

Ankieta Tutora SMP: **Prof. dr hab. Artur Michalak**

Stan na: 15.09.2021

1) Proponowana tematyka (hasłowo):

Teoretyczny opis wiązania chemicznego i reaktywności układów molekularnych. Kwantowo-chemiczne badania molekularnych mechanizmów procesów katalitycznych. Kwantowo-chemiczne badania relacji pomiędzy strukturą a właściwościami układów molekularnych.

2) Jak będzie wyglądała współpraca w ramach tutorialu ?

Częstotliwość spotkań może być ustalona indywidualnie w zależności od potrzeb studenta; w przypadku studentów wykonujących pracę roczną o charakterze badawczym sugerowane są regularne spotkania cotygodniowe.

3) Jakiego typu praca roczna może być wykonywana?

Sugerowane są prace roczne o charakterze badawczym, mające na celu m.in. praktyczne zapoznanie oraz opanowanie umiejętności związanych ze stosowaniem w praktyce obliczeń kwantowo-chemicznych. W indywidualnych przypadkach możliwe są także prace roczne o charakterze przeglądu literaturowego.

4) Jaka jest proponowana przez tutora tematyka prac rocznych?

Tematyka pracy rocznej będzie ustalana indywidualnie, w zależności od zainteresowań studenta, stopnia zaawansowania, itp. W przypadku studentów I roku sugerowane są prace mające na celu opanowanie podstawowych umiejętności związanych z zastosowaniem w praktyce obliczeń kwantowo-chemicznych. W przypadku studentów wyższych lat sugerowane są prace roczne związane z badaniami naukowymi aktualnie wykonywanymi w zespole.

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

Tematyka aktualnie prowadzonych badań związana jest z zagadnieniami wymienionymi w punkcie 1. Aktualnie obejmuje: 1) opis wiązania chemicznego w oparciu o rozwijaną w zespole metodologię opartą na NOCV (orbitale naturalne dla wartościowości chemicznej); 2) teoretyczne badania mechanizmów procesów kopolimeryzacji CO₂ z epoksydami katalizowanych przez kompleksy metali przejściowych (współpraca z Ajou University i KIST; Korea Pd.); 3) modelowanie molekularne struktury i własności nowych materiałów polimerowych do potencjalnych zastosowań w charakterze membran w ogniwach paliwowych (współpraca z KIST, Korea Pd. oraz Technon, Izrael).

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?

Brak wymagań na wstępie. Pomocne może być dobre przygotowanie z zakresu matematyki i fizyki. Sugerowany indywidualny program kształcenia zależeć będzie od zainteresowań i indywidualnych predyspozycji studenta.

7) Jak 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)?

Możliwe są oba podejścia, zależnie od zainteresowań, wiedzy i predyspozycji studenta. Wyniki prowadzonych badań naukowych nie były publikowane w formie artykułów popularnonaukowych. Studentom, którzy nie znają podstaw chemii kwantowej i nie mają świadomości, co do możliwości

oraz szerokich zastosowań metod obliczeniowych chemii kwantowej mogę polecić artykuł pt. *Metody obliczeniowe chemii kwantowej jako praktyczne narzędzie badawcze*. (Niedzialki, Nr 3/112, str.59-69).

8) Informacje dodatkowe

Zachęcam do osobistego kontaktu w celu uzyskania bardziej szczegółowych informacji.