

Projekt 3.13. Rozwój nowych technik wbudowywania pozwalających na dokładne obliczenia kwantowochemiczne dla reakcji na powierzchniach metalicznych

Promotor: Dr hab. Adam Kubas, prof. instytutu/Promotor pomocniczy: Dr Aleksandra Siklitckaia

Nazwa zespołu IChF PAN: Zespół 20: Kataliza kooperatywna

www: <http://coopcat.pl>

Opis:

Proponowany temat pracy doktorskiej skupia się na rozwoju nowych technik wbudowywania, które pozwolą na zastosowanie metody sprzężonych klasterów (metody uznawanej dziś za tzw. "złoty standard" w chemii obliczeniowej) do obliczeń związanych z powierzchniami metalicznymi. Praca będzie się w szczególności opierać na rozszerzeniu funkcjonalności technik wbudowywania rozwiniętych wcześniej dla tlenków metali przejściowych (A. Kubas et al. J. Phys. Chem. Lett. 2016, 7, 4207 and A. Kubas et al. J. Chem. Theory Comput. 2018, 14, 4320). Wykazano, że powyższe podejście pozwala na uzyskanie tzw. "dokładności chemicznej" (błąd <1 kcal/mol) w obliczeniach dla reakcji chemicznych na powierzchniach ciał stałych jak również pozwala na obliczenia odpowiedzi spektroskopowej ciał stałych i cząsteczek na nich zaadsorbowanych (UV-Vis, IR, rRaman). Taka dokładność i uniwersalność metody jest w praktyce bardzo trudna do osiągnięcia istniejącymi metodami periodycznymi bazującymi w większości na teorii funkcjonału gęstości. Wybrana kandydat zaimplementuje nowy schemat wbudowywania i porówna wyniki uzyskiwane z jego użyciem z istniejącymi schematami obliczeń. W kolejnym kroku, jej/jego zadaniem będzie zbadanie roli domieszek metalicznych w reakcjach selektywnego uwodornienia. Student(ka) będzie miał(a) możliwość odwiedzenia współpracujących z nami grup badawczych w Karlsruhe Institute of Technology (Niemcy) i University College London (Wielka Brytania).

Cel projektu:

- (1) Rozwinięcie metody wbudowywania, która pozwoli na zastosowanie dokładnych metod chemii kwantowej w opisie procesów katalitycznych na powierzchniach metalicznych
- (2) Zbadanie roli domieszek w reakcji chemoselektywnego uwodornienia związków nienasyconych z użyciem katalizatorów niklowych.

Wymagania:

- ukończone studia magisterskie z zakresu chemii lub fizyki
- doświadczenie w obliczeniach metodami kwantowymi lub z użyciem pól siłowych
- znajomość przynajmniej jednego języka programowania (np. C++, Fortran) lub języka skryptowego (np. Python, Bash)
- dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie