



شیمی و مهندسی شیمی

تهران - بهمن ۱۳۹۷

مطالعه نظری جذب مولکولهای H_2 , O_2 بر روی نانوخوشه های دوفلزی
غیرمسطح $(m=2,3) Au_mPd_{5-m}$

عبدالحکیم پنی^{۱*}، علیرضا حنفی^۲، مهدی قائمی^۳، سپیده سدنی^۴

۱- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فرهنگیان، تهران

۲- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی، قائمشهر، ایران

۳- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه گلستان، گرگان

۴- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی، گرگان، ایران

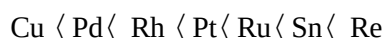
خلاصه

در این پروژه جذب مولکولهای H_2 و O_2 بر روی نانو خوشه های دوفلزی غیر مسطح Au_3Pd_2 و Au_2Pd_3 بطور نظری و با نظریه تابعیت چگالی مطالعه و بررسی شد. نتایج نشان داد که جذب این مولکولها در بعضی از ساختارها بسیار قوی ($744/44 \text{ kcal/mol}$) بوده بطوری که پیوند کوالانسی مولکولهای H_2 و O_2 شکسته شده و بصورت اتمی جذب شده اند. در سایر خوشه ها جذب ضعیف بوده ($0/02 \text{ kcal/mol}$) که در دمای معمولی عملاً جذب صورت نمی گیرد. توزیع فضایی اوربیتالهای HOMO و LUMO نشان داد که در HOMO اتمهای Au سهم کمتری و در LUMO اتمهای Au سهم بیشتری نسبت به اتمهای پالادیوم، اکسیژن و هیدروژن دارند.

کلمات کلیدی: خوشه های فلزی، انرژی برهمکنش، جذب سطحی، نظریه تابعیت چگالی، اوربیتالهای HOMO و LUMO، Au_3Pd_2 ، Au_2Pd_3

۱. مقدمه

جذب مولکولهای گازی به طور گسترده توسط محققین مختلف بر روی نانو لوله ها، نانو ذرات فلزی، غیر فلزی مانند بور نیتrideها [۱]، آنیونی، کاتیونی [۲] و آلیاژهای دو فلزی [۳] و چند فلزی مطالعه شده است. در یک نمونه از این مطالعات در دانشگاه شینخوا shinghua بر روی نانو ذره آنیونی Au_6^- جذب کربن مونو اکسید CO بر روی نانو ذره آنیونی نشان داده است که جذب در موقعیت راس هرم مربع القاعده انجام شده است. در مطالعه دیگری [۴] نشان داده که این ساختار Au_6 ، ساختار تقارنی D_{3h} دارد همچنین نتایج نشان داد که اوربیتال مولکولی LUMO این کمپلکس بعد از جذب CO در داخل ساختار مثلثی خوشه قرار گرفته است و CO که در بیرون ساختار مثلثی جذب شده است تاثیر کمی بر روی اوربیتال LUMO داشته است. بررسی الکترو اکسایش متانول و آب بر روی نانو ذرات دوفلزی PtM که در آن $M=(Pt, Sn, Ru, Rh, Pb, Cu)$ جهت افزایش کارایی کاتالیستی این واکنش انجام شده است [۵]. در این مطالعه به طور شگفت انگیزی متوجه شده اند که انرژی پیوندی هنگامی که مولکول آب یا متانول بر موقعیت اتم Sn جذب می شود بسیار ضعیف است. همچنین فعالیت سینتیکی شکستن مولکول آب به تر تیب زیر افزایش نشان داده است:



¹ Corresponding author E-mail: hakimpangh@yahoo.com