

## AR VARU DOPĒTA TITĀNA DIOKSĪDA DFT MODELĒŠANA ANTIBAKTERIĀLO ĪPAŠĪBU NOVĒRTĒŠANAI

Elīna Neilande<sup>1</sup>, Yin-Pai Lin<sup>1</sup>, Hanna Bandarenka<sup>1,2</sup>, Anatolijs Popovs<sup>1</sup>,  
Sergejs Piskunovs<sup>1</sup> un Dmitrijs Bočarovs<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

<sup>2</sup>*Baltkrievijas Valsts informātikas un radioelektronikas universitāte*

Titāna dioksīda (TiO<sub>2</sub>) nanodaļiņas veido trīs fāzes – anatass, rutīls un brokīts, kurām visām piemīt antibakteriālās īpašības, tomēr izteiktākās tās ir anatasam. TiO<sub>2</sub> antibakteriālās īpašības var skaidrot ar tā dabu, TiO<sub>2</sub> ir pusvadītājs un efektīvs fotokatalizators. Fotokatalītisko īpašību uzlabošanai TiO<sub>2</sub> nanodaļiņas iespējams dopēt ar cēlmetāliem. Šajā pētījumā tika novērtēts, kā uzlabojas TiO<sub>2</sub> rutīla un anatasas fāžu nanodaļiņu antibakteriālās īpašības, dopējot tās ar varu. Izmantojot blīvuma funkcionāla teoriju (DFT), tika izpētīta nanodaļiņas atomārā un elektronu struktūra, novērtēta TiO<sub>2</sub> nanodaļiņu bezdefektu virsmas ķīmiskā aktivitāte, vara iekļaušanas enerģija, kā arī -OH grupas adsorbcija uz tīras TiO<sub>2</sub> virsmas. Aprēķinos iegūtie rezultāti, kas pārsvarā apraksta -OH grupas hemosorbcijas pastiprināšanos, sniedz iespēju prognozēt ar varu dopētu TiO<sub>2</sub> nanodaļiņu antibakteriālās īpašības.

Autori pateicas LZP projektam LZP-2021/1-0464 par finansiālu atbalstu pētniecībā.

## EVALUATION OF ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF Cu-DOPED TITANIUM DIOXIDE USING DFT MODELLING

Elīna Neilande<sup>1</sup>, Yin-Pai Lin<sup>1</sup>, Hanna Bandarenka<sup>1,2</sup>, Anatoli I. Popov<sup>1</sup>,  
Sergei Piskunov<sup>1</sup> and Dmitry Bocharov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

<sup>2</sup>*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics*

Titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) nanoparticles (NPs) made of its anatase, rutile, and brookite phases possess antibacterial properties, however, they are most prominent for NP of anatase structure. Antibacterial properties of TiO<sub>2</sub> can be explained by its nature as it is a semiconductor and an efficient photocatalyst. To improve photocatalytic and antibacterial properties of TiO<sub>2</sub> NP it can be doped with noble metal atoms. In this study, we estimated an improvement of antibacterial properties of Cu-doped TiO<sub>2</sub> NPS of anatase and rutile phase. Atomic and electronic structure of NP under study, surface chemical activity of pristine TiO<sub>2</sub> NP and Cu-doped TiO<sub>2</sub> NP, the energy of Cu incorporation, as well as adsorption of -OH group on TiO<sub>2</sub> NP surface are studied by means of density functional theory (DFT). Results obtained from our calculations, mainly an increase of -OH group chemisorption, allow us to predict the enhancement of antibacterial properties of Cu-doped TiO<sub>2</sub> NPs.

The financial support of project LZP-2021/1-0464 is greatly acknowledged.