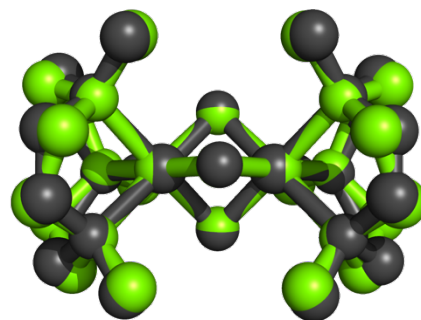


Projecte per beques d'estiu 2017

Dades del projecte:

Títol:	Millora de funcionals DFT
Supervisor:	Prof. Marcel Swart
E-mail supervisor:	marcel.swart@udg.edu
Grup de recerca:	QTMEM
Destinat a estudiants:	3r i 4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències / Parc UdG
Places ofertes:	1 (3r any) i 1 (4t any)
Data d'inici:	06/2016 / a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	10/2016 / a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Diària



Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Es valorarà haver cursat algunes assignatures de química computacional i de programació. Contactar prèviament per establir horaris (tan horaris com data d'inici/acabament són flexibles).

Estudis en curs requerits:

Grau en química o biotecnologia.

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

Ús d'eines de química computacional (ADF, NWChem, QUILD, etc.) i recursos supercomputacionals, programar en Python/Fortran. Iniciar-se en la recerca científica, anàlisi dels resultats obtinguts i descriure'ls en un report resumit que podrà convertir-se en un article científic. Iniciar-se en l'ús d'anglès com a llengua primera per la ciència.

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:

Als darrers anys la teoria del funcional de la densitat (DFT) ha pujat com a primera eina computacional en estudis moleculars de química, física i biologia. Tot i així, encara hi ha espai per millorar els resultats en l'aplicació de DFT a diferents sistemes. Hi ha diverses reaccions, molècules i complexos de metalls de transició on resultats de referència (al nivell elevat, com p.e. coupled clúster) demostren alguns fallos. Aquí volem entendre millor les raons per les discrepàncies entre DFT i els resultats de referència (benchmarks), i millorar les formules usades en DFT per a que podem obtenir millors mètodes DFT que s'ajustin més als resultats de referència. Al passat ja vam demostrar que amb una petita modificació (S12g),^[1-2] els errors dels funcionals non-empírics (PBE, TPSS) disminueixen per les barreres de química orgànica, i pels estats de spin.^[3] Dins aquest projecte està previst que s'estendrà als altres molècules i reactivitats.

Referències

[1] *Chem. Phys. Lett.* **2013**, 580, 166-171, www.dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2013.06.045

[2] *J. Chem. Phys.* **2009**, 131, 094103, www.dx.doi.org/10.1063/1.3213193

[3] *Acc. Chem. Res.* **2016**, 49, 2690-2697, www.dx.doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00271