

PLAN DE FORMACIÓN JAEIntro-2021-IFF-01

1. **Proyecto ofertado:** Modelización de primeros principios de agregados subnanométricos de metales en superficies de sólidos
2. **Tutora responsable:** Dra. María Pilar de Lara Castells
3. **Email tutora:** Pilar.deLara.Castells@csic.es
4. **Fecha de inicio:** 1 de enero o 1 de febrero de 2022
5. **Requisitos específicos:** Estudios de Grado en Física o Química, con nota media igual o mayor que 7,50 en escala de 0-10. Se valorará cualquier experiencia o formación relevante al tema de la beca.
6. **Resumen del proyecto:**

El principal propósito del proyecto es caracterizar la estabilidad y las propiedades ópticas, catalíticas y fotocatalíticas de nuevos materiales compuestos por agregados atómicos de metales nobles adsorbidos en superficies de relevancia en aplicaciones tecnológicas como es el dióxido de titanio (TiO_2). 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 del sistema nanoestructurado clúster/superficie. En particular, a través de modelización desde primeros principios, se ha demostrado en nuestro grupo cómo la decoración de superficies de TiO_2 con clústeres de Ag_5 permite la estabilización de polarones superficiales (formación de un material polarónico en dos dimensiones) y la separación entre electrones superficiales y huecos. La modificación de las superficies con clústeres de Ag_5 también hace posible la extensión de la respuesta óptica del TiO_2 hacia la región del visible. El objetivo principal será estudiar la interacción de moléculas presentes en la atmósfera con superficies de dióxido de titanio modificadas con clústeres de Ag_5 . Con este fin, se emplearán los paquetes de estructura electrónica ORCA y VASP así como un código local que permite analizar la respuesta foto-inducida de estos materiales y sus propiedades en fotocatalisis.

