**Первопринципное моделирование адсорбции и рекомбинации водорода и H3O+ на поверхностях Pt1, Pt13, Pt14 вблизи однослойного графена**

***Смирнов С.А.1, Меншарапов Р.М. 2, Спасов Д.Д. 1, Иванова Н.А. 2, Григорьев С.А.1,2,3,4***

*Студент, 2 курс бакалавриата*

*1НИУ «Московский энергетический институт», Москва, Россия*

*2НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

*3 Северо-Восточный университет, Почевструм, Южная Африка*

*4Институт элементоорганических соединений А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия
E-mail: segakarel@icloud.com*

Платиновые электрокатализаторы являются ключевым компонентом топливных элементов с протонообменной мембраной (ПОМТЭ). Однако электрокатализаторы на основе углеродной сажи имеют ряд недостатков, таких как низкая коррозионная стойкость, невысокая удельная поверхность и электропроводность. В качестве альтернативных носителей, лишенных данных недостатков, рассматриваются наноструктурированные углеродные материалы: нанотрубки, фуллерены, графен и др.

Спилловер-эффект и процессы на поверхности носителей играют значимую роль в процессах переноса заряда при протекании электрохимических реакций в ПОМТЭ. В данной работе были исследованы пути прохождения реакции адсорбции H+ и H3O+ на нанокластерах Pt1, Pt13 и Pt14, локализованных на поверхности листа графена, с различными углами H-Pt-Gr (водород-платина-плоскость графеного листа) [1]. Проведена структурная релаксация моделей, рассчитаны DOS/pDOS (Density of States/projected-Density of States) и рассчитаны значения ICOOP (Mulliken’s overlap population) с использованием функционала PBE (Perdew-Beckee-Ernzerhof) с диффузионной поправкой D3-Beckee в программных пакетах VASP и LOBSTER.

Из полученных результатов следует, что:

1. Энергия адсорбции в моделях с углом H-Pt-Gr = 90° близка к значениям, полученным из спектров термодесорбции, характерных для рекомбинации водорода на поверхности графена; энергии для моделей с углом H-Pt-Gr = 180°, напротив, схожи с энергиями реакций, не связанных с рекомбинацией [2].
2. Для моделей взаимодействия Pt13 и H3O+ энергия адсорбции с углом (H2O)H-Pt-С = 180° близка к экспериментальным данным для систем с большим количеством кислорода. Для модели присоединения с углом (H2O)H-Pt-С = 90° наблюдается энергия, характерная для модели с одним атомом кислорода [3].
3. Для моделей с углом H-Pt-Gr = 90° и с расстоянием H-Pt меньше 6 Å наблюдается химическое взаимодействие между адсорбатом и поверхностью графена, для расстояний H-Pt больше 6 Å наблюдается слабая связь с графеном. Для всех моделей с расстоянием H-Pt меньше 2 Å наблюдается сильная связь H+ с Pt.

*Работа выполнена в рамках проекта № ПНИ 2022/24–14 от 01.11.2022 «Моделирование электрохимических характеристик каталитических слоев на основе сложных углеродных наноструктур» при поддержке гранта НИУ «МЭИ» на реализацию программы научных исследований «Приоритет 2030: Технологии будущего» в 2022-2024 гг.*

**Литература**

1. Smirnov S. A. et al. Adsorption and Recombination of H+ and H3O+ on Graphene-Supported Pt1, Pt13, and Pt14 Nanoclusters: A First Principles Study // Catalysts. 2024. Vol. 14. P. 108.

2. Nechaev Y. S. et al. Methodology and results of studying the states of hydrogen in graphene structures // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2022. Vol. 30. №. 1. PP 140-145.

3. Ri G. C., Kim J. S., Yu C. J. Role of water molecules in enhancing the proton conductivity on reduced graphene oxide under high humidity // Physical Review Applied. 2018. V. 10. №. 3. P. 034018.