Métodos de simulación de primeros principios

Sistemas catalíticos nanoestructurados

Autores

Diego Julián Rodríguez Patarroyo, Julián Andrés Salamanca Bernal, Luz Helena Camargo Casallas



Sinopsis

En un mundo donde la eficiencia y la sostenibilidad son prioridades crecientes, el estudio de sistemas catalíticos nanoestructurados se presenta como una solución prometedora para los desafíos contemporáneos en la industria fisicoquímica. Este libro explora los sistemas catalíticos nanoestructurados, fundamentales para mejorar la eficiencia en procesos químicos y reducir emisiones contaminantes. A través de avanzadas técnicas de simulación, como la Teoría del Funcional Densidad (DFT), Dinámica Molecular de Car-Parrinello y simulación de Montecarlo, se ofrece una guía detallada para optimizar la interacción de nanopartículas con gases críticos como el CO, el OH y el O2, elementos clave en la industria fisicoquímica. El contenido se divide en seis capítulos que abarcan desde los conceptos básicos de catálisis hasta estudios de casos prácticos, como la oxidación de CO, ilustrando la aplicación de teorías y métodos discutidos. El libro también analiza la interacción entre nanopartículas de metales nobles y óxidos de transición, destacando sus aplicaciones en sectores como la petroquímica y la automotriz. Dirigido a investigadores, ingenieros químicos y estudiantes avanzados en ciencias físicas, químicas y de materiales, este texto es una referencia esencial para quienes buscan innovar y mejorar la eficiencia de procesos catalíticos.

Impreso

Año de publicación: 2024

Presentación: Con solapas (Libro)

Tamaño: 24 x 17 cm

Total de páginas numeradas: 148 Páginas

ISBN13: 9789587877175

$50.000 COP

2026 © Sistema Integrado de Metadata Estandarizada desarrollado por Hipertexto - Netizen

Con un enfoque teórico y práctico, proporciona las herramientas necesarias para avanzar hacia soluciones más sostenibles en la industria moderna.

DR

Sobre el autor

Diego Julián Rodríguez Patarroyo

JS

Julián Andrés Salamanca Bernal

LC

Luz Helena Camargo Casallas

IBD

Año de publicación: 2024

Presentación: Libro

Tamaño: 24 x 17 cm

Número de páginas del contenido principal: 150 Páginas

ISBN13: 9789587877175

$54.349 ARS

E-Book

Año de publicación: 2024

Presentación: EPUB (Digital: descarga y online)

Número absoluto de páginas: 148 Páginas

ISBN13: 9789587877199

$40.000 COP



Palabras clave

Simulación; Primeros principios; Eficiencia; Sostenibilidad; Sistemas catalíticos; Nanoestructurados

2026 © Sistema Integrado de Metadata Estandarizada desarrollado por Hipertexto - Netizen