

Charakterystyka oddziaływań międzycząsteczkowych: od dimerów do modeli mikrosolvacyjnych = Characterization of intermolecular interactions: from dimers to microsolvation models.

Autorzy

Jarosław J. Panek

Aneta Jezierska

Rok wydania

2020

Czasopismo

Wiadomości Chemiczne

Numer woluminu

74

Strony

645-662

Kolekcja

Naukowa

Język

Polski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Intermolecular interactions play an important role in many processes at the molecular level. In the contemporary science, there is a growing interest concerning the characteristics of such interactions. Therefore, the computational chemistry can provide answers to many questions, which could not be answered using experimental methods. The Symmetry-Adapted Perturbation Theory (SAPT) method was applied to characterize the energy partitioning in dimers, trimers and microsolvation models. The investigated complexes belong to various classes of compounds, e.g. · dimers of: $\text{NH}_3\cdots\text{HX}$, HF -pyridine, cycloalkanes, hypohalous acids; · trimers of: $\text{NH}_3\cdots\text{NH}_3\cdots\text{HF}$ or $\text{NH}_3\cdots\text{HF}\cdots\text{HF}$; · microsolvation models (biotin - water molecules). The current study summarizes recent years of our research devoted to the intermolecular interactions.

Wprowadzenie

1. Teoretyczny opis oddziaływań międzycząsteczkowych w świetle metody SAPT

1.1. Krótkie wprowadzenie do metody SAPT

1.2. Zastosowanie metody SAPT na przykładzie dimerów i trimerów

2. Modele mikrosolvacyjne Uwagi końcowe

Słowa kluczowe

SAPT, intermolecular hydrogen bond, microsolvation, dimers, trimers, molecular associates

SAPT, międzycząsteczkowe wiązania wodorowe, mikrosolvacja, dimery, trimery, asocjaty molekularne

Licencja otwartego dostępu

OTHER

Pełny tekst licencji:

Adres publiczny

https://ptchem.pl/storage/pages/Octo2020/zeszyt_9_10.pdf

Plik został wygenerowany dnia 2026-06-24 14:25:02

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/K2siXZ8>.