

Projekt 6.5. Obliczenia stabilności termodynamicznej i właściwości w warunkach wysokiego ciśnienia dla fluorków tlenu i siarki

Promotor: dr. hab. Paweł Strąk / dr. hab. Dominik Kurzydłowski

Instytut: IWC PAN

Jednostka organizacyjna: NL-3 Laboratorium Krystalizacji

www: <https://www.unipress.waw.pl/growth/index.php/theory/general>

Opis:

Badanie materii poddanej działaniu ciśnień przekraczających 1 GPa (= 10 kbar) jest dynamicznie rozwijającą się oraz interdyscyplinarną dziedziną łączącą fizykę, chemię, geologię, astronomię oraz biologię. Przemiany obserwowane w tych warunkach często różnią się w zasadniczy sposób od tych obserwowanych w normalnych warunkach. Z tego powodu badania wysokociśnieniowe pozwalają na lepsze zrozumienie mechanizmów reakcji chemicznych oraz fundamentalnych pojęć używanych do opisu materii, takich jak promień atomowy, elektroujemność, stopień utlenienia itp.

Proponowany projekt badawczy ma na celu zbadanie wpływu wysokich ciśnień na właściwości chemiczne i fizyczne układów bogatych we fluor. Pierwiastek ten posiada unikalną reaktywności nawet w normalnych warunkach, dodatkowo zaś niedawne badania wskazują, iż chemia fluoru staje się jeszcze bardziej ciekawa w warunkach wysokociśnieniowych

Cel projektu:

Celem projektu jest przebadanie reaktywności fluoru w ciśnieniach przekraczających 1 GPa (= 10 kbar). Niedawne prace wskazały, iż użycie tego pierwiastka jako reagenta w reakcjach wysokociśnieniowych powinno umożliwić otrzymanie egzotycznych związków takich jak NF₅. Celem zaplanowanych obliczeń jest poznanie reaktywności fluoru względem elektroujemnych niemetali: tlenu i siarki. W szczególności zostanie przebadana równowaga pomiędzy preferencją do tworzenia wiązań kowalencyjnych i jonowych.

Wymagania:

- ukończone studia magisterskie na kierunku chemia, fizyka, inżynieria materiałowa lub pokrewnym w dniu rozpoczęcia prac w projekcie
- doświadczenie w modelowaniu z wykorzystaniem metod mechaniki kwantowej
- mile widziane doświadczenie w przeprowadzaniu obliczeń z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości (DFT)