

**0.1. Евсева С.И. Имитационное моделирование адсорбции димеров на неоднородную поверхность металла методом Монте-Карло**

Исследование механизмов адсорбции ненасыщенных углеводородов на высокоиндексные грани металлов в настоящее время вызывает большой интерес. Это связано с производством новых активных и высокоселективных промышленных катализаторов. Одним из важнейших вопросов катализа является взаимосвязь координированности активного центра с селективностью процесса [1]. Главной задачей проводимых экспериментов является создание на поверхности катализатора активных центров с потенциально меньшей энергией связи углерод-металл [2]. Известно, что поверхность реального катализатора отличается от идеальной наличием различного рода дефектов, самыми распространенными из которых являются структурные. Недавние исследования [3] показали, что наличие регулярных ступенек на твердой поверхности может вызывать существенное изменение в реакционной способности поверхности. Для изучения подобных систем идеально подходит модель решеточного газа. Моделью простого углеводорода (C2-C3) и простейших его производных в данном случае может служить классический димер с двумя ориентациями относительно поверхности, который может занимать один или два адсорбционных центра на поверхности. С учетом вышеизложенного целью данной работы является исследование влияния внешнего давления и температуры на структуру и термодинамические свойства адсорбционного слоя димеров (с учетом возможности двух различных ориентаций относительно поверхности) на грани (410) металла с г.ц.к. решеткой в рамках модели решеточного газа, построенной с учетом ближайших и следующих за ближайшими латеральных взаимодействий с энергиями  $\epsilon$  и  $\omega$  соответственно, а также разницы между теплотами адсорбции сильных и слабых адсорбционных центров ( $\Delta_1$ ) и между величинами теплот адсорбции  $\pi$ - и ди- $\sigma$ -комплекса ( $\Delta$ ). Установлено, что при достаточно низкой температуре с увеличением внешнего давления чистая поверхность непрерывно заполняется адсорбирующимися молекулами, в результате чего формируются фазы, состоящие из чередующихся  $\pi$ - (при  $\Delta \geq 0$ ) или ди- $\sigma$ -комплексов (при  $\Delta < 0$ ) и пустых центров на крайнем ряду террасы. Дальнейшее увеличение давления приводит к последовательному заполнению крайнего и двух средних рядов террасы  $\pi$ -комплексами. Независимо от величины  $\Delta$ , ди- $\sigma$ -комплексы не появляются. Моделирование проводилось с использованием методов Монте-Карло и трансфер-матрицы. Результаты, полученные различными методами, совпадают с точностью до погрешности методов (не более 1%). Таким образом, мы можем гарантировать, что тер-

модинамические характеристики, вычисленные методом Монте-Карло, являются равновесными.

**Список литературы**

- [1] Kravchuk T., Venugopal V., Vattuone L. et al. // The Journal of Physical Chemistry C. 2009. V. 113. N. 49. P. 20881–20889.
- [2] Ajayan P. M. Nanotubes from carbon // Chemical reviews. 1999. V. 99. N. 7. P. 1787–1800.
- [3] Makino T., Okada M., Kokalj A. Adsorption of  $C_2H_4$  on Stepped Cu (410) Surface: A Combined TPD, FTIR, and DFT Study // The Journal of Physical Chemistry C. 2014. V. 118. N. 47. P. 27436–27448.