

Ankieta Tutora SMP

Stan na: czerwiec 2021 r.

1. Proponowana tematyka (hasłowo):

Tematyka: modelowanie i badanie centrów aktywnych w tlenkowych układach katalitycznych (m.in. zeolitach), badanie i modelowanie adsorpcji w materiałach porowatych (np. zeolity, MOF – sieci metaloorganiczne). Warsztat: obliczenia kwantowochemiczne, obliczenia mechaniką molekularną, współpraca z grupami eksperymentalistów (i obliczeniowców).

2. Jak będzie wyglądała współpraca w ramach tutorialu ?

Spotkania z tutorem, możliwość współpracy z doktorantem/opiekunem (w zależności od tematyki, w miarę możliwości czasowych studenta), okazje do udziału w seminariach zespołowych.

3. Jakiego typu praca roczna może być wykonywana ?

Praca roczna może być literaturowa lub badawcza. Badawcza może być realizowana samodzielnie lub we współpracy z tutorem/doktorantem/opiekunem. W zależności od preferencji może mieć charakter teoretyczny/obliczeniowy lub eksperymentalny (we współpracy w ramach grupy lub z innymi zespołami).

4) Jaka jest proponowana przez tutora tematyka prac rocznych?

W ogólności prowadzimy badania materiałów porowatych dwojakiego rodzaju: prokatalityczne oraz dotyczące adsorpcji. Jednakże w ramach dostępnych metod oraz możliwości można rozważyć rozszerzenie tej tematyki. W przypadku uzyskania wyników możliwych do opublikowania (niektóre tematy są zaawansowane) będzie możliwy udział w publikacji.

Przykładowa aktualna tematyka:

- „Badania adsorpcji wybranych cząsteczek w materiałach MOF” (literatura i ewent. badania, obliczenia, temat zaawansowany)
- „Badanie mechanizmu odwodnienia etanolu na zeolitach” (obliczenia, temat zaawansowany)
- „Aktywacja wiązania C-H – aktualne wyzwania” (literatura i ewent. obliczenia)

Przykładowe zrealizowane prace roczne:

- „Specjacja centrów kwasowych w materiałach o strukturze MWW” (literatura i modelowanie)
- „Modelowanie oddziaływania cząsteczki H_2 z centrami kationowymi Cd^{2+} i Zn^{2+} ”
- „Aktywacja cząsteczki acetyleny przez jony o konfiguracji d10 bloku 10, 11 i 12 – tego i ocena przydatności prostych modeli.”

5) Jaka jest aktualna tematyka badań naukowych/współpracy międzygrupowej tutora?

Aktualna tematyka obejmuje:

- modelowanie etapów procesów przemiany metanolu/etanolu do węglowodorów (M/ETH) – współpraca
- modelowanie adsorpcji małych cząsteczek (metanolu, wody, dwutlenku węgla, azotu, węglowodorów) w materiałach porowatych (zeolity, MOFy) za pomocą programu RASPA – współpraca z prof. Sofią Calero (Eindhoven, Holandia)
- modelowanie procesów związanych z fotokatalitycznym rozkładem wody (*water splitting*) w ramach międzynarodowego projektu (*COST action*)

6) Jaka wiedza byłaby przydatna przed rozpoczęciem współpracy z tutorem? Czy tutor wymaga/zaleca odbycie konkretnych kursów, lub zdobycie konkretnych umiejętności przed/na samym początku współpracy?

Dobór zalecanych kursów zależy od preferencji kandydata i ustalany będzie w trybie indywidualnym w porozumieniu ze studentem. Punktem wyjścia na pierwszym stopniu to moduły „chemia nieorganiczna i strukturalna” oraz „chemia fizyczna i teoretyczna” (studenci chemii wybierają dwa z czterech dostępnych). Typowy zestaw kursów przewidzianych dla drugiego stopnia zawiera panel nanochemia i kataliza, ale w ramach indywidualizacji można ten zestaw zmieniać, bądź realizować w ogóle inny panel. Często przydatne są kursy przewidziane dla kierunku fizyka (w ramach potrzeb, w miarę możliwości w zastępstwie kursów dla chemii). Możliwe jest też realizowanie pewnych kursów awansem.

7) Jakie jest podejście tutora do ewentualnej współpracy ze studentem: nastawione na specjalizację w danej dziedzinie czy bardziej interdyscyplinarne? Czy tutor może podać przykłady swoich publikacji popularnonaukowych (ze szczególnym uwzględnieniem publikacji interdyscyplinarnych)?

Oba podejścia są możliwe. Specjalizacja w wąskiej dziedzinie (modelowanie molekularne) lub współpraca w ramach grupy lub z innymi zespołami (synteza i modyfikacja materiałów porowatych, badania spektroskopowe, katalityczne, badanie adsorpcji i inne).

8) Przykładowe publikacje

1. G. Jajko, J. J. Gutiérrez-Sevillano, A. Sławek, M. Szufła, P. Kozyra, D. Matoga, W. Makowski, S. Calero „Water adsorption in ideal and defective UiO-66 structures”, *Microporous and Mesoporous Materials*, wysłane.
2. G. Jajko, P. Kozyra, M. Strzempek, P. Indyka, M. Zając, S. Witkowski, W. Pi-skorz „Structural Studies of Aluminated form of Zeolites—EXAFS and XRD Experiment, STEM Micrography, and DFT Modelling" *Molecules*, 26 (2021) 3566, 1-20.

3. G. Jajko, K. Tarach, K. Góra-Marek, P. Kozyra, W. Piskorz „Toward the Mechanism of o-Xylene Isomerization in Selected Zeolites of Different Si/Al Ratios and Channel Sizes—Experiment Corroborated by Periodic DFT + D Simulations" *J. Phys. Chem. C*, 2021, 125, 19, 10334–10348.
4. Broclawik, P. Kozyra, M. Mitoraj, M. Radoń, P. Rejmak „Zeolites at Molecular Level: What Can be Learned from Molecular Modeling" *Molecules*, 26 (2021) 1511, 1-33.
5. E. Broclawik, J. Datka, B. Gil, P. Kozyra, „T-O-T Skeletal Vibration in CuZSM-5 Zeolite: IR Study and Quantum Chemical Modeling", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2 (2000), 401.
6. P. Kozyra, W. Piskorz „Spin-Resolved NOCV Analysis of the Zeolite Framework Influence on the Interaction of NO with Cu(I/II) Sites in Zeolites", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17 (2015) 13267-13273.
7. P. Kozyra, W. Piskorz „A Comparative Computational Study on the Hydrogen Adsorption on the Ag⁺, Cu⁺, Mg²⁺, Cd²⁺, and Zn²⁺ Cationic Sites in Zeolites", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18 (2016) 12592-12603.

9) Strona www

<http://zeochem.chemia.uj.edu.pl/kozyra>