KRAKOWSKA INTERDYSCYPLINARNA SZKOŁA DOKTORSKA

Załącznik nr 1 do Ogłoszenia o rekrutacji
o której mowa w §5 ust. 1 lit. a

Zgłoszenie tematu badawczego realizowanego w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, dyscyplina nauki chemiczne

Rok akademicki 2021/2022

1	tytuł/stopień naukowy, Nazwisko i imię promotora, jednostka, adres e-mail	**Dr hab. RenataTokarz-Sobieraj** Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk renata.tokarz-sobieraj@ikifp.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	----
3	Temat pracy badawczej + krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	**Oddziaływanie heteropolizwiązków z nośnikami – obliczenia DFT.** Przedmiotem badań w projekcie są szeroko pojęte heteropolizwiązki (kwasy, sole) o różnorodnej geometrii (aniony Keggina, Well-Dawsona) i składzie chemicznym, modyfikowane w pozycji: jonu centralnego, metalu addenda, czy jonu kompensującego. Celem projektu jest badanie wpływu wybranego nośnika na strukturę katalizatora i jego właściwości fizykochemiczne np. charakter centrów aktywnych, kwasowość. Modelowanie przeprowadzone zostanie przy zastosowaniu metody DFT, przy użyciu zarówno modelu klasterowego jak i metod periodycznych. Do obliczeń wykorzystane zostaną ogólnodostępne pakiety obliczeniowe Turbomole, Gausian, VASP. Wyznaczone parametry geometryczne i teoretyczne tj. widma spektroskopowe, populacja i spinowość centrów aktywnych posłużą do znalezienia korelacji pomiędzy strukturą elektronową i/lub geometryczną katalizatora a jego właściwościami katalitycznymi. Odrębnym etapem będzie opis wybranych etapów reakcji katalitycznej z udziałem heteropolizwiązków.
4	Wymagania w stosunku do kandydata	Obsługa programów komputerowych do obliczeń kwantowo-chemicznych
5	Wskazanie źródeł finansowania	IKiFP PAN

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	**Dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj** Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences renata.tokarz-sobieraj@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation,e-mail address	
3	Research subject Title + Short description, up to 250 words	**Interaction of heteropoly compounds with support - DFT calculations.** The subject of research in the project are heteropoly compounds (acids, salts) of various geometry (Keggin, Well-Dawson anion) and chemical composition, modified in the position of: the central ion, metal addenda or compensating ion. The aim of the project is to study the influence of the selected support on the geometric and electronic structure of catalysts and its physicochemical/catalytic properties e.g. the nature of the active sites, acidity. Modeling will be carried out using the DFT method, using both the cluster model and periodic methods. The computing packages Turbomole, Gausian, VASP will be used for calculation. The geometric and theoretical parameters: spectroscopic spectra, population and spin of active centers will be used to find a correlation between the electronic or geometric structure of the catalyst and its physicochemical/catalytic properties. A description of selected steps of the catalytic reaction with heteropoly compounds as a catalyst will be a separate step of the proposed research.
4	Additional requirements to the candidate	Support for computer programs for quantum chemical calculations
5	Sources of financing	ICSC PAS