

Oddziaływania międzymolekularne

—

Wykładowca: **dr Rafał Podeszwa**

Treści merytoryczne:

Oddziaływania międzymolekularne (van der Waalsa). Dimer, monomery, energia oddziaływania dimeru. Metody supermolekularne, supermolekularny Hartree-Fock, rachunek zaburzeń Møllera-Plesseta, metoda sprzężonych klasterów. Metody perturbacyjne, rozwinięcie polaryzacyjne, rachunek zaburzeń o adaptowanej symetrii. Oddziaływania elektrostatyczne, wymienne, indukcyjne, dyspersyjne, indukcyjno-wymienne, dyspersyjno-wymienne. Wiązanie wodorowe. Rozwinięcie multipolowe. Oddziaływanie trwałych momentów multipolowych. Polaryzowalności statyczne i dynamiczne. Asymptotyczne oddziaływanie indukcyjne i dyspersyjne, współczynniki C_n . Trymery i większe klastry molekularne. Efekty nieaddytywne. Supermolekularne i perturbacyjne metody obliczania efektów nieaddytywnych. Oddziaływania międzymolekularne dla faz skondensowanych (ciecze, ciała stałe). Przykłady układów oddziałujących dyspersyjnie (dimer helu, argonu, benzenu), elektrostatycznie i indukcyjnie (dimer wody).

Cele przedmiotu:

Przedstawienie podstaw teorii oddziaływań międzymolekularnych, metod obliczania energii oddziaływania, wad i zalet poszczególnych podejść, zastosowań do badań dimerów, klastrów molekularnych oraz faz skondensowanych.

Efekty kształcenia:

Po ukończeniu zajęć student powinien znać podstawowe własności oddziaływań van der Waalsa, znać dwie podstawowe techniki modelowania tych oddziaływań (supermolekularną i perturbacyjną), znać fizyczną interpretację poszczególnych składowych energii oddziaływania, znać podstawy teorii asymptotycznej, rozumieć różnicę w oddziaływaniu układów polarnych i niepolarnych, znać efekty nieaddytywne i ich znaczenie dla klastrów molekularnych i faz skondensowanych.

Zalecana literatura:

1. A. J. Stone "The Theory of Intermolecular Forces", Clarendon Press, Oxford, 1996,
2. B. Jeziorski, R. Moszyński, K. Szalewicz, "Perturbation Theory Approach to Intermolecular Potential Energy Surfaces of van der Waals Complexes", Chem. Rev., 94, 1887 (1994),
3. 1.G. Chałasiński and M. M. Szczęśniak, "State of the art and challenges of the ab initio theory of intermolecular interactions", Chem. Rev., 100, 4227 (2000).