

Квантово-химическое моделирование газофазной адсорбции гидроксид-иона на кластерах IV-металлов Me_n ($n = 2-8$)

© Дорошенко⁺ Александр Александрович, Нечаев Игорь Владимирович
и Введенский* Александр Викторович

Кафедра физической химии. Воронежский государственный университет.

Университетская пл. 1. Воронеж, 394006. Россия.

Тел.: (473) 220-85-46. E-mail: doroshenko@chem.vsu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, кластеры IV-металлов, гидроксид-ион, хемосорбция, ИК спектры.

Аннотация

В рамках теории функционала плотности осуществлено моделирование газофазной адсорбции гидроксид-иона на малых кластерах IV-металлов. Рассчитаны энтальпия и энергия Гиббса взаимодействия адсорбата с металлическими кластерами. Выявлено сходство структурных и зарядовых состояний ОН-радикала и ОН-аниона в адсорбированном состоянии. Проведён анализ колебательных спектров адсорбционных комплексов. Установлено, что гидроксид-ион хемосорбируется на малых кластерах IV-металлов в положение *on top* или *bridge*. Показано, что при адсорбции гидроксид-иона частота валентных колебаний связи О-Н увеличивается относительно соответствующих значений в изолированном состоянии, в то время, как интенсивность колебаний значительно снижается.