

РЕФЕРАТ

Дана наукова робота загальним обсягом 108 сторінок, містить 24 ілюстрації, 4 таблиці, 2 додатки та 32 джерела за переліком посилань.

Актуальність теми. Квантово-хімічні розрахунки наносистем ксерогелю допомагають оцінити структуру молекули з урахуванням взаємодії між атомами і більш цілеспрямовано проводити синтез речовин, які мають потенційно корисні властивості. За допомогою нових технічних можливостей можна дослідити невідомі досі кристалічні структури, кластери й молекули, шляхи перебігу й перехідні стани хімічних реакцій.

Мета і завдання дослідження. Мета дослідження полягає використанні квантово-хімічних розрахунків для моделювання наносистем ксерогелів, функціоналізованих сульфуровмісними групами.

Об'єктом дослідження комп'ютерно – інтегровані технології для квантово-хімічного моделювання наносистем.

Предметом дослідження є сульфуровмісна група, що знаходиться в поверхневому шарі ксерогелю.

Методи дослідження. Для розв'язання поставлених завдань в даній роботі були використані методи: самоузгодженого поля Гартрі-Фока та функціонала електронної густини (DFT).

Наукова новизна результатів. Знайдено положення смуг поглинання в ІЧ спектрах, що необхідні для подальшого синтезування нових гібридних органо - неорганічних матеріалів.

Практичне значення результатів. Розраховані оптимізовані параметри наносистем дають можливість синтезувати нові гібридні органо-неорганічні сорбційні матеріали, в тому числі із заданими основними характеристиками. Змодельовані наносистеми ксерогелів можна використати для сорбції токсичних отруйних речовин – діоксинів.

Апробація результатів дисертації. Результати дослідження, що включені до дисертації, були оприлюднені на Всеукраїнській конференції з міжнародною участю, присвяченій 85-річчю з дня народження академіка НАН України О.О. Чуйка (Київ, 2015), I міжнародній науково-практичній конференції «Сучасний проблеми науки і технологій в умовах забезпечення сталого розвитку економіки: «MPST-I-2015»» (Миргород, 2015), Ukrainian-Polish scientific conference «Membrane and sorption processes and technologies» (Kyiv, 2016), VI Міжнародній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених з хімії та хімічної технології (Київ, 2016), 43rd International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering (SSCHE) (High Tatras, 2016).

Публікації. За результатами роботи опубліковано 5 праць, а саме 5 тезисів у збірниках на міжнародних та українських конференціях.

Експериментальну роботу по моделюванню наносистеми ксерогелю було виконано в інституті хімії поверхні ім. О.О. Чуйка.

КВАНТОВО - ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, ІЧ – СПЕКТРИ, ЯМР – СПЕКТРИ, ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНІ КРЕМНЕЗЕМИ, СУЛЬФУРОВМІСНА ГРУПА, СМУГА ВАЛЕНТНИХ КОЛИВАНЬ, МЕТОД ГАРТРИ - ФОКА

РЕФЕРАТ

Данная научная работа общим объемом 108 страниц, содержит 24 иллюстрации, 4 таблицы, 2 приложения и 32 источника по перечню ссылок.

Актуальность темы. Квантово - химические расчеты наносистем ксерогелей помогают оценить структуру молекулы с учетом взаимодействия между атомами и более целенаправленно проводить синтез веществ, которые имеют потенциально полезные свойства. С помощью новых технических возможностей можно исследовать неизвестные до сих пор кристаллические структуры, кластеры и молекулы, пути прохождения и переходные состояния химических реакций.

Цель и задачи исследования. Цель исследования заключается в использовании квантово - химических расчетов для моделирования наносистем ксерогелей, функционализированных сульфуросодержащими группами.

Объектом исследования компьютерно - интегрированные технологии для квантово - химического моделирования наносистем.

Предметом исследования является сульфуросодержащая группа, находящаяся в поверхностном слое ксерогелей.

Методы исследования. Для решения поставленных задач в данной работе были использованы методы: самосогласованного поля Гартри-Фока и функционала электронной плотности (DFT).

Научная новизна. Найдены положения полос поглощения в ИК спектрах, которые необходимы для дальнейшего синтезирования новых гибридных органо - неорганических материалов.

Практическое значение результатов. Рассчитаны оптимизированы параметры наносистем дают возможность синтезировать новые гибридные органо-неорганические сорбционные материалы, в том числе с заданными основными характеристиками. Смоделированы наносистемы ксерогелей можно использовать для сорбции токсичных ядовитых веществ - диоксинов.

Апробация результатов диссертации. Результаты исследования, включенные в диссертации, были обнародованы на Всеукраинской конференции с международным участием, посвященной 85- летию со дня рождения академика НАН Украины А.А. Чуйко (Киев, 2015), I международной научно - практической конференции «Современные проблемы науки и технологий в условиях обеспечения устойчивого развития экономики: «MPST-I-2015»» (Миргород, 2015), Ukrainian-Polish scientific conference «Membrane and sorption processes and technologies» (Kyiv, 2016), VI Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по химии и химической технологии (Киев , 2016), 43rd International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering (SSCHE) (High Tatras, 2016).

Публикации. По результатам работы опубликовано 5 тезисов в сборниках на международных и украинских конференциях.

Экспериментальную работу по моделированию наносистем ксерогелей было выполнено в институте химии поверхности им. А.А. Чуйко.

КВАНТОВО – ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕИРОВАНИЕ, ИЧ – СПЕКТРЫ, ЯМР – СПЕКТРЫ, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЕ КРЕМНЕЗЕМЫ, СУЛЬFUРОСОДЕРЖАЩИЕ ГРУППЫ, ПОЛОСА ВАЛЕНТНЫХ КОЛЕБАНИЙ, МЕТОД ГАРТРИ - ФОКА

SUMMARY

This research work on 108 pages containing 24 illustrations, 4 tables, 2 applications and 32 sources by the list of literature links.

Actuality of the topic. Quantum chemical calculations nanosystem help predict molecular structure of the interaction between atoms and more targeted spending synthesis of substances with potentially useful properties. With the new technical possibilities can explore hitherto unknown crystalline structure, clusters and molecules flow path and transition states of chemical reactions.

The purpose and objectives of the study. The purpose of the study is using quantum- chemical calculations to model nanosystem, functionalized sulfur-containing functional groups.

The object of the study are computer - integrated technologies for quantum - chemical modeling of nanosystems.

The subject of the study is sulfur - $\text{S}(\text{OH})_2$ group, located in the surface layer xerogels .

Research methods. To solve the problems in this work a set of methods: self-consistent field Gartri - Fock and density functional theory (DFT).

Scientific novelty. Found positions of the absorption bands in the infrared spectra, which are necessary to further synthesize new hybrid organic - inorganic materials.

The practical significance of the results. The parameters are optimized nanosystems allow to synthesize new hybrid organic - inorganic sorption materials, including those with basic characteristics. Modeling of nanosystems xerogels can be used for the adsorption of toxic poisonous substances - dioxins.

Approval of the research. Results of the research has been included in the thesis had been presented at the National Conference with international participation, dedicated to the 85th anniversary of academician of NAS of Ukraine AA Chuyko (Kiev, 2015), I of the international scientific - practical conference «Modern problems of science and technology in terms of sustainable economic development : «MPST-I-2015»» (Mirgorod, 2015), Ukrainian-Polish scientific

conference «Membrane and sorption processes and technologies» (Kyiv, 2016), VI International conference of students , graduate students and young scientists in chemistry and chemical engineering (Kiev, 2016), 43rd International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering (SSCHE) (High Tatras, 2016).

Publications. According to the results of the work has been published 5 abstracts at international and Ukrainian conferences.

Experimental work on the study of the catalytic properties has been performed at the Chuiko Institute of Surface Chemistry.

QUANTUM - CHEMICAL MODELING, IR – SPECTRUM , NMR – SPECTRUM, FUNCTIONAL GROUPS, SULFUR – CONTAINING, BANDS OF STRETCHING VIBRATION, GARTRI – FOCA METHOD