

СИНТЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГИДРОГЕНАЗ КАК МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ – ОТ МОЛЕКУЛ ДО МАТЕРИАЛОВ

Будникова Ю.Г.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
 ФИЦ Казанский научный центр РАН, 8, Арбузова, Казань,
 yulia@iopc.ru*

Замена платины в водородных топливных элементах (ТЭ) на распространенные металлы станет решающим шагом на пути к практическому использованию H_2 в качестве альтернативного топлива. Понимание факторов, которые контролируют связывание и гетеролиз H_2 этими металлами, может сыграть ключевую роль в активации или производстве H_2 . [FeFe]- и [NiFe]-гидрогеназы легко катализируют обратимую взаимную конверсию между газообразным H_2 и протонами и электронами в мягких условиях. Установление структур активных сайтов гидрогеназ является целью химиков-синтетиков для улучшения понимания электронной структуры и их реакционной способности. Разработка биомиметических катализаторов, имитирующих действие металлоферментов, основана на клеточных структурах, которые содержат донорные атомы P, N и S, координированные с атомами металла, и образуют определенные полости. Максимальные TOF выделения водорода с лучшими Ni катализаторами достигают 15200 с^{-1} , что превышает значения большинства известных синтетических катализаторов, и сравнимы с активностью природных гидрогеназ. Сегодня созданы новые материалы для ТЭ на основе эффективных металлоорганических моделей гидрогеназ. Так, комплекс никеля (II) с диазадифосфациклооктаном $[Ni(P\text{-}Py_2N^{P\text{-}Tol}_2)_2]^{2+}$ на Vulcan XC-72(C) функционирует как катализатор в полимерном электролитном мембранном топливном элементе с катодной плотностью мощности $14,66\text{ мВт/см}^2$, самой высокой для неблагородных аналогов. Созданы мембранно-электродные блоки с катализатором из Ni-натриевого пектатного комплекса PG-NaNi с максимальными плотностью тока 59 мА/см^2 и плотностью мощности $5,9\text{ мВт/см}^2$. Эти результаты позволят разработать экологически чистые и стабильные катализаторы для ТЭ из доступного биологического сырья. В докладе проанализированы и обобщены основные тенденции развития синтетических аналогов природных гидрогеназ и материалов на их основе.

Литература

Chemistry - A Europ. J., 2014, 20(11), 3169; J.Organomet. Chem., 2015, 789, 14–21; Russ. Chem. Rev., 2017, 86(4), 298; Energy Technol. 2018, 6, 1088; Inorg. Chem. Front., 2018, 5, 780-784; Dalton trans., 2019, DOI: 10.1039/c8dt04618b