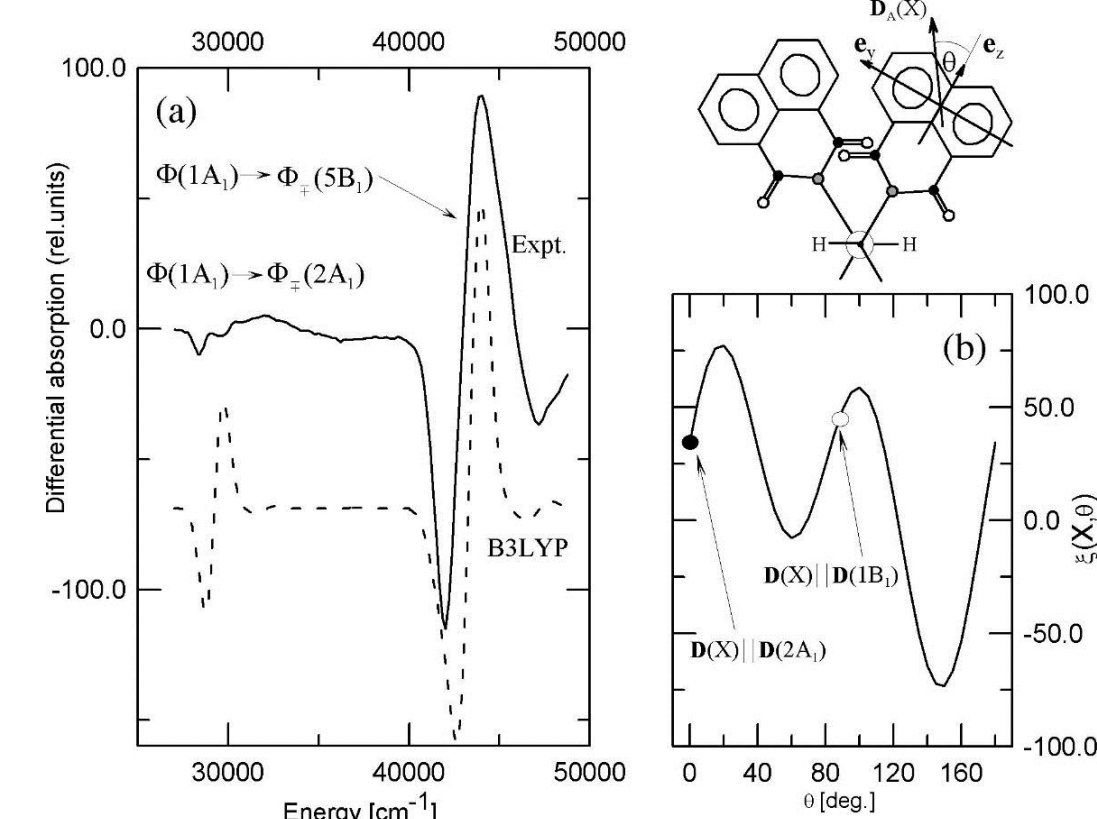


Panel specjalizacyjny: Chemia Teoretyczna i Komputerowa

Zakład Chemii Teoretycznej i Zakład Metod Obliczeniowych Chemii

Zespół Teoretycznej Fizyki Molekularnej

Prof. Dr hab. Marek Pawlikowski



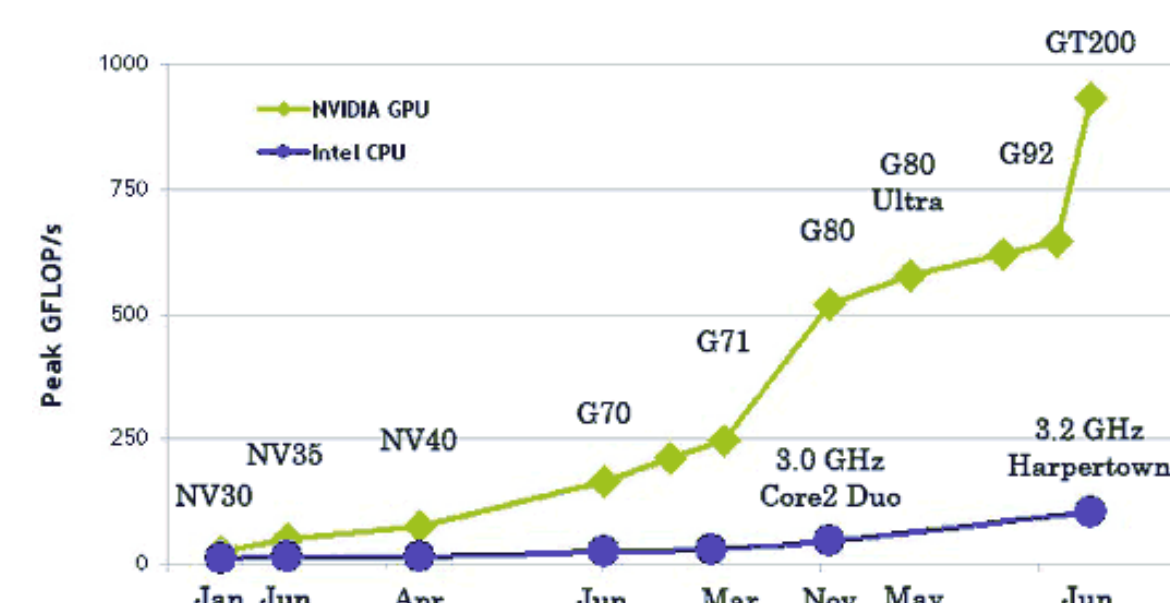
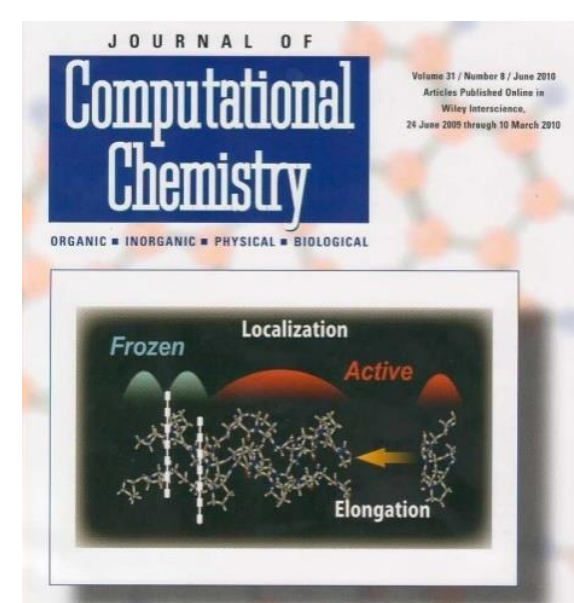
Spektroskopia molekularna

- teoria sprzężeń wibronowych
- modelowanie i interpretacja widm:
 - absorpcji elektronowej
 - rezonansowego rozpraszania ramanowskiego
 - dichroizmu kołowego
 - magnetycznego dichroizmu kołowego

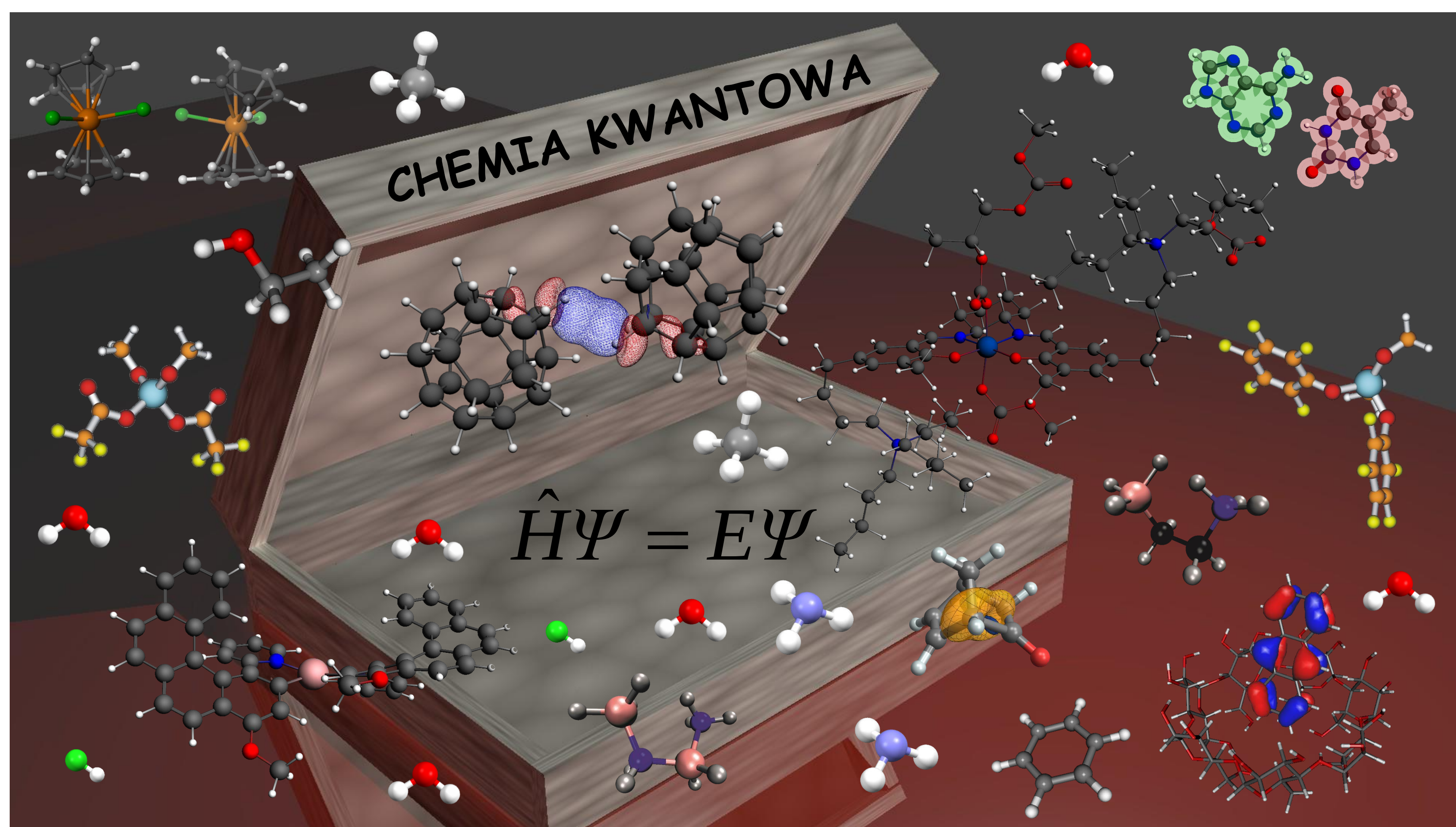
Dr Marcin Makowski

Technologia obliczeń kwantowo-chemicznych

- rozwijanie metod obliczeniowych liniowo skalujących się ze wzrostem układu (współpraca z Kyushu University)
- implementacja obliczeń kwantowo-chemicznych na wysoce równoległych architekturach komputerowych: klastry obliczeniowe, karty graficzne (GPU), układy FPGA (współpraca z AGH i ACK Cyfronet)



Zapraszamy!

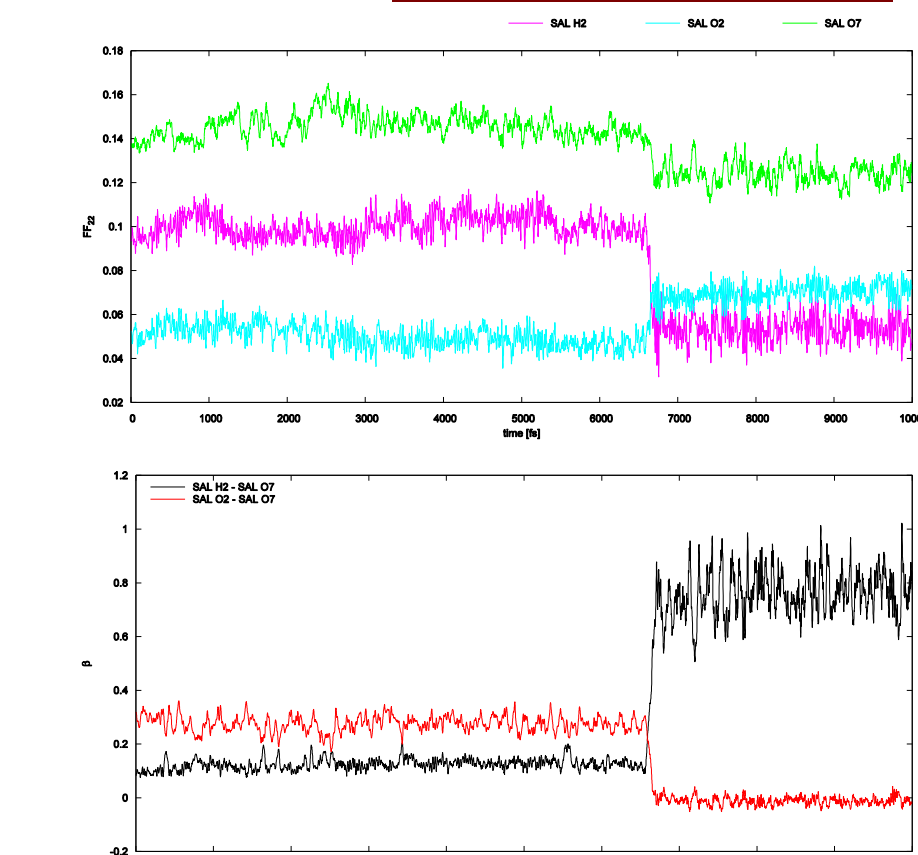
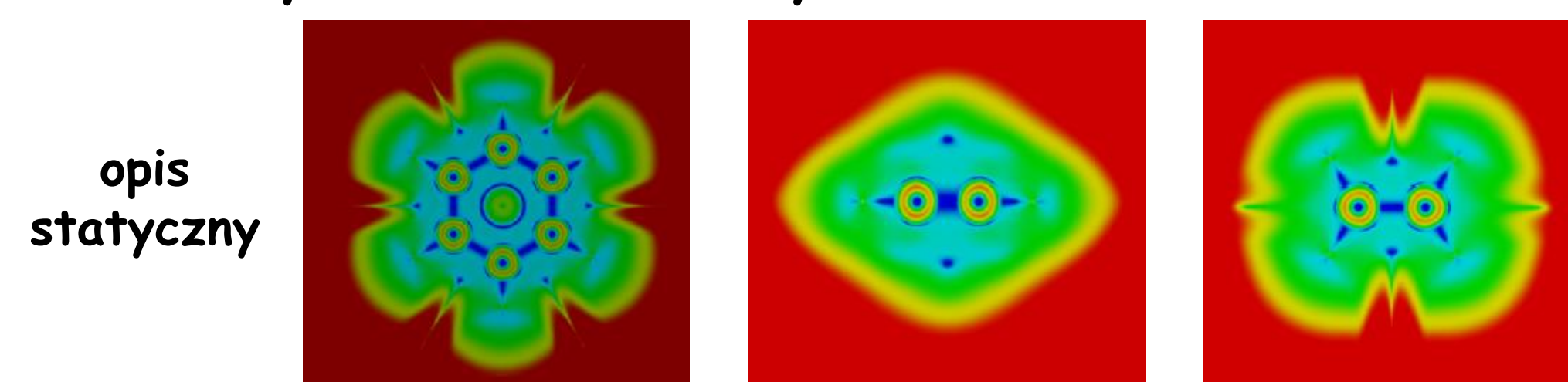


Zespół Chemii Kwantowej

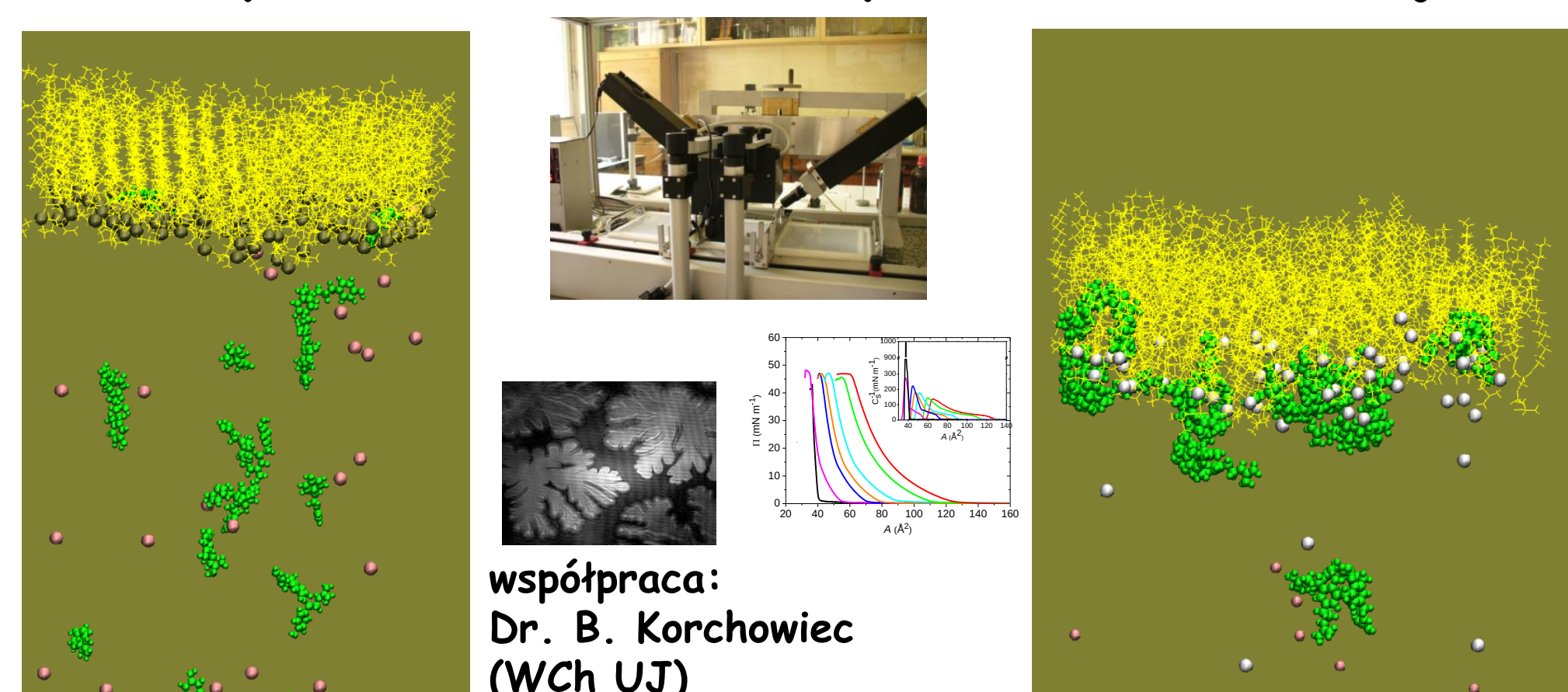
Grupa Teorii Reaktywności Chemicznej

Dr hab. Jacek Korchowiec
Dr Anna Stachowicz-Kuśnierz

Detektory wiązań chemicznych



Modelowanie filmów powierzchniowych na granicy fazy woda/powietrze metodami dynamiki molekularnej



współpraca:
Dr. B. Korchowiec
(WCh UJ)

Zespół Półprzewodników Organicznych

Prof. Dr hab. Piotr Petelenz

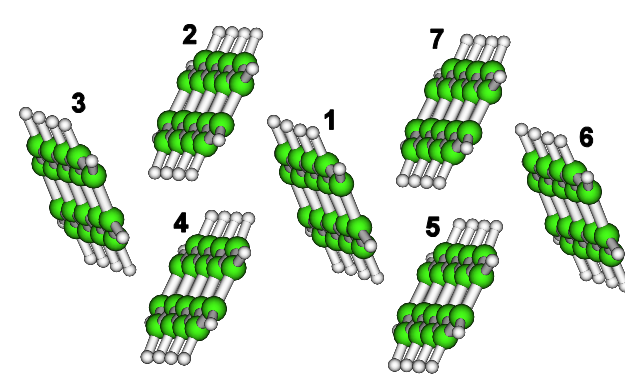
Spektroskopia kryształów molekularnych

- Opis sprzężeń wibronowych i procesów przeniesienia ładunku w kryształach molekularnych

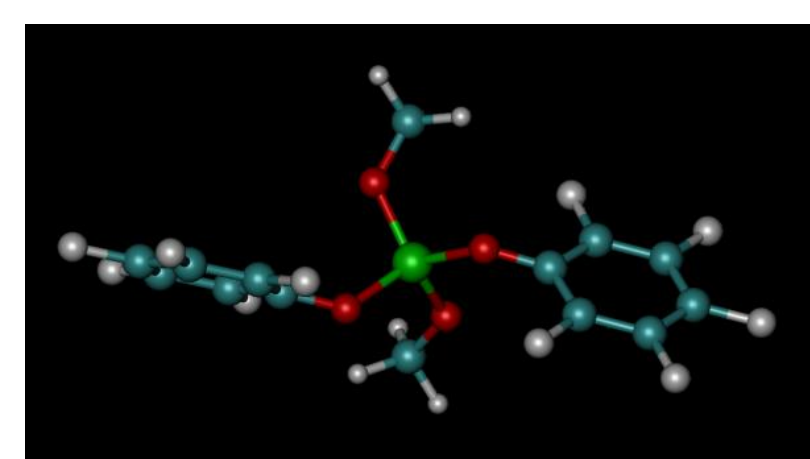
Dr hab. Andrzej Eilmes
Dr Piotr Kubisiak

Modelowanie kryształów molekularnych, elektrolitów polimerowych i cieczy jonowych

- badanie ekscytonów

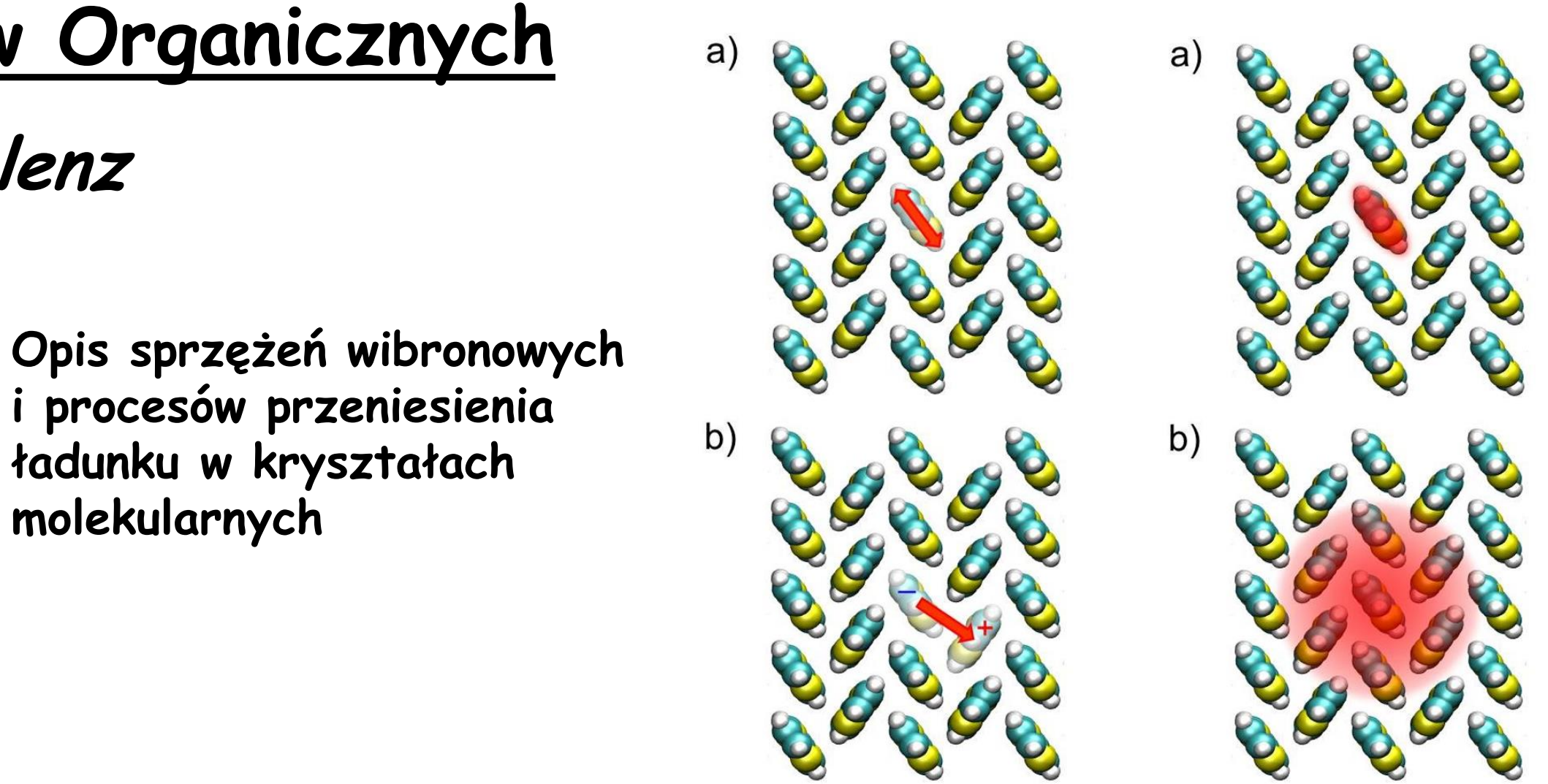


- opis procesów transportu ładunku

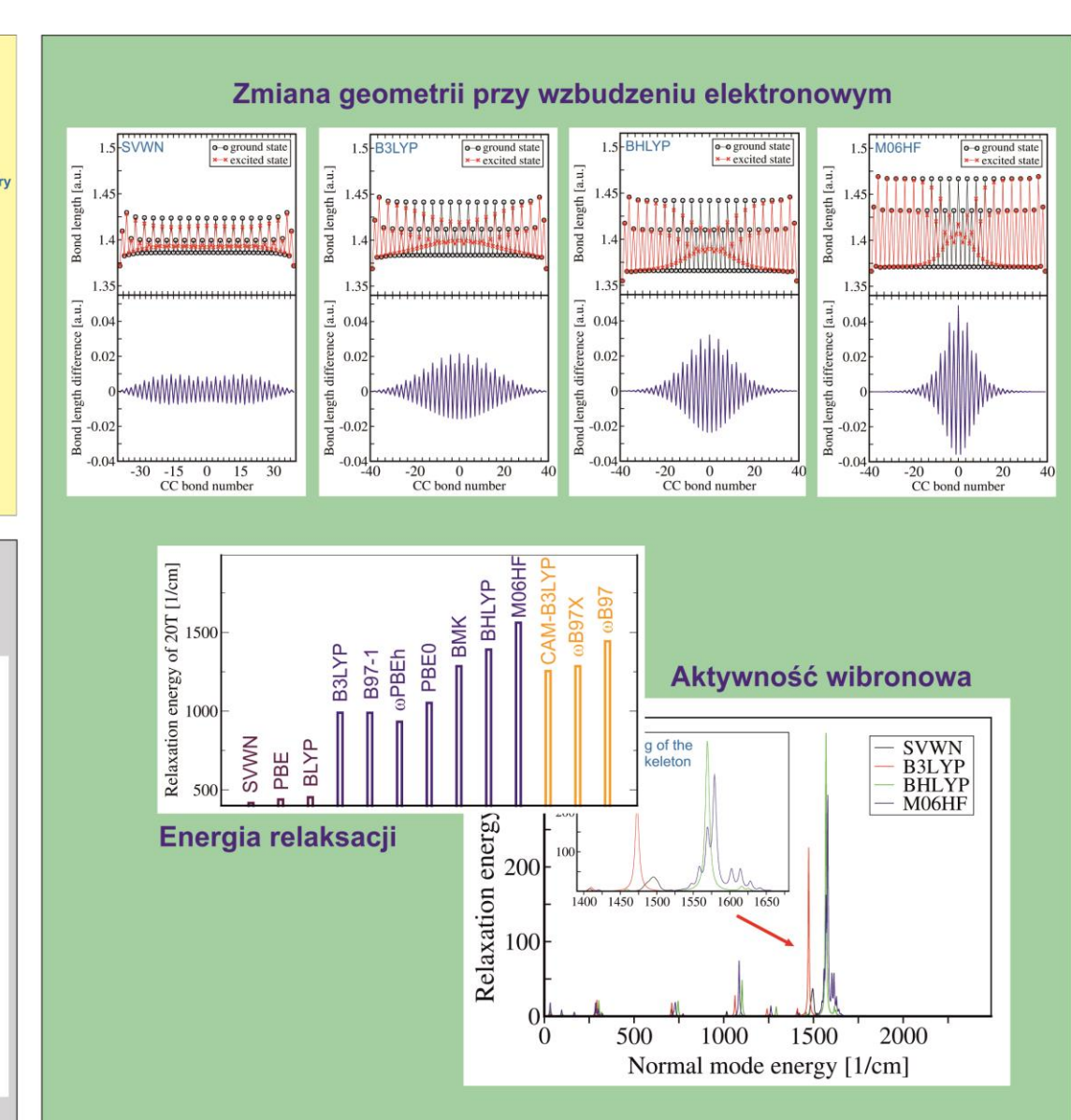
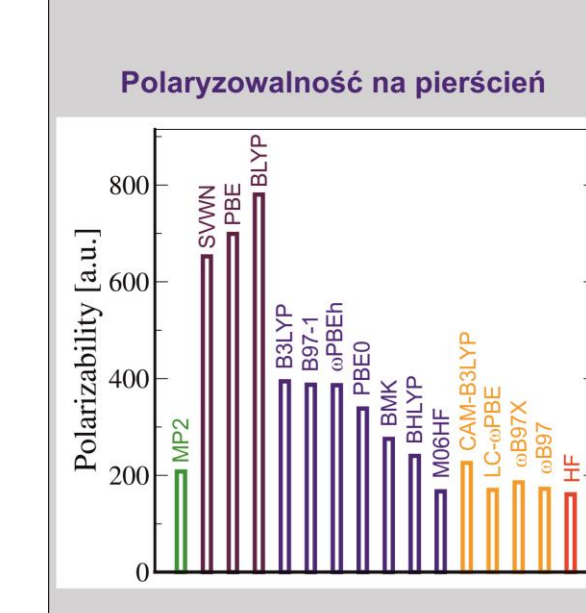
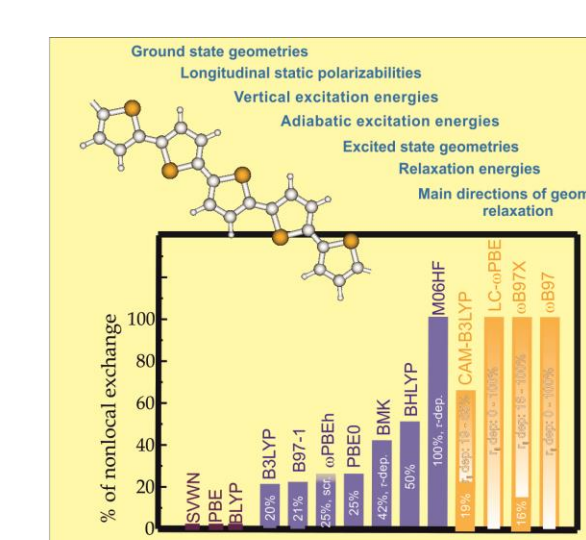
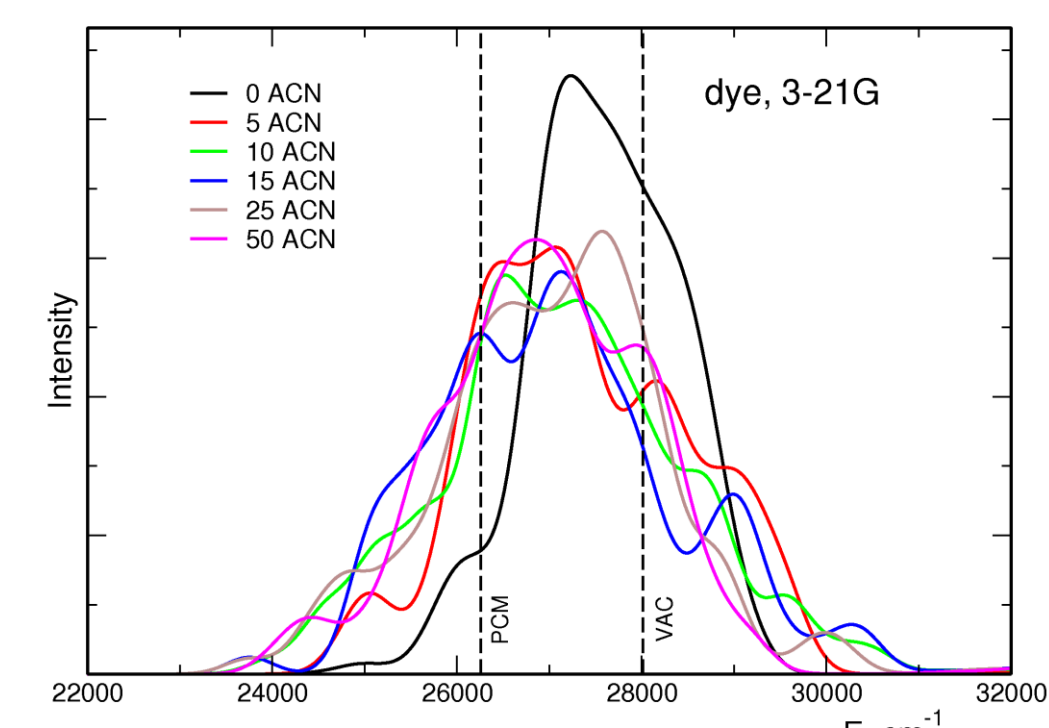
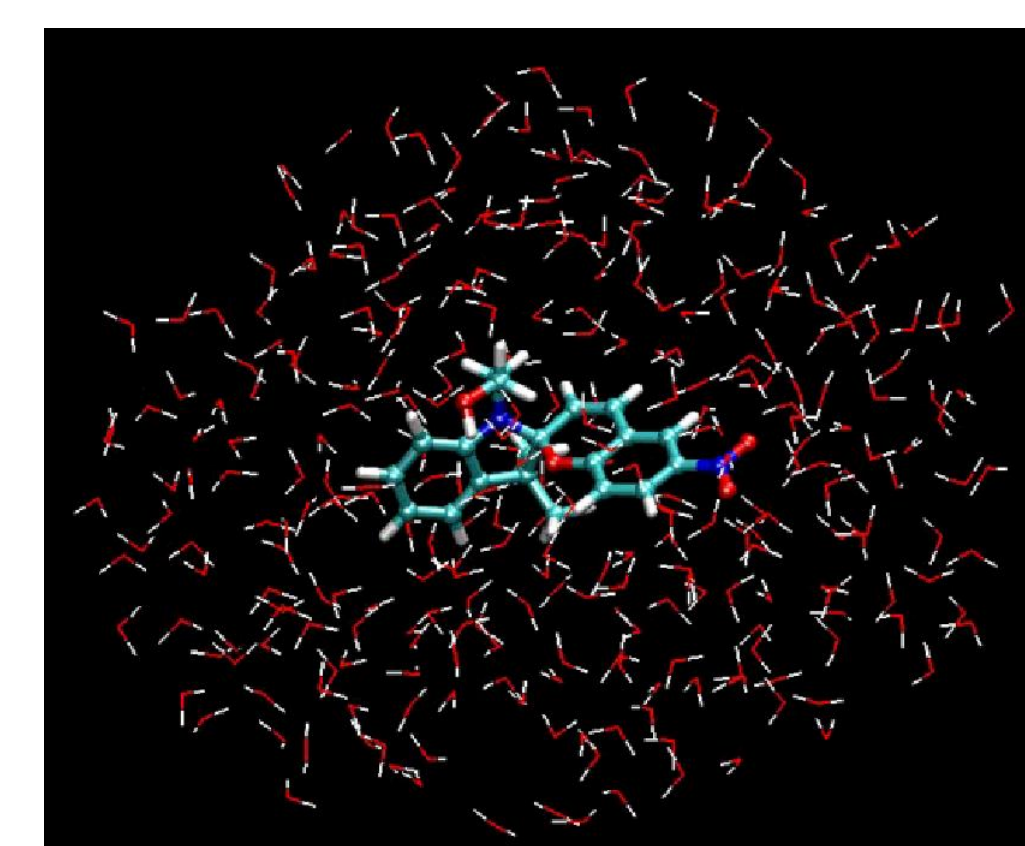


Dr Marcin Andrzejak

Spektroskopia molekularna



- analiza oddziaływania jon-rozpuszczalnik:
 - energii oddziaływania
 - efekty w widmach elektronowych

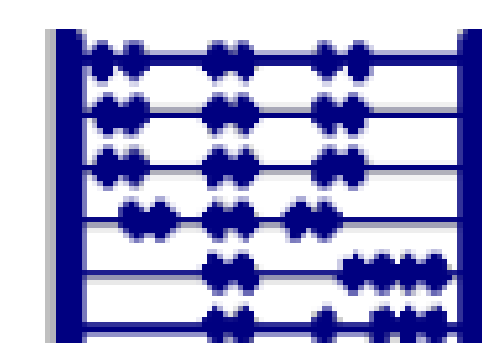


Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

Dr hab. Marek Frankowicz

Projekt niedoida

Dr Marcin Makowski
Dr Grzegorz Mazur



Technologia obliczeń kwantowo-chemicznych

- rozwijanie własnego pakietu obliczeniowego „niedoida”
- implementacja typowych obliczeń kwantowo-chemicznych

Zapraszamy!

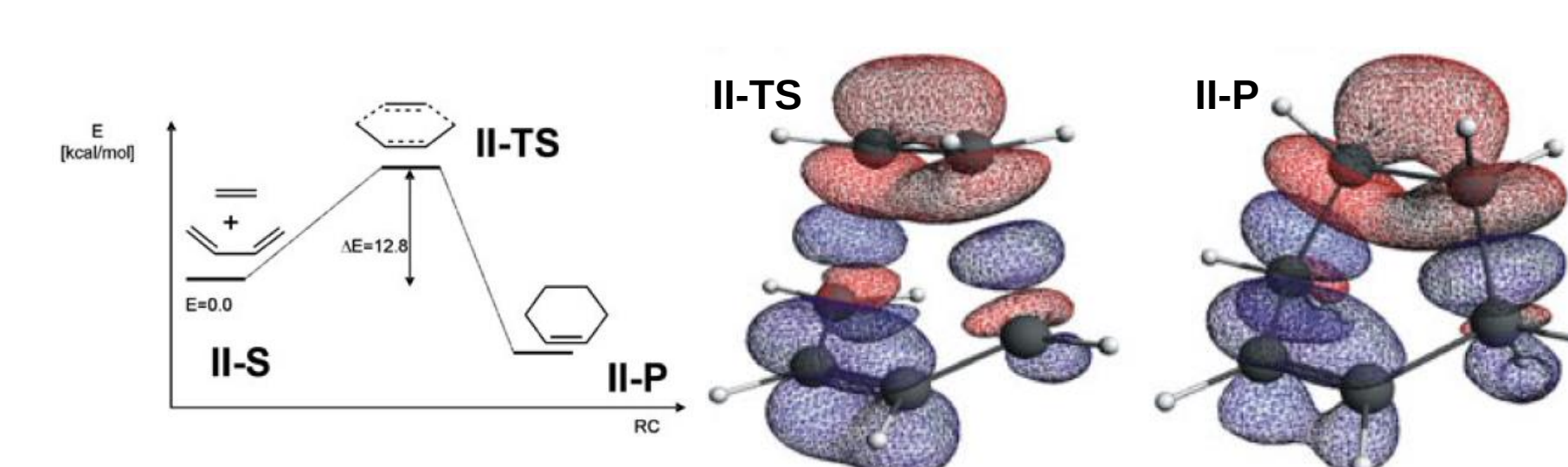
Grupa Modelowania Molekularnego Procesów Katalitycznych

Prof. Dr hab. Artur Michalak

Modelowanie procesów katalitycznych, w szczególności reakcji (ko)polimeryzacji wobec katalizatorów metaloorganicznych

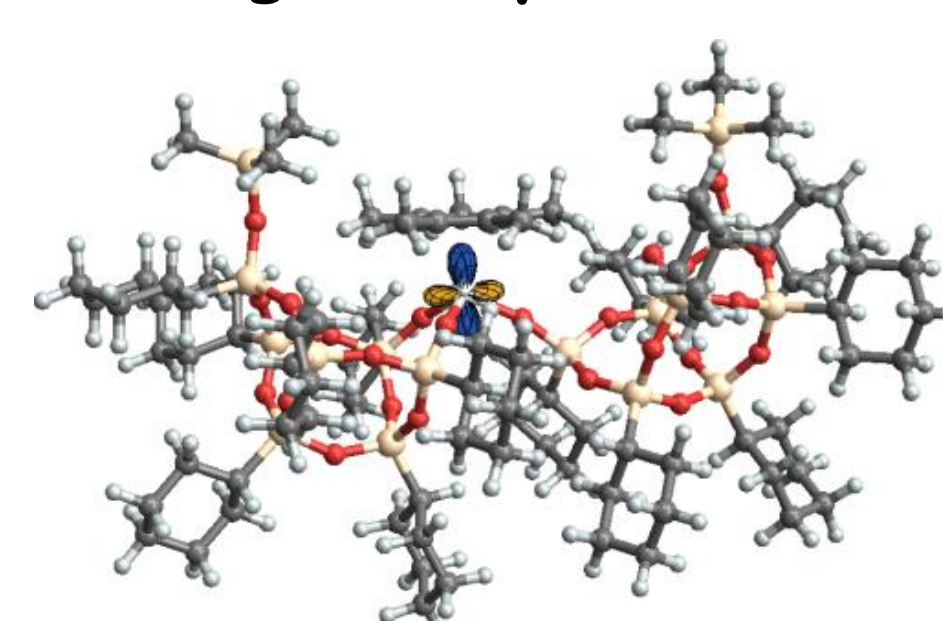
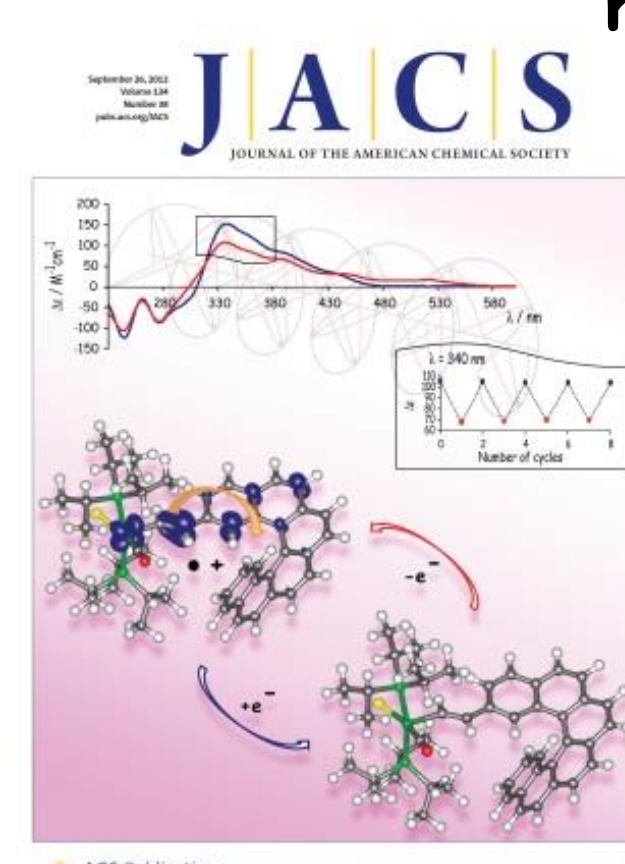
Analiza przebiegu reakcji chemicznych metodami dynamiki molekularnej ab initio

Opis zmian struktury wiązań w trakcie reakcji chemicznej w ujęciu ETS-NOCV



Dr Monika Srebro

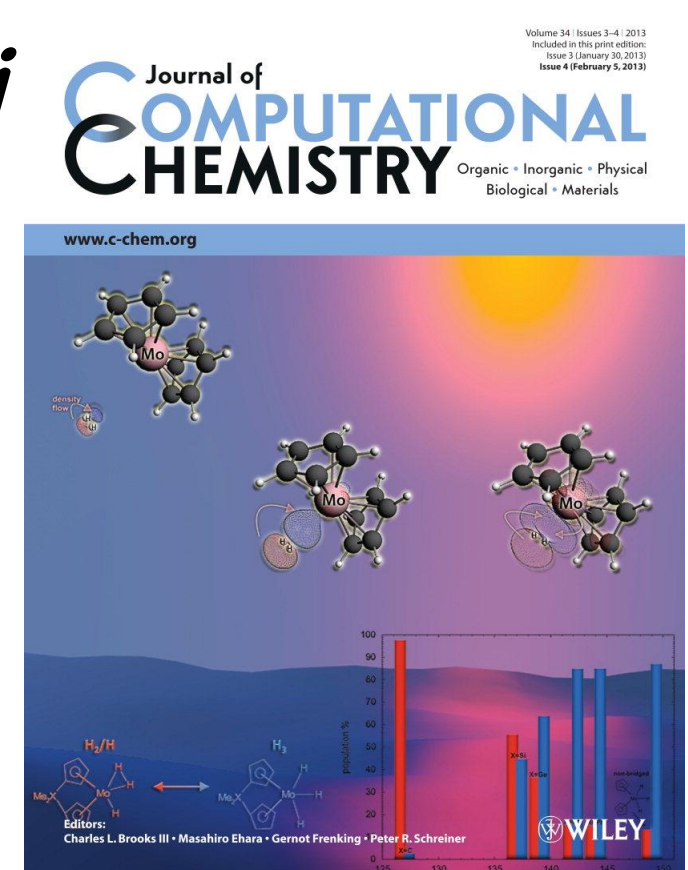
Obliczenia kwantowo-chemiczne i analiza własności optycznych i spektroskopowych układów metaloorganicznych



współpraca:
Prof. J. Autschbach (USA)
Prof. J. Crassous (Francja)

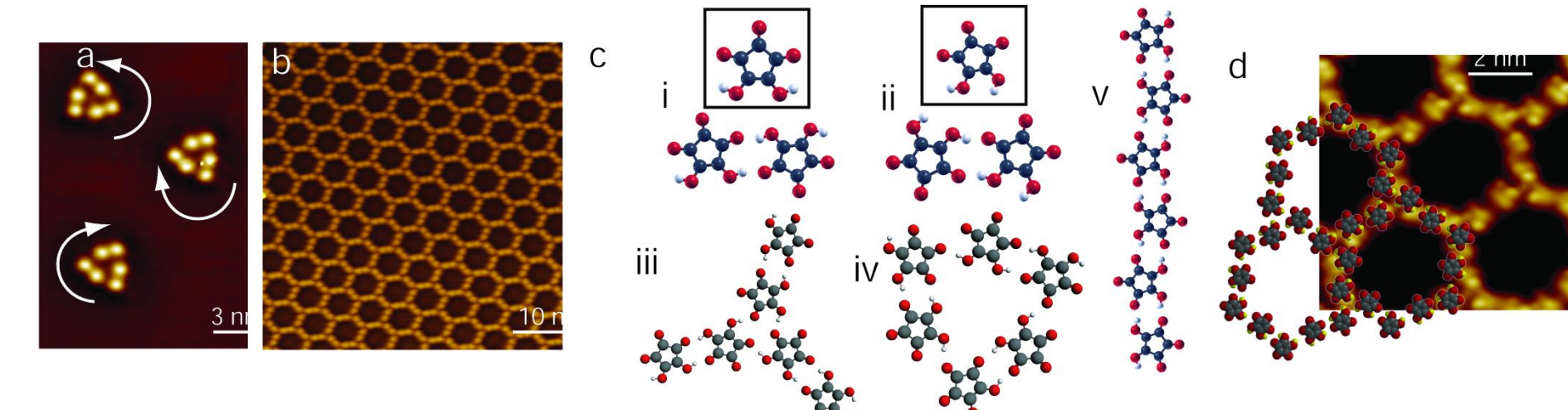
Dr Mariusz Mitoraj

Charakterystyka różnego typu wiązań chemicznych w kontekście produkcji wodoru cząsteczkowego



Dr James Hooper

Modelowanie cząsteczek organicznych zaadsorbowanych na nośnikach metalicznych



współpraca: Prof. A. Enders (USA) Prof. E. Zurek (USA)