

OH- grupas adsorbcijas uz TiO₂ virsmas aprēķini no pirmajiem principiem

Elīna Neilande¹, Yin-Pai Lin¹, Siarhei Zavatski², Hanna Bandarenka², Anatolijs Popovs¹,
Sergejs Piskunovs¹ un Dmitrijs Bočarovs¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

²*Baltkrievijas Valsts informātikas un radioelektronikas universitāte*

Titāna dioksīds (TiO₂) ir pusvadītājs ar antibakteriālām un lieliskām fotokatalītiskām īpašībām, kura aizliegtās zonas platums ir 3,2 eV. Materiāli, kuru pamatā ir TiO₂, bieži iznīcina organiskās vielas, tostarp patogēnus, ja tiek pakļauti UV starojumam vai saules gaismai, ar efektivitāti, ko var kontrolēt ar to elementu un fāzes sastāvu. Saskaņā ar citiem pētījumu TiO₂ legēšana ar varu var ievērojami palielināt tā antibakteriālo aktivitāti. Pētījuma laikā tiek rūpīgi salīdzinātas tīras un ar varu legētas TiO₂ anatāza fāzes no eksperimentālā un teorētiskā viedokļa. Tika pētīts anatāza (001) un (101) virsmas, kā arī ar Cu legēta tilpuma fāze. Ar Cu legēta TiO₂ modelēšana no pirmajiem principiem tiek veikta, izmantojot CRYSTAL17 un GPAW kodus, kuru pamatā ir attiecīgi kvantu ķīmija, blīvuma funkcionālā teorija (DFT) un no laika atkarīga DFT. Aprēķinātais ar Cu legēta TiO₂ adsorbcijas spektrs parāda atšķirību starp ar Cu dopētu virsmu un tīra TiO₂ virsmu. Tika aprēķināta Cu iekļaušanas enerģija anatāza (001) un (101) virsmām, kā arī OH- grupu adsorbcija uz tīrām un ar Cu legētām TiO₂ virsmām. Iegūtie rezultāti ļauj labāk izprast TiO₂ virsmas reaktivitāti un kalpo par pamatu turpmākiem termodinamiskajiem pētījumiem.

Autori pateicas LZP projektam LZP-2021/1-0464 par finansiālu atbalstu pētniecībā.

Calculations of OH- group adsorption on TiO₂ surface from first principles

Elina Neilande¹, Yin-Pai Lin¹, Siarhei Zavatski², Hanna Bandarenka², Anatoli I. Popov¹,
Sergei Piskunov¹, and Dmitry Bocharov¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

²*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics*

With a 3.2 eV band gap and great photocatalytic capabilities, titanium dioxide (TiO₂) is a semiconductor with strong antibacterial properties. TiO₂-based materials frequently kill organic substances, including pathogens, when exposed to UV or sunlight with effectiveness that can be controlled by their elemental and phase composition. According to other reports, copper doping titania may significantly increase its antibacterial activity. Here, we thoroughly compare the anatase phases of pure and Cu-doped TiO₂ from an experimental and theoretical standpoint. We investigated the surfaces of anatase (001) and anatase (101) as well as the bulk phase of the Cu-doped anatase. The ab initio modelling of Cu-doped TiO₂ is performed by means of the CRYSTAL17 and GPAW codes based on quantum chemistry, density functional theory (DFT) and time-dependent DFT, respectively. The calculated absorption spectrum of Cu-doped TiO₂ reveals a difference between the Cu-doped slab and one made of pristine TiO₂. We also compute the inclusion energy of Cu into the anatase (001) and (101) surfaces, and then simulate the adsorption of OH-groups on the untreated and doped with Cu TiO₂ surfaces. The obtained results lead to a better understanding of TiO₂ higher surface reactivity and form the basis for following thermodynamic studies.

This research was funded by the Latvian Scientific Council grant LZP-2021/1-0464.