

Исследование процесса каталитического разложения метана на краю графена

Кедало Е.М.^{1,2}, Полынская Ю.Г.^{1,3}, Сеница А.С.^{1,3}, Книжник А.А.^{1,3}

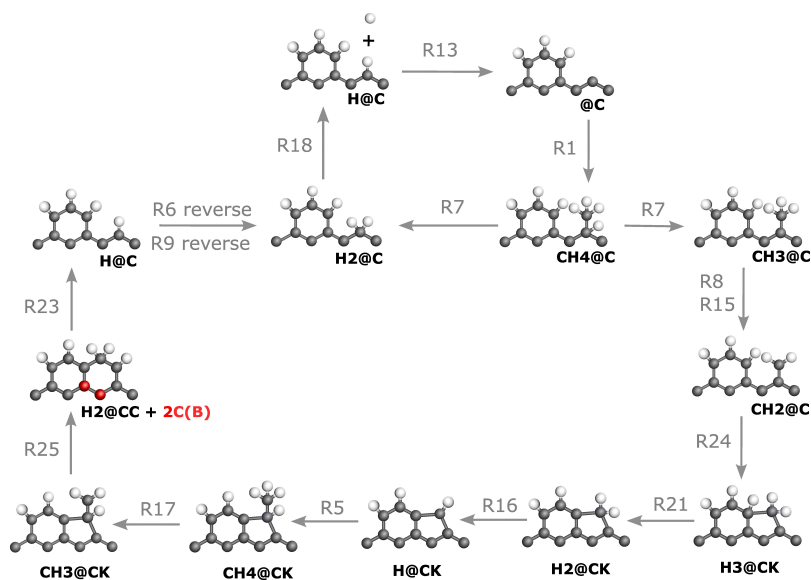
kedaloem@kintechlab.com

¹ ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия

² Московский физико-технический институт, Москва, Россия

³ НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия

В работе представлено систематическое исследование процесса диссоциации метана CH_4 на краю графена как модели углеродного катализатора. Подробно рассмотрены края графена типа зигзаг zz , реконструированный зигзаг $zz(57)$, кресло ac и реконструированное кресло $ac(677)$ и $ac(57)$. Атомистические расчеты из первых принципов (на основе теории функционала плотности DFT) были выполнены для получения параметров реакций образования активных центров на краю графена, взаимодействия молекулы метана с этими активными центрами и регенерации поверхности углеродного катализатора. Расчеты показали, что активность катализатора определяется краевыми атомами углерода с оборванными связями, образующимися в результате десорбции водорода, вызванной либо термическими флуктуациями, либо активными частицами из газовой фазы. На основе квантовохимических расчетов разработан детальный кинетический механизм, который включает относительно небольшое количество реакций (25) и верифицирован с использованием актуальных экспериментальных данных [1]. Подробно изучен процесс образования новых углеродных колец на краю графена, что позволяет с помощью разработанного механизма описать как процесс диссоциации метана, так и процесс роста края графена.



ССЫЛКИ

1. D.P. Serrano, J.Á. Botas, P. Pizarro, G. Gómez, Int. J. Hydrogen Energy. 38 (2013) 5671-5683.