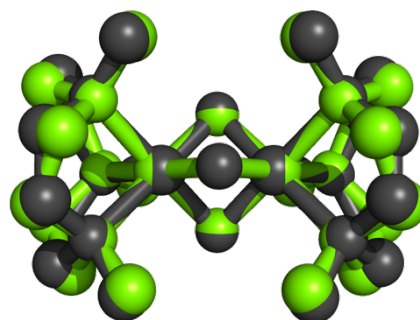


# Projecte per beques d'estiu 2019

Dades del projecte:

<b>Títol:</b>	<b>Millora de funcionals DFT</b>
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:	06/2019 / <b>a concretar amb l'estudiant</b>
Data d'acabament:	10/2019 / <b>a concretar amb l'estudiant</b>
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),<sup>[1-2]</sup> els errors dels funcionals non-empírics (PBE, TPSS) disminueixen per les barreres de química orgànica, i pels estats de spin.<sup>[3]</sup> Especialment el funcional OPBE<sup>[4]</sup> està demostrat recentment de donar bons resultats, tant per estats de spin<sup>[5]</sup> com per barreres.<sup>[6]</sup> Dins aquest projecte està previst que s'estendrà als altres molècules i reactivitats.

## Referències

- [1] Swart, *Chem. Phys. Lett.* **2013**, 580, 166  
[www.dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2013.06.045](http://www.dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2013.06.045)
- [2] Swart, Solà, Bickelhaupt, *J. Chem. Phys.* **2009**, 131, 094103  
[www.dx.doi.org/10.1063/1.3213193](http://www.dx.doi.org/10.1063/1.3213193)
- [3] Swart, Gruden, *Acc. Chem. Res.* **2016**, 49, 2690  
[www.dx.doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00271](http://www.dx.doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00271)
- [4] Swart, Ehlers, Lammertsma, *Mol. Phys.* **2004**, 102, 2467  
[www.dx.doi.org/10.1080/0026897042000275017](http://www.dx.doi.org/10.1080/0026897042000275017)
- [5] Radon, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, 21, 4854  
[www.dx.doi.org/10.1039/c9cp00105k](http://www.dx.doi.org/10.1039/c9cp00105k)
- [6] Feldt, Phung, Pierloot, Mata, Harvey, *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, 15, 922  
[www.dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00963](http://www.dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00963)