UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Panel: Chemia Teoretyczna i Komputerowa

Wydział Chemii UJ

Kraków, 29.10.2025

CHEMIA TEORETYCZNA I KOMPUTEROWA

- Przedmioty obowiązkowe – I rok:
  - Współczesna chemia teoretyczna - wprowadzenie do pracowni specjalizacyjnej
  - Pracownia specjalizacyjna panelu Chemia teoretyczna i komputerowa
- Przedmioty obowiązkowe – II rok:
  - Seminarium magisterskie
  - Pracownia magisterska

- Przedmioty fakultatywne:
  - Zaawansowane modelowanie molekularne
  - Zaawansowane modelowanie molekularne – laboratorium
  - Modelowanie układów chemicznych metodami dynamiki molekularnej
  - Modelowanie układów chemicznych metodami dynamiki molekularnej - laboratorium
  - Metody numeryczne
  - Programowanie obliczeń naukowych w Fortranie
  - Programowanie obliczeń naukowych w języku Python
  - Techniki programowania obliczeń naukowych w języku C++
  - Inne kursy oferowane przez WCh, WFAIS i WMiI

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Prezentacja tematyki badawczej *Zakładu Metod Obliczeniowych Chemii* oraz *Zakładu Chemii Teoretycznej* Wydziału Chemii UJ

Wydział Chemii UJ

Kraków, 29.10.2025



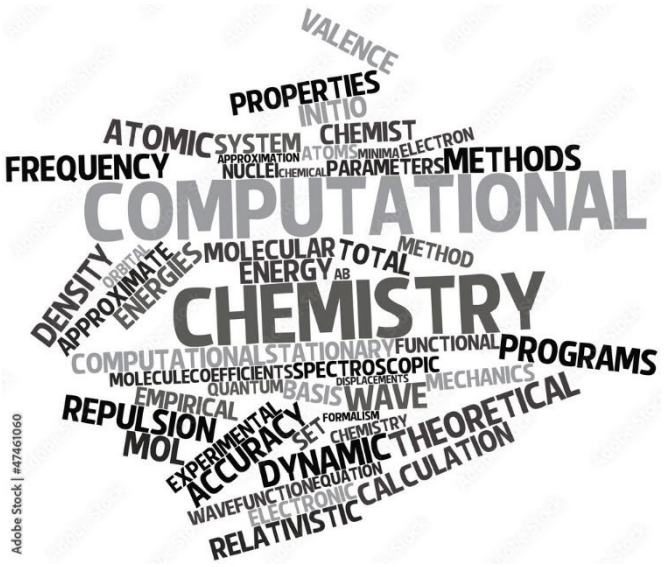
Segment: C3

Zakład Chemii Teoretycznej

Zakład Metod Obliczeniowych Chemii



- Czym zajmują się chemicy teoretycy:
  - rozwój teorii
  - opracowanie nowych metod o zwiększonej dokładności i/lub efektywności
  - opracowanie i implementacja nowych narzędzi (wskaźników, podejść) do analizy i interpretacji struktury i własności układów
  - badanie dokładności metod obliczeniowych, opracowywanie modeli i protokołów obliczeniowych
  - analiza struktury elektronowej i wiązań chemicznych
  - stosowanie metod i modeli do wyjaśnienia i/lub przewidywania danych doświadczalnych

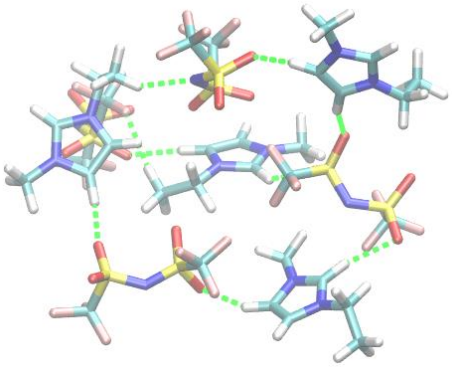


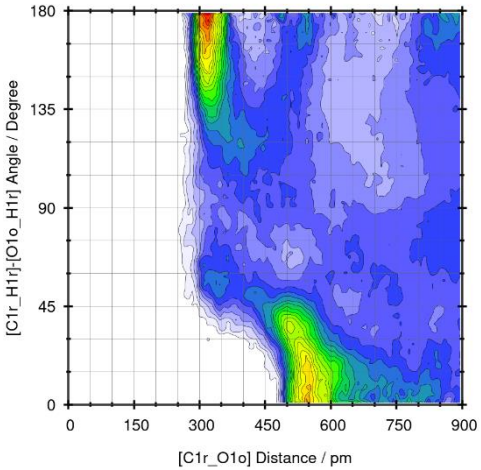
Zespół Półprzewodników Organicznych

dr hab. Andrzej Eilmes, prof. UJ, p. C3-03
dr Piotr Kubisiak, p. C3-08

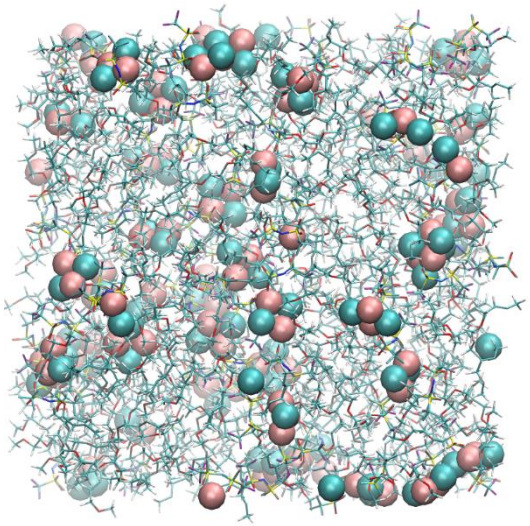
Obliczenia kwantowo-chemiczne i symulacje dynamiki molekularnej

- **badania struktury i dynamiki roztworów elektrolitów**
- **badania wiązań wodorowych w cieczach**





Wiązania wodorowe w cieczy jonowej EMIM-TFSI



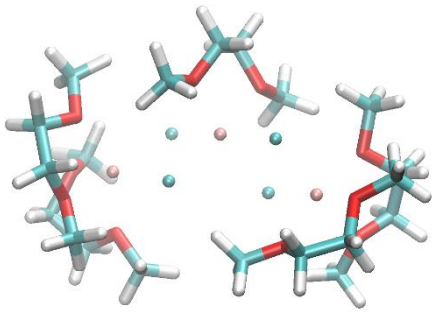
Struktura elektrolitu $MgCl_2/Mg(TFSI)_2$ w dimetoksyetanie

Zespół Półprzewodników Organicznych

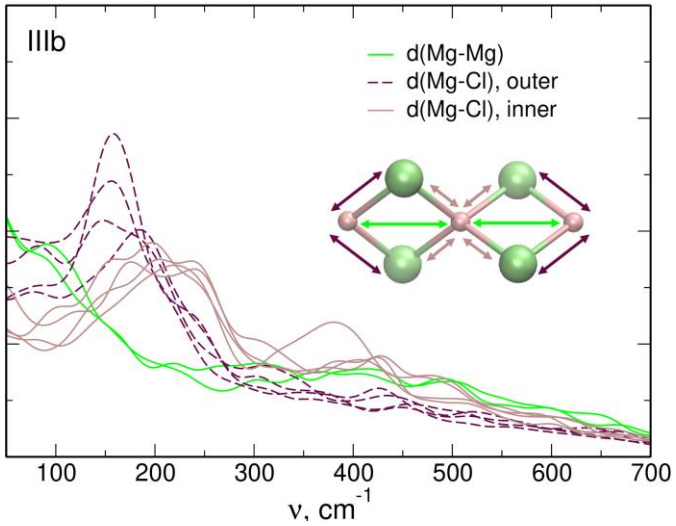
dr hab. Andrzej Eilmes, prof. UJ, p. C3-03
dr Piotr Kubisiak, p. C3-08

Obliczenia kwantowo-chemiczne i symulacje dynamiki molekularnej

- **badanie wpływu oddziaływań na widma oscylacyjne**



Częstości oscylacji odległości Mg-Cl i Mg-Mg w kompleksie $[Mg_3Cl_4]^{2+}$



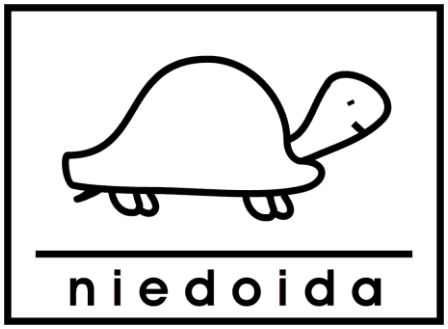
Proponowane tematy prac dyplomowych:

- ❑ Temat do uzgodnienia z osobą zainteresowaną
- ❑ Możliwa tematyka obejmuje obliczenia kwantowo-chemiczne oraz symulacje dynamiki molekularnej: badania oddziaływań i struktury w roztworach, modelowanie własności elektrolitów

Zespół Półprzewodników Organicznych

Rozwój metod obliczeniowych chemii kwantowej i mikroelektrostatyki

dr hab. Grzegorz Mazur
grzegorz.mazur@uj.edu.pl
p. C3-01



Uniwersalny program do obliczeń kwantowochemicznych

```
for (unsigned kx{1}; kx <= NK; ++kx) {
    for (unsigned ix{0}; ix + kx <= N; ++ix) {
        for (unsigned iy{0}; ix + kx + iy <= N; ++iy) {
            for (unsigned iz{0}; ix + kx + iy + iz <= N; ++iz) {
                const auto idx{ETIndex{{ix, kx, iy, 0, iz, 0}}};
                t(idx) =
                    -(be * xAB + de * xCD) / q *
                        t(ETIndex{{ix, kx - 1, iy, 0, iz, 0}}) -
                    p / q * t(ETIndex{{ix + 1, kx - 1, iy, 0, iz, 0}});

                tx(idx) =
                    -be / q * t(ETIndex{{ix, kx - 1, iy, 0, iz, 0}}) -
                    (be * xAB + de * xCD) / q *
                        tx(ETIndex{{ix, kx - 1, iy, 0, iz, 0}}) -
                    p / q * tx(ETIndex{{ix + 1, kx - 1, iy, 0, iz, 0}});
```

Programowanie

$$2\langle q_m|f_{HXC}(\omega)|q_n\rangle = 2\langle q_m|f^A_{HXC}|q_n\rangle + \frac{\langle q_m|H|d\rangle\langle d|H|q_n\rangle}{\omega-\omega_d} \quad (9)$$

This allows one to form an effective, frequency-dependent orbital rotation Hessian

$$\hat{A} = A + D \quad (10)$$

where A is the standard orbital rotation Hessian and D is the dressing matrix

$$D_{ia,jb} = \frac{\langle q_{ia}|\hat{H}|d\rangle\langle d|\hat{H}|q_{jb}\rangle}{\omega-\omega_d} \quad (11)$$

Rozwój nowych metod

Proponowane tematy prac dyplomowych:

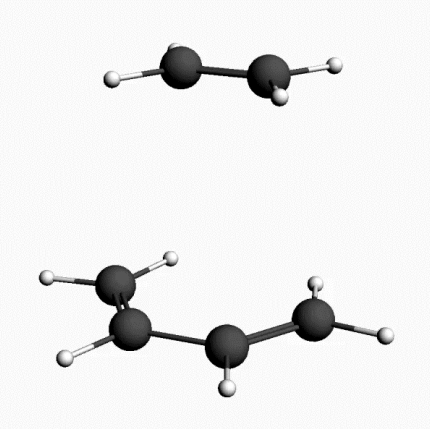
- ❑ Wykorzystanie symetrii do przyspieszenia obliczeń kwantowochemicznych
- ❑ Implementacja nowoczesnych funkcjonałów korelacyjno-wymiennych
- ❑ Oraz wiele innych, do ustalenia bezpośrednio z potencjalnie zainteresowanymi

Zespół Chemii Kwantowej

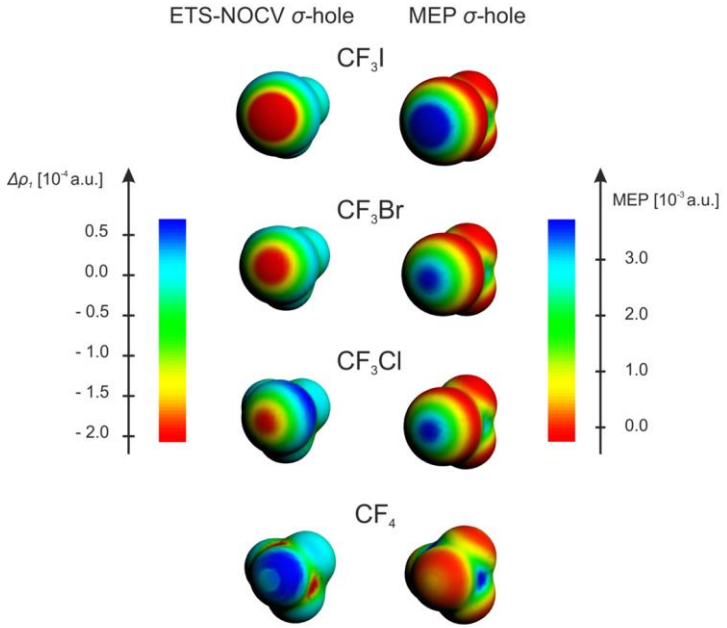
prof. dr hab. Artur Michalak
michalak@chemia.uj.edu.pl
artur.michalak@uj.edu.pl
p. C3-07

Teoretyczny opis wiązania chemicznego

- **Opis wiązania chemicznego w oparciu o orbitale naturalne dla wartościowości chemicznej (metoda ETS-NOCV), indeksy rzędów wiązań oraz wielkości związane z molekularnym potencjałem elektrostatycznym**
- **Opis zmian struktury wiązań wzdłuż ścieżek reakcji chemicznych**



Zmiany struktury wiązań wzdłuż ścieżki IRC dla reakcji cykloaddycji (etylen + butadien)



Proponowane tematy prac dyplomowych:

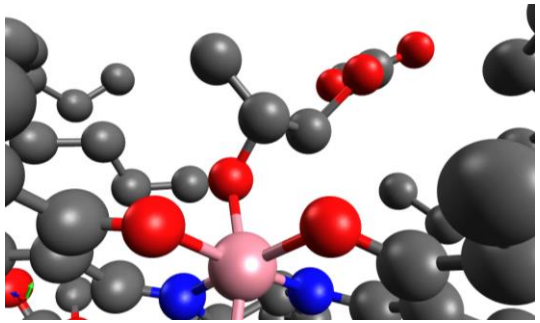
- Konkretne tematy prac dyplomowych mogą zostać sformułowane w uzgodnieniu ze Studentem/-tką zależnie od jego/jej zainteresowań

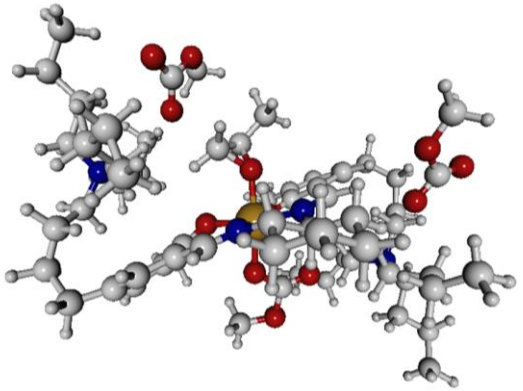
Zespół Chemii Kwantowej

prof. dr hab. Artur Michalak
michalak@chemia.uj.edu.pl
artur.michalak@uj.edu.pl
p. C3-07

Teoretyczne badania związku pomiędzy strukturą a aktywnością katalityczną / własnościami materiałów

- **Teoretyczny opis mechanizmów reakcji elementarnych w procesie kopolimeryzacji CO_2 z epoksydami wobec katalizatorów Co(III) z ligandami salenowymi**





Przykładowa ścieżka reakcji otwarcia epoksydu.

Współpraca: KIST (Korea Pd.), Ajou Univ. (Korea Pd.), Technion (Izrael), i in.

Proponowane tematy prac dyplomowych:

- Konkretne tematy prac dyplomowych mogą zostać sformułowane w uzgodnieniu ze Studentem/-tką zależnie od jego/jej zainteresowań

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

CHEMIA TEORETYCZNA I KOMPUTEROWA

Zespół Chemii Kwantowej

prof. dr hab. Artur Michalak
michalak@chemia.uj.edu.pl
artur.michalak@uj.edu.pl
p. C3-07

Teoretyczne badania związku pomiędzy strukturą a aktywnością katalityczną / własnościami materiałów

- **Teoretyczny opis mechanizmów reakcji elementarnych w procesie kopolimeryzacji CO_2 z epoksydami wobec katalizatorów Co(III) z ligandami salenowymi**
- **Teoretyczne badania układów polimerowych o potencjalnym zastosowaniu jako membrany w ogniwach paliwowych, ze szczególnym uwzględnieniem nowych polimerów opartych na tetrazolu / benzimidazolu**
- **Teoretyczne badania mechanizmów degradacji materiałów polimerowych w alkalicznych ogniwach paliwowych**



Struktura wiązań wodorowych w membranie opartej na polimerze z ugrupowaniami tetrazolowymi.

Współpraca: KIST (Korea Pd.), Ajou Univ. (Korea Pd.), Technion (Izrael), i in.

Proponowane tematy prac dyplomowych:

- Konkretne tematy prac dyplomowych mogą zostać sformułowane w uzgodnieniu ze Studentem/-tką zależnie od jego/jej zainteresowań

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

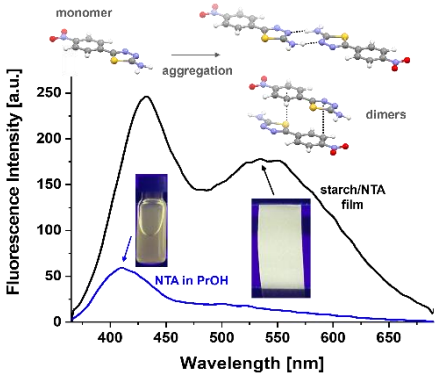
CHEMIA TEORETYCZNA I KOMPUTEROWA

Zespół Chemii Kwantowej

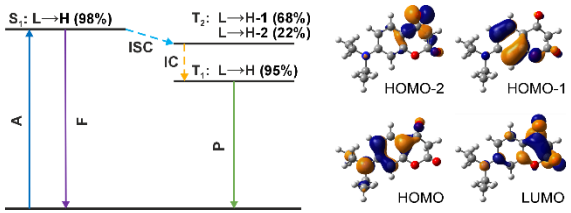
dr hab. Monika Srebro-Hooper, prof. UJ
monika.srebro@uj.edu.pl p. C3-09

Obliczeniowa spektroskopia molekularna

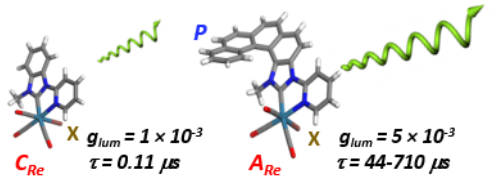
zjawisko podwójnej fluorescencji indukowanej przeniesieniem protonu / agregacją



efekt fosforescencji w temperaturze pokojowej

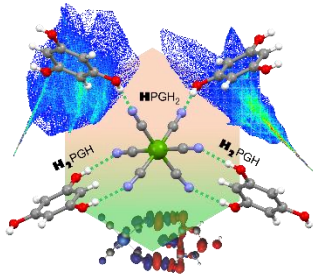


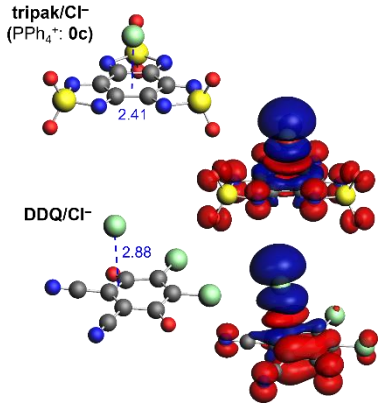
aktywność optyczna i luminescencja spolaryzowana kołowo



Charakterystyka struktury elektronowej

oddziaływania w układach supramolekularnych stabilizowanych wiązaniami wodorowymi i / lub typu anion-π oraz ich wpływ na obserwowane własności spektroskopowe





Współpraca:
Prof. J. Crassous (Francja)
Prof. J. Autschbach (USA)
dr hab. A. Matwijczuk (Lublin)
Prof. R. Podgajny (WCh UJ)
dr hab. D. Pinkowicz (WCh UJ

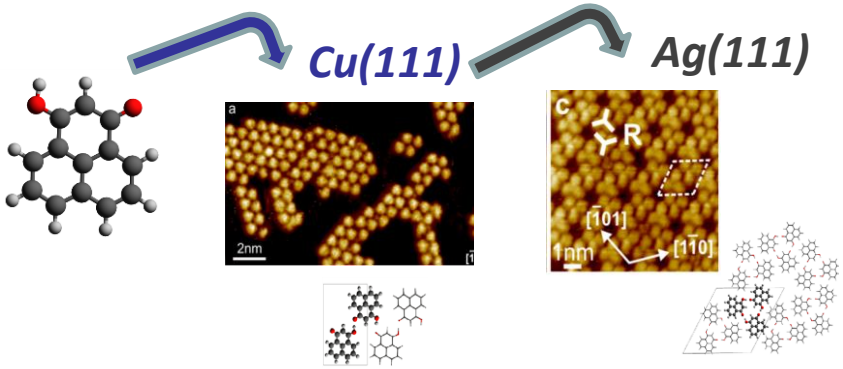
Proponowane tematy prac dyplomowych – nawiązujące do aktualnych projektów:

- ❑ Preferencje strukturalne i własności fotofizyczne pochodnych tiadiazoli i kumaryny; aktywność optyczna związków chiralnych
- ❑ Oddziaływania międzycząsteczkowe w nowo-zsyntetyzowanych układach supramolekularnych

Zespół Chemii Kwantowej

dr hab. James Hooper, prof. UJ
james.hooper@uj.edu.pl
p. C3-11

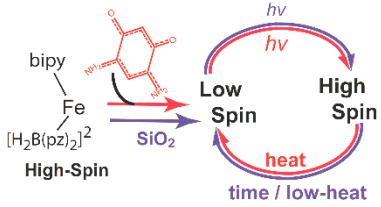
Characterization and prediction of the electronic structure of new materials

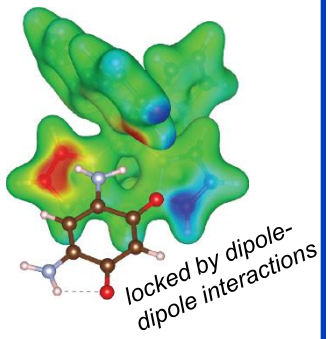


Use and develop models that investigate the electronic and chemical structure at the interface

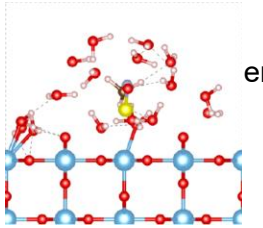
- **Relate properties of the surfaces with real chemistry of the surface**
  - **Structural changes**
  - **Solvation and charge transfer effects**

Implement automated structure searching to solve and propose chemical structures

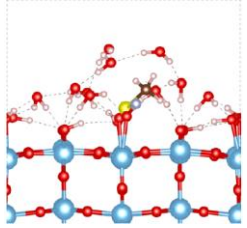




rationalization of experiment



Alignment of energy levels in solvated environment



Proponowane tematy prac dyplomowych:

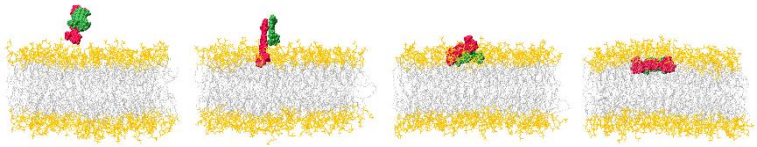
- ❑ The influence of surface interactions on doped graphene nanoribbons
- ❑ Analysis of solvation effects on defects in doped metal oxides

Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

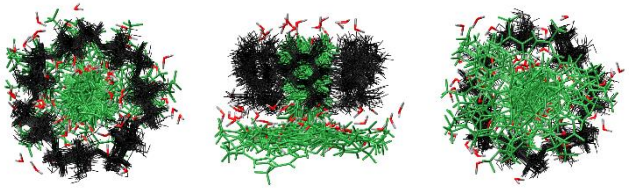
Badania układów biologicznych za pomocą klasycznej dynamiki molekularnej

prof. dr hab. Jacek Korchowiec, p. C3-05
dr Anna Stachowicz-Kuśnierz, p. C3-24

Transport leków przez błony biologiczne, nośniki leków

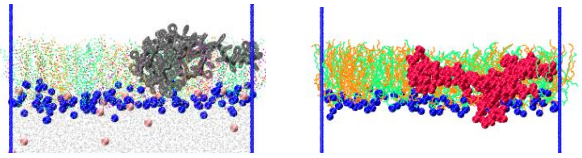


Wnikanie dimeru doksorubicyna-czerwień Kongo do dwuwarstwy fosolipidowej

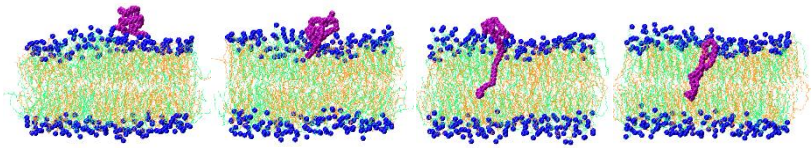


Ułożenie gliklazydu w kompleksie inkluzyjnym z cyklodektryną

Oddziaływania nanoplastiku z błonami biologicznymi



Nanoplastik zaadsorbowany na powierzchni pęcherzyka płucnego (model surfaktantu płucnego)



Wnikanie łańcucha polietylenu do dwuwarstwy fosfolipidowej

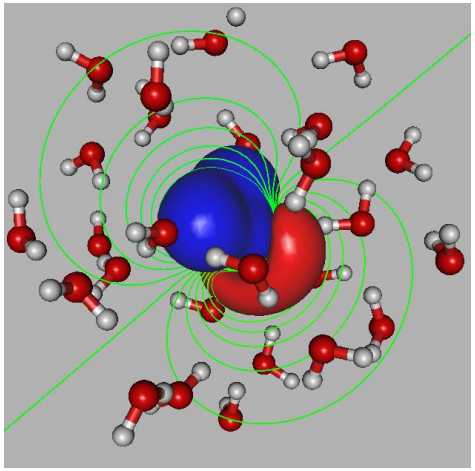
Proponowane tematy prac dyplomowych:

- Wpływ produktów degradacji plastiku na strukturę i funkcje membran biologicznych - symulacje metodami dynamiki molekularnej.
- Modelowanie oddziaływań związków biologicznie aktywnych z membranami lipidowymi.

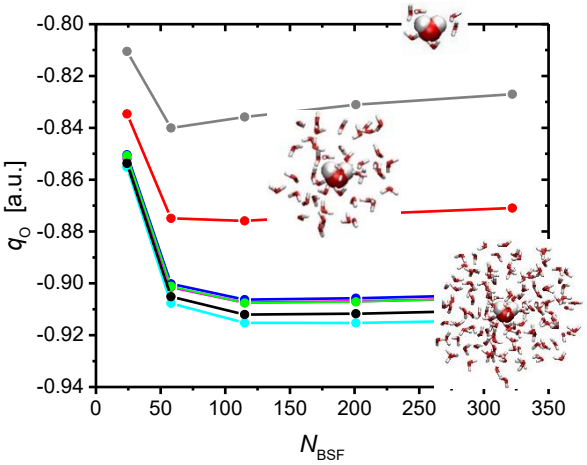
Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

prof. dr hab. Jacek Korchowiec, p. C3-05
dr Anna Stachowicz-Kuśnierz, p. C3-24

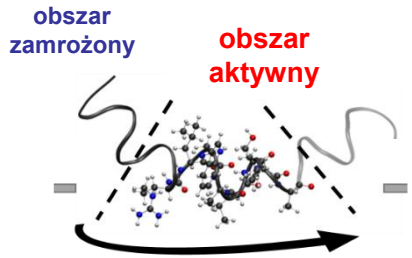
Rozwój i zastosowanie metody samouzgodnionej polaryzacyjnie dla podukładów, metod skalujących się liniowo z wielkością układu molekularnego oraz teorii reaktywności chemicznej



Graficzne przedstawienie metody samouzgodnionej polaryzacyjnie



Zbieżność obliczeń z wielkością układu molekularnego



Kierunek syntezy struktury elektronowej biomateriałów

Metoda wydłużania

Proponowane tematy prac dyplomowych:

- Wykorzystanie metody samouzgodnionej polaryzacyjnie do opracowania pół siłowych prostych cieczy organicznych.
- Podatności atomowe w granicy bazy zupełnej - analiza zbieżności.

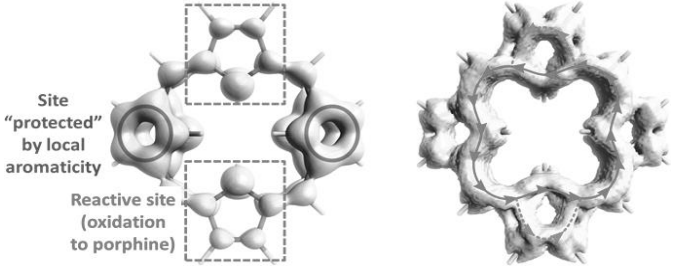
Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

dr Dariusz Szczepanik, p. C3-22

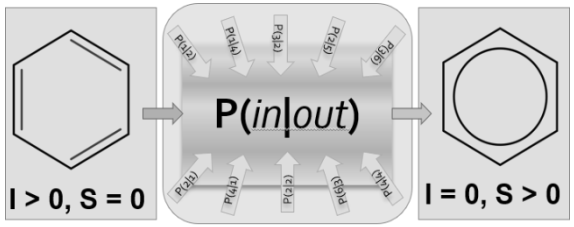
Kwantowa teoria wiązania chemicznego i aromatyczności.
Badanie struktury elektronowej układów poli- i makrocyklicznych.
Teoria informacji układów molekularnych.

www.eddb.pl

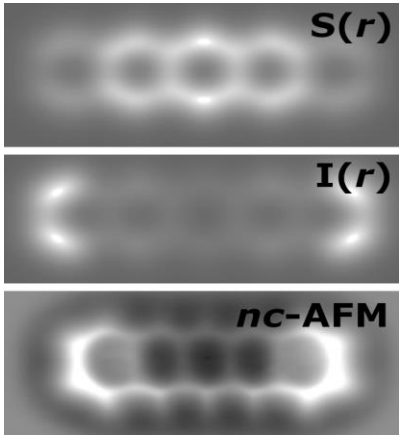
Delokalizacja elektronowa ***vs*** **Prąd pierścieniowy**



Shannon's entropy H = Mutual information $I[\mathbf{P}]$ + Conditional entropy $S[\mathbf{P}]$



$$I = \sum p_i P(j|i) \log_2 \frac{P(j|i)}{q_j} \qquad S = \sum p_i P(j|i) \log_2 P(j|i)$$



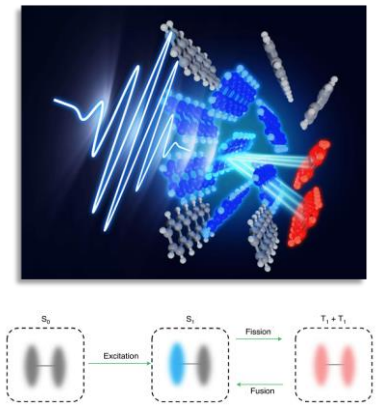
Proponowane tematy prac dyplomowych:

- Teoretyczny opis lokalnej i globalnej aromatyczności w związkach makrocyklicznych;
- Zasada maksymalnej entropii informacyjnej dla wzbudzeń elektronowych w cząsteczkach aromatycznych.

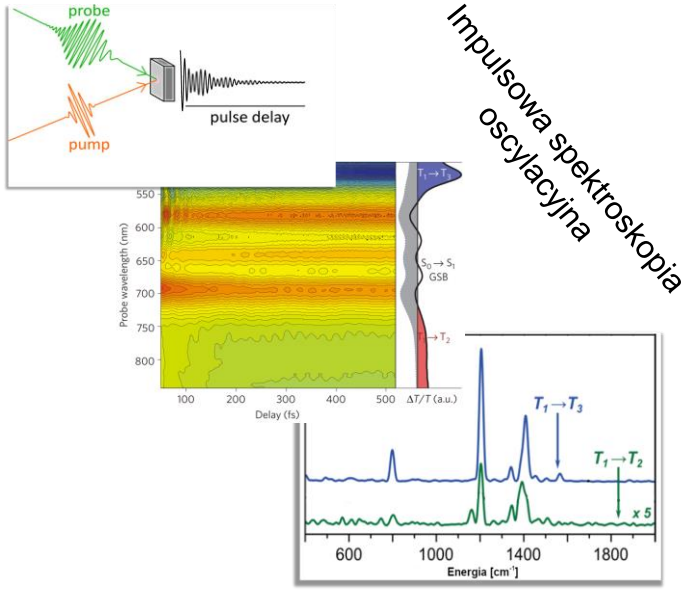
Zespół Teoretycznej Fizyki Molekularnej

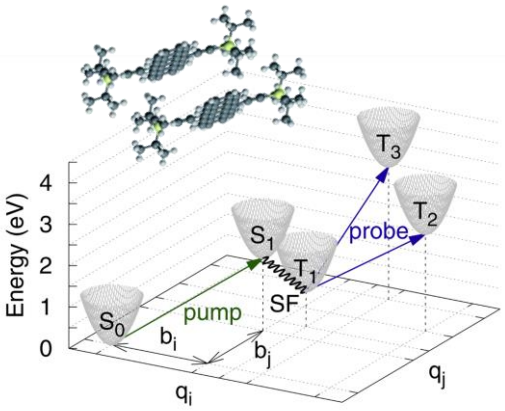
dr hab. Marcin Andrzejak, p. C3-06
mgr Joanna Zams, p. C3-29
mgr Wojciech Radzik, p. C3-27

- **Badanie molekularnego mechanizmu zjawiska rozszczepienia singletu.**
- **Teoretyczna interpretacja widm IVS (Impulsive Vibrational Spectroscopy)**



Ilustracja zjawiska rozszczepienia singletu na parę trypletów





Stany elektronowe TIPS-pentacenu uwzględniane w modelu teoretycznym

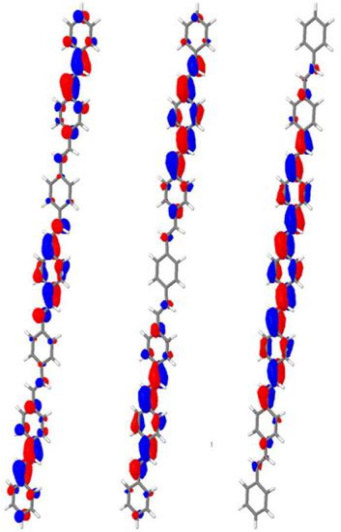
Proponowane tematy prac dyplomowych:

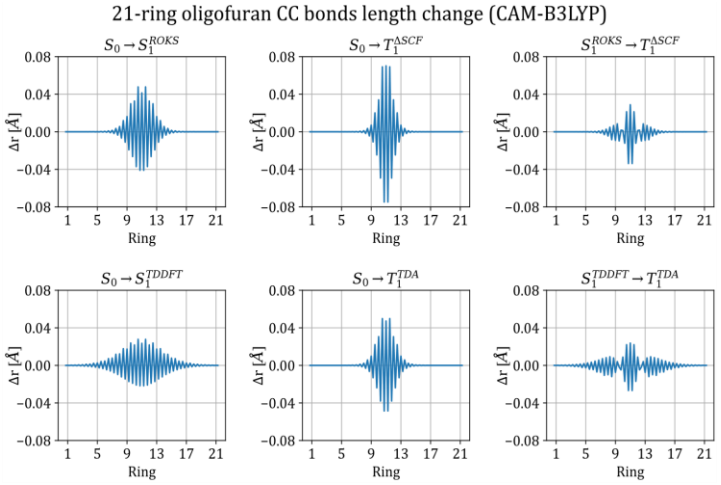
- ❑ Badanie roli kierunków relaksacji geometrii na teoretyczną reprodukcję widm IVS.
- ❑ Rozszczepienie singletu w rozdzielczości wibronowej – co mogą nam powiedzieć obliczenia modelowe?

Zespół Teoretycznej Fizyki Molekularnej

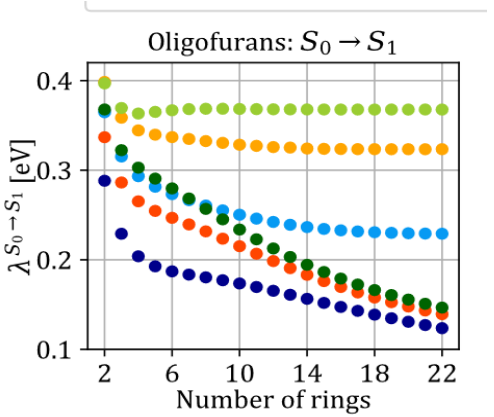
dr hab. Marcin Andrzejak, p. C3-06
mgr Joanna Zams, p. C3-29
mgr Wojciech Radzik, p. C3-27

Badanie delokalizacji elektronowej i jej wpływ na własności chromoforów organicznych.





Samopułapkowanie wzbudzenia w łańcuchu oligomeru w wyniku relaksacji geometrii



Zależność energii reorganizacji od długości oligomeru wg różnych metod chemii kwantowej

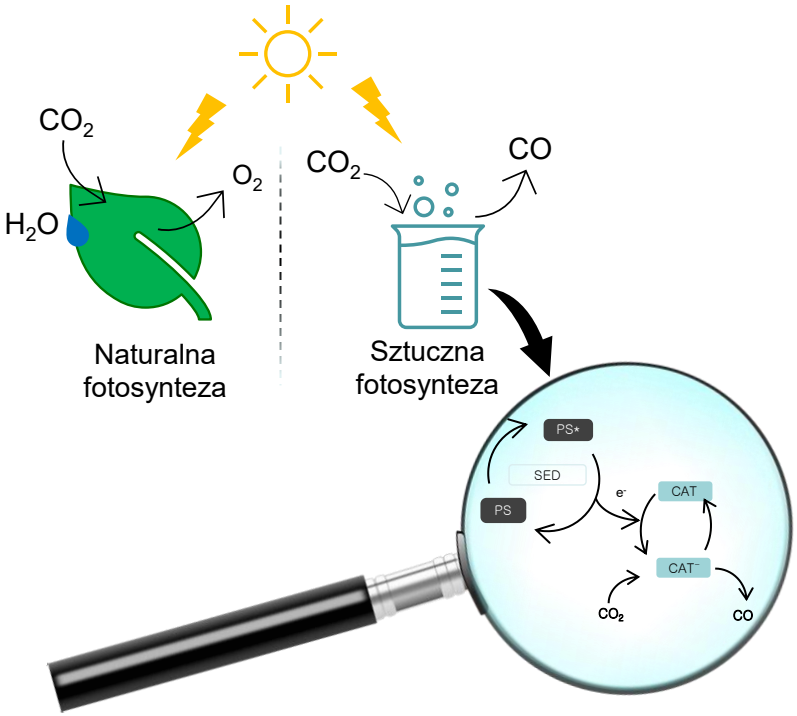
Proponowane tematy prac dyplomowych:

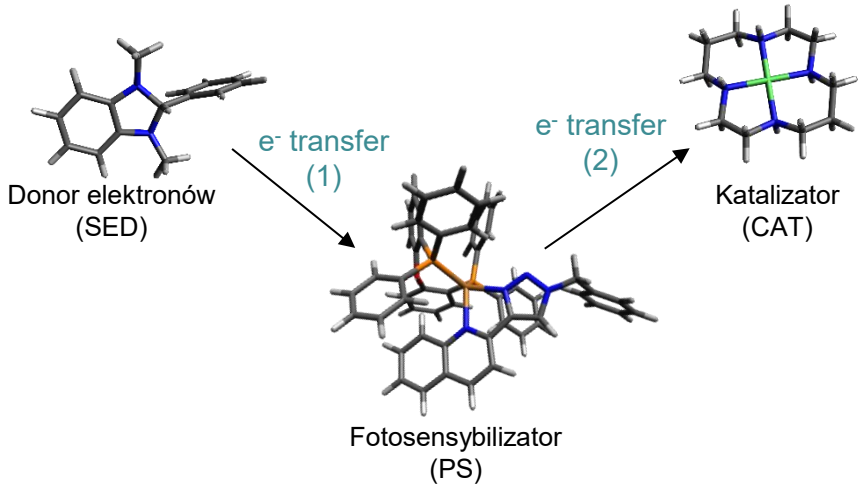
- ❑ Badanie zależności energii reorganizacji od długości łańcucha i metody obliczeniowej dla oligomerów o sprzężonych pierścieniach aromatycznych.
- ❑ Badanie charakteru stanów wzbudzonych w oligomerach aromatycznych w oparciu o jednoelektronową macierz gęstości elektronowej przejścia.

Zespół Teoretycznej Fizyki Molekularnej

dr hab. Marcin Andrzejak, p. C3-06
mgr Joanna Zams, p. C3-29
mgr Wojciech Radzik, p. C3-27

Badanie molekularnego mechanizmu fotoredukcji CO_2 z wykorzystaniem kompleksowych związków miedzi(I)





→ Redukcyjne czy oksydacyjne wygaszenie PS*?
→ Jak dokładnie dokonuje się przeskok elektronu?
→ Jaką rolę pełnią ligandy w kompleksie Cu(I)?
→ Jaki jest wpływ rozpuszczalnika?
→ Jak poprawić istniejące kompleksy Cu(I)?

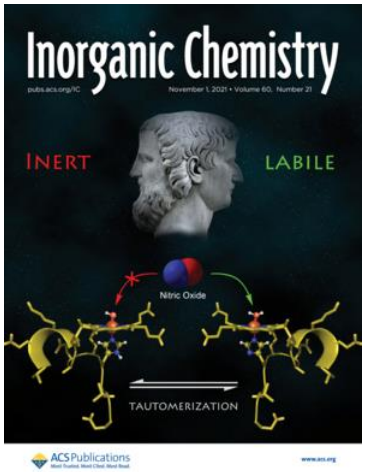
Proponowane tematy prac dyplomowych:

- ❑ Badanie relacji struktury ligandów i własności stanów wzbudzonych w kompleksach Cu(I)
- ❑ Modelowanie oddziaływania reagentów (PS, SED, CAT) w roztworze metodami mechaniki molekularnej (FF).

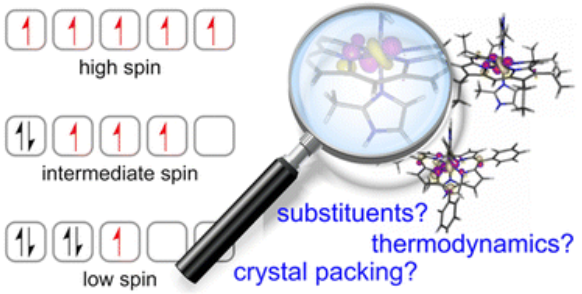
Zespół Chemii Koordynacyjnej (obliczeniowej)

dr hab. Mariusz Radoń, p. C1-06

1. Struktura elektronowa, właściwości i reaktywność kompleksów metali przejściowych
2. Stany spinowe kompleksów spin-crossover i innych oraz wpływ otoczenia (rozpuszczalnik, kryształ).
3. Ocena dokładności metod chemii kwantowej (benchmarki) dla kompleksów metali przejściowych

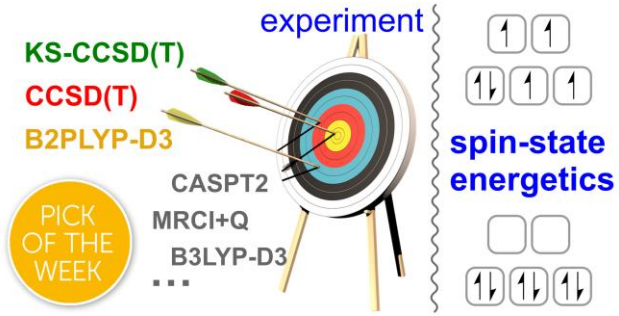


⟵ Wymiana ligandów
na centrum aktywnym Fe(III)
mikroperoksydazy
Inorg. Chem. **2021**, *60*, 15948



Benchmarki „teoria vs eksperyment”
dla energetyki stanów spinowych ⟶

Chem. Sci., **2024**, *15*, 20189
Phys. Chem. Chem. Phys. **2024**, *26*, 18182



Proponowane tematy prac dyplomowych:

- Konkretne tematy prac dyplomowych w ramach powyższej tematyki mogą zostać sformułowane w uzgodnieniu ze Studentem/-tką zależnie od jego/jej zainteresowań.

Dziękuję za uwagę!