

Моделовање катализатора – од развијених површина до појединачних атома

Игор Пашти

Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију

Српска академија наука и уметности

Катализа представља један од кључних процеса савремене хемије, енергетике и заштите животне средине. Ефикасност катализатора зависи од његове структуре на различитим скалама – од морфологије и величине зрна, преко природе активних центара, до хемије појединачних атома на површини. Разумевање ових односа могуће је једино кроз детаљно теоријско и рачунарско моделовање, које омогућава да се повежу атомска структура и реактивност.

У овом предавању биће представљен развој приступа моделовању катализатора – од класичних модела развијених површина метала, преко наночестица и хетерогених фазних граница, до појединачних атома везаних за носаче. Биће показано како савремене методе, попут теорије функционала густине (DFT), доприносе разумевању механизма адсорпције и реакција на атомском нивоу, као и како ови увиди воде ка дизајну нових, ефикаснијих и стабилнијих катализатора. Посебна пажња биће посвећена моделима једноатомских катализатора и њиховој улози у развоју материјала будућности за реакције од значаја за конверзију и складиштење енергије.