

Teoretyczne badania właściwości statycznych i dynamicznych układów molekularnych = Theoretical studies of static and dynamic properties of molecular systems

Autorzy

Zdzisław Latajka
Sławomir Berski
Andrzej Bil
Przemysław Dopieralski

Piotr Durlak

Rok wydania

2026

Czasopismo

Wiadomości Chemiczne

Numer woluminu

80

Strony

499-530

DOI

10.53584/wiadchem.2026.02.20

Kolekcja

Naukowa

Język

Polski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Zespół Teoretycznego Modelowania Procesów Chemicznych na Wydziale Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego od 1996 roku prowadzi badania struktury i dynamiki układów molekularnych z wykorzystaniem szeregu metod modelowania molekularnego. Pierwszym kierownikiem był prof. dr hab. Zdzisław Latajka, a obecnie jest nim dr hab. Sławomir Berski, prof. UWr. W okresie swojej działalności naukowcy Zespołu byli świadkami rozwoju metod obliczeniowych chemii kwantowej począwszy od metod półempirycznych chemii kwantowej poprzez metody ab initio dla układów periodycznych, metody DFT, dynamiki molekularnej ab initio, mechanochemii i Chemicznej Topologii Kwantowej, a skończywszy na wykorzystaniu metod sztucznej inteligencji w chemii kwantowej. W tej ewolucji braliśmy udział realizując badania naukowe dotyczące chemii gazów szlachetnych, chemii fulerenów, fizykochemii ciała stałego, mechanizmów reakcji chemicznych, natury wiązania chemicznego i oddziaływań niekowalencyjnych.

Słowa kluczowe

hydrogen bond, proton transfer, noble gas compounds, molecular dynamics, nature of chemical bonds, ab initio, computational mechanochemistry, disulfide bond, C₇₀ fullerene, endohedral fullerenes

wiązanie wodorowe, przeniesienie protonu, cząsteczki z atomem gazu szlachetnego, dynamika molekularna, natura wiązań chemicznych, ab initio, mechanochemia obliczeniowa, wiązanie dwusiarczkowe, fuleren C₇₀, fulereny endohedralne

Licencja otwartego dostępu

OTHER

Pełny tekst licencji:

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.53584/wiadchem.2026.02.20>

Plik został wygenerowany dnia 2026-06-20 17:29:44

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/RG-IV2e>.