

Rezumat/Obiective

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-configurazionale 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 deplasariile 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 resonanta, 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 perspective noua in chestiuni ce au atit relevanta aplicationala cit si semnificatie euristica.

Proiectul propune dezvoltari teoretice in domeniul chimiei cuantice si computationale, aplicate la sisteme moleculare si supra-moleculare cu proprietati speciale si potential aplicativ in tehnologiile prospectate la nano-scala, incluzind corelatii cu date experimentale, predictia si design-ul proprietatilor.

Obiective:

2013.1. Regim de legatura si proprietatile sistemelor cu ioni d si f continuti in fullerene, complexi si sisteme solide.

2014.1. Interactii non-covalente de spin in sisteme cu ioni encapsulati endoedric.

2015.1 Interactii non-covalente in chimia si fizica ansamblurilor supra-moleculare de tipul encapsularii endoedrice.

2015.2. Proprietati magnetice speciale in sisteme de carbon extins conjugate.

2016.1. Proprietati electrice si conductie in sisteme de carbon extins conjugate.