

## Modelējot ūdeņraža ražošanu uz pakāpienveidīgajām SrTiO<sub>3</sub> perovskīta nanodaļiņu virsmām: *ab initio* skaitliskais pētījums

Maksims Sokolovs<sup>1</sup>, Jurijs A. Mastrikovs<sup>1</sup>, Guntars Zvejnieks<sup>1</sup>, Jevgēnijs A. Kotomins<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Ūdeņraža ražošana izmantojot ūdens sadalīšanu ir svarīgs process zaļajā enerģētikā. Šai reakcijai ir nepieciešams labs katalizators. Stroncija titanāts SrTiO<sub>3</sub> (STO) ir ilgtspējīgs katalizators fotokatalītiskajai ūdens sadalīšanai. Tā aktivitāti var uzlabot, izmantojot daudzskaldņu nanodaļiņas.

Lai saprastu iemeslus, kāpēc daudzskaldņu daļiņu aktivitāte ir augstāka, mēs izmantojam *ab initio* metodes ūdens sadalīšanai uz šīm nanodaļiņām. Mēs izveidojam atomāro modeli divām nanodaļiņu skaldņu veidiem: plakanā {001} virsma un pakāpienveidīgā {110} virsma. Mēs veicām blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) aprēķinus lai novērtētu katalītisko aktivitāti, pielietojot skaitlisko ūdeņraža elektroda (CHE) teoriju kopā ar  $G_{\max}(\eta)$  aprakstu.

Mēs demonstrējam, ka ūdeņraža evolūcijas reakcijai (HER, ūdens sadalīšanās katoda daļā) ir labāki termodinamiski nosacījumi uz plakanas {001} virsmas, bet skābekļa evolūcijas reakcijai (OER, ūdens sadalīšanās anoda daļā) – uz pakāpienveidīgas {110} virsmas. Šie novērojumi ir saskanīgi ar eksperimentāliem datiem. Mēs arī izpētījam vairākus iespējamus OER reakcijas ceļus un atradām termodinamiski izdevīgāko. Tādā veidā mēs labāk izprotam ūdens sadalīšanu gan uz daudzskaldņu, gan uz plakanām virsmām.

### Pateicības

Pētījumu atbalsta EraNet “Engineering of two-dimensional heterostructural photocatalysts for hydrogen generation” (HetCat) projekts; Nr. ES RTD/2023/10. Aprēķini tika veikti izmantojot HLRS klasteri (Štutgarte) DEFTD 12939 projekta rāmjos.

## Modeling of hydrogen production on stepped surfaces of SrTiO<sub>3</sub> perovskite nanoparticles - *ab initio* computational study.

Maksim Sokolov<sup>1</sup>, Yuri A. Mastrikov<sup>1</sup>, Guntars Zvejnieks<sup>1</sup>, Eugene A. Kotomin<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Institute of Solid State Physics, University of Latvia

As an important process for green energy, hydrogen production through water splitting requires a good catalyst. Strontium titanate SrTiO<sub>3</sub> (STO) is a sustainable material for photocatalytic water splitting, the activity of which can be further improved by creating multifaceted nanoparticles.

To better understand the source of the improved activity of multifaceted nanoparticles, we model the reaction using *ab initio* method. We created an atomistic model for the two types of nanoparticles' facets, namely, flat {001} surface and stepped {110} surface, shown in Figure 1. We then performed density functional theory (DFT) calculations as implemented in the Vienna *ab initio* simulation package (VASP). To estimate the catalytic activity, we used the descriptor-based analysis within the computational hydrogen electrode (CHE) framework. The  $G_{\max}(\eta)$  was selected as the descriptor.

We demonstrate that the hydrogen evolution reaction (HER, cathodic part of water splitting) is thermodynamically preferred on the flat {001} STO surface, while the oxygen evolution reaction (OER) is preferred on the stepped {110} surface. These observations are consistent with the experimental data. Moreover, for the OER, we investigate several possible reaction pathways and find the energetically favorable ones. Thus, we shed light on the process of water splitting on both multifaceted as well as cubic nanoparticles.

### Acknowledgments

The study has been financially supported by the EraNet “Engineering of two-dimensional heterostructural photocatalysts for hydrogen generation” (HetCat) project; Nr. ES RTD/2023/10. Calculations have been performed at the HLRS facility (Stuttgart) within the framework of the DEFTD 12939 project.