Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

**КОМПЬЮТЕРНОЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ
 $\text{SiO}_2 - \text{Me}_x\text{O}_y$**

А.А. Гвозденко, А.В. Блинов, М.А. Ясная, А.Б. Голик, В.В. Раффа, В.Н. Крамаренко,
Д.Г. Маглакелидзе, И.М. Шевченко

ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

355017, Россия, Ставрополь, ул. Пушкина, 1

nastya_bogdanova_88@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.394

Аннотация: Впервые с помощью компьютерного квантово-химического моделирования показана возможность формирования поликомпонентных систем $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_3\text{O}_4$, $\text{SiO}_2 - \text{MnO}_2$ и $\text{SiO}_2 - \text{CuO}$ путем адсорбции на поверхности микросфер SiO_2 металлоксидного слоя, состоящего из наночастиц диоксида марганца (IV), смешанного оксида железа или наночастиц оксида меди (II). По результатам сканирующей электронной микроскопии установлено, что формирование металлоксидного слоя в образце $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_3\text{O}_4$ произошло наиболее равномерно среди всех представленных образцов поликомпонентных систем. В рамках квантово-химического моделирования установлено, что наиболее энергетически выгодным и стабильным является взаимодействие SiO_2 с наночастицами Fe_3O_4 .

Ключевые слова: *нанокомпози́ты, поликомпонентные системы, квантово-химическое моделирование, золь-гель метод.*

1. Введение

В настоящее время широкое распространение получили поликомпонентные системы, которые представляют собой нанокомпози́ты, смешанные наночастицы, системы «ядро-оболочка» и т.д. Формирование подобных систем из различных материалов позволяет увеличить функциональные возможности и максимально использовать структурные преимущества полученных материалов, а также варьировать свойствами полученных поликомпонентных систем. Это связано с развитой удельной поверхностью нанокомпози́тов, в особенности, наносфер, покрытых несколькими слоями оксидов металлов [1-3]. Данные поликомпонентные системы находят широкое применение в медицине, микроэлектронике, оптике, энергетике, а также в качестве материалов для детектирования ИК-излучения, основы для магнитных жидкостей, селективных индикаторов, устройств преобразования и хранения энергии [4-8].

Цель данной работы – исследовать процесс формирования металлоксидного слоя, состоящего из наночастиц диоксида марганца (IV), наночастиц смешанного оксида железа, наночастиц оксида меди (II) на поверхности микросфер диоксида кремния, то есть формирование поликомпонентных систем $\text{SiO}_2 - \text{CuO}$, $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_3\text{O}_4$ и $\text{SiO}_2 - \text{MnO}_2$.

2. Экспериментальная часть и обсуждение результатов

На первом этапе синтезировали микросферы SiO_2 . Для этого смешивали 25 мл этанола (C_2H_5OH), 10 мл тетраэтоксисилана (ТЭОС, $(C_2H_5O)_4Si$), 50 мл 12,5% раствора аммиака (NH_4OH). Полученный раствор перемешивали на магнитной мешалке в течение 24 часов, центрифугировали при 3000 об/мин в течение 5 мин и декантировали. Полученный диоксид кремния использовали для синтеза поликомпонентных систем, представляющих из себя наноразмерные композиты $SiO_2 - CuO$, $SiO_2 - Fe_3O_4$ и $SiO_2 - MnO_2$.

Синтез $SiO_2 - CuO$ проводили золь-гель методом. На первом этапе смешивали 1 г SiO_2 и 3,99 г ацетата меди (II) ($Cu(CH_3COOH)_2$). Полученный раствор нагревали до температуры $95^\circ C$ и медленно добавляли 40% раствор KOH . Полученный образец декантировали, промывали дистиллированной водой.

Синтез $SiO_2 - Fe_3O_4$ заключался в следующем. Микросферы диоксида кремния растворяли в 25 мл дистиллированной воды, добавляли 0,86 г сульфата железа (II) ($FeSO_4$) и 2,35 г хлорида железа (III) ($FeCl_3$). Полученный раствор нагревали до $80^\circ C$ при постоянном перемешивании и добавляли 25% раствор аммиака (NH_4OH). Полученную чёрную суспензию отмывали дистиллированной водой до достижения значения pH в пределах 7,5–8, центрифугировали при 5000 об/мин в течение 5 минут.

Синтез поликомпонентной системы $SiO_2 - MnO_2$ состоял из двух этапов. На первом этапе синтеза в 200 мл дистиллированной воды растворяли 1,6387 г метионина ($C_5H_{11}NO_2S$) и 1 г SiO_2 при постоянном перемешивании. На втором этапе готовили 200 мл 0,01 М раствора перманганата калия ($KMnO_4$), смешивали растворы.

Исследование морфологии поверхности полученных образцов поликомпонентных систем $SiO_2 - CuO$, $SiO_2 - Fe_3O_4$ и $SiO_2 - MnO_2$ проводили на сканирующем электронном микроскопе MIRA-LMH с системой определения элементного состава AZtecEnergy Standart / X-max 20 (standard) фирмы Tescan.

Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия наночастиц оксидов с поверхностью микросфер диоксида кремния осуществили в программе QChem с использованием молекулярного редактора IQmol. Расчет осуществлялся на оборудовании центра обработки данных (Schneider Electric) ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет».

На первом этапе проводили исследование полученных образцов поликомпонентных систем $\text{SiO}_2\text{--CuO}$, $\text{SiO}_2\text{--Fe}_3\text{O}_4$ и $\text{SiO}_2\text{--MnO}_2$ методом сканирующей электронной микроскопии на сканирующем электронном микроскопе MIRA-LMN (см. рис. 1-3).

Рис. 1. СЭМ-микрофотография образца $\text{SiO}_2\text{--CuO}$: а – масштабная метка 5 мкм, б – масштабная метка 1 мкм.

Рис. 2. СЭМ-микрофотография образца $\text{SiO}_2\text{--Fe}_3\text{O}_4$: а – масштабная метка 5 мкм, б – масштабная метка 1 мкм.

Рис. 3. СЭМ-микрофотография образца $\text{SiO}_2 - \text{MnO}_2$: а – масштабная метка 5 мкм, б – масштабная метка 1 мкм.

Анализ полученных данных показал, что во всех образцах поликомпонентных систем произошло формирование агрегатов различной формы и размеров. Диаметр полученных микросфер SiO_2 составил от 0,379 мкм до 1,18 мкм. Размер наночастиц CuO составил 40 ± 25 нм, наночастиц Fe_3O_4 – 45 ± 15 нм, наночастиц MnO_2 – 30 ± 15 нм. Все полученные наночастицы имеют сферическую форму. Анализ полученных СЭМ-микрофотографий показал, что формирование металлоксидного слоя в образце $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_3\text{O}_4$ произошло наиболее равномерно среди всех представленных образцов.

На следующем этапе исследований проводили квантово-химическое моделирование элементарного акта взаимодействия между поверхностью микросфер SiO_2 и наночастицами металлоксидного слоя. В качестве элементарного акта рассматривали образование химической связи между тетраэдром $[\text{SiO}_4]^{4-}$ и элементарной структурной единицей наночастиц CuO , MnO_2 , Fe_3O_4 . Использование тетраэдра $[\text{SiO}_4]^{4-}$ связано с тем, что согласно литературным данным все полиморфные модификации диоксида кремния в качестве основных структурных единиц содержат тетраэдры $[\text{SiO}_4]^{4-}$, в вершинах которых находятся двухвалентные атомы кислорода, а в центре четырехвалентные атомы Si [9]. Для упрощения расчетов свободные связи гидрировали.

В результате квантово-химического моделирования получены распределения электронной и спиновой плотности (расчет: Energy, метод: HF, базис: 6-21G, convergence – 5, силовое поле – Chemical), представленные на рис. 4-6 [10].

Рис. 4. Распределение электронной плотности (а), распределение спиновой плотности (б), градиент распределения электронной плотности (в) модели взаимодействия поверхности микросфер SiO_2 с наночастицами MnO_2 .

Рис. 5. Распределение электронной плотности (а), распределение спиновой плотности (б), градиент распределения электронной плотности (в) модели взаимодействия поверхности микросфер SiO_2 с наночастицами Fe_3O_4 .

Рис. 6. Распределение электронной плотности (а), распределение спиновой плотности (б), градиент распределения электронной плотности (в) модели взаимодействия поверхности микросфер SiO_2 с наночастицами CuO .

На следующем этапе квантово-химического моделирования проводили исследование стабильности систем моделей взаимодействия $\text{SiO}_2 - \text{CuO}$, $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_3\text{O}_4$ и $\text{SiO}_2 - \text{MnO}_2$. Для этого проводили моделирование и расчёт энергии высшей заселённой молекулярной орбитали (HOMO) и низшей свободной молекулярной орбитали (LUMO) для каждой модели взаимодействия (расчет: Energy, метод: HF, базис: 3-21G, convergence – 5, силовое поле – Chemical). Полученные данные представлены на рис. 4-6.

Согласно литературным данным [11, 12] HOMO и LUMO – это главные орбитали, описывающие химическую стабильность системы. Высшая заселённая молекулярная орбиталь (HOMO) напрямую связана с понятием «потенциал ионизации», LUMO – с понятием «электронное сродство». Энергетическая разница между орбиталями LUMO и HOMO называется энергетическим зазором ΔE .

На основании полученных результатов моделирования было рассчитано значение абсолютной химической жесткости η . Абсолютная химическая жесткость характеризует стабильность системы, препятствующую ее изменению. Согласно литературным данным [13] абсолютная химическая жесткость рассчитывается по формуле (1):

$$\eta = \frac{1}{2} \times (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}), \quad (1)$$

где E_{LUMO} – энергия LUMO, эВ; E_{HOMO} – энергия HOMO, эВ.

Результаты моделирования представлены на рис. 7-9. Значения ΔE и η для каждой модели взаимодействия представлены в Таблице 1.

Рис. 7. Результаты моделирования молекулярных орбиталей модели взаимодействия поверхности микросфер SiO_2 с наночастицами MnO_2 : а – LUMO, б – HOMO.

Рис.8. Результаты моделирования молекулярных орбиталей модели взаимодействия поверхности микросфер SiO_2 с наночастицами Fe_3O_4 : а – LUMO, б – HOMO.

Рис. 9. Результаты моделирования молекулярных орбиталей модели взаимодействия поверхности микросфер SiO_2 с наночастицами CuO : а – LUMO, б – HOMO.

Таблица 1. Результаты исследования стабильности.

Параметр	Вид нанокompозита		
	$SiO_2 - MnO_2$	$SiO_2 - Fe_3O_4$	$SiO_2 - CuO$
E_{LUMO} , эВ	0,049	0,100	0,049
E_{HOMO} , эВ	-0,204	-0,244	-0,229
ΔE , эВ	0,253	0,344	0,278
η , эВ	0,1265	0,1720	0,1390

На основании полученных данных можно сделать вывод о том, что система $SiO_2 - Fe_3O_4$ является наиболее стабильной из всех представленных.

Полная энергия рассматриваемых поликомпонентных систем составила: (расчет: Energy, метод: HF, базис: 3-21G, convergence – 5, силовое поле – Chemical): $E(SiO_2 - MnO_2) = -1959,35$ ккал/моль, $E(SiO_2 - Fe_3O_4) = -2098,15$ ккал/моль, $E(SiO_2 - CuO) = -1998,97$ ккал/моль. В результате установлено, что наименьшей энергией и, соответственно, наиболее энергетически выгодным является взаимодействие наночастиц Fe_3O_4 с поверхностью микросфер SiO_2 .

3. Заключение

По результатам данных квантово-химического моделирования и практической работы, можно говорить о формировании металлоксидного слоя, состоящего из наночастиц диоксида марганца (IV), смешанного оксида железа или наночастиц оксида меди (II), на поверхности микросфер SiO_2 , то есть о формировании поликомпонентных систем $SiO_2 - Fe_3O_4$, $SiO_2 - MnO_2$ и $SiO_2 - CuO$. Данные сканирующей электронной микроскопии свидетельствуют о наиболее равномерном формировании металлоксидного слоя в образце $SiO_2 - Fe_3O_4$. По результатам квантово-химического моделирования установлено, что наиболее энергетически выгодным является также взаимодействие наночастиц Fe_3O_4 с поверхностью микросфер SiO_2 . Полученные данные внесут определенный вклад в понимание механизма формирования поликомпонентных систем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (проект СП-1191.2019.4).

Библиографический список:

1. **Wang, Z.** One-step accurate synthesis of shell controllable $CoFe_2O_4$ hollow microspheres as high-performance electrode materials in supercapacitor / Z. Wang, W. Jia, M. Jiang, et al. // Nano Research. – 2016. – V. 9. – I. 7. – P. 2026-2033. DOI: 10.1007/s12274-016-1093-y.
2. **Magdalane, C.M.** Photocatalytic activity of binary metal oxide nanocomposites of

- CeO₂ / CdO* nanospheres: Investigation of optical and antimicrobial activity / C.M. Magdalane, K. Kaviyarasu, J.J. Vijaya, et al. // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. – 2016. – V. 163. – P. 77-86. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2016.08.013.
3. **Deng, Y.** Superparamagnetic high-magnetization microspheres with an *Fe₃O₄ @ SiO₂* core and perpendicularly aligned mesoporous *SiO₂* shell for removal of microcystins / Y. Deng, D. Qi, C. Deng, et al. // Journal of the American Chemical Society. – 2008. – V. 130. – I. 1. – P. 28-29. DOI: 10.1021/ja0777584.
4. **Zhang, Z.Q.** *MnO₂* density – dependent supercapacitive characteristics of *SiO₂ / MnO₂* core-shell nanostructure / Z.Q. Zhang, C. Chen, C.C. Ma, et al. // International Journal of Electrochemical Science. – 2016. – V. 11. – I. 7. – P. 6138-6148. DOI: 10.20964/2016.07.54.
5. **Peng, T.** Facile synthesis of *SiO₂ @ MnO₂* nanocomposites and their applications on platforms for sensitively sensing antibiotics and glutathione / T. Peng, X. Dai, Y. Zhang, et al. // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2020. – V. 304. – Art. № 127314. – 23 p. DOI: 10.1016/j.snb.2019.127314
6. **Wu, X.** Fluorescence sensor for facile and visual detection of organophosphorus pesticides using AIE fluorogens-*SiO₂–MnO₂* sandwich nanocomposites / X. Wu, P. Wang, S. Hou, et al. // Talanta. – 2019. – V. 198. – P. 8-14. DOI: 10.1016/j.talanta.2019.01.082.
7. **Amini, Z.** *Cu–S* codoping *TiO₂ / SiO₂* and *TiO₂ / SiO₂ / Fe₃O₄* core-shell nanocomposites as a novel purple LED illumination active photocatalyst for degradation of diclofenac: the effect of different scavenger agents and optimization. / Z. Amini, M.H. Givianrad, S.W. Husain, et al. // Chemical Engineering Communications. – 2019. – P. 1-18. DOI: 10.1080/00986445.2019.1660652.
8. **Khan, L.U.** Red-emitting magnetic nanocomposites assembled from *Ag* – decorated *Fe₃O₄–SiO₂* and *Y₂O₃:Eu³⁺* *Y₂O₃:Eu³⁺* impact of iron oxide/silver nanoparticles on *Eu³⁺* emission / L.U. Khan, F.M.L. Zambon, J.L. Santos, et al. // Chemistry Select. – 2000. – V. 3. – I. 4. – P. 1157-1167. DOI: 10.1002/slct.201702478.
9. **Офицеров, Е.Н.** Кремний в биосфере / Е.Н. Офицеров // Химия и жизнь. – 2002. – № 7. – С. 32-35.
10. **Блинов, А.В.** Компьютерное квантово-химическое моделирование полимерной стабилизации наночастиц серебра / А.В. Блинов, М.А. Ясная, А.А. Блинова и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 414-421. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.414.
11. **Seidy, N.** Structural properties, natural bond orbital, theory functional calculations (DFT), and energies for the α – halorganic compounds / N. Seidy, S. Ghamamy // Current World Environment. – 2012. – V. 7. – I. 2. – P. 221-226. DOI: 10.12944/CWE.7.2.05.
12. **Ghamami, S.** Density functional theory studies of structural properties and natural bond orbital for a new silver halo compound / S Ghamami, A. Lashgari // Open Access Library Journal. – 2014. – V. 1. – № 3. – P. 1-6. DOI: 10.4236/oalib.1100422.
13. **Bader, R.F.W.** Atoms in molecules: a quantum theory / R.F.W. Bader. – Oxford: Clarendon Press, 1994. – 458 p.

References:

1. **Wang, Z.** One-step accurate synthesis of shell controllable *CoFe₂O₄* hollow microspheres

- as high-performance electrode materials in supercapacitor / Z. Wang, W. Jia, M. Jiang, et al. // Nano Research. – 2016. – V. 9. – I. 7. – P. 2026-2033. DOI: 10.1007/s12274-016-1093-y.
2. **Magdalane, C.M.** Photocatalytic activity of binary metal oxide nanocomposites of CeO_2 / CdO nanospheres: Investigation of optical and antimicrobial activity / C.M. Magdalane, K. Kaviyarasu, J.J. Vijaya, et al. // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. – 2016. – V. 163. – P. 77-86. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2016.08.013.
3. **Deng, Y.** Superparamagnetic high-magnetization microspheres with an Fe_3O_4 @ SiO_2 core and perpendicularly aligned mesoporous SiO_2 shell for removal of microcystins / Y. Deng, D. Qi, C. Deng, et al. // Journal of the American Chemical Society. – 2008. – V. 130. – I. 1. – P. 28-29. DOI: 10.1021/ja0777584.
4. **Zhang, Z.Q.** MnO_2 density – dependent supercapacitive characteristics of SiO_2 / MnO_2 core-shell nanostructure / Z.Q. Zhang, C. Chen, C.C. Ma, et al. // International Journal of Electrochemical Science. – 2016. – V. 11. – I. 7. – P. 6138-6148. DOI: 10.20964/2016.07.54.
5. **Peng, T.** Facile synthesis of SiO_2 @ MnO_2 nanocomposites and their applications on platforms for sensitively sensing antibiotics and glutathione / T. Peng, X. Dai, Y. Zhang, et al. // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2020. – V. 304. – Art. № 127314. – 23 p. DOI: 10.1016/j.snb.2019.127314
6. **Wu, X.** Fluorescence sensor for facile and visual detection of organophosphorus pesticides using AIE fluorogens- SiO_2 - MnO_2 sandwich nanocomposites / X. Wu, P. Wang, S. Hou, et al. // Talanta. – 2019. – V. 198. – P. 8-14. DOI: 10.1016/j.talanta.2019.01.082.
7. **Amini, Z.** $Cu-S$ codoping TiO_2 / SiO_2 and TiO_2 / SiO_2 / Fe_3O_4 core-shell nanocomposites as a novel purple LED illumination active photocatalyst for degradation of diclofenac: the effect of different scavenger agents and optimization. / Z. Amini, M.H. Givianrad, S.W. Husain, et al. // Chemical Engineering Communications. – 2019. – P. 1-18. DOI: 10.1080/00986445.2019.1660652.
8. **Khan, L.U.** Red-emitting magnetic nanocomposites assembled from Ag – decorated Fe_3O_4 – SiO_2 and $Y_2O_3:Eu^{3+}$ / $Y_2O_3:Eu^{3+}$ impact of iron oxide/silver nanoparticles on Eu^{3+} emission / L.U. Khan, F.M.L. Zambon, J.L. Santos, et al. // Chemistry Select. – 2000. – V. 3. – I. 4. – P. 1157-1167. DOI: 10.1002/slct.201702478.
9. **Ofitserov, E.N.** Kremnii v biosfere [Silicon in the biosphere] / E.N. Ofitserov // Khimiya i zhizn'. – 2002. – № 7. – P. 32-35. (In Russian).
10. **Blinov, A.V.** Komp'yuternoe kvantovo-khimicheskoe modelirovanie polimernoi stabilizatsii nanochastits serebra [Computer quantum-chemical simulation of polymeric stabilization of silver nanoparticles] / A.V. Blinov, M.A. Yasnaya, A.A. Blinova, et al. // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterial. – 2019. – I. 11. – P. 414-421. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.414. (In Russian).
11. **Seidy, N.** Structural properties, natural bond orbital, theory functional calculations (DFT), and energies for the α – halorganic compounds / N. Seidy, S. Ghammamy // Current World Environment. – 2012. – V. 7. – I. 2. – P. 221-226. DOI: 10.12944/CWE.7.2.05.
12. **Ghamami, S.** Density functional theory studies of structural properties and natural bond orbital for a new silver halo compound / S Ghamami, A. Lashgari // Open Access Library Journal. – 2014. – V. 1. – № 3. – P. 1-6. DOI: 10.4236/oalib.1100422.
13. **Bader, R.F.W.** Atoms in molecules: a quantum theory / R.F.W. Bader. – Oxford: Clarendon Press, 1994. – 458 p.

COMPUTER QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION OF MULTICOMPONENT
 SiO_2 - Me_xO_y SYSTEMS

A.A. Gvozdenko, A.V. Blinov, M.A. Yasnaya, A.B. Golik, V.V. Raffa, V.N. Kramarenko,
D.G. Maglakelidze, I.M. Shevchenko

North-Caucasian Federal University, Stavropol, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.394

Abstract: For the first time, in this work, the possibility of forming multicomponent $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_3\text{O}_4$, $\text{SiO}_2 - \text{MnO}_2$ and $\text{SiO}_2 - \text{CuO}$ systems by adsorption of a metal oxide layer consisting of nanoparticles of manganese (IV) dioxide, mixed iron oxide or nanoparticles of copper (II) oxide on the surface of SiO_2 microspheres has been shown by means of a computer quantum-chemical simulation. According to the results of the scanning electron microscopy, it was found that formation of a metal oxide layer in the $\text{SiO}_2 - \text{Fe}_3\text{O}_4$ sample occurred most uniformly among all the presented samples of multicomponent systems. Within the framework of quantum-chemical simulation, it was found that the most energetically favorable and stable was the interaction of SiO_2 with Fe_3O_4 nanoparticles.

Keywords: nanocomposites, multicomponent systems, quantum-chemical simulation, sol-gel method.

Гвозденко Алексей Алексеевич – студент 3 курса кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Блинов Андрей Владимирович – старший преподаватель кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Ясная Мария Анатольевна – к.х.н., доцент кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Голык Алексей Борисович – студент 3 курса кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Раффа Владислав Викторович – студент 2 курса кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Крамаренко Василий Николаевич – студент 3 курса кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Маглакелидзе Давид Гурабиевич – студент 1 курса кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Шевченко Ирина Михайловна – к.т.н., доцент кафедры электроники и нанотехнологий Инженерного института ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Alexey A. Gvozdenko – 3rd year student of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

Andrey. V. Blinov – Senior Lecturer of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

Mariya. A. Yasnaya – Ph. D., Assistant professor of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

Alexey B. Golik – 3rd year student of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

Vladislav V. Raffa – 2nd year student of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

Vasiliy N. Kramarenko – 3rd year student of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

David G. Maglakelidze – 1st year student of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

Irina. M. Shevchenko – Ph. D., Assistant professor of the Department of Electronics and Nanotechnology of the Engineering Institute, North Caucasus Federal University

Поступила в редакцию/received: 01.08.2020; после рецензирования/revised: 16.08.2020; принята/accepted 01.09.2020.