

## ВЛИЯНИЕ ЛИГАНДА НА МЕХАНИЗМ ОКИСЛЕНИЯ СО НА ЦИКЛИЧЕСКИХ ТИОЛАТНЫХ КОМПЛЕКСАХ ЗОЛОТА

Никитина Н.А., Пичугина Д.А., Кузьменко Н.Е.

*Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3  
e-mail: nikitina1719@gmail.com*

Монооксид углерода является известным газом-загрязнителем. Разработка катализатора окисления СО в СО<sub>2</sub> является важной задачей. Также реакция окисления СО считается модельной для изучения механизма гетерогенно-каталитических процессов. Фундаментально новыми катализаторами являются кластеры золота, стабилизированные лигандами (фосфины, тиолаты). Окисление СО на наночастицах золота может протекать при низких температурах. Однако механизм реакции окисления СО не установлен до конца<sup>1</sup>. Цель данной работы – установить влияние органических лигандов на механизм окисления СО.

В данной работе были рассмотрены катализаторы на основе комплексов (AuSCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, (AuSCH<sub>2</sub>CHSCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, защищенных тиолатными и дитиолатными лигандами. Метод DFT/PBE/SBKJC использовался в программе PRIRODA на суперкомпьютере МГУ им. М.В. Ломоносова<sup>2</sup>.

Согласно результатам, тиолатный комплекс (AuSCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub> является инертным по отношению к О<sub>2</sub> и СО из-за прочной связи Au-S. О<sub>2</sub> и СО слабо активируются на (AuSCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>. Замена тиолатных на дитиолатные лиганды значительно изменила структуру. Дитиолатный комплекс не плоский, связь Au-S увеличилась на 0,08 Å. Отличается и характер распределения электронной плотности вдоль Au-S. ВЗМО локализована на атомах Au и S в дитиолатном комплексе, а в тиолатном комплексе - по связи Au-S. Это указывает на увеличение активности (AuSCH<sub>2</sub>CHSCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>. О<sub>2</sub> и СО активируются в комплексе (AuSCH<sub>2</sub>CHSCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, окисление СО происходит с низкой энергией активации. Можно сделать вывод, что лиганды изменяют механизм окисления СО.

### Литература

1. Nie X., Qian H., Ge Q., Xu H., Jin R. ACS Nano, 2012, 6, 6014.
2. Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin VI., Opanasenko V. "Lomonosov": Supercomputing at Moscow State University. In Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale (Chapman & Hall/CRC Computational Science), Boca Raton, USA, CRC Press, 2013, 283.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 17-03-00962.*

*Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова*