

Rozwikłanie tajemnicy przenoszenia ładunku w związkach o mieszanej wartościowości.

Przejście z przeniesieniem ładunku (przejście CT) to reakcja w wyniku której następuje transfer ładunku z miejsca z nadmiarem ładunku (donoru) do miejsca z niedoborem ładunku (akceptora). Przejście CT jest zjawiskiem fundamentalnym obecnym zarówno w wielu procesach biologicznych determinujących podstawowe procesy życiowe na naszej planecie (np. fotosynteza), jak i wykorzystywane w różnorodnych rozwiązaniach technologiach (np. ogniwa fotowoltaiczne).

Związki chemiczne, w których występuje przejście CT nazywają się związkami z mieszaną walencyjnością. Mogą nimi być związki organiczne, nieorganiczne, kompleksy metaloorganiczne lub kryształy. Badania nad tymi związkami pozwalają zrozumieć, zoptymalizować i kontrolować przejście CT. Metody obliczeniowe chemii kwantowej mogą wywrzeć duży wpływ na poziom wiedzy na temat przesyła CT. Dają bowiem precyzyjne informacje na temat geometrii cząsteczek, jak również dokładny opis właściwości elektronowych. Te informacje mogą być później użyte do lokalizacji ładunku w molekułe i zdeterminowanie jego natury tj. czy jest on zdelokalizowany (zdecentralizowany pomiędzy donorem a akceptorem) czy też zlokalizowany (zcentralizowany na donorze lub akceptorze).

W zaproponowanym projekcie, badania przeprowadzane będą różnymi metodami obliczeniowymi chemii kwantowej, które precyzyjnie określą położenie i poziom zcentralizowania ładunku w badanej cząsteczce. Migracja ładunku podczas przejścia CT wpływa na zmianę geometrii jak i struktury elektronowej cząsteczki. W czasie realizacji projektu zostaną opisane stany początkowe, przejściowe i końcowe na ścieżce reakcji danej cząsteczki ze względu na ich geometrie, struktury elektronowe oraz energie. Dzięki tym badaniom będzie można określić w jaki sposób przebiega mechanizm przejścia CT w badanym związku.

Jeśli projekt odniesie sukces, zostanie znacznie poszerzona wiedza możliwych mechanizmów przepływu ładunku pomiędzy donorem a akceptorem z perspektywy molekularnej. Ze względu na to, że przejście CT jest procesem fundamentalnym, który indukuje większość najważniejszych procesów biologicznych, rezultaty otrzymane metodami obliczeniowymi chemii kwantowej mogą pomóc rozwikłać skomplikowane ścieżki reakcji procesów występujących w naturze. Ponadto, zrozumienie migracji ładunku może pomóc lepiej kontrolować i ulepszyć istniejące urządzenia, których działanie bazuje na przejściu CT. Badanie związków, posiadających dwa stany różniące się stopniem lokalizacji ładunku daje możliwość przetestowania skuteczności metod chemii kwantowej w opisywaniu wymagających systemów. Dodatkowo, otrzymane dane mogą uzupełnić eksperymentalne rezultaty na temat procesów, które odbywają się w czasie femtosekund, czyli biliardowej (10^{-15}) części sekundy.