

Projektowanie oraz badanie własności materiałów fotoaktywnych opartych o związki organiczne, takich jak diody elektroluminescencyjne czy fotoogniwa woltaiczne, to jedna z intensywnie rozwijających się gałęzi chemii. Struktura tych materiałów jest zdeterminowana przez oddziaływania niekowalencyjne – siły międzycząsteczkowe odpowiedzialne za tworzenie i stabilność kompleksów molekularnych. Oddziaływania niekowalencyjne są o jeden lub dwa rzędy wielkości słabsze niż oddziaływania kowalencyjne, w wyniku których tworzą się lub zrywają wiązania chemiczne, co prowadzi do powstania nowych molekuł. Niemniej jednak to oddziaływania międzycząsteczkowe, mimo że słabsze, są odpowiedzialne za istnienie cieczy, fałdowanie białek, zwijanie nici DNA/RNA, czy procesy rozpoznawania cząsteczek na poziomie molekularnym.

Zarówno siła jak i charakter oddziaływań niekowalencyjnych zmieniają się w wyniku wzbudzenia elektronowego. Może prowadzić to do modyfikacji struktury układu, np. reorganizacji sieci wiązań wodorowych, co skutkuje różnicami w zdolności do absorpcji i emisji światła. Postęp w inżynierii materiałów fotoaktywnych wymaga rozwoju metod chemii kwantowej, które mogą wspomóc syntezę nowych związków o pożądanym własnościach optycznych.

Współczesne metody chemii kwantowej stosowane w badaniu oddziaływań niekowalencyjnych pomiędzy cząsteczkami w stanie podstawowym osiągnęły poziom dokładności, który pozwala na porównanie z wynikami eksperymentalnymi. Obliczenia energii oddziaływania dla kompleksów w stanach wzbudzonych jest jednak wyzwaniem zrealizowanym tylko w niewielkim stopniu. Jedną z przyczyn jest fakt, że przybliżenia, które ułatwiają opis stanów podstawowych, nie mogą być zastosowane dla wyższych stanów elektronowych. Wobec tego konieczne są bardziej zaawansowane modele teoretyczne o większej złożoności obliczeniowej. Kolejne wyzwanie stanowią tzw. oddziaływania rezonansowe, które pojawiają się w kompleksach składających się z identycznych molekuł w różnych stanach elektronowych. To zjawisko nie występuje w stanach podstawowych i wymaga metod zdolnych opisać zdegenerowane stany elektronowe.

Celem projektu jest rozwój metody teoretycznej pozwalającej na obliczenia oddziaływań niekowalencyjnych w kompleksach w stanie wzbudzonym. Podejście to będzie oparte o rachunek zaburzeń, w którym energia oddziaływania obliczana jest bezpośrednio na podstawie własności podukładów i składa się z komponentów o jasnej interpretacji fizycznej: elektrostatyki, wymiany (energii odpychania Pauliego), indukcji oraz dyspersji. Metoda będzie łączyć efektywność obliczeniową oraz dokładność charakterystyczne dla teorii funkcjonału gęstości elektronowej z możliwością opisu stanów wzbudzonych przy pomocy funkcji falowej. W zdegenerowanym wariacie proponowane podejście umożliwi opis układów, w których pojawiają się oddziaływania rezonansowe. Układy takie to ekscymery oraz ekscypleksy – kompleksy, które odgrywają istotną rolę we materiałach optoelektronicznych oraz znajdują zastosowanie jako chemosensory czy znaczniki molekularne.

Wprowadzona metoda będzie mogła być użyta w obliczeniach dla dużych układów, takich jak organiczne kryształy o zdolnościach emisji światła czy materiały optoelektroniczne. Planowane badania pozwolą wyjaśnić rolę, jaką oddziaływania niekowalencyjne odgrywają w fotoaktywnych kompleksach molekularnych.