

Projekt 3.14 Uwzględnienie oddziaływań magnetycznych w hybrydowych obliczeniach QM/MM dla katalizy i spintroniki

Promotor: dr Aleksandra Siklitskaia / dr hab. Adam Kubas, profesor instytutu

Instytut: Chemii Fizycznej

Zespół: Zespół 20. Kataliza kooperatywna - dr hab. Adam Kubas, profesor instytutu

www: <http://coopcat.pl>

Opis:

Hybrydowe metody chemii kwantowej / mechaniki molekularnej (QM/MM) stały się niezastąpione przy obliczaniu właściwości dużych układów chemicznych, takich jak białka lub katalizatory na nośnikach. Podejście QM/MM pozwoliło na uzyskanie nowej fundamentalnej wiedzy o nanoświecie. W ramach tego podejścia, region układu najważniejszy z punktu widzenia chemii badanego procesu jest traktowany w pełni na poziomie QM z możliwością zastosowania metod wysokiego poziomu, takich jak najnowocześniejsze metody sprzężonych klastrów (patrz np. A. Kubas i in. J. Phys. Chem. Lett 2016, 7, 4207). Reszta systemu jest traktowana w przybliżeniu, zazwyczaj jako zbiór ładunków punktowych zawartych w hamiltonianie QM, często z uwzględnieniem odpowiedzi ładunków na zmianę gęstości elektronowej części QM. Chociaż podejście QM/MM daje doskonałe wyniki w przewidywaniu lokalnej reaktywności chemicznej, aktualnie dostępne sformułowania nie pozwalają na uwzględnienie oddziaływań kwantowych na dużych odległościach. Naszym najnowszym osiągnięciem jest model analityczny długozasięgowych efektów elektrostatycznych na powierzchniach metalicznych. W tym przypadku metaliczne stany powierzchniowe są podzielone na dwie części: typowe stany objętościowe 'bulk', na które chemia powierzchni nie ma wpływu, oraz drugą, najważniejszą część – stany powierzchniowe Tamma. Model analityczny pozwala na wygenerowanie pola ładunków punktowych do wykorzystania w obliczeniach QM/MM dla reakcji katalitycznych na powierzchniach metalicznych. Opracowane podejście nie obejmuje jednak oddziaływań magnetycznych, co jest poważną wadą podczas badania otwartopowłokowych metali przejściowych i ich kompleksów osadzonych na powierzchniach metalicznych ważnych w katalizie i spintronice.

Spodziewamy się, że interakcja Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida będzie siłą napędową powstawania wielu zjawisk w silnie skorelowanych materiałach. Oddziaływanie zlokalizowanego momentu magnetycznego z metalicznym nośnikiem powoduje powstanie stanu wielociałowego Kondo. W literaturze przedmiotu brak jest modelu oddziaływania układu dwóch momentów magnetycznych umieszczonych na powierzchni Kondo lub Kroniga-Penneya w przestrzeni rzeczywistej, który byłby łatwy do zastosowania w chemii kwantowej. Dostępne są jedynie jednowymiarowe wyniki dla łańcucha Kondo opublikowane w ostatnim czasie (Moro-Lagares i in., Nat. Com. 2019, 10, 2211). Należy przemyśleć aktualne osiągnięcia w dziedzinie spintroniki, fizyki materiałów przewodzących i chemii powierzchni i zbudować model, który będzie akceptowalnym kompromisem wszystkich teorii połączonym z niezbędnym stopniem dokładności teoretycznej.

Tematem badań będzie rozwój czysto teoretycznego podejścia matematycznego z wiedzą zarówno z chemii powierzchni, jak i fizyki materii skondensowanej, połączone z najnowocześniejszymi metodami obliczeniowymi.

Cel projektu:

Uwzględnienie oddziaływania Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida w istniejącym modelu analitycznym, który pozwala na obliczenie odpowiedzi gęstości ładunku powierzchni metalicznej na obecność zaadsorbowanych molekuł.

Wymagania:

- ukończone studia II stopnia z fizyki lub nauk pokrewnych (matematyka, chemia etc.),
- doskonała znajomość fizyki ciała stałego, fizyki układów metalicznych, analizy funkcjonalnej i rachunku zaburzeń,
- znajomość języka angielskiego pozwalająca na komunikację wyników badań oraz czytanie literatury fachowej,
- zaawansowana znajomość przynajmniej jednego języka programowania lub języka skryptowego.