

# УПРАВЛЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ И МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ

Чепкасов Илья Васильевич

Сколковский институт науки и технологий

В работе на основе комплекса методов молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности установлены фундаментальные закономерности управления физико-химическими свойствами биметаллических и многокомпонентных нанокатализаторов. Показано, что термическая стабильность наночастиц Pt-Pd и Cu-Au определяется разницей поверхностных энергий компонентов: при температурах выше 700 К элемент с меньшей поверхностной энергией (Pd или Au) мигрирует на поверхность, вызывая реструктуризацию исходной архитектуры (ядро-оболочка, сплав, Янус). Наиболее устойчивыми конфигурациями признаны Pt@Pd и однородный сплав Cu-Au (40–60% Cu). Впервые количественно охарактеризовано, что архитектура «ядро-оболочка» позволяет усиливать поверхностный заряд в 2–4 раза по сравнению с монометаллическими частицами, причём икосаэдрические наночастицы Pd@Pt демонстрируют на 18% больший отрицательный заряд, чем ГЦК-аналоги. Показано, что аморфные наночастицы обладают фундаментально иным распределением активных центров: ширина распределения центров d-зоны и энергий адсорбции O, H, CO, NO, OH в них существенно выше, чем в кристаллических, что приводит к нарушению классических корреляций адсорбция – центр d-зоны. Для многокомпонентных систем HEA@Pt (HEA = AgAuCuIrPdRhRu) впервые установлено, что высокоэнтропийное ядро создаёт на платиновой оболочке уникальный спектр адсорбционных центров, сглаживая различия между кристаллическим и аморфным состояниями. На примере системы Pt/азот-легированный углерод раскрыт двойной механизм влияния носителя: пиридиновые N-дефекты подавляют спекание наночастиц, выступая энергетическими ловушками, и одновременно активируют молекулярный кислород за счёт направленного переноса заряда на разрыхляющие орбитали O–O. На основе полученных данных сформулированы принципы рационального дизайна нанокатализаторов с заданным балансом активности, стабильности и селективности путём комбинированного управления архитектурой, составом, степенью структурного беспорядка и функционализацией носителя.