

Ведущий научный сотрудник в группу твердотельной ЯМР спектроскопии

Вакансия VAC 56690

Статус: Прием заявок на конкурс с 26.11.2019 г. по 16.12.2019 г.

Дата и место проведения заседания конкурсной комиссии: 17.12.2019 г., ИК СО РАН (г. Новосибирск)

Специализация

Должность: Ведущий научный сотрудник

Наименование: Ведущий научный сотрудник в группу твердотельной ЯМР спектроскопии

Отрасль науки: Химические науки

Тематика исследований: Структурная диагностика ультрадисперсных и наноструктурированных систем, используемых в качестве катализаторов, носителей, сорбентов, комплексом дифракционных, спектральных, адсорбционных и электронно-микроскопических методов» ЯМР спектроскопия в твердом теле. ЯМР спектроскопия в твердом теле

Расположение

Регион: Новосибирская область

Город: Новосибирск

Задачи:

Цель работы состоит в реализации метода ЯМР кристаллографии в приложение к исследованию реальных катализаторов. Это позволит на детальном атомарном уровне не только охарактеризовать строение центров активного компонента, но и установить реакционную способность каждого типа центров. ЯМР кристаллография это многостадийный процесс, который кратко можно представить следующей схемой:

1 - Запись спектров ЯМР – статических и с использованием методики вращения образца под магическим углом, с различными скоростями вращения

2 – определение ЯМР параметров по экспериментальным спектрам с привлечением методик SATRAS, MQMAS, MASSA, QCPMG и т.д. Необходимо определить 8 независимых параметров тензора химического сдвига и квадрупольного взаимодействия, а также ориентацию тензоров. Критерием надёжности параметров является совпадение расчётных спектров с экспериментальными статическими и MAS спектрами

3 – создание квантовохимической модели центров на основании полученных экспериментальных ЯМР параметров

4 - Расчёт ЯМР параметров для созданной модели по программам GIPAW, CASTEP

5 – сопоставление теоретических и экспериментальных ЯМР параметров, в случае их совпадения (пункт 6), в случае расхождения возвращение к пункту 3 и создание новой модели

6 – теоретические оценки активности полученных центров по адсорбции молекул тестов (H₂O, CO, CH₃OH)

2020 год: Развитие и применение метода ЯМР-кристаллографии для неупорядоченных (дефектных) систем, в том числе и для катализаторов. Оценка активности центров. Будет проведена большая работа по определению строения центров и установлению связи между строением каталитических центров и их реакционной способностью на примере слоистых V-Al-Si-O катализаторов.

2021 год: Сопоставляя строение активных центров в массивных и нанесенных V, Nb, Al катализаторах с их реакционной способностью по отношению к метанолу, планируется установить связь между строением металл-оксидных центров и их реакционной способностью.

2022 год: Метод ЯМР кристаллографии планируется применить для исследования многокомпонентных катализаторов, имеющих в составе V, Mo, Nb, Te, первоначально необходимо будет подготовить базы ЯМР данных для анализа сложных систем. Будут дополнены уже существующие базы данных по ⁵¹V, ⁹³Nb, созданы для ⁹⁵Mo, ¹²⁵Te. Параллельно будут проведены квантовохимические расчеты для базовых систем. Это будут заделом для исследования механизма формирования многокомпонентного катализатора, исследование которого планируется на последующие 2022-2023 годы.

Квалификационные требования

– Высшее образование, не менее 1

– Ученая степень кандидата или доктора наук, не менее 1

– Стаж работы по специальности после получения ученой степени, не менее 5 лет

- Количество баллов квалификации в соответствии с правилами таблицы 2 "Квалификационных требований, предъявляемых к должностям научных работников ФГБУН ИК СО РАН", не менее 7
- Доля основных показателей в соответствии с таблицей 1 "Квалификационных требований, предъявляемых к должностям научных работников ФГБУН ИК СО РАН", не менее 80%

Условия

Заработная плата: 30765 рублей/месяц

Стимулирующие выплаты:

Трудовой договор: Срочный

Социальный пакет: Да

Найм жилья: Нет

Компенсация проезда: Нет

Служебное жилье: Нет

Дополнительно: Трудовой договор с 1 января 2020 г. по 30 декабря 2022 г.

Тип занятости: Полная занятость

Лицо для получения дополнительных справок

Конкурсная комиссия Института катализа СО РАН

E-mail: 303@catalysis.ru

Телефон: +7 (383) 326-97-84

Дополнительно: При подаче документов на конкурс претенденты **ДОЛЖНЫ** в первую очередь руководствоваться требованиями к должностям, размещенными на сайте Института катализа СО РАН (www.catalysis.ru) в разделе "ВАКАНСИИ". Справка о квалификационных требованиях претендента за 2014-2019 гг. является обязательной при подаче комплекта документов через сайт ученые-исследователи.рф. Претенденты, ранее не работавшие в Институте катализа СО РАН, обязательно предоставляют характеристику с предыдущего места работы, а также документальное подтверждение ученой степени и стажа.