

Тема дипломной работы:

Компьютерное моделирование структурных и каталитических свойств металлических наночастиц Pd, Pt и их наносплавов с Au и Ag методом функционала плотности

Аннотация дипломной работы:

Работа будет заключаться в численном решении уравнения Шредингера на компьютере с помощью специального ПО для электронов химических систем, таких как молекулы, твёрдые тела, наночастицы. Полученные в результате таких расчетов уровни энергии и формы электронных оболочек позволяют получить информацию о геометрической структуре, энергетике, и других свойствах исследуемых систем, в частности каталитических. Объектом исследования в данной работе, как следует из названия, будут наночастицы переходных металлов и их сплавов. Интерес таких систем заключается в том что их каталитические свойства могут модулироваться их размерами. Актуальность данного направления работ обусловлена тем, что дает понимание принципов работы катализаторов на молекулярном и атомном уровне. Такое понимание крайне важно для целенаправленного совершенствования существующих катализаторов.