

Квантово-химическое моделирование активации и диссоциации кислорода на кластерах платина-медь

Бандура Л.С., Никитина Н.А., Пичугина Д.А.
Химический факультет,
Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова
e-mail: monbar-95@yandex.ru

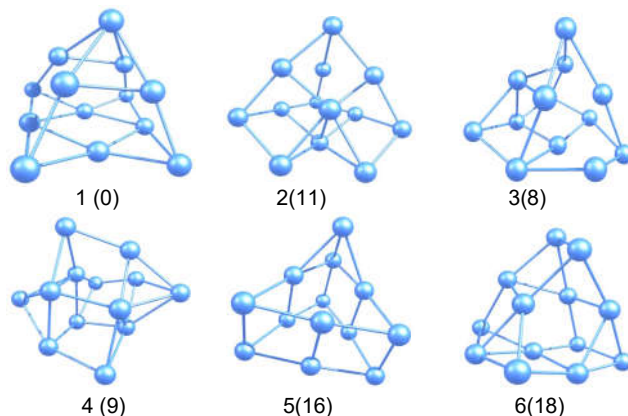
Цель: сравнение методами квантовой химии активации и диссоциации кислорода, протекающих на двух разных каталитических системах: платина и платина-медь.

Оптимизированные структуры кластеров Pt₁₃

Актуальность

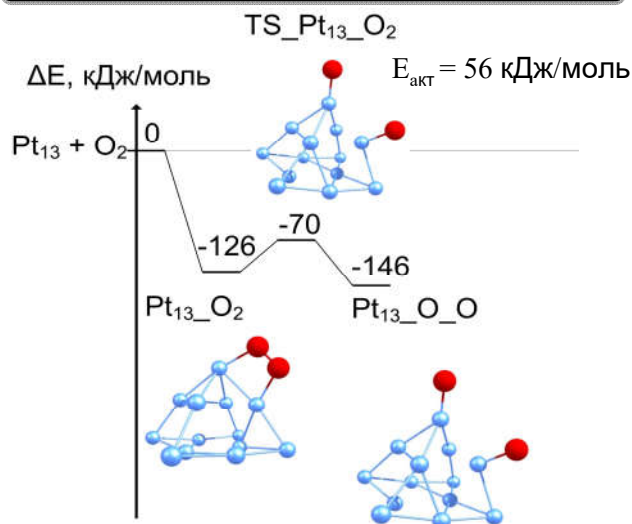
Очистка воздуха от монооксида углерода, являющимся одним из компонентов выхлопных газов является одной из самых актуальных задач. Это достигается использованием катализаторов в выхлопных системах автомобилей, способствующих дожиганию CO до CO₂. Катализаторы на основе благородных металлов, например, платины являются традиционными в окислении CO.

Введение другого металла способно увеличить каталитическую способность платины и уменьшить стоимость катализатора.

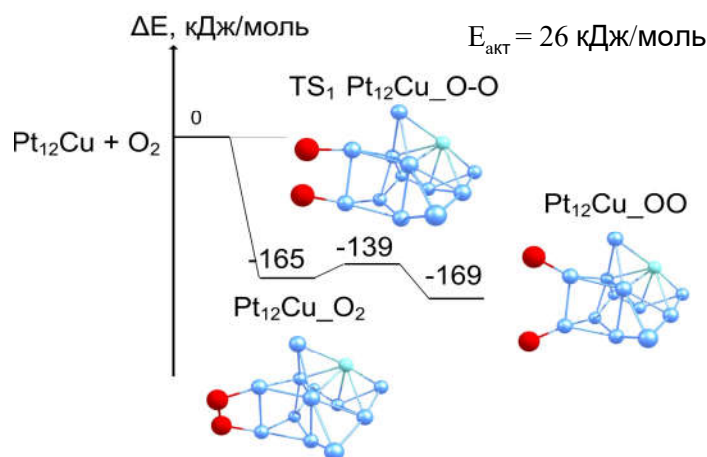


В скобках указаны относительные энергии изомеров в кДж/моль.

Энергетическая диаграмма реакции диссоциации кислорода на кластере Pt₁₃



Энергетическая диаграмма реакции диссоциации кислорода на кластере Pt₁₂Cu



Основные результаты и выводы

1. Наиболее устойчивой структурой кластера Pt₁₂Cu является та, в которой атом меди располагается на ребре. Особых изменений в геометрии кластера не происходит при его допировании.

2. При взаимодействии кислорода с кластером платины образуются супероксидные и пероксидные комплексы, а с биметаллическим кластером платина-медь - только пероксидные.

3. При рассмотрении диссоциации кислорода были найдены переходное состояние и энергия активации на двух модельных каталитических системах. Введение в кластер Pt₁₃ атома меди снижает энергию активации в реакции диссоциации кислорода. Наиболее выгодным положением для адсорбции молекулы кислорода на биметаллическом кластере является положение, которое не находится в непосредственной близости к атому меди.

4. Можно предположить, что роль меди заключается в изменении электронных свойств кластера, способствующих увеличению его реакционной способности.