

## ANEXO I PROPOSTA DE PROXECTOS DE INVESTIGACIÓN STEMBACH

<b>Coordinación STEMBach na Facultade/Escola UVigo:</b>	
Nome: Marta Teijeira Bautista	
Enderezo electrónico: qomaca@uvigo.gal	Teléfono: 986 812 280
<b>Dirección do proxecto Uvigo:</b>	
Nome: Olalla Nieto Faza	
Enderezo electrónico: faza@uvigo.es	Teléfono: 617239986
<b>Co-dirección do proxecto UVigo:</b>	
Nome: Sofia Kiriakidi	
Enderezo electrónico: skyriakidi@uvigo.es	Teléfono: 986812632
<b>Bienio</b>	<b>2023-2025</b>
<b>Número de participantes (máx. 4)</b>	<b>1-4</b>

NOTA: Os custos derivados da execución deste proxecto de investigación tales como os desprazamentos do profesorado da UVigo ao centro educativo ou doutras actividades establecidas no plan de traballo, correrán a cargo do centro educativo ao que se asigne este proxecto.

### Título

**Superátomos en catálise**

### Resumo

A “táboa periódica expandida” de Castleman establece paralelismos entre a estrutura electrónica de clusters de átomos e a de elementos da táboa periódica. Neste proxecto exploraremos a través da modelización molecular a viabilidade de empregar superátomos ou pequenas nanopartículas como substitutos de metais como o platino, paladio ou ouro no reformado do petróleo e outros procesos chave na industria química.

### Obxectivo

Os estudantes explorarán a xeometría e estrutura electrónica de pequenos clusters, comparándoa coa de átomos illados e analizarán o seu efecto como catalizadores de reaccións de formación de enlaces C-C e C-O. Aprenderán a traballar con software de modelización e infraestruturas de computación de altas prestacións. Analizarán representacións de estruturas e orbitais moleculares relacionándoos coa reactividade dos catalizadores e presentarán os seus resultados nun informe científico profesional. Entrarán en contacto tamén cos colaboradores experimentais do grupo para completar a súa visión do proxecto.

### Plan de traballo

0. Recolleita de información sobre as reaccións implicadas no reformado do petróleo e a importancia dos catalizadores nestes procesos.
1. Estudo da estrutura electrónica de átomos. Representación de orbitais atómicos, análise de enerxías e configuracións electrónicas.
2. Modelización do enlace covalente e de procesos sinxelos de rotura/formación de enlace en moléculas sinxelas
3. Optimización xeométrica de estruturas diatómicas e pequenos clusters/nanopartículas
4. Representación dos orbitais moleculares, análise de enerxías e configuracións electrónicas
5. Avaliación da súa actividade como catalizadores
6. Elaboración dun informe de resultados e presentación das conclusións do proxecto.