

# КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ВОДОРОДА НА КЛАСТЕРЕ Pt<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>

Г.Г. Гарифзянова, Д.В. Чачков, А.Г. Шамов

*Казанский государственный технологический университет*

Современные квантово-химические методы являются важным инструментом изучения механизмов процессов на металлических катализаторах групп платиновых металлов, в частности, в реакциях гидрирования углеводородов.

С использованием различных методов функционала плотности нами были проведены расчеты геометрических параметров биметаллического нанокластера Pt<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>. Была рассмотрена зависимость структуры кластера от мультиплетного состояния.

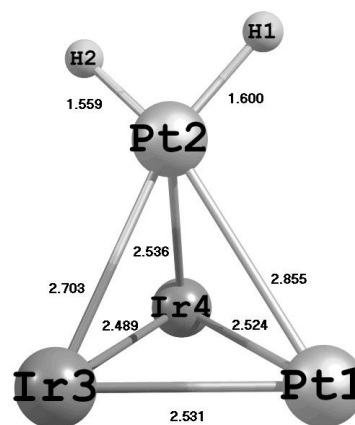


Рис. 2. Геометрические структуры кластера Pt<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>H<sub>2</sub> (метод B3LYP/LanL2DZ).

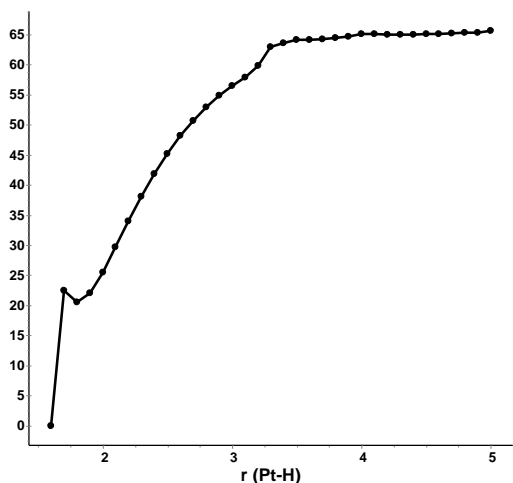


Рис. 1. Кривая изменения поверхности потенциальной энергии (ППЭ) в зависимости от длины связи Pt-H (Å).

Была изучена адсорбция молекулы водорода на ромбический кластер Pt<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub> (с мультиплетностью 1) с использованием процедуры сканирования ППЭ методом B3LYP/LanL2DZ. Сканирование по связи Pt-H приводит к более энергетически выгодной тетраэдрической структуре кластера (рис.2) при длине связи в 1.6 Å. Были исследованы различные положения атома водорода на получаемом кластере Pt<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>H<sub>2</sub>.

Расчеты выполнены с использованием ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (09-03-97013-р\_поволжье\_a).