



OBAVIJEST

Javna obrana teme doktorskog rada studentice
poslijediplomskog sveučilišnog studija BIOFIZIKA

ANTONIJE MRAVAK, mag. phys.

pod naslovom

“Dizajn novih heterogenih katalizatora za obnovljivu energiju”

održat će se u četvrtak, **19. siječnja 2023., u 10.00 sati** na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Splitu (dvorana B3-48) pred članovima Stručnog povjerenstva:

1. **prof. dr. sc. Ante Bilušić**, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu - predsjednik,
2. **prof. dr. sc. Leandra Vranješ Markić**, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu - članica,
3. **dr. sc. Štefan Vajda, dr. habil.**, Institut fizikalne kemije J. Heyrovsky u Pragu, član.

Mentorica i komentor:

prof. dr. dr. h. c. Vlasta Bonačić Koutecky - Centar izvrsnosti za znanost i tehnologiju – integracija Mediteranske regije (STIM) pri Interdisciplinarnom centru za naprednu znanost i tehnologiju (ICAST) i **prof. dr. sc. Mile Dželalija** - Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu).

Pozivaju se svi zainteresirani da prisustvuju javnoj obrani.



Naslov:

Dizajn novih heterogenih katalizatora za obnovljivu energiju

Sažetak:

Upotreba alternativnih izvora energije umjesto uobičajeno korištenih fosilnih goriva omogućuje dekarbonizaciju industrijskih procesa i otvara put održivoj budućnosti. Razvoj katalitičkih materijala s ciljem eliminacije štetnih plinova i proizvodnje korisnih produkata ključan je u kontekstu zelene tehnologije. Cilj istraživanja je upravo dizajn i razvoj novih heterogenih katalizatora s direktnom primjenom u razvoju materijala za obnovljivu energiju. U tu svrhu koristi se teorija funkcionala gustoće (DFT) koja omogućuje istraživanje geometrijske i elektronske strukture materijala te računanje energijskog profila reakcije. Modifikacija veličine, morfologije i sastava katalizatora na nanoskali omogućuje preciznu kontrolu njegove aktivnosti i selektivnosti. Stoga, uz detaljni mehanistički uvid u katalitičke reakcije, ispitiva se odnos strukture i aktivnosti katalizatora. Fokus istraživanja je na povećanju efikasnosti i unaprjeđenju gorivih ćelija u smislu proizvodnje i pohrane vodika te eliminacije ugljikova monoksida. Također, s ciljem eliminacije ugljikova dioksida istražuje se njegova pretvorba u produkte s dodanom vrijednosti. Novi materijali na kojima se temelji dizajn su metalo-organske mreže (MOF-ovi), zeoliti te klasteri na površini. Teorijski rezultati su nadopunjeni eksperimentima nastalima u suradnji s međunarodnim istraživačima te stimuliraju proizvodnju i ispitivanja novih katalitičkih materijala s poboljšanim svojstvima.

Title:

Design of new heterogeneous catalysts for renewable energy

Abstract:

The use of alternative energy sources, instead of conventional fossil fuels, enables the decarbonization of industrial processes and paves the way to a sustainable future. The development of catalytic materials with the goal of eliminating harmful gases and producing useful products is crucial in the context of green technology development. The aim of the present study is precisely design and development of new heterogeneous catalysts with direct application towards the development of materials for renewable energy. For this purpose, the density functional theory (DFT) has been used, which enables the investigation of the geometric and electronic structure of the materials and the construction of reaction energy profiles. Modifying the size, morphology, and composition of the catalyst on the nanoscale enables precise control of its activity and selectivity. Therefore, along with a detailed mechanistic insight into the catalytic reaction, the relationship between the structure and activity of the catalyst has been examined. The focus of the investigation is on the increase of efficiency and improvement of fuel cells through the production and storage of hydrogen, and the elimination of carbon monoxide. In addition, with the goal of carbon dioxide reduction, its conversion into value-added products has been examined. The materials design has been based on metal-organic frameworks (MOFs), zeolites, and clusters deposited on the surface. Theoretical results are complemented with experiments conducted by international experts, thus stimulating the production and testing of new catalytic materials with improved properties.