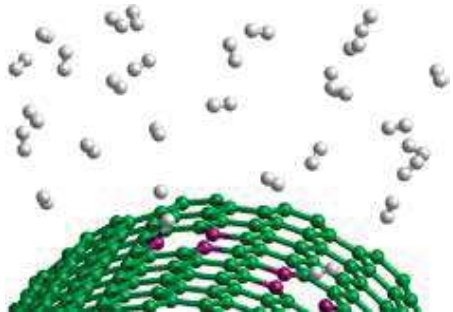


Idrogenazione dell'L-Arabinosio (componente dell'emicellulosa) su catalizzatore di Ru in fase acquosa

Attivazione dell'idrogeno molecolare in corrispondenza di siti difettivi contenenti azoto di un nanotubo di carbonio.



LINEA DI RICERCA 15

CHIMICA COMPUTAZIONALE E CATALISI

Le reazioni chimiche sono processi complessi che avvengono attraverso una serie di eventi elementari; spesso affinché un essere umano ne possa apprezzare il decorso queste devono avvenire in presenza di un catalizzatore, una sostanza in grado di incrementare la velocità di reazione del processo. Le interazioni tra le specie reagenti ed il catalizzatore sono alla base dei meccanismi di reazione dei processi catalitici. Uno dei metodi più efficaci per analizzarli a livello atomico è oggi la chimica computazionale.

L'attività scientifica a riguardo può essere suddivisa in due grandi filoni: la modellizzazione di meccanismi di reazione di processi industrialmente rilevanti, con particolare attenzione per i processi verdi di conversione delle biomasse e l'analisi di materiali di nuova generazione con potenziale applicazione come catalizzatori.

Per ulteriori informazioni rivolgersi a:

dario.duca@unipa.it

