

//Економіка і прогнозування (укр.). – 2006. – №1. – с. 7-26.

2. Безпека банківської діяльності: Посібник для студентів вищих навчальних закладів / М.І. Зубок. – К: КНЕУ, 2002. – 114 с.

3. Безопасность информационных технологий. Методология создания систем защиты / В.В. Домарев. - К.: ООО "ТИД "ДС", 2001. - 688 с.

4. Інформаційні системи і технології в економіці: Посібник для студентів вищих навчальних закладів / За ред. В.С. Пономаренка. – Л: Видавничий центр “Академія”, 2002. – 544 с.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ АЛМАЗА ПОД ВЛИЯНИЕМ ЧАСТИЦ ВОЛЬФРАМАТСОДЕРЖАЩЕГО РАСПЛАВА**

11276

Соловьев В.В., д.х.н., проф.; Черненко Л.О., к.х.н., доц.; Глебова Л.Ю. \*, к. мед. н., доц.; Бондус С.Н., студ.

Полтавський національний технічний університет імені Юрія Кондратюка, \*ВГУЗУ «Українська медична стоматологічна академія», г. Полтава

Обнаруженная ранее [1] возможность осаждения на природные и синтетические алмазы-диэлектрики гальванических покрытий без предварительного создания проводящего слоя [1-2] свидетельствовала о возникновении проводимости алмаза, погруженного в карбонатсодержащий расплав и отсутствии проводимости, например, в борсодержащем расплаве. На основании экспериментальных данных, авторами [2] был сделан феноменологический вывод о том, что поверхностная проводимость алмаза в оксидных расплавах обусловлена протеканием окислительно-восстановительных процессов на границе раздела. Позже была предложена (на основании анализов квантовохимических расчетов) модельная схема изменения поверхностной проводимости алмаза, объясняющая возникновение проводимости поверхностного слоя диэлектрика-алмаза [3]. Однако до настоящего времени вопрос о механизме возникновения и типе поверхностной проводимости в этом случае является дискуссионным.

Вместе с тем, квантово-механической теорией элементарного акта переноса заряда через границу металл (проводник) – электролит [4] объясняется как наличие «токов обмена», так и сам механизм ред-окс реакций в гетерогенных средах. Так как сам процесс возможного перехода электронов с поверхности катода на частицу электролита наиболее вероятен при совпадении уровней энергии Ферми материала катода и частицы, нами была проведена квантовохимическая оценка этого аспекта теории [4].

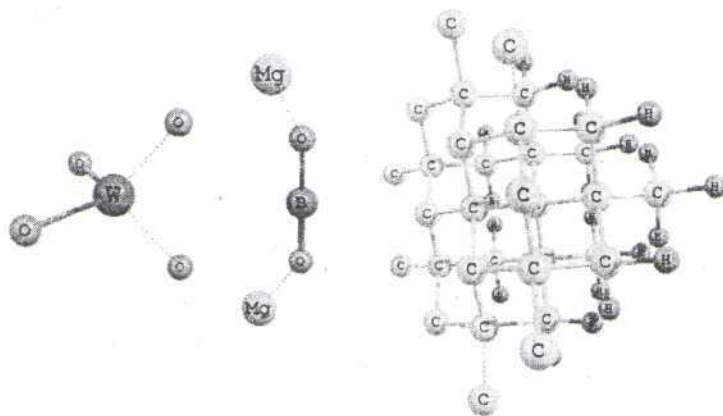


Рис.1. Строение адсорбционных комплексов иона вольфрамата на поверхности электрода в присутствии  $\text{VO}_2^-$

Расчеты проводились в программе GAMESS/FireFly [5]. В качестве объектов исследования была выбрана кластерная модель поверхности (КМП) электрода из 38 атомов углерода тетраэдрической структуры, моделирующая поверхность алмаза; в качестве структурных частиц расплава – изoelekтронные молекулы  $\text{CO}_2$  и  $\text{VO}_2^-$ , а также анион  $[\text{WO}_4]^{2-}$  в окружении 2-х катионов  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  и четырех катионов  $\text{Li}^+$  (рис.1).

Поскольку реакционную