



UNIWERSYTET  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

**Nazwa jednostki:** Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński

**Nazwa stanowiska:** Doktorant stypendysta (1 etat)

**Wymagania:**

WYMÓG PODSTAWOWY:

W myśl zasad konkursu, stypendium naukowe może być przyznane osobie, która w chwili rozpoczęcia realizacji zadań w projekcie jest doktorantem.

Oferta jest kierowana w pierwszym rzędzie do osób, które:

- w roku akademickim 2016/17 są STUDENTAMI I lub II ROKU III STOPNIA studiów stacjonarnych, na kierunku chemia (preferowane) lub kierunków pokrewnych (nauki materiałowe, fizyka)

oraz

- przedłożą zaświadczenie o pozytywnym wyniku egzaminu na studia doktoranckie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (kierunek chemia) i wyrażą wolę wykonywania pracy doktorskiej w Zespole Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego (Wydział Chemii UJ) pod kierunkiem kierownika niniejszego projektu, od dnia 1 października 2017 roku.

INNE ISTOTNE WYMAGANIA:

Doktorant stypendysta może wybrać ze ścieżek prowadzenia badań: doświadczalną lub obliczeniową. Niektóre z podanych niżej wymagań dotyczą obu ścieżek, a pozostałe jednej z podanych wyżej:

- ukończone studia magisterskie na kierunku chemia (preferowane) lub na kierunkach: nauki materiałowe, fizyka;
- udokumentowane doświadczenie w syntezie i charakterystyce materiałów mikroporowatych;
- doświadczenie w konstrukcji niestandardowych zestawów doświadczalnych z wykorzystaniem standardowych elementów automatyki oraz oprogramowania LabView lub równoważnego.
- doświadczenie w dziedzinie kwantowochemicznego modelowania ciała stałego (VASP, DMol3, QuantumEspresso, SIESTA, CASTEP);
- znajomość w stopniu co najmniej średnim systemu operacyjnego Linux (w dowolnej dystrybucji)
- doświadczenie w dziedzinie modelowania ciała stałego na poziomie klasycznych pól siłowych (GULP, Forcite)

Wydział Chemii

ul. Ingardena 3

PL 30-060 Kraków

tel. +48(12) 633 63 77

fax +48(12) 634 05 15

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl



UNIwersYTET  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

Wydział Chemii

- doświadczenie w dziedzinie modelowania procesów sorpcyjnych (RASPA, Biovia Sorption)
- znajomość języka angielskiego co najmniej na poziomie B2+ (zaliczony kurs akademicki), umożliwiającą posługiwanie się literaturą naukową;
- podstawowa znajomość i umiejętność obsługi oprogramowania komputerowego umożliwiającą przygotowywanie dokumentów tekstowo-graficznych (tekst naukowy, prezentacja ustna, poster): LibreOffice/OpenOffice (lub równoważnym), jak również CorelDraw; pożądana znajomość programu Biovia MaterialsStudio (dawniej Accelrys);
- zaradność, motywacja do pracy naukowej, pełne zaangażowanie w wykonywaną pracę badawczą;
- gotowość do ciągłego doskonalenia i rozszerzania posiadanych umiejętności;
- gotowość do aktywnego udziału w konferencjach i stażach naukowych, krajowych i zagranicznych.

Wymagania dodatkowe:

- mile widziana będzie dodatkowo dobra znajomość technik obliczeniowych w zakresie chemii kwantowej;
- mile widziana znajomość programu AutoCAD lub FreeCAD w stopniu przynajmniej średnim

Wymagane dokumenty:

- CV oraz dane kontaktowe osób mogących udzielić rekomendacji kandydatowi;
- list motywacyjny wraz z opisem zainteresowań naukowych;
- kopia dyplomu ukończenia studiów magisterskich;
- informację/zaświadczenie o wpisie do rejestru doktorantów na Uniwersytecie Jagiellońskim;
- lista dotychczasowego dorobku naukowego (współautorstwo w artykułach naukowych, aktywny udział w konferencjach naukowych), uzyskanych nagród, stypendiów i wyróżnień oraz odbytych praktyk i staży naukowych.
- wykaz ocen z przebiegu studiów oraz średnia ocen ze studiów;

KIEROWNIK PROJEKTU: dr hab. Witold Piskorz, e-mail:  
witold.piskorz@uj.edu.pl

### Opis zadań:

W ramach realizacji zadań badawczych w projekcie NCN pt. „Wieloskalowa eksploracja transformacji alkoholi do węglowodorów w kanałach zeolitów: od modelowania centrum aktywnego do symulacji procesów ciągłych” Stypendysta

ul. Ingardena 3

PL 30-060 Kraków

tel. +48(12) 633 63 77

fax +48(12) 634 05 15

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl



UNIWERSYTET  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

Wydział Chemii

będzie zobowiązany do:

- Indywidualnych poszukiwań literaturowych,
- Przygotowywania artykułów i prezentacji naukowych,
- Czynnego udziału w konferencjach naukowych.
- Czynnego udziału w seminariach zespołowych.
- W części doświadczalnej
  - Przeprowadzania zaawansowanych eksperymentów katalitycznych sprzężonych ze spektroskopowymi na mikroporowatych materiałach jako katalizatorach
  - Prac związanych z charakterystyką materiałów na podstawie uzyskanych wyników
- W części obliczeniowej
  - Prowadzenia obliczeń kwantowo-chemicznych za pomocą programu VASP lub DMol3;
  - Projektowania ścieżek elementarnych aktów reakcji
  - Interpretacji wyników obliczeniowych w tym modelowania sorpcji

**Typ konkursu NCN:** OPUS 12

**Termin składania ofert:** 31 sierpnia 2017, 23:59

**Forma składania ofert:** dowolnie

**Warunki zatrudnienia:**

Data rozstrzygnięcia konkursu: nie później niż 30 września 2017, 23:59.

Przed podjęciem decyzji kierownik projektu zastrzega sobie prawo do przeprowadzenia bezpośredniego spotkania i rozmowy kwalifikacyjnej, w obecności członków dedykowanej komisji wydziałowej Wydziału Chemii UJ. Informacje o wynikach konkursu zostaną podane do wiadomości kandydatów. Stypendium NCN w wysokości 3000 PLN/miesiąc na okres 24 miesięcy. Proponowany termin zatrudnienia od października 2017. Powyższa kwota jest niezależna od stypendium doktoranckiego uzyskiwanego w ramach studiów doktoranckich.

Kandydat może liczyć na dostęp do bogatego zaplecza laboratoryjno-aparaturowego:

- klaster obliczeniowy;
- centrum superkomputerowe Cyfronet
- korzystanie z licencji, których posiadaczami jest Zespół lub licencji ogólnouczelnianych

Kandydat może liczyć również na dostęp do literatury fachowej i chemicznych baz danych, jak również na merytoryczne wsparcie ze strony członków Zespołu Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego (Wydział Chemii UJ) i miłą atmosferę

ul. Ingardena 3

PL 30-060 Kraków

tel. +48(12) 633 63 77

fax +48(12) 634 05 15

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

pracy.

## **Dodatkowe informacje:**

SKRÓCONY OPIS TEMATYKI BADAWCZEJ

## **STRESZCZENIE PROJEKTU**

### **1. Cel prowadzonych badań/hipoteza badawcza**

Głównym celem projektu jest synteza i pełna charakterystyka właściwości strukturalnych, tekstualnych oraz kwasowo/redoksowych materiałów zeolitowych oraz ich modyfikacja w kierunku otrzymania nowych katalizatorów. Badania dotyczyć będą poznania natury centrów aktywnych ich oddziaływania z cząsteczkami reagentów. Badania obejmą także przeprowadzenie modyfikacji, które optymalizują teksturę materiałów a w konsekwencji ich własności katalityczne. Równoległe stosowanym narzędziem badawczym będą obliczenia teoretyczne, umożliwiające detekcję procesu dyfuzji, sorpcji a ostatecznie transformacji cząsteczek reagentów w mikrokanalich zeolitów.

### **2. Zastosowana metoda badawcza/metodyka**

W projekcie tym można wyróżnić dwie główne techniki badawcze: spektroskopię IR, zarówno w modzie statycznym jak i czasowo-rozdzielczym oraz obliczenia kwantowo-chemiczne w formalizmie DFT i za pomocą klasycznej dynamiki molekularnej (MD). Analiza widm IR dostarcza informacji o naturze i właściwościach centrów aktywnych w zeolitach determinowanych przez (a) własności samej sieci zeolitu (Si/Al), (b) architekturę mikroporów oraz (c) przez sposób jej modyfikacji (wprowadzenie drugorzędowej mezoporowatości), ale także o sposobie aktywacji cząsteczek reagentów przez centrum adsorpcji. Zastosowanie cząsteczek o tak różnym stopniu rozgałęzienia (pirydyna, lutydyna, di-tertbutylpirydyna) umożliwia pełną charakterystykę dostępności aktywnych katalitycznie centrów i powiązanie tej własności z teksturą badanego materiału. Właściwości centrów kwasowych w kontekście mocy tych centrów scharakteryzowane zostaną dzięki sorpcji cząsteczek o zróżnicowanej zasadowości (CO, nityle, pirydyna).

Jednakże w wielu przypadkach informacje uzyskane z sorpcji typowych cząsteczek sond nie znajdują całkowitego odniesienia do oddziaływania cząsteczka reagenta – centrum aktywne. Nie jest więc możliwe bezpośrednie powiązanie tych informacji z aktywnością i selektywnością katalizatora. Istotnym zagadnieniem jest więc zaadaptowanie cząsteczek reagentów jako sond by bezpośrednio powiązać aktywność centrum sorpcji ze sposobem aktywacji cząsteczki reagenta. Sorpcja cząsteczek reagentów i detekcja ich transformacji będzie szczególnie użytecznym narzędziem ewaluacji reaktywności tych cząsteczek oraz natury tworzących się produktów przejściowych. W kontekście sorpcji cząsteczek reagentów szczególny nacisk położony zostanie na aspekt ilościowy ich transformacji w produkty reakcji. Oprócz w/w metod pragniemy zastosować analizę TEM, XRD, badania nisko-temperaturowej sorpcji azotu. Aplikacyjny charakter otrzymanych materiałów zostanie zweryfikowany za pomocą testów katalitycznych (głównie dehydratacja etanolu). W badaniach sorpcji etanolu (cząsteczka reagenta) jak i jego transformacji wykorzystana zostanie spektroskopia IR, tak w modzie klasycznym jak i czasowo-rozdzielczym (*rapid-scan*). Równoległe stosowanym narzędziem badawczym będą obliczenia „*first-principle Monte Carlo*” (oparte o energetykę obliczoną na poziomie teorii DFT), umożliwiające detekcję procesu dyfuzji, sorpcji a ostatecznie transformacji



UNIwersytet  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

Wydział Chemii

ul. Ingardena 3

PL 30-060 Kraków

tel. +48(12) 633 63 77

fax +48(12) 634 05 15

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

cząsteczek reagentów w mikrokanałach zeolitów. Korelacja wyników badań IR, obrazów i analiz mikroskopii elektronowej, obliczeń oraz danych katalitycznych dostarczy informacji pomocnych w projektowaniu nowych katalizatorów.

Dodatkowe informacje dotyczące tematyki projektu kandydaci mogą uzyskać bezpośrednio od kierownika projektu drogą elektroniczną (dr hab. Witold Piskorz, e-mail: [witold.piskorz@chemia.uj.edu.pl](mailto:witold.piskorz@chemia.uj.edu.pl)).



UNIwersytet  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

Wydział Chemii

ul. Ingardena 3  
PL 30-060 Kraków  
tel. +48(12) 633 63 77  
fax +48(12) 634 05 15  
[sekretar@chemia.uj.edu.pl](mailto:sekretar@chemia.uj.edu.pl)  
[www.chemia.uj.edu.pl](http://www.chemia.uj.edu.pl)