

[Akceptuje](#)

W ramach naszej witryny stosujemy pliki cookies w celu świadczenia państwu usług na najwyższym poziomie, w tym w sposób dostosowany do indywidualnych potrzeb. Korzystanie z witryny bez zmiany ustawień dotyczących cookies oznacza, że będą one zamieszczone w Państwa urządzeniu końcowym. Możecie Państwo dokonać w każdym czasie zmiany ustawień dotyczących cookies. Więcej szczegółów w naszej [Polityce Prywatności](#)

[Portal](#) [Informacje](#) [Katalog firm](#) [Praca](#) [Szkolenia](#) [Wydarzenia](#) [Porównania międzylaboratoryjne](#)
[Kontakt](#)



[Laboratoria](#)
[.net](#)
[Innowacje](#)
[Nauka](#)
[Technologie](#)

[Logowanie](#) [Rejestracja](#) [pl](#)

Newsletter

zapisz się



- [Nowe technologie](#)
- [Felieton](#)
- [Tygodnik "Nature"](#)
- [Edukacja](#)
- [Artykuły](#)
- [Przemysł](#)

[Strona główna](#) > [Nowe technologie](#)

Kataliza na bazie nanomateriałów

Nanotechnologia ma coraz większe znaczenie dla badania i rozwijania czystej energii, od produkcji paliwa wodorowego po czyste spalanie. Naukowcy z UE postanowili poprawić wydajność i stabilność nanostrukturalnych materiałów katalitycznych.

Poszukiwania nowych nanostrukturalnych materiałów katalitycznych i udoskonalonych katalizatorów konwencjonalnych wymagają prowadzenia kosztownych eksperymentów opartych na metodach prób i błędów. W efekcie katalizatory charakteryzuje się zwykle tylko pod względem reaktywności, selektywności i stabilności,

Niewiele natomiast wiadomo o ich strukturze w skali atomowej czy zasadach działania. Finansowany

ze środków UE projekt NANO-DESIGN (Computation-driven rational design of MoSx-based desulphurization nanocatalysts) miał na celu uzupełnienie tych braków dzięki opracowaniu skutecznych narzędzi do charakteryzowania katalizatorów.

Aby zbadać katalizę na poziomie podstawowym, uczeni wykorzystali najnowszą metodologię obliczeniową opartą na teorii funkcjonału gęstości (DFT). Opracowali i zoptymalizowali modele obliczeniowe reprezentatywne dla katalizatorów kontaktowych z siarczku molibdenu (MoSx).

Uzyskano obrazy metodą syntetycznej tunelowej mikroskopii skaningowej (STM) dla wszystkich modeli oraz obliczono energie wiążące elektron i rdzeń dla wybranych z nich. Zespół NANO-DESIGN wykorzystał te dane do analiz danych z eksperymentów STM i rentgenowskiej spektroskopii fotoemisyjnej (XPS) układów katalitycznych.

Uczeni ustalili, że miejsca aktywne na krawędzi warstwowego MoSx mają istotne znaczenie dla zrozumienia i udoskonalenia katalizatorów kontaktowych. Ponadto ich ewolucja musi być starannie monitorowana przy pomocy eksperymentów XPS prowadzonych w realistycznych warunkach.

Uczestnicy projektu ocenili przydatność katalizatorów MoSx w zakresie odsiarczania spalin przy pomocy obliczeń DFT. Nanocząstki MoSx posiadały niejednorodne właściwości chemiczne w miejscach brzegowych, a ich reaktywność zmieniała się zależnie od odległości od narożników nanocząstek.

Rezultaty projektu NANO-DESIGN wskazują na znaczenie miejsc aktywnych dla skuteczności katalizatorów na bazie MoSx oraz potrzebę stworzenia jawnych modeli nanocząstek w symulacji katalizy. Co jeszcze istotniejsze, nowe narzędzia do charakteryzowania katalizatorów powinny uitorować drogę do bardziej racjonalnego projektowania katalizatorów umożliwiających odsiarczanie spalin.

Źródło: www.cordis.europa.eu

<http://laboratoria.net/technologie/26727.html>

Informacje dnia: [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu Świat atomów i cząsteczek Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu Świat atomów i cząsteczek Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu Świat atomów i cząsteczek Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#)

Partnerzy