

FICHA DESCRIPTIVA JAE INTRO (IFF-CSIC)

1. **Proyecto ofertado:** Modelización *ab initio* de procesos catalíticos en agregados subnanométricos de metales
2. **Tutor/a responsable:** Dra. María Pilar de Lara-Castells
3. **Email tutor/a:** Pilar.deLara.Castells@csic.es
4. **Requisitos específicos:**
Estudiante o graduado de Química (ver requisitos generales para aplicar)
5. **Descripción del proyecto y actividades que se desarrollarán:**

El principal propósito es caracterizar la estabilidad y las propiedades ópticas, catalíticas y fotocatalíticas de nuevos materiales compuestos por agregados atómicos de metales (Au, Ag, Cu) adsorbidos en superficies de relevancia en aplicaciones tecnológicas. La modificación de materiales nanoestructurados mediante el depósito controlado de agregados atómicos de metales tiene un tremendo impacto en sus propiedades ópticas, catalíticas y fotocatalíticas. Por ejemplo, nuestros estudios han demostrado como una monocapa de agregados de cobre (Cu_5) adsorbida en superficies de dióxido de titanio es muy estable y cambia completamente el perfil de absorción del material en la región visible del espectro solar. Además, hemos comprobado el potencial del sistema Cu_5/TiO_2 para eliminar CO_2 de la atmósfera. El proyecto dedica un énfasis especial al análisis de la correlación entre el tamaño, forma y composición de los agregados y la mejora de las propiedades ópticas, catalíticas, y fotocatalíticas del sistema nanoestructurado agregado/superficie. La actividad específica del estudiante se centrará en el estudio de una reacción catalítica específica (reducción de CO) en un agregado de Cu_5 no soportado, con su extensión al caso del mismo agregado cuando está soportado en una superficie de TiO_2 . Para ello, el estudiante adquirirá formación en el empleo del programa de química computacional ORCA.

