

LIANA-SIMONA SBÎRNĂ

SEBASTIAN SBÎRNĂ

LIANA-SIMONA SBÎRNĂ

SEBASTIAN SBÎRNĂ

CHIMIE GENERALĂ –

Structura atomilor, moleculelor și rețelelor



**EDITURA UNIVERSITARIA
Craiova, 2018**

Referenți științifici:
Prof.univ.dr. Mihaela MUREȘEANU
Conf.univ.dr. Aurora REISS

Copyright © 2018 Universitaria
Toate drepturile sunt rezervate Editurii Universitaria

Descrierea CIP a Bibliotecii Naționale a României
SBÎRNĂ, LIANA SIMONA

Chimie generală : structura atomilor, moleculelor și rețelelor / Liana-Simona Sbîrnă, Sebastian Sbîrnă. - Craiova : Universitaria, 2018

Conține bibliografie

ISBN 978-606-14-1454-3

I. Sbîrnă, Sebastian

54

© 2018 by Editura Universitaria

Această carte este protejată prin copyright. Reproducerea integrală sau parțială, multiplicarea prin orice mijloace și sub orice formă, cum ar fi xeroxarea, scanarea, transpunerea în format electronic sau audio, punerea la dispoziția publică, inclusiv prin internet sau prin rețelele de calculatoare, stocarea permanentă sau temporară pe dispozitive sau sisteme cu posibilitatea recuperării informațiilor, cu scop comercial sau gratuit, precum și alte fapte similare săvârșite fără permisiunea scrisă a deținătorului copyrightului reprezintă o încălcare a legislației cu privire la protecția proprietății intelectuale și se pedepsesc penal și/sau civil în conformitate cu legile în vigoare.

*În memoria
distingusului nostru tată,*



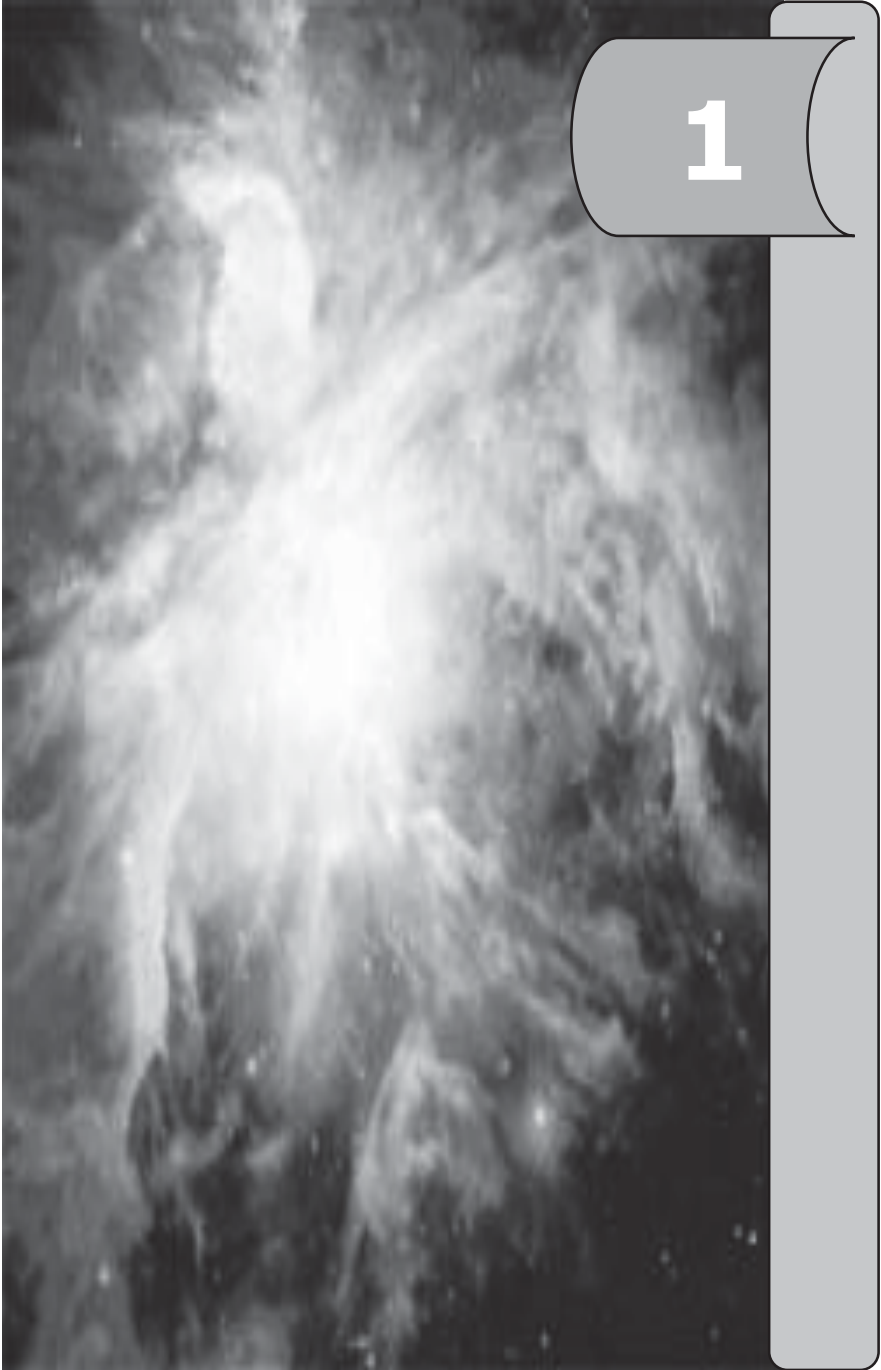
*prof. dr. Nicolae Mureșan
(03.12.1940 - 14.01.2018)*

Această carte este adresată, în primul rând, studenților de la specializările CHIMIE FARMACEUTICĂ și BIOCHIMIE TEHNOLOGICĂ din cadrul DOMENIULUI CHIMIE, precum și celor de la specializările FIZICĂ MEDICALĂ și FIZICĂ INFORMATICĂ din cadrul DOMENIULUI FIZICĂ, dar poate constitui un îndrumar și pentru alți studenți sau elevi în înțelegerea unor noțiuni specifice de chimie generală, referitoare la structura atomilor, moleculelor și rețelelor.

De asemenea, ea ar putea fi utilă și tinerilor profesori de chimie, în vederea consolidării cunoștințelor necesare pentru promovarea cu succes a examenelor de titularizare/suplinire sau pentru obținerea diverselor grade didactice, dar și pentru o mai eficientă activitate la catedră.

Autorii vor fi recunoscători tuturor aceluia care, prin diverse observații și sugestii, vor contribui la îmbunătățirea conținutului acestei cărți pentru o eventuală reeditare.

1



1. STRUCTURA DISCONTINUĂ A MATERIEI

1.1. PROCESUALITATEA CUNOAȘTERII ȘTIINȚIFICE

1.1.1. Dezvoltarea continuă a teoriilor referitoare la „microcosmos”

Referindu-se la studiul structurii materiei, un filosof spunea: „În comparație cu filosofia – este matematică; în comparație cu matematica – este filosofie”.

Teoriile științifice sunt, într-adevăr, la granița dintre concret și abstract, dintre matematica rece – care încearcă să încadreze în formule și în ecuații tot ceea ce există în jurul nostru și chiar pe noi înșine – și filosofia, lipsită uneori de realism, a unui Univers mult prea complex pentru a putea fi explicat și a cărui înțelegere, dacă ar fi posibilă, nu ar face decât să îi perturbe esența, dacă nu chiar să îl golească de sens.

Este adevărat că, în Univers, nu există „cel mai mic”, tot la fel cum nu există nici „cel mai mare”. Tocmai această permisivitate a granițelor cunoașterii face la fel de interesantă explorarea „microcosmosului” ca și a „macrocosmosului” .

Vom fi mereu în căutarea celei mai mici particule din structura materiei, ca și în căutarea celei mai îndepărtate galaxii.

Este evident că teoriile științifice nu sunt „închise”: dezvoltarea lor are un caracter istoric, ele fiind, pe rând îmbogățite, corectate și – în cazul evidențierii unor deficiențe prea profunde – chiar abandonate, ilustrând astfel procesualitatea cunoașterii științifice.

După cum se știe, s-a crezut inițial că materia este continuă; apoi s-a infirmat continuitatea ei și s-a introdus celebra „ipoteză atomistă”.

S-a considerat că substanța este alcătuită din „atomi”, aceștia fiind priviți ca particule indivizibile, fapt atestat chiar de numele pe care l-au primit.

Ulterior s-a dovedit, incontestabil, că atomii au o structură internă, fiind alcătuiți din înveliș electronic și nucleu.

Mai mult, acesta, la rândul lui, este alcătuit din nucleoni – protoni și neutroni.

În momentul actual, cercetătorii sunt convinși că nici nucleonii nu sunt cele mai mici particule din care este alcătuită materia.

Constituenții nucleonilor au fost denumiți „quarks” (cuarcuri/cuarci), dar teoriile asupra acestora sunt încă insuficient argumentate experimental.

Rămâne în sarcina generațiilor următoare să dovedească fără echivoc existența cuarcurilor și, eventual, să găsească structura lor internă...

1.1.2. Importanța cunoașterii fundamentului istoric al dezvoltării științei

În decursul ultimelor decenii, știința în general – și chimia în particular – a cunoscut o dezvoltare fără precedent, odată cu apariția calculatoarelor performante și a softurilor capabile să rezolve cu o deosebită precizie ecuații ale căror soluții ar fi fost altfel practic imposibil de aflat, și în același timp capabile să ofere o imagine intuitivă, accesibilă înțelegerii noastre, asupra unor noțiuni abstracte, începând cu acelea de „orbitali atomici”, „suprafețe echipotențiale”, „suprafețe nodale” și ajungând până la modelarea pe computer a structurii unor molecule-gigant (de tip „cluster”) sau a diverselor tipuri de rețele și care permit, între altele, vizualizarea modurilor normale de vibrație caracteristice unor astfel de sisteme poliatomice și chiar identificarea simetriei acestora.

În ciuda acestei adevărate explozii de informație la care avem astăzi acces mulțumită noilor tehnologii și noilor echipamente de calcul, și chiar dacă acum, la începutul unui nou mileniu, vechile concepte fundamentale ale chimiei – de mult depășite – au ajuns să nu mai fie satisfăcătoare pentru descifrarea literaturii științifice a vremii noastre, ele rămân totuși un abecedar al cunoașterii, a cărui însușire este necesară, fie și numai din considerente de ordin moral, pentru ca, învățând chimia modernă, să nu locuim într-o casă fără temelii.

1.2. ORIGINEA NOȚIUNII DE ATOM

1.2.1. Primele ipoteze asupra structurii materiei

Termenul de "materie" trebuie înțeles – în primul rând – în forma sa cea mai abstractă, și anume cea de categorie filosofică.

În acest sens, este vorba despre o substanță universală eternă, evident obiectivă, care, sub diferitele ei forme concrete, alcătuiește lumea.

Daca materia, în sensul ei abstract, este un obiect de studiu al filosofiei, manifestările sau realizările ei concrete constituie obiectul de studiu al diferitelor științe exacte.

Încă din antichitate s-a pus problema cunoașterii științifice a obiectelor și fenomenelor naturale.

În zorii cunoașterii științifice, materia se considera a fi un tot unitar și continuu. Ideea aceasta a fost susținută de Xenofanes și școala sa eleatică, în secolul al V^{-lea} î.e.n.

Un curent potrivit acestei concepții a apărut în secolul următor, când Leukippos și apoi Demokritos au introdus ipoteza discontinuității materiei, aceasta fiind înțeleasă ca fiind alcătuită din particule foarte mici, care nu mai pot fi fragmentate și care chiar din acest motiv au primit denumirea de atomi ("a-tomos", în limba greacă, înseamnă "ceea ce nu poate fi tăiat").

S-a căutat apoi identificarea unor elemente concrete din care este alcătuită substanța, pentru a fi adusă dovada discontinuității acesteia.

Concepția lui Empedocles (secolul al V^{-lea} î.e.n.), conform căreia constituenții materiei ar fi: pământul, apa, aerul și focul, a fost îmbrățișată cu un secol mai târziu de către Aristoteles, care a încercat să o argumenteze prin aceea că aceste „elemente primordiale” corespund perfect calităților diverselor obiecte, și anume: „uscat”, „umed”, „rece”, și „cald” (fig. 1.1).

Toate aceste concepte – deși remarcabile pentru acea vreme – erau încă foarte departe de o înțelegere corectă și profundă a modului în care este alcătuită materia și implicit a proprietăților ei.

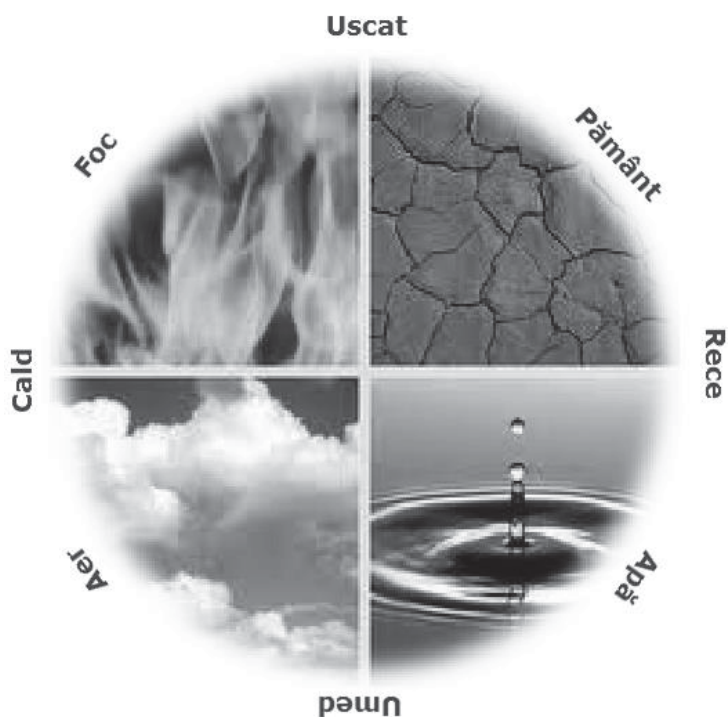


Fig. 1.1. O reprezentare a ideii lui Aristoteles privind structura materiei

1.2.2. Formularea ipotezei atomiste

Problema elucidării structurii materiei a rămas într-o "adormire" de secole. Unii alchimști au mai încercat doar să sugereze că materia ar fi alcătuită din substanțe simple (la începutul secolului al XVII^{-lea}, spre exemplu, Van Helmont susținea că toate substanțele derivă din apă).

Abia la sfârșitul secolului al XVIII^{-lea}, J. Dalton a emis o ipoteză revoluționară în cunoașterea științifică: ipoteza atomistă.

Anume, el a afirmat că trebuie reluate ideile vechilor greci cu privire la alcătuirea materiei din particule care nu mai pot fi divizate, definind atomul ca unitate structurală a oricărei substanțe (cea mai mică particulă a respectivei substanțe care mai păstrează încă proprietățile acesteia).

1.2.3. Legi fundamentale ale chimiei bazate pe ipoteza atomistă

Ipoteza atomistă stă la baza formulării „legii conservării masei” (în mod independent de către Lomonosov și Lavoisier, la sfârșitul secolului al XVIII^{-lea}), conform căreia „masele atomilor nu sunt afectate în reacțiile chimice la care ei participă; cu alte cuvinte, în orice reacție chimică, masa produșilor de reacție este egală cu masa reactanților”.

Tot ipoteza atomistă se află și la baza enunțării „legii proporțiilor definite” (de către Proust, în ultimul an al secolului al XVIII^{-lea}): „La formarea unei combinații chimice, elementele componente păstrează între ele un raport de masă riguros determinat”.

La începutul secolului al XIX^{-lea}, chiar Dalton, pe baza propriei sale ipoteze atomiste, elaborează „legea proporțiilor multiple”: „Dacă două elemente pot forma mai multe combinații chimice, atunci cantitățile dintr-un element care se combină cu una și aceeași cantitate din celălalt, se află într-un raport de numere întregi și cu valori mici”.

De exemplu, o cantitate de azot de masă M se poate combina cu diferite cantități de oxigen, fie m_1, m_2, \dots masele acestora.

Într-adevăr, pentru diverșii compuși ai azotului cu oxigenul, se respectă legea proporțiilor multiple.

Rezultatele obținute sunt prezentate tabelat în cele ce urmează.

La formarea N_2O se combină n_N de atomi de azot.

$$n_N = \frac{m_N}{m_N^0}$$

(unde m_N^0 este masa unui atom de azot) cu un număr întreg de atomi de oxigen)

$$n_O = \frac{m_O}{m_O^0}$$

(analog s-a notat m_O^0 masa unui atom de oxigen).