



MOLİBDEN KARBİD SƏTHLƏRİNDƏ METAL NANOKLASTER-DAŞIYICI FAZALARARASI SƏRHƏDLƏRİNİN ELEKTRON VƏ STRUKTUR FORMALAŞMA XÜSUSİYYƏTLƏRİ

Lamiyə Asif qızı Mürsəlova 

Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Bakı, Azərbaycan
lamiya.mursalova@mail.ru

Tədqiqat işində yaşıl kimya reaksiyalarında yüksək effektivlik nümayiş etdirən molibden karbid əsaslı sistemlərdə Cu və Au nanoklasterlərinin formalaşma qanunauyğunluqları tədqiq edilmişdir. "Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsinə" əsaslanan kvant-kimyəvi hesablamalar vasitəsilə metal nanohissəcikləri ilə karbid daşıyıcıları arasındakı fazalararası qarşılıqlı əlaqələrin əsas təbiəti müəyyən olunmuşdur. İşin elmi yeniliyi müxtəlif molibden karbid fazalarının (δ -MoC və β -Mo₂C) və səth düzlülüşlərinin nanoklasterlərin həndəsi quruluşuna və elektron vəziyyətinə təsirinin ilk dəfə sistemli şəkildə müqayisə edilməsindən ibarətdir. Hesablamalar nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, daşıyıcının metal-karbon nisbəti klasterlərin böyümə mexanizmini birbaşa müəyyən edir: β -Mo₂C (001) səthinin hər iki atomar düzlülüşündə Cu klasterləri ikiölçülü (2D) layvari (yastı) struktura meyl göstərsə də, δ -MoC (001) səthində üçölçülü (3D) piramidal quruluşlar energetik baxımdan daha stabildir. Bader yük analizi və elektron cəmləşmə funksiyası vasitəsilə sübut olunmuşdur ki, fazalararası sərhəddə yük mübadiləsinin istiqaməti səthin polyarlığından asılıdır. Molibden sonluqlu səthlərdə metal klasterləri daşıyıcıdan elektron qəbul edərək reduksiya olunmuş vəziyyətə keçir. Karbon sonluqlu səthlərdə isə elektron mübadiləsi əks istiqamətdə baş verdiyi üçün nanoklasterlərdə oksidləşmə meyilləri üstünlük təşkil edir. Alınan nəticələr katalizatorun aktivliyini və selektivliyini idarə etmək üçün "daşıyıcı mühəndisliyi" yanaşmasının tətbiqi baxımından mühüm əhəmiyyət daşıyır.

Açar sözlər: *sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi, DFT hesablamaları, metanol sintezi, su qazının yerdəyişməsi, CO₂-nin aktivləşməsi, səth sabilliyi, keçid vəziyyəti, energetik mənzərə, adsorbsiya enerjisi.*

GİRİŞ

Kataliz qədim zamanlardan bəşəriyyətə məlum olan bir hadisə olsa da, onun əsas yanaşmaları yalnız XIX əsrdən etibarən elmi şəkildə izah olunmağa başlanmışdır. İlk dəfə 1836-cı ildə Berzelius tərəfindən irəli sürülən kataliz anlayışı, sonralar Ostvald tərəfindən müasir formasına yaxın şəkildə - "reaksiyada iştirak edən, lakin sərf olunmadan prosesin sürətini dəyişən maddənin təsiri" kimi xarakterizə edilmişdir. Katalizatorun əsas rolu reaksiyanın aktivləşmə enerjisini azaltmaq və ya alternativ reaksiya mexanizmləri təqdim etməklə müəyyən məhsulların alınma sürətini artırmaqdır.

Heterogen kataliz, sənaye miqyaslı kimyəvi proseslərin böyük əksəriyyətini təşkil etməklə müasir cəmiyyətin inkişafında mühim əhəmiyyət daşıyır. Məsələn, ammoniyakın sintezi XX əsrin əvvəllərində dünyada qida çatışmazlığı riskinin qarşısını alan və əhali artımına birbaşa təsir göstərən ən vacib heterogen katalitik reaksiyalardan biri olmuşdur. Hazırda sənayedə istifadə olunan katalizatorların çoxu oksid və ya sulfid daşıyıcılar üzərində yerləşən Pd və ya Pt kimi bahalı metal nanohissəciklərinə əsaslanır. Müasir kimya elminin ən böyük çağırışlarından biri isə qalıq yanacaqlardan asılılığı azaltmaq üçün daha ucuz, lakin yüksək effektivliyə malik yeni katalizatorların, xüsusilə "yaşıl kimya" reaksiyalarını sürətləndirən sistemlərin qurulması və inkişaf etdirilməsidir. Bu baxım-



dan keçid metallarının karbidləri özünəməxsus fiziki və kimyəvi xüsusiyyətləri - yüksək bərkliyi, ərimə temperaturu və metallara bənzər elektron xassələri ilə fərqlənən mühim əhəmiyyət kəsb edən materiallar qrupudur. Son onilliklərdə aparılan tədqiqatlar göstərir ki, keçid metallarının karbidləri, xüsusilə volfram və molibden karbidləri bir çox reaksiyalarda platin qrupu metallarına bənzər katalitik aktivlik göstərilir [9, 15]. Qiymət baxımından əlverişli olmaları bu materialları bahalı nəcib metallara ən ciddi alternativə çevirmişdir.

Molibden karbidlərinin müxtəlif fazaları (kubik δ -MoC və ortorombik β -Mo₂C) ətraf mühit üçün zərərli olan maddələrin (məsələn, CO₂) faydalı yanacaq komponentlərinə və xammala (metanol, CO) çevrilməsində yüksək aktivlik göstərir. Xüsusilə, bu karbidlərin kiçik metal klasterləri üçün daşıyıcı rolunda çıxış etməsi və güclü metal-daşıyıcı qarşılıqlı təsiri hesabına katalizatorun aktivliyini kəskin artırması tədqiqatçıların diqqət mərkəzindədir. Təqdim olunan işin məqsədi molibden karbid səthlərində Cu və Au nanoklasterlərinin formalaşma xüsusiyyətlərini, fazalararası sərhəddə baş verən elektron və struktur dəyişikliklərini kvant-kimyəvi üsullarla öyrənməkdir. Tədqiqat çərçivəsində fərqli metal-karbon nisbətində malik karbid fazalarının nanoklasterlərin həndəsi quruluşuna, aktivliyinə və selektivliyinə təsiri sistemli şəkildə tədqiq edilmişdir.

MATERIAL VƏ METODLAR

Tədqiqat işində molibden karbid sistemlərinin elektron və struktur xüsusiyyətlərini öyrənmək üçün "Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsinə" əsaslanan dövrü hesablamalar aparılmışdır. Bütün kvant-kimyəvi hesablamalar proqram təminatı vasitəsilə yerinə yetirilmişdir. Elektron mübadilə-qarşılıqlı əlaqə effektlərini nəzərə almaq üçün ümumiləşdirilmiş qradiant təqribiliyi çərçivəsində PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) funksionalı tətbiq edilmişdir [11]. Molekullararası zəif qarşılıqlı təsirləri daha dəqiq təsvir etmək məqsədilə hesablamalara Grimme tərəfindən təklif edilmiş DFT-D2 dispersiya düzəlişləri əlavə olunmuşdur.

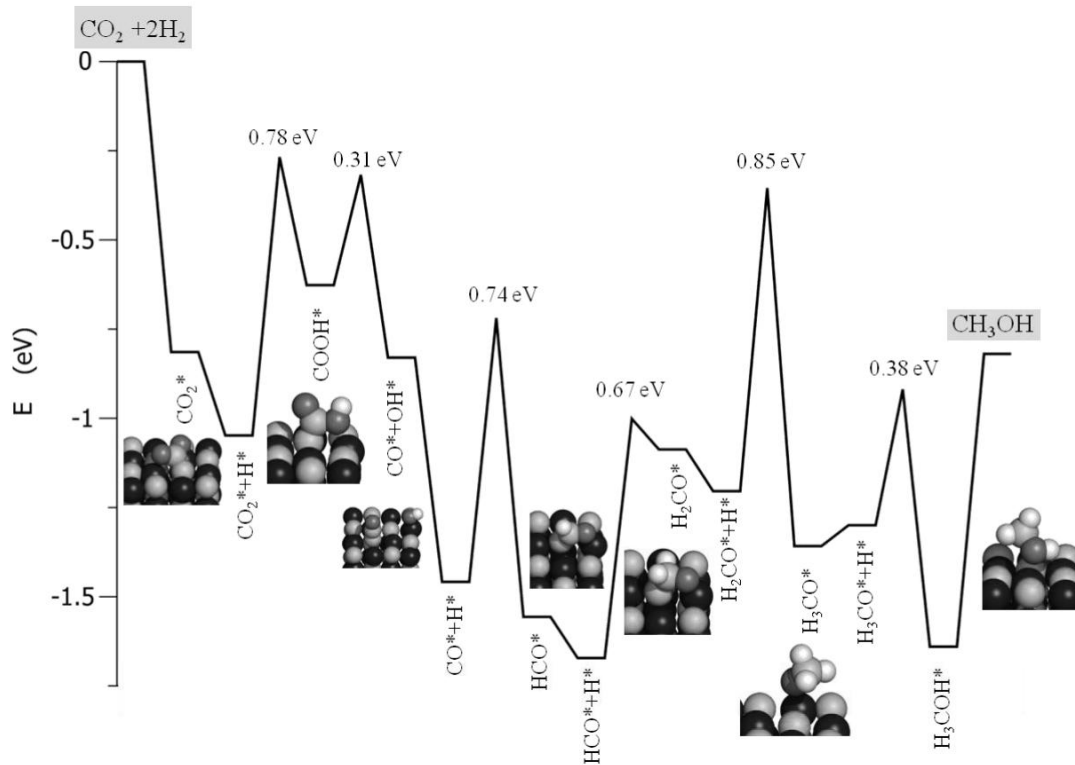
Nüvə və valent elektronları arasındakı qarşılıqlı təsir Blöchl tərəfindən təklif edilmiş proyeksiyalı əlavə edilmiş dalğalar üsulu vasitəsilə xarakterizə olunmuşdur [12]. Valent elektronlarının dalğa funksiyalarının genişlənməsi üçün müstəvi dalğaların kəsilmə enerjisi 415 eV olaraq qəbul edilmişdir. Elektron strukturun relaksasiyası zamanı dəqiqlik həddi 10–5 eV, atomların həndəsi optimallaşdırılması üçün isə qalıq qüvvələrin maksimal qiyməti 0,01 eV/Å səviyyəsində müəyyən olunmuşdur [13]. Tərs fəzada integrallama üçün kubik δ -MoC (001) səthi üçün $3 \times 3 \times 1$, polar β -Mo₂C (001) səthləri üçün isə $5 \times 5 \times 1$ ölçülü Monkhorst-Pack k-nöqtələr şəbəkəsindən istifadə edilmişdir [14]. Molibden karbid daşıyıcılarını modelləşdirmək üçün laylı model yanaşmasından istifadə olunmuşdur [4]. Hesablamalarda 4 atom qatından ibarət modellər qurulmuş, "2+2" yaxınlaşmasına əsasən daxili iki qat sabit saxlanılmış, səthə yaxın olan iki qat isə tam atomar nizamlanmışdır. Dövrü təkrarlanmalar arasında qarşılıqlı təsirin qarşısını almaq üçün z oxu boyunca 10-12 Å ölçüsündə vakuum sahəsi tətbiq edilmişdir.

Keçid vəziyyətlərinin və reaksiya sədlərinin müəyyən edilməsi üçün yönləndirilmiş elastik zolaq və dimer üsullarından istifadə olunmuşdur. Fazalararası yük mübadiləsini kəmiyyətə qiymətləndirmək üçün Bader yük analizi, kimyəvi rabitələrin təbiətini öyrənmək üçün isə Elektron cəmləşmə funksiyası metodologiyası tətbiq edilmişdir.

NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Bu tədqiqatda molibden karbid sistemlərinin katalitik aktivliyi CO₂ hidrogenləşməsi və su qazının yerdəyişməsi reaksiyaları üzərində tədqiq edilmişdir. Alınan nəticələr göstərir ki, katalizatorun metal-karbon nisbəti reaksiyanın həm selektivliyinə, həm də mexanizminə əsaslı təsir göstərir. Şəkil

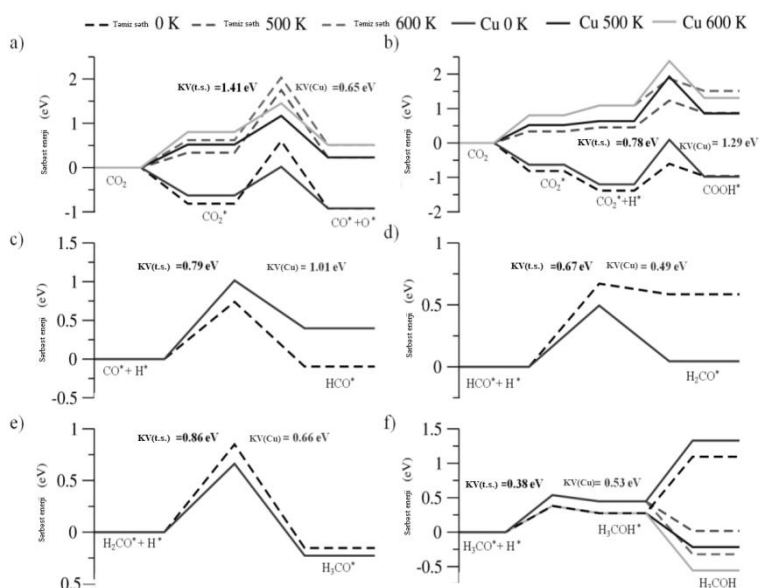
1-də δ -MoC (001) təmiz səthi üzərində CO_2 molekulunun metanol (MeOH) və CO-ya çevrilməsinin minimum enerji yolu göstərilmişdir.



Şəkil 1. δ -MoC (001) səthində CO_2 -nin metanola hidrogenləşməsinin enerji diaqramı

Hesablamalar göstərir ki, bu səthdə CO_2 -nin birbaşa parçalanması ($\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{O}$) yüksək enerji səddi (1,41 eV) səbəbindən çətindir [1]. Bunun əvəzinə proses reaksiya mərkəzlərinin birbaşa iştirakı ilə gedir: CO_2 əvvəlcə hidrogenləşərək COOH^* (karboksil) aralıq məhsulunu yaradır (sədd 0,78 eV) və bu aralıq məhsulun parçalanması nəticəsində CO əmələ gəlir. Metanolun sintezi isə CO-nun HCO^* , H_2CO^* və H_3CO^* (metoksi) ardıcılığı ilə hidrogenləşməsi nəticəsində baş verir [2]. Bu prosesdə sürəti müəyyən edən mərhələ (RDS) H_2CO^* -nin hidrogenləşərək metoksi qrupuna çevrilməsidir (sədd 0,85 eV). Şəkildən göründüyü kimi, metan (CH_4) istehsalının qarşısı metoksi qrupunun yüksək parçalanma səddi (>2 eV) vasitəsilə alınır ki, bu da δ -MoC-nin yüksək selektivliyini təmin edir.

Şəkil 2-də kiçik Cu nanoklasterlərinin δ -MoC daşıyıcısı üzərinə yerləşdirilməsinin termodinamik və kinetik effektləri təqdim verilmişdir. Müqayisəli analiz sübut edir ki, Cu nanoklasterlərinin varlığı reaksiyanın mexanizmini əsaslı şəkildə dəyişir [5]. Təmiz səthdə CO istehsalı COOH^* vasitəsilə baş verdiyi halda (sədd 0,78 eV), mis nanoklasterləri CO_2 -nin birbaşa parçalanma səddini 0,65 eV-ə qədər endirərək reaksiyanı redoks mexanizminə yönəldir. Bu sinergetik effekt həm də H_2CO^* və H_3CO^* hidrogenləşmə sədlərinin azalmasında (uyğun olaraq 0,49 eV və 0,66 eV-ə qədər) özünü göstərir [6]. Şəkildəki Hibbs sərbəst enerji diaqramları (500 K və 600 K temperaturda) təsdiq edir ki, yüksək temperaturda məhsulların (MeOH və H_2O) desorbsiyası asanlaşır, bu da təmiz səthlərdə müşahidə olunan səth zəhərlənməsinin qarşısını alır [7, 8].



Şəkil 2. Təmiz δ -MoC (001) və Cu/ δ -MoC (001) sistemlərində sərbəst enerji diaqramlarının müqayisəsi (KV(t.s.)-təmiz səth üçün keçid vəziyyəti; KV(Cu)-mis üçün keçid vəziyyəti)

Cədvəldə təqdim olunan eksperimental energetik parametrlər Cu/ δ -MoC katalizatorunun sənaye standartlarından üstünlüyünü kəmiyyətcə sübut edir.

Cədvəl

Müxtəlif katalizatorlar üzərində CO və MeOH istehsalı üçün təcrübi müşahidə olunan aktivləşmə enerjiləri (Ea)

Katalizator	CO istehsalı (Ea, eV)	MeOH istehsalı (Ea, eV)
Cu/ δ -MoC	0,39	0,43
Cu/TiC (001)	0,39	0,48
δ -MoC	0,78	0,74
Cu/ZnO (0001 $\bar{1}$)	0,61	0,69
Cu (111)	0,95	1,08

Göründüyü kimi, metanol istehsalı üçün aktivləşmə enerjisi Cu/ δ -MoC sistemində cəmi 0,43 eV təşkil edir ki, bu da sənaye katalizatoru olan Cu/ZnO-dan (0,69 eV) və təmiz Cu (111) metalından (1,08 eV) əhəmiyyətli dərəcədə aşağıdır[10]. Bu kəskin azalma mis və molibden karbid daşıyıcısı arasındakı "güclü metal-daşıyıcı qarşılıqlı təsirinə" nəticəsidir. Hər iki məhsul (CO və MeOH) üçün Ea (aktivləşmə enerjisinin) qiymətlərinin bir-birinə yaxın olması təsdiq edir ki, CO istehsalı bütün metal/karbid sistemlərində sürəti müəyyən edən ümumi mərhələdir və MeOH bu CO-nun sonrakı ardıcıl hidrogenləşməsi nəticəsində formalaşır.

Alınan nəticələr göstərir ki, β -Mo₂C fazası yüksək aktivliyə malik olsa da, CO₂-ni tam parçalayaraq metan istehsalına və səthin oksigenlə zəhərlənməsinə meyllidir. Əksinə, δ -MoC (001) bazasında yaradılan metal-karbid fazalararası sərhədləri, xüsusilə Cu/ δ -MoC sistemi, aşağı



temperaturda CO₂ hidrogenləşməsi üçün həm yüksək aktivlik, həm də yüksək selektivlik nümayiş etdirən perspektivli katalizatorlardır.

YEKUN NƏTİCƏ

Aparılmış genişmiqyaslı kvant-kimyəvi və təcrübi tədqiqatlar nəticəsində molibden karbid əsaslı sistemlərin CO₂ hidrogenləşməsi və su qazının yerdəyişməsi reaksiyalarında yüksək katalitik aktivliyi müəyyən edilmişdir. Tədqiqat işindən alınan əsas elmi nəticələr aşağıdakı kimi ümumiləşdirilmişdir:

1. Müəyyən edilmişdir ki, molibden karbidlərin kimyəvi aktivliyi, selektivliyi və stabilliyi birbaşa daşıyıcının metal-karbon nisbətindən asılıdır. Metal-karbon nisbəti 2:1 olan ortorombik β -Mo₂C fazası CO₂ və CO molekullarını asanlıqla parçalayaraq arzuolunmaz metan (CH₄) istehsalına və səthin oksigenlə zəhərlənməsinə səbəb olur. Əksinə, metal-karbon nisbəti 1:1 olan kubik δ -MoC fazası CO molekulunu parçalamadığı üçün daha yüksək selektivlik və uzunmüddətli stabillik nümayiş etdirir.
2. Molibden karbid səthlərinə kiçik Cu və Au nanoklasterlərinin əlavə edilməsi katalizatorun iş prinsipini əsaslı şəkildə dəyişir. Cu/ δ -MoC sistemi metanol istehsalında sənaye tipli Cu/ZnO katalizatorlarından 8-11 dəfə daha yüksək aktivlik göstərmişdir. Au/ δ -MoC sistemi isə aşağı temperaturlu su qazının yerdəyişməsi reaksiyasında ən yüksək məhsuldarlıq nümayiş etdirən perspektivli katalizator kimi müəyyən olunmuşdur.
3. DFT hesablamaları sübut etmişdir ki, metal nanoklasterləri reaksiya mexanizmini əlaqəli yoldan daha effektiv olan oksidləşmə-reduksiya (redoks) yoluna keçirir. Bu, CO₂ molekulunun birbaşa parçalanma enerji səddini kəskin azaldır və aktiv mərkəzlərin zəhərlənməsinin qarşısını alır.
4. Tədqiqatın nəticələri göstərir ki, δ -MoC əsaslı sistemlər həm qlobal istiləşməyə səbəb olan tullantı qazlarının faydalı kimyəvi xammala çevrilməsində, həm də təmiz enerji mənbəyi olan hidrogen istehsalında yüksək səmərəliliyə malikdir.

Alınan elmi nəticələr molibden karbid əsaslı materialların sənaye katalizində tətbiqi üçün geniş perspektivlər açır və bu sahədə aparılacaq gələcək tədqiqatlar üçün əsas baza rolunu oynayır.

ƏDƏBİYYAT

1. Posada-Pérez, S. The bending machine: CO₂ activation and hydrogenation on δ -MoC (001) and β -Mo₂C (001) surfaces / S.Posada-Pérez, F.Viñes, P.J.Ramirez [et al.] // Physical Chemistry Chemical Physics, - 2014. Vol. 16, - p. 14912-14921.
2. Posada-Pérez, S. Fundamentals of methanol synthesis on metal carbide based catalysts: Activation of CO₂ and H₂ / S.Posada-Pérez, F.Viñes, J.A.Rodriguez [et al.] // Topics in Catalysis, - 2015. Vol. 58, - p. 159-173.
3. Posada-Pérez, S. Methane capture at room temperature: adsorption on cubic δ -MoC and orthorhombic β -Mo₂C molybdenum carbide (001) surfaces / S.Posada-Pérez, J.R.S.Politi, F.Illas // RSC Advances, - 2015. Vol. 5, - p. 33737-33746.
4. Posada-Pérez, S. Structure and electronic properties of Cu nanoclusters supported on Mo₂C (001) and MoC (001) surfaces / S.Posada-Pérez, F.Viñes, J.A.Rodriguez [et al.] // Journal of Chemical Physics, - 2015. Vol. 143, - 1114704.
5. Posada-Pérez, S. The conversion of CO₂ to methanol on orthorhombic β -Mo₂C and Cu/ β -Mo₂C catalysts: mechanism for admetal induced change in the selectivity and activity / S.Posada-Pérez, P.J.Ramirez, R.A.Gutierrez [et al.] // Catalysis Science & Technology, - 2016. Vol. 6, - p. 6676-6677.
6. Posada-Pérez, S. Highly active Au/ δ -MoC and Cu/ δ -MoC catalysts for the conversion of CO₂: The metal/C ratio as a key factor defining activity, selectivity, and stability / S.Posada-Pérez,



- P.J.Ramirez, J.Evans [et al.] // Journal of the American Chemical Society, – 2016. Vol. 138, – p. 8269-8278.
7. Posada-Pérez, S. Adsorption and dissociation of molecular hydrogen on orthorhombic β -Mo₂C and cubic δ -MoC (001) surfaces / S.Posada-Pérez, F.Viñes, R.Valero [et al.] // Surface Science, - 2017. Vol. 656, - p. 24-32.
8. Posada-Pérez, S. Highly active Au/ δ -MoC and Au/ β -Mo₂C catalysts for the low-temperature water gas shift reaction: effects of the carbide metal/carbon ratio on the catalysts performance / S.Posada-Pérez, R.A.Gutierrez, Z.Zuo [et al.] // Catalysis Science & Technology, - 2017. Vol. 7, - p. 5332-5342.
9. Politi, J.R.S. Molybdenum carbide surfaces as alternative substrates for the adsorption and activation of CO₂ / J.R.S.Politi, F.Viñes, J.A.Rodriguez [et al.] // Physical Chemistry Chemical Physics, - 2013. Vol. 15, - p. 12617-12625.
10. Rodriguez, J.A. Hydrogenation of CO₂ to Methanol: Importance of Metal-Oxide and Metal-Carbide Interfaces / J.A.Rodriguez, P.Liu, D.J.Stacchiola [et al.] // ACS Catalysis, - 2015. Vol. 5, - p. 6696-6706.
11. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P.Perdew, K.Burke, M.Ernzerhof // Physical Review Letters, - 1996. Vol. 77, - p. 3865-3868.
12. Blöchl, P.E. Projector augmented-wave method // Physical Review B, - 1994. Vol. 50, - p. 17953-17979.
13. Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional with (1/r₆) dispersion corrections // Journal of Computational Chemistry, - 2004. Vol. 25, - p. 1463-1473.
14. Monkhorst, H.J. Special points for Brillouin-zone integrations / H.J.Monkhorst, J.D.Pack // Physical Review B, - 1976. Vol. 13, - p. 5188-5192.
15. Oyama, S.T. The Chemistry of Transition Metal Carbides and Nitrides / S.T.Oyama. -Glasgow: Blackie Academic and Professional, - 1996. - 536 p.

ELECTRON AND STRUCTURAL FORMATION CHARACTERISTICS OF METAL NANOCLUSTER-CARRIER INTERFACIAL PHASE BOUNDARIES IN MOLYBDENUM CARBIDE SURFACES

L.A. Mursalova

The research investigates the catalytic performance of cubic δ -MoC and orthorhombic β -Mo₂C (001) surfaces in CO₂ hydrogenation and water-gas shift (WGS) reactions using Density Functional Theory (DFT) calculations. The study reveals that the metal-to-carbon stoichiometry plays a fundamental role in determining activity, selectivity, and stability. While the β -Mo₂C phase demonstrates high reactivity by spontaneously dissociating CO₂ at room temperature, it suffers from rapid deactivation due to surface poisoning (oxycarbide formation) and low selectivity toward methanol as it favors methane production. In contrast, the δ -MoC surface provides a more stable and selective platform where direct CO₂ dissociation is avoided. The addition of small Cu and Au nanoclusters significantly enhances the catalytic efficiency. Specifically, the Cu/ δ -MoC system acts as a bifunctional catalyst, facilitating CO₂ activation through a redox mechanism, which increases methanol yield by 8-11 times compared to industrial Cu/ZnO models. These findings provide a theoretical foundation for developing cost-effective catalysts for sustainable fuel production and CO₂ utilization.

Keywords: *Density Functional Theory, DFT calculations, methanol synthesis, water-gas shift, CO₂ activation, surface stability, transition state, adsorption energy*



ХАРАКТЕРИСТИКИ ФОРМИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И СТРУКТУРЫ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ МЕЖДУ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОКЛАСТЕРАМИ И НОСИТЕЛЯМИ МЕТАЛЛОВ НА ПОВЕРХНОСТЯХ КАРБИДА МОЛИБДЕНА

Л.А. Мурсалова

В данном исследовании с помощью расчетов на основе теории функционала плотности (DFT) изучены каталитические свойства кубической δ -MoC и орторомбической β -Mo₂C (001) поверхностей в реакциях гидрирования CO₂ и конверсии водяного газа (WGS). Установлено, что стехиометрия металл-углерод играет решающую роль в определении активности, селективности и стабильности катализаторов. Фаза β -Mo₂C проявляет высокую реакционную способность, спонтанно диссоциируя CO₂ при комнатной температуре, однако подвержена быстрой деактивации из-за формирования оксикарбидов и низкой селективности в отношении метанола вследствие интенсивного образования метана. Напротив, поверхность δ -MoC обеспечивает более стабильную платформу, предотвращая прямую диссоциацию CO₂. Нанесение малых нанокластеров Cu и Au значительно повышает каталитическую эффективность. В частности, система Cu/ δ -MoC функционирует как бифункциональный катализатор, способствуя активации CO₂ через окислительно-восстановительный механизм, что повышает выход метанола в 8-11 раз по сравнению с промышленными моделями Cu/ZnO. Полученные результаты закладывают теоретическую базу для разработки экономически эффективных катализаторов для производства экологически чистого топлива и утилизации CO₂.

Ключевые слова: Теория функционала плотности, расчеты DFT, синтез метанола, реакция водяного газа, активация CO₂, стабильность поверхности, переходное состояние, энергетический ландшафт, энергия адсорбции