

Санкт-Петербургское отделение РАН
Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Институт химии твердого тела УрО РАН
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева
Научный совет РАН по неорганической химии
Научный совет РАН по физической химии

**XVI Симпозиум с международным участием
ТЕРМОДИНАМИКА И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ
(ТиМ-2025)**

Тезисы докладов

30 июня – 4 июля 2025

**Санкт-Петербург
2025**

УДК 541.11 + 541.123 + 541.6

ББК Г531

ISBN 978-5-7629-3510-4

Термодинамика и материаловедение: Тезисы докладов XVI Симпозиума с международным участием, Санкт-Петербург, 30 июня – 4 июля 2025
/ ответственный за выпуск Е.К. Храпова. Санкт-Петербург: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2025, 175 с.

Особенности формирования нанообъектов на основе ZnO и их влияние на параметры продуктов и фотокаталитическую активность

Мешина К.И., Ткаченко Д.С., Бобрышева Н.П., Осмоловский М.Г.,
Вознесенский М.А., Осмоловская О.М.

СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Среди существующего на данный момент разнообразия способов очистки сточных вод от циклических органических соединений, таких как красители или антибиотики, отсутствует безотходная технология, которая бы позволяла быстро полностью избавляться от загрязнителей. Перспективным является применение в системах очистки воды процесса фотодеградации загрязнителей с участием полупроводниковых материалов. При помещении в водную среду последние генерируют под действием света электрон-дырочные пары, мигрирующие к поверхности и инициирующие создание гидроксильных и супероксидных анионных радикалов, реагирующих с молекулой загрязнителя, образовавшей активированный комплекс с поверхностью полупроводника, и приводящие к её полному разложению до CO₂ и H₂O. Одним из таких широко изучаемых материалов является оксид цинка (ZnO), который ввиду своих нетоксичных, биосовместимых и полупроводниковых свойств применяется в медицине и индустрии красоты. Однако ряд вопросов, препятствующих внедрению материалов на основе ZnO в водоочистные сооружения, до сих пор остается неисследованным. Так, авторами не показано, как можно целенаправленно изменять форму, морфологию и параметры наноразмерного ZnO. На основании работ нашей научной группы мы полагаем, что это возможно при варьировании таких условий синтеза, как способ внесения реагентов в реакционную среду, температура синтеза, наличие гидротермальной обработки или добавки противоионов, концентрация или природа катиона цинка, концентрация щелочи, время выдерживания суспензии. Что касается исследования фотокаталитической активности, то в рамках одной работы отсутствует обсуждение протекания фотодеградации с участием ZnO и под УФ-излучением, и под светом видимого диапазона, как и не приводится исследование эффективности процесса для разных типов красителей. Также в литературе не приводится полное обсуждение того, как происходит взаимодействие компонентов реакционной среды друг с другом и разных типов красителей с поверхностью ZnO, тем более с привлечением компьютерного моделирования. Все указанные гипотезы требуют комплексного исследования.

В рамках данного исследования было получено 17 образцов ZnO при варьировании условий синтеза, описанных выше. Проведена характеристизация комплексом физико-химических методов, включая РФА, определение формы и размеров кристаллитов, ИК-спектроскопию, СЭМ, ПЭМ, БЭТ, РФЭС, получение спектров поглощения и отражения и КР-спектроскопию. Был использован специально разработанный и апробированный расчетный подход методом DFT, включавший в себя учет кислородных вакансий, определяющих протекание фотокатализа под действием света из видимой области, и реальных параметров образцов, полученных методом РФА. Проведен анализ процесса формирования наночастиц и его влияния на форму конечных продуктов. Кроме этого, квантово-химические расчеты были использованы для оценки взаимодействия красителей – метиленового голубого, эозина К, Конго красного и бриллиантового зеленого – с поверхностью нанообъектов ZnO. Обширное исследование фотокаталитической активности образцов различной формы, включавшее расчетный эксперимент, продемонстрировало, что эффективность разложения органических красителей в значительной степени определяется особенностями их взаимодействия с поверхностью фотокатализатора, а также что улучшенное избавление от конкретного типа загрязнителя зависит от варьирования соотношения граней получаемых наночастиц.

Авторы благодарят Научный парк СПбГУ, в частности ресурсные центры «РДМИ», «МАСВ», «ОЛМИВ», «ДФМ», «ФМИП», «ВЦ», «Нанофотоника», «Нанотехнологии», «МРМИ», «ИТКН» за предоставленную возможность использования приборной базы.

<u>Злобина И.В., Бекренев Н.В., Чуриков Д.О.</u>	
Упрочняющая термическая СВЧ модификация при различных частотах воздействия отверженных углепластиков, сформированных на термопластичном и термореактивном связующем	105
<u>Королева М.С., Пийр И.В.</u>	
Содопиравание s, p, d, f элементами как способ влияния на функциональные свойства Mg-замещенных ниобатов висмута со структурой пирохлора	106
<u>Курицына Е.А., Храпова Е.К.</u>	
Исследование фазообразования в системе MgO-SiO ₂ -GeO ₂ -H ₂ O	107
<u>Лунина С.Е., Храпова Е.К.</u>	
Си-содержащие гидросиликаты со структурой хризотила	108
<u>Малышкин Д.А., Мильченко А.Д., Яговитин Р.Е., Иванов И.Л., Цветков Д.С., Зуев А.Ю.</u>	
Исследование сложных оксидов BaFe _{1-x} In _x O _{3-δ} и BaCo _{1-x} In _x O _{3-δ}	109
<u>Матвеев Е.С.</u>	
Построение кристаллографических полей для сложных оксидов с общей формулой A ₂ BB'O ₅	110
<u>Мешина К.И., Ткаченко Д.С., Бобрышева Н.П., Осмоловский М.Г., Вознесенский М.А., Осмоловская О.М.</u>	
Особенности формирования нанообъектов на основе ZnO и их влияние на параметры продуктов и фотокатализическую активность	111
<u>Минеев А.М., Смаль Е.А., Шешковас А.Ж., Туманов И.А., Марчук А.С., Рекова Ю.С., Лебедева М.В.</u>	
LaCo _{1-x} Ni _x O ₃ , как материалы для толстопленочных резисторов: электрические свойства и взаимодействие со стеклом	112
<u>Мошкина Е.М., Молохеев М.С., Кох Д., Еремин Е.В.</u>	
Влияние компонентов растворителя на валентное состояние катионов марганца в системах на основе Bi ₂ O ₃ -MoO ₃ -Na ₂ O-B ₂ O ₃ -Mn ₂ O ₃ -Gd ₂ O ₃ при работе раствор-расплавным методом	113
<u>Мурашкина Н.И.</u>	
Фазообразование в системе TiO ₂ -Fe ₂ O ₃ (H ₂ O) в условиях термообработки на воздухе	114
<u>Мурашкин А.А., Мартинсон К.Д.</u>	
Синтез наночастиц цинк-магниевого феррита методом растворного горения и их структурные, магнитные и электрохимические особенности поведения	115
<u>Налимова С.С., Никонова В.А., Максимов А.И., Шомахов З.В., Бузовкин С.С., Рыбина А.А., Баймухаметова Р.М., Мошников В.А.</u>	
Газочувствительные слои на основе многокомпонентных оксидов металлов и металлических наночастиц	116
<u>Налимова С.С., Никонова В.А., Максимов А.И., Шомахов З.В., Юферицын М.Д., Мошников В.А.</u>	
Гидротермальный синтез наностержней оксида цинка для сенсорики и энергетики	117
<u>Николаева М.Н., Дунаевский М.С., Бугров А.Н.</u>	
Топография поверхности одностенных углеродных нанотрубок и восстановленного оксида графена в композитах с полистиролом и их электрическое сопротивление	118
<u>Панфилова К.А., Чумак Е.А., Васильева А.А.</u>	
Применениеnanostructuredированного анодированного оксида алюминия в качестве темплата для синтеза волокон оксида цинка	119