

IDEI-PCE-14/2013

Titlul:

Dezvoltari metodologice si experimente teoretice asupra regimului de legatura si proiectarea proprietatilor. De la atomi, la supra-molecule.

Cod proiect: PN-II-ID-PCE-2012-4-0633

Contract nr.: 14/2013

Durata: 2013-2016

Buget: 1125000 lei

Finantare: UEFISCDI

Rezumat

Proiectul este dedicat unor dezvoltari teoretice si metodologice implicind abordarea non-rutina a chimiei cuantice si computationale. Selectind citeva probleme importante, punem accentul pe inovatia conceptuala, mai degraba decit pe explorarea extensiva si intensiva. O prima serie de obiective priveste tratamentul sistemelor fullerenice endoedrice bazate pe lantanide, prin proceduri multi-configurationale incluzind interactia spin-orbita, utilizind strategia originala de a asambla functia de unda initiala din componentele orbitale ale fragmentelor separate. Tratamentul nostru permite descrierea realistica a multor efecte, pavind drumul catre potentiale aplicatii, precum o spintronica bazata pe lantanide encapsulate in fullerene. Alte obiective privesc fullerenele endoedrice encapsulind sisteme non-metalice, folosind o noua metoda de estimare a interactiei host-guest, punind in ecuatie deplasarea frecventelor vibrationale ale moleculelor implicate. Aceeasi procedura este adaptata la sisteme cu topologie tubulara a moleculei gazda. Modelele rezultate sint relevante pentru intelegerea si modelarea dinamicii sistemelor supramoleculare. O alta ramura a proiectului se concentreaza pe materiale de carbon poliaromatice, utilizind modele de tip Hamiltonian efectiv drept complement al calculelor riguroase. Utilizind Hamiltonianul de spin si concepte de rezonanta, tratam distributia de spin si proprietatile magnetice in grafene triunghiulare si hexagonale distorsionate, ce, din motive topologice, sint purtatoare de electroni neimperecheati. Poliacenele sint considerate ca obiecte ale unor modele inedite ale conductiei, aducind o perspectiva noua in chestiuni ce au atit relevanta aplicationala cit si semnificatie euristica.