Компьютерный дизайн биметаллических наноматериалов для катализа и других приложений

Нейман Константин1,2

1 - Департамент химии материалов и физической химии, Барселонский Университет  
2 - ICREA (Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats, Барселона, Испания

E-mail konstantin.neyman@icrea.cat

Металлические наночастицы являются ключевой компонентой многочисленных катализаторов. Присутствие в наночастицах более чем одного металла открывает широ­кие возможности варьирования и оптимизирования свойств катализаторов для конкрет­ных процессов. Однако, разнообразие структурных мотивов гетерометаллических нано­частиц делает их контроль и понимание связи с каталитической активностью серьёзной проблемой. Следует отметить, что экспериментальное установление взаимного распо­ложения разных атомов металлов уже в биметаллических наночастицах (т. н. *химический* или *атомный порядок*) представляет исключительно сложную задачу, но без детальных данных о химическом порядке на поверхности биметаллических нано­частиц понимание их каталитических свойств на атомном уровне вряд ли возможно.

Мы предложили оригинальный метод для определения *химического порядка* в би­металлических наночастицах на основе расчётов методом функционала плотности [1,2]. Наш метод применим к различным комбинациям переходных металлов друг с другом и с *s*,*p*-металлами [1-6]. Он позволяет надёжно предсказывать с атомным разрешением энергетически стабильные структуры биметаллических наночастиц, которые могут быть затем приготовлены. Мы представим результаты применения этого метода к би­металлическим наночастицам, содержащим Pd [1,2], Pt [3-5] и Ni [6]. На основе данного метода предполагается генерирование баз данных со структурами и энергиями биме­таллических наночастиц для пар металлов всей Периодической Таблицы Элементов. Простота и надёжность предложенного подхода открывает уникальные возможности для эффективного моделирования многих типов биметаллических наночастиц, содержащих тысячи атомов. Широкое использование этого метода радикально ускорит целенаправленный поиск и приготовление катализаторов и других биметаллических наноматериалов с задаными свойствами, а также принципиально улучшит понимание химических взаимодействий в гетерометаллических нанокомпозитах.

Литература:

[1] S.M. Kozlov, G. Kovács, R. Ferrando, K.M. Neyman. *How to determine accurate chemical ordering in several nanometer large bimetallic crystallites from electronic structure calculations*. Chemical Science 6 (2015) 3868

[2] G. Kovács, S.M. Kozlov, K.M. Neyman. *Versatile optimization of chemical ordering in bimetallic nanoparticles*. J. Phys. Chem. C 121 (2017) 10803

[3] G. Kovács, S.M. Kozlov, I. Matolínová, M. Vorokhta, V. Matolín, K.M. Neyman. *Revealing chemical ordering in Pt-Co nanoparticles using electronic structure calculations and X-ray photo­electron spectroscopy*. Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 28298

[4] M. Vorokhta, I. Khalakhan, M. Václavů, G. Kovács, S.M. Kozlov, P. Kúš, T. Skála, N. Tsud, J. Lavková, V. Potin, I. Matolínová, K.M. Neyman, V. Matolín. *Surface composition of magnetron sputtered Pt-Co thin film catalyst for proton exchange membrane fuel cells*. Appl. Surf. Sci. 365 (2016) 245

[5] A. Neitzel, G. Kovács, Y. Lykhach, S.M. Kozlov, N. Tsud, T. Skála, M. Vorokhta, V. Matolín, K.M. Neyman, J. Libuda. *Atomic ordering and Sn segregation in Pt-Sn nanoalloys supported on CeO2 thin films*, Top. Catal. 60 (2017) 522

[6] A. Wolfbeisser, G. Kovács, S.M. Kozlov, K. Föttinger, J. Bernardi, B. Klötzer, K.M. Neyman, G. Rupprechter. *Surface composition changes of CuNi-ZrO2 catalysts during methane decomposition*. Catal. Today 283 (2017) 134