

DIPC - UPV/EHU PhD STUDENT GRANTS ZABALDUZ PROGRAMME

Donostia International Physics Center (DIPC) en colaboración con la Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU) ha abierto una convocatoria de solicitudes para estudiantes de doctorado dentro del programa ZABALDUZ. Ésta es una oportunidad única para que estudiantes con gran motivación, con estudios en Física o campos relacionados, puedan desarrollar una carrera científica uniéndose a algunos grupos de investigación de alto nivel dentro del DIPC.

La duración del contrato se limitará inicialmente a un año, con la posibilidad de renovar hasta un máximo de tres años.

Los candidatos deben estar en posesión del título de grado y máster o equivalente en Física, Química o Ciencia de Materiales.

Más información sobre esta convocatoria se encuentra disponible mediante el siguiente contacto: phd@dipc.org.

La fecha límite de solicitudes es el **26 de Septiembre de 2012**.

Los detalles de la convocatoria ZABALDUZ se encuentran en la página web de la UPV/EHU:

http://www.ikerkuntza.ehu.es/p273-content/es/contenidos/ayuda_subvencion/vri_becas/es_vri_beca/adjuntos/Convocatoria%20ZabaldUz_cas.pdf

Los proyectos de doctorado ofertados se describen a continuación:

PhD OPENINGS

- Implementación de efectos no adiabáticos en la interacción de átomos y moléculas pequeñas con superficies metálicas

DIPC supervisor: Dr. Maria Blanco Rey (maria_blancorey@ehu.es).

Supervisor en la UPV/EHU: Dr. J. Iñaki Juaristi

La catálisis heterogénea es una de las principales motivaciones sobre las que descansa la ciencia de superficies. Existen multitud de ejemplos de moléculas altamente estables en fase gaseosa, como el H₂ ó el O₂, que ven reducida su energía de enlace cuando interaccionan con la superficie de un metal. Nuestra propuesta consiste en el estudio teórico de la dinámica de dichas interacciones. Los cálculos de primeros principios basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) son una herramienta teórica fundamental en este campo, ya que proporcionan información cuantitativa precisa en problemas altamente sensibles a la multidimensionalidad, como es el caso de la interacción molécula-superficie.

Sin embargo, los cálculos habituales en DFT no tienen en cuenta los efectos no adiabáticos en la interacción. Éstos son relevantes cuando una parte no despreciable de la energía de molécula se transmite al sustrato, donde se producen excitaciones vibracionales (fonones) o electrónicas [creación de pares electrón-hueco (e-h)]. Los efectos no adiabáticos se suelen introducir “a posteriori” en el estudio dinámico empleando diversas parametrizaciones. En el proyecto propuesto nos encargaremos de explorar diversas implementaciones de estos canales de pérdida en cálculos de primeros principios. Asimismo, se desarrollarán modelos sencillos de pérdida de energía por pares e-h para casos típicos, empleando descripciones simples (por ejemplo, jellium) de la estructura electrónica de la superficie.

- ***Estudio teórico de la adsorción y organización molecular en superficies de diferente naturaleza***

DIPC supervisor: Dr. Pepa Cabrera-Sanfelix (swbcasam@sc.ehu.es).

Supervisor en la UPV/EHU: Dr. Daniel Sanchez-Portal

Este proyecto se centrará en la adsorción de pequeñas moléculas orgánicas y otras moléculas de interés tecnológico, como el agua y el CO, sobre superficies de diferente naturaleza, ya sea metálica, iónica o gráfica. Por una parte el proyecto estará enfocado hacia el estudio de la modificación de la estructura electrónica que dichos substratos pueden sufrir debido a la interacción con los adsorbatos. Por otro lado, es de gran interés el investigar como estas modificaciones a su vez afectan a la organización (self-assembly) de dichos adsorbatos.

El comprender la estructura y el crecimiento de las primeras capas de recubrimiento en ciertas superficies es de crucial importancia para entender y dominar fenómenos como la corrosión y procesos electroquímicos en superficies metálicas; así como otros procesos de naturaleza atmosférica, tales como reacciones catalíticas en aerosoles troposféricos.

Uno de los objetivos de este estudio es comprender como las interacciones débiles (dipolares, van der Waals, etc) influyen en la auto-organización de pequeñas moléculas de interés biológico.



- ***Transporte electrónico en túnel y en contacto***

DIPC supervisor: Dr. Aran Garcia-Lekue (wmbgalea@lg.ehu.es).

Supervisor en la UPV/EHU: Prof. Andrés Arnau

En los últimos años, el transporte electrónico a través de nanoestructuras ha suscitado un gran interés, ya que las uniones nanométricas o los dispositivos moleculares pueden dar lugar a tecnología basada en la electrónica molecular. La corriente que fluye a través de una nanoestructura puede ser medida mediante el microscopio de efecto túnel (STM, del inglés scanning tunneling microscope) y mediante técnicas de ruptura de unión. El objetivo de este proyecto es simular el transporte electrónico a través de nanoestructuras, por ejemplo a través de moléculas aisladas unidas a electrodos metálicos con el objeto de predecir y/o entender las observaciones experimentales.