

Projecte per beques d'estiu 2019

Dades del projecte:

Títol:	Deconstruint les propietats òptiques no lineals moleculars
Supervisor:	Dr. Josep M. Luis
E-mail supervisor:	josepm.luis@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (4t any)
Data d'inici:	a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Diària

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:

Els coneixements adquirits en les assignatures obligatòries del grau de Química impartides per l'àrea de Química Física

Estudis en curs requerits:

Química

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:

El student aprendrà a utilitzar el programari que es fa servir habitualment per calcular l'estructura electrònica i la reactivitat de les molècules, com per exemple el programa Gaussian16. A més a més l'estudiant també aprendrà la teoria i metodologia necessaris per calcular les propietats òptiques no lineals, i descompondre aquestes propietats en diferents contribucions amb sentit físic. El student també aprendrà a descompondre qualsevol propietat en contribucions atòmiques estrictament additives.

Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:

El disseny de nous materials amb propietats òptiques no lineals (NLOP) grans és essencial pel desenvolupament de les tecnologies basades en la utilització de llum làser. Les NLOP dels materials depenen en gran mesura en les interaccions intermoleculars. L'avaluació de les contribucions a NLOPs de termes amb diferent origen físic i d'àtoms o grups d'àtoms son una eina molt útil pel disseny de nous materials amb NLOPs molt grans. El primer objectiu d'aquest projecte és investigar l'origen físic de les NLOPs d'un conjunt de 9 dímers formats per interaccions per pont de hidrogen ($\text{HCN}\cdots\text{HCl}$, $\text{HCN}\cdots\text{HCN}$, $\text{HCN}\cdots\text{HF}$, $\text{HCN}\cdots\text{HNC}$, $\text{HNC}\cdots\text{HCN}$, $\text{N}_2\cdots\text{HF}$, $\text{CO}\cdots\text{HF}$, $\text{FCCH}\cdots\text{NCF}$ i $\text{HCCH}\cdots\text{NCF}$). Per fer aquest anàlisi diferents se utilitzaran diferents mètodes per descompondre l'energia en components amb un clar origen físic. L'enfocament presentat en aquest treball és general i es pot utilitzar amb qualsevol mètode de partició d'energia.

En la bibliografia s'han presentat molts treballs que tenen com a objectiu predir les NLOPs a partir de les contribucions additives de fragments moleculars. Però tots ells present un greu problema, el valor de la contribució dels diferents àtoms depèn de la seva posició en la molècula. El nostre laboratori ha desenvolupat el primer mètode que pot descompondre les NLOP en aportacions

atòmiques estrictament additives i el valor de les quals no depèn de la posició de l'àtom en la molècula. El segon objectiu d'aquest treball és investigar si les NLOPs dels 9 dímers estudiats poden ser predites utilitzant les contribucions atòmiques calculades amb el nou mètode desenvolupat en el nostre laboratori.

Bibliografia

Robert Zaleśny, Miroslav Medved', Robert W. Góra, Heribert Reis, Josep M. Luis, Partitioning of interaction-induced nonlinear optical properties of molecular complexes. I. Hydrogen-bonded systems, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 19841-19849