

Ankieta Tutora SMP

Stan na: styczeń 2019 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), udział 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.

Przykładowa tematyka:

- „Badania adsorpcji wody w materiałach MOF” (literatura i ewent. badania, obliczenia)
- „Aktywacja wiązania C-H – aktualne wyzwania” (literatura i ewent. obliczenia)
- „Modelowanie oddziaływania cząsteczki H₂ z centrami kationowymi Cd²⁺ i Zn²⁺”
- „Specjacja centrów kwasowych w materiałach o strukturze MWW” (modelowanie)

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 (Sevilla, Hiszpania)

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 „chemia nieorganiczna i strukturalna” oraz „chemia fizyczna i teoretyczna”. Typowy zestaw kursów przewidzianych dla drugiego stopnia zawiera panel katalizy i chemia powierzchni ciała stałego, 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. 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.
2. E. Broclawik, J. Zalucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka „New Insights into Charge Flow Processes and their Impact on the Activation of Ethene and Ethyne by Cu(I) and Ag(I) Sites in MFI”, *Journal of Physical Chemistry C*, 114(21) (2010) 9808-9816.
3. P. Kozyra, E. Broclawik, M. Mitoraj, J. Datka „C=C, C≡C and C=O Bond Activation by Coinage Metal Cations in Zeolites: Quantitative Charge Transfer Resolution”, *Journal of Physical Chemistry C*, 117 (2013) 7511-7518.
4. 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.
5. 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>