. Calculation and Comparison of Acid-Base Equilibrium Constant for Nickel(II) Oxide Determined by Various Methods // Theor. Found. Chem. Eng. – 2007. – V. 41, N 6. – P. 859–867.
6. Ткаченко Н., Яремко З., Солтис М., Сімон Ф. Особливості адсорбції поліметакрилової кислоти на модифікованому діоксиді титану // Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. – 2007. – Вип. 48, Ч. 2. – С. 132–139.
7. Устинов С.М., Зимницкий В.А. Вычислительная математика. – Санкт-Петербург: БХВ–Петербург, 2009. – 336 с.
8. Ермакова А.Э., Сидорова М.П., Богданова Н.Ф., Борисова М.Н. Электрохимические характеристики оксидов кремния и титана и титан-кислородных наноструктур на кремнеземных подложках // Коллоидн. журн. – 1999. – Т. 61, № 6. – С. 771–775.
9. Janush W. Determination of surface ionization and complexation constants from potentiometric titration data // Polish J. Chem. – 1991. – V. 65. – P. 799–807.
10. Русакова С.М., Горичев И.Г., Артамонова И.В., Забенькина Е.О. Очистка вод с помощью диоксида титана (IV) // Экология промышленного производства. – 2010. – № 1. – С. 28–31.

11. Голикова Е.В., Рогоза О.М., Щелкунов Д.М., Чернобережский Ю.М. Электроповерхностные свойства и агрегативная устойчивость водных дисперсий TiO_2 и ZrO_2 // Коллоидн. журн. – 1995. – Т. 57, № 1. – С. 25–29.
12. Kosmulski M. The pH-dependent surface charging and points of zero charge: V. Update // J. Colloid Interface Sci. – 2011. – V. 353, N 1. – P. 1–15.
13. West A. Solid state chemistry its applications. Part 1. – New York: John Wiley & Sons Ltd., 1984. – 483 p.
14. Тарасевич Ю.И. Строение и химия слоистых силикатов. – Киев: Наукова думка, 1988. – 248 с.
15. Yaremko Z.M., Tkachenko N.H., Bellmann C., Pich A. Redispersion of TiO_2 Particles in Aqueous Solutions // J. Colloid Interface Sci. – 2006. – V. 296. – P. 565–571.

Надійшла 15.10.2012, прийнята 25.02.2013

Определение констант ионизации поверхностных гидроксильных групп модифицированного диоксида титана в их водных суспензиях

Р.С. Петришин, З.М. Яремко, М.Н. Солтыс

*Львовский национальный университет имени Ивана Франко
ул. Кирилла и Мефодия, 8, Львов, 79005, Украина, petryshyn_roman@list.ru*

Обоснован новый подход к определению констант ионизации поверхностных гидроксильных групп модифицированного диоксида титана в его водных суспензиях. Его суть заключается в применении 2-рК модели к описанию экспериментально найденной зависимости разности рН водных суспензий и исходных растворов от рН исходных растворов, на основе которых эти суспензии приготовлены. Кроме констант ионизации поверхностных гидроксильных групп, этот подход позволяет оценить их общую концентрацию и доли положительно и отрицательно заряженных поверхностных гидроксильных групп.

Determination of the ionization constants for surface hydroxyl groups of modified titanium dioxide in its aqueous suspensions

R.S. Petryshyn, Z.M. Yaremko, M.M. Soltys

*Ivan Franko National University of Lviv
8 Kyryla & Mefodiya Str., Lviv, 79005, Ukraine, petryshyn_roman@list.ru*

A new approach to the determination of ionization constants of surface hydroxyl groups of the modified titanium dioxide in its aqueous suspensions has been justified. Its essence lies in the use of the 2-pK model for description of experimentally found dependence of difference in pH of aqueous suspensions and initial solutions on the pH of the initial solutions used for preparation of the suspensions. Besides the ionization constants of surface hydroxyl groups, this approach allows us to estimate their total concentration and parts of positively and negatively charged ones.