

Kolory różnych materiałów zawdzięczamy wzbudzeniom elektronowym. Ich charakterystyka energetyczna jest cząsteczkowym odpowiednikiem daktyloskopii. Wzbudzenia te powstają, ponieważ – zgodnie z mechaniką kwantową – molekuly mogą istnieć w rozmaitych stanach, które różnią się między sobą energią i innymi właściwościami. Zazwyczaj cząsteczki występują w stanie podstawowym, tzn. w stanie o najniższej energii, ale mogą ulegać wzbudzeniu do tak zwanych stanów wzbudzonych. Dzieje się to zazwyczaj pod wpływem promieniowania w obszarze UV-Vis lub promieni rentgenowskich. Aby zrozumieć podstawy fizyczne wzbudzeń elektronowych, nie wystarczy jedynie zbadanie położenia poziomów energetycznych. Wielkością, która może być wyznaczona wraz z energią, jest tzw. funkcja falowa, która umożliwia opis ruchów cząsteczek w ujęciu probabilistycznym. Ponieważ jednak sama funkcja falowa jest skomplikowanym konstruktem matematycznym, wykorzystuje się inne, prostsze (choć wciąż skomplikowane) wielkości, niosące wystarczającą ilość informacji o badanym układzie, takie jak np. gęstość ładunku. W ostatnich paru dekadach zaproponowano wiele modeli badania gęstości ładunku dla cząsteczek w stanach podstawowych, jednak dopiero ostatnio zaczęto zastosować metody, oparte na Chemicznej Topologii Kwantowej (*ang.* Quantum Chemical Topology – QCT) – jak nazywane są te metody – również do opisu stanów wzbudzonych.

W ramach niniejszego projektu planujemy zbadanie i dalszy rozwój metod opartych na Chemicznej Topologii Kwantowej do opisu stanów wzbudzonych. W szczególności planujemy skoncentrować się na opisie wzbudzeń elektronów znajdujących się w pobliżu jąder atomowych (tzw. wzbudzenia rdzeniowe) i wzbudzeń, w których ładunek elektryczny przepływa z jednego obszaru cząsteczki do drugiego (przejścia z przeniesieniem ładunku).

Chemicy są szczególnie zainteresowani poprawnym opisem elektronowych stanów wzbudzonych. Jednym z powodów są reakcje fotochemiczne, czyli takie, którym ulegają cząsteczki po zaabsorbowaniu światła. W niektórych przypadkach prowadzić to może do osłabienia wybranych wiązań w cząsteczce, które następnie mogą ulec rozerwaniu lub rotacji. Innym obszarem zastosowań są pomiary spektroskopowe, w których zasada działania wykorzystuje występowanie wzbudzeń elektronowych. Szczegółowe zbadanie zmian gęstości elektronowej w obrębie cząsteczek za pomocą odpowiednio zaprojektowanych narzędzi QCT ułatwi zrozumienie stanów wzbudzonych i reakcji chemicznych zachodzących pod wpływem światła.