

CUPRINS

1. Structura discontinuă a materiei	12
1.1. Procesualitatea cunoașterii științifice	12
1.1.1. Dezvoltarea continuă a teoriilor referitoare la „microcosmos”	12
1.1.2. Importanța cunoașterii fundamentului istoric al dezvoltării științei	13
1.2. Originea noțiunii de atom	14
1.2.1. Primele ipoteze asupra structurii materiei	14
1.2.2. Formularea ipotezei atomiste	15
1.2.3. Legi fundamentale ale chimiei bazate pe ipoteza atomistă	16
1.3. Identificarea constituenților atomului	18
1.3.1. Electronul	18
1.3.2. Protonul	20
1.3.3. Neutronul	21
1.4. Mărimi fizice și unități de măsură legate de structura discontinuă a materiei	22
1.4.1. Unitatea atomică de masă	22
1.4.2. Masa atomică relativă. Masa moleculară relativă	22
1.4.3. Molul. Masa molară	24
1.4.4. Numărul lui Avogadro	24
1.4.5. Volumul molar	25
2. Structura atomilor – tratare în modelul planetar clasic și semicuantic	28
2.1. Primele modele atomice	28
2.1.1. Conceptul de model atomic	28
2.1.2. Elaborarea primelor modele atomice	28
2.2. Tratarea clasică a atomilor	31
2.2.1. Modelul planetar clasic	31
2.2.2. Deficiențele modelului planetar clasic	33
2.3. Tratarea semicuantică a atomilor	34
2.3.1. Dovezi experimentale care au impus introducerea cuantificării	34
2.3.2. Modelul planetar semicuantic Bohr al atomului. Postulatele lui Bohr	37
2.3.3. Calculul energiei electronilor în stările staționare	40
2.3.4. Procese care decurg cu absorbție sau cu emisie de fotoni	44
2.3.5. Modelul planetar semicuantic Bohr-Sommerfeld al atomului	46

3. Structura atomilor – tratare în modelul cuantic	48
3.1. Principii de bază în tratarea cuantică a atomului.....	48
3.1.1. Deficiențele modelului planetar semicuantic.....	48
3.1.2. Dualismul undă-corpusul în înțelegerea comportamentului electronilor în atom	49
3.1.3. Principiul de nedeterminare al lui Heisenberg	50
3.2. Ecuația lui Schrödinger și consecințe ale acesteia	50
3.2.1. Ecuația lui Schrödinger – fundament al mecanicii cuantice	50
3.2.2. Ecuația lui Schrödinger pentru „particula în cutie”	51
3.2.3. Semnificația fizică a soluțiilor ecuației lui Schrödinger.....	55
3.3. Orbitalii atomici	58
3.3.1. Expresiile orbitalilor atomici în coordonate sferice	58
3.3.2. Numerele cuantice și legătura lor cu orbitalii atomici	62
3.3.3. Repartizarea orbitalilor atomici pe straturi și substraturi	63
3.4. Aproximații utilizate în descrierea atomului cu mai mulți electroni.....	66
3.4.1. Aproximația orbitală	66
3.4.2. Aproximația Hartree-Fock și aproximația Slater	67
4. Structura electronică a atomilor diverselor elemente chimice.....	70
4.1. Principii de ocupare cu electroni a orbitalilor atomici.....	70
4.1.1. Principiul energetic de construcție (principiul Aufbau)	70
4.1.2. Principiul de excluziune al lui Pauli	70
4.1.3. Regula lui Hund	71
4.2. Ordinea energetică a orbitalilor atomici	72
4.2.1. Ecranarea și penetrarea – fenomene ce diferențiază energetic orbitali din aceeași strat.....	72
4.2.2. Regula „ $n+l$ ” de stabilire a ordinii energetice a orbitalilor atomici	75
4.2.3. Metoda lui Goldanski de prezentare a ordinii energetice a orbitalilor atomici	77
4.2.4. Diagrame energetice de orbitali atomici. Abateri de la regula „ $n+l$ ”. Inversiuni energetice	78
4.3. Configurații electronice corespunzătoare stării fundamentale	81
4.3.1. Stabilirea configurațiilor electronice ale atomilor în starea fundamentală	81
4.3.2. Stabilirea configurațiilor electronice ale ionilor monoatomici în starea fundamentală	85
4.3.3. Neregularități în stabilirea configurațiilor electronice.....	87

5. Rolul tabelului periodic al elementelor chimice	
în studiul structurii substanțelor	90
5.1. Construcția tabelului periodic al elementelor chimice	90
5.1.1. Identificarea subnivelului în care se plasează	
electronul distinctiv al unui atom	90
5.1.2. Perioade și grupe. Blocuri ale tabelului periodic	91
5.2. Variația proprietăților elementelor în tabelul periodic	94
5.2.1. Valoarea euristică a tabelului periodic	94
5.2.2. Proprietăți periodice și proprietăți neperiodice	
ale elementelor chimice	96
5.2.3. Raza atomică	96
5.2.4. Energia de ionizare primară.....	99
5.2.5. Afinitatea pentru electron	101
5.2.6. Caracterul electrochimic.	
Coeficientul de electronegativitate Mulliken	102
6. Structura moleculelor	106
6.1. Molecule care prezintă un atom central	106
6.1.1. Clasificarea moleculelor cu atom central	106
6.1.2. Posibile geometrii adoptate	
de moleculele cu atom central	107
6.1.3. Principiile de bază ale modelului Gillespie.....	110
6.2. Predicția și modelarea geometriei standard	
a unei molecule cu atom central.....	111
6.2.1. Algoritm de atribuire a geometriei standard	111
6.2.2. Exemple de atribuire a geometriei standard	112
6.2.3. Modelarea geometriei standard.....	115
6.3. Predicția și modelarea geometriei reale	
a unei molecule cu atom central.....	119
6.3.1. Repulsia perechilor de electroni din stratul de valență.....	119
6.3.2. Influența repulsiei asupra unghiurilor dintre legături.....	119
6.3.3. Tipuri de molecule cu atom central și geometria claselor	
distincte corespunzătoare aceluiași tip.....	120
6.3.4. Geometria reală a unor molecule uzuale cu atom central –	
predicție și modelare.....	128
6.3.5. Variantele de geometrie reală corespunzătoare	
numărului de atomi din molecula cu atom central	130
6.4. Molecule care nu prezintă un atom central	133
6.4.1. Incapacitatea modelului Gillespie de a indica	
geometria moleculară reală	
a unei molecule care nu prezintă un atom central	133
6.4.2. Factori care influențează geometria moleculară	134

6.5. Simetria moleculară și consecințe directe ale acesteia	136
6.5.1. Elemente și operații de simetrie	136
6.5.2. Simbolurile Schœnflies pentru grupurile de simetrie ale moleculelor	137
6.5.3. Încadrarea moleculelor în grupuri de simetrie	138
6.5.4. Polaritatea moleculelor	140
6.5.5. Chiralitatea moleculelor	145
7. Structura rețelelor	154
7.1. Caracteristicile unei rețele cristaline	154
7.1.1. Generalități	154
7.1.2. Cele mai uzuale geometrii de rețele cristaline	155
7.2. Structura rețelelor metalice	162
7.2.1. Exemple de rețele metalice	162
7.2.2. Proprietăți generale ale rețelelor metalice	164
7.2.3. „Împachetare afânată” și „împachetare compactă”	166
7.2.4. Numărul de coordinare caracteristic unei rețele metalice	171
7.2.5. Numărul de particule care revin unei celule elementare dintr-o rețea metalică	173
7.2.6. Factorul de împachetare caracteristic unei rețele metalice	175
7.3. Structura rețelelor ionice	179
7.3.1. Exemple de rețele ionice	179
7.3.2. Proprietăți generale ale rețelelor ionice	180
7.3.3. „Regula raportului de raze” pentru o rețea ionică	182
7.3.4. Raportul de combinare într-o rețea ionică	187
7.3.5. Determinarea formulei chimice a unui compus ionic pe baza studiului unei celule elementare din rețeaua acestuia	192
7.4. Structura rețelelor atomice	199
7.4.1. Exemple de rețele atomice	199
7.4.2. Proprietăți generale ale rețelelor atomice	203
7.5. Structura rețelelor moleculare	203
7.5.1. Exemple de rețele moleculare	203
7.5.2. Proprietăți generale ale rețelelor moleculare	207
7.5.3. Legăturile de hidrogen	208
7.5.4. Legături de tip van der Waals	211
8. Bibliografie și web-grafie	213