

## ПРИМЕНЕНИЕ DFT И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ТЕОРИЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЫ ЭОЗИНА В С TNT

Журавлёва Д.А. (НИУ “ИТМО”)

Ментор – магистрант 2 года обучения, Гончаров В.В.  
(НИУ “ИТМО”)

**Введение.** Нанотрубки диоксида титана (TNT) привлекли существенный интерес в последние годы из-за их выдающихся свойств и возможности их использования в различных прикладных отраслях. Основным методом синтеза представленной структуры является анодирование титана в органических растворителях с применением фторида аммония. Также важно моделировать и понимать требования к расходу энергии для процесса синтеза  $\text{TiO}_2$  NT, чтобы повысить энергетическую эффективность и общую устойчивость процесса в целом [1].

В электрохимическом анодировании TNT энергия в основном контролируется подаваемой мощностью и временем анодирования. Как следствие, точный анализ энергозатрат в процесс электрохимического анодирования  $\text{TiO}_2$  NT критичен для формирования необходимой морфологии поверхности. Для процессов энергетического моделирования термодинамический анализ, включая анализы энергии и энергопотоков, является эффективным подходом для понимания и сокращения использования энергии в электрохимических процессах. В принципе, энергия никогда не уничтожается, а всегда сохраняется на основе первого закона термодинамики. Энергия в максимальном количестве должна быть доступна для выполнения работы в процессе, чтобы уравновесить с эталонным состоянием и учесть потери [2].

Также одним из основных методов изучения структур нанотрубок  $\text{TiO}_2$  является теория функционала плотности (DFT). Многие исследователи применяют теорию функционала плотности для изучения геометрических и электронных свойств различных  $\text{TiO}_2$  поверхностей [3].

**Основная часть.** Практической частью данного исследования являлось создание на поверхности титановой пластины слоя нанотрубок диоксида титана высотой порядка 1 мкм., диаметром самих трубок 50 нм. Синтез проводили при помощи процесса анодирования, где анод – титан, а катод – платиновый сетчатый электрод. В качестве электролита мы использовали этиленгликоль с добавлением различного количества фторида аммония в диапазоне от 0,1 до 1 масс. %. Напряжение варьировали при помощи источника постоянного тока.

Теоретической частью данного исследования являлось сравнение двух методик моделирования строения нанотрубок диоксида титана, а также изучалось влияние содержания фторида аммония на процесс формирования пористой поверхности TNT.

**Выводы.** Исследование сосредоточено на изучении формирования нанотрубок  $\text{TiO}_2$  при помощи различных моделей, таких как термодинамическая теория или теория функционала плотности. Исследование синтеза TNT в определенных условиях способствуют более глубокому пониманию взаимодействия этих материалов с фармацевтическими субстанциями.

Работа была поддержана грантом РФФИ № 19-79-10244.

1. Bingbing L. et al. Energy Modeling of Electrochemical Anodization Process of Titanium Dioxide Nanotubes. – 2014.
2. ZHU Z. ET AL. DYNAMIC MODEL OF ION AND WATER TRANSPORT IN IONIC POLYMER-METAL COMPOSITES //AIP ADVANCES. – 2011. – Т. 1. – №. 4.
3. Cao W. et al. Molecular behavior of water on titanium dioxide nanotubes: A molecular dynamics simulation study //Journal of Chemical & Engineering Data. – 2016. – Т. 61. – №. 12. – С. 4131-4138.

Журавлёва Д.А. (автор)

Гончаров В.В. (ментор)