

Структура ядро-оболочка наночастиц карбида палладия

Усольцев Олег Андреевич

Скорынина Алина Александровна, Исаева Аишура Нураслановна, Терещенко Андрей Александрович,

Доронкина Станислава Валерьевна, Камышова Елизавета Геннадиевна

Южный федеральный университет

Бугаев Арам Лусеенович

oleg-usol@yandex.ru

Наночастицы благородных металлов находят широкое применение в катализе и электрохимии благодаря некоторым преимуществам перед массивными аналогами, главным из которых является большая удельная площадь поверхности наночастиц. Атомная и электронная структура приповерхностных областей определяют каталитические свойства. Таким образом, существует необходимость исследования атомной структуры наночастиц благородных металлов, зависимости этой структуры от условий синтеза, типа подложки и размеров частиц для получения лучших свойств катализатора.

Спектроскопия рентгеновского поглощения является одним из наиболее эффективных методов структурного анализа наноразмерных материалов, поскольку не требует наличия дальнего порядка в образцах. Экспериментальные спектры наночастиц чувствительны к изменению атомной и электронной структуры локального окружения атомов, как в объеме, так и на поверхности наночастиц. Интерпретация наблюдаемых различий и их численный анализ позволяет получить качественную и количественную информацию об атомном окружении и химическом состоянии атомов металла в наночастицах.

В данной работе исследовалась зависимость околопороговой структуры спектров рентгеновского поглощения (XANES) в ходе образования карбидной фазы наночастиц палладия средних размеров 2.6 нм. Измерения проводились в режиме *in situ*, в ходе которых образец подвергался воздействию газов ацетилена и водорода. По разностным спектрам была построена зависимость степени насыщения наночастиц углеродом от внешних условий. Теоретические спектры XANES для разных концентраций углерода палладии (рис.1.) были рассчитаны в программном пакете FDMNES и сопоставлены с экспериментальными данными.

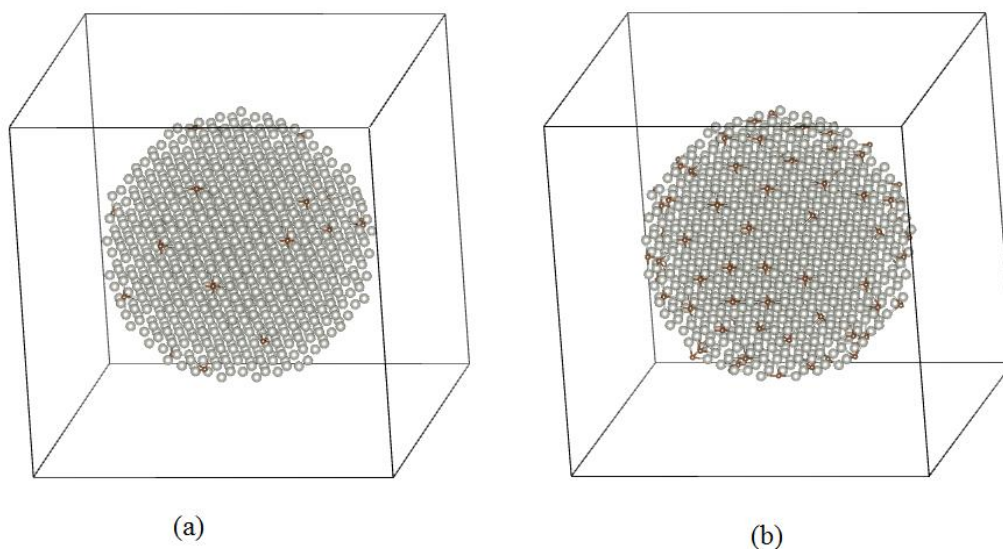


рис.1. Трехмерные атомные модели наночастиц палладия, поверхность которых модифицирована 2% (a) и 10% (b) атомов углерода

Список публикаций:

- [1] Tew M. W., Miller J. T., van Bokhoven J. A. // *Journal of Physical Chemistry C*. 2009. Т. 113. № 34. С. 15140..
- [2] Bugaev A. L., Guda A. A., Lazzarini A., Lomachenko K. A., Groppo E., Pellegrini R., Piovano A., Emerich H., Soldatov A. V., Bugaev L. A., Dmitriev V. P., van Bokhoven J. A., Lamberti C // *Catalysis Today*. 2017. Т. 283. С. 119.