Panel Struktura–Teoria–Modelowanie

Łączymy badania struktury i właściwości materii z ich opisem teoretycznym oraz modelowaniem komputerowym - od wiązań chemicznych i cząsteczek po kryształy, powierzchnie i układy złożone.

Zakład Krystalochemii i Krystalofizyki

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii Proszkowej

Zakład Chemii Teoretycznej

Zespół Półprzewodników Organicznych

Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

Zespół Chemii Kwantowej

Zespół Teoretycznej Fizyki Molekularnej

Zakład Metod Obliczeniowych Chemii



Program panelu

Przedmiot	Godziny	ECTS
Laboratorium specjalizacyjne panelu STeM	105 L	10 (Z)
Zaawansowane modelowanie molekularne	20 W + 40 L	4 (E)
Elementy termodynamiki statystycznej	30 W z el. K	2 (Z)
Modelowanie układów chemicznych metodami dynamiki molekularnej	10 W + 30 L	2 (Z)
Samoorganizacja struktur krystalicznych – grupy przestrzenne i eksperymentalna gęstość elektronowa	20 W + 20 K	3 (E)
Komputerowa analiza danych dyfrakcyjnych i modelowanie struktur krystalicznych	25 L	2 (Z)
Łącznie	**300**	**23**

W – wykład K – konwersatorium L – laboratorium
Z – zaliczenie na ocenę E – egzamin

Laboratorium specjalizacyjne

105 godzin · 10 ECTS

Część wspólna dla wszystkich

Bazy danych struktur krystalicznych, obliczenia periodyczne w programie CRYSTAL oraz modelowanie stanów wzbudzonych w ciele stałym

Część specjalistyczna: jedna z dwóch

Zgodnie z miejscem realizacji pracy magisterskiej

Chemia teoretyczna i obliczeniowa

Metody teoretyczne i obliczeniowe, w tym modelowania komputerowego, do rozwiązywania specjalistycznych problemów badawczych

Krystalochemia i krystalofizyka

Inżynieria krystaliczna, niestandardowe metody (współ)krystalizacji, krystalografia kwantowa

Gdzie pracują nasi absolwenci?

Nauka i badania

AGH · Norweski Uniwersytet Nauki i Technologii · Uniwersytet w Southampton · Uniwersytet w Namur · Uniwersytet w Getyndze · University of South Florida

Farmacja i badania kliniczne

Selvita, Boehringer Ingelheim, Szpital Uniwersytecki CMUJ Veranova

Biomateriały i wyroby medyczne

Biovico · Tactica · IBSS BIOMED

Programowanie i IT

Tworzenie i rozwój oprogramowania · UBS · Code Poets ·Cyfronet

Aparatura i infrastruktura badawcza/ przemysł

Rigaku ·ośrodki synchrotronowe ·MOBRUK ·grupa Azoty

Kosmetyki i produkty naturalne

Herbalife

Kryminalistyka i ekspertyzy sądowe

Instytut Ekspertyz Sądowych w Krakowie

Wydawnictwa naukowe/ edukacja

Edytor ·redaktor zarządzający ·szkoły średnie

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

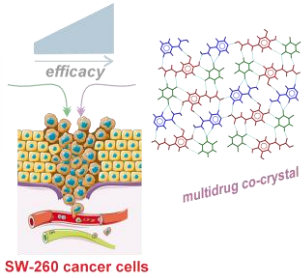
http://www.zikas.chemia.uj.edu.pl

Skład Zespołu: Dr hab. Marlena Gryl, prof. UJ (kierownik),
dr Agnieszka Skórska-Stania, prof. dr hab. Katarzyna M. Stadnicka,
dr Szymon Grabowski, dr Martin Zábranský



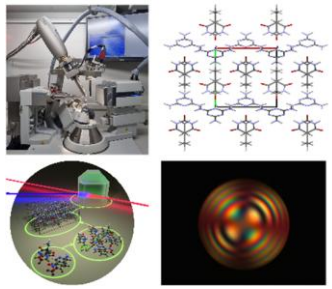
Projektowanie materiałów wieloskładnikowych w oparciu o nowoczesne techniki inżynierii krystalicznej





Otrzymywanie i badania biologiczne nowych **kokryształów leków** oraz **biomateriałów**

Badania strukturalne i pomiary właściwości fizycznych materiałów funkcjonalnych





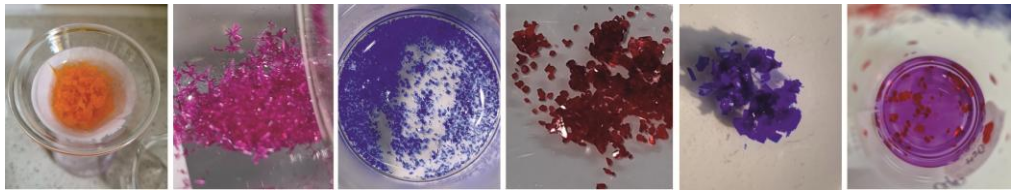
Krystalografia kwantowa, obliczenia właściwości optycznych i elektrycznych kryształów molekularnych

Kontakt:
marlena.gryl@uj.edu.pl
agnieszka.skorska-stania@uj.edu.pl
szymon.grabowski@uj.edu.pl

Poszukiwani studenci do współpracy w projektach

NCN OPUS 26: Modułowe projektowanie układów złożonych kokryształów do zastosowań w optoelektronice, sterowane metodami krystalografii kwantowej

EU COST: CA22107: Bringing Experiment and Simulation Together in Crystal Structure Prediction



Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii Proszkowej

Kryształ odrzucony przez badających – stał się źródłem danych strukturalnych

Gwarancja ciekawych badań

Aparatura;
Nowoczesny dyfraktometr proszkowy z unikalnymi w skali kraju przystawkami. Zakupiony w ramach programu ATOMIN 2.0
Zakres badanych temperatur: 13 – 1600 K

Ciekawe tematy badan:
1) Badania strukturalne pigmentów naftaleno-azowych
2) Katalityczna obróbka materiałów odnawialnych
3) Pionierskie metody w badaniach biomas ligninowych
4) Symetria i autentyczność zabytków i dziel sztuki
5) Metody XRPD w testach procesów termicznych otrzymywania materiałów energetycznych
6) Ligniny jako baza materiałów użytkowych. Monitoring przy użyciu metod XRPD

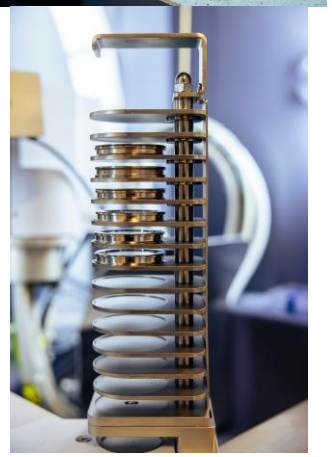
Zespół badawczy przodujący w badaniach XRPD w kraju:
prof. dr hab. Wiesław Łasocha, dr Marcin Kozieł, dr Marcin Oszajca, dr Michał Duda, dr Marek Michalec, dr Andrzej Olech

Ścieżki kariery:
Rigaku, uniw. Norwegia, grupa Azoty, Selvita, Solaris, W. Ch. UJ

Współpraca:
-Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN
-International Centre for Diffraction Data (USA)



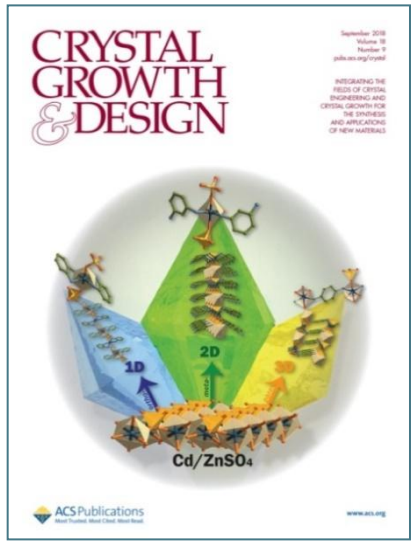




Dyfraktometr Malvern PANalytical Empyrean

Przykłady badań (pigmenty, tapeta, groty strzał)





Aparatura wykorzystywana do badań naukowych

(ZIKAS & ZSDP)



- Dyfraktometry monokrystaliczne (Rigaku Synergy S, SuperNova) i proszkowe (Malvern Panalytical Empyrean)
- Mikroskopy polaryzacyjne Jenapol oraz Zeiss Axio Scope.A1 z przystawką Linkam do badania przejść fazowych, akcesoriami do badań fluorescencji, dwójłomności oraz skręcalności optycznej
- Spektrofotometr UV-Vis Perkin Elmer lambda 365 do badania cieczy i ciał stałych
- Spektrofluorymetr FL 8500 PerkinElmer wraz z akcesoriami do analizy proszków w uchwycie do ciała stałego oraz sferą integracyjną do analizy wydajności kwantowej
- Refraktometry ATAGO do pomiarów współczynników załamania światła dla cieczy i ciała stałego
- Rektor Mikrofalowy Anton Paar Monowave 500
- Reaktor do krystalizacji i syntez z akcesoriami do fotochemii
- Młyn kulowy (mechanochemia), sonikatory, piece wysokotemperaturowe, glove box













Nasi studenci współautorami publikacji

(ZIKAS & ZSDP)



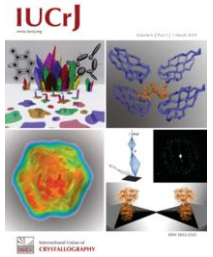
The whole is greater than the sum of its parts: binary and ternary 5-fluorouracil co-crystals with enhanced selectivity towards metastatic cancer cells

ChemComm · 2025



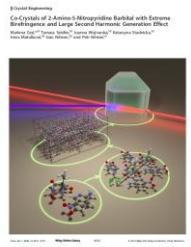
Deciphering colour mechanisms in co-crystals and salts containing violuric acid and chosen L-amino acids

Journal of Materials Chemistry C · 2024



Origin of chromic effects and crystal-to-crystal phase transition in the polymorphs of tyraminium violurate

IUCrJ · 2019



Co-Crystals of 2-Amino-5-Nitropyridine Barbital with Extreme Birefringence and Large Second Harmonic Generation Effect

Chemistry – A European Journal · 2018



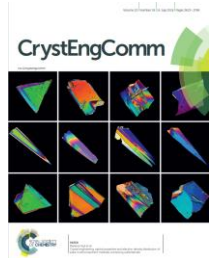
Tyramine as a Prolific Coformer in Crystal Engineering: Insights from Classical Crystal Structure Analysis and Electron Density Studies

Crystal Growth & Design · 2025



Synthesis, Characterization, and Optical Properties of Organic–Inorganic Hybrid Layered Materials: A Solvent-Free Ligand-Controlled Dimensionality Approach Based on Metal Sulfates and Aromatic Diamines

Crystal Growth & Design · 2018



Crystal engineering, optical properties and electron density distribution of polar multicomponent materials containing sulfanilamide

CrystEngComm · 2018

Tematy badawcze 2026/2027

(ZIKAS & ZSDP)

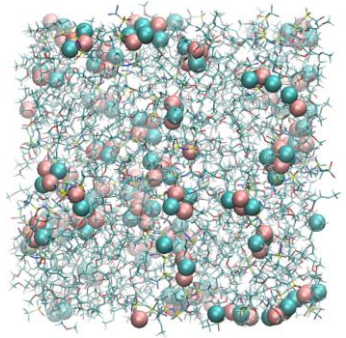
- Analiza topologiczna rozkładu gęstości elektronowej organicznych materiałów chromowych
  Projektowanie materiałów fotonicznych – jak struktura decyduje o interakcji ze światłem
- Optymalizacja procesu krystalizacji odmian polimorficznych wybranych leków
  (dr hab. Marlena Gryl, prof. UJ)
- Dwuskładnikowe formy krystaliczne leków kardiologicznych
- Polimorfizm wybranych leków kardiologicznych
  (dr Agnieszka Skórska-Stania)
- Badania rozkładu gęstości elektronowej kryształów związków aktywnych farmakologicznie
- Inżynieria krystaliczna i badania strukturalne kokryształów zawierających leki przeciwnowotworowe
  (dr Szymon Grabowski)

- Ligniny jako baza materiałów użytkowych. Monitoring przy użyciu metod XRPD.
  (prof. dr hab. Wiesław Łasocha)
- Nieorganiczno-organiczne materiały ze sprzężonym układem π-elektronowym
  (dr Marcin Oszajca)
- Projektowanie układów wieloskładnikowych opartych na blokach budulcowych o wysokiej symetrii
  (dr Marcin Kozieł)

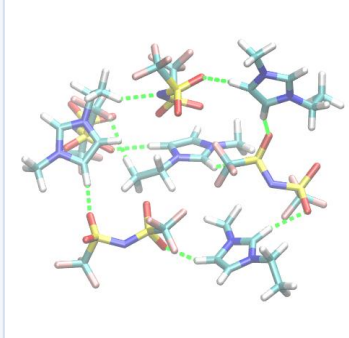
Obliczenia kwantowo-chemiczne i symulacje dynamiki molekularnej

dr hab. Andrzej Eilmes, prof. UJ (p. C3-03) · **dr Piotr Kubisiak** (p. C3-08)
andrzej.eilmes@uj.edu.pl piotr.kubisiak@uj.edu.pl

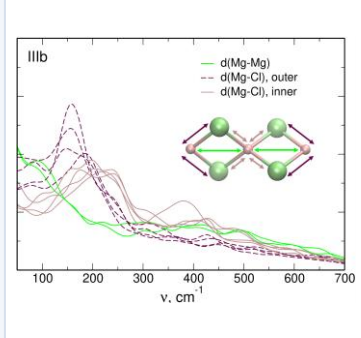
Metody klasyczne i kwantowe, a także pola siłowe oparte na uczeniu maszynowym



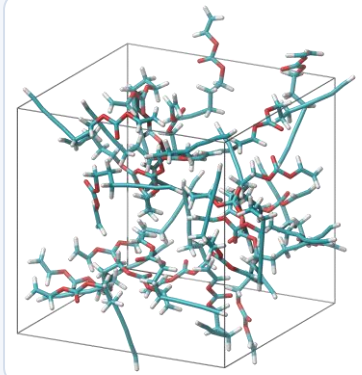
Elektrolity
struktura i dynamika $MgCl_2/Mg(TFSI)_2$ w DME



Wiązania wodorowe
sieć wiązań w cieczy jonowej EMIM-TFSI



Widma oscylacyjne
drgania Mg–Cl i Mg–Mg w $[Mg_3Cl_4]^{2+}$



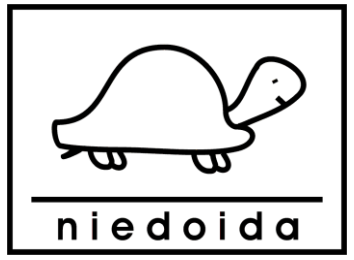
Pola siłowe ML (MACE)
klatka z symulacji MD z potencjałem MACE

Proponowane tematy prac dyplomowych

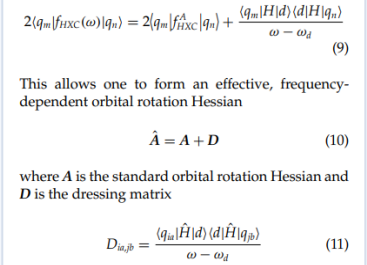
- Obliczenia kwantowo-chemiczne i symulacje MD: oddziaływania i struktura w roztworach, modelowanie własności elektrolitów
- Symulacje z polami siłowymi opartymi na uczeniu maszynowym (MACE)
- Konkretny temat do uzgodnienia z osobą zainteresowaną

Rozwój metod chemii kwantowej i mikroelektrostatyki

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



Programowanie
niedoida – uniwersalny program kwantowochemiczny



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

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

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

where $\boldsymbol{A}$ is the standard orbital rotation Hessian and $\boldsymbol{D}$ is the dressing matrix

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

Nowe metody
teoria i implementacja w chemii kwantowej

Proponowane tematy prac dyplomowych

- Wykorzystanie symetrii do przyspieszenia obliczeń kwantowochemicznych
- Implementacja nowoczesnych funkcjonałów korelacyjno-wymiennych
- …i wiele innych – do ustalenia indywidualnie

STRUKTURA · TEORIA · MODELOWANIE

Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

STeM

prof. dr hab. Jacek Korchowiec
dr Anna Stachowicz-Kuśnierz

Badania układów biologicznych za pomocą klasycznej dynamiki molekularnej

Oddziaływanie nanoplastiku z błonami biologicznymi

Mechanizm penetracji, dyfuzja oligomerów przez modelowe błony eukariotyczne, wpływ na strukturę i mechanikę błony

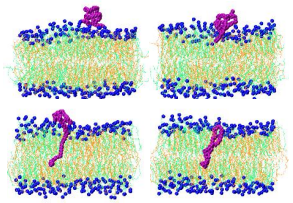
Wpływ zanieczyszczeń powietrza na surfaktant płucny

Modelowanie wpływu zaadsorbowanych zanieczyszczeń i utlenienia lipidów na równowagę fazową lipidów

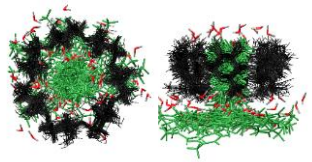
Modelowanie otoczki komórkowej bakterii gram ujemnych pod kątem biologicznego upcyclingu plastiku

Nośniki leków

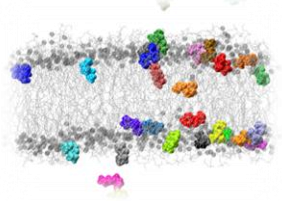
Agregacja kompleksów lek-nośnik, transport przez błony biologiczne



Wnikanie łańcucha polietylenu do dwuwarstwy fosfolipidowej



Ułożenie gliklazydu w kompleksie inkluzyjnym z cyklodekstryną



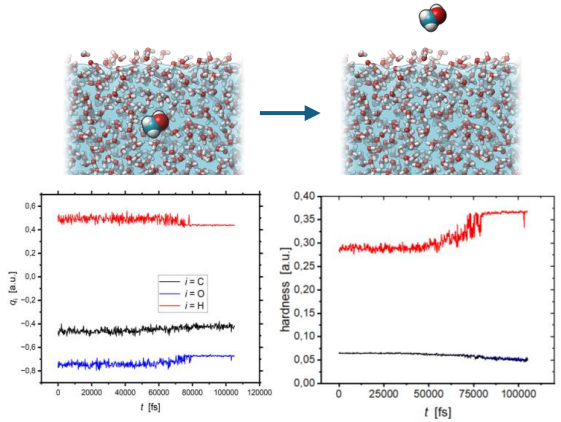
Adsorpcja produktów degradacji polihydroksymaślanu na modelowej błonie bakteryjnej

Analiza podatnościowa rozkładu ładunku

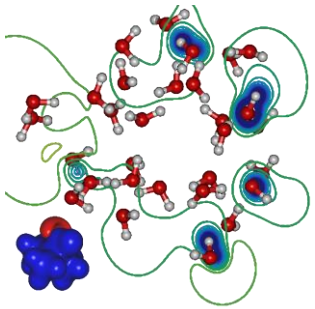
Ujęcie dynamiczne: polaryzacja, detektory wiązań, indeksy reaktywności w symulacjach dynamiki molekularnej

Metoda samouzgodniona polaryzacyjnie

Ładunki cząstkowe uwzględniające wpływ otoczenia



Zmiany ładunków cząstkowych oraz twardości cząsteczki metanolu w odpowiedzi na przejście z roztworu wodnego do fazy gazowej



Metoda samouzgodniona polaryzacyjnie – graficzne przedstawienie potencjału elektrostatycznego działającego na cząsteczkę t-butanolu w środowisku wodnym

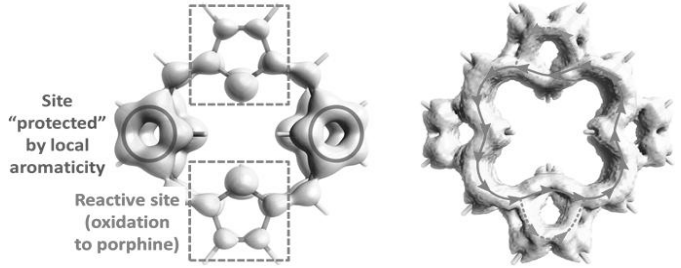
dr hab. Dariusz Szczepanik

Kwantowa teoria wiązania chemicznego i aromatyczności

Badanie struktury elektronowej układów poli- i makrocyklicznych

Teoria informacji układów molekularnych

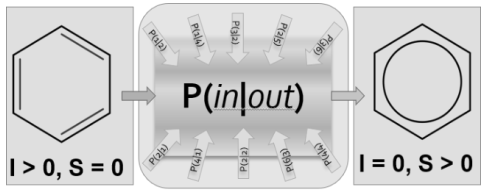
Delokalizacja elektronowa *vs* **Prąd pierścieniowy**



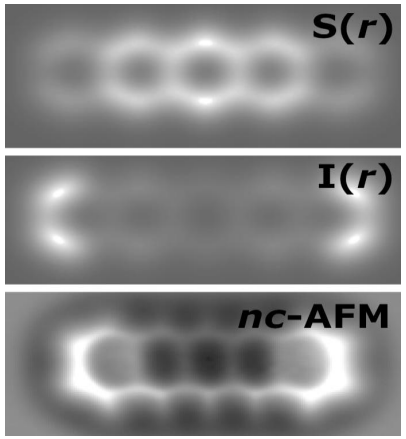
www.eddb.pl

$$H = I[\mathbf{P}] + S[\mathbf{P}]$$

Shannon's entropy — Mutual information — Conditional entropy



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



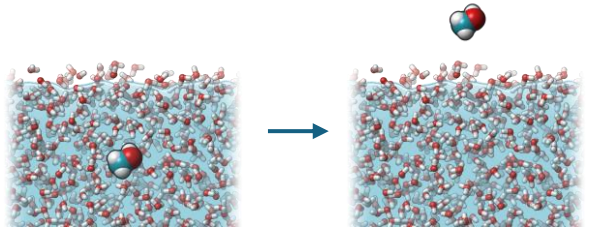
prof. dr hab. Jacek Korchowiec

e-mail: korchow@chemia.uj.edu.pl, pok. C3-05

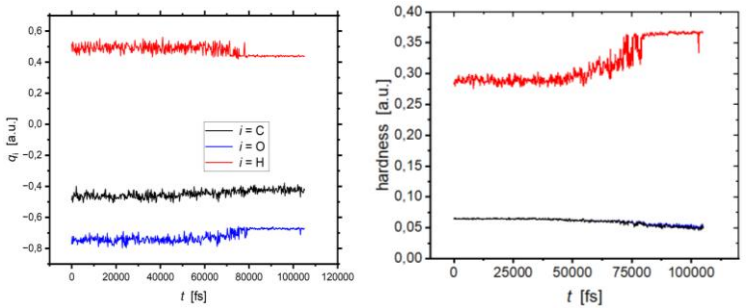
Tematyka badań

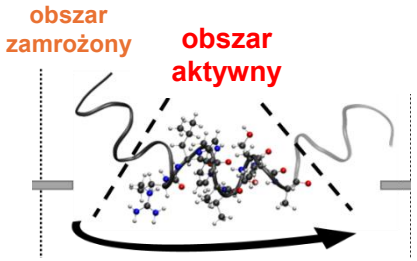
1. **Elektronowe stopnie swobody w symulacjach klasycznych**
   - **Analiza podatnościowa rozkładu ładunku** – ujęcie dynamiczne w symulacjach MD: polaryzacja, detektory wiązań, indeksy reaktywności, twardość i miękkość
   - **Metoda samouzgodniona polaryzacyjnie** – uwzględnienie wpływu otoczenia w niepolaryzowalnych polach siłowych poprzez atomowe ładunki cząstkowe wyznaczone w polu cząsteczek ośrodka

2. **Metoda wydłużania**
   Wydajna metoda prowadzenia obliczeń kwantowochemicznych dla makrocząsteczek (polimery, biopolimery), w której strukturę elektronową syntezuje się w sposób analogiczny do reakcji polimeryzacji/kopolimeryzacji.

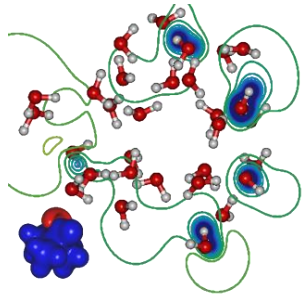


Analiza podatnościowa rozkładu ładunku
Zmiany ładunków cząstkowych oraz twardości cząsteczki metanolu w odpowiedzi na przejście z roztworu wodnego do fazy gazowej





Metod wydłużania
Kierunek syntezy struktury elektronowej biomateriałów



Metoda samouzgodniona polaryzacyjnie
Graficzne przedstawienie potencjału elektrostatycznego działającego na cząsteczkę t-butanolu w środowisku wodnym

Współpraca naukowa

- Yuriko Aoki (Uniwersytet Kiusiu)
- Sara Soltani (Uniwersytet Medyczny w Algierze)
- Jarosław Zaklika (Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu)

Proponowane tematy prac dyplomowych

- Zasada maksymalnej twardości w układach molekularnych - symulacje metodami klasycznej dynamiki molekularnej
- Korekta parametrów potencjału Lennarda–Jonesa w niepolaryzowalnych polach siłowych uwzględniająca środowiskową polaryzację rozkładu ładunku w cieczach

Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

STeM

dr Anna Stachowicz-Kuśnierz

e-mail: anna2.stachowicz@uj.edu.pl, pok. C3-24

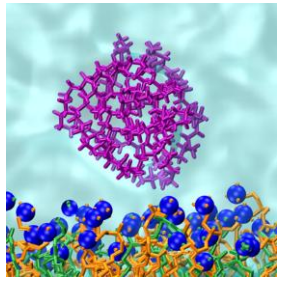
Tematyka badań

1. **Oddziaływanie nanoplastiku z błonami biologicznymi**
   Mechanizm penetracji, dyfuzja oligomerów przez modelowe błony eukariotyczne, wpływ na strukturę i mechanikę błony
2. **Modelowanie otoczki komórkowej bakterii gram ujemnych pod kątem biologicznego upcyclingu plastiku**
   Konstrukcja i walidacja modeli molekularnych dla błony wewnętrznej, zewnętrznej oraz peptydoglikanu, badanie oddziaływania produktów degradacji plastiku z otoczką komórkową
3. **Wpływ zanieczyszczeń powietrza na surfaktant płucny**
   Modelowanie wpływu zaadsorbowanych zanieczyszczeń i utlenienia lipidów na równowagę fazową lipidów
4. **Nośniki leków**
   Agregacja kompleksów lek-nośnik, transport przez błony biologiczne

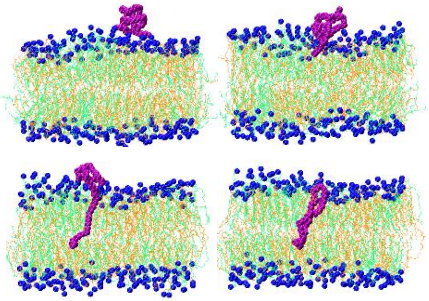
Współpraca naukowa

- Łukasz Ćwiklik, Instytut Chemii Fizycznej im. J. Heyrovksiego, Praga, Czechy
- Beata Korchowiec, Zakład Chemii Fizycznej i Elektrochemii, Wydział Chemii UJ
- Waldemar Kulig, Wydział Fizyki, Uniwersytet Helsiński, Filnandia
- Paweł Kaszycki, Katedra Biologii Rośli i Biotechnologii, Uniwersytet Rolniczy w Krakowie

Oddziaływanie nanoplastiku z błonami biologicznymi

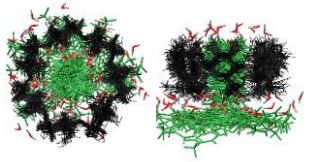


Model nanocząstki polietylenu zbliżającej się do powierzchni błony

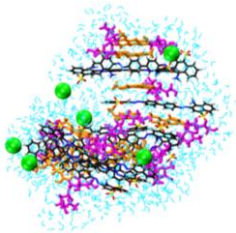


Wnikanie łańcucha polietylenu do dwuwarstwy fosfolipidowej

Nośniki leków



Ułożenie gliklazydu w kompleksie inkluzyjnym z cyklodektryną

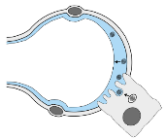


Model kompleksu czerwieni Kongo z doksorubicyną

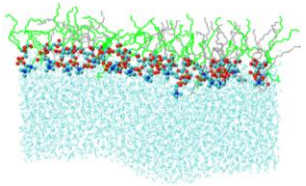
Wpływ zanieczyszczeń powietrza na surfaktant płucny



Zanieczyszczenia powietrza

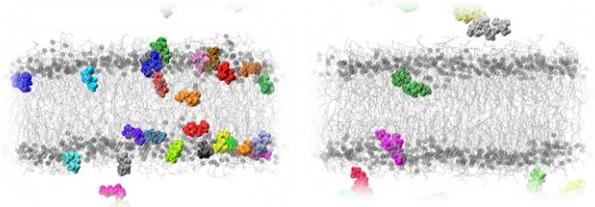


Pęcherzyk płucny

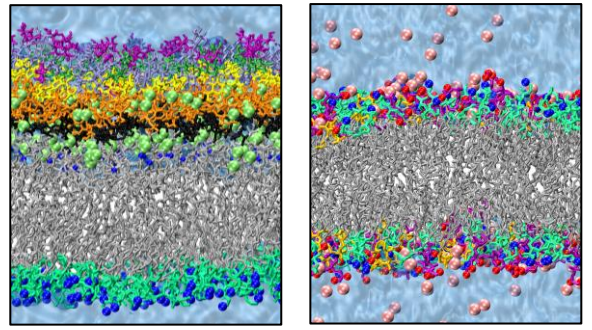


Model monowarstwy surfaktantu płucnego

Modelowanie otoczki komórkowej bakterii gram ujemnych



Adsorpcja produktów degradacji polihydroksymaślanu na modelowej błonie wewnętrznej



Modele zewnętrznej i wewnętrznej błony komórkowej

Proponowane tematy prac dyplomowych

Teoretyczne badania oddziaływania produktów degradacji polimerów ropopochodnych z modelowymi błonami komórkowymi bakterii gram ujemnych

dr hab. Dariusz Szczepanik

e-mail: dariusz.szczepanik@uj.edu.pl, pok. C3-22

https://aromaticity.uj.edu.pl/

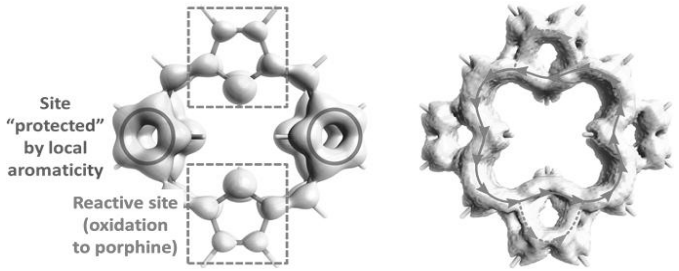
Tematyka badań

Kwantowa teoria wiązania chemicznego i aromatyczności

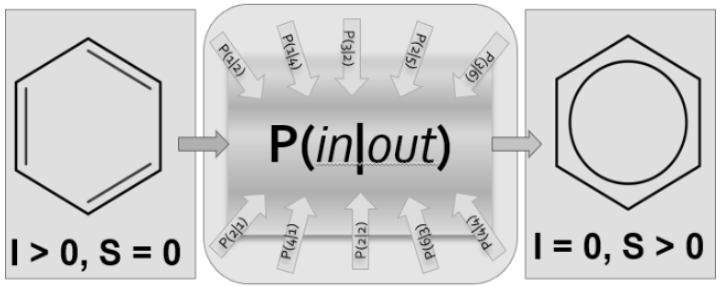
Badanie struktury elektronowej układów poli- i makrocyklicznych

Teoria informacji układów molekularnych

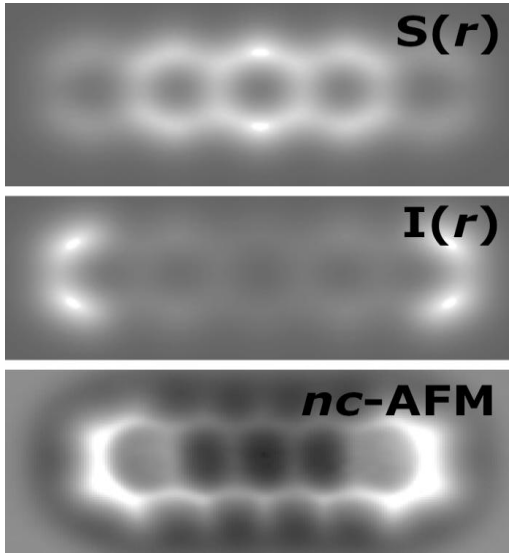
Delokalizacja elektronowa *vs* **Prąd pierścieniowy**



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



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



Współpraca naukowa

- Miquel Solà, Universitat de Girona, Hiszpania
- Zhong-Ming Sun, Nankai University, Chiny
- Henryk Szatyłowicz, Politechnika Warszawska
- Rajendra S. Ghadwal, Universität Bielefeld, Niemcy
- Ognjen Š. Miljanić, University of Houston, USA

Proponowane tematy prac dyplomowych

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

Publikacje naukowe realizowane we współpracy ze studentami

Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Hazardous Materials

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jhazmat

Interactions of ultra-fine polystyrene nanoparticles with lung surfactant monolayers and bilayers: A combined molecular dynamics and experimental study

Franciszek Włodek [a,b,1], Wojciech Pajerski [c,1], Agnieszka Olżyńska [d], Katarina Vazdar [d], Petro Khoroshyy [e], Lukasz Cwiklik [d,*], Anna Stachowicz-Kuśnierz [a,*]

Contents lists available at ScienceDirect

BBA - Biomembranes

journal homepage: www.elsevier.com/locate/bbamem

Insights into short chain polyethylene penetration of phospholipid bilayers via atomistic molecular dynamics simulations

Franciszek Włodek [a,b], Waldemar Kulig [c], Anna Stachowicz-Kuśnierz [a,*]

Inorganic Chemistry

pubs.acs.org/IC Article

Stable Au(III) Benzohomoporphyrin: Synthesis, Structure, Near-Infrared Absorption, and Superoxide Radical Generation

Songlin Xue,* Jinrong Wu, Yuting Dong, Fengxian Qiu,* Mikołaj Dratwiński, Dariusz W. Szczepanik,* Fan Wu, Wataru Suzuki, Toshiharu Teranishi, Hiroyuki Furuta,* and Jianming Pan*

Journal of Computational Chemistry

Towards Equilibrium Charges: Environment-Consistent Atomic Charge Models for Non-polarizable Force Fields

DOI: 10.1002/jcc.70534

Status: In Production

Franciszek Włodek, Beata Korchowiec, Jacek Korchowiec, Anna Stachowicz-Kuśnierz

molecules

MDPI

Article

Insights into Transfer of Supramolecular Doxorubicin/Congo Red Aggregates through Phospholipid Membranes

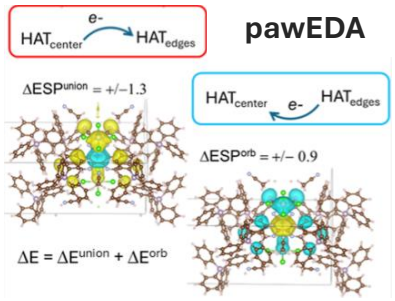
Anna Stachowicz-Kuśnierz *, Paulina Rychlik, Jacek Korchowiec and Beata Korchowiec *

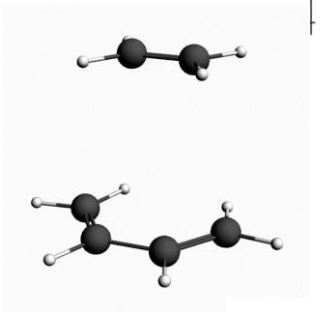
Zespół Chemii Kwantowej

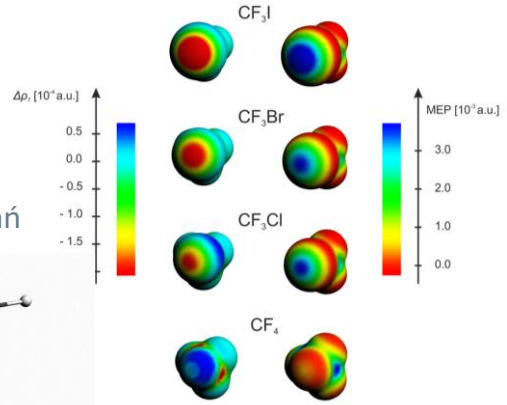
Opis wiązania chemicznego

metodologia i zastosowania

- rozwój i walidacja narzędzi analizy
- interpretacja natury oraz reorganizacji wiązań





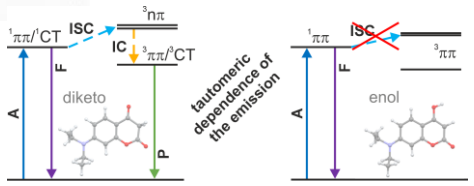


ETS-NOCV & MEP

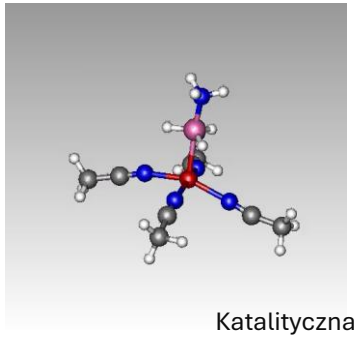
Przebieg procesów chemicznych

reakcje i przemiany fotofizyczne

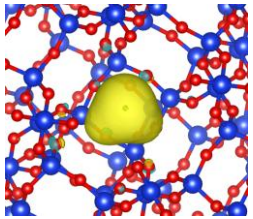
- ścieżki reakcji i profile energetyczne
- stany wzbudzone oraz kanały dezaktywacji



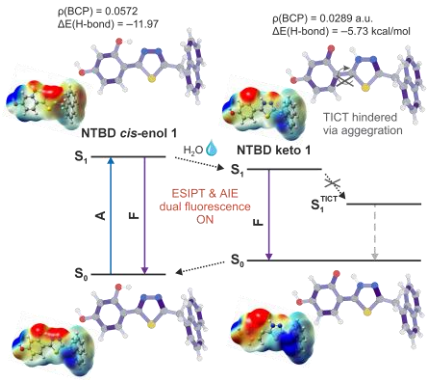
podwójna fluorescencja, RTP, ESIPT



procesy katalizowane zeolitami



Katalityczna produkcja wodoru cząsteczkowego



prof. dr hab. Artur Michalak: artur.michalak@uj.edu.pl • p. C3-07
dr Mercedes Kukułka: mercedes.kukulka@uj.edu.pl • p. C3-20

- badania układów polimerowych o potencjalnym zastosowaniu jako membrany w ogniwach paliwowych
- różnicowy MEP jako narzędzie do opisu wiązania chemicznego i reaktywności
- badanie zależności struktura–właściwości fotofizyczne sond fluorescencyjnych

dr hab. Mariusz Mitoraj, prof. UJ: mariusz.mitoraj@uj.edu.pl • p. C3-04
dr Filip Sagan: filip.sagan@uj.edu.pl • p. C3-20

- modelowanie reakcji katalitycznych i aktywacji wiązań kowalencyjnych
- modelowanie procesów produkcji i magazynowania wodoru
- modelowanie właściwości kwasowo-zasadowych układów molekularnych z wykorzystaniem metod chemii kwantowej oraz uczenia maszynowego
- badanie mechanizmów degradacji melaniny metodami kwantowochemicznymi

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

- kwantowochemiczne projektowanie i charakterystyka nowych związków oraz układów supramolekularnych
- modelowanie i interpretacja właściwości spektroskopowych: UV–Vis, emisji, ECD, CPL, IR, VCD, NMR
- badania mechanizmów przemian i dezaktywacji stanów wzbudzonych, wpływ środowiska (rozpuszczalnik, matryca polimerowa) i agregacji

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

- characterization and prediction of the electronic structure in new materials
- investigating and showing how molecules interact in different environments
- developing and validating new methods to study binding energies in periodic systems

STRUKTURA · TEORIA · MODELOWANIE

Zespół Chemii Kwantowej

STeM

dr hab. Monika Srebro-Hooper, prof. UJ
Zakład Chemii Teoretycznej
Zespół Chemii Kwantowej

monika.srebro@uj.edu.pl • C3-09

DFT / TDDFT
struktura | stany wzbudzone
właściwości elektronowe

Oddziaływania niekowalencyjne
wiązania wodorowe, π–π, anion–π, kation–π, oddziaływania w roztworze i w stanie stałym

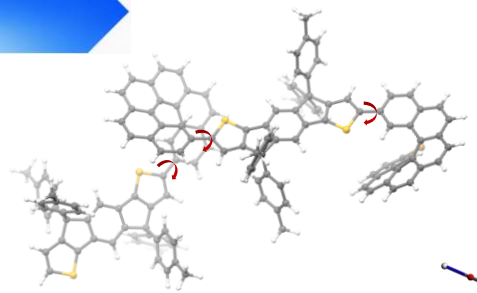
Symulacja widm
UV–Vis, emisja, ECD, CPL, IR, NMR

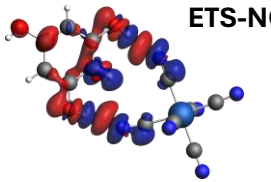
Analiza mechanizmów
ESIPT, PET, TICT, ILCT i przejścia międzysystemowe

Projektowanie molekularne
racjonalne modyfikacje struktury i właściwości

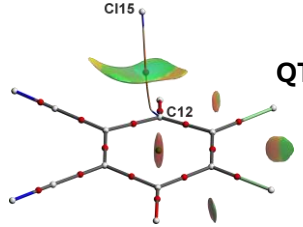
STRUKTURA
GEOMETRIA I ODDZIAŁYWANIA

- izomeria i konformacje
- koordynacja jonów metali
- wpływ podstawników
- energia i natura wiązań oraz oddziaływań





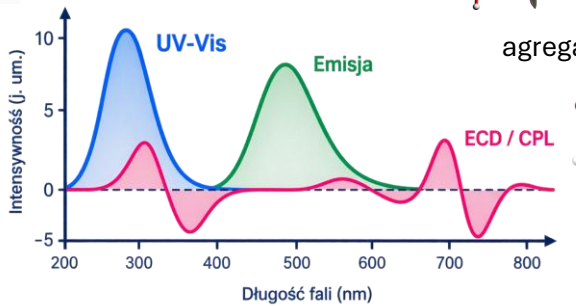
ETS-NOCV



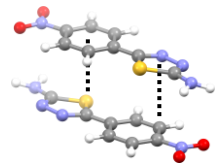
QTAIM, NCI

WIDMA
INTERPRETACJA | PRZEWIDYWANIE

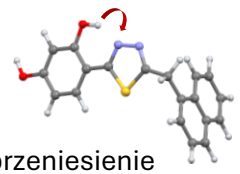
- symulacja i interpretacja widm
- przypisanie pasm i przejść
- charakterystyka stanów wzbudzonych
- parametry fotofizyczne i mechanizmy dezaktywacji
- wpływ środowiska (rozpuszczalnik, matryca) i agregacji
- korelacje struktura–właściwości
- opis zjawisk: podwójnej fluorescencji, fosforescencji w RT, luminescencji spolaryzowanej kołowo
- projektowanie układów do zastosowań optoelektronicznych (sensory, sondy, OLED-y)



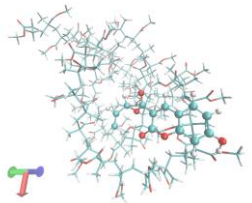
agregacja tiadiazolu



kumaryna @ PMMA



przeniesienie protonu w stanie wzbudzonym



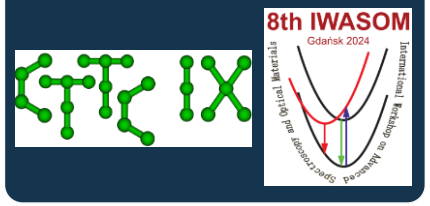
Współpraca

Prof. J. Crassous (Francja)
dr Kais Dhbaibi (Francja)
Prof. J. Autschbach (USA)
dr hab. A. Matwijczuk (Lublin)
Prof. R. Podgajny (WChUJ
dr hab. D. Pinkowicz (WChUJ)

Wybrane artykuły z udziałem studentów II. stopnia



Wybrane wystąpienia konferencyjne studentów II. stopnia



Proponowana tematyka prac dyplomowych w oparciu o aktualne projekty:

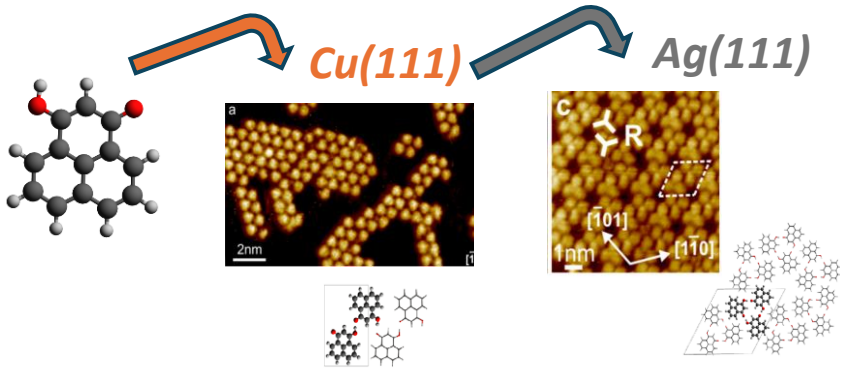
- ❑ Preferencje strukturalne i własności fotofizyczne pochodnych tiadiazoli i kumaryny; fosforescencja w temperaturze pokojowej; aktywność optyczna związków chiralnych
- ❑ Oddziaływania międzycząsteczkowe w (nowo-zsyntetyzowanych) układach supramolekularnych i ich wpływ na obserwowane własności spektroskopowe
- ❑ Projektowanie fluoroforów i sensorów

Key Concepts:

- ❑ Characterization and prediction of the electronic structure in new materials
- ❑ Investigating and showing how molecules interact in different environments
- ❑ Developing and validating new methods to study binding energies in periodic systems

dr hab. James Hooper, prof. UJ
Zakład Chemii Teoretycznej
Zespół Chemii Kwantowej

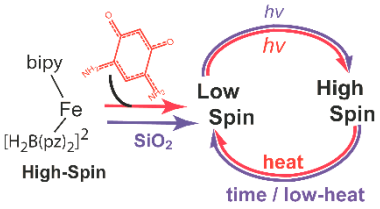
james.hooper@uj.edu.pl • C3-11



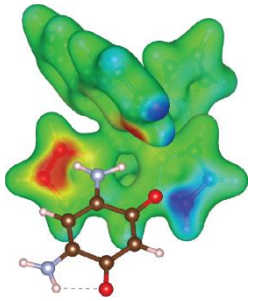
- **Use and develop models that investigate the electronic and chemical structure at the interface**

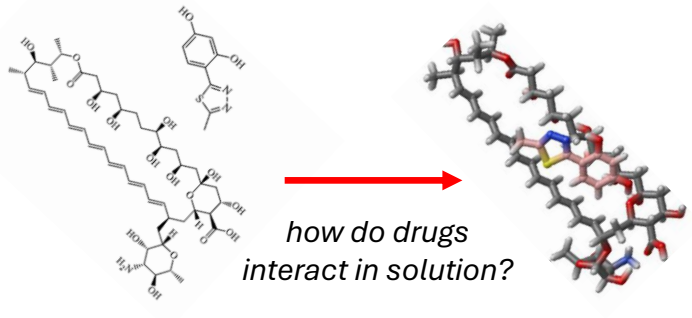
- **Relate properties of the surfaces with the behavior of molecules near the surface**
  - **structural changes, solvation, charge transfer, etc.**
  - **molecular arrangements, surface accessibility**

- **Implement automated structure searching to solve and propose chemical structures**



rationalization of experimental trapping

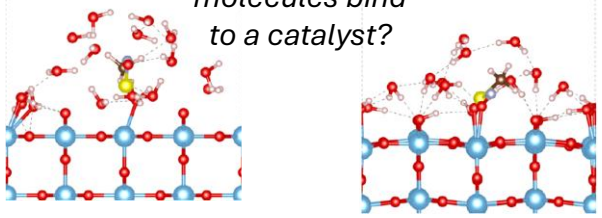


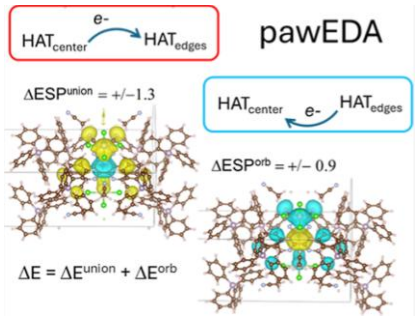


how do drugs interact in solution?

- **Implement and validate new computational tools for periodic systems**

how do molecules bind to a catalyst?





Possible Topics for M.Sc. Thesis :

- ❑ Development of new descriptors for interacting molecules in complex environments
- ❑ Using structure searches to investigate chemical interactions in solutions and solids

Chem

CellPress
OPEN ACCESS

Article

A multifunctional *pseudo*-[6]oxocarbon molecule innate to six accessible oxidation states

Paweł Pakulski,[1,*] Michał Magott,[1] Szymon Chorazy,[1] Marcin Sarewicz,[2] Monika Srebro-Hooper,[1] Dominika Tabor,[1] Łukasz Łapok,[1] Dariusz Szczepanik,[1] Selvan Demir,[3] and Dawid Pinkowicz[1,4,*]

nature energy

Article

https://doi.org/10.1038/s41560-025-01876-9

Sulfonated polybenzimidazole for low-alkalinity ion solvating membrane water electrolysis

Received: 30 October 2024

Accepted: 2 September 2025

Published online: 10 October 2025

Muhammad Mara Ikhsan[1,2,10], Chaeyeon Yang[1,3,10], Kamal Ghotia[4], Franz Egert[4,5], Syed-Asif Ansar[4], Olga Żurowska[6,7], Marla Rózga[6], Artur Michalak[6], Mikkel Rykær Kraglund[8], David Alli[8], Hyun S. Park[1,2], Fatemeh Razmjooei[4] & Dirk Henkensmeier[1,2,9]

ACS APPLIED OPTICAL MATERIALS

pubs.acs.org/acsaom

Article

Circularly Polarized Luminescence from Benzodithiophene and Indacenodithiophene Oligomers Alternated with Helicenes as Chiral Inducers

Clement Gedeon, Natalia Del Rio, Dominika Tabor, Joachim Grzybowski, Stefano Cadeddu, Nicolas Vanthuyne, Vasilis G. Gregoriou, Adele Gapin, Cyril Brochon, Monika Srebro-Hooper,* Christos L. Chochos,* and Jeanne Crassous*

Cite This: *ACS Appl. Opt. Mater.* 2025, 3, 2207−2220

Read Online

Artykuł powstał w oparciu o pracę magisterską nagrodzoną nagrodą PTChem im. Jacka Rychlewskiego

www.nature.com/scientificreports

scientific reports

Check for updates

OPEN

Understanding the synergistic interaction between a 1,3,4-thiadiazole derivative and amphotericin B using spectroscopic and theoretical studies

Lidia Ślusarczyk[1], Klaudia Rząd[1], Grzegorz Niedzielski[2,3], Mikołaj Gurba[2], Jose Chavez[4], Luca Ceresa[4], Joe Kimball[4], Ignacy Gryczyński[4], Zygmunt Gryczyński[4], Mariusz Gagoś[5], James Hooper[2] & Arkadiusz Matwijczuk[1,4]

Chemistry – A European Journal

ChemEurJ

Chemistry Europe
European Chemical Societies Publishing

RESEARCH ARTICLE

Hierarchy and Synergy of Anion-π, Hydrogen Bonding and π-π Interactions in Multicomponent Ionic Hybrid Architectures

Dorota Glosz[1,2] | Aleksandra Żabińska[1] | Joachim Grzybowski[1] | Monika Srebro-Hooper[1] | James G. M. Hooper[1] | Bogdan Musielak[1] | Tadeusz M. Muzioł[3] | Robert Podgajny[1]

scientific reports

Check for updates

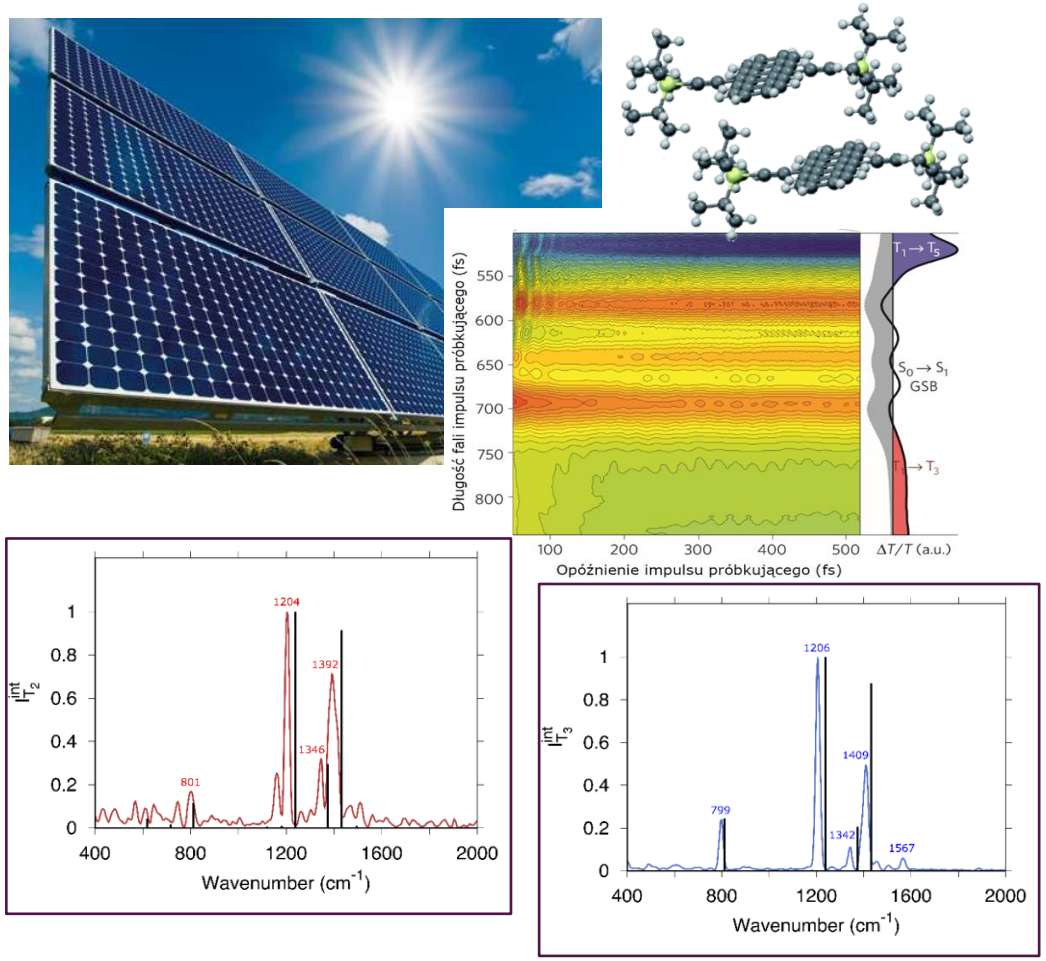
OPEN

Dual-fluorescent starch biopolymer films containing 5-(4-nitrophenyl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine powder as a functional nanofiller

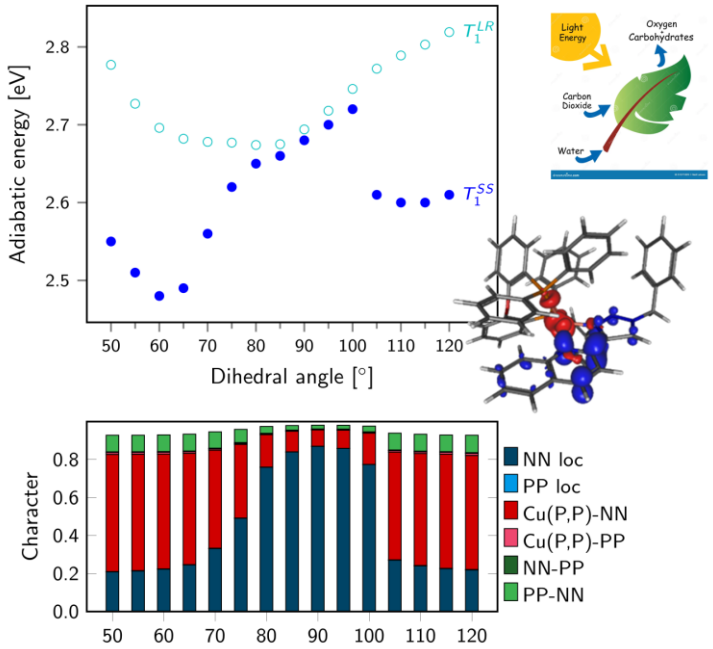
Anita Kwaśniewska[1], Katarzyna Orzechowska[2], Klaudia Rząd[3], Luca Ceresa[4], Małgorzata Figiel[5], Anna A. Hoser[6], Maurycy E. Nowak[6], Dariusz Karcz[7], Bożena Gładyszewska[3], Grzegorz Gładyszewski[1], Monika Srebro-Hooper[2] & Arkadiusz Matwijczuk[3]

dr hab. Marcin Andrzejak, p. C3-06

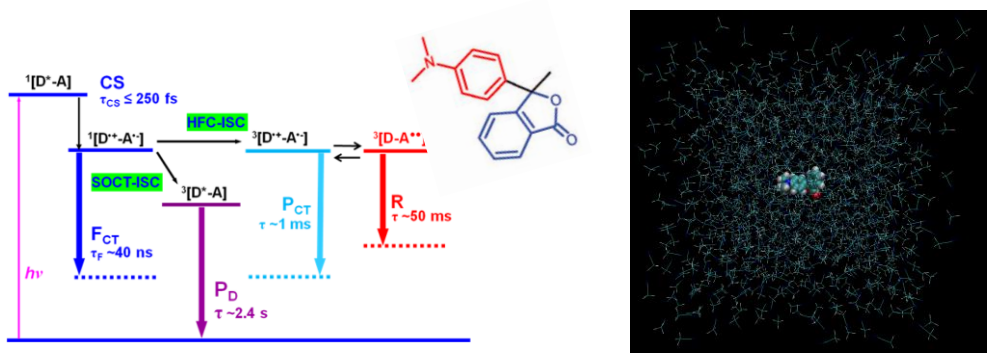
Modelowanie koherencji oscylacyjnych w ultraszybkim rozszczepieniu ekscytonów singletowych



Badania mechanizmu fotoredukcji CO_2



Ewolucja stanów wzbudzonych układów donorowo-akceptorowych



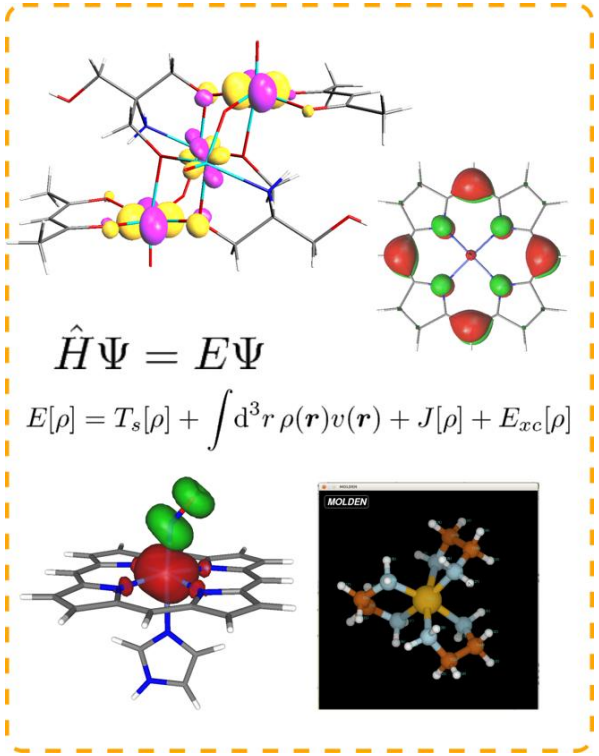
Obliczeniowa chemia koordynacyjna:

kontakt: dr hab. Mariusz Radoń, prof. UJ

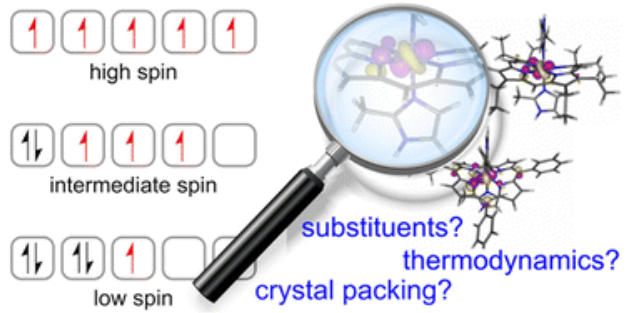
https://tungsten.ch.uj.edu.pl/~mradon

Tematyka badawcza:

1. Struktura elektronowa i właściwości kompleksów metali przejściowych elektronowych oraz centrów aktywnych w metaloenzymach
2. Stany spinowe kompleksów spin-crossover
3. Benchmarki dokładności metod obliczeniowych, wiarygodne protokoły obliczeniowe

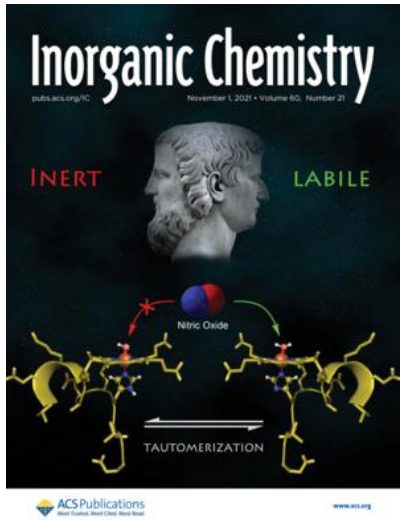






Phys. Chem. Chem. Phys. 2024, 26, 18182

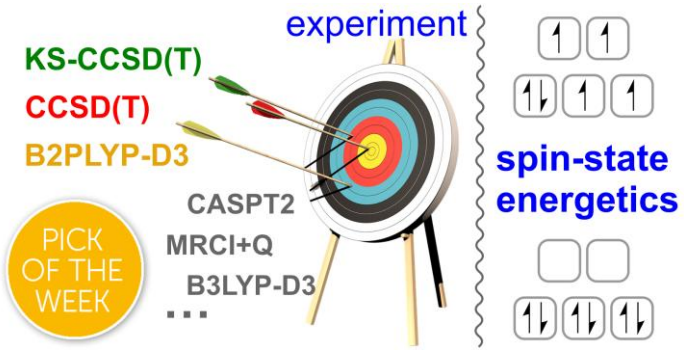
Wybrane publikacje z w/w tematyki:



← Wymiana ligandów na centrum Fe(III) mikroperoksydazy

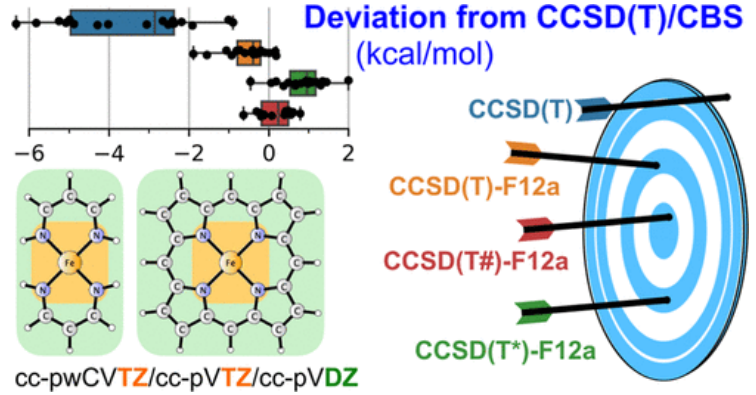
Inorganic Chemistry., 2021, *60*, 15948

Benchmarki „teoria vs eksperyment” dla energetyki stanów spinowych →



Chem. Sci. 2024, *15*, 20189

HOT Article & Pick of the Week 2024



J. Chem. Theory Comput. 2024, *20*, 3199