

Сравнение методов исследования сорбции воды на оксиде титана

© Дегтярев^{1*} Андрей Александрович и Тараканов²⁺ Александр Геннадьевич

¹ Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный технический университет. ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия. Тел.: (4752) 63-44-44.

E-mail: ad.dycost@gmail.com

² Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный технический университет. ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия. Тел.: (4752) 63-44-44.

E-mail: uazqaz@gmail.com

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: DFT, псевдопотенциалы, BSSE, оксид титана(IV), рутил, вода, сорбция.

Аннотация

В работе исследовано влияние размера кластера оксида титана(IV) и метода молекулярного моделирования, на вычислительные затраты и точность расчета геометрических и энергетических характеристик сорбции молекулы воды на поверхности (110) рутила.

Проведены расчеты методами молекулярной динамики, полуэмпирической квантовой химии и *ab initio* методами в базисах с псевдопотенциалами (LANL2DZ и SBKJС) и полноэлектронных базисах (3-21G(d,p), 6-31G(d,p), 6-31++G(d,p)). Используемые *ab initio* методы – Хартри-Фока и теории функционала плотности с гибридным функционалом B3LYP5. Из исследованных методов был выбран метод, оптимальный на основании вычислительных затрат и точности расчета.

Вычислительные затраты оценивались на основании времени одного шага оптимизации для фиксированного программного и аппаратного обеспечения. Точность расчета оценивалась на основании двух факторов: энергия сорбции одной молекулы воды по центру кластера и расстояние между кислородом воды и ближайшим атомом поверхности (100) кластера. Сравнение использованных методов проводилось с экспериментальными данными и квантово-химическими расчетами в полноэлектронном базисе (из литературных данных и собственные расчеты), принятыми за эталон.

Дополнительно, для методов показавших приемлемые результаты по точности значений исследовано влияние погрешности BSSE на величину энергии сорбции.

Оптимальным был принят расчет методом теории функционала плотности с гибридным функционалом B3LYP5, полноэлектронным базисом 6–31G(d, p) для атомов Н, О и базисом с псевдопотенциалом LANL2DZ для атомов Ti с последующим вычислением погрешности BSSE.