

Abstrakt

Podepřené platinové nanočástice jsou důležité heterogenní katalyzátory pro velkou řadu průmyslových procesů, nicméně jejich aktivita je velmi ovlivněna difúzí částic a slinováním, které vedou k deaktivaci katalyzátoru. Pro stabilizaci platinových nanočástic je potřeba detailní znalost reakčních interakcí mezi platinou a jejím podpírajícím materiálem, jako je např. hydroxylované křemičité povrchy a defektní zeolity. Realistických simulací těchto katalyzátorů relevantních časových úseků může být dosaženo pomocí potenciálů neuronových sítí (NNP), které zachovávají přesnost *ab initio* metod za zhruba 10^3 krát menší výpočetní cenu v porovnání s výpočty za pomoci teorie funkcionálu hustoty (DFT). Ačkoliv mají NNP jen omezenou přenosnost na systémy, které nebyly zahrnuty v tréninkové databázi. Proto, v této práci jsou důkladně testovány nově vyvinuté SchNet NNP. Tyto potenciály byly trénovány na rozmanité sadě platiny a defektních zeolite a hydroxylovaných křemičitých površích. Nejprve byla DFT databáze rozšířena pomocí aktivního učení pro přesné modelování povrchů α -quartz, MWW a 2D zeolitové vrstvy IPC-1P (produkt hydrolyzy zeolite UTL). Potenciály vytrénované na nové DFT databázi byly poté testovány pomocí simulací molekulové dynamiky systémů, které byly dosud neviděné během trénovacího procesu. Tyto systémy obsahovaly zeolity s křemíkovým hnízdem (MOR, FER) se samostatnými platinovými atomy a klastry od Pt₃ do Pt₁₉. Přesnost těchto potenciálů neuronových sítí byla dále vyhodnocována pomocí větších platinových klastrů (až do Pt₃₈) a hypotetická vrstva silicatene (s křemičitými hnízdami) jako testovací příklady náročné přenosnosti těchto potenciálů. Na závěr, aplikační potenciál našich potenciálů byl předveden na studii aglomerace malých platinových klastrů v CHA jako funkce velikosti částic (Pt₁ až Pt₅), teploty (400-1200 K) a koncentrace defektů (nedefektní vs. CHA s křemičítým hnízdem).