

## Metoda obliczeniowa do opisu oddziaływań międzycząsteczkowych w stanie wzbudzonym

Wiązania kowalencyjne to te, dzięki którym woda, tlen i inne substancje występują w przyrodzie w formie cząsteczek. Oprócz nich istnieją jeszcze tzw. oddziaływania niekowalencyjne – słabsze od kowalencyjnych, ale równie ważne. Odpowiadają one za stany skupienia materii, przestrzenną strukturę cząsteczek, utrudniają lub ułatwiają poszczególne reakcje chemiczne. Opis tych oddziaływań, ze względu na ich subtelność, często sprawia trudność teoretykom, jednak jest on konieczny do poprawnego modelowania materiałów i reakcji chemicznych.

Najpopularniejsza grupa metod obliczeniowych – tzw. DFT, początkowo nie radziła sobie z oddziaływaniami niekowalencyjnymi, jednak dzięki specjalnym poprawkom jest obecnie w stanie je opisywać. Niestety poprawki te zostały wprowadzone tylko dla tzw. stanu podstawowego. To znaczy, że kiedy interesująca nas cząsteczka zaabsorbuje światło, nie będziemy już w stanie opisać jej oddziaływań z otoczeniem. To duże utrudnienie, bo materia znajdująca się w stanie wzbudzonym jest bardzo interesująca dla chemików i nie tylko.

W szczególności, modelowanie materiałów dla ogniw słonecznych oraz cząsteczkowych fotoprzełączników wymaga dobrego opisu jednocześnie stanów wzbudzonych oraz oddziaływań niekowalencyjnych. Ogniwa słoneczne zamieniają energię świetlną na elektryczną. Są one obecnie największą szansą na zastąpienie węgla jako głównego źródła energii elektrycznej. Z kolei fotoprzełączniki to cząsteczki, które zmieniają swoją geometrię pod wpływem światła, dzięki czemu potrafią otworzyć lub zamknąć „obwód elektryczny” skonstruowany w skali nano. Gdybyśmy potrafili szybko i tanio znaleźć najlepszych możliwych „kandydatów” na ogniwa lub fotoprzełączniki, znacząco obniżylibyśmy koszty ich produkcji – zamiast żmudnie konstruować a potem testować dziesiątki lub setki cząsteczek, wystarczyłoby je wymodelować komputerowo, a następnie stworzyć w laboratorium kilka wybranych, najlepiej rokujących cząsteczek.

Niniejszy projekt ma na celu uzupełnienie zestawu narzędzi, którymi dysponuje chemia obliczeniowa i stworzenie metody, która tanio i dokładnie opisywałaby oddziaływania - w tym również niekowalencyjne - w stanie wzbudzonym. Metoda zostanie zaimplementowana w szeroko dostępnym programie do obliczeń kwantowochemicznych, a następnie użyta do opisu układów takich jak perylen i jego pochodne, które mają zastosowanie w budowie ogniw, co może przyczynić się do skonstruowania tych urządzeń o lepszej efektywności niż już istniejące.

Głównym wynikiem projektu będzie jednak sama metoda, jako pierwsza na świecie metoda typu DFT będąca w stanie oprócz opisu wiązań kowalencyjnych opisywać dokładnie oddziaływania niekowalencyjne w stanach wzbudzonych.