

ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ЦИРКОНИЙ (IV) ДИОКСИДА В ФОТОКАТАЛИЗЕ

Быканова В.В., Козуб П.А., Булавин В.И., Козуб С.Н.

Национальный технический университет

“Харьковский политехнический институт”, г. Харьков

Благодаря комбинации уникальных механических и электрических свойств цирконий (IV) диоксид находит широкое применение в производстве структурной и износостойкой керамики, формовочных матриц, синтетических драгоценных камней, стекол, различных ювелирных изделий, твердотельных топливных элементов, кислородных сенсоров, а также фильтров датчиков и резонаторов для изготовления мобильных телефонов. Особый интерес представляет собой применение чистого ZrO_2 в качестве фотокатализатора или же создание нанесенных фотокатализаторов на его основе.

На сегодняшний день наиболее распространенным фотокатализатором является титан (IV) диоксид. Однако основной проблемой его использования является слабая активность в видимой области спектра, что приводит к сравнительно небольшому квантовому выходу реакций, неселективному характеру их протекания и образованию побочных продуктов. Поэтому актуальной проблемой является разработка составов и получение таких фотокаталитических систем, которые будут обладать высокой фоточувствительностью, достаточно высокой химической стабильностью, развитой удельной, химически активной поверхностью. Однако обзор научно-технической и патентной литературы показал, что для ZrO_2 отсутствуют упорядоченные данные о фотофизических свойствах. Потому анализ имеющихся данных представляется важной задачей.

Согласно расчетным данным по методу функционала электронной плотности, ширина запрещенной зоны чистого ZrO_2 составляет $E_g = 3,3-4,1$ eV. Согласно же экспериментальным данным, ширина запрещенной зоны (E_g) ZrO_2 составляет 5–6 eV. Это свидетельствует о том, что ZrO_2 является хорошим изолятором, в котором ионная проводимость практически отсутствует, и для формирования кислородных вакансий нужна высокая энергия. Однако, несмотря на столь противоречивые данные, значения E_g указывают на возможность применения ZrO_2 в качестве фотокатализатора. Такой же вывод можно сделать после анализа положений квазиуровней Ферми электронов и дырок, что также свидетельствует о перспективности проведения дальнейших исследований в выбранном направлении.