

The reaction of aluminium clusters with water : a quantum chemical investigation.

Autorzy

Jerzy Moc

Rok wydania

2015

Czasopismo

Journal of Physics-
Conference Series

Numer woluminu

574

Strony

012013/1-012013/5

DOI

10.1088/1742-
6596/574/1/012013

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The reaction of charged aluminium clusters with water in the gas phase is investigated theoretically. To this end, the doublet potential energy surface for the $Al_n^+ + H_2O \rightarrow Al_nO^+ + H_2$ reaction with $n=6$ is explored using density functional theory. The calculated reaction pathways include the initial adduct ion formation, the O-H bond activation and H_2 elimination steps, and are consistent with the recent experimental report (Ref.2). The results of the current quantum-chemical study are relevant to the issues of catalytic role of the main group metal clusters and H_2 generation.

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/574/1/012013>

Strona internetowa wydawcy

<https://iopublishing.org/>