

## PROGRAMA ANALITICĂ

a disciplinei "Structură și simetrie moleculară"

Cod:

Specializarea: Chimie  
anul de studii II, semestrul 4,  
număr ore de curs - 3, laborator - 2 / săptămână  
anul universitar 2008/2009

### 1. Obiectivele cursului

Prezentarea bazelor teoretice ale structurii moleculare. Cunoașterea elementelor de simetrie și utilizarea acestora pentru aprofundarea naturii legăturii chimice și a proprietăților moleculare. Determinarea teoretică a structurii și reactivității moleculare.

### 2. Conținutul de bază

#### 1. Elemente de simetrie moleculară

- 1.1. Rotirea unui sistem de coordonate în plan.
- 1.2. Elemente, operații și grup de simetrie.
- 1.3. Multiplicarea operațiilor de simetrie.
- 1.4. Caractere și reprezentări ale grupului.
- 1.5. Reprezentări reductibile și ireductibile ale grupului.
- 1.6. Dezvoltarea unei reprezentări reductibile după reprezentările ireductibile ale grupului.
- 1.7. Principalele grupuri de simetrie moleculară și notația acestora.

#### 2. Natura legăturii chimice. Stările electronice ale moleculei diatomice.

- 2.1. Probleme generale privind natura legăturii chimice.
- 2.2. Teoria cuantică a legăturii covalente. Ionul molecular de hidrogen,  $H_2^+$ .
- 2.3. Clasificarea orbitalelor moleculare (stărilor electronice) ale moleculei diatomice.
- 2.4. Stările electronice ale moleculei de hidrogen în teoria orbitalelor moleculare (OM).
- 2.5. Molecula de Hidrogen în teoria legăturilor de valență (VB).
- 2.6. Molecula de hidrogen. Introducerea spinul în funcția de undă și comparație între metoda MO și VB.
- 2.7. Energia de corelare și interacțiunea configurațională.
- 2.8. Configurații electronice ale moleculelor diatomice în teoria orbitalelor moleculare.
- 2.9. Legătura metalică.

#### 3. Structura electronică și geometria moleculelor poliatomice.

- 3.1. Aspecte experimentale referitoare la structura moleculară.
- 3.2. Bazele teoretice ale configurației geometrice moleculare.
- 3.3. Atomul în stare de valență. Hibridizarea orbitalelor atomice.

- 3.4. Teoria repulsiei perechilor electronice din orbitalele de valență.
- 3.5. Utilizarea simetrie în teoria orbitalilor moleculare. Exemplu molecula de apă.
- 3.6. Semnificația proprietăților legăturilor în teoria orbitalilor moleculare

#### 4. Aproximația $\pi$ - electronică în structura moleculară

- 4.1. Bazele fizico - chimice ale aproximației  $\pi$  - electronice.
- 4.2. Metoda electronului liber.
- 4.3. Metoda orbitalilor moleculare ale lui Hückel.
- 4.4. Aplicația metodei Hückel. la molecula de butadienă.
- 4.5. Hidrocarburi conjugate ciclice în teoria OM Hückel. Regula aromaticității.
- 4.6. Aproximația  $\pi$  - electronică în metoda Pariser - Parr - Pople.
- 4.7. Proprietăți moleculare generale în teoria orbitalilor moleculare

#### 5. Elemente de teoria cuantică a reactivității chimice.

- 5.1. Probleme generale ale reactivității chimice. Suprafața de energie potențială a reacției chimice.
- 5.2. Calcule relative ale capacității de reacție considerând numai substratul. Reacții de substituție și adiție în seria aromatică.
- 5.3. Metoda " $\alpha_r$ " modificat și metoda electronului de frontieră.
- 5.4. Calcule relative ale capacității de reacție considerând atât substratul cât și agentul. Reacții de substituție și reacții de adiție în seria aromatică.
- 5.5. Teoria topologică a reactivității chimice.

### 3. Sistemul de evaluare a studentului: evaluare pe parcurs si examen final

#### 4. Bibliografie curs

1. I. Humelnicu, *Elemente de chimie teoretică*, Ed. Tehnopress, Iași, 2003
2. C. Ghirvu, *Structură chimică*, Univ. "Al. I. Cuza" Iași, 1973
3. C. Ghirvu, *Chimie fizică - Elemente de structură și reactivitate moleculară*, I. P. Iași, 1979
4. I.G. Murgulescu, *Introducere în Chimia fizică - Atomi, molecule, legătura chimică*, vol. I, 1, Ed. Academiei Române, București, 1976
5. I.G. Murgulescu, *Introducere în Chimia fizică - Structura și proprietățile moleculelor*, vol. I, 2, Ed. Academiei Române, București, 1978
6. P.W. Atkins, *Tratat de chimie fizică* - traducere, Ed. Tehnică București, 1996
7. M. Weissbluth, *Atoms and Molecules*, Acad. Press, New York, 1978

#### 5. Tematica lucrărilor de laborator

1. Metode de prelucrare a datelor experimentale.
2. Măsurători fizico - chimice generale, densitate, indice de refracție.
3. Verificarea legii generale a absorbției de radiație de către materie (legea lui Lambert - Beer).
4. Studiul absorbției de radiație prin metoda fotometrică.
5. Studiul refracțiilor atomice și ionice și corelarea acestora cu structura moleculară.
6. Studiul structurii moleculare prin măsurători de momente de dipol electric.
7. Studiul structurii moleculare prin spectroscopie de infraroșu.
8. Studiul structurii moleculare prin spectroscopie de UV și vizibil.

9. Studiul ionului molecular de hidrogen,  $H_2^+$  și a moleculei de hidrogen (aplicație pe calculator).
10. Studiul structurii electronice și a spectrelor electronice molecular (aplicații pe calculator)
11. Studiul reactivității sistemelor moleculare (aplicații pe calculator).
12. Probleme diverse la capitolul “Simetrie moleculară”

#### 6. Bibliografie laborator

1. C. Ghirvu, I. Humelnicu, *Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea II – Structură moleculară*, Ed. Universității <Al.I. Cuza> Iași, 2005
2. P.W. Atkins, C.A. Trapp, *Exerciții și probleme rezolvate de Chimie fizică* (traducere), Ed. Tehnică, București, 1997
3. D.W. Rogers, *Computational chemistry using the PC*, Wiley, New Jersey, 2003;
4. C. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, Wiley, Chichester, 2002
5. H.H. Jaffe, M. Orchin, *Theory and Applications of Ultraviolet Spectroscopy*, John Wiley, New York, 1962
6. E.F.H. Brittain, W.O. George, C. H. J. Wells, *Introduction to Molecular Spectroscopy – Theory and Experiment*, Acad. Press, 1970
7. Diverse programe proprii și comerciale de chimie cuantică și structură moleculară.
8. Referate proprii de laborator.

Titular disciplină,

Conf.dr. Ionel Humelnicu