

Секция «Преподавание русского языка и фундаментальных дисциплин иностранным учащимся»

Квантово-химическое моделирование адсорбции фенилэтилового спирта на кластере Au₂₀

Научный руководитель – Пичугина Дарья Александровна

Цзян Цэ

Студент (магистр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Кафедра физической химии, Москва, Россия

E-mail: iloveliyijing@gmail.com

Альдегиды и кетоны широко используются в качестве растворителей, сырья для синтеза полимеров, в парфюмерии и лекарственных препаратах. Каталитическое окисление спиртов кислородом представляет перспективный и экологический способ получения альдегидов и кетонов без химических растворителей [1]. Высокую каталитическую активность имеют наночастицы золота. В докладе представлены результаты квантово-химического моделирования структурных и зарядовых эффектов Au₂₀ и Au₂₀⁺ в адсорбции ароматического спирта. Кластер является хорошей моделью, так как содержит атомы с разным координационным числом (атомы на вершине, на ребре, на грани). Расчёт проводился методом DFT PBE с применением релятивистского гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта в полноэлектронном базисе в программе Природа.

Рассмотрено два типа координации спирта на Au₂₀: координация ОН-группой и координация C₆H₅-фрагментом. Мы вычисляли изменение энергии Гиббса при 298К. Наиболее выгодная конфигурация показана на рисунке.

Источники и литература

- 1) A. Abad, A. Corma, H. Garcia Catalyst Parameters Determining Activity and Selectivity of Supported Gold Nanoparticles for the Aerobic Oxidation of Alcohols: The Molecular Reaction Mechanism. Chemistry. 2008;14(1):212-22.

Иллюстрации

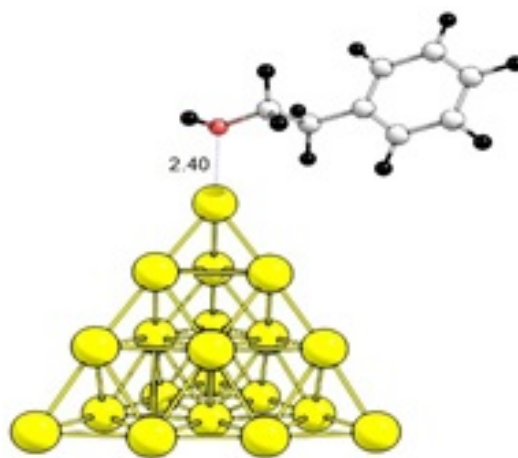


Рис. 1. Структура