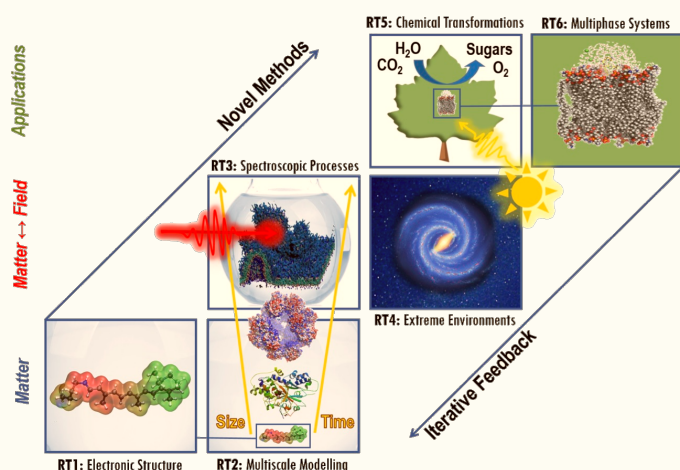


# Avslør naturens hemmeligheter med laptopen som ditt laboratorium

## Hylleraas-senteret for teoretisk kjemi bringer deg til forskningsfronten

Ved Hylleraas-senteret utvikler og anvender vi simuleringsmetoder for å forstå, tolke og forutsi ny kjemi, fysikk og biologi for molekyler i komplekse og ekstreme miljøer.



Våre forskningstema (RT)

Gjennom et bachelor- eller masterprosjekt ved Hylleraas-senteret kan du fordype deg i tema som matematiske modelleringsmetoder, programmering og maskinlæring innen teoretisk kjemi, og du vil få en dyp innsikt i hvordan naturen frembringer molekyllær struktur og dynamikk.

I tillegg vil du tilegne deg etterspurte spesialkunnskaper for en fremtidig karriere.

**Finn ditt prosjekt hos oss i kolonnen til høyre.**



Med **Michele Cascella** som veileder vil du krysse ulike størrelsesskalaer, fra kvantemekanikk til statistiske felter, for å utforske kjemiske reaksjoner, selv-aggregering og myke materialer. En tett tilknytning mellom teori og eksperiment gir også muligheter for samarbeid med eksperimentister.

Kontakt: [michele.cascella@kjemi.uio.no](mailto:michele.cascella@kjemi.uio.no)

Sammen med **Thomas Bondo Pedersen** kan du blant annet utvikle helt nye beregningsmetoder for å simulere kvantedynamikken til molekyler i ultrakorte laserpulser og sterke magnetfelter i tidsskalaer ned til femto- og attosekunder. Du vil utvikle *high-performance computing* algoritmer og få innsikt i avanserte spektroskopiske teknikker.

Kontakt: [t.b.pedersen@kjemi.uio.no](mailto:t.b.pedersen@kjemi.uio.no)



Sammen med **Ainara Nova** vil du ta i bruk simuleringsmetoder for å utforske struktur og reaktivitet for katalysatorer nødvendig for gjenvinning verdifulle kjemikalier fra CO<sub>2</sub>. Forskningen omfatter mange ulike systemer, blant annet homogene og single-site heterogene katalysatorer.

Kontakt: [a.n.flores@kjemi.uio.no](mailto:a.n.flores@kjemi.uio.no)

Med **David Balcells** som veileder vil du ta i bruk maskinlæring og high throughput virtuell screening for å utforske katalysatorer for fornybare energiprosesser. Du vil tilegne deg ferdigheter innen dataanalyse, programmering og evaluering av prediktive modeller.

Kontakt: [david.balcells@kjemi.uio.no](mailto:david.balcells@kjemi.uio.no)



Sammen med **Simen Kvaal** kan du blant annet utvikle nye metoder for å løse den tidssavhengige Schrödingerlikningen for molekyler på datamaskinen, utforske kvantekaos og grenselandet mellom kvante- og klassisk mekanikk, og benytte maskinlæring for å gjøre kvantekjemiske beregninger kjappere.

Kontakt: [simen.kvaal@kjemi.uio.no](mailto:simen.kvaal@kjemi.uio.no)

Med **Erik Tellgren** som veileder kan du utforske eksotisk kjemi for molekyler i sterke magnetfelter, hvor nye kjemiske bindinger og fysiske effekter gjør seg gjeldende. Prosjekter kan fokusere mot anvendelse, programmering av beregningsmetoder, eller matematiske/teoretiske aspekter.

Kontakt: [erik.tellgren@kjemi.uio.no](mailto:erik.tellgren@kjemi.uio.no)



Sammen med **Abril Castro** vil du lære hvordan du simulerer strukturelle, elektroniske og spektroskopiske egenskaper. Mulige emner er modellering av NMR-egenskaper for å forutsi og tolke eksperimenter, analyse av kjemiske bindinger i løsnings- og faststoffsystemer, og studier av molekyler som inneholder tunge atomer.

Kontakt: [abril.castro@kjemi.uio.no](mailto:abril.castro@kjemi.uio.no)



← Besøk vår nettside

 Hylleraas