

Т а б л и ц а 4

Коэффициенты распределения вода—*n*-октанол ($lg b_i$) для карбоксилатных комплексов

Частица	$[M(\text{COO})]^+$	$[M(\text{CH}_3\text{COO})]^+$	$[M(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO})]^+$
Ni^{2+}	-0.790	-0.370	0.0704
Cu^{2+}	-0.783	-0.420	0.0792
Zn^{2+}	-0.829	-0.466	0.0334

ления для цинковых комплексов на 8-10% меньше, чем для аналогичных комплексов меди(II) и никеля(II). По нашему мнению, это связано с уменьшением радиуса иона цинка(II) по сравнению с ионами меди(II) и никеля(II).

В результате экспериментов определены значения коэффициента распределения для комплексов никеля (II), меди (II) и цинка (II) с дипиридилом, этилендаминол, гидразином и простейшими карбоновыми кислотами (метановой, этановой и пропановой). Доказано, что природа центрального атома в изученном ряду металлов не оказывает значительного влияния на липофильность комплексной частицы. В то же время количество лигандов является определяющим фактором в значении липофильности. Полученные результаты позволяют более детально определять механизм взаимодействия данных комплексных частиц с клеточными мембранами, тем самым прогнозируя их биологическую активность.

РЕЗЮМЕ. Визначено коефіцієнти розподілу для комплексних сполук нікелю (II), купруму (II) та цинку

Украинский государственный химико-технологический университет, Днепропетровск

УДК 544.435

Д.П. Бабюк, В.В. Нечипорук

КВАНТОВЫЕ ТРАЕКТОРИИ В ИЗУЧЕНИИ РЕАКЦИИ ОБМЕНА ВОДОРОДА $\text{H} + \text{H}_2 = \text{H}_2 + \text{H}$

В рамках гидродинамического подхода к квантовой механике рассмотрено поведение системы при коллинеарном столкновении молекулы и атома водорода. Изучена динамика квантовых траекторий. Для нахождения траекторий предварительно решалось нестационарное уравнение Шредингера методом конечных разностей. Показано, что вследствие сильной интерференции волновой функции прямое применение метода квантовых траекторий для этой системы невозможно.

© Д.П. Бабюк, В.В. Нечипорук, 2010

(II) з лігандами різної природи у системі вода—*n*-октанол. Показано залежність величини ліпофільності від будови комплексу — природи центрального атома, будови лігандів та їх кількості.

SUMMARY. The partition coefficients for the complexes of nickel (II), cuprum (II) and zinc (II) with ligands of different nature have been determined. The dependence of the lipophilicity magnitude on complex structure (the nature of central atom, the structure and quantity of ligands) were shown.

1. Smith R.N., Hansch C., Ames M.A. // J. Pharm. Sci., 1975. -64. -P. 599—612.
2. Бьеррум Я. Образование аминов металлов в водном растворе. Теория обратимых ступенчатых реакций. -М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
3. Мильникова С.И., Астахова К.В. // Журн. физ. химии. -1970. -№ 10. -С. 2500—2504.
4. Carlson J.P., McReynolds F.H., Verhoek F.H. // J. Amer. Soc. -1945. -67. -P. 1334—1339.
5. Ahmad N., Rahman S.M.F. // Zeitschrift fur anorganische und allgemeine Chemie. -1964. -330, № 3—4. -P. 210—214.
6. Рабинович В.А., Халвин З.Я. Краткий химический справочник. -Л.: Химия, 1991.
7. OECD: Guideline for testing of chemicals. "Partition Coefficient" (shake-flask method). OECD, adopted May 1981.
8. Alderighi L., Gans P., Ienco A. et al. // Coord. Chem. Rev. -1999. -184. -P. 311—318.
9. Wilko Verweij (1999—2007) The Netherlands, cheaqs@tiscali.nl, <http://home.tiscali.nl/cheaqs>.
10. Leo A.L., Hansch C., Elkin D. // Chem. Rev. (Washington D.C.). -1971. -71, № 6. -P. 525—616.
11. Dataset of LogP values C - logP (BioByte Corp., Claremont, CA, USA).

Поступила 25.09.2009

Понимание поведения реагирующей системы на молекулярном уровне является ключом в интерпретации ее макроскопической кинетики. Фундаментом последней выступает химическая динамика, в которой изучается молекулярный механизм элементарных физико-химических процессов. Особая роль принадлежит изучению межмолекулярных столкновений, поскольку именно они служат микроскопическим механизмом большинства кинетических процессов в газах и жидкостях. Вследствие малых размеров реагирующих частиц возможно проявление квантовых эффектов, таких как туннелирование, нулевая колебательная энергия, неадиабатические переходы. Поэтому наиболее строгое описание химической динамики должно проводиться в рамках квантовой механики. К сожалению, этот подход реализуем только для систем с относительно небольшим числом степеней свободы, поскольку их увеличение ведет к экспоненциальному росту требуемой операционной памяти компьютера, а, следовательно, и времени вычислений.

Относительно недавно было предложено иное решение проблемы. Это метод квантовых траекторий, базирующийся на гидродинамическом или Бомовском подходе к квантовой механике [1, 2]. Цель этой работы — изучить динамику квантовых траекторий на примере наипростейшей реагирующей системы в реакции обмена водорода $H + H_2 = H_2 + H$.

Формулировка проблемы и пути ее решения. Пусть происходит взаимодействие между молекулой водорода и атомом водорода, причем все три ядра всегда находятся на одной линии. Такое коллинейное столкновение оставляет независимыми только две координаты — расстояние r_2 между атомами А и В в молекуле и расстояние r_1 между атомом С и ближайшим к нему атому В молекулы. Изучение динамики такой системы существенно упрощается в приближении Борна–Оппенгеймера, когда разделяется движение электронов и ядер. Тогда для определенной конфигурации ядер квантово-механически рассчитываются электронные уровни E как функции межъядерных координат R . Прибавив к ним потенциальную энергию отталкивания ядер, получаем потенциальные поверхности $U(R)$, в области которых будет происходить движение ядер.

Несмотря на наличие в литературе множества примеров различных потенциальных поверх-

ностей для основного электронного состояния системы H_3 , рассчитанных методами *ab initio*, в данной работе точность потенциала не играет особой роли, поскольку исследуется динамика ядер. Поэтому используется самая простая полуэмпирическая LEPS-поверхность [3]. При значениях параметров LEPS-потенциала $D=0.1724$, $\beta=1.0298$, $r_e=1.402$ высота потенциального барьера составляет $E_{act} 8.33 \cdot 10^{-3}$ при расстояниях $r_1=r_2=1.73$. Здесь и далее все величины даются в атомных единицах ($\hbar=1$, $m_e=1$, $e=1$).

Применение в качестве координат межъядерных расстояний r_1 и r_2 при коллинейном столкновении рождает в операторе полной энергии смешанную производную второго порядка по r_1 и r_2 :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{(m_A + m_B)}{2m_A m_B} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{(m_B + m_C)}{2m_B m_C} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{1}{m_B} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_2} + V(r_1, r_2). \quad (1)$$

Для ее исключения координаты r_1 и r_2 делают косоугольными:

$$r_1 = x - \frac{y}{\operatorname{tg} \alpha}, \quad r_2 = \frac{y}{\sin \alpha}. \quad (2)$$

Теперь x и y — прямоугольные координаты, а α — угол между косоугольными координатами r_1 и r_2 . Если его выбрать в виде

$$\alpha = \arccos \sqrt{\frac{m_A m_B}{(m_A + m_B)(m_B + m_C)}}, \quad (3)$$

то Гамильтониан (1) упрощается и приобретает вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(x, y), \quad (4)$$

где $\mu = \frac{m_A(m_B + m_C)}{m_A + m_B + m_C}$.

Для нашей системы в предположении равенства масс всех трех атомов получаем: $\alpha = \pi/3$ и $\mu = 2m_H/3 = 1224$.

Квантово-механическое изучение химической динамики такой системы подразумевает предписание начальному состоянию системы определенной волновой функции и исследование ее поведения во времени путем интегрирования неста-

ционарного уравнения Шредингера:

$$i \frac{\partial \psi(x,y,t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x,y,t) \quad (5)$$

с Гамильтонианом (4). Пусть в начальный момент времени молекула H_2 будет в основном колебательном состоянии ($v = 0$), а атом H, находясь на расстоянии x_0 от ближайшего атома молекулы, движется ей навстречу с относительной скоростью v_0 . Тогда соответствующая начальная волновая функция будет произведением волнового пакета с групповой скоростью $v_0 = k/\mu$ (k — волновое число) вдоль этой поступательной координаты x и волновой функции основного состояния системы с потенциалом Морзе вдоль колебательной координаты y , то есть

$$\psi(x,y,0) = \left\{ \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} \exp\left[ikx - \gamma(x - x_0)^2 \right] \cdot \left\{ N(2J + 1)^J \exp\left[-\left(J + \frac{1}{2} \right) \exp(-\beta y) + \beta J y \right] \right\} \right\}, \quad (6)$$

где

$$N = \sqrt{\frac{2\beta J}{\Gamma(2J+1)}}, \quad J = \frac{\sqrt{2\mu D}}{\beta} - \frac{1}{2},$$

здесь $\Gamma(x)$ — гамма-функция; γ — параметр, характеризующий ширину волнового пакета; значения параметров β и D определены выше при описании LEPS-потенциала.

Поступательная энергия такого начального распределения $E_{tr} = k^2/2\mu$ зависит только от волнового числа k , а колебательная энергия $E_{vib} = \beta \left(\sqrt{\frac{D}{2\mu}} - \frac{\beta}{8\mu} \right) = 0.0085$.

Одним из способов решения уравнений (4)—(6) может быть метод конечных разностей. Для этого двумерное пространство покрывают сеткой, в узлах которой пространственные производные аппроксимируют конечными разностями. Интегрирование по времени обычно проводится методами Рунге–Кутты или конечноразностными схемами. При соблюдении достаточной резолюции сетки и условий численной устойчивости этот подход дает максимально точное решение. Однако его недостаток заключается в необходимости использования большой плотности сетки вследствие высокой степени немонотонности волновой функции. Кроме того, сеткой покрывается все пространство, где ожидается появление волновой функции, то есть даже в начальный момент времени,

когда функция локализована только в области реагентов, вычисления ведутся и в области продуктов, где волновая функция стремится к нулю. Эти два недостатка делают неприменимым вышеописанную схему для задач более высокой размерности, поскольку общее число узлов сетки увеличивается экспоненциально с ростом числа степеней свободы.

В этом отношении более перспективен метод квантовых траекторий, базирующийся на гидродинамическом описании квантовой механики [1, 2]. Во-первых, в нем осциллирующие волновые функции заменяются гладкими функциями — амплитудой и фазой. Во-вторых, траектории всегда находятся только в тех областях, где плотность вероятности отлична от нуля, а следовательно, нет необходимости интегрировать лишние уравнения в областях пространства, в которых волновая функция не несет полезной информации. К сожалению, метод квантовых траекторий неприменим в области интерференции волновой функции, поскольку в узлах гидродинамические уравнения содержат сингулярные члены. Несмотря на интенсивные поиски и некоторые успехи [4, 5], проблема узлов пока остается основным препятствием широкого применения метода квантовых траекторий в химической динамике сложных систем. Гидродинамический подход также полезен в анализе направления потоков вероятности. Суть его заключается в том, что вначале численно решается нестационарное уравнение Шредингера и на основании полученной волновой функции при использовании гидродинамического подхода делают заключение о потоках вероятности. Затем интегрированием скоростей по времени получают квантовые траектории [6]. Именно этот подход и реализуется в данной работе.

Решение нестационарного уравнения Шредингера. Уравнение Шредингера интегрируем по схеме конечных разностей, описанной выше. Пространственные производные представляем центральными разностями с использованием пяти точек. На-

пример, для $\frac{\partial^2 \psi(x,y,t)}{\partial x^2}$ имеем:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,y,t)}{\partial x^2} \approx \frac{1}{12h^2} [-\psi(x-2h,y,t) + 16\psi(x-h,y,t) - 30\psi(x,y,t) + 16\psi(x+h,y,t) - \psi(x+2h,y,t)].$$

Интегрирование по времени также проводим

центральными конечными разностями, но только в двух точках:

$$\frac{\partial \psi(x,y,t)}{\partial t} \approx \frac{\psi(x,y,t+\delta) - \psi(x,y,t-\delta)}{2\delta}$$

Для запуска этой схемы необходимы значения ψ не только в момент $t=0$, но и в момент $t=\delta$. Последнее находится методом Рунге–Кутты. Описанная схема при соблюдении условия численной устойчивости ($\delta = \mu h^2/10$) [7] весьма эффективна и проста в применении.

Поместим центр начального волнового пакета с параметром ширины $\gamma=6.0$ вдалеке от области реакции при $x_0=5.5$. Интересующее пространство покрывается прямоугольной сеткой $N_x \times N_y$, с $N_x=200$, $N_y=110$ и шагом $h=0.07$. Затем начальная функция (6) запускается в направлении реакции. Интегрирование уравнения Шредингера (5) проводится по изложенной выше методике с временным шагом $\delta=0.5$. Численная устойчивость контролируется по значению нормы $\sum_{k,i} |\psi(x_k, y_i)|^2 h^2 = 1$.

Рис. 1 показывает зависимость вероятности прохождения реакции от времени при разных начальных поступательных энергиях системы. Они рассчитываются путем интегрирования по прост-

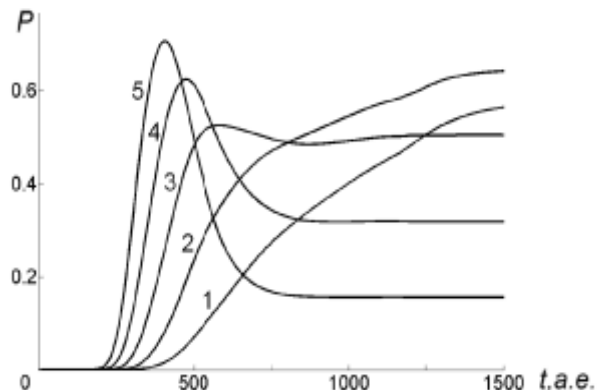


Рис. 1. Вероятность прохождения реакции в зависимости от времени при различных начальных поступательных энергиях E_{tr} : 0.0065 (1), 0.0147 (2), 0.0261 (3), 0.0408 (4), 0.0588 (5).

ранству плотности вероятности в области продуктов, которая условно отделена от области реагентов прямой, проходящей через начало координат и седловидную точку на потенциальной поверхности. Как видно, увеличение скорости столкновения вначале способствует прохождению реакции. Однако при некотором пороговом значении E_{tr} (кривая 3) начинается отток плотности вероятности из области продуктов в область реа-

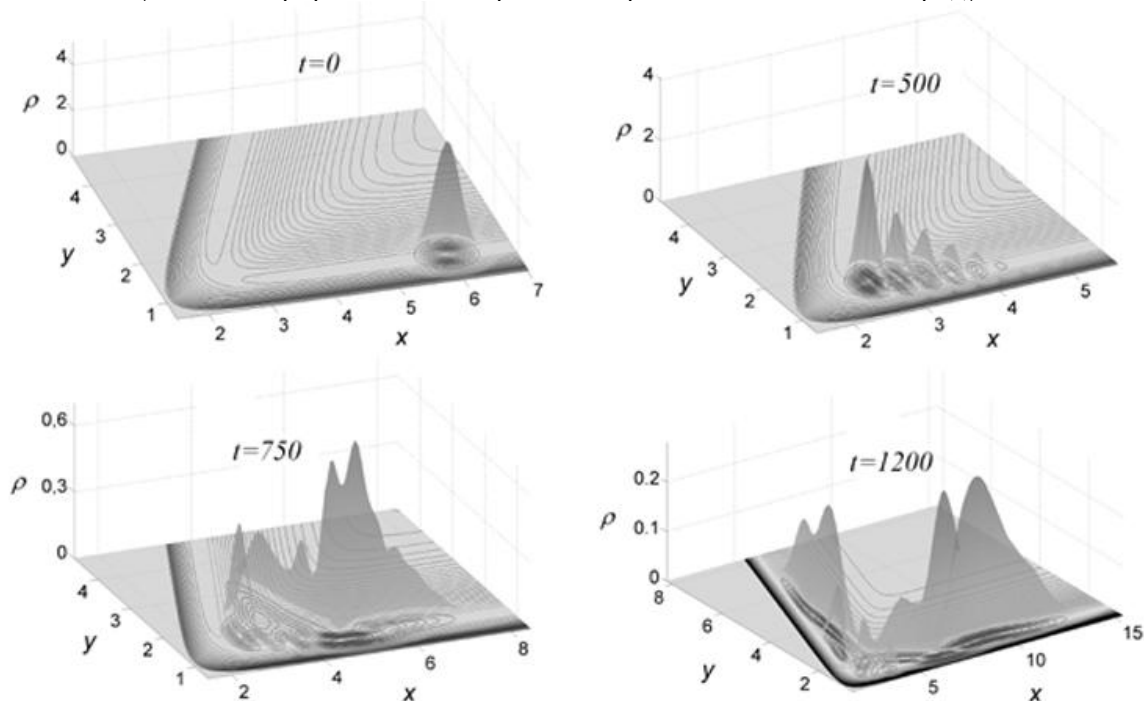


Рис. 2. Плотность вероятности при различном времени ($E_{tr}=0.0408$). Контурами показаны потенциальная энергия и проекция плотности вероятности.

гентов. Если посмотреть на рис. 2, то становится ясно, что вследствие инерционности быстрому волновому пакету тяжелее повернуть в направлении долины продуктов, даже когда большая его часть уже пересекла седловидную точку. В этом случае ключевую роль играет соотношение поступательной и колебательной энергий начального пакета, а явление описывается правилом Эванса–Поляни [8, 9].

На рис. 2 показано несколько плотностей вероятности при различных временах для $E_{tr}=0.0408$, которому соответствует кривая 4 на рис. 1. Как видим, интерференция приводит к очень сложной структуре не только отраженной части волнового пакета, но и прошедшего через барьер. Обилие узловых областей указывает на невозможность прямого применения метода квантовых траекторий.

Гидродинамические уравнения и квантовые траектории. Согласно Бому [10], в гидродинамическом подходе волновая функция представляется в полярной форме:

$$\psi(\vec{r}, t) = R(\vec{r}, t) \exp[iS(\vec{r}, t)], \quad (7)$$

где R и S — амплитуда и фаза колебаний (функция действия) соответственно. Причем R и S — действительные функции. Затем (7) подставляется в нестационарное уравнение Шредингера (5). После разделения действительной и мнимой частей полученного равенства приходим к системе из двух уравнений:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \nabla(\rho \nabla S); \quad (8)$$

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2\mu} (\nabla S)^2 + U - \frac{1}{2\mu R} \nabla^2 R, \quad (9)$$

где $\rho = R^2$.

Если принять, что градиент функции действия есть импульс

$$p = \nabla S, \quad (10)$$

то первое уравнение представляет собой уравнение непрерывности потока вероятности $\vec{J} \approx \rho \vec{v}$. Второе — уравнение Гамильтона–Якоби с дополнительным членом $Q = -\frac{1}{2\mu R} \nabla^2 R$, называемым квантовым потенциалом. Именно этот член становится сингулярным в узлах волновой функции.

Перейдем теперь к квантовым траекториям. По аналогии с классической механикой их уравнения движения можно представить в виде:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}. \quad (11)$$

Подставляя вместо скорости \vec{v} импульс, деленный на массу, и учитывая связь импульса с градиентом фазы (10), получим:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\mu} \nabla S(\vec{r}, t). \quad (12)$$

Это и есть уравнение движения квантовой траектории. В классической механике необходимо было бы дополнить (12) уравнением для временной производной импульса. Здесь такой необходимости нет, поскольку импульс сразу вычисляется для любой точки пространства и времени из нестационарной волновой функции с помощью соотношений (7) и (10).

Квантовые траектории в начальный момент времени могут выбираться произвольным образом. Однако если их генерировать согласно случайному распределению с функцией, совпадающей с плотностью вероятности, полученной из уравнения (6), то каждая траектория будет нести одинаковый статистический вес, равный $1/N_{tr}$ [11]. Вероятность прохождения реакции в этом случае вычисляется как отношение числа прошедших траекторий к общему их числу N_{tr} . Хотя этот метод вычисления вероятностей медленно сходится, он универсален в плане применения к многомерным задачам.

Интегрирование уравнений для квантовых траекторий (12) проводится численно различными методами. Вначале простым и быстрым конечно-разностным методом. Если траектория испытывает численную неустойчивость, то для ее интегрирования применяется метод Рунге–Кутты с автоматическим выбором шага. Следует отметить, что тут возникает некая трудность. Предварительно полученная методом сеток волновая функция является дискретной в пространстве и времени. Положение же квантовой траектории вовсе не должно совпадать с узлами той сетки, в которых имеются готовые значения волновых функций и полученных из нее градиентов фазы и скоростей. Чтобы преодолеть эту трудность, мы разработали оригинальный алгоритм. Для нужной траектории в момент времени τ ищутся сначала соседние nt точек временной сетки. Затем в пространственной сетке выбираются nx и ny соседних точек в направлении x и y соответственно. Эти точки ограничивают пространственную подсетку размером $nx \times ny$, в которой рассматриваемая траектория находится ближе к ее центру. В узлах каждой точки подсетки

ищутся значения скорости v_x и v_y в момент времени τ путем интерполяции кубическим сплайном между nt точками. Имея значения v_x и v_y в нужный момент времени в подсетке $n_x \times n_y$, проводим такую же интерполяцию в пространстве и получаем значения v_x и v_y в точке траектории в нужный момент времени τ . Тестирование показало, что достаточная точность достигается при размерах подсетки с $nt=10$, $n_x=5$, $n_y=5$.

Из генерированных, как описано выше, 100 траекторий в область продуктов приходит 34 траектории. Таким образом, вероятность протекания реакции согласно квантовым траекториям $P=0.34$. Точное значение $P=0.3187$ (рис. 1, кривая 4). Согласие неплохое, учитывая то, что общее число траекторий всего $N_{tr}=100$.

Вернемся теперь к динамике отдельных траекторий. В отличие от классических полная энергия квантовых траекторий, которая вычисляется согласно (10) как $E = -\frac{\partial S}{\partial t}$, не является инвариантом движения и может изменяться при движении. Это следствие того, что движение каждой квантовой траектории зависит от движения ансамбля остальных траекторий и взаимодействие передается через квантовый потенциал в уравнении (9). Более того, квантовая траектория может попадать и в область с потенциальной энергией, превышающей ее полную энергию [12], отображая явление туннелирования. Рис. 3 показывает отдельно несколько прошедших и отраженных траекторий. Начальная скорость всех траекторий одинакова, но вследствие сложной динамики одним удается пройти сквозь барьер и поворачивать в область продуктов, другие отражаются и возвращаются в долину реагентов, иногда даже пройдя барьер (прямая под углом на рис. 3).

Особо интересна динамика траекторий попадающих в область узлов. Согласно анализу квантово-гидродинамических уравнений [6], траектория не может пересекать узел. Приближаясь к нему, она как бы втягивается в

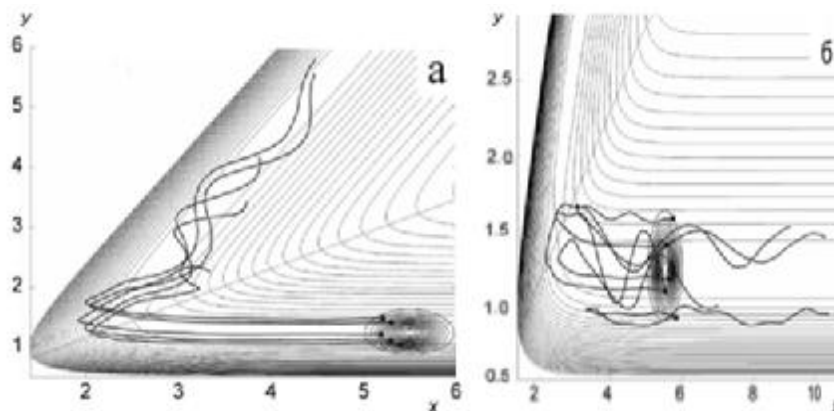


Рис. 3. Пройденные (а) и отраженные (б) квантовые траектории.

“водоворот” и ускоренно начинает вращаться вокруг этого узла [12]. Удобным способом выявления такого поведения может служить векторное поле — схема, на которой стрелками показывается направление вектора потока вероятности в точках сетки [13]. Рис. 4 отчетливо демонстрирует формирование вихрей как раз между пиками плотности вероятности. Со временем эти вихри двигаются, исчезают и вновь образуются. Траектории стараются огибать такие вихри (низкая плотность вероятности означает малое количество траекторий), но некоторым это не удается и они втягиваются в вихревое движение. На рис. 3, а нижняя траектория в конце своей эволюции попадает в такой вихрь. С математической точки

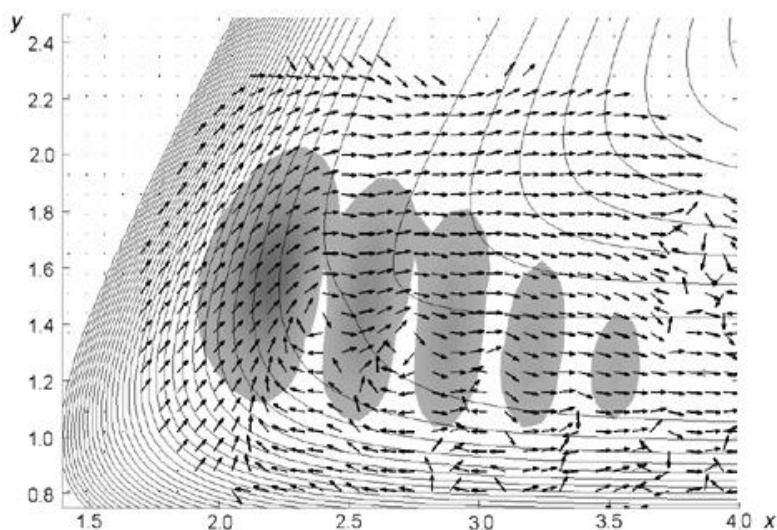


Рис. 4. Направление потока вероятности при $t=500$. Контурные линии нанесены для демонстрации потенциала, затемнения показывают плотность вероятности.

зрения крайне трудно интегрировать уравнения возле вихрей даже при наличии точной волновой функции. А в методе квантовых траекторий, где волновая функция неизвестна, а требуется интегрировать, кроме уравнений (12), еще и (8)—(9), включающие квантовый потенциал, — не представляется возможным.

В данной работе обнаружен еще ряд интересных вопросов, которые планируется детально исследовать в будущем. Прежде всего, это зависимость прохождения отдельных траекторий от их положения в начальном пакете. Интересным будет также поведение квантовых траекторий в случае, если молекула до столкновения находится в возбужденных колебательных состояниях.

Как отмечено, динамика коллинеарного столкновения системы двухатомная молекула—атом, когда все 3 атома одинаковые, слишком сложна для метода квантовых траекторий. Это обусловлено острым углом между косоугольными координатами, что ведет к многократному отражению волнового пакета при его столкновении с барьером. В случае углов, близких к 90° , возможно, не будет возникать множество узлов и удастся применить метод квантовых траекторий непосредственно. Таковыми свойствами обладает, например, реакция $\text{H}^+\text{Cl} + \text{H} = \text{H}^+ + \text{HCl}$, для которой согласно (3) угол между косоугольными координатами составляет 88.4° .

РЕЗЮМЕ. В рамках гідродинамічного підходу до квантової механіки розглянуто поведінку системи при колінеарному зіткненні молекули і атома водню. Вивчено динаміку квантових траєкторій. Для знаходження траєкторій попередньо розв'язувалось нестационарне рів-

няння Шредингера методом кінцевих різниць. Показано, що внаслідок сильної інтерференції хвильової функції безпосереднє застосування методу квантових траєкторій для цієї системи неможливе.

SUMMARY. Collinear collision of the hydrogen atom and diatom is considered within the hydrodynamic approach to quantum mechanics. Dynamics of quantum trajectories is studied. In order to obtain the quantum trajectories, the time-dependent Schroedinger equation was solved by the finite difference method. It is shown that direct employment of the quantum trajectory method is incapable due to severe interference of the wave function.

1. *Lopreore C.L., Wyatt R.E.* // *Phys. Rev. Lett.* -1999. -**82**. -P. 5190—5193.
2. *Wyatt R.E.* *Quantum dynamics with trajectories.* -New York: Springer, 2005.
3. *Sato S.* // *J. Chem. Phys.* -1955. -**23**. -P. 592—593.
4. *Babyuk D., Wyatt R.E.* // *Ibid.* -2004. -**121**. -P. 9230—9238.
5. *Babyuk D., Wyatt R.E.* // *Chem. Phys. Lett.* -2004. -**400**. -P. 145—152.
6. *Holand R.P.* *The quantum trajectory of motion.* -New York: Cambridge Press, 1993
7. *Kosloff R.* // *J. Phys. Chem.* -1988. -**92**. -P. 2087—2100.
8. *Polanyi J.C., Wong W.H.* // *Ibid.* -1969. -**51**. -P. 1439—1450.
9. *Levine R.D., Bernstein R.B.* *Molecular reaction dynamics and chemical reactivity.* -Oxford: University Press, 1987.
10. *Bohm D.* // *Phys. Rev.* -1952. -**85**. -P. 166—193.
11. *Babyuk D., Wyatt R.E.* // *J. Chem. Phys.* -2006. -**125**. -P. 064112.
12. *Babyuk D., Wyatt R.E., Frederick J.H.* // *Ibid.* -2003. -**119**. -P. 6482—6488.
13. *McCullough E.A., Wyatt R.E.* // *Ibid.* -1971. -**54**. -P. 3578—3591.

Черновицкий национальный университет
им. Юрия Федьковича

Поступила 09.01.2009

УДК 541.128+542.943.73

Л.П. Олексенко, Г.О. Арінархова, В.К. Яцимирський, Л.В. Луценко

КАТАЛІТИЧНА АКТИВНІСТЬ НАНЕСЕНИХ ЦЕОЛІТНИХ СИСТЕМ У РЕАКЦІЇ ОКИСНЕННЯ СО

Досліджено каталітичну активність у реакції окиснення монооксиду вуглецю Mn-цеолітних систем з вмістом металу 15 % мас. Виявлено, що активність Mn-каталізаторів зменшується в ряду: $\text{Mn—NaX} > \text{Mn—Na,K—ERI} > \text{Mn—NaA}$. Встановлено, що найвища активність Mn—NaX в реакції окиснення СО може бути обумовлена

© Л.П. Олексенко, Г.О. Арінархова, В.К. Яцимирський, Л.В. Луценко, 2010