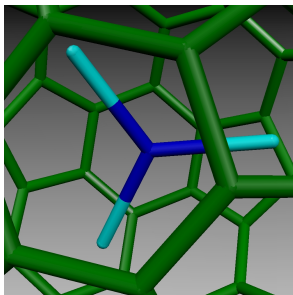


Strukturalne, elektryczne i optyczne właściwości kompleksów i materiałów molekularnych

Sprawozdanie za rok 2013



Justyna Kozłowska

Zakład Chemii Teoretycznej,
Instytut Chemii Fizycznej i
Teoretycznej
Politechnika Wrocławska

Wrocław, 11 lutego 2014



Zakład Chemii Teoretycznej

Prof. Wojciech BARTKOWIAK
Dr hab. Krzysztof STRASBURGER
Dr inż. Robert GÓRA
Dr Paweł LIPKOWSKI
Dr inż. Robert ZALEŚNY
Dr inż. Agnieszka ROZTOCZYŃSKA
Dr inż. Mikołaj MIKOŁAJCZYK
Mgr inż. Małgorzata WIELGUS
Mgr inż. Marta SOWULA
Mgr inż. Paulina NACIAŻEK
Mgr inż. Justyna KOZŁOWSKA

Studenci realizujący prace badawcze

Joanna Bednarska
Marta Chołuj
Karolina Dzierzkowska
Anna Grabarz
Magdalena Kowalska
Przemysław Kubik
Paweł Łata
Piotr Olszewski
Kamila Radożycka
Sebastian Sitkiewicz

Współpracujący użytkownicy

Dr Angelika Baranowska-Łączkowska (Bydgoszcz)

Dr Żaneta Czyżnikowska (Wrocław)

Dr Petro Lutsyk (Ukraina)

Dr inż. Tomasz Misiaszek (Wrocław)

Dr Daniel Luiz da Silva (Brazylia)

Mgr inż. Bartosz Błasiak (Korea)

Mgr inż. Ireneusz Bulik (USA)

Mgr inż. Piotr Kasprzycki (Warszawa)

Mgr inż. Michał Maj (Korea)

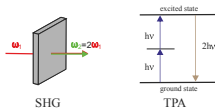
Mgr inż. Rafał Szabla (Czechy)

Mgr Kristinn Torfason (Islandia)

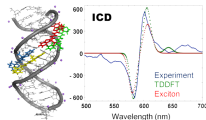


Tematyka prowadzonych badań

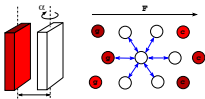
⇒ Molekularna optyka nieliniowa



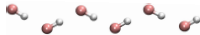
⇒ Modelowanie zjawiska bezpromienistego przeniesienia energii



⇒ Elektronika molekularna



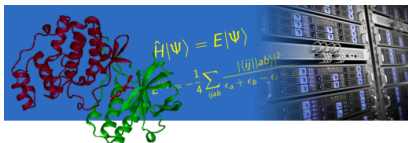
⇒ Teoria oddziaływań w układach z wiązaniem wodorowym



Realizowane granty

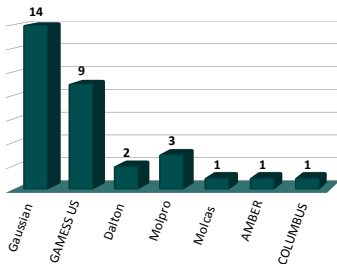
- 1 Grant badawczy NCN (dr inż. Agnieszka Roztoczyńska): Wiązania wodorowe w ograniczonych przestrzeniach (2012-2015)
- 2 Grant badawczy NCN (dr inż. Robert W. Góra): Teoretyczne badania procesów rezonansowego przenoszenia energii w modelowych układach oraz w spiralnych agregatach barwników cyjaninowych w matrycach (2011-2014).
- 3 Grant badawczy NCN (dr inż. Robert Zaleśny): Oscylacje molekuł a ich nieliniowe właściwości optyczne (2011-2014)
- 4 Grant badawczy NCN (mgr inż. Justyna Kozłowska): Rezonansowe i nierezonansowe nieliniowe właściwości optyczne molekuł w ograniczonych przestrzeniach. Studium teoretyczne. (2014-2016)
- 5 Grant badawczy NCN (mgr inż. Małgorzata Wielgus): Nowe oblicza solwatochromizmu: Absorpcja dwukwantowa układów molekularnych i nanostruktur w fazie skondensowanej. (2014-2015)
- 6 Grant badawczy MNiSW (dr inż. Robert Zaleśny): Nieliniowe właściwości optyczne fotoaktywnych układów molekularnych (2012-2014)
- 7 Program KOLUMB, stypendium FNP (dr inż. Robert Zaleśny): Theory and computations of two-photon absorption spectra including vibronic coupling and environmental effects (2012-2013)

2 700 000 godzin obliczeniowych

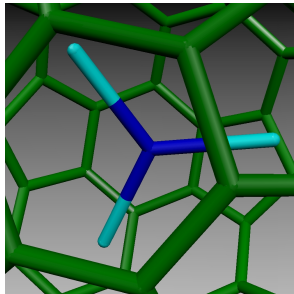


- opublikowano 23 prace
“A generous computer time from the Wroclaw Supercomputer and Networking Center is acknowledged.”
- $\frac{\text{Impact Factor}}{\text{Liczba publikacji}} = 2.83$

- pakiety obliczeniowe



Molekuły i kompleksy molekularne w warunkach ograniczenia przestrzennego - właściwości strukturalne, energetyczne i elektryczne



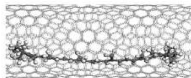
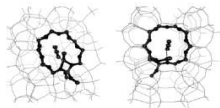
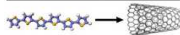
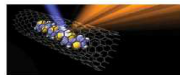
Justyna Kozłowska

Zakład Chemii Teoretycznej,
Instytut Chemii Fizycznej i
Teoretycznej
Politechnika Wrocławska

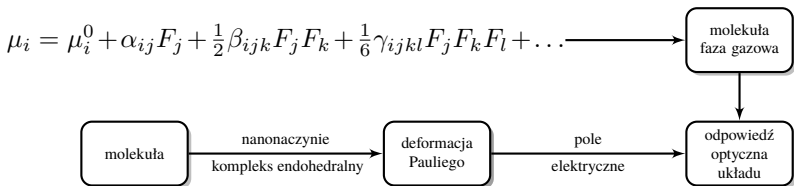
Wrocław, 11 lutego 2014

Fizykochemia ograniczonych przestrzeni

- kompleksy endohedralne
- molekuly w nanokanałach zeolitów
- związki inkluzyjne
- molekuly w inertnych matrycach (He)
- materia pod wysokim ciśnieniem

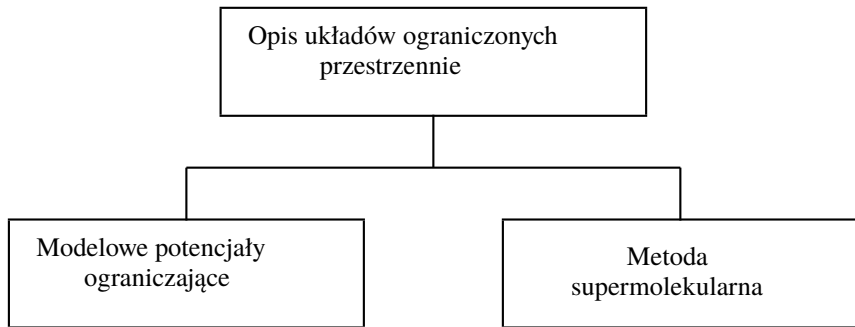


Właściwości elektryczne cząsteczek w ograniczonej przestrzeni



Rachunek zaburzeń : $\Delta E = E_{elst} + E_{ind} + E_{disp} + E_{exch}$

Modele teoretyczne



$$\left[\hat{H}^0 + V_{\text{ogr}}(r) \right] \Psi_n = E_n \Psi_n$$

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

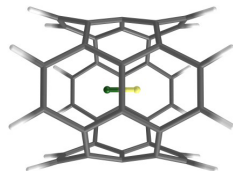
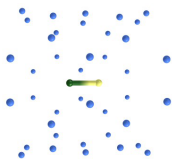
Molekuły dwuatomowe ($\mu \neq 0$) w ograniczeniu przestrzennym

J. Kozłowska, R. Zaleśny, W. Bartkowiak

*"On the nonlinear electrical properties of molecules in confined spaces –
– from cylindrical harmonic potential to carbon nanotube cages"*

Chem. Phys. 428:19–28 (2014)

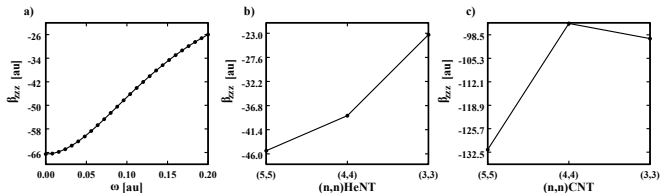
$$\left[\hat{H}_0 + \sum_{i=1}^N \underbrace{V_{conf}(r_i)} \right] \Psi_{el} = E_{el} \Psi_{el}$$
$$V_{conf}(r_i) = \frac{1}{2} \omega^2 r_i^2$$



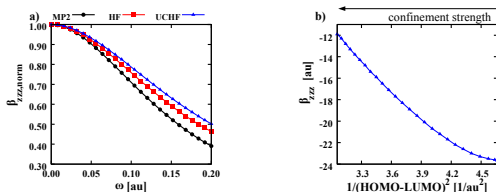
μ, α, β

Molekuły dwuatomowe ($\mu \neq 0$) w ograniczeniu przestrzennym

⇒ LiF – różne modele ograniczenia przestrzennego



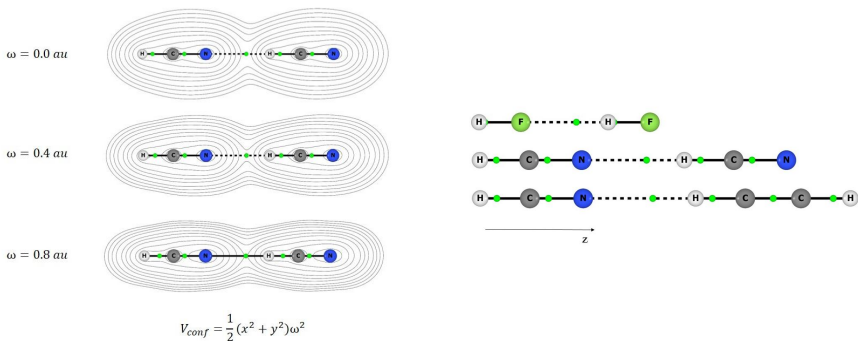
⇒ LiF – aspekt metodologiczny



Kompleksy połączone wiązaniem wodorowym w ograniczeniu przestrzennym

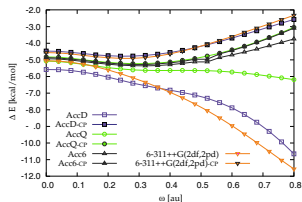
P. Lipkowski, J. Kozłowska, A. Roztoczyńska, W. Bartkowiak

"Hydrogen – bonded complexes upon spatial confinement : Structural and energetic aspects" Phys. Chem. Chem. Phys. 16:1430-1440 (2014)

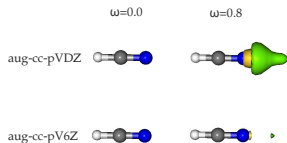


Kompleksy połączone wiązaniem wodorowym w ograniczeniu przestrzennym

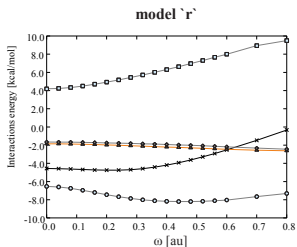
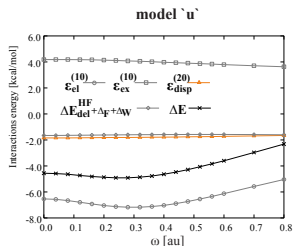
⇒ Znaczący wzrost BSSE



HCN(DCBS) - HCN(MCBS)



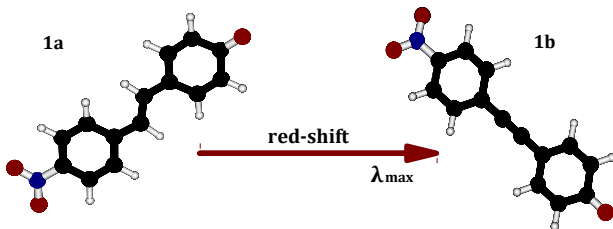
⇒ Dekompozycja energii oddziaływania



Widma absorpcyjne UV-Vis – eksperyment vs TD-DFT

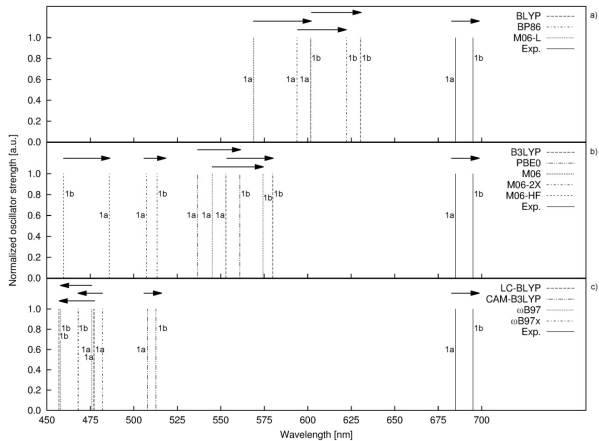
J. Kozłowska, M. Wielgus, W. Bartkowiak

"TD – DFT study on the charge – transfer excitations of anions possessing double or triple bonds" Comput. Theor. Chem. 1014:49-55 (2013)



⇒ Dane eksperymentalne: Kirketerp et al., ChemPhysChem 11:2495-2498(2010)

Widma absorpcyjne UV-Vis – eksperyment vs TD-DFT



Podziękowania dla

- Wrocławskiego Centrum Sieciowo–Superkomputerowego
- Infrastruktury PL–Grid
- Koleżanek i Kolegów z Zakładu Chemii Teoretycznej PWr

