**PROF. KONSTANTIN NEYMAN**
**FACULTY OF CHEMISTRY**
**UNIVERSITY OF BARCELONA, SPAIN**

# „*In-silico* design of bimetallic nanocrystals”

Bimetallic particles (nanoalloys) often
become systems of choice for various applications.

Determining atomic ordering in nanoalloys,

which largely defines their properties, is very challenging.

We developed a method to search for thermostable atomic orderings in nanoalloys by first-principles (DFT) calculations combined with a topological description

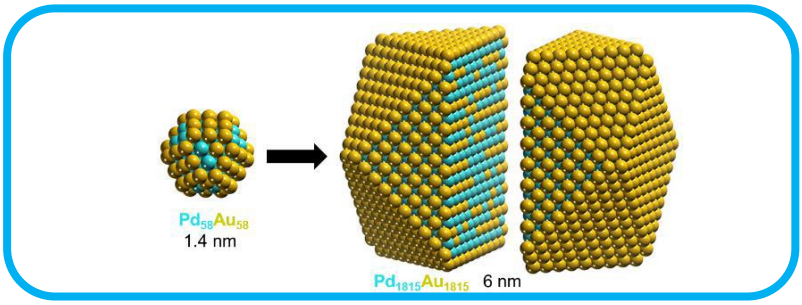
The method allows 1) to reliably predict energetically most stable in vacuum structures of bimetallic crystallites with up to thousands atoms

The method allows 2) to estimate how their surface atomic ordering will be modified in a given reactive environment



*Проект BG05M2OP001-2.009-0028 "Постигане на оптимална среда за обучение, научни изследвания, иновации и устойчиво развитие на човешкия капитал в сферата на химическите науки: Адаптиране на образованието днес за утрешния ден", финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.*

The talk overview our recent results of application of this novel approach to nanoalloys of Pd[1,2,4,5], Pt[6-8] and Ni[3] with *d*- and *s, p*-metals.




Usage of this method can radically accelerate design of tailor-made nanoalloys for broad variety of technological needs and deepen general understanding of the bonding in nanoalloys.




*Проект BG05M2OP001-2.009-0028 "Постигане на оптимална среда за обучение, научни изследвания, иновации и устойчиво развитие на човешкия капитал в сферата на химическите науки: Адаптиране на образованието днес за утрешния ден", финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.*