

РЕФЕРАТ

Робота містить: 119 с., 16 рис., 8 табл., 3 дод., 44 джерела.

Актуальність теми – вивчення взаємодії молекули води, яка в газовій фазі в основному електронному стані знаходиться в триплетному стані, з поверхнею твердого тіла, спіновий стан якої синглетний, має важливе значення, зважаючи на можливість триплет-синглетного переходу в адсорбційному комплексі. Другорядне, але не менш важливе є з'ясування впливу кисневих вакансій на поверхні діоксиду титану та адсорбції на них молекул газової фази на ширину забороненої зони, яка визначає ефективність утилізації сонячного випромінювання кристалічним оксидом титану (IV).

Мета роботи – з використанням квантово-хімічних розрахунків встановити послідовність елементарних актів взаємодії молекули води, основний електронний стан якої триплетний, з модельними кластерами поверхні TiO_2 , які знаходяться в синглетному стані, для з'ясування умов їх взаємодії.

Об'єкт дослідження – комп'ютерно-інтегровані технології для дослідження ідеальної грані кристалічного анатазу, грані анатазу с кисневою вакансією, поверхні потенціальної енергії, триплетно-синглетного переходу.

Предмет дослідження – просторова будова та електронна структура кластерних моделей, енергія утворення адсорбційних комплексів, властивості триплетно-синглетного переходу.

Метод дослідження – квантово-хімічний метод теорії функціонала густини з обмінно-кореляційним функціоналом B3LYP в базисі 6-31 G**.

Наукова новизна результатів полягає в наступному:

- 1) Утворення кисневих вакансій на грані (001) анатазу призводить до зменшення ширини забороненої зони TiO_2 .
- 2) Адсорбція молекулярного кисню на бездефектній грані (001) діоксид титану не відбувається.
- 3) Адсорбція H_2O на кисневій вакансії грані (001) анатазу передусє триплет-синглетний перехід в системі [Кластер 001 + H_2O].

4) Утворення кисневої вакансії з наступною адсорбцією на ній молекули H_2O призводить до подальшого зменшення ширини забороненої зони, що відкриває шлях до створення на основі анатазу ефективних перетворювачів сонячного випромінювання.

Публікації. За матеріалами роботи опубліковано 4 тез доповідей на міжнародних та українських конференціях.

ДІОКСИД ТИТАНУ, КВАНТОВО-ХІМІЧНИЙ РОЗРАХУНОК, КРИСТАЛІЧНА ГРАНЬ, КИСНЕВА ВАКАНСІЯ, МОЛЕКУЛА O_2 , МОЛЕКУЛА H_2O АДСОРБЦІЙНИЙ КОМПЛЕКС, ТРИПЛЕТ-СИНГЛЕТНИЙ ПЕРЕХІД.