

Przedmowa

Tom drugi podręcznika *Chemia fizyczna* Krzysztofa Pigoń i Zdzisława Ruziewicza prezentujemy w obecnym wydaniu pod wyodrębnionym tytułem *Fizykochemia molekularna*.. Wspólnym mianownikiem dla różnorodnego materiału zawartego w siedmiu rozdziałach tej części jest molekularny obraz materii: jego opis oraz eksperymentalnie obserwowalne konsekwencje. Ten molekularny punkt wyjścia zasadniczo odróżnia fizykochemię molekularną od klasycznej chemii fizycznej prezentowanej w części pierwszej, której podstawą jest metoda fenomenologiczna: wyjaśnienie reguł rządzących przebiegiem zjawisk istotnych w chemii na podstawie zasad fizyki klasycznej. Obraz molekularny przywoływany był tam na ogół w celach ilustracji, a kwantowa natura oddziaływań nie ujawniała się w opisywanych zjawiskach.

Podstawą fizykochemii molekularnej jest kwantowy opis struktury atomów i cząsteczek, zawarty w rozdziałach 8 i 9. Kolejnym zasadniczym elementem wiedzy o atomach i cząsteczkach jest opis ich wzajemnych oddziaływań (rozd. 9) oraz oddziaływań z polem zewnętrznym, elektrycznym lub magnetycznym (rozd. 10). Spektroskopia molekularna, czyli obserwacja i opis oddziaływania cząsteczek z polem fali elektromagnetycznej, najważniejsza dzisiaj metoda obserwacji kwantowych właściwości cząsteczek, przedstawiona jest w obszernym rozdz. 11. Właściwości faz uporządkowanych (kryształów) zbudowanych z atomów i cząsteczek zebrane są w rozdz. 12, a ich opis koncentruje się na odkryciu powiązań między właściwościami pojedynczych cząsteczek i właściwościami materiału. Elementy fotochemii zaprezentowane w rozdz. 13 ilustrują powszechnie dziś obserwowane i wykorzystywane reakcje chemiczne inicjowane promieniowaniem. Termodynamika statystyczna, której jedynie zarys zawiera rozdz. 14, pokazuje możliwości fizycznego opisu zachowania zbiorów złożonych z ogromnej liczby cząsteczek; rozdział ten łączy fizykochemię molekularną z podstawami fenomenologicznymi chemii fizycznej w tomie 1. Prawa termodynamiki stanowiące podstawę analizy fenomenologicznej znajdują swoje uzasadnienie oraz alternatywne ujęcie w metodzie statystycznej.

Fizykochemia molekularna, tom 2. podręcznika *Chemia fizyczna*, wymaga od Czytelnika znacznie poważniejszego przygotowania w dziedzinach fizyki oraz matematyki niż było to konieczne w przypadku tomu 1. Prezentacja materiału jest bowiem utrzymana na poziomie pełnej i samowystarczalnej analizy problemów, w których metody matematyczne odgrywają poważną rolę. Aby nie zaciemniać obrazu fizycznego, który w tym podręczniku ma znaczenie kluczowe, w wielu przypadkach pomijano szczegóły wywodów matematycznych, lecz zadbano, aby każdej opisywanej metodzie i wszystkim faktom eksperymentalnym towarzyszyła ścisła interpretacja ilościowa. Liczne związki w obrębie materiału opisywanego w rozdziałach tego tomu wymagają od Czytelnika systematyczności: spektroskopii molekularnej nie sposób studiować bez uprzedniej wiedzy o kwantowych podstawach budowy cząsteczek, a właściwości materiałów skondensowanych pozostaną tajemnicze bez znajomości wzajemnych oddziaływań cząsteczek. Jednak poziom *Fizykochemii molekularnej* został tak wyważony, aby nie przekraczał możliwości studenta wyższych lat studiów chemicznych. W znacznej części podręcznik jest także przystępny dla studentów innych kierunków przyrodniczych i technicznych, mających elementarne wykształcenie w zakresie chemii.

Szczególą cechą fizykochemii molekularnej jest jej aktualność. Metody badań spektroskopowych, metody kwantowochemiczne, a nawet techniki obliczeniowe rozwijały się żywiłowo w ostatnich kilku dziesięcioleciach. Fizykochemiczne metody badawcze stały się niezbywalnym narzędziem pracy w każdym laboratorium chemicznym – sztandarowym przykładem jest rutynowe korzystanie z magnetycznego rezonansu jądrowego. Dzięki powszechnej dostępności komputerów oraz komercyjnych programów obliczeniowych również metody chemii obliczeniowej stały się rutynowym narzędziem pracy chemika w projektowaniu właściwości nowych związków chemicznych (np. projektowaniu leków). Rozpoznawane właściwości fizyczne nowych materiałów są

powszechnie wykorzystywane jako technologiczna podstawa w wielu dziedzinach techniki: elektronice, fotonice, inżynierii biomedycznej.

Fizykochemiczne metody badawcze podlegają ciągłemu rozwojowi oraz komercjalizacji – narzędzia badawcze stają się powszechnie dostępnym wyposażeniem laboratoriów. Fizykochemia molekularna jest zatem niezbędnym przedmiotem wiedzy chemików i przedstawicieli innych dyscyplin, korzystających ze specjalistycznej aparatury. Bez znajomości podstaw metod eksperymentalnych i obliczeniowych oraz bez świadomości o ich ograniczeniach niemożliwe jest ich twórcze wykorzystanie. Aby Czytelnikowi dostarczyć koniecznej wiedzy w zakresie podstaw nowoczesnych metod badawczych, materiał *Fizykochemii molekularnej* został świadomie ograniczony do ich opisu fizycznego – pominięto szczegóły rozwiązań technicznych. Do obecnego wydania włączono natomiast opisy najnowszych metod i zjawisk oraz technik, które na naszych oczach stają się powszechnie znane (np. obrazowanie NMR, fotografia cyfrowa).

Nauczanie fizykochemii molekularnej w takim zakresie, jaki prezentuje obecny podręcznik, nie znalazło dotąd jednolitej podstawy w programach nauczania uczelni wyższych w Polsce; również w uczelniach światowych materiał ten bywa rozdzielany pomiędzy rozmaite odrębnie wykładane przedmioty. Metody kwantowochemiczne (budowa atomów i cząsteczek) są wykładane jako chemia kwantowa w uniwersytetach. Spektroskopia i termodynamika statystyczna oraz elementy wiedzy o oddziaływaniach cząsteczek w polach zewnętrznych wchodzi często w zakres podstawowego wykładu chemii fizycznej, niekiedy bez poprzedzającego wykładu elementów chemii kwantowej, co z konieczności spłyca poziom prezentacji. Elementy opisu struktury faz skondensowanych bywają wykładane w chemii nieorganicznej; w wielu uczelniach niezależnie wykładanym przedmiotem jest krystalografia. Właściwości fizyczne kryształów przedstawiane są w wykładach raczej na studiach fizycznych niż chemicznych, fotochemia bardzo rzadko pojawia się poza wykładami ściśle specjalistycznymi w studiach chemicznych.

Znaczną część materiału prezentowanego tu jako fizykochemia molekularna jest w literaturze światowej klasyfikowana jako fizyka chemiczna (ang. *chemical physics*), nazwa ta jednak nie zyskała sobie prawa obywatelstwa jako przedmiot w uczelniach wyższych. Wydaje się, że zjawisko to ma przyczynę semantyczną: nazwa „fizyka chemiczna” lokuje materiał w obszarze dyscypliny „fizyka”, podczas gdy ogromna większość prezentowanego materiału stanowi niezbędny element wiedzy w zakresie nowoczesnej chemii i tam jest wykładana. Fizykochemia molekularna jest bez wątpienia obszarem łączącym obszar fizyki i chemii, jednak należy uprzedzić Czytelnika, że języki opisu zjawisk używane tu przez fizyka i przez chemika bywają różne. Łatwo to zauważyć, porównując rozdziały poświęcone teorii kwantowej lub spektroskopii w podręcznikach fizyki i chemii fizycznej. Sytuacja ta stanowi poważną trudność dla studiujących, ponieważ niekiedy bardzo zbliżone metody mają różny historycznie ukształtowany opis – inny w fizyce, inny w chemii. Ważnym przykładem jest spektroskopia rezonansów magnetycznych: NMR rozwijany głównie dla potrzeb chemików operuje innym aparatem pojęciowym niż EPR, który służy częściej potrzebom badawczym fizyków.

Redaktorzy *Fizykochemii molekularnej*, kontynuując oryginalny zamysł autorów, profesorów Krzysztofa Pigionia i Zdzisława Ruzewicza, stworzyli kolejne wydanie książki, która ma służyć poszerzeniu edukacji w zakresie chemii; dla przedstawicieli innych dyscyplin książka ta może mieć znaczenie pomocnicze. Zadbano o ujednolicenie stosowanych pojęć oraz terminologii we wszystkich partiach materiału, przyjmując za podstawę ukształtowany język, aparat pojęciowy oraz symbolikę stosowane w chemii fizycznej. Konsekwentnie zastosowano układ jednostek SI, wprowadzono go również w tych częściach, w których nie jest on zwyczajowo stosowany w literaturze naukowej (chemia kwantowa, spektroskopia molekularna). Wykorzystano aparat pojęciowy chemii fizycznej także w materiale, który zazwyczaj operuje językiem fizyki (właściwości fizyczne kryształów). Redaktorzy mają nadzieję, że tak skomponowany podręcznik będzie przystępną pomocą dla studentów i doktorantów. Być może posłuży także jako punkt wyjścia do systematycznego nauczania fizykochemii molekularnej jako wyodrębnionej gałęzi chemii fizycznej.

Ludwik Komorowski
Józef Lipiński

Wrocław, 15 lipca 2005 r.