

**ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ
ПОВЕРХНОСТИ ВЫСШЕГО БОРИДА ВОЛЬФРАМА**

Радина А.Д. (Сколковский институт науки и технологий; НИТУ «МИСиС»)
**Научный руководитель – доктор физико-математических наук, старший
преподаватель Квашнин А.Г.** (Сколковский институт науки и технологий; НИТУ
«МИСиС»)

Введение. В настоящее время большинство катализаторов, используемых в отечественной промышленности, являются импортными, а также изготавливаются из благородных и редкоземельных металлов, что существенно увеличивает стоимость производства многих изделий. Поэтому непрерывно ведётся поиск альтернативных вариантов, которые будут столь же эффективными, но более дешёвыми.

В качестве возможной альтернативы рассматриваются бориды переходных металлов, в частности, бориды вольфрама. В первую очередь, наряду с боридами кобальта, молибдена, никеля и ванадия, бориды вольфрама рассматривались в качестве перспективных катализаторов для реакции получения водородного топлива, однако в дальнейшем были сделаны предположения об их высокой каталитической активности в ходе органического синтеза.

Важно отметить, что высшие бориды переходных металлов проявляют большую каталитическую активность, чем прочие стехиометрические соединения бора и металла, что делает данную работу особенно многообещающей.

Основная часть. Так как в соединении высшего бориды вольфрама WB_{5-x} активными центрами являются атомы вольфрама, для рассмотрения были выбраны высокосимметричные кристаллографические направления (001), (010), (100), (110), (101), (111), (130) и (201). Было определено, что в данных направлениях наблюдается наибольшее содержание металла на поверхности. Отношение атомов вольфрама на поверхности к атомам вольфрама внутри структуры составило в среднем 0,71. С целью выявления стабильных плоскостей, в программе VESTA из структуры WB_{5-x} были получены образцы шириной 8-12 Å с вакуумом 15 Å сверху и снизу, соответственно.

В дальнейшем при помощи VASP была проведена релаксация полученных поверхностей и рассчитаны их энергии Гиббса. В дальнейшем при помощи построения Вульфа, реализованного в рамках библиотеки Python Wulffpack, были выявлены стабильные грани кристалла WB_{5-x} . Такими гранями оказались (010) и (001), содержащие на поверхности преимущественно атомы бора, и грань (101), содержащая большое количество активных центров.

Возможные реконструкции стабильных поверхностей исследовались при помощи эволюционного алгоритма предсказания кристаллических структур USPEX [1]. Было выявлено, что графеноподобные структуры бора, составляющие поверхность (010) наиболее стабильны, и никакой реконструкции в данном случае не происходит.

В дальнейшем было проведено исследование адсорбции атмосферных газов на поверхности (010), которое показало, что наилучшим образом на рассматриваемой поверхности адсорбируются NO , H_2 и O_2 , в то же время она инертна по отношению к SO_2 , что говорит о перспективах использования WB_{5-x} в качестве автомобильного катализатора. На данный момент ведутся исследования энергетических барьеров реакций, протекающих на подобных катализаторах.

Выводы. Выявлены стабильные поверхности высшего бориды вольфрама WB_{5-x} , а также при помощи эволюционного алгоритма предсказания кристаллических структур USPEX была найдена стабильная реконструкция поверхности (010), проведено исследование адсорбции

атмосферных газов на данной поверхности. Полученные данные позволяют сделать предположение о возможности применения WB_{5-x} в качестве автомобильного катализатора.

Список использованных источников:

1. Oganov A. R., Lyakhov A. O., Stokes H. T., и Zhu Q. New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX // Computer Physics Communications – 2013. – № 4 (184). – С. 1172–1182