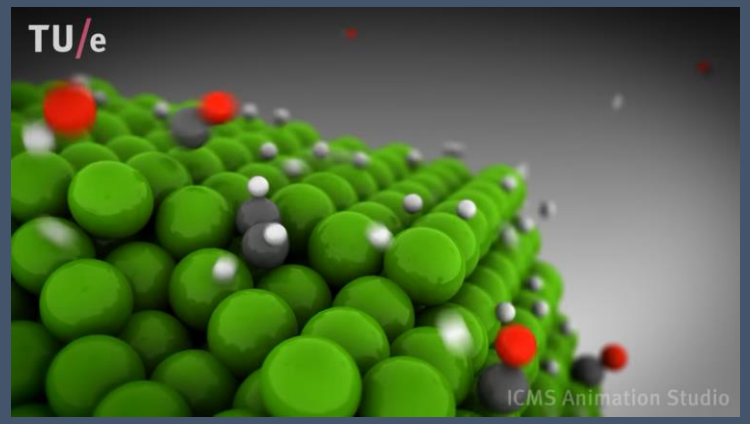
Simulering av Fisher-Tropcsh prosessen ved bruk av tetthets-functional-teori (DFT)

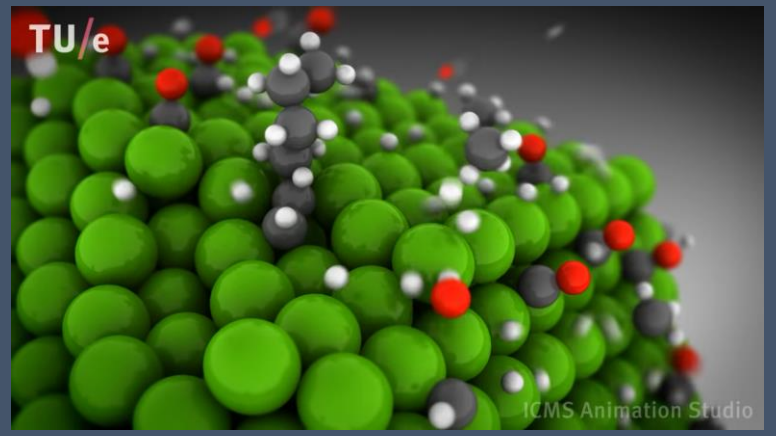
Navn: Christoffer Askvik Faugstad

Veileder: Jaakko Akola

Katalyse

- Forstå mekanismer
- Bedre og andre katalyematerialer

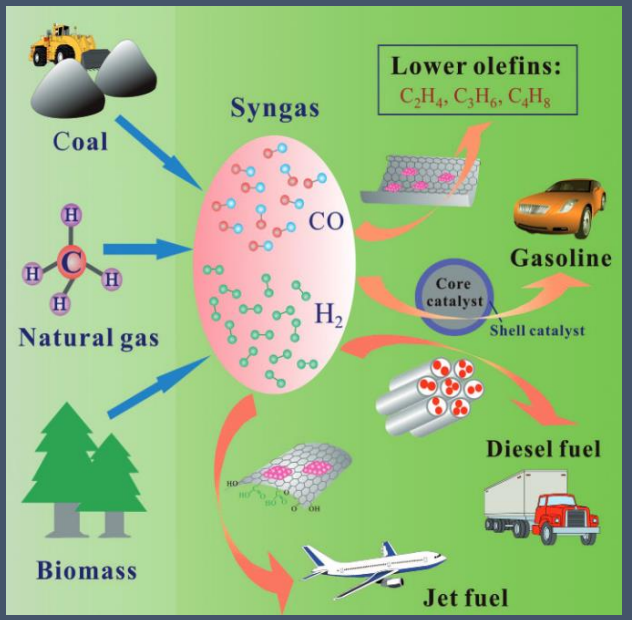




https://doi.org/10.1039/C1CY00118C

Fisher-Tropch

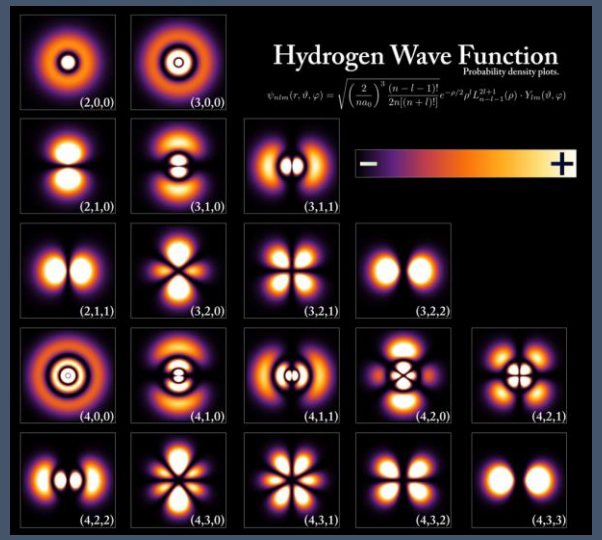
- Omgjøring CO og H2
- Produksjon av drivstoff og kosmetiske produkter



https://doi.org/10.1002/cctc.201000071

Tetthets-Funktional-Teori

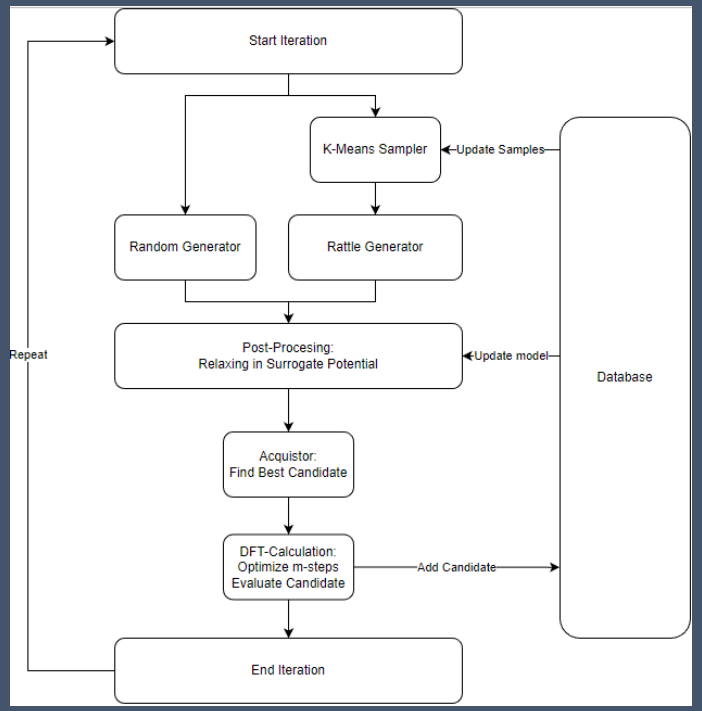
- Elektrontettheten gir alle egenskaper
- Kohn-Sham ligningene
- Tunge beregninger



https://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital

Maskinlæring og Globale søk

- Finne grunn tilstand
- Lært potensial
- Bedre og automatisk generering av strukturer



Gjort så langt