

Badania spektroskopowe wybranych układów z wiązaniami wodorowymi prowadzone będą w stanie podstawowym i wzbudzonych stanach elektronowych. Badania te obejmą zaawansowane obliczenia kwantowo-mechaniczne o wysokiej precyzji wykonane w celu uzyskania informacji o energiach, strukturach i parametrach spektralnych badanych układów.

Projekt obejmuje obliczenia kwantowo-mechaniczne i interpretacje widm podczerwonych i ramanaowskich układów z wiązaniami wodorowymi, badania teoretyczne fotofizyki dimerów purynowo-pirymidynowych, występujących w zasadach nukleinowych, obliczenia metodami dynamiki molekularnej i badania tunelowania protonu w układach z wiązaniami wodorowymi. Celem przedstawionego projektu jest wyjaśnienie natury wiązań wodorowych i tunelowania protonu.