

# SO<sub>2</sub> - en H<sub>2</sub>O-adsorpsie op Pt-oppervlakke: 'n Digtheidsfunksionaalondersoek

T Nel, CGCE van Sittert

Laboratorium vir Toegepaste Molekuulmodellering, Chemiese Hulpbronveredeling, Noordwes-Universiteit, Privaatsak X6001, Potchefstroom, 2520

**Korresponderende outeur:** Cornie van Sittert **E-pos:** [Cornie.VanSittert@nwu.ac.za](mailto:Cornie.VanSittert@nwu.ac.za)

**SO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O adsorption on Pt-surfaces: A density functional theory study:** The co-adsorption of SO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O on platinum (Pt), which is an efficient catalyst material for the HyS cycle, was investigated. It was found that SO<sub>2</sub> adsorption is not significantly influenced by co-adsorbed H<sub>2</sub>O, but that H<sub>2</sub>O adsorption on Pt is strongly dependent on the presence of co-adsorbed SO<sub>2</sub>.

Fossielbrandstowwe se nadelige invloed, en die beperktheid daarvan, het groot belangstelling in die ontwikkeling en gebruik van volhoubare energiebronne teweeggebring (Nel et al. 2020). Verskeie alternatiewe energiebronne is tot dusver geïdentifiseer (Kriek et al. 2013; Liberatore et al. 2016). In die besonder is waterstof tans, vanweë sy hoë energiedigtheid en lae omgewingsimpak, as 'n sterk energiekandidaat geïdentifiseer. Gevolglik is verskeie tegnieke vir die verkryging van waterstof, waaronder die hibriedswaelsiklus (HS-siklus), ontwikkel. In die HS-siklus word swaeldioksied (SO<sub>2</sub>) en water (H<sub>2</sub>O) elektrochemies in swaelsuur (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) en waterstofgas (H<sub>2</sub>) omgeskakel (Kriek et al. 2013; Ungerer et al. 2021). Platinum (Pt) geniet tans, vanweë die hoë selektiwiteit en sensitiwiteit daarvan, voorkeur as die elektrodemateriaal, maar is skaars en duur. Verder bestaan daar praktiese probleme met betrekking tot die gebruik van Pt as elektrodemateriaal, naamlik vergiftiging deur swawelbindings en suuroplosbaarheid. Hierdie aspekte noodsaak die ontwikkeling van alternatiewe elektrodemateriale.

Om doeltreffender elektrodemateriale te ontwikkel is dit belangrik om die SO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O-wisselwerking op die Pt-oppervlak te verstaan. In die eerste stap vind gesamentlike adsorpsie van SO<sub>2</sub> en H<sub>2</sub>O op die elektrodeoppervlak plaas, waarna die SO<sub>2</sub> met H<sub>2</sub>O geoksideer word (Nel et al. 2020). Alhoewel reagensadsorpsie vir die HS-siklus noodsaaklik is, is oormatige SO<sub>2</sub>-adsorpsie ongewens aangesien dit die Pt-H<sub>2</sub>O-wisselwerking belemmer. Verder kan oormatige SO<sub>2</sub>-adsorpsie tot 'n self-redoksreaksie tussen geadsorbeerde SO<sub>2</sub>, om SO en SO<sub>3</sub> te vorm, lei. Aangesien SO beduidend sterk met die Pt-atome bind as SO<sub>2</sub>, bied SO-vorming 'n groter probleem ten opsigte van die Pt-oppervlakdoeltreffendheid (Lin et al. 2002, Nel et al. 2020). Alhoewel verskeie ondersoeke rakende SO<sub>2</sub>- en H<sub>2</sub>O-adsorpsie op die Pt-oppervlak voltooi is, bestaan onsekerheid rakende SO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O-wisselwerking op die Pt-oppervlak steeds (Lin et al. 2002; Ungerer et al. 2021).

Die gesamentlike adsorpsie van SO<sub>2</sub> en H<sub>2</sub>O op die Pt(111)-oppervlak is met behulp van die digtheidsfunksionaalteorie, soos gebruik in Vienna ab-initio simulatieprogram (VASP), ondersoek. Daar is bevind dat H<sub>2</sub>O-adsorpsie beduidend deur medegeadsorbeerde SO<sub>2</sub> beïnvloed word, maar dat SO<sub>2</sub>-adsorpsie nie beduidend deur die teenwoordigheid van H<sub>2</sub>O beïnvloed word nie.

## Verwysings

- Kriek, R.J., Van Ravenswaay, J.P., Potgieter, M., et al., 2013, SO<sub>2</sub> – An indirect source of energy. *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy* 113, 593-604.
- Liberatore, R., Lanchi, M., Turchetti, L., 2016, Hydrogen production by the solar-powered hybrid sulfur process: Analysis of the integration of the CSP and chemical plants in selected scenarios. *AIP Conference Proceedings* 1734(1), p.120006. <https://doi.org/10.1063/1.4949208>.
- Lin, X., Hass, K.C., Schneider, W.F., et al., 2002, Chemistry of sulfur oxides on transition metals I: Configurations, energetics, orbital analyses, and surface coverage effects of SO<sub>2</sub> on Pt(111). *Journal of Physical Chemistry B* 106(48), 12575-12583. <https://doi.org/10.1021/jp026128f>.
- Nel, T., Van Sittert, C.G.C.E., Ungerer, M.J., 2020, SO<sub>2</sub>-oksidasiemeganisme op 'n Pt-oppervlak: 'n Digtheidsfunksionaalondersoek. *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* 39(1), 128. <https://doi.org/10.36303/SATNT.2020.39.1.0825>.
- Ungerer, M.J., Van Sittert, C.G.C.E., De Leeuw, N., 2021, Behaviour of S, SO, and SO<sub>3</sub> on Pt(001),(011) and (111) surfaces: A DFT study, *The Journal of Chemical Physics* 154, 194701. <https://doi.org/10.1063/5.0043501>.

**Nota:** 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 28–29 Oktober 2021, Noordwes-Universiteit. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Cornie van Sittert (Navorsingsfokusarea: Chemiese Hulpbronveredeling, Noordwes-Universiteit).