

## Frontier Chemistry Center 講演会フロンティア化学教育研究センター



演 題: Computations, Modeling and Catalysis. Chemical Complexity and Performance Metrics in Catalysis.

講 師: Prof. Evgeny A. Pidko Delft University of Technology, The Netherlands

日時: 2023年7月27日(木) 14:45~16:15 2023年7月27日(木) 16:30~18:00

## **X**Zoom online platform

Zoom URL: https://zoom.us/j/5228796543

Meeting ID: 522 879 6543

## 要旨:

Catalysis plays a pivotal role in all chemical strategies towards novel more efficient and sustainable chemical conversion processes for the valorization of renewable feedstocks such as biomass and CO2. Traditionally, catalyst development has predominantly relied on trial-anderror approaches. The grand challenge in the field is to make a step towards the rational design of efficient catalysts for a given chemical reaction. This on one hand requires a deep insight into the active site structure, the mechanism of their action, and evolution under operating conditions This seminar is focused on recent efforts in the computational catalysis methodologies to resolve active site structures and get an insight into the challenging and rare-event chemistry of the catalysis.

本講演は、大学院総合化学院『化学研究先端講義(修士課程選択科目)/ 総合化学特別研究第二(博士後期課程選択科目)』の一部として認定されています。

主催: 北海道大学大学院総合化学院

共催: 北海道大学大学院工学研究院フロンティア化学教育研究センター

連絡先: 触媒科学研究所 鳥屋尾 隆(011-706-9165)