

Sveučilište u Zagrebu
Prirodoslovno-matematički fakultet
Kemijski odsjek

KOLOKVIJ

Karlo Sović,

s Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu

održat će u srijedu 24. rujna u predavaonici P1 (prizemlje zgrade Kemije, Horvatovac 102a) s početkom u 13:15 sati kolokvij pod naslovom:

Ubrzan pristup predviđanju energija adsorpcije u heterogenoj katalizi koristeći proces finog podešavanja temeljnih modela

Predviđanje i opis adsorpcijskih te desorpcijskih procesa ključ je razumijevanja reakcijskih mehanizama u heterogenoj katalizi. Iako ab-initio proračuni nude visoku točnost za određivanje interakcija između adsorbata i adsorbenta, njihova značajna računska zahtjevnost ograničava sveobuhvatno pretraživanje potencijalnih aktivnih mjesta i geometrija adsorbata na površini. Međuatomski potencijali temeljeni na strojnom učenju predstavljaju moćno rješenje za ovaj izazov, omogućujući brza, ali i točna predviđanja energija. Nedavna pojava pred-treniranih temeljnih modela pruža podatkovno učinkovit put za generiranje robusnih, specifičnih potencijala za promatrane sustave kroz proces finog podešavanja (engl. fine-tuning).

Za prikaz učinkovitosti ovog pristupa, provedeno je računalno istraživanje adsorpcije sustava za pretvorbu glicerola u 1,2- te 1,3-propandiol na različitim metalnim površinama u plinovitoj fazi. Konkretno, razvijena je nova metodologija za generiranje modela visoke učinkovitosti koristeći proces finog podešavanja na temeljnom modelu MACE-MP-0b3 s ciljanim skupom podataka dobivenim iz ab-initio proračuna. Rezultati pokazuju da predložena metodologija daje model koji točno reproducira energije adsorpcije usporedive sa DFT proračunima, uz značajnu redukciju komputacijskog utroška. Nadovezujući se na te rezultate, predložen je i novi, ubrzani tijek rada za istraživanje površina katalizatora i predviđanje energija adsorpcije, čime se omogućuje učinkovitije istraživanje složenih reakcijskih mehanizama u području heterogene katalize i šire.