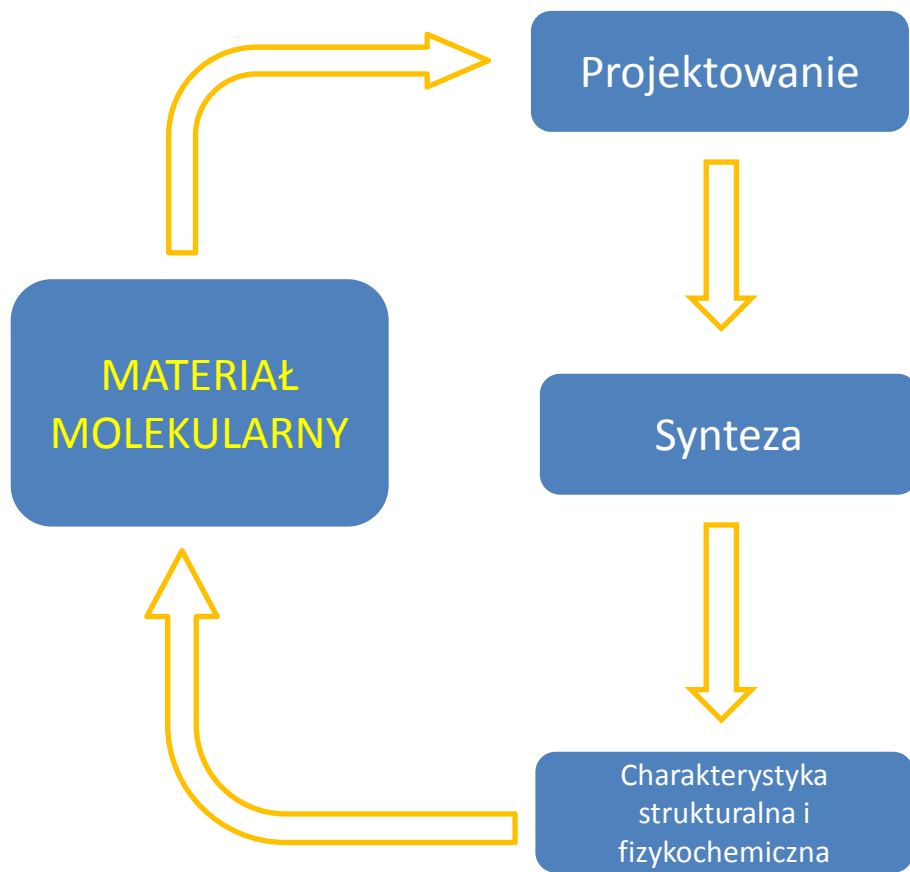




UNIwersytet JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

WYDZIAŁ CHEMII UJ

PANEL CHEMIA NOWYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH

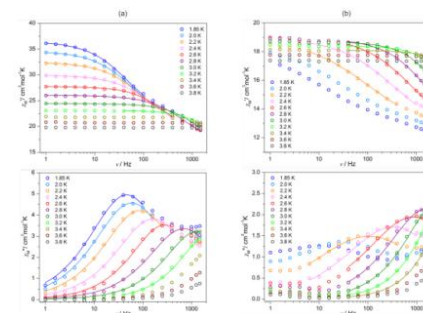
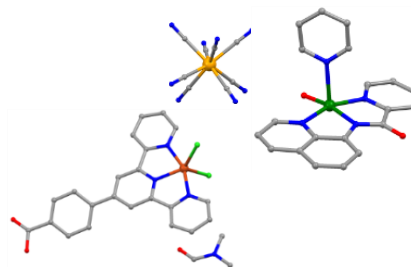
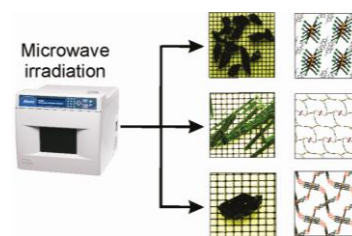


IUPAC Periodic Table of the Elements																									
1																	18								
H Hydrogen (1.00794)																	He Helium (4.002602)								
2																									
3	4													13	14	15	16	17	18						
Li Lithium (6.941)	Be Beryllium (9.012182)													B Boron (10.811)	C Carbon (12.011)	N Nitrogen (14.00643)	O Oxygen (15.999)	F Fluorine (18.9984032)	Ne Neon (20.1797)						
5	6	7	8	9	10							11	12	13	14	15	16	17	18						
Na Sodium (22.98976928)	Mg Magnesium (24.304)	Al Aluminum (26.9815385)	Si Silicon (28.08558)	P Phosphorus (30.9737615)	S Sulfur (32.06)	Cl Chlorine (35.45)	Ar Argon (39.948)	K Potassium (39.0983)	Ca Calcium (40.078)	Sc Scandium (44.955912)	Ti Titanium (47.88)	V Vanadium (50.9415)	Cr Chromium (51.9961)	Mn Manganese (54.938044)	Fe Iron (55.845)	Co Cobalt (58.933194)	Ni Nickel (58.6934)	Cu Copper (63.546)	Zn Zinc (65.38)	Ga Gallium (69.723)	Ge Germanium (72.64)	As Arsenic (74.9216)	Se Selenium (78.96)	Br Bromine (79.904)	Kr Krypton (83.80)
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
K Potassium (39.0983)	Ca Calcium (40.078)	Sc Scandium (44.955912)	Ti Titanium (47.88)	V Vanadium (50.9415)	Cr Chromium (51.9961)	Mn Manganese (54.938044)	Fe Iron (55.845)	Co Cobalt (58.933194)	Ni Nickel (58.6934)	Cu Copper (63.546)	Zn Zinc (65.38)	Ga Gallium (69.723)	Ge Germanium (72.64)	As Arsenic (74.9216)	Se Selenium (78.96)	Br Bromine (79.904)	Kr Krypton (83.80)	Rb Rubidium (85.4678)	Sr Strontium (87.62)	Y Yttrium (88.90584)	Zr Zirconium (91.224)	Nb Niobium (92.90638)	Mo Molybdenum (95.94)	Tc Technetium (98)	Ru Ruthenium (101.07)
39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64
Rb Rubidium (85.4678)	Sr Strontium (87.62)	Y Yttrium (88.90584)	Zr Zirconium (91.224)	Nb Niobium (92.90638)	Mo Molybdenum (95.94)	Tc Technetium (98)	Ru Ruthenium (101.07)	Rh Rhodium (102.9055)	Pd Palladium (106.9051)	Ag Silver (107.8682)	Cd Cadmium (112.411)	In Indium (114.818)	Sn Tin (118.710)	Sb Antimony (121.757)	Te Tellurium (127.6)	I Iodine (126.90547)	Xe Xenon (131.29)	Cs Cesium (132.90545196)	Ba Barium (137.327)	La Lanthanum (138.90547)	Ce Cerium (140.12)	Pr Praseodymium (140.90765)	Nd Neodymium (144.24)	Pm Promethium (144.9127)	Sm Samarium (150.36)
57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82
Cs Cesium (132.90545196)	Ba Barium (137.327)	La Lanthanum (138.90547)	Ce Cerium (140.12)	Pr Praseodymium (140.90765)	Nd Neodymium (144.24)	Pm Promethium (144.9127)	Sm Samarium (150.36)	Eu Europium (151.964)	Gd Gadolinium (157.25)	Tb Terbium (158.92532)	Dy Dysprosium (162.50014)	Ho Holmium (164.93032)	Er Erbium (167.2593)	Tm Thulium (168.93032)	Yb Ytterbium (173.05468)	Lu Lutetium (174.967)	Hf Hafnium (178.49)	Ta Tantalum (180.94788)	W Tungsten (183.84)	Re Rhenium (186.207)	Os Osmium (190.23)	Ir Iridium (192.222)	Pt Platinum (195.084)	Au Gold (196.966569)	Hg Mercury (200.59)
87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112
Fr Francium (223)	Ra Radium (226)	Ac Actinium (227)	Th Thorium (232.0377)	Pa Protactinium (231.03688)	U Uranium (238.02891)	Np Neptunium (237)	Pu Plutonium (244)	Am Americium (243)	Cm Curium (247)	Bk Berkelium (247)	Cf Californium (251)	Es Einsteinium (252)	Fm Fermium (257)	Md Mendelevium (258)	No Nobelium (259)	Lr Lawrencium (262)	Rf Rutherfordium (261)	Hf Hafnium (178.49)	Ta Tantalum (180.94788)	W Tungsten (183.84)	Re Rhenium (186.207)	Os Osmium (190.23)	Ir Iridium (192.222)	Pt Platinum (195.084)	Au Gold (196.966569)
117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142
Uut Ununtrium (288)	Uuq Ununquadium (298)	Uub Unbium (304)	Uut Ununtrium (315)	Uuq Ununquadium (324)	Uub Unbium (330)	Uut Ununtrium (341)	Uuq Ununquadium (350)	Uub Unbium (358)	Uut Ununtrium (369)	Uuq Ununquadium (378)	Uub Unbium (386)	Uut Ununtrium (397)	Uuq Ununquadium (406)	Uub Unbium (414)	Uut Ununtrium (425)	Uuq Ununquadium (434)	Uub Unbium (442)	Uut Ununtrium (453)	Uuq Ununquadium (462)	Uub Unbium (470)	Uut Ununtrium (481)	Uuq Ununquadium (490)	Uub Unbium (498)	Uut Ununtrium (509)	Uuq Ununquadium (518)



87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Rf	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl
117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142
Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq	Uub	Uut	Uuq

For names and symbols in this table, see www.iupac.org. This version included 8 January 2016.
Copyright © 2016 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.



Panel realizowany w Zakładzie Chemii Nieorganicznej oraz
w Zakładzie Krystalochemii i Krystalofizyki



Tematyka badań

Multifunkcjonalne materiały
molekularne

Zaawansowana synteza
nieorganiczna i obliczenia DFT

Projektowanie faz krystalicznych
o zadanych właściwościach

Badania obiektów zabytkowych

Zespół badawczy

Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych

Prof. dr hab. Barbara Sieklucka

Zespół Chemii Koordynacyjnej

Prof. dr hab. Janusz Szklarzewicz

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Prof. dr hab. Katarzyna Stadnicka

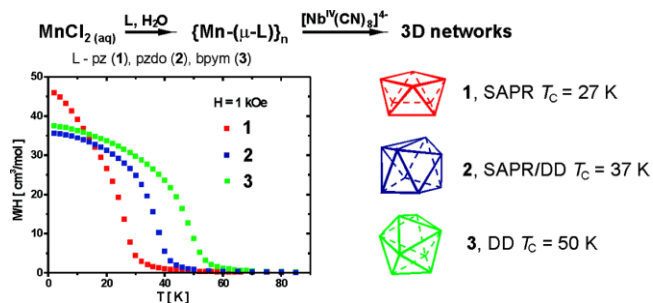
Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii Proszkowej

Prof. dr hab. Wiesław Łasocha

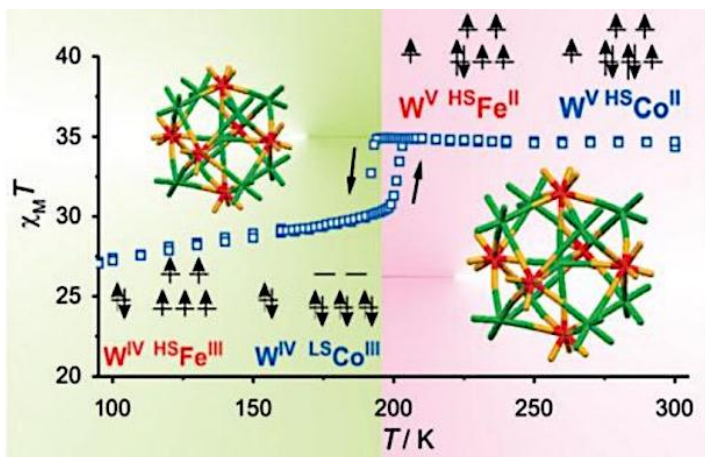
ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH – TEMATYKA BADAWCZA

MAGNESY MOLEKULARNE

Układy molekularne wykazujące
dalekozasięgowe uporządkowanie
magnetyczne



Bistabilność spinowa (spin cross-over)



GĄBKI MAGNETYCZNE

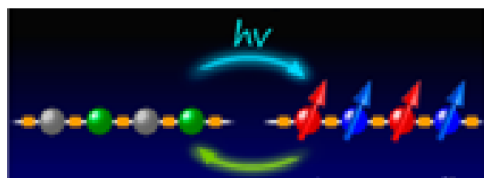
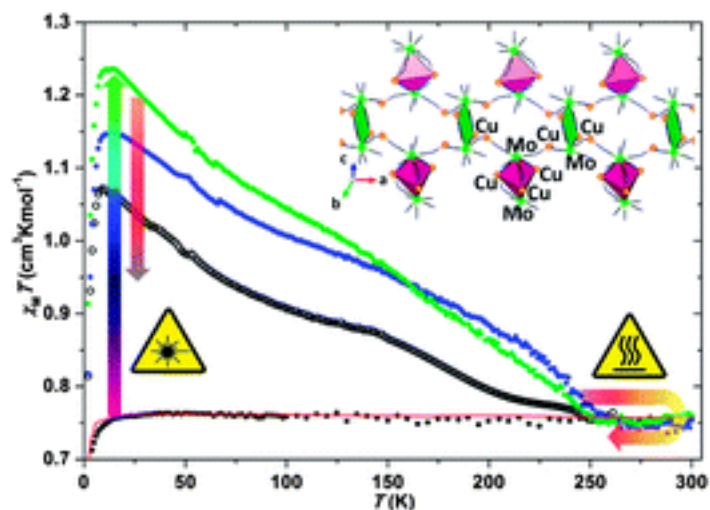
Odwracalna zmiana właściwości magnetycznych
pod wpływem hydratacji/dehydratacji



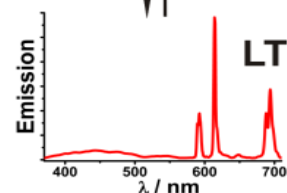
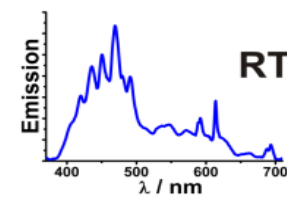
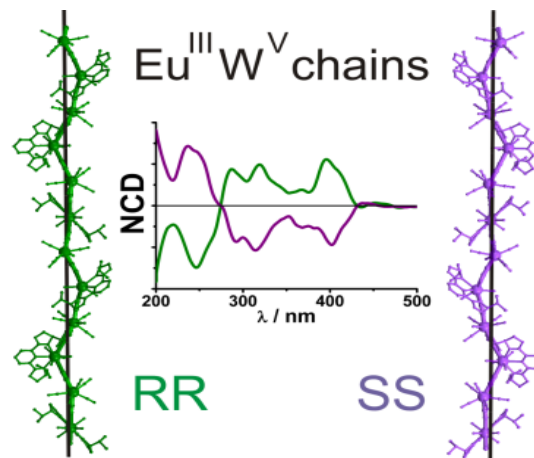
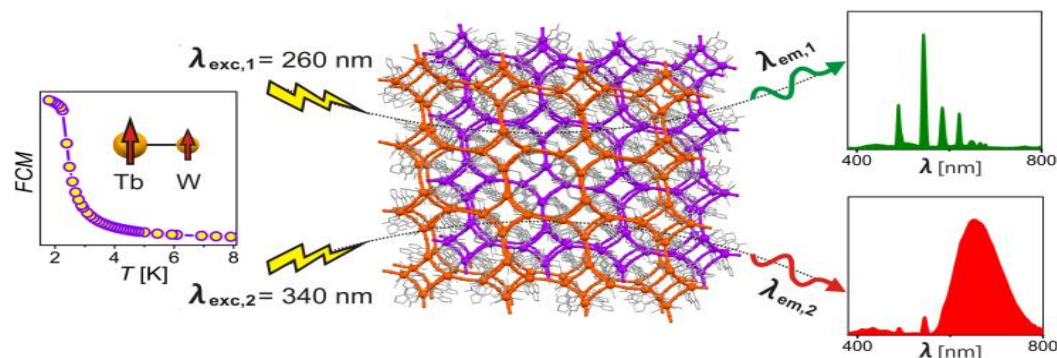


ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH – TEMATYKA BADAWCZA

FOTOMAGNESY MOLEKULARNE



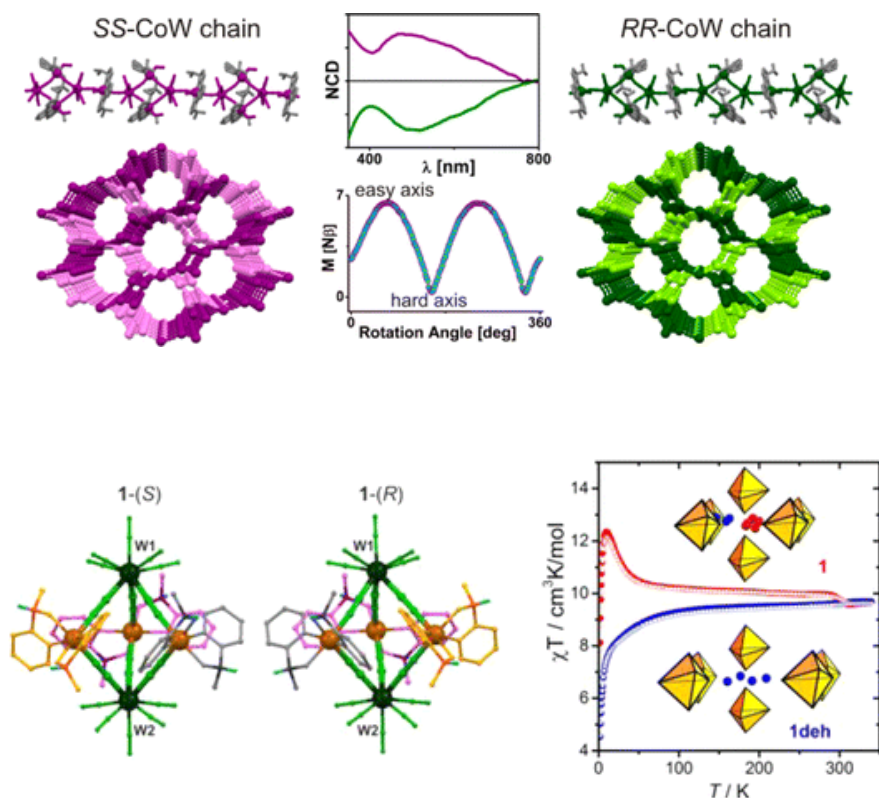
LUMINESCENCYJNE MAGNESY MOLEKULARNE





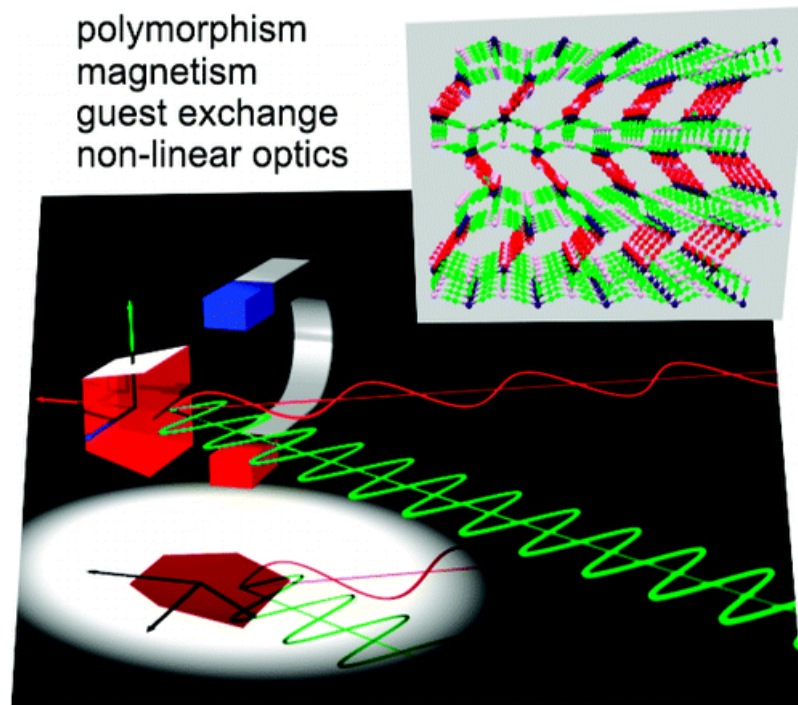
ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH – TEMATYKA BADAWCZA

CHIRALNE MAGNESY MOLEKULARNE



MAGNESY MOLEKULARNE O NIELINIOWYCH WŁAŚCIWOŚCIACH OPTYCZNYCH MSHG

(Magnetization-induced Second Harmonic Generation)





ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH – APARATURA

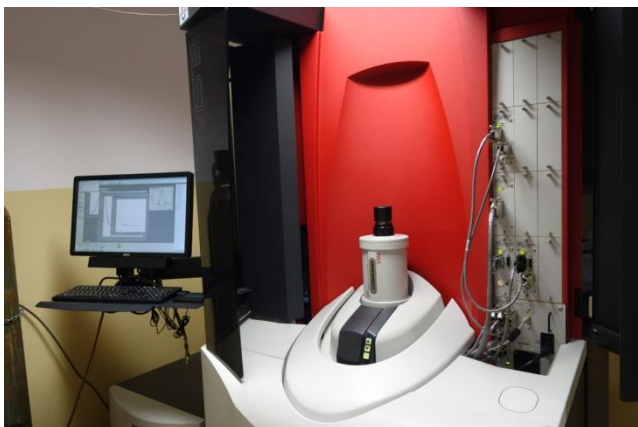


Dyfraktometr monokrystaliczny BRUKER D8-QuestECO

Określanie struktur krystalicznych otrzymanych połączeń molekularnych



ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH – APARATURA



Magnetometr SQUID VSM3 (Quantum Design) wyposażony w:

lampę ksenonową – do pomiarów właściwości fotomagnetycznych
przystawkę ciśnieniową – do pomiarów właściwości magnetycznych pod zwiększonym ciśnieniem

Charakterystyka właściwości magnetycznych i fotomagnetycznych





ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH – APARATURA



Mikroskop IR Nicolet iN10

wyposażony w przystawkę temperaturową

Badanie spektroskopowe:

- pojedynczych kryształów
- przemian fazowych
- w funkcji temperatury (od 77K)
- w atmosferze gazu obojętnego

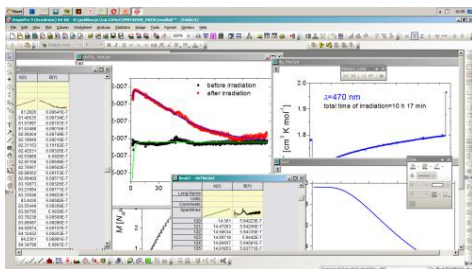


Komora rękawicowa (GloveBox)

Synteza w warunkach beztlenowych

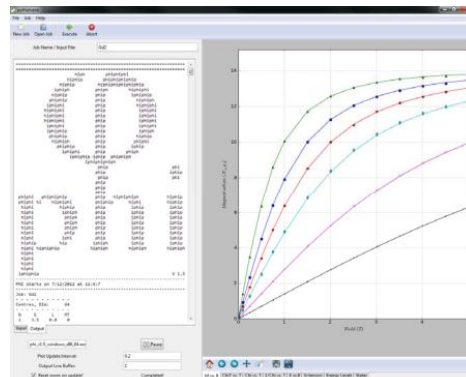


ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH – TECHNIKI OBLICZENIOWE

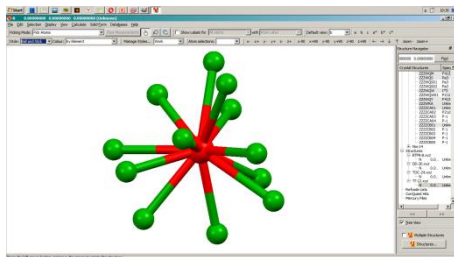


Microcal Origin –

interpretacja oraz analiza
właściwości magnetycznych
i spektroskopowych



Phi – symulacja i interpretacja właściwości
magnetycznych, analiza i dopasowanie widm EPR,
efekty cieplne fazowych przejść magnetycznych



Shape 2.1 - analiza geometrii molekularnej
(Continuous Shape Measure) i chiralności
(Continuous Chirality Measure)



ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH - AKTUALNE PROJEKTY BADAWCZE

- Projekt NCN Opus 8 2014/15/B/ST5/04465 "Poszukiwanie mulifunkcjonalnych magnesów molekularnych)" 2015-2018
- Projekt NCN SONATA BIS 4 2014/14/E/ST5/00357 "Nanoprzestrzenna inżynieria krystaliczna nowych rozgałęzionych magnetyków molekularnych" (NanMagMol), 2015-2019
- Projekt NCN OPUS 8 2014/15/B/ST5/02098 "Nowe podejście do oddziaływań typu anion- π : addukty supramolekularne z udziałem anionowych kompleksów jonów metali d-elektronowych i cząsteczek organicznych z niedoborem gęstości elektronowej π " (Anion- π), 2015-2018
- Diamentowy Grant "Elektroaktywne ligandy dioksotiadiazolowe w konstrukcji multifunkcjonalnych magnesów molekularnych" 0041/DIA/2015/44, MNiSW 2015-2019
- Projekt MNiSW luventus Plus "Od magnetycznych polimerów koordynacyjnych do nanomagnesów kwantowych,, 0370/IP3/2015/73 finansowany przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, 2015-2017
- Projekt MNiSW luventus Plus "Konstrukcja zaawansowanych przełączników molekularnych wykorzystujących przejścia spinowe i przeniesienie ładunku" 0060/IP3/2015/73 MNiSW, 2015-2017
- "Diamentowy Grant" nr : 0195/DIA/2013/42 "Funkcjonalne materiały molekularne oparte na kompleksach niklu(II) i polycjanometalanach", MNiSW 2013-2017
- UE COST Action: CA15128 – Molecular Spintronic (MOLSPIN) 2016-2020
- UE COST Action: CM1203 – Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience (PoCheMoN) 2012-2016



UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

WYDZIAŁ CHEMII UJ

PANEL CHEMIA NOWYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH

ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH
WSPÓŁPRACA MIĘDZYNARODOWA

Prof. Shin-ichi Ohkoshi

Department of Chemistry, School of Science,
The University of Tokyo, Tokyo (Japonia)



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO

Prof. Corine Mathoniere

Institute de Chimie de Matiere Condensee de Bordeaux (Francja)



Prof. Kim R. Dunbar

Department of Chemistry, Texas A&M University College Station, TX 77843 (USA)



Prof. Christian Näther

Institut für Anorganische Chemie, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel (Niemcy)



Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Prof. Liviu F. Chibotaru

Division of Quantum and Physical Chemistry, Katholieke Universiteit Leuven (Belgia)



Dr Oksana Zaharko

Laboratory for Neutron Scattering, Paul Scherrer Institute, CH-5232 Villigen,
(Szwajcaria)





UNIwersytet JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

WYDZIAŁ CHEMII UJ

PANEL CHEMIA NOWYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH

ZESPÓŁ NIEORGANICZNYCH MATERIAŁÓW MOLEKULARNYCH
ZAPRASZAMY DO REALIZACJI PRACY MAGISTERSKIEJ



Prof. dr hab. Barbara Sieklucka

Dr hab. Robert Podgajny

Dr Beata Nowicka

Dr Dawid Pinkowicz

Dr Tomasz Korzeniak

Dr Szymon Chorąży

Dr Olaf Stefańczyk

Mgr Bernard Czarnecki

Mgr Mateusz Reczyński

<http://www2.chemia.uj.edu.pl/znmm>



Zespół Chemii Koordynacyjnej

Pracownicy

Prof. dr hab. Janusz Szklarczyk
Dr Ryszard Gryboś
Dr Dariusz Matoga
Dr Mariusz Radoń
Mgr Joanna Balińska

Doktoranci:

Mgr Patrycja Paciorek
Mgr Piotr Zabierowski
Mgr Anna Czyrnek

Magistranci:

Anna Ryniewicz
Monika Tomecka

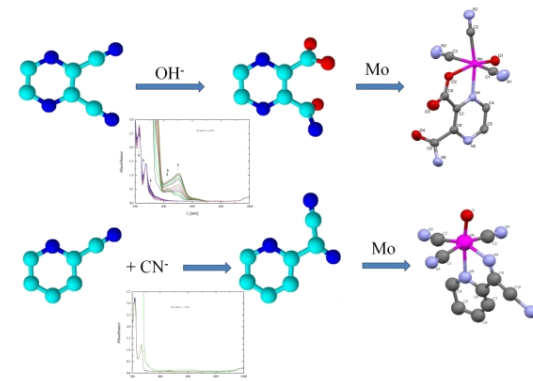
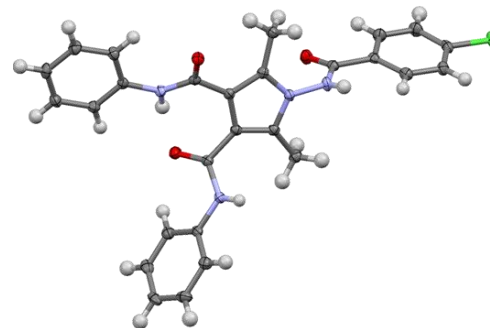
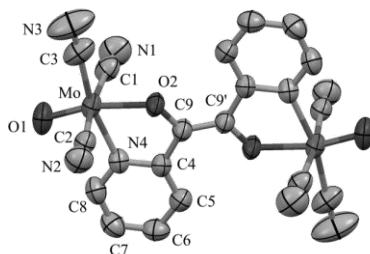
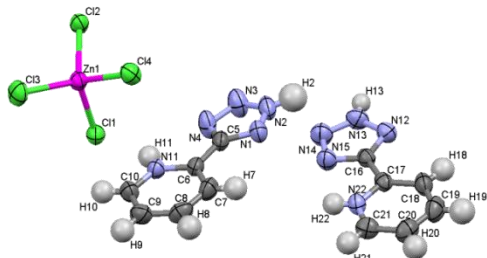
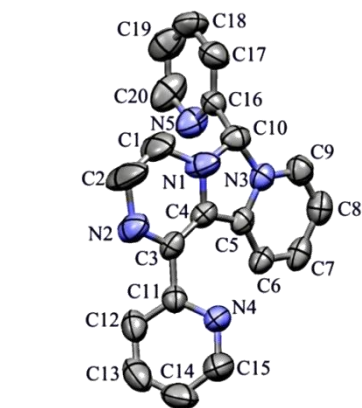
Tematyki badawcze realizowane obecnie w Zespole Chemii Koordynacyjnej

- Synteza nowych związków, synteza katalizowana centrum koordynacyjnym, „green chemistry”** – jednoetapowa synteza nowych, nieznanych wcześniej związków w połączeniu z wysoką wydajnością, selektywnością oraz stosowaniem rozpuszczalników przyjaznych dla środowiska.

A + B

H₂O, EtOH

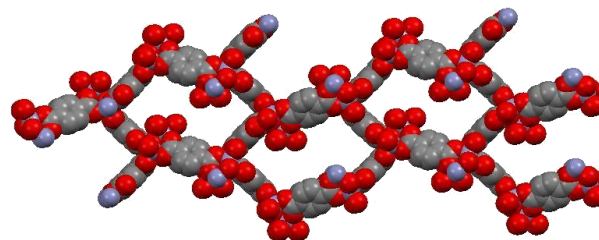
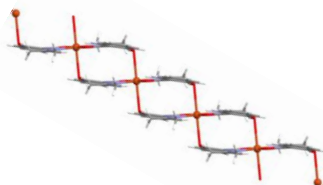
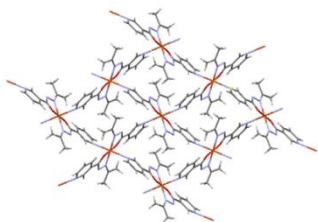
Kompleks



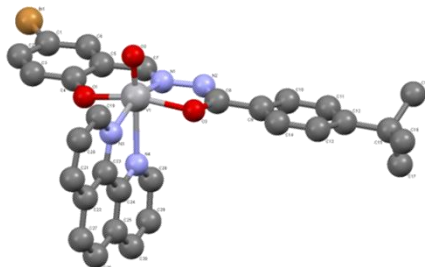


2. Synteza nowych materiałów:

- typu MOF, w tym też o mieszanych metalach



- **metalofarmaceutyków** : np. projekt POIG „Kompleksy wanadu - innowacyjne metalofarmaceutyki w leczeniu cukrzycy” oraz nowe projekty (leki antydepresyjne)



INNOWACYJNA
GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



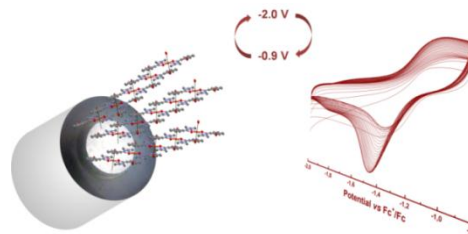
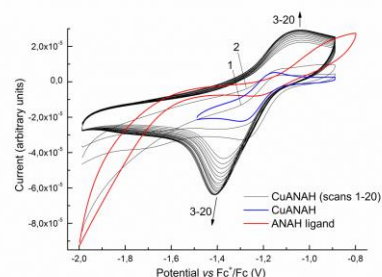
Projekt nr POIG.01.03.01-174/09

Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego
w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

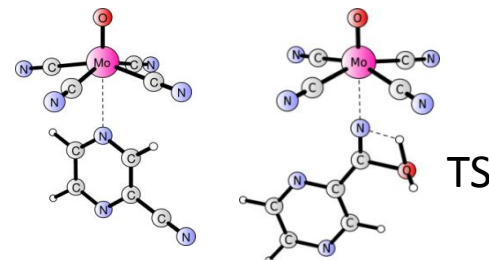
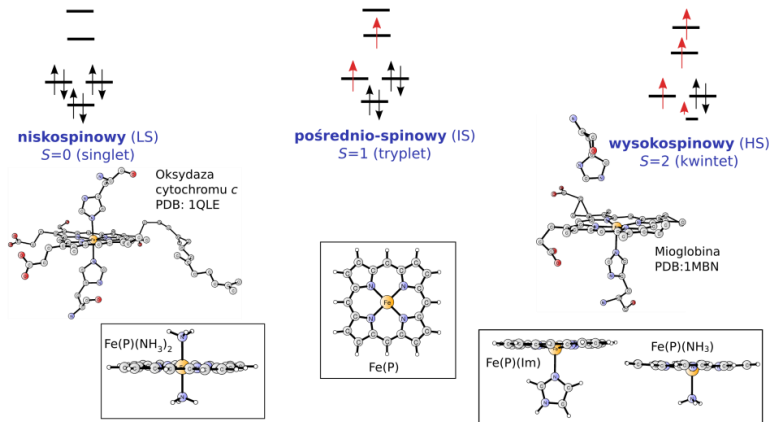
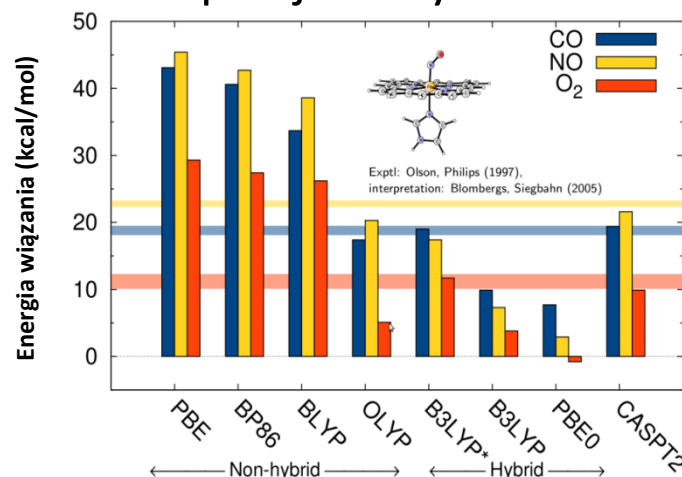
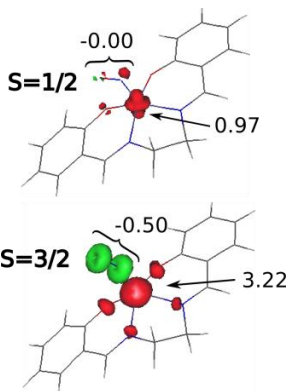
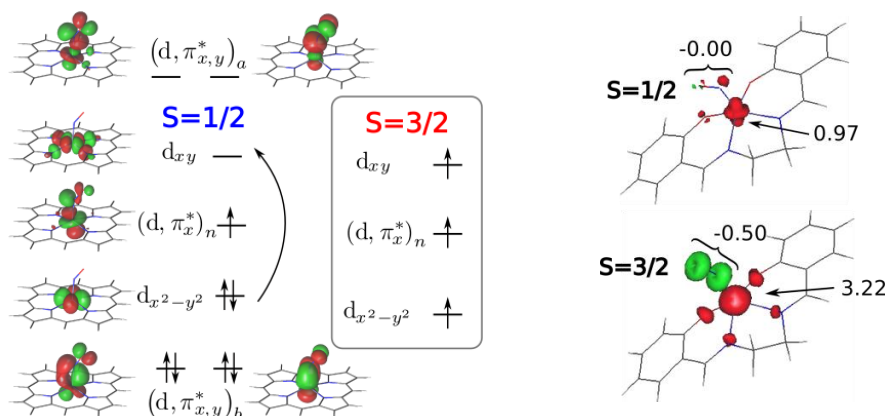


- **kompleksów elektropolimeryzowalnych**



3. Modelowanie związków koordynacyjnych i centrów d-elektronowych w enzymach

- Struktura elektronowa, stany spinowe, oddziaływania metal – ligand
- Mechanizmy reakcji z udziałem kompleksów metali przejściowych





Chemia Nowych Materiałów

Wiesław Łasocha

**Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii
Proszkowej**

**Zakład Krystalochemii i Krystalofizyki
pok. 307, tel 6632053, 6632054**

lasocha@chemia.uj.edu.pl

<http://www.chemia.uj.edu.pl/~lasocha>



Skład Zespołu i współpraca:

Prof. Wiesław Łasocha
Dr Marcin Kozieł
mgr Marcin Oszejca



- **WSPÓŁPRACA**

A. Rafalska-Łasocha

E. Opozda UHP Kielce

W. Surga UHP Kielce

dr Maciej Grzywa, Augsburg

dr Bartłomiej Gawęł, Norwegia

- **Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN**
Dr D. Mucha, A. Dobija, M. Grzesiak, K. Lubarda

- **International Centre for Diffraction Data, USA**

- **Prof. Henk Schenk, Lab. Crystallography, Univ. Amsterdam**

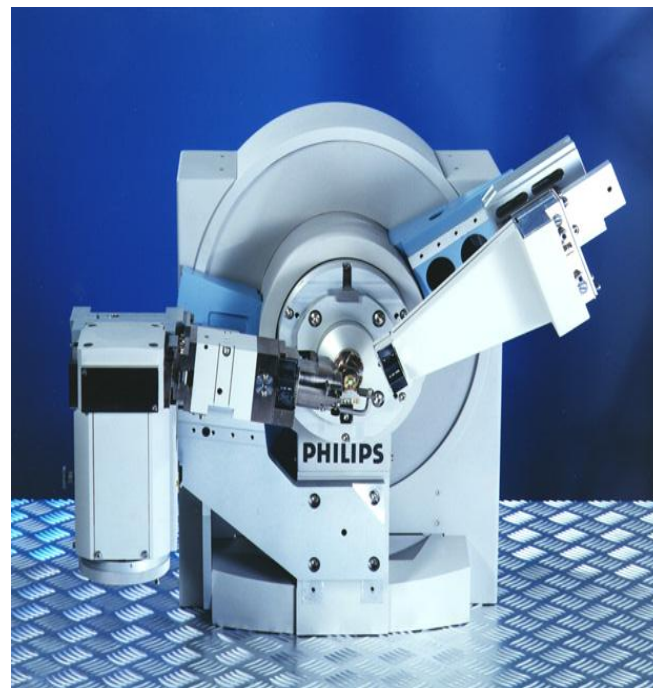
- **Uniwersytet Warszawski Prof. Wojciech Grochala**

Laboratory of Technology of Novel Functional Materials,

Interdisciplinary Center for Mathematical and Computational Modeling



Dyfraktometry X'Pert i X'Pert PRO MPD

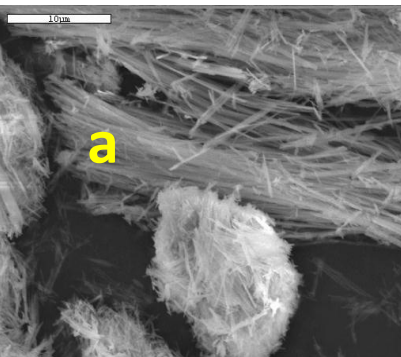


Uniwersalne dyfraktometry rentgenowskie z przystawkami reakcyjną, nisko- i wysokotemperaturową, optymalizowane do badań strukturalnych (zwierciadło ogniskujące, pomiary w rotujących kapilarach) i mikrodyfrakcyjnych

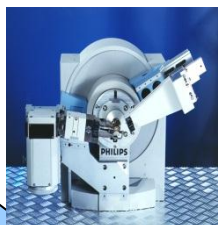


Posiadana aparatura badawcza jest porównywalna z wyposażeniem wiodących ośrodków światowych. Prowadzimy również współpracę naukową i badania w ośrodkach synchrotronowych (ESRF – Grenoble, Diamond – W.Brytania, PETRA III w DESY – Niemcy)

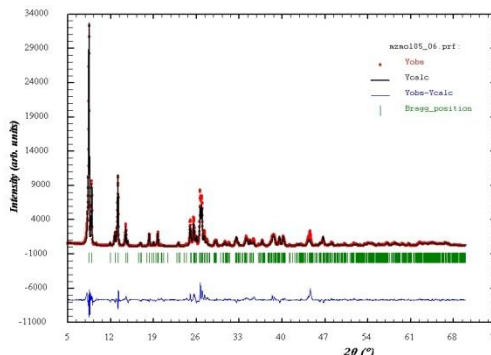
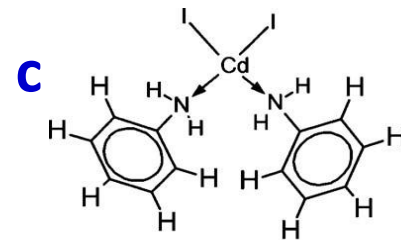
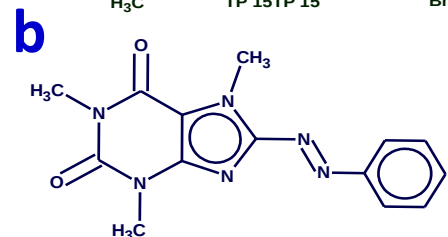
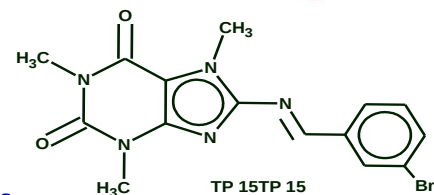
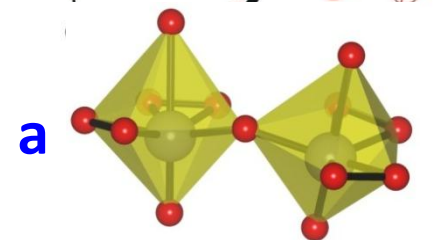
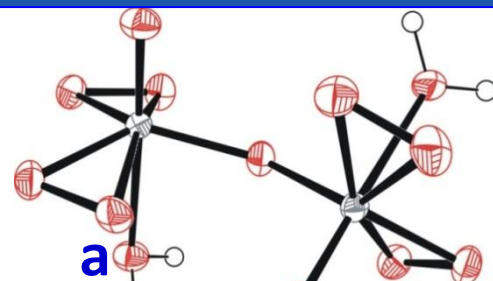
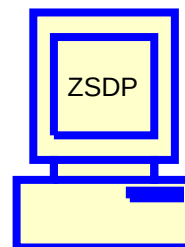




**Kryształ odrzucony
przez badających**



**Stał się...(po zmieleniu)
źródłem danych
strukturalnych**



Przykłady badań:

a – peroksozwiązki i polimetalany Mo(VI), W(VI) i V(V).

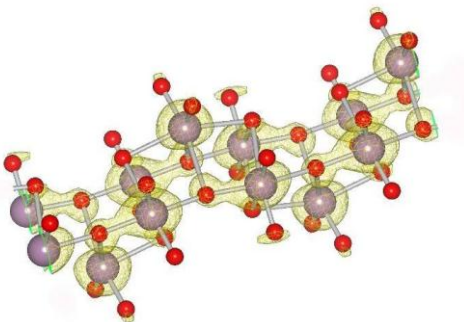
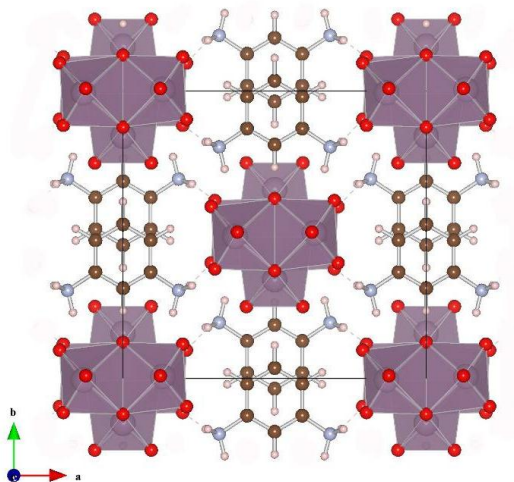
b – preparaty farmakologiczne, badania strukturalne (synchrotron)

c – ostatnio badane kompleksy...



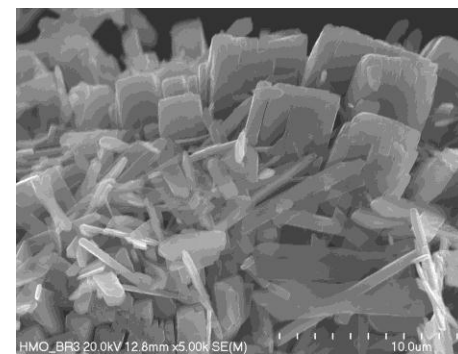
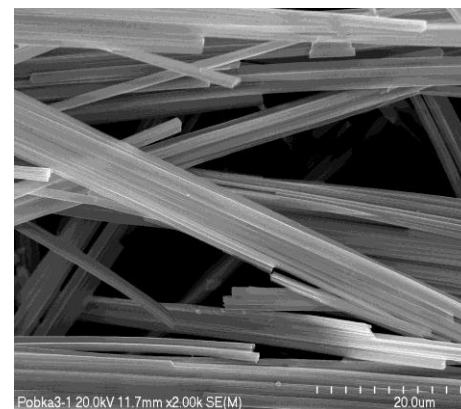
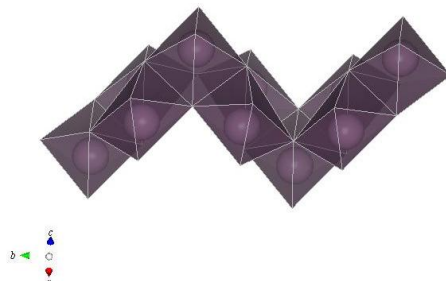
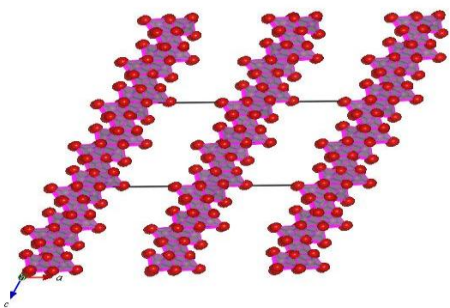
Na początku były: związki o polimerycznych nieorganicznych anionach, kryształy włókniste, materiały warstwowe.

Zastosowania: Kataliza, sorbcja, itp...

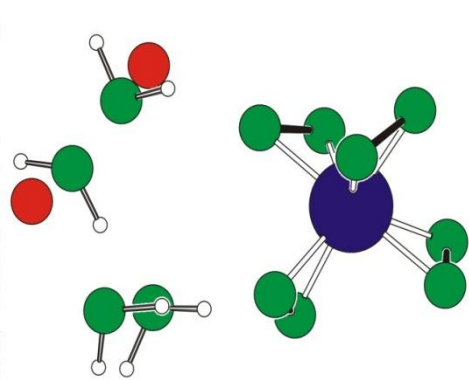


Metody globalnej optymalizacji

Metody charge flipping



Metodami dyfrakcji proszkowej rozwiązano w Zespole szereg struktur włóknistych i warstwowych związków o złożoności do 27 atomów (ab initio) w części asymetrycznej. Tradycja i Nowoczesność (od prof.Chojnackiego)



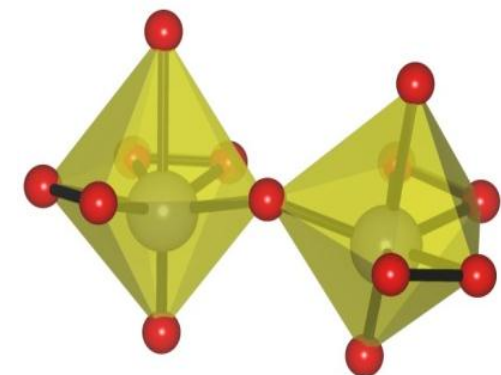
Synteza i badania fizykochemiczne nowych związków

- Nowe peroxo- związki Mo(VI), W(VI) & V(V).

Związki wysoce nietrwałe (**wybuch przy ucieraniu lub zatapianiu**) – badania są wyzwaniem dla procedur pomiarowych!

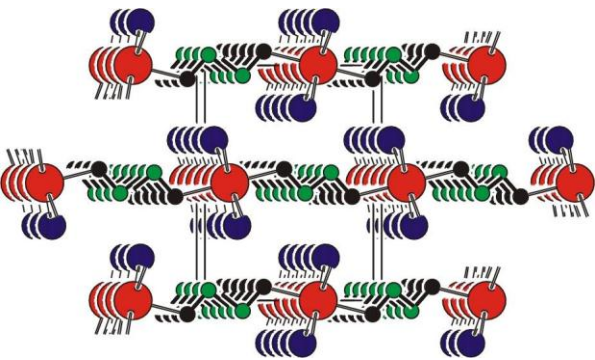
Tematyka BOMBOWA

Zastosowania: **Katalizatory, utleniacze, generatory tlenu singletowego**



- Materiały warstwowe i polimery koordynacyjne

Zastosowania: **inżynieria krystaliczna, sorbcja**



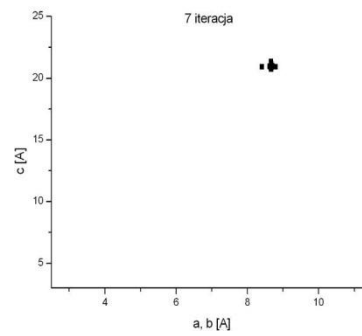
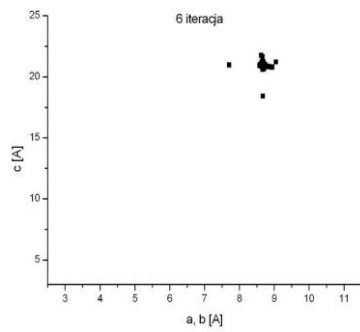
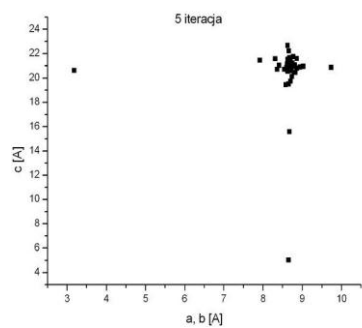
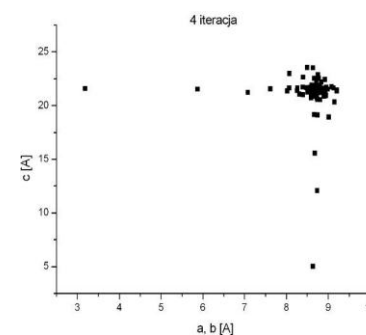
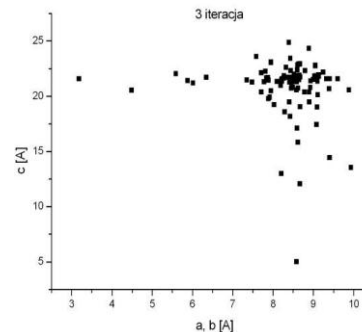
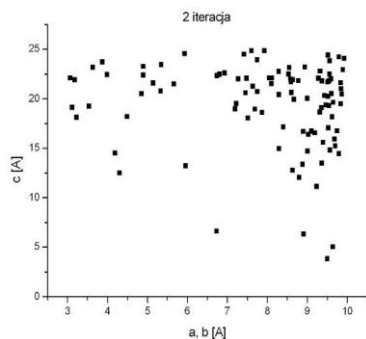
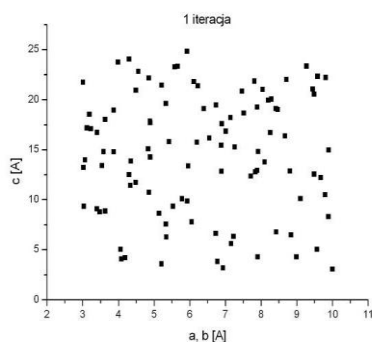


Nowe algorytmy optymalizacyjne

Zastosowanie algorytmu
kooperatywnego w procesie
wskaźnikowania



Test 1. Układ tetragonalny, $a = b = 8.670 \text{ \AA}$; $c = 20.927 \text{ \AA}$





Badania z zakresu ochrony zabytków

Badanie autentyczności, datowanie, dobór technik konserwatorskich (przystawka do mikrodyfrakcji)

badane obiekty: zabytkowe monety, elementy uzbrojenia (grot z czasów rzymskich), pigmenty...



18-19 września 2008 - X-ray techniques in investigations of the object of cultural heritage

12,13 maj 2010 – Around Rembrandt and his workshop

2012 – 2014 Kolejne konferencje pod auspicjami IUCr (Commission of Art)



Dotychczasowi magistranci i doktoranci: – losy po studiach

- Trondheim, Augsburg – praca naukowa,
- Delft, Lyon, Londyn, Genewa, AGH - studia doktoranckie
- PAN, Pliva, Comarch - zatrudnienie

Badane połączenia to: farmaceutyki, katalizatory, magnesy molekularne, i inne trudne połączenia otrzymane na Wydziale Chemii !

Rocznie syntezujemy i poddajemy badaniom ok. 20 nowych związków z grupy polimetalanów, perokspolimetalanów, połączeń gąbek protonowych z kwasami organicznymi

Tematyka badań:

- Synteza i badania strukturalne (metody proszkowe) nowych ciekawych materiałów. Badania obiektów zabytkowych.

Prace magisterskie są zazwyczaj podstawą publikacji czy posterów na konferencjach naukowych



Zapraszamy do współpracy

Bo dla wszystkich materiałów:

Czy to nowoczesne, czy też zabytkowe

Metody i sprzęt nasz, absolutnie NOWE

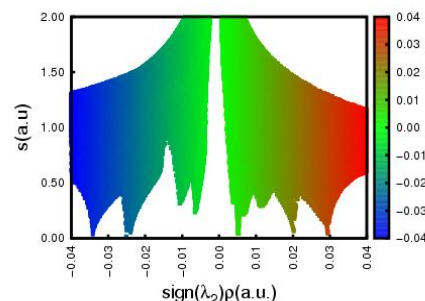
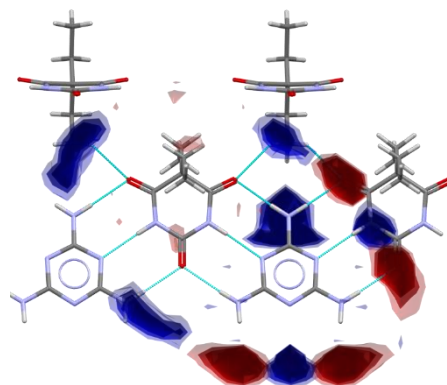
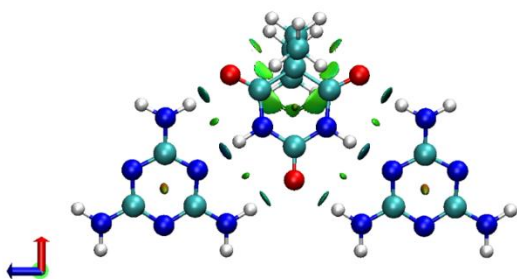
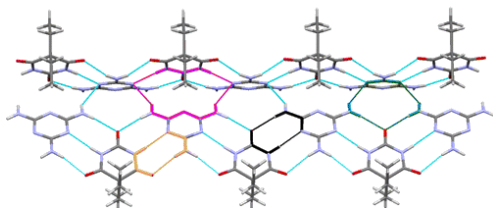
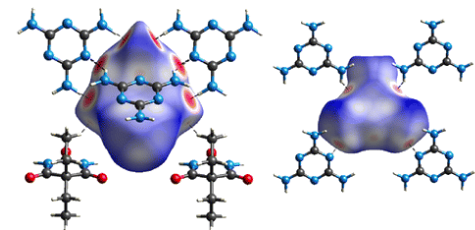
DZIĘKUJĘ ZA UWAGĘ !!!



Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Tematyka badawcza

- ❖ Jakościowa i ilościowa inżynieria krystaliczna

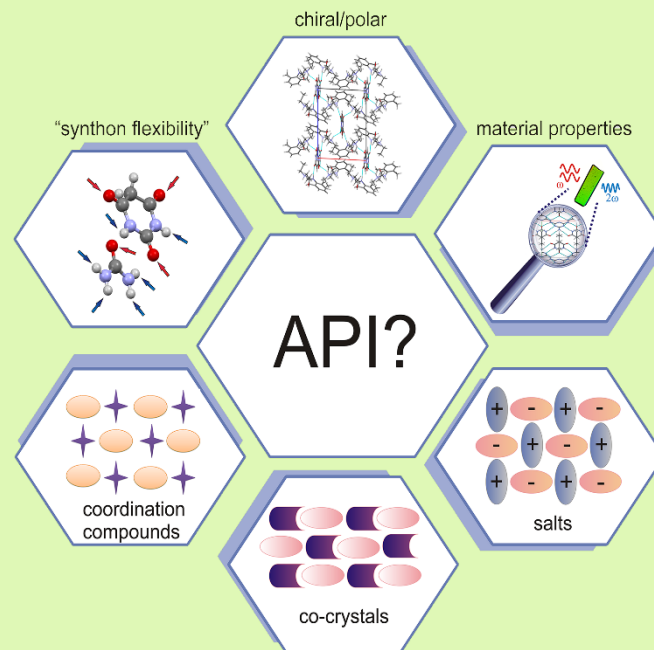


Acta Cryst
B

Acta Crystallographica Section B
STRUCTURAL SCIENCE, CRYSTAL
ENGINEERING AND MATERIALS

ISSN 2052-5206

Volume 71 | Part 4 | 1 August 2015

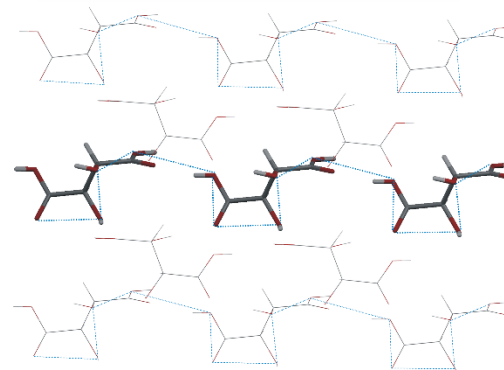
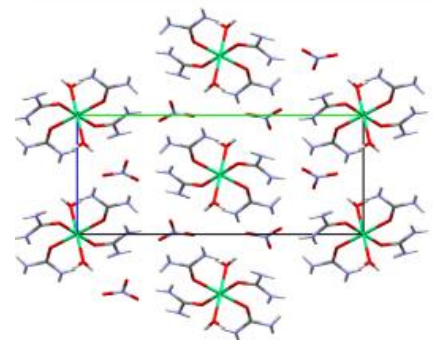
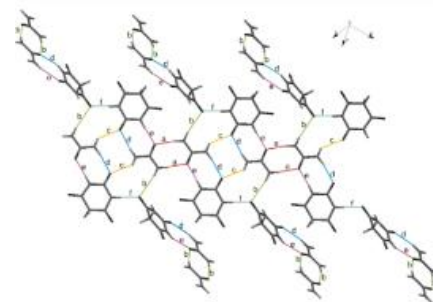
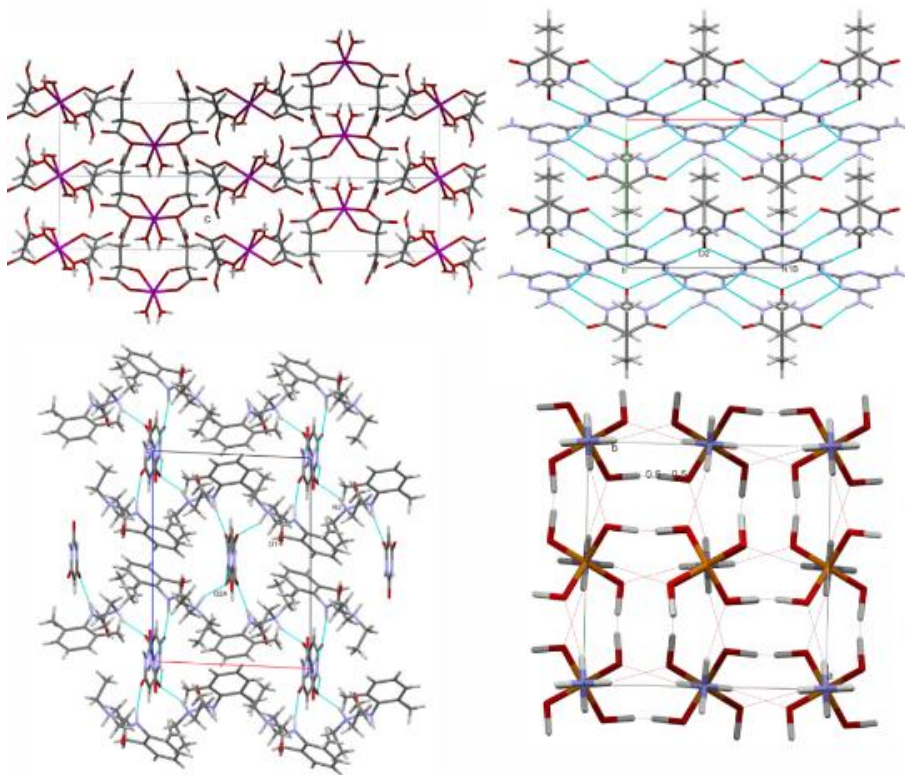




Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Tematyka badawcza

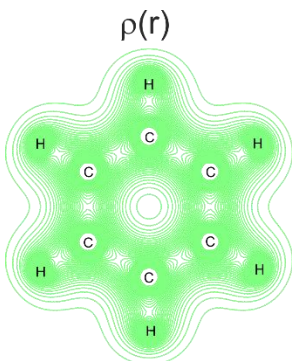
- ❖ Strukturalne badania dyfrakcyjne na monokryształach



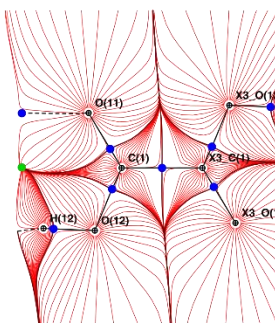
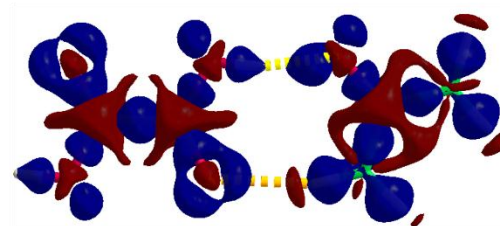
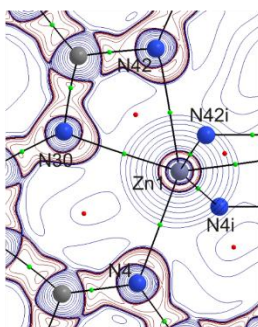
Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Tematyka badawcza

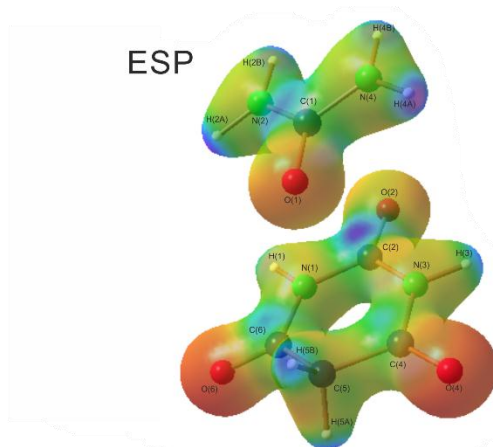
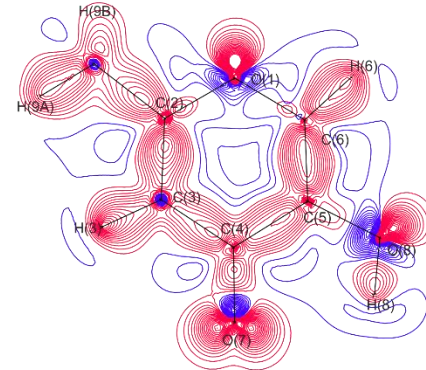
- ❖ Analiza gęstości elektronowej z wysokorozdzielczych pomiarów dyfrakcyjnych
- ❖ Badania topologii gęstości elektronowej



Gradient field trajectories of $\rho(r)$


$$\Delta\rho(r)$$

$$\nabla^2 \rho(r)$$


ESP

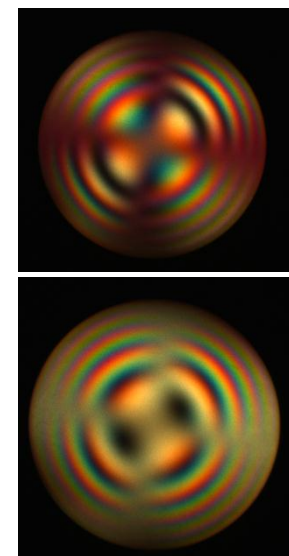
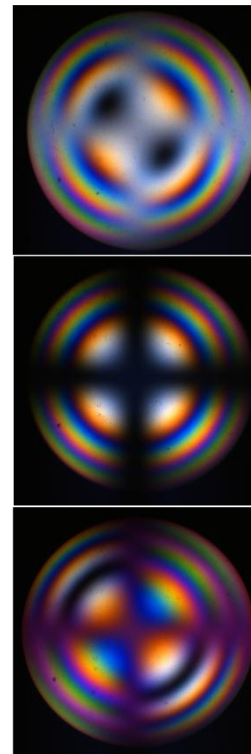
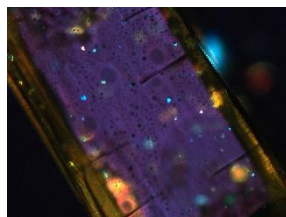
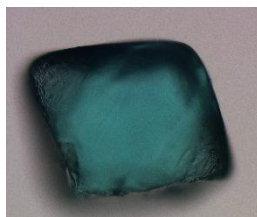
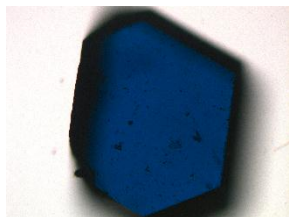
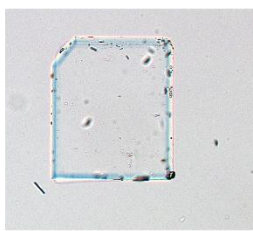
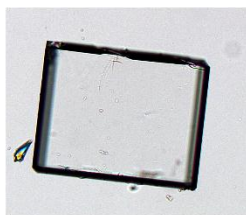
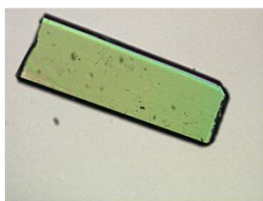
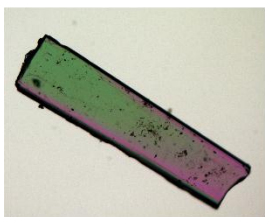

$$\Delta\rho(r)$$




Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Tematyka badawcza

- ❖ Hodowla monokryształów do badań optycznych
- ❖ Pomiary optycznych własności kryształów



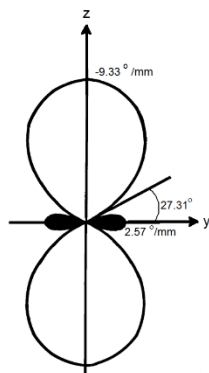
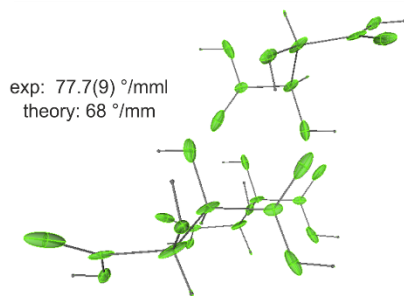


Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

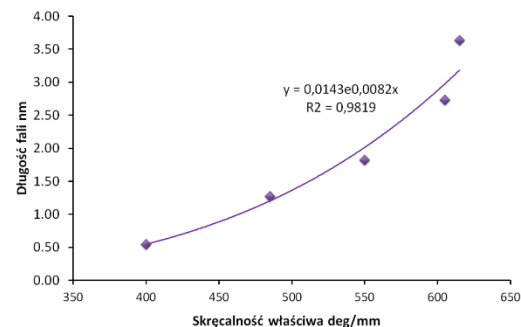
Tematyka badawcza

- ❖ Korelacja struktury z własnościami fizycznymi i chemicznymi kryształów

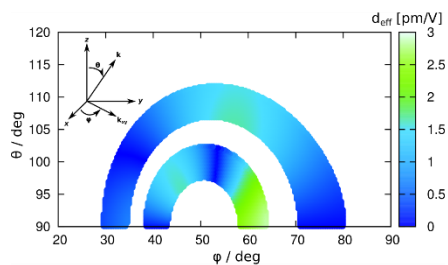
Chiralność kierunkowa



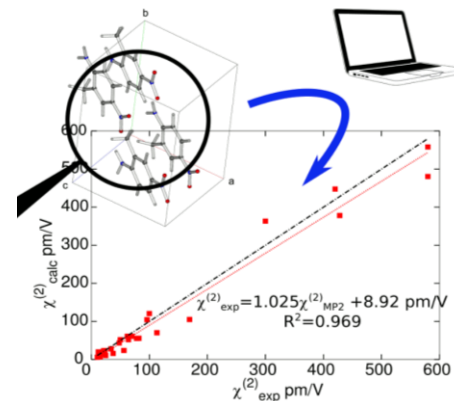
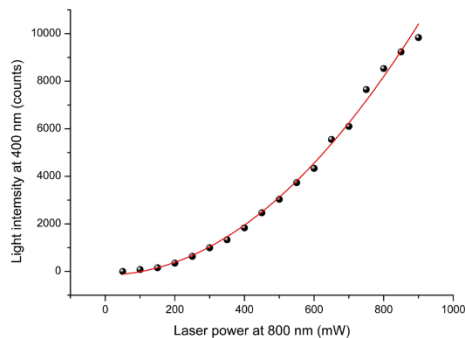
Aktywność optyczna



SHG dopasowanie fazowe



SHG efficiency

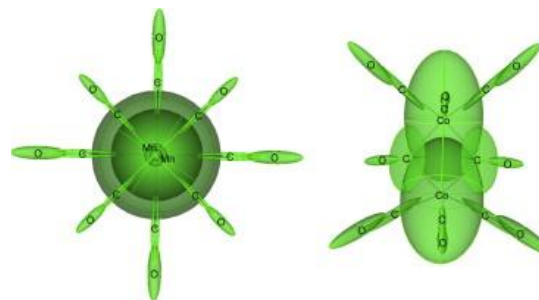
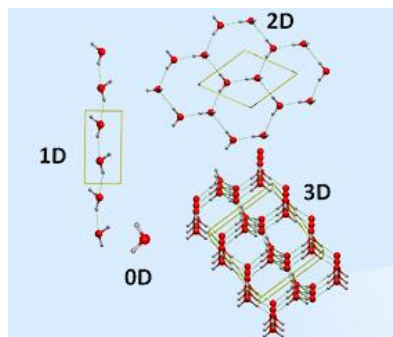
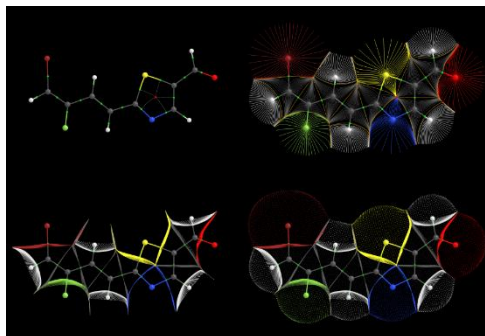
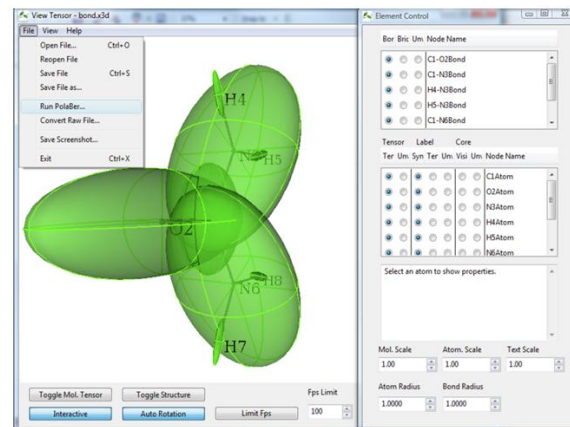
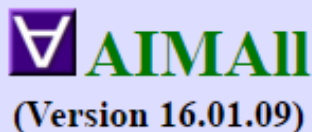




Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Tematyka badawcza

- ❖ Obliczenia kwantowo-mechaniczne – AIMAll, CRYSTAL14
- ❖ Autorski program PolaBer



PolaBer



Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Aparatura badawcza

dyfraktometr
monokrystaliczny
Nonius Kappa CCD



dyfraktometr
monokrystaliczny
Rigaku Oxford
diffraction SuperNova™



mikroskop polaryzacyjny do
pomiarów optycznych Zeiss
Axio Scope A1





Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Współpraca międzynarodowa

- ❖ prof. Ángel Martín Pendás, University of Oviedo, Hiszpania
- ❖ prof. Benoît Champagne, University of Namur, Belgia
- ❖ dr hab. Piero Macchi, University of Bern, Szwajcaria
- ❖ prof. Bo Brummerstedt Iversen
- ❖ dr hab. Jacob Overgaard, Aarhus University, Dania
- ❖ assoc. prof. RNDr. Ivan Němec, PhD
- ❖ prof. ing. Petr Němec, Ph.D.
- ❖ dr Simone Cenedese



Universidad de Oviedo



u^b

^b
UNIVERSITÄT
BERN



AARHUS UNIVERSITY





ZAPRASZAMY !

Kontakt:

Prof. dr hab. Katarzyna Stadnicka
stadnick@chemia.uj.edu.pl

Dr Anna Krawczuk
krawczuk@chemia.uj.edu.pl

Dr Marlena Gryl
gryl@chemia.uj.edu.pl

Pok. 321a