

# 2011

- **Informacja o wykorzystaniu czasu komputerowego w WCSS w roku 2011 przez Zespół Zakładu Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej wraz ze współpracownikami z innych jednostek Politechniki Wrocławskiej.**

prof. dr hab.	W. Andrzej	Sokalski	profesor
prof. dr hab.	Szczepan	Rozzak	profesor
prof. dr hab.	Henryk	Chojnacki	profesor em.
dr hab.	Tadeusz	Andruniów	profesor PWr
dr inż.	Paweł	Kędzierski	adiunkt
dr inż.	Borys	Szefczyk	asystent
prof. dr hab.	Paweł	Kafarski	profesor
dr hab.	Łukasz	Berlicki	adiunkt
dr inż.	Karol	Langner	adiunkt
dr inż.	Tomasz	Misiaszek	adiunkt
dr inż.	Paweł	Szarek	asystent
dr inż.	Edyta	Dyguda-Kazimierowicz	asystent
mgr inż.	Agnieszka	Dzielendziak	doktorantka
mgr inż.	Paweł	Kadłubański	doktorant
mgr inż.	Rafał	Rozzak	doktorant
mgr inż.	Dorota	Ślepieńczuk	doktorantka
mgr inż.	Elżbieta	Walczak	doktorantka
mgr inż.	Łukasz	Wolański	doktorant
inż.	Wiktor	Beker	dyplomant
	Wiktor	Giedroyc-Piasecka	dyplomantka

# Materiały węglowe

- [The Evolution of Bonding and Thermodynamic Properties of Boron-Doped Small Carbon Clusters: An Ab Initio Study](#)

Saloni Julia; Kadlubanski Pawel; Roszak Szczepan; Majumdar, D.,  
Hill Jr. G., Leszczyński Jerzy  
CHEMPHYSICHEM Volume: **12** Issue: **7** Pages: **1358-1366**

# Ekologia

- Probing the structures and thermodynamic characteristics of the environment polluting mercuric halides, cyanides and thiocyanates

Majumdar D.; Roszak Szczepan; Leszczynski Jerzy  
CHEMICAL PHYSICS LETTERS

Volume: **501** Issue: **4-6** Pages: **308-314**

# Witamina B

- **Electronic and Structural Properties of Low-lying Excited States of Vitamin B(12)**

Lodowski Piotr; Jaworska Maria; Kornobis Karina; Andruniow Tadeusz, Kozłowski P.M.

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B

Volume: **115** Issue: **45** Pages: **13304-13319**

- **Electronically Excited States of Vitamin B(12): Benchmark Calculations Including Time-Dependent Density Functional Theory and Correlated ab Initio Methods**

Kornobis Karina; Kumar Neeraj; Wong Bryan M.; Lodowski P., Jaworska M., Andruniow T., Ruud K., Kozłowski P.M.

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A

Volume: **115** Issue: **7** Pages: **1280-1292**

# Dynamika molekularna

- **Molecular Dynamics Simulations of Pregelification Mixtures for the Production of Imprinted Xerogels**  
Azenha Manuel; Szefczyk Borys; Loureiro Dianne; Kathirvel P.,  
Cordeiro M.N.D.S., Fernando-Silva A.  
LANGMUIR Volume: **27** Issue: **8** Pages: **5062-5070**
- **Physical Properties at the Base for the Development of an All-Atom Force Field for Ethylene Glycol**  
Szefczyk Borys; Cordeiro M. Natalia D. S.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B  
Volume: **115** Issue: **12** Pages: **3013-3019**

# Oddziaływania molekularne

- [The Ethidium-UA/AU Intercalation Site: Effect of Model Fragmentation and Backbone Charge State](#)

Langner Karol M.; Janowski Tomasz; Gora Robert W.;  
Dziekonski P., Sokalski W.A., Pulay P.

JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION

Volume: **7** Issue: **8** Pages: **2600-2609**

# Chemia organiczna

- [Remarkable Potential of the alpha-Aminophosphonate/Phosphinate Structural Motif in Medicinal Chemistry](#)

Mucha Artur; Kafarski Pawel; Berlicki Lukasz

JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY

Volume: **54** Issue: **17** Pages: **5955-5980**



# Właściwości optyczne

- [Helical Superstructure and Charged Polarons Contributions to Optical Non linearity of 2-Methyl-4-nitroaniline Crystals Studied by Resonance Raman, Electron Paramagnetic Resonance, Circular Dichroism Spectroscopies, and Quantum Chemical Calculations](#)  
Szostak M. Magdalena; Chojnacki Henryk; Piela Katarzyna; et al.  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A  
Volume: **115** Issue: **26** Pages: **7448-7455**
- [Charged polaron-enhanced circular dichroism of optically nonlinear 3-nitroaniline crystal](#)  
Szostak M. Magdalena; Chojnacki Henryk  
OPTICAL MATERIALS  
Volume: **33** Issue: **9** Pages: **1395-1397**

# Chemia fizyczna

- [Non-empirical quantum chemical studies on electron transfer reactions in trans- and cis-diamminedichloroplatinum\(II\) complexes](#)

Kuduk-Jaworska Janina; Chojnacki Henryk; Janski Jerzy J.  
JOURNAL OF MOLECULAR  
MODELING Volume: **17** Issue: **9** Pages: **2411-2421**

# Doktoraty i współprace

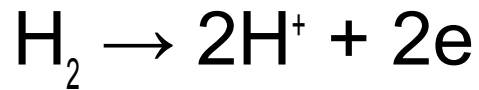
- **Uzyskane wyniki są częścią 7 prac doktorskich**
- Prowadzono współpracę zagraniczną z
  - Jackson State University, Jackson, MS, USA
  - University of Porto, Porto, Portugalia
  - University of Louisville, Kansas, USA

# Ogniwa paliwowe - ORR

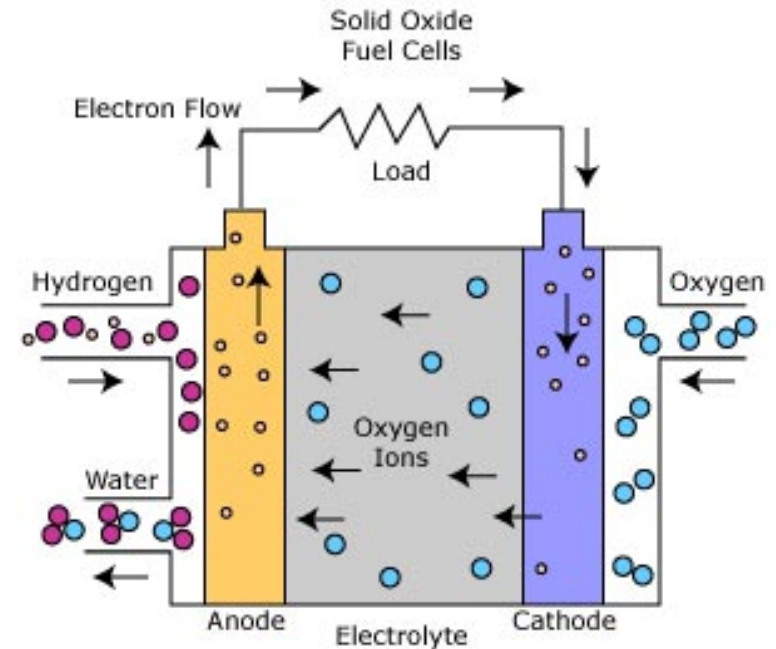
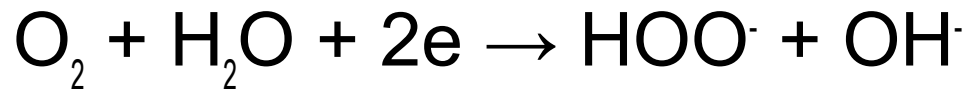
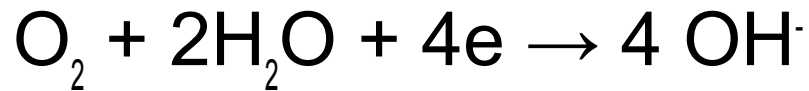
- **Ustalono mechanizmu redukcji tlenu (ORR, ang. oxygen reduction reaction) katalizowanej przez domieszkowane azotem materiały węglowe w środowisku zasadowym**
- **Reakcja ta decyduje o sprawności całego ogniwa**

# Ogniwa paliwowe - Wprowadzenie

- **anoda (ogniwo wodorowe):**



- **katoda:**



# Ogniwa paliwowe - katalizatory

<u>Katalizatory metaliczne</u>	<u>Katalizatory organiczne</u>
Głównie Pt	Materiały węglowe z azotem
Wysoka aktywność	Aktywność zależna od typu
Wysoka selektywność	Selektywność zależna od typu
Wysoka cena	Niska cena
Mała trwałość	Duża trwałość
Mała odporność na zanieczyszczenia	Duża odporność na zanieczyszczenia

**Czym musi charakteryzować się materiał węglowy aby być selektywnym i aktywnym katalizatorem w ORR?**

# ORR - mechanizm

**W literaturze został opisany jedynie mechanizm ORR w środowisku kwaśnym (w którym reakcja jest mniej wydajna).**

**Mechanizm ORR w środowisku zasadowym nie został dotychczas poznany.**

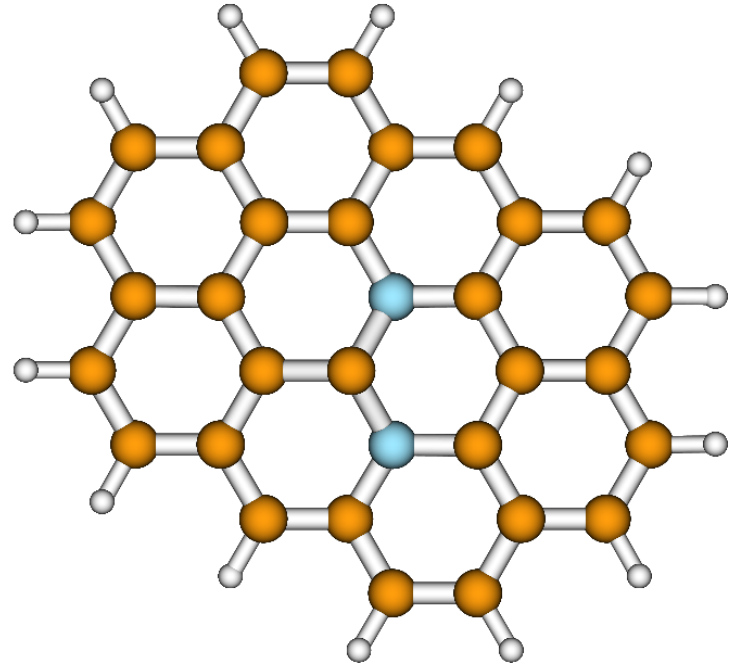
# ORR - mechanizm

- **Model:**

- grafen  $C_{29}(NCN)H_{14}$

- Yang, W.; Feller, T-P.; Antonietti, M.

- J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 206-209



- **Poziom teorii**

- b3lyp/cc-pvdz i b3lyp/aug-cc-pvdz (b3lyp/6-31++G<sup>\*\*</sup>)

- model rozpuszczalnika: CPCM



# ORR – wyniki

- Solwatacja anionów OH i OOH

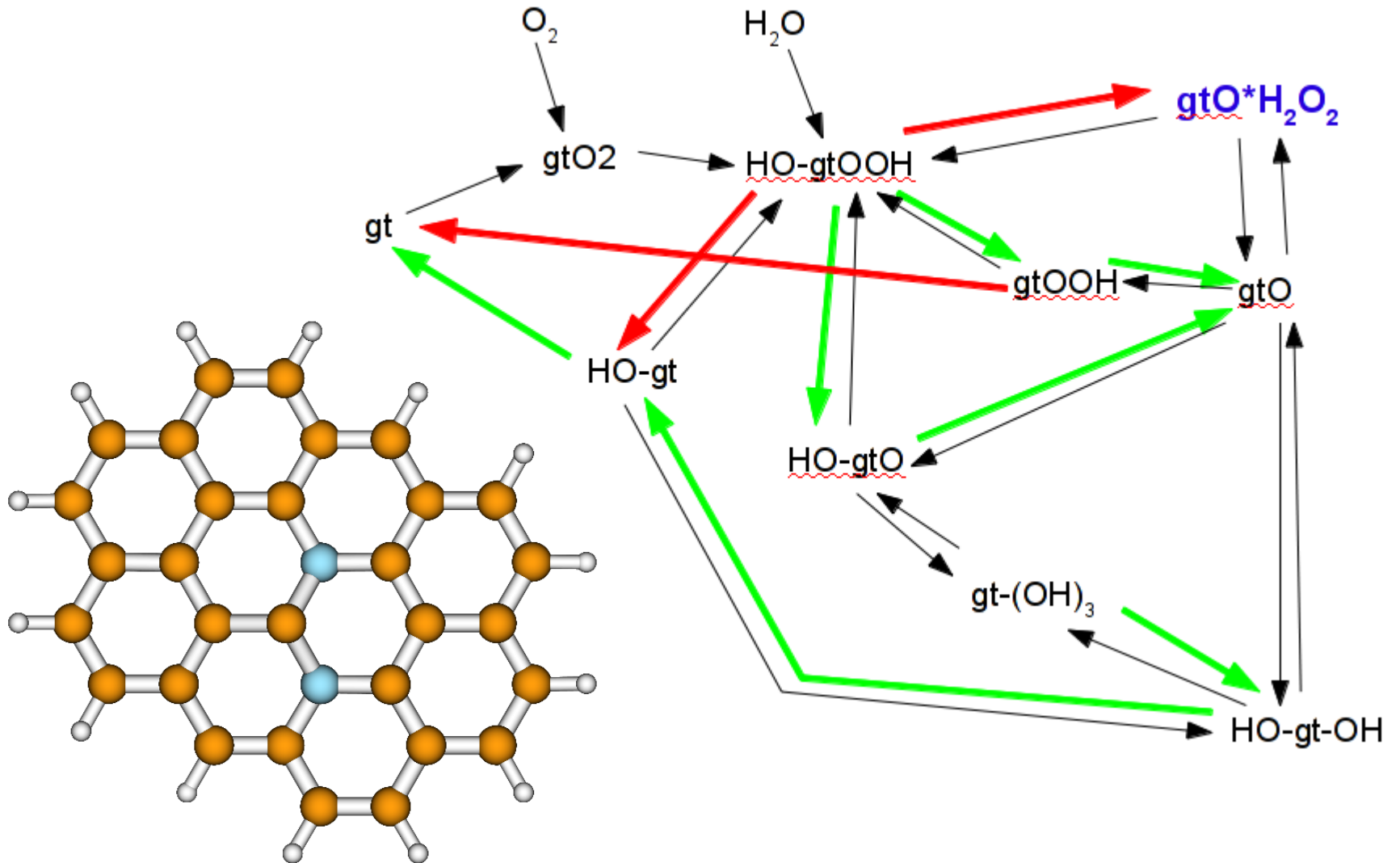
do poprawnego opisu solwatacji i dysocjacji anionów konieczne są:

- baza z funkcjami rozmytymi
- zastosowanie modelu ciągłego polaryzacyjnego modelu rozpuszczalnika (PCM)
- uwzględnienie explicite cząsteczek wody, liczba cząsteczek zależna jest struktury katalizatora (produktu przejściowego)

- Określenie mechanizmu reakcji redukcji tlenu

- znaleziono ponad 40 stanów przejściowych
- określono wszystkie (?) dostępne ścieżki reakcji

# ORR – wyniki



# ORR – podsumowanie

- 3 rodzaje reakcji:
  - dysocjacja jonów: OH i OOH
  - dysocjacja/addycja  $H_2O_2$
  - addycja: wody (i tlenu)
- Reakcja decydująca o szybkości procesu:
  - Addycja wody do gt-O i HO-gt-O
- Procesy decydujące o selektywności:
  - Reaktywność grup gt-OOH
  - Szybkość tworzenia  $H_2O_2$  z anionu OOH
  - Dostępność grup gt-O

# ORR – wnioski

- Projektowanie materiałów
  - wpływ zmian składu katalizatora na reaktywność produktów pośrednich:  
gt-O  
gt-OOH oraz HO-gt-OOH