

УДК 547.828.1

ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ РЕАКЦИЯ ОБРАЗОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА В ПРИСУТСТВИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ГИДРИДОВ

Бойкова Т.В., Загороднова А.С. (НИ МГУ им. Н.П. Огарёва)

Научный руководитель – доцент, кандидат химических наук, Долганов А.В.
(НИ МГУ им. Н.П. Огарёва)

Введение. Энергия играет важную роль в становлении любого общества и является ключевым аспектом его устойчивого развития [1]. В настоящие годы, основная часть энергетических потребностей населения удовлетворяется ископаемыми видами топлива, которые, в свою очередь, не только имеют ограниченные и стремительно заканчивающиеся накопления, но и способствуют выбросам больших объемов парниковых газов, неблагоприятно влияющих на экологию [2]. Очевидно, что текущая модель мирового энергопотребления неустойчива, и приоритетной задачей является развитие надежных и практических возобновляемых источников энергии, способных в полной мере удовлетворить все наши потребности [3,4].

В контексте устойчивого развития энергетики, водород рассматривается как многообещающее альтернативное безуглеродное топливо и энергоноситель. Хотя существует множество способов производства водорода, электрохимическая реакция является ключевой технологией, которая сможет в будущем обеспечить его массовое производство. На первый взгляд, эта реакция может показаться простой, но высокая энергия активации требует наличия эффективного катализатора для снижения энергетического барьера.

Основная часть. Одной из перспективных электрокаталитических систем процесса образования молекулярного водорода являются так называемые “органические гидриды”. Можно предположить, что наличие атома водорода, способного в определённых условиях проявлять свойства гидрид-иона, позволит реализовывать реакцию образования молекулярного водорода по гетерогенному механизму, по аналогии с электрокатализаторами на основе металлокомплексов.

Выводы. Впервые показан пример проявления электрокаталитической активности в реакции образования молекулярного водорода у нового класса органических безметалльных электрокатализаторов относящегося к классу “органических гидридов” - производного соединения 4,4'-дигидропиридина - 1,1'-(2,6-диметил-1,4-дигидропиридин-3,5-диил)бис(этан-1-он). Электрокаталитическая активность была изучена в присутствии уксусной и трифторуксусной кислоты. Показано, что значение рК используемой кислоты предопределяет механизм в реакции образования молекулярного водорода. На основе кинетических данных, данных изотопного обмена, а также квантово-химических расчетов показано, что образование молекулярного водорода в зависимости от природы кислоты протекает по трем различным механизмам: в случае использования уксусной кислоты процесс идет через стадию бимолекулярного элиминирования, при использовании трифторуксусной кислоты – при потенциале $E = -1.0$ В через стадию внутримолекулярного элиминирования, тогда как при $E = -1.6$ В по гетерогенному механизму.

Список использованных источников:

1. Haddad, A.Z., Cronin, S.P., Mashuta, M.S., Buchanan, R.M., Grapperhaus, C.A. Metal-Assisted Ligand-Centered Electrocatalytic Hydrogen Evolution upon Reduction of a Bis(thiosemicarbazonato)Cu(II) Complex // Inorg. Chem. – 2017. – С. 11254–11265. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b01608>

2. Karak, P., Mandal, S.K., Choudhury, J. Exploiting the NADP+/NADPH-like Hydride-Transfer Redox Cycle with Bis-Imidazolium-Embedded Heterohelicene for Electrocatalytic Hydrogen Evolution Reaction // *J. Am. Chem. Soc.* - 2023. - C. 17321-17328. <https://doi.org/10.1021/jacs.3c04737>

3. Wu, Y., Rodríguez-López, N., Villagrán, D. Hydrogen gas generation using a metal-free fluorinated porphyrin // *Chem. Sci.* - 2018. - C. 4689-4695. <https://doi.org/10.1039/C8SC00093J>

4. Rodríguez-López, N., Wu, Y., Ge, Y., Villagrán, D. Hydrogen Evolution Catalyzed by a Metal-Free Corrole: An Experimental and Theoretical Mechanistic Study // *J. Phys. Chem.* - 2020. C. 10265–10271. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10957>

Бойкова Т.В. (автор)

Подпись

Долганов А.В. (научный руководитель)

Подпись