



INFEMTO



Prof. dr hab.
Wojciech
Gadomski



Dr hab. Bożena
Ratajska-
Gadomska



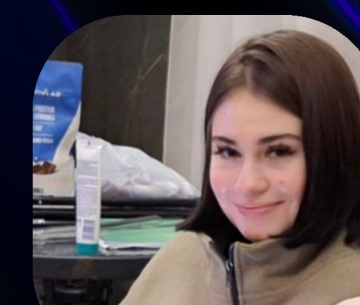
Dr Kamil Polok



Dr Krzysztof
Bieńkowski



Mgr inż.
Karolina Skąła



Joanna
Bukojemska



Bartłomiej
Bazaniak

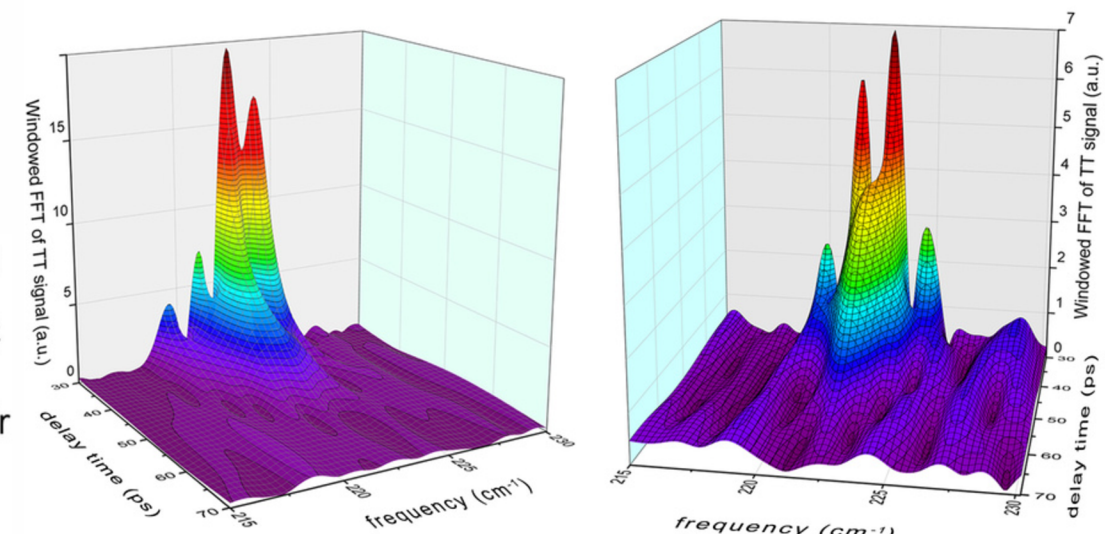
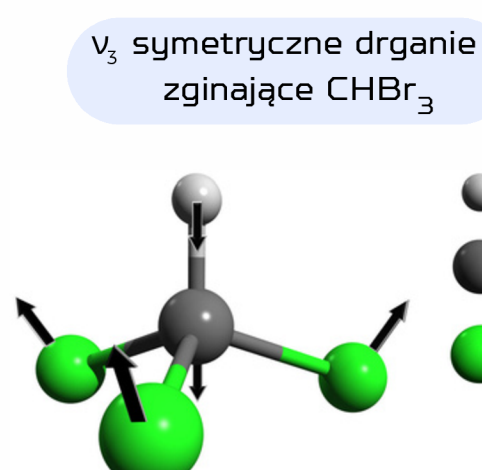


Rozszczepienie izotopowe w widmach oscylacyjnych bromoformu czasowo-rozdzielcza spektroskopia transmisji przejściowej

Czasowo-rozdzielcza spektroskopia pozwala na badanie rozszczepienia izotopowego ramanowsko-aktywnych modów. Dzięki zastosowaniu okienkowej transformaty Fouriera [WFFT] do sygnałów czasowych, uzyskujemy widma Ramana o wyższej rozdzielczości niż widma spontaniczne.

Małe przesunięcia izotopowe stają się widoczne, co jest szczególnie ważne w przypadku substancji takich jak CHBr_3 . W wyniku krótkotrwałego zaburzenia impulsem laserowym, obserwujemy makroskopową odpowiedź spójnie wzbudzonych cząstek. Oddziaływania międzycząsteczkowe prowadzą do wydłużenia czasu dekoherencji, co skutkuje zmniejszeniem szerokości linii widmowej i poprawia rozdzielczość. Przy niższych stężeniach stosunek wkładów od poszczególnych izotopologów pozwala określić ich zawartość w próbce, co może być pomocne przy określaniu źródła bromoformu. Przy wyższych stężeniach oddziaływania międzycząsteczkowe zaburzają stosunek obserwowanych pików. W naszych badaniach CHBr_3 był rozcieńczany w CCl_4 .

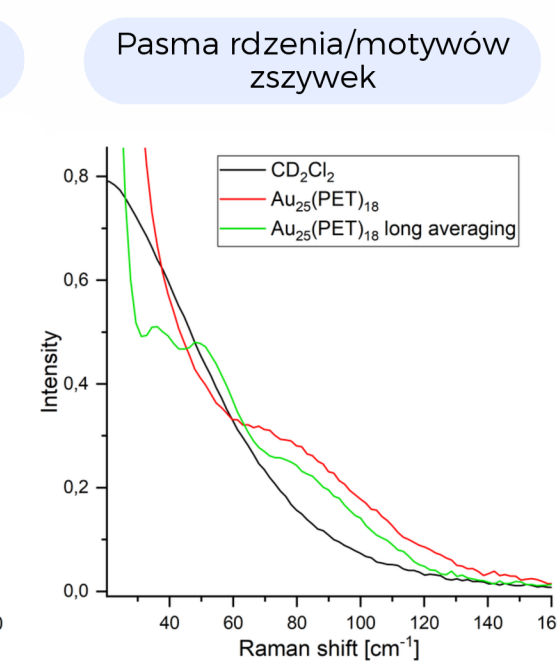
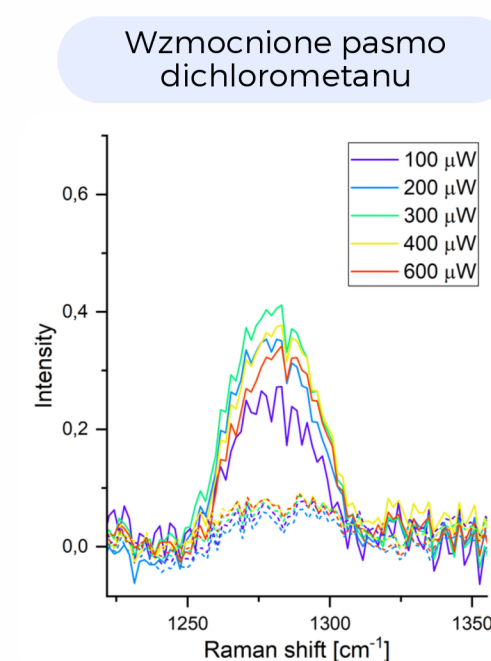
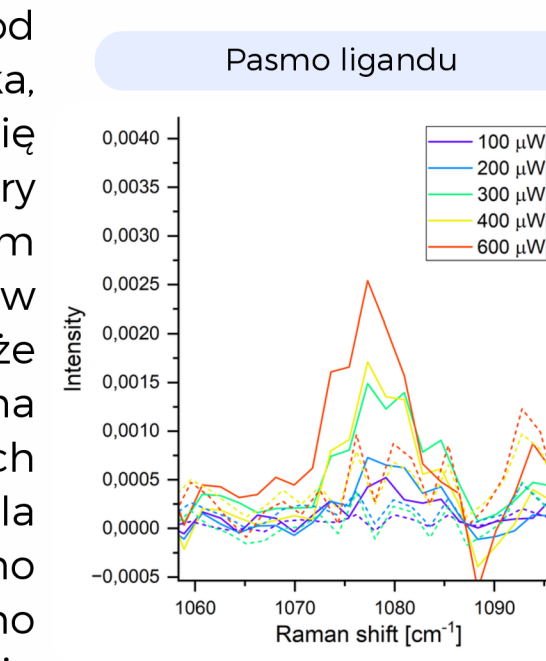
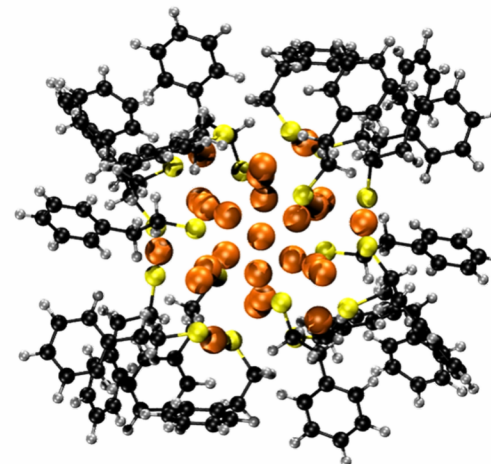
100% CHBr_3 10% CHBr_3



Atomowo precyzyjne nanoklastry Au

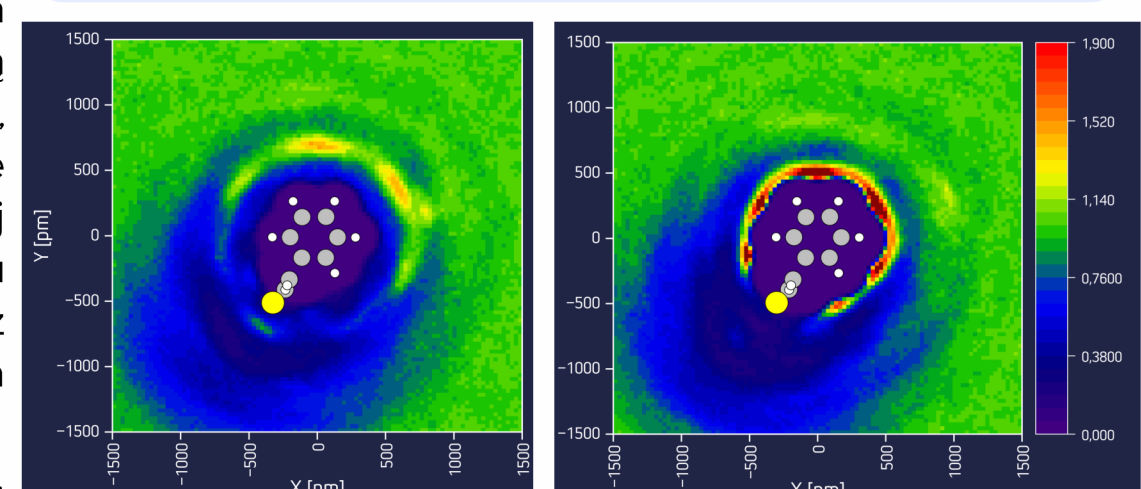
W ramach projektu magisterskiego prowadzono badania teoretyczne i doświadczalne atomowo precyzyjnych nanoklastków złota $\text{Au}_{25}(\text{PET})_{18}$.

Część doświadczalna, realizowana pod opieką dr Marcina Pastorczaka, wykorzystywała spektroskopię wymuszonego efektu Ramana. Pomiary wykazały silne wzmocnienie pasm pochodzących od rozpuszczalnika w obecności nanoklastków, a także występowanie wzmocnionego pasma pochodzącego od ligandu (na rysunkach po prawej sygnał odniesienia dla czystego rozpuszczalnika zaznaczono linią przerywaną). Zaobserwowano ponadto niskoczęstotliwościowe drgania pochodzące od rdzenia nanoklastra i tzw. "motywów zszywek".



Część teoretyczna, była wykonywana pod opieką dr Kamila Poloka. obejmowała symulacje dynamiki molekularnej nanoklastra w otoczeniu rozpuszczalnika oraz obliczenia DFT widm ramanowskich rozpuszczalnika i ligandu.

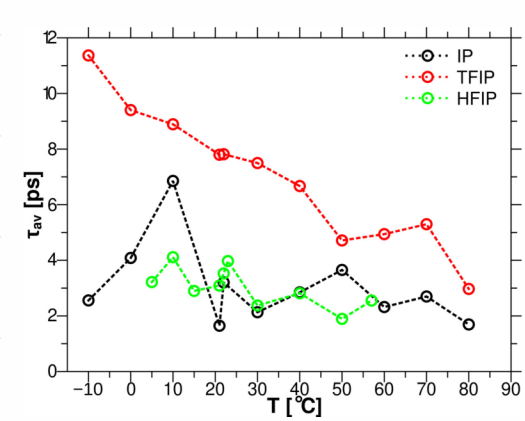
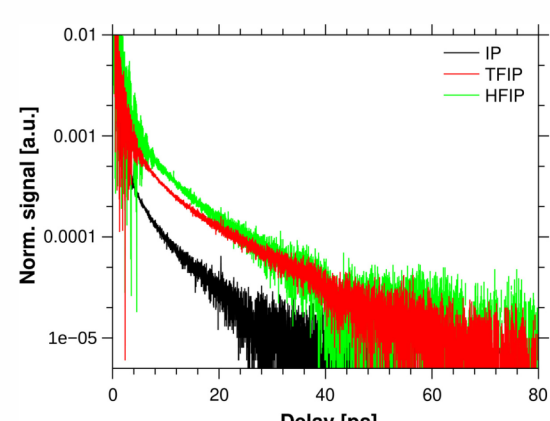
Rozkład cząstek dichlorometanu w otoczeniu ligandu (z lewej atomy H dichlorometanu, z prawej atomy Cl dichlorometanu)



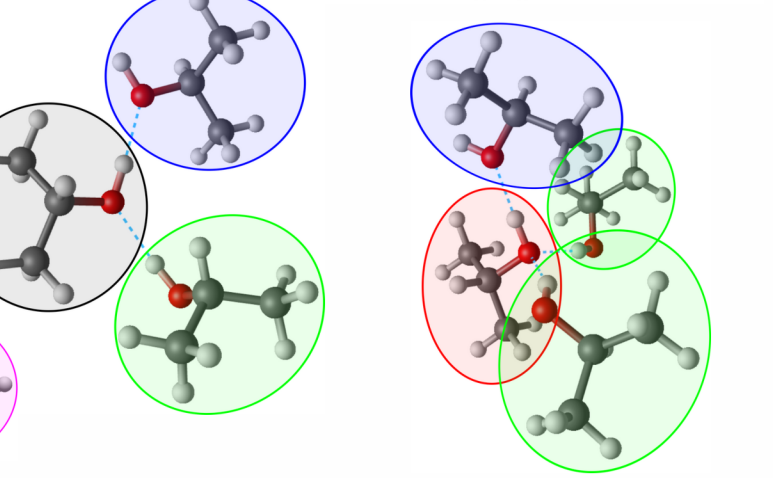
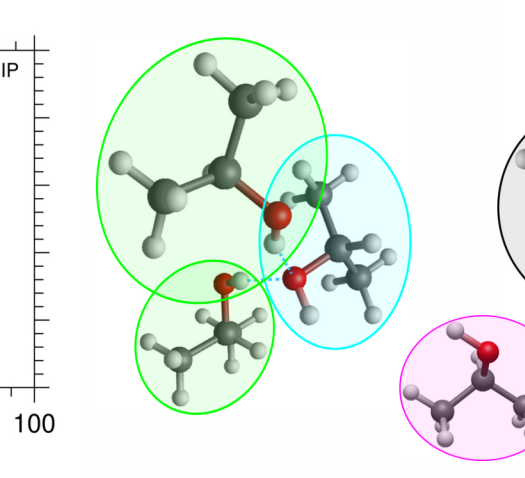
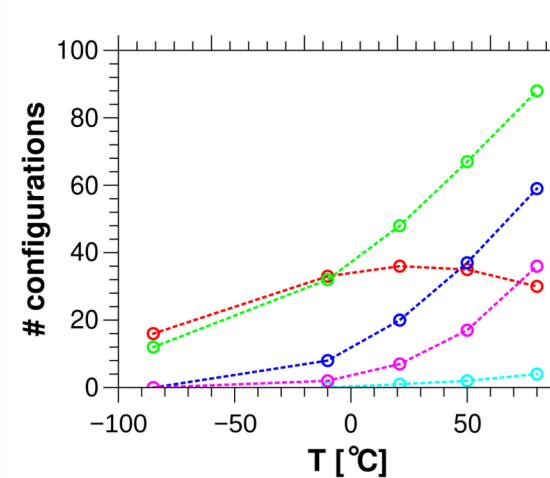
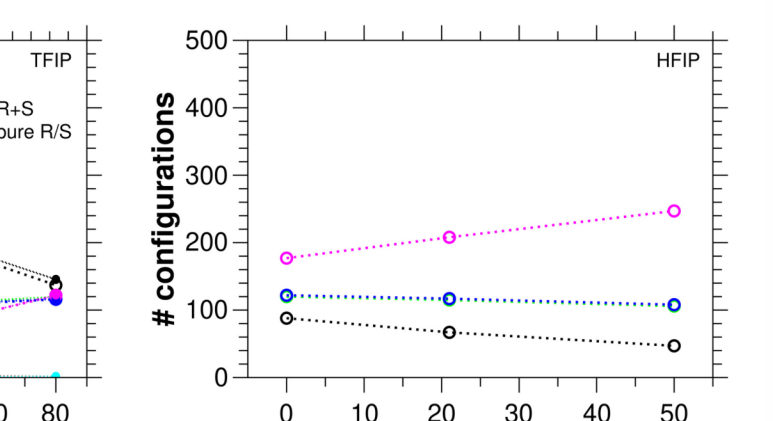
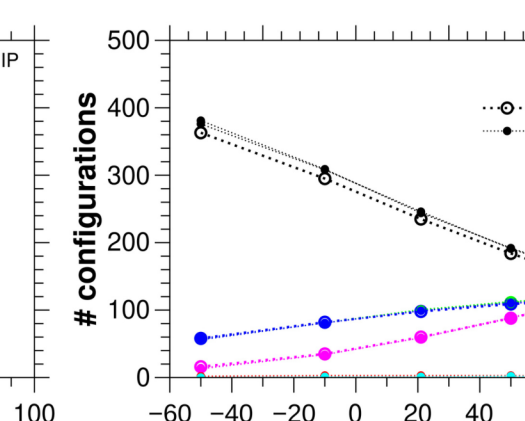
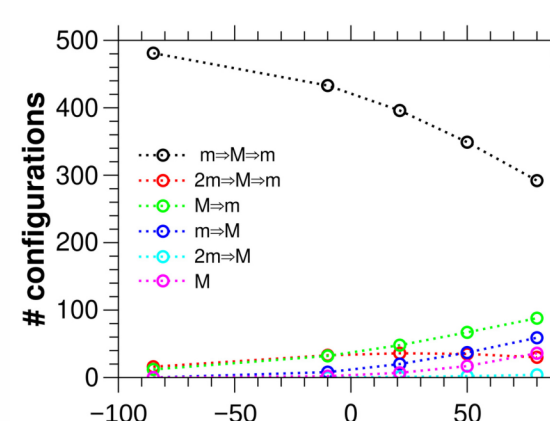
Badanie 2-propanolu i jego fluorowanych pochodnych

Przeprowadziliśmy badania 2-propanolu [IP], 1,1,1-trifluoro-2-propanolu [TFIP] oraz 1,1,1,3,3,3-heksafluoro-2-propanolu [HFIP] wykorzystując spektroskopię femtosekundowego optycznego efektu Kerra, obliczenia DFT i symulacje dynamiki molekularnej.

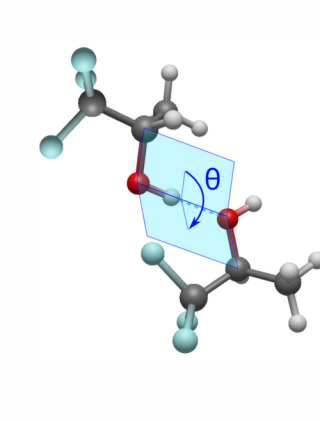
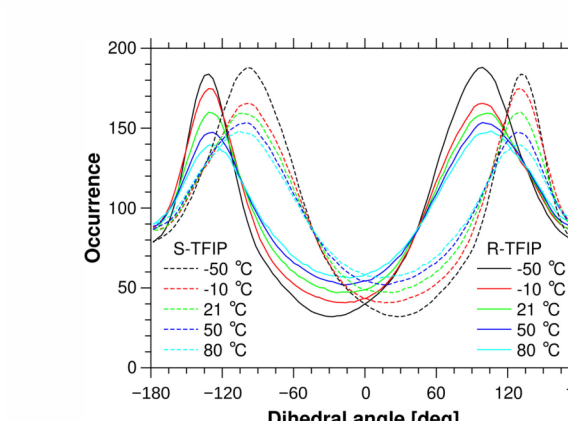
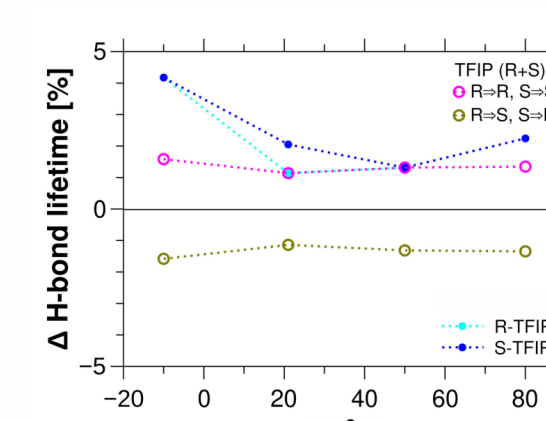
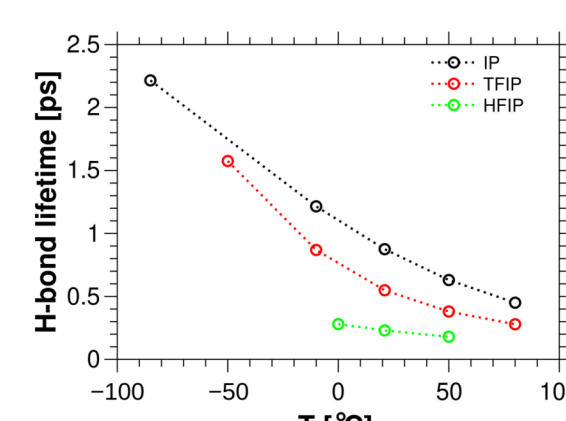
Badania prowadzone we współpracy z dr hab. Piotrem Garbaczem, prof. ucz. z Wydziału Chemii UW



Pomimo rosnącego ze stopniem fluorowania cząstek momentu bezwładności, czas reorientacji cząstek IP i HFIP jest zbliżony, natomiast najwolniejszą reorientację obserwujemy dla TFIP. Jest to spowodowane skracaniem czasu życia wiązań wodorowych i malejącą złożonością ich sieci, towarzyszącymi wzrostowi momentu bezwładności.

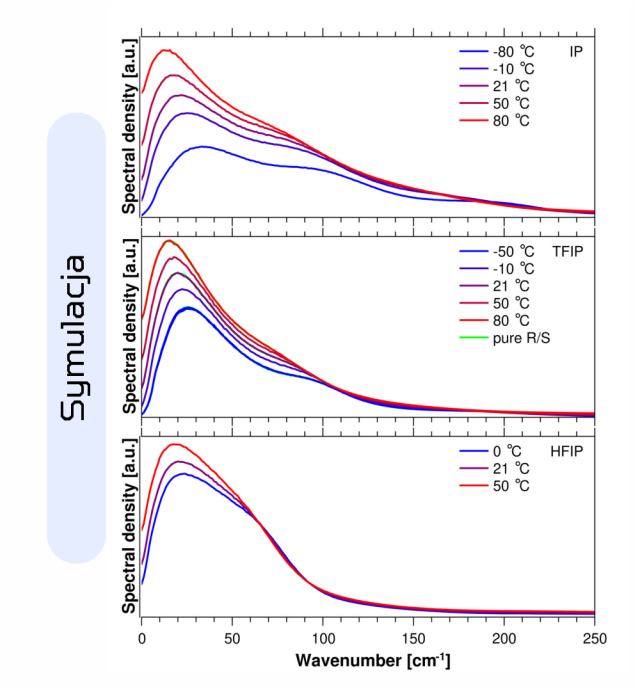
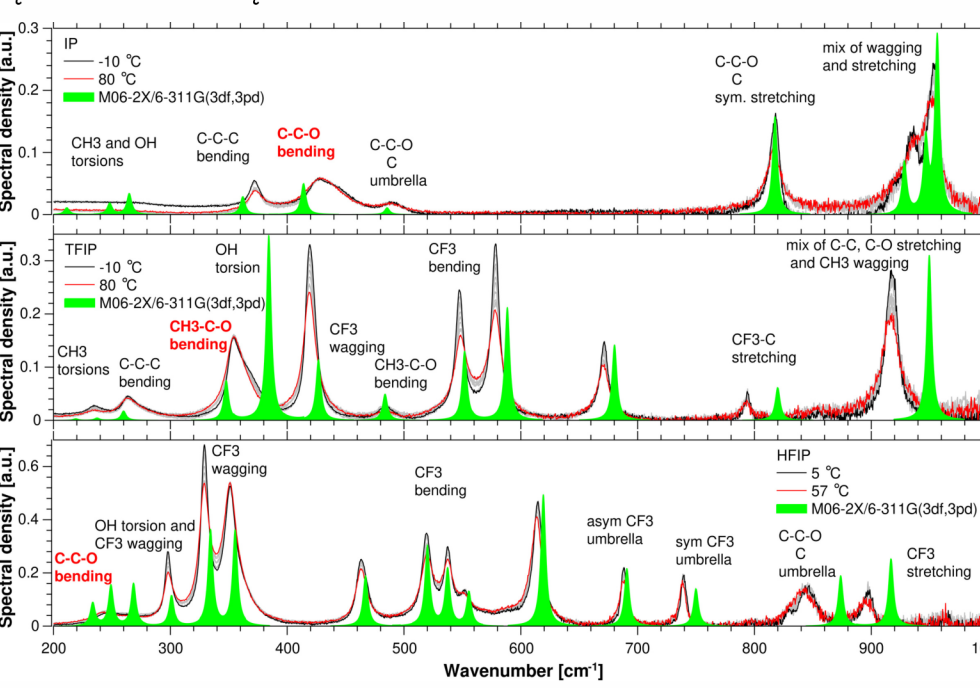
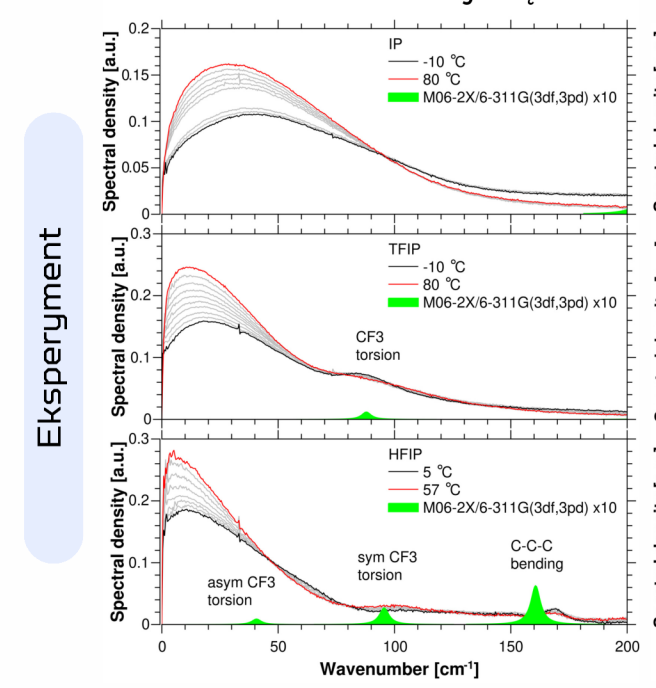


Sieć wiązań wodorowych tworzona przez IP jest najbardziej złożona. Większość cząstek jest jednocześnie akceptorem i donorem jednego wiązania wodorowego (cząsteczki wewnątrz łańcucha), a obecność ok. 8% cząstek będących donorem jednego i akceptorem dwóch wiązań wodorowych świadczy o licznych rozgałęzieniach w sieci wiązań wodorowych. W TFIP cząsteczki tworzą głównie łańcuchy bez rozgałęzień, natomiast w HFIP większość cząstek nie tworzy wiązań wodorowych. HFIP jest dobrym donorem, ale słabym akceptorem wiązań wodorowych.



W przypadku TFIP zaobserwowaliśmy obecność nieznacznie dłuższych łańcuchów i nieznacznie większy czas życia wiązań wodorowych dla czystych enancjomerów (pure R/S) niż dla racematu (R+S). W samym racemacie wiązania wodorowe pomiędzy tymi samymi enancjomerami żyją dłużej niż pomiędzy różnymi enancjomerami.

Dla czystych enancjomerów R/S-TFIP, kąt dwuścienny θ wykazuje różnice w rozkładzie prawdopodobieństwa dla kątów dodatnich i ujemnych, co wskazuje na możliwość występowania różnic w skrętności ustawień wiązań C-O, obserwowanej gdy poruszamy się wzdłuż łańcuchów tworzonych przez wiązania wodorowe. Aktualnie rozwijamy kod programu, który ma umożliwić dokładniejszą analizę strukturalną.

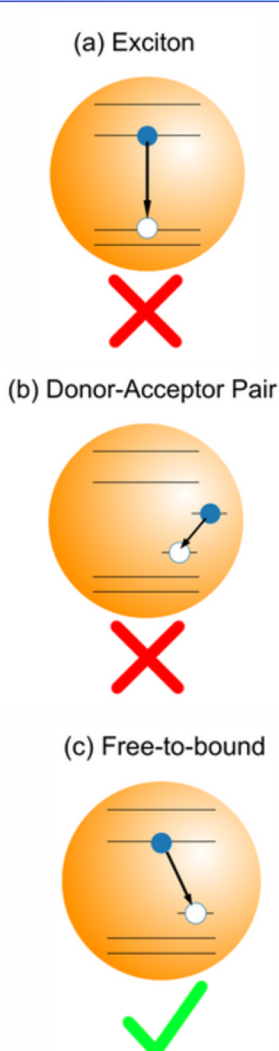
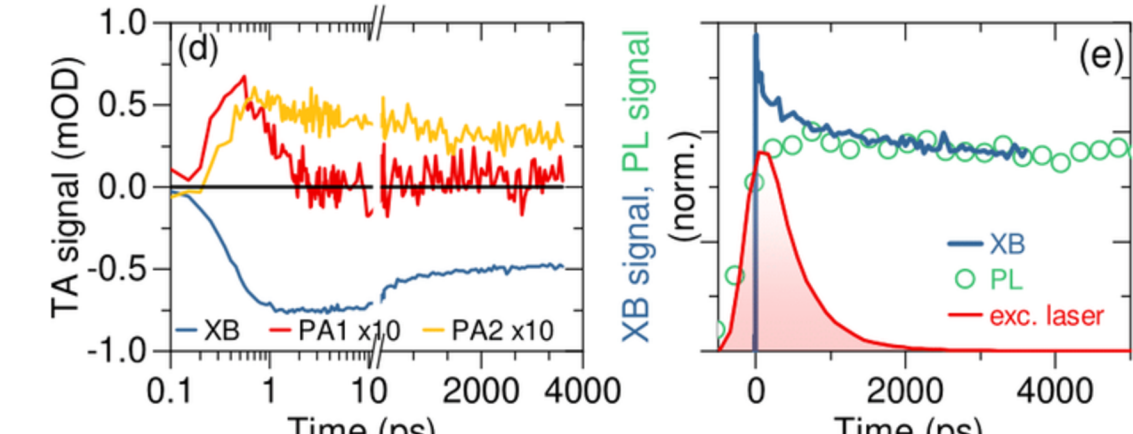
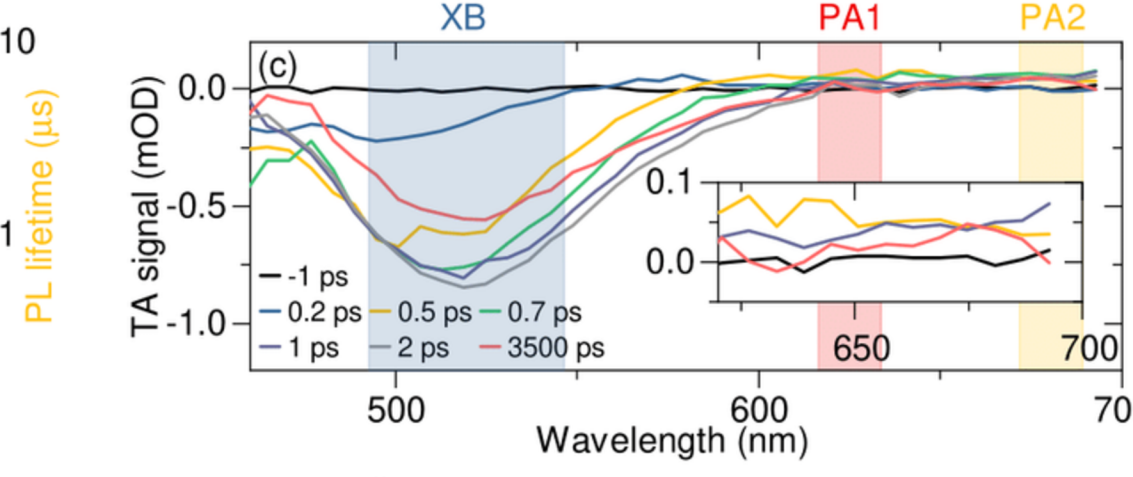
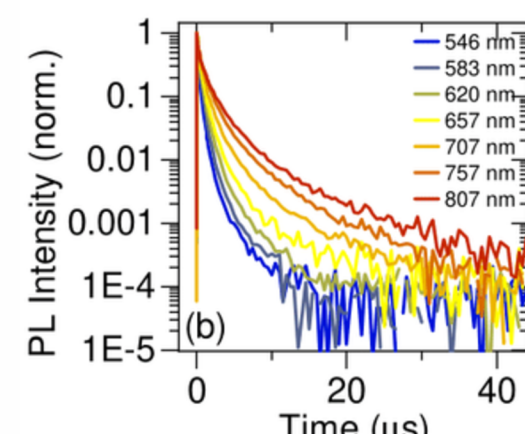
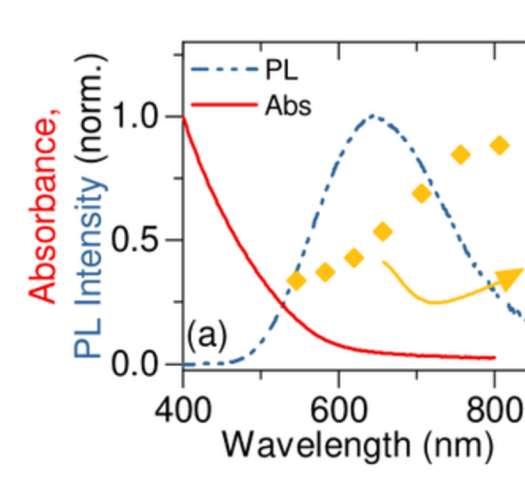
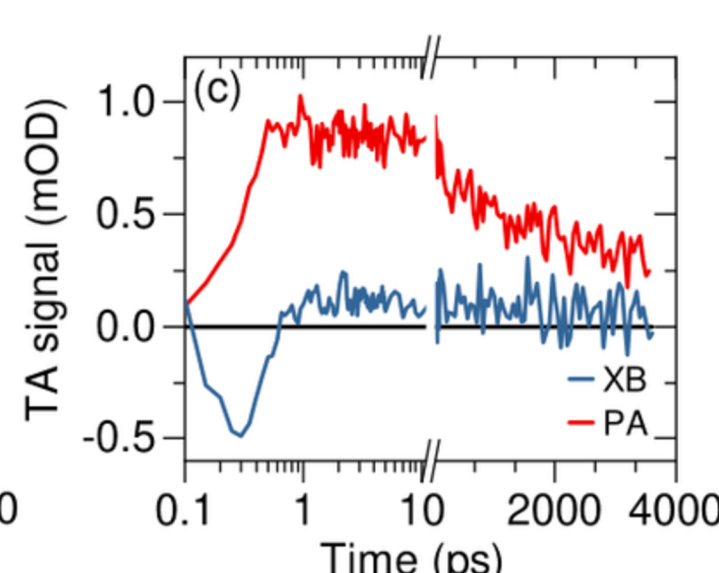
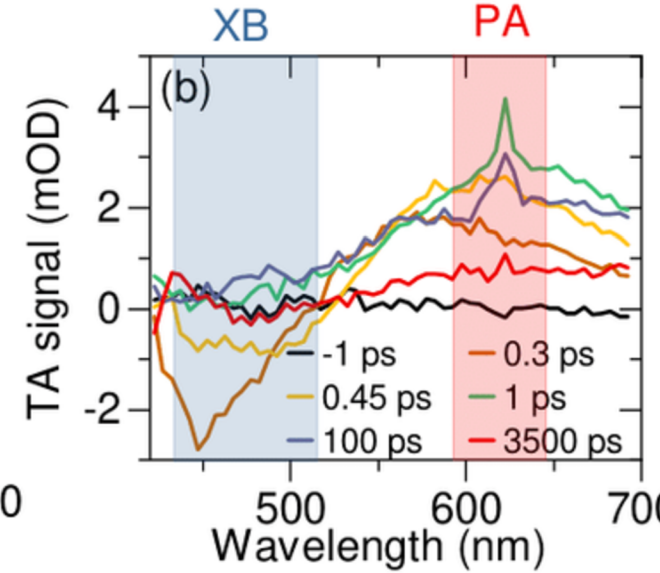
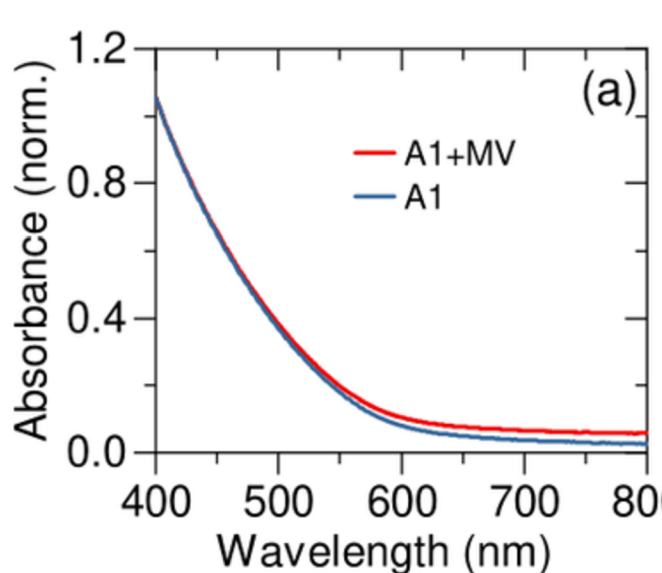


W widmach doświadczalnych uzyskanych z pomiarów femtosekundowego optycznego efektu Kerra, można zauważyć bimodalny kształt pasma od drgania zginającego $\text{CH}_3\text{-C-O}$, co wynika z obecności wiązań wodorowych. Dynamika międzycząsteczkowa (rotacje i translacje) jest obserwowana przy niskich częstościach, poniżej 200 cm^{-1} . Na szerokie pasma międzycząsteczkowe nakładają się pojedyncze drgania wewnątrzcząsteczkowe. Widmo uzyskane z wysymulowanej funkcji autokorelacji rzutu prędkości cząsteczki na kierunek wiązania OH wskazuje na obecność drgań sieci wiązań wodorowych w zakresie między 50 i 200 cm^{-1} , aczkolwiek w przypadku danych doświadczalnych są one mało wyraźne.

Badanie dynamiki i ścieżek rekombinacji nośników w nanocząstkach półprzewodnikowych Ag-In-Zn-S

Badania prowadzone we współpracy z dr hab. Łukaszem Kłopotowskim z Instytutu Fizyki PAN

Przeprowadziliśmy pomiary femtosekundowej absorpcji przejściowej dla nanokryształów stopów półprzewodnikowych dla różnych energii impulsu pompującego oraz po dodaniu wymiatacza elektronów. Nasze pomiary w połączeniu z pomiarami fotoluminescencji pozwoliły współpracownikom wykazać, że główną ścieżką rekombinacji nośników jest rekombinacja wolnego elektronu ze sputakowaną dziurą, a nie jak wcześniej sądzono, sputakowanych elektronu i dziury.



Publikacje powstałe w 2024 roku:

W. Gadomski, K. Polok, K. Skąła, B. Ratajska-Gadomska Bromine isotope splitting in vibrational spectra of bromoform by time-resolved transient transmission spectroscopy, *Analytical Sciences* 41, 211-224 (2025)

A. Cwiłich, D. Larowska-Zarych, P. Kowalik, K. Polok, P. Bujak, M. Duda, T. Kazimierzczuk, W. Gadomski, A. Pron, Ł. Kłopotowski Carrier Dynamics and Recombination Pathways in Ag-In-Zn-S Quantum Dots, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 15, 10479-10487 (2024)

N. Maity, K. Polok, P. Piatkowski, Y. Smortsova, F. Mianny, W. Gadomski, A. Idrissi Effect of Mixture Composition on the Photophysics of Indoline Dyes in Imidazolium Ionic Liquid-Molecular Solvent Mixtures: A Femtosecond Transient Absorption Study, *The Journal of Physical Chemistry B*, 128, 4485-4503 (2024)