

Universitatea "Al. I. Cuza" Iași
Facultatea de Chimie
Colectivul de Chimie Fizică și Teoretică

PROGRAMA ANALITICĂ A CURSULUI

"Chimie fizică avansată",
din anul I de studii, semestrul 2,
(toate secțiile de master)
2 ore de curs și 2 ore de seminar pe săptămână,
anul universitar 2008-2009

1. Obiectivele cursului:

Prezentarea unor capitole speciale de

- studiu termodinamic al sistemelor de dimensiuni nanometrice. Metodele termodinamicii clasice sunt extinse la nivelul nanosistemelor pe baza nanotermodinamicii dezvoltate de T.L.Hill și a termodinamicii statistice dezvoltate de C. Tsallis.
- cinetică chimică, cu accent pe fundamentarea microscopică a studiilor cinetice.
- chimie teoretică, cu aplicații în abordarea a studiului sistemelor chimice reactante.

Seminariile și laboratoarele familiarizează studenții cu principalele metode utilizate în:

- studiul cinetic al sistemelor chimice complexe, și cuprind aplicații de calcul analitic și numeric.
- determinarea structurii, proprietăților moleculare și a mecanismului de reacție utilizând programe de calcul adecvate; se urmărește formarea deprinderilor studenților de a aborda studiul unui sistem reactant sub aspect teoretic.

2. Conținutul de bază:

I. Termodinamică

- Noțiunile de sistem termodinamic, energie, căldură și lucru la nivelul nanosistemelor.
- Aplicarea principiilor termodinamicii la nivelul nanosistemelor.
- Nanotermodinamica – teoria T.L.Hill.
- Mecanica statistică ne-extensivă – C.Tsallis.
- Tranziții de fază în nanosisteme.

II. Cinetică chimică

- Teorii ale vitezelor de reacție
 - Modelul Marcellin-Wigner-Polanyi

- Teoria RRKM
- Teoria variațională a stării de tranziție.
- Capítule speciale de cinetica reacțiilor catalitice.
 - Solventul catalizator.
 - Catalizatori metalici.
 - Cinetica reacțiilor catalitice eterogene.

III. Chimie teoretică

- Metode și aproximații ale chimiei cuantice de determinare a structurii și proprietăților moleculare
- Metode de mecanică moleculară, empirice, semiempirice, *ab-initio*, DFT
- Studiul mecanismului de reacție utilizând suprafața de energie potențială
- Definirea structurii moleculare utilizând diferite tipuri de coordonate
- Identificarea structurilor stabile, intermediare și instabile
- Influența mediului asupra structurii și reactivității moleculare
- Interacțiuni intra- și intermoleculare

3. Sistemul de evaluare a studentului: evaluare pe parcurs și examen final, scris.

4. Discipline care trebuie parcurse în prealabil: “Termodinamică chimică”, “Cinetică chimică”, “Chimie cuantică”, “Structură și simetrie moleculară” și “Matematică”.

5. Bibliografie curs:

1. T. L. Hill, *Thermodynamics of Small Systems*, Dover, New York, 1994.
2. C. Tsallis in S. Abe, Y. Okamoto (eds.), *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*, 3-80, Springer, Berlin, 2001.
3. G. A. Mansoori, *Principles of nanotechnology*, World Scientific, New Jersey, 2005.
4. M. Hillert, *Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations – Their Thermodynamic Basis*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
4. V. Georgescu, *Tranziții de fază – Metode de studiu*, Ed. Univ. “Al. I. Cuza”, Iași, 1998.
5. P. Papon, J. Leblond, *Thermodynamique des états de la matière*, Hermann, Paris, 1990.
6. A. Bîrzu, M. Dumitraș, *Cinetică chimică. Aspecte fundamentale*, MatrixROM, București, 2008.
7. R. I. Masel, *Chemical Kinetics and Catalysis*, Wiley, 2001.
8. J. Steinfeld, J. Francisco, W. Hase, *Chemical Kinetics and Dynamics*, Prentice Hall, 1989.
9. K. J. Laidler, *Chemical Kinetics*, Harper&Row, 1987.
10. M. R. Wright, *An introduction to chemical kinetics*, Wiley, 2004.
11. I. Humelnicu, *Elemente de chimie teoretică*, Editura Tehnopress, Iași, 2003

12. A. Gerschel, *Liaisons intermoleculaires – Les forces en jeu dans la matiere condensee*, Savoirs Actuels, InterEditions, CNRS Editions, 1995;
13. D. M. Hirst, *A Computational Approach to Chemistry*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990;
14. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, New York, 2001;
15. D.B. Cook, *Handbook of Computational Chemistry*, Oxford University Press, 1998;
16. D.C. Young, *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*, Wiley, New York, 2001;
17. D.W. Rogers, *Computational chemistry using the PC*, Wiley, New Jersey, 2003;
18. C. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, Wiley, Chichester, 2002
19. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, New York, 2001;
20. R.K. Anthony, C.J. Carla, *Molecular Mechanics, across Chemistry*, University Science Books, Sausalito, California, 1997;
21. I. Silaghi Dumitrescu, D. Horvat, *Mecanică moleculară*, University Press, Cluj, 1996;
22. O. Tapia, J. Bertran (Editori), *Solvent Effects and Chemical Reactivity*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996;
23. D.M. Hirst, *A Computational Approach to Chemistry*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991.

6. Tematica seminarilor:

I. Termodinamică

- Influenta dimensiunii particulelor asupra proprietăților termodinamice.
- Determinarea experimentală a proprietăților fizice necesare modelării comportamentului termodinamic al nanosistemelor.
- Mecanica statistică ne-extensivă – aplicații de calcul.

II. CINETICĂ

- Descrierea sistemelor reactante complexe.
- Rezolvarea numerică a unor ecuații cinetice complexe.

III. Chimie teoretică

- "Construirea" structurilor moleculare în coordonate carteziane și interne
- Analiza conformațională a unor structuri moleculare
- Determinarea proprietăților moleculare utilizând chimia teoretică
- Obținerea suprafeței de energie potențială pentru reacții simple
- Investigații asupra mecanismului de reacție utilizând SEP

- Studiul influenței mediului asupra interacțiunilor intermoleculare

7. Bibliografie laborator și seminar

1. T. L. Hill, *Thermodynamics of Small Systems*, Dover, New York, 1994.
2. C. Tsallis in S. Abe, Y. Okamoto (eds.), *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications*, 3-80, Springer, Berlin, 2001.
3. P. Papon, J. Leblond, *Thermodynamique des états de la matière*, Hermann, Paris, 1990.
4. K. J. Laidler, *Chemical Kinetics*, Harper&Row, 1987.
5. M. R. Wright, *An introduction to chemical kinetics*, Wiley, 2004.
6. L. V. Fausett, *Applied numerical analysis using MATLAB*, Prentice Hall, 1999.
7. K. Ebert, H. Ederer, T. Isenhour, *Computer Applications in Chemistry*, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1989.
8. ***, *HyperChem-Computational Chemistry. Molecular Visualization and Simulation*, Hypercube. Inc., Waterloo, 1994.
9. ***, *HyperChem – Computational Chemistry – Part 2 – Theory and Methods*, Hypercube, Inc., Waterloo, 1996.
10. A. Hinchliffe, *Modelling Molecular Structures*, John Wiley & Sons, New York, 1996.
11. J.B. Foresman, AEleen Frisch, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, second edition, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996.

25.09.2008

Titulari de curs

Lect. dr. Mircea Apostu

Conf.dr. Adrian Bîrzu

Conf. dr. Ionel Humelnicu