



Dr hab. inż. Robert Zaleński
Politechnika Wrocławskiego,
Wydział Chemiczny
Katedra Chemii Analitycznej i Metalurgii
Chemicznej (K14W03D10)

Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław
bud. A3, pok. 3.15
Tel. 71-320-3937

Wykształcenie:

- # doktor habilitowany (nauki chemiczne), Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławskiego, 2017
- # doktor (nauki chemiczne), Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławskiego, 2007
- # magister inżynier (inżynieria materiałowa), WPPT, Politechnika Wrocławskiego, 2002

Dziedzina i dyscyplina naukowa:

Dziedzina nauk ścisłych i przyrodniczych
Dyscyplina naukowa: nauki chemiczne

Zainteresowania naukowe:

- # chemia teoretyczna i kwantowa
- # spektroskopia obliczeniowa
- # molekularna optyka nieliniowa
- # projektowanie materiałów molekularnych z zasad pierwszych

Publikacje:

Pełna lista prac naukowych znajduje się w bazie DONA:

<https://dona.pwr.edu.pl/szukaj/default.aspx?nrewid=437350>

Wybrane publikacje:

- K. Ahmadzadeh, X. Li, Z. Rinkevicius, P. Norman, R. Zaleński. *Toward accurate two-photon absorption spectrum simulations: Exploring the landscape beyond the generalized gradient approximation.* **The Journal of Physical Chemistry Letters**, 15:969-974, 2024.
- A. Iglesias-Reguant, H. Reis, M. Medved, J. M. Luis, R. Zaleński. *A new computational tool for interpreting infrared spectra of molecular complexes.* **Physical Chemistry Chemical Physics**, 25:11658-11664, 2023.
- E. F. Petrusevich, M. H. E. Bousquet, B. Ośmiałowski, D. Jacquemin, J. M. Luis, R. Zaleński. *Cost-effective simulations of vibrationally-resolved absorption spectra of fluorophores with machine-learning-based inhomogeneous broadening.* **Journal of Chemical Theory and Computation**, 19:2304-2315, 2023.
- S. P. Sitkiewicz, R. Zaleński, E. Ramos-Cordoba, J. M. Luis, E. Matito. *How reliable are modern density functional approximations to simulate vibrational spectroscopies?* **The Journal of Physical Chemistry Letters**, 13:5963-5968, 2022.
- M. Chołuj, Md. M. Alam, M. T. P. Beerepoot, S. P. Sitkiewicz, E. Matito, K. Ruud, R. Zaleński. *Choosing bad versus worse: Predictions of two-photon-absorption strengths based on popular density functional approximations.* **Journal of Chemical Theory and Computation**, 18:1046-1060, 2022.

- M. Chołuj, R. Behera, E. F. Petrusevich, W. Bartkowiak, Md. M. Alam, R. Zaleśny. *Much of a muchness: On the origins of two- and three-photon absorption activity of dipolar y-shaped chromophores*. **The Journal of Physical Chemistry A**, 126:752-759, **2022**.
- I. Knysh, A. Kozakiewicz-Piekarcz, A. Wojtczak, D. Plażuk, G. Baryshnikov, R. Valiev, R. Nasibullin, H. Ågren, D. Jacquemin, B. Ośmiałowski, R. Zaleśny. *Less is more: on the effect of benzannulation on the solid-state emission of difluoroborates*. **Journal of Materials Chemistry C**, 9:15820-15830, **2021**.
- B. Ośmiałowski, E. F. Petrusevich, K. Nawrot, B. Paszkiewicz, M. Nyk, J. Zielak, B. Jędrzejewska, J. M. Luis, D. Jacquemin, R. Zaleśny. *Tailoring nonlinear absorption of fluorescent dyes by substitution at a boron center*. **Journal of Materials Chemistry C**, 9: 6225-6233, **2021**.
- B. Ośmiałowski, E. F. Petrusevich, M. A. Antoniak, I. Grela, M. A. Bin Jassar, M. Nyk, J. M. Luis, B. Jędrzejewska, R. Zaleśny, D. Jacquemin. *Controlling two-photon action cross section by changing a single heteroatom position in fluorescent dyes*. **The Journal of Physical Chemistry Letters**, 11:5920-5925, **2020**.