

### Zapytanie ofertowe – dot. wykonania ekspertyzy badawczej.

Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe Politechniki Wrocławskiej, w ramach realizowanego projektu pt. „Dziedzinowo zorientowane usługi i zasoby infrastruktury PL-GRID dla wspomaganie Polskiej Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej – PL Grid Plus” poszukuje wykonawcy ekspertyzy badawczej której tematem będzie:

#### **Analiza dostępnych metod obliczeniowych chemii kwantowej i dobór optymalnych do badań widm dwufotonowych.**

#### **Szczegółowy opis przedmiotu :**

Zasadniczym przedmiotem analizy będzie wskazanie, zgodnie z najnowszą wiedzą, ścieżek jakościowego i ilościowego opisu widm dwufotonowych w oparciu o współczesne metody chemii obliczeniowej zintegrowane z dostępnymi pakietami obliczeniowymi

1. Identyfikacja istotnych parametrów materiałów molekularnych i nanostruktur posiadających duże wartości przekrojów czynnych na absorpcję dwufotonową pod kątem możliwości przewidywania ich wartości w ramach modeli teoretycznych.
2. Zbadanie możliwości określenia przy pomocy metod obliczeniowych ilościowej miary dla przekroju czynnego na absorpcję dwufotonową w terapii fotodynamicznej, zapisie informacji, konstrukcji ograniczników optycznych.
3. Ocena i dobór metod obliczeniowych pod kątem dostarczania informacji o:
  - 3.1. Strukturze elektronowej stanu podstawowego i stanów wzbudzonych dużych układów molekularnych .
  - 3.2. Intensywności przejść elektronowych w widmach jednofotonowych i dwufotonowych:  
siły oscylatora, dipolowych momentów przejść, prawdopodobieństwa absorpcji dwufotonowej.
  - 3.3. Przekrojach czynnych na absorpcje dwufotonową.
  - 3.4. Możliwościach analizy i opisu funkcji kształtu linii widmowej.
  - 3.5. Wpływie efektów otoczenia (rozpuszczalnik, matryca polimerowa) na strukturę widm elektronowych.
  - 3.6. Rozkładzie gęstości elektronowej w molekułach.
4. Analiza dostępnego oprogramowania obliczeniowego realizującego wybrane w Ekspertyzie metody obliczeniowe ze względu na:
  - 4.1. Ilościowe oszacowania parametrów charakteryzujących widma dwufotonowe.
  - 4.2. Złożoność procedury obliczeniowej,
  - 4.3. Wymagania ze względu na oczekiwaną wydajność obliczeń,
  - 4.4. Dostępność oprogramowania
    - a) sposób licencjonowania,
    - b) koszt,0

c) możliwość wdrożenia i integracji z infrastrukturą obliczeniową PL-Grid.  
4.5. Możliwość integracji proponowanych metod obliczeniowych/oprogramowania z systemem AuxEx

**Wymagania dla Eksperta:**

Doświadczenie badawcze z zakresu eksperymentalnej i teoretycznej optyki nieliniowej, spektroskopii laserowej i chemii obliczeniowej potwierdzone dorobkiem publikacyjnym. Publikacje o cyrkulacji międzynarodowej w okresie ostatnich pięciu lat i kierowanie lub udział w grantach badawczych w dziedzinie chemii teoretycznej i fizycznej.

**Wycenę wykonywania powyższej ekspertyzy oraz przewidywany czas proszę wysłać do dnia 26.11.2012 r. na poniższy adres: [agata.wolodkiewicz@pwr.wroc.pl](mailto:agata.wolodkiewicz@pwr.wroc.pl)**