

WCSS sprawozdanie za rok 2012

Strukturalne, elektryczne i optyczne właściwości kompleksów i materiałów molekularnych

Mikołaj Mikołajczyk

Zakład Chemii Teoretycznej, Instytut Chemii Fizycznej i Teoretycznej,
Politechnika Wrocławska

5 luty 2013 r.

Zakład Chemii Teoretycznej

dr hab. Wojciech BARTKOWIAK,
Prof. PWr

dr hab. Krzysztof STRASBURGER

dr inż. Robert GÓRA

dr Paweł LIPKOWSKI

dr inż. Robert ZALEŚNY

dr inż. Agnieszka ROZTOCZYŃSKA

dr inż. Mikołaj MIKOŁAJCZYK

doktoranci:

mgr inż. Justyna KOZŁOWSKA

mgr inż. Małgorzata WIELGUS

Dyplomanci i studenci realizujący prace badawcze

Michał Michalski

Zuzanna Szarek

Paweł Łata

Sebastian Sitkiewicz

Joanna Bednarska

Karolina Dzierzkowska

Michał Zubel

Radosław Kolkowski

Dzianis Kozakevich

Piotr Olszewski

Kamila Rodożycka

Marta Chołuj

Mateusz Śmigowski

Magdalena Kowalska

Współpracujący użytkownicy

dr. inż. Tomasz Misiaszek (Wrocław)

dr Daniel Luiz da Silva (Brazylia)

dr Żaneta Czyżnikowska (Wrocław)

mgr inż. Ireneusz Bulik (USA)

mgr inż. Stanisław Kasprzycki (Warszawa)

dr Petro Łucyk (Ukraina)

dr Angelika Baranowska-Laczowska (Bydgoszcz)

mgr Kristinn Torfason (Islandia)

inż. Michał Maj (Korea)

mgr inż. Bartosz Błasiak (Korea)

mgr inż. Rafał Szabla (Czechy)

Realizowane granty

- ❶ Grant MNiSW/NCN (promotorski, doktorant: M. Mikołajczyk): Teoretyczne i eksperymentalne badania ruchliwości nośników ładunku w materiałach organicznych (2010-2012). N N507 388139
- ❷ Grant badawczy NCN: Wiązania wodorowe w ograniczonych przestrzeniach (2012-2015). 011/03/D/ST4/00744
- ❸ Grant badawczy NCN: Teoretyczne badania procesów rezonansowego przenoszenia energii w modelowych układach oraz w spiralnych agregatach barwników cyjaninowych w matrycach (2011-2014). DEC-2011/03/B/ST4/00587
- ❹ Grant badawczy NCN: Oscylacje molekuł a ich nieliniowe właściwości optyczne (2011-2014). DEC-2011/01/D/ST4/03149
- ❺ Grant badawczy MNiSW: Nieliniowe właściwości optyczne fotoaktywnych układów molekularnych (2012-2014). 0628/IP3/2011/71
- ❻ Program KOLUMB, stypendium FNP (dr. R. Zaleśny): Theory and computations of two-photon absorption spectra including vibronic coupling and environmental effects (2012-2013).

Realizowane granty

- ❶ Grant MNiSW/NCN (promotorski, doktorant: M. Mikołajczyk): Teoretyczne i eksperymentalne badania ruchliwości nośników ładunku w materiałach organicznych (2010-2012). N N507 388139
- ❷ Grant badawczy NCN: Wiązania wodorowe w ograniczonych przestrzeniach (2012-2015). 011/03/D/ST4/00744
- ❸ Grant badawczy NCN: Teoretyczne badania procesów rezonansowego przenoszenia energii w modelowych układach oraz w spiralnych agregatach barwników cyjaninowych w matrycach (2011-2014). DEC-2011/03/B/ST4/00587
- ❹ Grant badawczy NCN: Oscylacje molekuł a ich nieliniowe właściwości optyczne (2011-2014). DEC-2011/01/D/ST4/03149
- ❺ Grant badawczy MNiSW: Nieliniowe właściwości optyczne fotoaktywnych układów molekularnych (2012-2014). 0628/IP3/2011/71
- ❻ Program KOLUMB, stypendium FNP (dr. R. Zaleśny): Theory and computations of two-photon absorption spectra including vibronic coupling and environmental effects (2012-2013).

Tematyka badań

- molekularna optyka nieliniowa
- opis właściwości elektrycznych molekuł w ograniczeniu przestrzennym
- elektronika organiczna
- teoria oddziaływań w układach o znaczeniu biologicznym
- teoria wiązania wodorowego
- rozwój metodologii obliczeń w oparciu o formalizm funkcji jawnie skorelowanych

Modelowanie właściwości przewodzących ciekłych kryształów bazujących na oligotiofenach

Mikołaj Mikołajczyk

Katedra i Zakład Chemii Fizycznej, Wydział Farmaceutyczny,



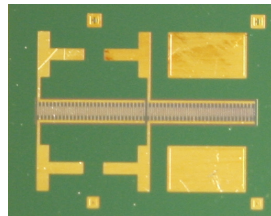
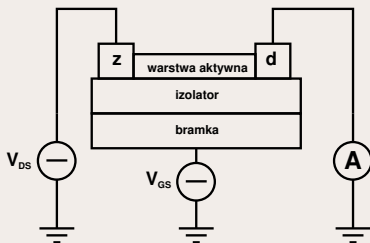
UNIwersYTET MEDYCZNY
IM. PIASTÓW ŚLĄSKICH WE WROCŁAWIU

5 lutego 2013 r.

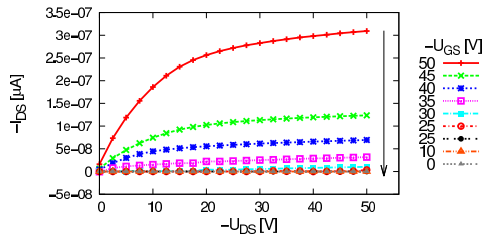
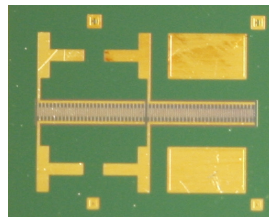
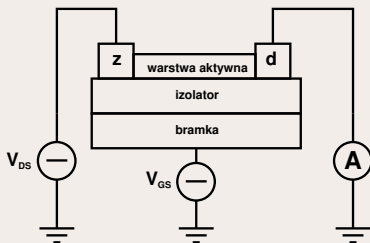
Elektronika Organiczna



Układ pomiarowy



Układ pomiarowy



Gęstość Prądu

$$j = en\nu_d$$

Ruchliwość Nośników Ładunku

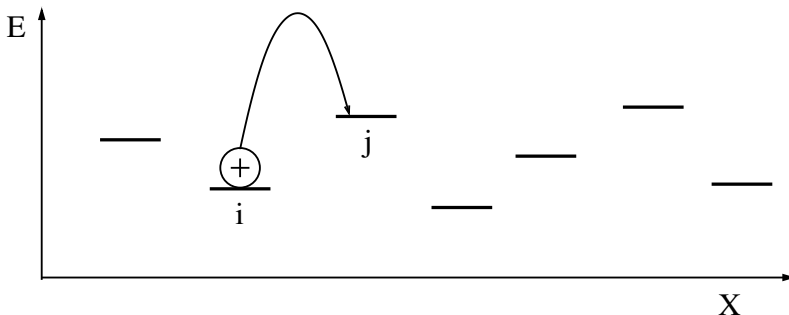
$$\mu = \frac{\partial \nu_d}{\partial E}$$

Równanie Markusa

$$k_{ij} = \frac{2\pi J_{ij}^2}{h} \sqrt{\frac{\pi}{2k_B T}} \exp\left(-\frac{\lambda + \varepsilon_j - \varepsilon_i}{4\lambda k_B T}\right)$$

Równanie Markusa

$$k_{ij} = \frac{2\pi J_{ij}^2}{h} \sqrt{\frac{\pi}{2k_B T}} \exp\left(-\frac{\lambda + \varepsilon_j - \varepsilon_i}{4\lambda k_B T}\right)$$



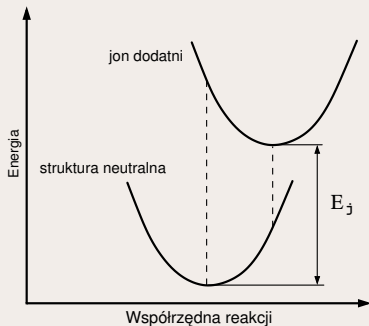
Energia obszaru molekularnego

$$\varepsilon_s = \langle \varphi_s | H | \varphi_s \rangle$$

Energia obszaru molekularnego

$$\varepsilon_s = \langle \varphi_s | H | \varphi_s \rangle$$

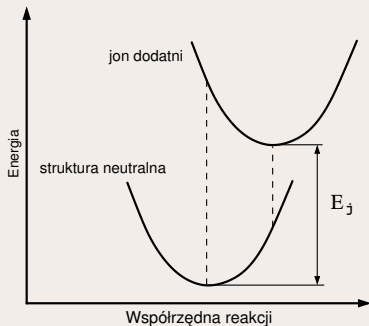
Energia jonizacji



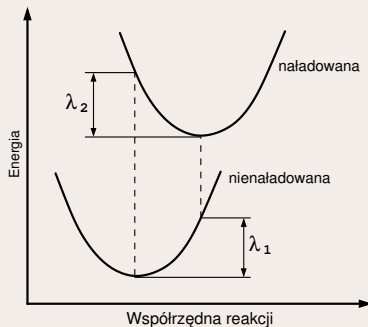
Energia obszaru molekularnego

$$\varepsilon_s = \langle \varphi_s | H | \varphi_s \rangle$$

Energia jonizacji



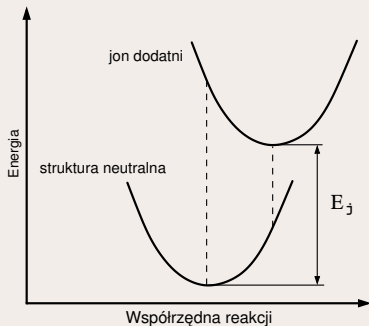
Energia reorganizacji



Energia obszaru molekularnego

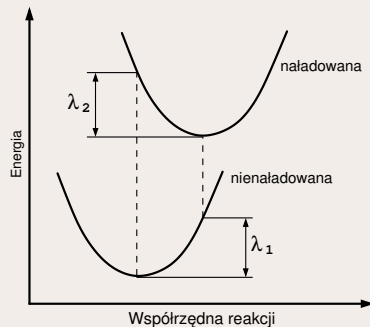
$$\varepsilon_s = \langle \varphi_s | H | \varphi_s \rangle$$

Energia jonizacji



Gaussian

Energia reorganizacji



Obliczenia całek przeniesienia ładunku

$$J_{s,s'} = \langle \varphi_s | H | \varphi_{s'} \rangle$$

Obliczenia całek przeniesienia ładunku

$$J_{s,s'} = \langle \varphi_s | H | \varphi_{s'} \rangle$$

$$J_{eff} = J_{s,s'} - \frac{1}{2} S_{s,s'} (\varepsilon_s - \varepsilon_{s'})$$

Obliczenia całek przeniesienia ładunku

$$J_{s,s'} = \langle \varphi_s | H | \varphi_{s'} \rangle$$

$$J_{eff} = J_{s,s'} - \frac{1}{2} S_{s,s'} (\varepsilon_s - \varepsilon_{s'})$$

 Gaussian

vs.



Scientific Computing & Modelling

Modyfikacja DNA

5'-ATTTTCTC T ATAT C TATAT-3'

3'-TAAAAAGAG₉A₁₀TATA₁₄G₁₅ATATA-5'

5'-ATTTTCTC T ZTZT C TATAT-3'

3'-TAAAAAGAG₉Z₁₀TZTZ₁₄G₁₅ATATA-5'

Modyfikacja DNA

5'-ATTTTCTC T ATAT C TATAT-3'
3'-TAAAAAGAG₉A₁₀TATA₁₄G₁₅ATATA-5'

5'-ATTTTCTC T ZTZT C TATAT-3'
3'-TAAAAAGAG₉Z₁₀TZTZ₁₄G₁₅ATATA-5'

K. Kawai, H. Kodera, Y. Osakada, Y. Majima,
*"Sequence-independent and rapid long-range charge transfer
through DNA"*
Nature Chemistry 1 (2009) 156–159

Modyfikacja DNA

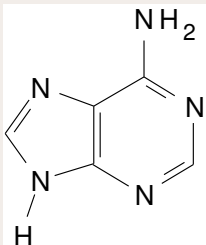
5'-ATTTTCTC T ATAT C TATAT-3'

3'-TAAAAGAG₉A₁₀TATA₁₄G₁₅ATATA-5'

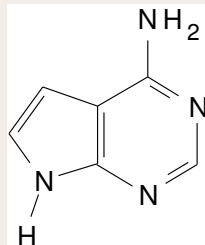
5'-ATTTTCTC T ZTZT C TATAT-3'

3'-TAAAAGAG₉Z₁₀TZTZ₁₄G₁₅ATATA-5'

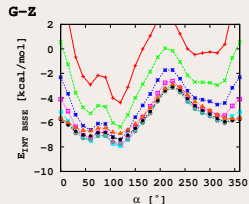
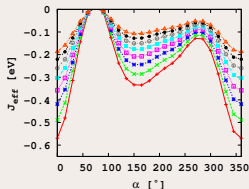
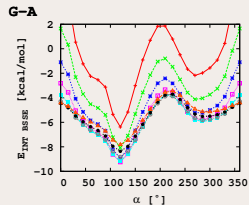
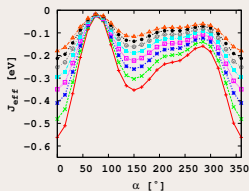
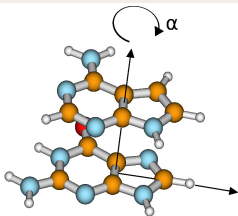
adenina



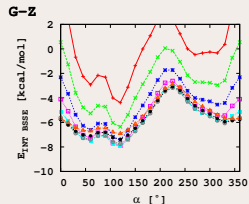
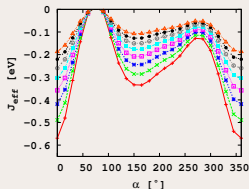
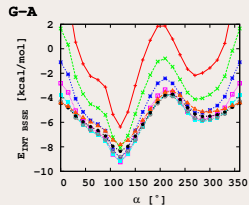
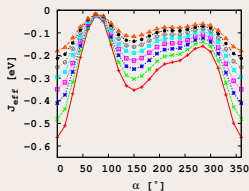
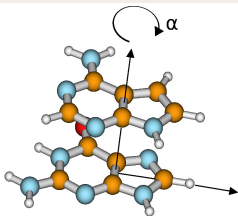
7-deazaadenina



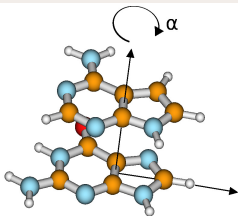
Parametry strukturalne



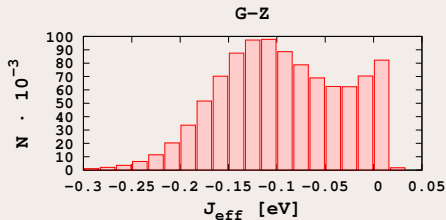
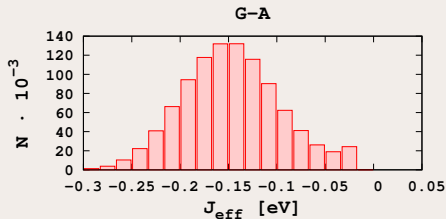
Parametry strukturalne



Parametry strukturalne



Rozkład Boltzmanna



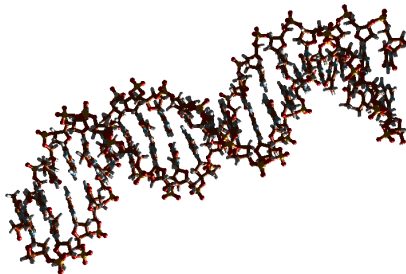
Dynamika molekularna

5'-ATTTTCTC T ATAT C TATAT-3'

3'-TAAAAAGAG₉A₁₀TATA₁₄G₁₅ATATA-5'

5'-ATTTTCTC T ZTZT C TATAT-3'

3'-TAAAAAGAG₉Z₁₀TZTZ₁₄G₁₅ATATA-5'



Dynamika molekularna

5'-ATTTTCTC T ATAT C TATAT-3'

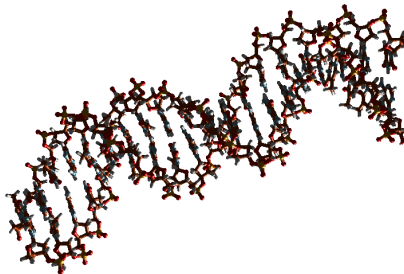
3'-TAAAAAGA_{G₉A₁₀}TAT_{A₁₄G₁₅}ATATA-5'

5'-ATTTTCTC T ZTZT C TATAT-3'

3'-TAAAAAGA_{G₉Z₁₀}TZT_{Z₁₄G₁₅}ATATA-5'



Amber11



Dynamika molekularna

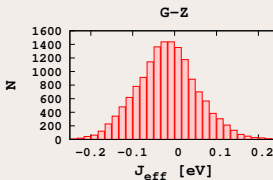
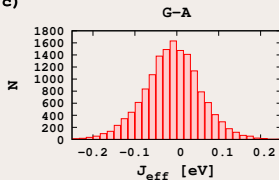
5'-ATTTTCTC T ATAT C TATAT-3'

3'-TAAAAAGA **G₉A₁₀** TAT **A₁₄G₁₅** ATATA-5'

5'-ATTTTCTC T ZTZT C TATAT-3'

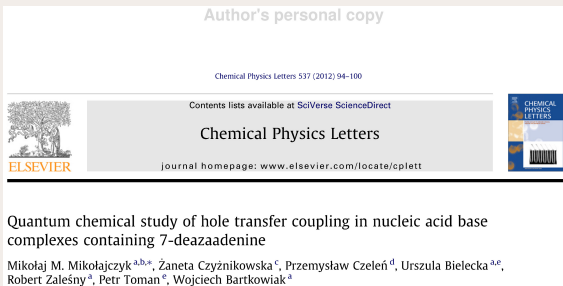
3'-TAAAAAGA **G₉Z₁₀** TZT **Z₁₄G₁₅** ATATA-5'

c)

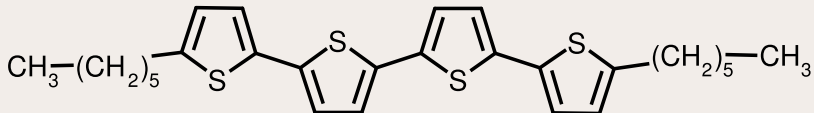


Rezultaty

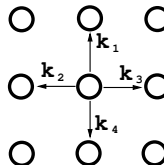
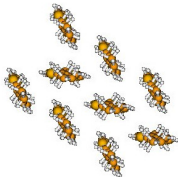
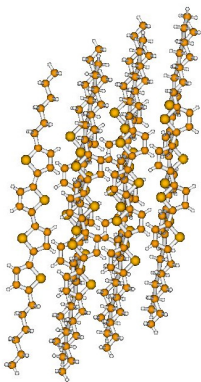
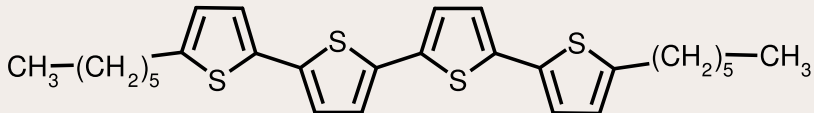
- przeanalizowana wpływ modyfikacji na najważniejsze parametry determinujące μ w DNA
- potwierdzono hipotezę zawartą w publikacji *Nature Chem.* **1** (2009) 156–159, że jedynie zmiana energii jonizacji znacząco wpływa na transport ładunku w modyfikowanym DNA



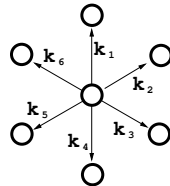
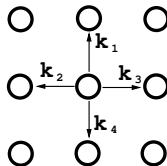
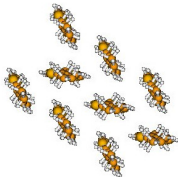
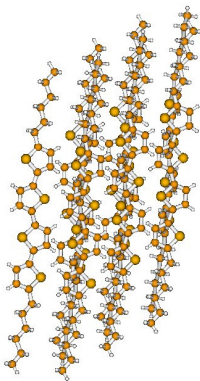
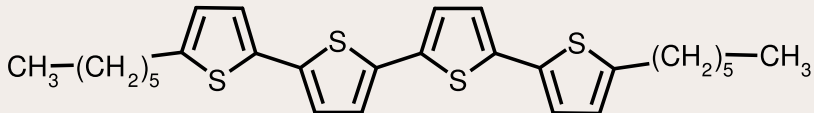
Badany układ

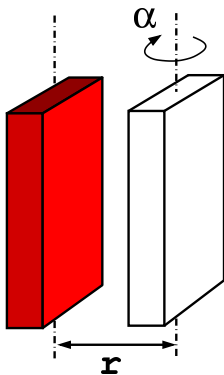


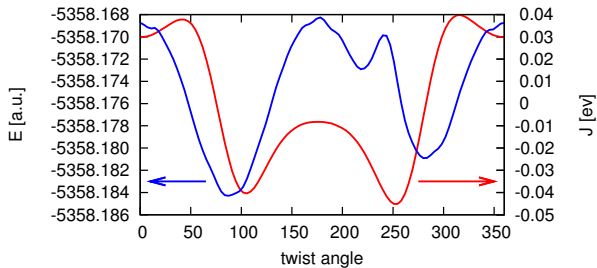
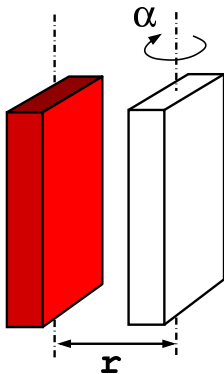
Badany układ

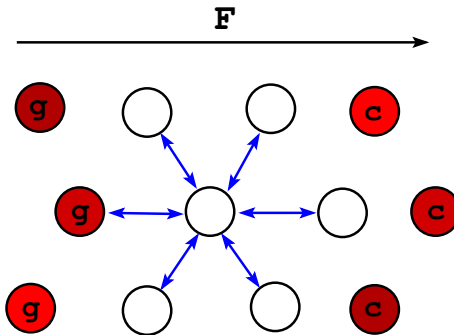
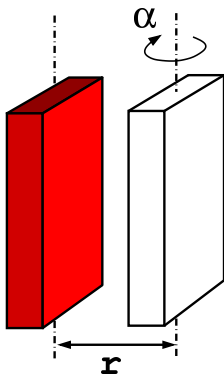


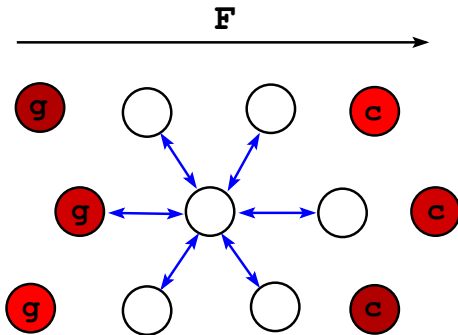
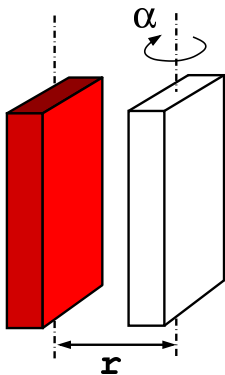
Badany układ





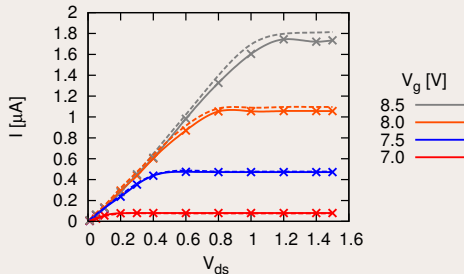
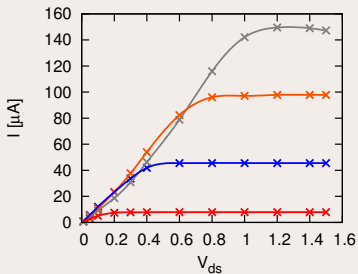






ToFeT J. Appl. Phys. 109, 113720 (2011)

Wstępne rezultaty



Plany badawcze

- Wykonanie obliczeń całek przeniesienia ładunku dla modelowych dimerów oligotiofenów.
- Przeprowadzenie symulacji MD dla różnych faz ciekłokrystalicznych.
- Wykonanie symulacji transportu nośników ładunku dla struktur z MD.

Plany badawcze

- Wykonanie obliczeń całek przeniesienia ładunku dla modelowych dimerów oligotiofenów.
- Przeprowadzenie symulacji MD dla różnych faz ciekłokrystalicznych.
- Wykonanie symulacji transportu nośników ładunku dla struktur z MD.



Dziękuję za uwagę.