

Ankieta Tutora SMP: dr hab. Piotr Pietrzyk

Stan na maj 2017

1) Proponowana tematyka (hasłowo):

nanomateriały modyfikowane jonami metali przejściowych o znaczeniu katalitycznym (zeolity do zastosowań praktycznych takich jak usuwanie NO z gazów spalinowych), aktywacja małych cząsteczek gazowych (takich jak NO, CO, N₂O, O₂, węglowodory, NH₃) na jonach metali przejściowych [1,2];

materiały katalityczne do generowania reaktywnych form tlenu [3];

charakterystyka spektroskopowa (spektroskopia EPR) materiałów [4] oraz modelowanie ich właściwości spektroskopowych i magnetycznych metodami chemii kwantowej (DFT) [5];

2) Jak będzie wyglądała współpraca w ramach tutorialu?

Spotkania z tutorem (najlepiej cotygodniowe konsultacje indywidualne), stała współpraca z doktorantem/opiekunem (w ramach prac przy konkretnym projekcie badawczym, w miarę możliwości czasowych studenta) udział w seminariach zespołowych, praca w grupie przy projekcie badawczym.

3) Jakiego typu praca roczna może być wykonywana?

W zależności od oczekiwań i predyspozycji studenta praca eksperymentalna (synteza nieorganiczna, testy katalityczne, badania spektroskopowe) lub praca o charakterze obliczeniowych (modelowanie molekularne metodami DFT).

4) Jaka jest proponowana przez tutora tematyka prac rocznych?

przykładowa tematyka:

1. Modele aktywacji cząsteczki H₂O₂ - mechanizmy tworzenia reaktywnych form tlenu
2. Powierzchniowe addukty małych cząsteczek z jonami metali przejściowych – symetria, właściwości spektroskopowe i reaktywność
3. Obliczenia parametrów spektroskopowych paramagnetycznych kompleksów jonów metali przejściowych za pomocą relatywistycznych metod DFT

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

Aktywacja cząsteczek zawierających azot na central metalicznych w materiałach porowatych (grant NCN)

Generowanie reaktywnych form tlenu na amorficznych tlenkach d⁰ (projekt doktorancki, NCN)

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. Sugerowane będą kursy z zakresu fizyki (w ramach potrzeb) i oczywiście z chemii nieorganicznej i fizycznej, chemii teoretycznej, katalizy i chemii materiałów (ciała stałego).

7) Jakie jest podejście tutora do ewentualnej współpracy ze studentem: nastawione na specjalizację w danej dziedzinie czy bardziej interdyscyplinarne?

Oba podejścia się możliwe; specjalizacja w wąskiej dziedzinie (spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego w technice fali ciągłej lub impulsowej, modelowanie molekularne DFT) lub specjalizacja interdyscyplinarna ukierunkowana zarówno na badania podstawowe jak i aplikacyjne (badania w kontekście procesów chemicznego utleniania albo zmniejszenie zawartości NO w gazach spalinowych).

8) Przykładowe artykuły tutora

- [1] P. Pietrzyk, T. Mazur, K. Podolska-Serafin, M. Chiesa, Z. Sojka, *Intimate Binding Mechanism and Structure of Trigonal Nickel(I) Monocarbonyl Adducts in ZSM-5 Zeolite – Spectroscopic CW-EPR, HYSCORE and IR Studies Refined with DFT Quantification of Disentangled Electron and Spin Density Redistributions along σ and π Channels*, **Journal of the American Chemical Society**, **135 (41)**, 15467–15478, 2013
- [2] P. Pietrzyk, K. Góra-Marek, *Paramagnetic Dioxovanadium(IV) Molecules Inside the Channels of Zeolite BEA – EPR Screening of VO₂ Reactivity Toward Small Gas-Phase Molecules*, **Physical Chemistry Chemical Physics**, **18 (14)**, 9490–9496, 2016
- [3] K. Sobańska, P. Pietrzyk, Z. Sojka, *Generation of Reactive Oxygen Species via Electroprotic Interaction of H₂O₂ with ZrO₂ Gel: Ionic Sponge Effect and pH-Switchable Peroxidase- and Catalase-Like Activity*, **ACS Catalysis**, **7**, 2935–2947, 2017
- [4] P. Pietrzyk, T. Mazur, Z. Sojka, *Chapter 4. Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy of Inorganic Materials, Local Structural Characterisation: Inorganic Materials Series*, D. W. Bruce, D. O'Hare and R. I. Walton (Eds.), John Wiley & Sons, Ltd., 2014, pp. 225–300. ISBN: 978-1-119-95320-3
- [5] P. Pietrzyk, K. Podolska, Z. Sojka, *Molecular Interpretation of EPR Parameters - Computational Spectroscopy Approaches*, **Specialist Periodical Reports - Electron Paramagnetic Resonance: Volume 23**, B. C. Gilbert, D. M. Murphy, V. Chechik (Eds.), RSC Publishing, **23**, 264–311, 2013, ISBN: 978-1-84973-168-3