

PROGRAMA ANALITICĂ

la disciplina “**Dinamica interacțiunilor intermoleculare**”

Profilul: Chimie - Master,

Cod:

Specializarea: **Dinamică și analiză în sisteme chimice**

Anul de studii II, semestrul 3

număr ore săptămână: curs 2, laborator 3

anul universitar 2008/2009

1. Obiectivele cursului:

Cursul “Dinamica interacțiunilor intermoleculare” prezintă unele noțiuni necesare studenților ce doresc să-și îmbunătățească cunoștințele dobândite anterior în ceea ce privește domeniul interacțiunilor intermoleculare. Sunt expuse tipurile de interacțiuni intermoleculare ce se întâlnesc între molecule aflate în diferite stări de agregare. Se abordează atât natura moleculară, termodinamică cât și cuantică a interacțiunilor intermoleculare. Sunt prezentate unele modele, teorii și concepte pentru abordarea studiului acestor interacțiuni în mediu gazos sau în stări condensate. Cursul se completează cu orele de laborator unde se fac numeroase aplicații în care sunt utilizate noțiunile predate la curs pentru formarea deprinderilor studenților în abordarea teoretică și practică a studiului interacțiunilor intermoleculare.

2. Conținutul de bază:

Introducere

1. Forțe intermoleculare și clasificarea lor
2. Interacțiuni în gaze reale
 - 2.1. Interacțiuni de multipoli electrici permanenți
 - 2.2. Forțe de inducție
 - 2.3. Forțe de dispersie
 - 2.4. Forțe intermoleculare de repulsie
 - 2.5. Potențiale empirice de interacțiune moleculară
 - 2.6. Aspecte termodinamice ale interacțiunilor moleculare. Ecuația de stare van der Waals
 - 2.7. Ecuația virială de stare
 - 2.8. Ecuații empirice de stare
 - 2.9. Ecuații empirice de stare pentru amestecuri de gaze reale
 - 2.10. Teoria cuantică a ecuației de stare
3. Interacțiunile și mediul
4. Interacțiuni în lichide

- 4.1. Interacțiuni electrostatice
 - 4.1.1. Interacțiuni între molecule polare
 - 4.1.1.1. Interacțiuni ion – dipol
 - 4.1.1.2. Interacțiuni dipol – dipol
 - 4.1.2. Interacțiuni ce implică polarizarea moleculelor
 - 4.1.3. Interacțiuni între ioni și molecule neutre
 - 4.1.4. Interacțiuni dipol – dipol indus
 - 4.1.5. Interacțiuni dipol indus – dipol indus
- 4.2. Interacțiuni de polarizare
- 5. Interacțiuni în fascicule moleculare
- 6. Abordarea cuantică a interacțiunilor moleculare în soluție

3. Sistemul de evaluare al studenților: evaluare pe parcurs și examen final

4. Discipline care trebuie parcurse în prealabil:

- obligatorii: Chimie cuantică, Structura și simetrie moleculară, Termodinamică

5. Bibliografie curs:

1. J. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, Academic Press Limited, London, 1992;
2. A. Gerschel, *Liaisons intermoleculaires – Les forces en jeu dans la matiere condensee*, Savoirs Actuels, InterEditions, CNRS Editions, 1995;
3. D. Hirst, *A Computational Approach to Chemistry*, Blackwell Scientific Publications, Oxford London, 1990;
4. R. Levine, R. Bernstein, *Molecular Reaction Dynamics and Chemical Reactivity*, Oxford University Press, 1987;
5. I. Bădilescu, S. Bădilescu, *Legătura de hidrogen*, Ed. Științifică și Enciclopedică, București, 1981;
6. I.G. Murgulescu, E. Segal, *Introducere în chimia fizică, volumul II-1; Teoria molecular-cinetică a materiei*, Ed. Academiei RSR, București, 1979;
7. J.M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation-Elementary Methods*, John Wiley & Sons Inc., New York, 1992;
8. I.G. Murgulescu, E. Segal, T. Oncescu, *Introducere în chimia fizică CINETICĂ chimică și cataliză*, vol. II-2, Ed. Academiei RSR, București, 1981;
9. R. Daudel, G. Leroy, D. Peeters, M. Sana, *Chimie cuantică*, traducere, Ed. Academiei RSR, București, 1988;
10. P.W. Atkins, *Tratat de chimie fizică*, traducere, Ed. Tehnică, București, 1996;
11. I.G. Murgulescu, R. Vilcu, *Introducere în chimia fizică; Termodinamică chimică*, vol. III, Ed. Academiei RSR, București, 1982;
12. B. Ya Simkin, I. Sheikhet, *Journal of Molecular Liquids*, **27**, pag. 79-123 (1983);

6. Tematica lucrărilor de laborator:

1. Determinarea teoretică a unor parametri specifici pentru diferite tipuri de potențiale de interacțiune intermoleculară
2. Studiul influenței mediului asupra interacțiunilor intermoleculare

7. Bibliografie laborator:

1. J. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, Academic Press Limited, London, 1992;
2. Al. Gerschel, *Liaisons intermoleculaires - Les forces en jeu dans la matiere condensee*, Savoirs Actuels, InterEditions, CNRS Editions, 1995;
3. K. Ebert, H. Ederer, T. Isenhour, *Computer Applications in Chemistry*, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1989;
4. Ș. Moldoveanu, A. Savin, *Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de orbitali moleculari*, Ed. Academiei Române, București, 1980;
5. P.W. Atkins, *Exerciții și probleme de chimie fizică*- traducere, Ed. Tehnică, București 1997.

Titular de disciplină,

Conf. dr. Ionel Humelnicu