



Рисунок 1 – Будова адсорбційних комплексів вольфрамат-іона на поверхні електрода

Таблиця 1 – Величини атомних зарядів Q та порядків міжатомних зв'язків  $V_{ij}$  ЕАЧ  $\{Li_n^+[WO_4]^{2-}\}^{(n-2)+}$  в присутності КМП  $C_{26}O_{20}$  (вибіркові дані)

Велич и-на	Атом, зв'язок	$WO_4^{2-}$	$\{Li_n^+[WO_4]^{2-}\}^{(n-2)+}$			
			n			
			1	2	3	4
Q	W	0,267	0,435	0,646	0,859	1,003
	O <sub>(1)</sub>	-0,600	-0,606	-0,548	-0,616	0,574
	O <sub>(2)</sub>	-0,537	-0,465	-0,498	-0,420	-0,519
	Li	-	0,662	0,685	0,770	0,790
$V_{ij}$	W-O <sub>(1)</sub>	1,509	1,058	1,123	0,916	1,057
	W-O <sub>(2)</sub>	1,764	1,690	1,322	1,790	1,066
	Li-O	-	0,448	0,275	0,569	0,513

1. Догондзе Р.Р., Чизмаджев Ю.А. Кинетика некоторых окислительно-восстановительных реакций на полупроводниках // Докл. АН СССР. – 1963. – Т.150, №2. – С. 333–336.

2. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>

3. Соловйов В.В., Черненко Л.О. Моделювання спільного впливу поверхні електрода та катіонного і електричного полів на процеси електровідновлення вольфрамат – іона // Вісник ХНУ. – 2005. – №648. – С. 210–213.

4. Соловйов В.В., Черненко Л.О. Моделювання поверхні твердого тіла в рамках кластерного наближення // Фізика і хімія твердого тіла. – 2004. т.5, №3, – С. 488–492/

УДК 544.476.128.12

## КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ АДСОРБЦІЇ РАДИКАЛІВ НА ПОВЕРХНІ ДИСПЕРСНОГО КРЕМНЕЗЕМУ

Курсант Водяницький О.О.

(Науковий керівник к.х.н., доцент Кукуєва В.В.)

Академія пожежної безпеки ім. Героїв Чорнобилья  
вул. Онопрієнко, 8, Черкаси, 18034, kukueva@yahoo.com

Хімічна адсорбція супроводжується утворенням на поверхні твердого тіла поверхневих хімічних сполук. Міцність хемосорбційного зв'язку, як і звичайних хімічних зв'язків, в об'ємних сполуках, може коливатися у вельми широких межах. Природа хемосорбційного зв'язку у принципі та ж, що і в об'ємних сполуках, проте специфіка поверхні може істотно вплинути на характер зв'язку і розподіл електронів в атомах, що взаємодіють. Характер хімічної адсорбції визначається взаємним переносом електронів між адсорбованою речовиною і адсорбентом, тобто електронною взаємодією адсорбованих молекул і твердого тіла.

З метою дослідження вогнегасної дії галогенопохідних вуглеводнів, які, згідно літературних джерел [1-2] можуть бути альтернативою забороненим хладонам, а також для пошуку можливості пролонгування каталітичної дії, були проведені квантово-хімічні розрахунки шляхів їх термічної деструкції. Розрахунки виконувались неемпіричним методом ССП МО ЛКАО за програмою Gamess [3]. При оптимізації геометрії молекул використовували градієнтну методику і базисний набір 6-31 G\*. Величини енергії розриву зв'язку, наведені в табл. 1, є різницею енергій вихідних і кінцевих продуктів у їх рівноважних конфігураціях.