

DOMOKOS STEFAN
CHIMIE CLASICĂ ȘI CUANTICĂ
EITURA SCIENTIFIC TECHNOLOGY
EDIȚIE ELECTRONICĂ ONLINE

ISBN 978-630-6695-18-8

2025

BUZĂU

DOMOKOS STEFAN, SUBSTANȚELE, CHIMIE CLASICĂ ȘI CUANTICĂ, EDITURA SCIENTIFIC TECHNOLOGY, BUZĂU, 2024.

DOMOKOS STEFAN ESTE INGINER, ABSOLVENT AL FACULTĂȚII DE FIZICĂ TEHNOLOGICĂ, UNIVERSITATEA BUCUREȘTI, ÎN PROMOTIA 1982-1987.

DOMOKOS STEFAN A FOST ȘI ESTE DIRECTORUL ȘI SINGURUL ANGAJAT AL EDITURII.

TEHNOREDACTARE ȘI EDITARE: DOMOKOS STEFAN, EDITURA SCIENTIFIC TECHNOLOGY

PUBLICAT, TIPĂRIT, SCRIS PE CD SAU DVD, ON LINE ȘI DISTRIBUIT DE EDITURA SCIENTIFIC TECHNOLOGY BUZĂU. CĂRȚILE EDITURII SE GĂSESC GRATUIT PE LINK-UL

<https://www.dropbox.com/sh/2lvftvy1fehyze/AAAaK8Rfx6svo1RnkwKZh4S3a?dl=0>

ȘI PE WWW.LINKEDIN.COM

NR DE ORDINE ÎN REGISTRUL COMERȚULUI ROONRC.F10/91/2019 CUI 40733833

ADRESA: STR. PIETROASELE, CART. EPISCOPIEI, MICRO 3, NR. 6, BL. D3, SC. C, ET. 2, AP.6, BUZĂU, 120049, ROMÂNIA; TEL: +40 725243907;EMAIL:

SQDOMOKOS@YAHOO.COM

ACEASTA CARTE SE ADRESEAZĂ TUTUROR CATEGORIILOR SOCIALE ȘI ESTE DISPONIBILĂ PENTRU ORICINE DOREȘTE. TOATE CĂRȚILE SCRISE ÎN PERIOADA DE ACEȘTI AUTORI SE POT MULTIPLICA ȘI RĂSPÂNDI GRATIS PRIN ORICE MIJLOACE: TIPĂRIRE, SCRIS DE MÂNĂ, COPIERE, SAU ELECTRONICE, SCIERE CDROM SAU DVDROM, DE ORICINE. ACESTE CĂRȚI SE POT COPIA ȘI COMERCIALIZA FĂRĂ OBLIGAȚII FAȚĂ DE AUTORI ȘI FAȚĂ DE EDITURĂ.

AUTORUL DOMOKOS STEFAN

TOATĂ LUMIEA MI-A SPUS SĂ SCRIS CĂRȚI DE 50-800 PAGINI DE LA 5 ANI.

AUTORUL DOMOKOS STEFAN

EU SUSȚIN CONSTITUȚIA ROMÂNIEI ÎN FORMA ACTUALĂ.

AUTORUL DOMOKOS STEFAN

CARDUL DE IDENTITATE AL AUTORULUI DOMOKOS STEFAN



ACESTĂ FOTOGRAFIE REPREZINTĂ DIPLOMA ÎN ȘTIINȚE JURITICE A LUI
TĂNASE MARIN, SOCRUL AUTORULUI ACESTEI CĂRȚI

CONTENTS

PARTEA I. CHIMIE CLASICĂ	11
1. INTRODUCERE	11
2. PROTECȚIA ÎMPOTRIVA ACCIDENTELOR CARE POT SĂ PRODUCĂ MOARTEA SAU ÎMBOLNAVIREA	13
3. ELEMENTELE CHIMICE.....	13
3.1. CUPRUL.....	14
3.2. FIERUL.....	19
3.3. ARGINTUL	22
3.4. PLUMBUL.....	23
3.5. SULFUL	25
3.6. ANTIMONIU	28
3.7. OLĂRITUL.....	28
3.8. ZINC	30
3.9. ACIDUL SULFURIC	31
3.10. MERCURUL	33
3.11. CĂRBUNEL.....	35
3.12. STICLA.....	35
4. DEPOZITELE NATURALE DE SUBSTANȚE.....	37
5. ALCHIMIA	38
6. MINERITUL	40
7. FORMULAREA CONCEPTELOR DE ATOM ȘI MOLECULĂ.....	41
8. ELEMENTELE CHIMICE.....	43
9. CONSTRUCȚIA MATERIEI DIN PRICIPII, ÎN PREZENT ELEMENTE CHIMICE	43
10. STUDIUL APELOR MINERALE	46
11. REACȚII CHIMICE ENDOTERME.....	49
12. SOLIDIFICAREA.....	52
13. EVAPORAREA, ȘI CONDENSAREA	57
14. ATOMII ȘI MOLECULELE CONSIDERATE CORPURI.....	63

15.	DEOSEBIREA SUBSTANȚELOR CHIMICE PRIN GUST, ȘI CU SOLUȚII DE TINCTURĂ DE TURNESOL ȘI SUPERBA COROZIVĂ	73
16.	PROCEDEE DE OBȚINERE A SUBSTANȚELOR NOI.....	77
17.	NATURA AERULUI.....	85
18.	FOSFORUL.....	92
19.	REAȚII CHIMICE CUNOSCUTE ÎN PERIOADA 1665 – 1699 ȘI ALTE REAȚII CHIMICE.....	92
20.	REAȚII CHIMICE COMPLETE.....	95
21.	CARACTERISTICI ALE SUBSTANȚELOR	96
22.	SUBSTANȚE NOI.....	97
23.	RECUNOAȘTEREA MINERALELOR	97
24.	TERMODINAMICĂ.....	103
24.1.	presiunea, masa, și forța expansivă a aerului	103
24.2.	CĂLDURA	106
25.	ATOMUL, ELEMENTUL CHIMIC ȘI ELEMENTUL FIZIC.....	110
26.	PROPORȚIILE DETERMINATE ÎN CARE SE REGĂSESC REUNITE ELEMENTELE NATURII INORGANICE	121
27.	PROPORTIILE DETERMINATE ÎN CARE SE GASESC REUNITE ELEMENTELE NATURII INORGANICE	121
28.	REAȚIILE CHIMICE.....	133
29.	CHIMIE.....	134
29.1.	THE STRUCTURE OF THE ATOM	134
29.2.	ELECTRON CONFIGURATION	138
29.3.	LEGĂTURA CHIMICĂ	142
29.4.	LEGĂTURA COVALENTĂ	143
	FIGURA 1	145
	FIGURA 2.....	146
29.4.	LEGĂTURA IONICĂ	147
29.5.	LEGĂTURA POLARĂ	150
30.	REAȚII CHIMICE	151
30.1.	REACTANȚI ȘI PRODUSI	152

30.2.	TEORIA CIOCNIRILOR	153
30.3.	REAȚII EXOTERME	154
30.4.	REAȚII ENDOTERME	154
30.5.	TIPURI DE REAȚII.....	155
30.5.1.	REAȚII DE COMBINARE.....	155
30.5.2.	REAȚII DE DECOMPUNERE.....	155
31.	ACIZI ȘI BAZE	155
32.	ELECTROCHIMIE	156
32.1.	ELECTROLIZA.....	156
32.2.	CELULA ELECTROCHIMICĂ.....	156
32.3.	REAȚIA DE OXIDARE DIN CELULA ELECTROCHIMICĂ	157
32.4.	REAȚIA DE REDUCERE DIN CELULA ELECTROCHIMICĂ	157
32.5.	EFECTELE PILEI VOLTAICE	158
32.6.	LEGEA LUI OHM CU PILA VOLTAICĂ PRIN ELECTROCUTARE	162
32.7.	PILĂ VOLTAICĂ CU ELECTROZI DE CUPRU ȘI ZINC ȘI ELECTROLIT DIN ACID SULFURIC PENTRU ACUMULATORI DE AUTOMOBIL CARE EMITE UN GAZ TOXIC	166
32.8.	DISPOZITIV PENTRU DEMONSTRAREA DEVIATIEI ACULUI MAGNETIC DE UN CURENT PRODUS DE O PILA VOLTAICA FARA DEGAJARE VIZIBILA DE GAZE	169
32.9.	PRODUCEREA SARCINILOR ELECTRICE IN PILA VOLTAICA.....	172
32.10.	PROCEDEU PENTRU STUDIUL PROPAGĂRII ELECTRICITĂȚII SUB FORMĂ DE CURENT ȘI DEMONSTRAREA CĂ NU ESTE TRANSMISĂ PRIN RADIAȚIE	177
32.11.	PROCEDEU PENTRU DEMONSTRAREA PRODUCERII CURENTULUI ELECTRIC CÂND ACȚIUNEA CHIMICĂ ARE LOC ÎNTRE O MOLECULĂ ELEMENTARĂ ȘI UN COMPUS DIN DOUĂ MOLECULE ETEROGENE	179
32.12.	PROPAGAREA ELECTRICITĂȚII ÎN ELECTROLIȚI.....	179
32.13.	OXIDAREA UNUI MILIGRAM DE ZINC.....	182
32.14.	MASURAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A UNEI BATERII	183
32.15.	PILĂ VOLTAICĂ CU DOUA CAPSULE	189
32.16.	PILĂ CU SULFAT DE CUPRU, ELECTROD DE Cu, ȘI SARAMURĂ CU ELECTROD DE Fe.....	191
	PARTEA A II-A CHIMIE CUANTICĂ.....	191
1.	MOLECULA DE HIDROGEN	191
33.	ENERGIA MOLECULEI DE HIDROGEN ÎN MODELUL LEGĂTURII DE VALENȚĂ CU STĂRI IONICE	192

34. OPTIMIZAREA DISTANTEI INTERNUCLEARE PENTRU MOLECULA DE HIDROGEN CU STARI IONICE SI CONSTANTA DE ECRANARE CU METODA LEGATURII DE VALENȚĂ	192
BIBLIOGRAFIE	220
35. OPTIMIZAREA EXPONENTULUI PENTRU MOLECULA DE HIDROGEN CU STĂRI IONICE	221
BIBLIOGRAFIE	247
36. PARTE INSTRUCTIVĂ, ECUATIA ENERGIEI MOLECULEI DE HIDROGEN CU STARI IONICE, CALCULUL FORMULELOR INTEGRALELOR CU REZULTATE NUMERICE GREȘITE,.....	249
BIBLIOGRAFIE	276
37. MINIMUL ENERGIEI MOLECULEI DE HIDROGEN ÎN FUCTIE DE DISTANȚA INTERNUCLEARĂ CA REZULTAT AL VARAȚIEI DIFERITE PE UNITATEA DE DISTANȚĂ A ENERGIEI ELECTRONILOR ȘI AL INTERACȚIEI DINTRE NUCLEE SAU EGALITATEA DERIVATELOR CELOR DOUĂ ENERGII ÎN FUNCȚIE DE DISTANȚA INTERNUCLEARĂ..	277
BIBLIOGRAFIE	281
38. MINIMUL ENERGIEI MOLECULEI DE HIDROGEN CA REZULTAT AL CRESTERII ENERGIEI INTERACȚIUNII ELECTRONILOR SI SCADEREA ACESTEIA DATORITA INTERACȚIUNII DINTRE NUCLEE în funcție DE DISTANTA INTERNUCLEARA II	282
BIBLIOGRAFIE	306
Chapter 2 PROGRAMELE DE CALCUL PENTRU PROGRAMUL MATLAB R2014 a FOLOSITE PENTRU CALCULUL INTEGRALELOR FOLOSITE PENTRU CALCULUL ENERGIEI MOLECULEI DE HIDROGEN	307
Chapter 2 MOLECULAR ORBITAL OF THE ELECTRON AND MOLECULAR SPECTROSCOPY.....	333
Chapter 3 PHOTOCHEMICAL PROCESSES.....	344
Chapter 4 DISOCIATION ENERGIES OF FeX.....	345
Chapter 5 ENERGIA MOLECULEI DE FH.....	349
PHOTO DISSOCIATION AND EXCITATION	367
The maximum of the potential energy in electron transfer reactions when the orbitals of the reacting molecules are not overlapping	369
Chapter 1 MOLECULE NEPOLARE CA SOLVENȚI	372
BIBLIOGRAFIE	374
Chapter 2 MOLECULA DE BH CARACTERIZATĂ PRIN ENERGIA DE LEGĂTURĂ	375
BIBLIOGRAFIE	395
Chapter 3 METODA HARTREE-FOCK APLICATA SUSCEPTIBILITATII MAGNETICE A MOLECULEI DE LiH	412
BIBLIOGRAFIE	418

Chapter 4 STRUCTURA SI ENERGIA MOLECULELOR DE OH SI APA H₂O	419
Bibliografie	421
BIBLIOGRAFIE	439
V.MOLECULA DE H₂SO₄	440
14.REZULTATELE EXPERIMENTALE SI TEORETICE DESPRE STRUCTURA H₂SO₄ SI A SO₄²⁻ – în H₂O	440
BIBLIOGRAFIE	446
IX.APLICAREA TEORIEI LEGATURII DE VALENTA LA DIAMANT	448
BIBLIOGRAFIE	453
Chapter 3 XVII.METODA SI DISPOZITIV PENTRU VERIFICAREA LINIILOR MOLECULELOR DE H₂ , O₂ , H₂O , SI CH₄	455
BIBLIOGRAFIE	498
39. INDEX.....	501
40. BIBLIOGRAFIE	507
41. NOTIȚILE SCRISE DE MÂNĂ DE AUTOR CÂND A SCRIS ACEASTĂ CARTE	523

PARTEA I. CHIMIE CLASICĂ

1. INTRODUCERE

DESCOPERIRILE ALCHIMIȘTILOR S-AU REALIZAT PRIN AMESTECAREA METALELOR ȘI ACIZILOR [1].

CU ACESTE CÂTEVA SUBSTANȚE CHIMICE PE CARE LE VOM PREZENTA ÎN CONTINUARE, NU PUTEM SĂ DESCRIEM CUM AU FOST DESCOPERITE, LA CE

AU FOST FOLOSITE, ȘI CARE AU FOST METODELE PRIN CARE S-AU DETERMINAT PROPRIETĂȚILE LOR FIZICE ȘI CHIMICE, PREZENTĂM DOAR CÂTEVA DATE DESPRE ACESTE PROBLEME, PENTRU A ARĂTA CĂ LE CUNOAȘTE.

DESCOPERIREA PROCEDEULUI DE A AMESTECA SUBSTANȚELE PENTRU A OBȚINE NOI SUBSTANȚE, A LE FIERBE, A LE DISTILA, ȘI A LE ÎNCĂLZI LA FOC, A DUS LA OBȚINEREA MULTOR SUBSTANȚE NOI. PRIN CÂNTĂRIRE S-AU OBȚINUT MASE ȘI DENSITĂȚI DIFERITE ALE NOILOR SUBSTANȚE, ȘI PROPRIETĂȚI CHIMICE DIFERITE.

2. PROTECȚIA ÎMPOTRIVA ACCIDENTELOR CARE POT SĂ PRODUCĂ MOARTEA SAU ÎMBOLNAVIREA

ÎN AFARA DE SUBSTANȚELE CHIMICE, ÎN STARE SOLIDĂ, LICHIDĂ, SAU GAZOASĂ, CARE SUNT DESTINATE PENTRU UZ GOSPODĂRESC CU INSTRUCȚIUNI DE FOLOSIRE, CELELALTE SUBSTANȚE CHIMICE POT SĂ PROVOACE MOARTEA, ÎMBOLNĂVIREA, SAU ORBIREA, PRIN INHALARE, ÎNGHIȚIRE, CONTACT CU PIELEA SAU CU OCHII, SAU POT SĂ PRODUCĂ EXPLOZII DACĂ NU SUNT ȚINUTE ÎN CONDIȚII CORESPUNZĂTOARE, SAU SUNT AMESTECATE. DE ASEMENEA CURENTUL ELECTRIC POATE SĂ PRODUCĂ MOARTEA. LUMINA PEA PUTERNICĂ, PEA INTENSĂ POATE SĂ PRODUCĂ ORBIREA.

3. ELEMENTELE CHIMICE

DESCOPERIREA ELEMENTELOR CHIMICE AFLATE ÎN MATERII PURE, NUMITE NATIVE, ȘI A MOLECULELOR, COMPUSE DIN ELEMENTE CHIMICE, ÎN MATERII FORMATE DIN ACESTE MOLECULE, AMBELE TIPURI DE MATERII GĂSITE ÎN ABUNDENȚĂ LOCALĂ ÎN SCOARȚA TERESTRĂ, S-A REALIZAT TREPTAT PRIN IDENTIFICAREA LOR, INVENTAREA APLICAȚIILOR LOR, ȘI NU SE POT DESPĂRȚII UNA DE CEALALTĂ, PENTRU CĂ NU S-A CUNOSCUȚ DE LA ÎNCEPUT DIN CE ELEMENTE CHIMICE SUNT FORMATE MOLECULELE, ȘI NICI CĂ MOLECULELE SUNT FORMATE DIN ELEMENTE CHIMICE, CEEA CE ÎNSEAMNĂ CĂ NU S-A CUNOSCUȚ CĂ MOLECULELE SUNT COMPUSE DIN ALTE ENTITĂȚI ELEMENTARE, DATORITĂ FAPTULUI CĂ TOATE TECHNOLOGIILE DE

IDENTIFICARE ALE ELEMENTELOR CHIMICE AU FOST INVENTATE ULTERIOR ÎN MOD TREPTAT.

3.1.CUPRUL

EPOCA DE PIATRĂ A FOST DATATĂ DE LA 10800 LA 4250 Î.E.N., ȘI EPOCA DE BRONZ DE LA 2900 LA 2050 Î.E.N. [2].

LA MUZEUL BRĂILEI CAROL I LA SECȚIA ARHEOLOGIE LA GALERIA FOTO SE POT VEDEA [3]:

-MACHETĂ DE LOCUINȚĂ ÎN MINIATURĂ DIN EPOCA NEOLITICĂ DIN PERIOADA ANULIOR 4400-4000 Î.E.N. DIN JUD. BRĂILA [3].

CUPRUL NATIV CONȚINE CUPRU PUR, ȘI ESTE MULT RĂSPÂNDIT ÎN CRUSTA TERESTRĂ, ÎN LAVE VULCANICE SOLIDIFICATE ȘI ÎN ROCI SEDIMENTARE [4].

ROCILE SEDIMENTARE SE FORMEAZĂ PRIN DEPUNEREA MATERIALELOR DIN APĂ [5].

PRELUCRAREA CUPRULUI [6]:

-S-A PRELUCRAT ÎN URMĂ CU 3100 ANI ÎN PERU CU CIOCANUL;

-DIN CUPRU S-AU CONFEȚIONAT UNELTE ȘI FOLII SUBȚIRI;

-A FOST CĂLIT;

-S-A PRELUCRAT AUR;

-OBIECTELE DIN CUPRU AU FOST ACOPERITE CU FOLII DE AUR;

-ULTERIOR CUPRUL A FOST PRELUCRAT PRIN TOPIRE.

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [2].

S-A PRODUS O TRANZIȚIE DE LA EPOCA DE PIATRĂ LA EPOCA BRONZULUI ÎN PARTEA DE VEST A RUSIEI DIN PREZENT, ÎN PERIOADA 2900 Î.E.N.

PĂDURILE DIN NORDUL ȘI ESTUL EUROPEI AU FOST COLONIZATE ÎN DOUĂ VALURI LA SFÂRȘITUL PALEOLITICULUI ȘI ÎNCEPUTUL MESOLITICULUI ÎN PERIOADA DE LA MILENIUL 13 LA MILENIUL 9 Î.E.N..

ÎN MORMINTELE DIN ACEEA ZONĂ, DIN PERIOADA DE LA 2750 LA 2500 Î.E.N., S-AU GĂSIT TOPOARE DIN PIATRĂ CU GAURĂ PENTRU MÂNER, UNELTE DIN PIATRĂ, ȘI VASE DIN CERAMICĂ, ATRIBUITE CULTURII FATYANOVO.

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [7].

CUPRUL ESTE UN METAL OTRĂVITOR. ÎN TIMPURILE ANTICE ATMOSFERA A FOST POLUATĂ DE O VARIETATE DE METALE GRELE.

S-A DESCOPERIT ÎN GHEAȚĂ O CONCENTRAȚIE DE CUPRU DATATĂ CU 7000 ANI ÎN URMĂ, LA ÎNCEPUTUL EPOCII BRONZULUI.

ÎN GROELANDA AU FOST DESCOPERITE EMISII DE CUPRU PROVENITE DIN METALURGIA DE TOPIRE A CUPRULUI, CU O VECHIME DE 2500 ANI, DIN PERIOADA ANILOR DE AUR ALE GRECIEI.

CONCENTRATIA DE CUPRU A CRESCUT ÎN TIMPUL APOGEULUI IMPERIULUI ROMAN, A SCĂZUT ÎN TIMPUL EVULUI MEDIU, ȘI A CRESCUT DIN NOU CU ÎNCEPUTUL REVOLUȚIEI INDUSTRIALE.

ÎN GHEAȚA DIN ANTARCTICA S-A DESCOPERIT O POLUARE A AERULUI DIN TOPIREA METALELOR GRELE CU 5000 ANI ÎN URMĂ.

S-A DETECTAT O POLUARE DIN TOPIREA CUPRULUI CU 5000 ANI ÎN URMĂ, CARE INDICĂ ÎNCEPUTUL EPOCII BRONZULUI.

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [8].

CUPRUL A FOST FOLOSIT LA ÎNCEPUT PENTRU MONEZI ȘI ORNAMENTE CU 8000 ANI Î.E.N.

ÎN JURUL ANILOR 5500 Î.E.N., UNELTELE DIN CUPRU AU AJUTAT CIVILIZAȚIILE SĂ IASĂ DIN EPOCA DE PIATRĂ.

CUPRUL A FOST ALIAT CU STANIUL PENTRU PRODUCEREA BRONZULUI CU APROXIMATIV 3000 ANI Î.E.N.

ÎN STATELE UNITE ALE AMERICII, ÎN GEORGIA, S-A DESCOPERIT O BRĂȚARĂ DE CUPRU, CU O VECHIME DE 3500 ANI.

ELEMENTELE CORESPUNZĂTOARE URMELOR O LEAGĂ DE DEPOZITUL GEOLOGIC DIN REGIUNEA MARILOR LACURI.

ÎN PREZENT, CUPRUL ESTE FOLOSIT ÎN CONSTRUIREA CLĂDIRILOR, GENERAREA ȘI TRANSMISIA PUTERII, MANUFACTURA PRODUSELOR ELECTRICE, ȘI PRODUCEREA UTILAJELOR INDUSTRIALE ȘI VEHICULELOR DE TRANSPORT.

ÎN LUCRĂRILE [7] ȘI [8], ÎNCEPUTUL EPOCII BRONZULUI ESTE DATATĂ LA ACEAȘI PERIOADĂ.

VASE DIN CUPRU AU FOST FOLOSITE ÎN URMĂ CU 4500 ANI ÎN MESOPOTAMIA DE CIVILIZAȚIA SUMERIANĂ [9].

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [10].

CEL MAI VECHI BRONZ CU STANIU DIN GRECIA ARE O VECHIME DE 2600-2700 DE ANI Î.E.N..

ÎN EUROPA CENTRALĂ, CEL MAI VECHI BRONZ CU STANIU DATEAZĂ DIN 2200 Î.E.N..

CUPRUL SE EXTRĂGEA PRIN MINERIT, ÎN EPOCA PREISTORICĂ, DIN ALPI ȘI DIN GRECIA CONTINENTALĂ, ÎNSĂ NU SE CUNOAȘTE PROVENIENȚA STANIULUI.

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [11].

ÎN PENINSULA IBERICĂ, ÎN PERIOADA ANILOR DE LA 3300 LA 2800, METALURGIA CUPRULUI ERA RĂSPÂNDITĂ.

ÎN ACEASTĂ PERIOADĂ MOBILITATEA OAMENILOR ERA MARE, MULȚI INDIVIZI AU FOST ÎNGROPAȚI ÎN LOCAȚII DIFERITE DE CELE ÎN CARE AU CRESCUT.

CONECȘIUNILE DINTRE REGIUNI SUNT ARĂTATE ȘI DE FILDEȘUL ADUS DIN AFRICA, CHIHLIMBARUL ADUS DIN SICILIA, ȘI COJILE DE OUĂ DE STRUȚ DIN AFRICA.

ÎN PENINSULA IBERICĂ, TRANZIȚIA DE LA EPOCA CUPRULUI LA EPOCA BRONZULUI S-A PRODUS LA SFÂRȘITUL MILENIULUI AL TREILEA Î.E.N..

ÎNCEPUTUL EPOCII BRONZULUI ÎN PENINSULA IBERICĂ S-A REALIZAT DE LA ANII 2200 LA 1550 Î.E.N..

OBIECTE DIN CERAMICĂ ȘI METAL CARACTERISTICE AU APĂRUT ÎN ANII 2200 Î.E.N. ÎN SUD-ESTUL IBERIEI.

EXISTA O TEHNOLOGIE DE TURNARE A METALELOR, ȘI ERAU FOLOSITE HAREBALDE.

ÎNTRE ANII 2000 ȘI 1800 Î.E.N. ACEASTĂ CIVILIZAȚIE, EL ARGAR, S-A EXTINS PÂNĂ ÎN CENTRUL SPANIEI.

ARMELE FOLOSITE AU FOST HAREBALDE ȘI PUMNALE.

ÎNTRE ANII 1800 ȘI 1550 Î.E.N., ÎN EL ARGAR SE FOLOSEAU ÎN PLUS UNELTE DE ȘLEFUIT, ȘI EXISTAU MARI ATELIERE.

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [12].

OAMENII AU ÎNCEPUT SĂ TOPEASCĂ CUPRUL CU 6000 ANI Î.E.N. ÎNTR-O REGIUNE DIN ORIENTUL MIJLOCIU, CARE INCLUDE MESOPOTAMIA, EGIPT, IORDANIA, LIBAN, PALESTINA, ISRAEL, SIRIA, TURCIA, IRAN, IRAC, ȘI CIPRU.

BRONZUL ESTE MAI DUR DECÂT CUPRUL.

DIN ACEASTĂ CAUZĂ, BRONZUL A DEVENIT UN METAL MAI BUN PENTRU UNELTE ȘI ARME DECÂT CUPRUL.

REZULTATE ARHEOLOGICE ARATĂ CĂ TRANZIȚIA DE LA CUPRU LA BRONZ A AVUT LOC ÎN JURUL ANILOR 3300 Î.E.N..

BRONZUL ESTE UN ALIAJ DE CUPRU CU STANIU, ALUMINIU, ȘI SAU PLUMB, MAI DUR DECÂT CUPRUL [13].

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [14].

OBIECTE DE BRONZ DIN SECOLELE X-XI ÎEN SUNT EXPUSE LA MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA, ȘI AU FOST DESCOPERITE ÎN ROMÂNIA.

ACESTE OBIECTE DIN BRONZ SUNT DIN EPOCA METALELOR.

ACESTE OBIECTE SUNT:

- SECERI,
- VÂRFURI DE LANCE DEOARECE LANCEA ARE O PARTE DIN LEMN CARE A PUTREZIT,
- TOPOARE,
- OBIECTE DE PODOABĂ,
- DE HARNAȘAMENT FOLOSITE LA CĂLĂRIE ȘI PENTRU MUNCILE CU CAI [14].

LA MUZEUL BRĂILEI CAROL I LA SECȚIA ARHEOLOGIE LA GALERIA FOTO SE POT VEDEA [3]:

- PIESE DE PORT, DE PODOABĂ DIN SEC II-I Î.E.N. DIN JUD. BRĂILA, DINTRE CARE UNELE SUNT GALBENE ASEMĂNĂTOARE CU CUPRUL, BRONZUL, SAU AURUL, ALTELE SUNT ROȘIATICE ASEMĂNĂTOARE CU CUPRUL SAU BRONZUL, ȘI ALTELE SUNT GRI CA FIERUL;
- MONEDĂ GETO-DACICĂ DIN SEC. II-I Î.E.N. DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN JUD. BRĂILA, ROȘII CA CUPRUL;
- CERCEI ȘI VERIGI DIN BRONZ DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN SEC. II-I Î.E.N. DIN JUD. BRĂILA;

-FIBULE DIN BRONZ DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN JUD. BRĂILA DIN SEC. II-I Î.E.N.;

-COIF ATTIC DIN BRONZ DIN MORMÂNTUL ARTISTOCRATIC GETIC DE LA GĂVANI DIN JUD. BRĂILA DIN ANII 350-300 Î.E.N.;

-CLOPOȚEI DIN BRONZ ȘI INEL DE CULOAREA CUPRULUI SAU BRONZULUI DIN MORMÂNTUL ARISTOCRATIC GETIC DIN GĂVANI, JUD. BRĂILA, 350-300 Î.E.N..

DIN CELE PREZENTATE MAI SUS, REZULTĂ CĂ TRANZIȚIA DE LA EPOCA CUPRULUI LA EPOCA BRONZULUI S-A PRODUS DEOARECE BRONZUL ESTE MAI DUR DECÂT CUPRUL [11].

COLONIZATORII DIN SUA AU FOLOSIT MONEZI DE CUPRU [15].

CRESTĂTURILE DIN SĂBIILE DE BRONZ AU ARĂTAT FOLOSIRE LOR ÎN LUPTE ÎN EPOCA BRONZULUI ÎN EUROPA [16].

DIN CELE PREZENTATE MAI SUS ÎN ACEST CAPITOL CONCLUZIA ESTE CĂ, PENTRU GENERAREA EPOCII CUPRULUI, CONDIȚIA NECESARĂ A FOST DESCOPERIREA DEPOZITELOR DE CUPRU NATIV, PE CARE OAMENII L-AU LOVIT CU CIOCANUL AȘA CUM PRELUCRAU PIETRELE ÎN EPOCA DE PIATRĂ, ȘI ATUNCI AU OBSERVAT CĂ POT SĂ-L PRELUCREZE, ȘI ȘI-AU CONFEȚIONAT UNELTE ȘI ARME DIN CUPRU [6], [8], [10].

3.2.FIERUL

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [17].

SE CONSIDERĂ CĂ PRELUCRAREA FIERULUI A FOST DESCOPERITĂ CU 3000 ANI ÎN URMĂ.

VÂNĂTORII-CULEGĂTORI ARCTICI, CU 2000 ANI ÎN URMĂ, AU FOLOSIT OPERAȚII DE PRELUCRAREA FIERULUI LA FEL DE AVANSATE CA SOCIETĂȚILE DE FERMIERI DEPARTE CĂTRE SUD.

ÎN NORD-ESTUL SUEDEI DE ASTĂZI S-AU DESCOPERIT FURNALE ANTICE ȘI GROPI PE CARE EI LE-AU FOLOSIT PENTRU PRELUCRAREA METALELOR.

EI AU PRODUS FIER ȘI OBIECTE DIN METAL MEȘTEȘUGITE.

S-AU DESCOPERIT CATARAME DIN BRONZ, ȘI ALTE OBIECTE, CARE ARATĂ O PRODUCȚIE AVANSATĂ DE FIER ȘI PRELUCRAREA METALELOR.

EI AU SCHIMBET, APARENT, RESURSE ȘI CUNOȘTINȚE LEGATE DE METALURGIE, ȘI DE EXTRAȚIA METALELOR DIN MINEREURI.

GRUPURI S-AU AȘEZAT TIMP SUBSTANȚIAL ÎN LOCAȚII LÂNGĂ RESURSE CRUCIALE, CUM SUNT MINEREURILE PENTRU PROSPECTARE, LEMN NECESAR PENTRU CĂRBUNI, ARGILĂ ȘI PIATRĂ NECESARE CONSTRUIRII FURNALELOR ȘI GROPIILOR DE FOC FOLOSITE ÎN PRODUCȚIA FIERULUI.

MULȚI CERCETĂTORI CONSIDERĂ PRELUCRAREA FIERULUI CA O DESCOPERIRE A MARILOR SOCIETĂȚI AGRICOLE DIN SUD-VESTUL ASIEI CU MAI MULT DE 3000 ANI ÎN URMĂ.

SE CREDE CĂ, DE AICI, ACEASTĂ TEHNOLOGIE S-A RĂSPÂNDIT ÎN ALTĂ PARTE, ȘI A FOST ADOPTATĂ ÎN FORME SIMPLIFICATE ÎN SCANDINAVIA DE NORD ȘI ALTE ARII ARCTICE ÎNTRE ANII 700 ȘI 1600 E.N..

LA SANGIS ÎN SUEDEA S-A DESCOPERIT UN FURNAL PENTRU TOPIREA FIERULUI, DE FORMĂ DREPTUNGHILARĂ, CARE CONSTĂ DINTR-O STRUCTURĂ DE PLĂCI DE PIATRĂ, CU O LATURĂ DESCHISĂ.

ÎNAUNTRU, ÎN PARTE PE STRUCTURĂ, A FOST CONSTRUIT UN PUȚ DE LUT.

ÎN STRUCTURĂ AU FOST FĂCUTE GĂURI PENTRU A SUFLA AER PE CĂRBUNI.

S-A CONSTATAT CĂ PRODUCȚIA DE FIER S-A PRODUS ÎNTRE 200 – 50 Î.E.N..

VÂNĂTORI-CULEGĂTORI AU OCUPAT 500 METRI DE LA FURNAL ÎNTRE ANII 500 Î.E.N. ȘI 900 E.N., UNDE S-AU GĂSIT FRAGMENTE DE CERAMICĂ.

S-AU GĂSIT NUMEROASE OASE DE PEȘTE, ȘI TREI GROPI PENTRU FOC UNDE FIERUL DIN FURNAL A FOST REÎNCĂLZIT ȘI FINISAT.

ACOLO AU FOST DESCOPERITE CÂTEVA OBIECTE DIN FIER ȘI ALTELE DIN OȚEL, O CATARAMĂ DIN BRONZ ȘI REZIDUURI METALICE CU PICĂTURI DE CUPRU PE SUPRAFAȚĂ, CEEA CE SUGEREAZĂ CĂ LA SANGIS AU FOST PRODUSE METALE DIFERITE.

ÎN TIMPUL EPOCII DE FIER, OAMENII AU ÎNCEPUT SĂ-ȘI CONFECTIONEZE UNELTE ȘI ARME DIN FIER [18].

ÎN CHINA, ÎN REGIUNEA XINJIANG, EPOCA FIERULUI A FOST ÎN PERIOADA DE LA 3000 LA 2000 DE ANI ÎN URMĂ, SOCOTITĂ DIN PREZENT [19].

OBIECTE DIN EPOCA FIERULUI, DIN SECOLELE X – VIII ÎNAINTEA EREI NOASTRE, EXPUSE LA MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA, DESCOPERITE ÎN SUDUL ROMÂNIEI, ARATĂ FORMAREA POPORULUI GETO-DAC LA DUNĂREA DE JOS [20].

FIERUL NU ESTE ÎN MOD NECESAR MAI DUR DECÂT BRONZUL [21].

PIETRE DE POLIZAT PENTRU PULVERIZAREA PLANTELOR AU FOST FOLOSITE ÎN EPOCA FIERULUI ÎNTR-O SOCIETATE DIN GHANA ÎN PERIOADA DINTRE ANII 600 E.N. ȘI 1200 E.N. [22].

LA MUZEUL BRĂILEI CAROL I LA SECȚIA ARHEOLOGIE LA GALERIA FOTO SE POT VEDEA [3]:

-INSTRUMENTE DIN FIER DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN JUD. BRĂILA DIN SEC. II-I Î.E.N.;

-CREUZETE DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN JUD. BRĂILA DIN SEC. II Î.E.N.;

-ZĂBALĂ DE CULOARE RUGINIE DIN MORMÂNTUL ARISTOCRATIC GETIC DIN GĂVANI, JUD. BRĂILA, 350-300 Î.E.N., CEEA CE POTE SĂ ÎNSEMNE CĂ POT FI DIN FIER.

ÎN EPOCA CONTEMPORANĂ, LA ÎNTREPRIDAREA SC DUCTIL SA S-AU FABRICAT PLASE SUDATE DIN FIER, ȘI ACUM ACEASTĂ ÎNTREPRINDERE NU MAI PRODUCE [23].

EI CUMPĂRAU FIER DE LA OȚELĂRIA DIN TÂRGOVIȘTE [23].

3.3. ARGINTUL

ÎN PERIOADA ANILOR 2200 Î.E.N. ÎN SUD ESTUL IBERIEI CIRCULAU INELE ȘI BRĂȚĂRI DIN ARGINT [11].

URMĂTOAREA PARTE A LUCRĂRII ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [24].

ÎN CULTURILE ANTICE, ARGINTUL A FOST FOLOSIT PENTRU PRODUCEREA BIJUTERIILOR, TACĂMURILOR, FIGURINELOR, OBIECTELOR PENTRU RITUAL, ȘI MONEZILOR.

METALUL A FOST EXTRAS ÎN ANTICHITATE ÎN MINE ÎN GRECIA, SPANIA, ITALIA, ANATOLIA, CHINA, KOREA, JAPONIA, ȘI AMERICA DE SUD [24]. METALUL ESTE MOALE ȘI SE POATE LUSTRUI SĂ DEVINĂ LUCIOS, ȘI SE POATE PRELUCRA UȘOR PENTRU MEȘTEȘUGIREA BIJUTERIILOR.

ARGINTUL A FOST TOPIT DIN MINEREURI.

MINEREURILE CONȚINEAU MAI PUȚIN DE 1 % ARGINT.

UȘURINȚA DE TOPIRE L-A FĂCUT PROFITABIL DIN EPOCA TIMPURIE A BRONZULUI.

TEHNICILE DE TOPIRE S-AU DEZVOLTAT ÎN PERIOADA CLASICĂ ÎN EUROPA ȘI CHIAR MINEREURI CU CONȚINUT SCĂZUT AU PUTUT FI EXPLOATATE.

ÎN TIMPURILE ROMANILOR, MINEREUL DEJA TRATAT, ZGURA, A PUTUT FI TRATATĂ DIN NOU PENTRU A EXTRAGE MAI MULT ARGINT.

PENTRU A ÎNTĂRI METALUL, DESEORI A FOST ALIAT CU CUPRUL.

ÎN AMERICA, PENTRU MINERITUL ARGINTULUI S-AU SĂPAT PUȚURI VERTICALE.

MINEREUL A FOST SPART, FĂRĂMIȚAT, ȘI TOPIT ÎN CREUZETE DIN LUT.

MAI DEVREME DE ANUL 1400 E.N., ÎN AMERICA DE SUD, CIVILIZAȚIA PRE-INCAȘĂ A AVUT O INDUSTRIE A ARGINTULUI [25].

LA MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA, ÎN COLECȚIA DE NUMISMATICĂ, SE POT VEDEA PIESE REPUBLICANE ȘI IMPERIALE DIN BRONZ ȘI ARGINT DIN IMPERIUL ROMAN, IMPERIUL BIZANTIN, BULGARIA, AUSTRO-UNGARIA ȘI ROMÂNIA [26].

3.4. PLUMBUL

PLUMBUL A FOST DESCOPERIT ÎN ANTICHITATE [27].

PLUMBUL ESTE OTRĂVITOR [28].

ÎN PERIOADA REVOLUȚIEI INDUSTRIALE PLUMBUL A FOST CUNOSCUȚ CA UN UCIGAȘ [29].

VÂRSTA DE FOLOSIRE A PLUMBULUI ESTE 6000 ANI [30].

ANTICI AU ASOCIAT PLUMBULUI ZEITATEA NEPTUN [31].

ÎN LACURILE DIN SUECIA S-A DESCOPERIT O CREȘTERE A CONCENTRAȚIEI DE PLUMB ÎN URMĂ CU 2600 ANI, CARE A CRESCUT PÂNĂ CU 2000 ANI ÎN URMĂ [32].

CREȘTEREA ȘI SCĂDEREA CONCENTRAȚIEI DE PLUMB ÎN SEDIMENTE APARE ÎN TIMPUL CÂND VOLUMUL DE PLUMB PRODUS ÎN LUMEA ANTICĂ A CRESCUT [32].

CREȘTEREA POLUĂRII CU PLUMB A ÎNCEPUT ÎN TIMPUL ÎN CARE GRECIA ANTICĂ A ÎNCEPUT SĂ PRODUCĂ MONEZI DIN ARGINT, CARE S-A OBȚINUT PRIN TOPIREA MINEREULUI DE PLUMB [32].

ÎNTRE ANII 450-950, ÎN AMERICA DE SUD, ÎN CULTURA TIWANAKU/WARI, S-A CONSTATAT O EMISIE DE PLUMB MULT MAI RIDICATĂ DATORITĂ PROCESELOR METALURGICE PENTRU PRODUCEREA ARGINTULUI, MĂSURATĂ ÎN MIEZUL GHEȚARULUI ILLIMANI [33].

NIVELUL DE PLUMB ÎN SÂNGE ADMIS ÎN SUA ESTE 50 – 60 MICROGRAM PER DECILITRU, ȘI CU TOATE CĂ STUDIILE ARATĂ CĂ ACEST NIVEL AJUNGE LA 55 $\mu\text{G/DL}$ PENTRU MUNCITORII CARE LUCREAZĂ ÎN INDUSTRIA PLUMBULUI, ȘI EXISTĂ DOVEZI CĂ SE ÎMBOLNĂVESC ȘI LA NIVEL DE PLUMB ÎN SÂNGE MAI SCĂZUT, STANDARDELE NU CER RETRAGEREA LOR DIN MUNCĂ [34].

ÎN ANII TÂRZII 1800 A FOST RECUNOSCUȚ ÎN SUA CĂ ȚEVILE DE PLUMB FOLOSITE PENTRU APA POTABILĂ SUNT CAUZA OTRĂVIRII CU PLUMB [35].

URMĂTOAREA PARTE A LUCRĂRII ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [36].

O LISTA CU MAI MULTE MINERALE ȘI PĂMÂNTURI A FOST EXPEDIATĂ DIN GERMANIA ÎN ANGLIA. ZĂCĂMINTELE ERAU DIN GERMANIA ȘI UNGARIA. DIN FIECARE ZĂCĂMÂNT A FOST TRIMIS UN SPECIMEN.

PRINTRE ACESTEA ESTE REMARCABIL UN MINEREU DE PLUMB. ÎL FACE REMARCABIL FAPTUL CA NU ESTE AMESTECAT CU NICI UN ALT METAL. ACESTA SE GASEȘTE ÎN DOUA TIPURI. UNUL ESTE UN TIP DE PIATRA CRISTALINĂ [36]. ACESTA ESTE APROAPE TOTUL DIN PLUMB. CELALALT NU ESTE AȘA DE BOGAT ÎN PLUMB. ACESTEA NU SUNT SCOASE DE SUB PĂMÂNT DEOARECE MINELE NU MAI FUNCȚIONEAZA. ELE SUNT STRANSE DE LOCALNICI DIN CE AU ARUNCAT ȘI AU LASAT ÎN AER LIBER ÎNAINȚAȘII LOR.

ȚEVI DE PLUMB AU FOST FOLOSITE ÎN ROMÂNIA PENTRU ALIMENTAREA CU APĂ LA CUVETĂ DINAINTE DE REVOLUȚIA DIN 1989 DIN ROMÂNIA ȘI PÂNĂ ÎN PREZENT.

3.5.SULFUL

DEOARECE SUNTEM NEPREGĂTIȚI, NU ȘTIM DACĂ SULFUL NATIV ESTE TOXIC.

URMĂTOAREA PARTE A LUCRĂRII ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [37].

SULFUL A FOST DESCOPERIT ÎNAINTE DE CONSTRUCȚIA PIRAMIDELOR DIN EGIPT.

SULFUL ESTE UN MINERAL DE CULOARE GALBEN STRĂLUCITOR.

SE TOPEȘTE LA O TEMPERATURĂ PUȚIN PESTE PUNCTUL DE TOPIRE AL APEI.

SULFUL ARE DOUĂ STRUCTURI, CU DOUĂ TEMPERATURI DE TOPIRE DIFERITE.

O TEMPERATURĂ DE TOPIRE ESTE 113 °C, ȘI A DOUA ESTE 119 °C.

DIN ACEASTĂ CAUZĂ, SULFUL NU ESTE COMPLET TOPIT, PÂNĂ NU SE ATINGE ULTIMA TEMPERATURĂ.

O BUCATĂ DE SULF PUR SE POATE RUPE UȘOR CU MÂNA.

SULFUL NATIV, ÎN COMBINAȚIE CU ALTE ELEMENTE, SE GĂSEȘTE ÎN DEPOZITE NATURALE.

CEL MAI MASIV DEPOZIT DE SULF ESTE ÎN SICILIA.

SE EFECTUA MINERITUL SULFULUI ÎN ZONELE VULCANICE, ÎNSĂ ASTĂZI NU SE MAI PRACTICĂ.

ACEST MINERIT SE EFECTUA ÎN SPECIAL ÎN JAPONIA.

UN ANUMIT COMPUS AL SULFULUI ARE MIROSUL DE OUĂ STRICATE.

NU EXISTAU MULTE APLICAȚII ALE SULFULUI ÎN ANTICHITATE.

PRIMA APLICAȚIE RAPORTATĂ A SULFULUI ESTE ÎN ÎNREGISTRAREA MEDICALĂ NUMITĂ EBERS PAPYRUS, DIN ANUL 1550 Î.E.N., ÎN CARE SULFUL A FOST UN INGREDIENT ACTIV ÎNTR-O ALIFIE PENTRU OCHI ÎN TIMPUL FARAONILOR ÎN PERIOADA TIMPURIE A NOULUI REGAT.

SINGURUL RAPORT ANTIC MAJOR VINE DE LA PLINY, 23 – 79 E.N., DIN IMPERIUL ROMAN.

ELEMENTUL GALBEN ESTE AMINTIT ÎN ENCICLOPEDIA LUI ISTORIA NATURALĂ.

APLICAȚIILE ROMANILOR AU FOST: CA MEDICAMENT, PENTRU ALBIREA LÂNII, ȘI PENTRU FITIL PENTRU LAMPĂ.

PLINY A NUMIT SULFUL ROMBIC, DE LA FORMA CRISTALELOR LUI.

DE ASEMENEA EL L-A MAI NUMIT APYRON, CARE ÎNSEMNĂ CĂ NU ESTE INFLAMABIL.

ROMANII EXTRĂGEAU CEA MAI MARE PARTE DIN MINERIT DIN INSULA GRECEASCĂ MELOS, ȘI DIN CIPRU.

ÎNAINTE DE PLINY, LITERATURA GREACĂ NU SPUNEA MULTE DESPRE ACEST ELEMENT.

ARISTOTEL A MENȚIONAT SULFUL, ÎNSĂ NU ÎN SENSUL TEHNIC.

CEA MAI TIMPURIE CARTE DESPRE MINERALOGIE A FOST A ELEVULUI LUI THEOPHRATSTUS, 371 – 286 Î.E.N., NUMITĂ: DESPRE PIETRE.

ELEVUL LUI, STRATO DE LAMPSACUS, 290 Î.E.N., ÎN CARTEA LUI DESPRE INDUSTRIA DE MINERIT A GRECIEI, A GREȘIT DISCUȚIA DESPRE SULF.

THEOPHRASTUS SCRIE DESPRE CINABRU, UN DERIVAT AL SULFULUI, UN COMPUS AL SULFULUI CU UN ALT ELEMENT CHIMIC.

EL DESCRIE O REACȚIE A ACESTUI MATERIAL: CÂND CINABRU ESTE FRECAT CU OȚET ÎNTR-UN MOJAR DIN CUPRU, SE PRODUCE MERCUR PUR.

ACEASTĂ REACȚIE ESTE PRIMA REACȚIE CHIMICĂ DOCUMENTATĂ:

CINABRU + MOJAR DIN CUPRU $\rightarrow$ MERCUR + O ALTĂ SUBSTANȚĂ. (1)

DESCOPERITORUL CINABRULUI S FOST CALLIAS DIN ATENA.

EL A SPERAT CA PRIN ARDERA CINABRULUI SĂ PRODUCĂ AUR.

NATURA STRĂLUCITOARE A ACESTUI MATERIAL L-A DUS LA ACEASTĂ CONCLUZIE.

CINBARUL ARE O CULOARE GALBEN AURIU, CARE A CONDUS LA CONCLUZII FALSE.

PLINY A DESCRIS EXTENSIV INDUSTRIA DE CINBAR.

SURSA MAJORĂ DE CINBAR A ROMANILOR A FOST ÎN SPANIA.

ROMANII L-AU FOLOSIT CA PIGMENT.

SULFUL ARUNCAT ÎN FOC ARDE CU O FLACĂRĂ ALBASTRĂ, ȘI EMANĂ UN MIROS ÎNȚEPĂTOR.

ARDEREA SULFULUI ESTE CANDIDATUL PENTRU PRIMA REACȚIE CHIMICĂ REALIZATĂ DE OM.

ESTE POSIBIL CA UN CHIMIST DIN EPOCA DE PIATRĂ SĂ FI ARUNCAT SULF ÎN FOC, ȘI SĂ FI DESCOPERIT ACEASTĂ REACȚIE.

CUVÂNTUL SULFUR, DIN ENGLEZĂ, PROVINE DIN CUVÂNTUL LATIN SULFURIUM, CARE ÎNSEAMNĂ PIATRA CARE ARDE.

SULFUL A FOST NUMIT DE ANTICI LOADSTONE [38].

ULISE LE-A CERUT SLUJITORILOR SĂ ARDĂ SULF ÎN PALATUL REGAL CA ELEMENT PURIFICATOR ÎN CARTEA ODISEA DIN LITERATURA ANTICĂ [39].

3.6.ANTOMONIU

ANTIMONIUL ESTE CUNOScut DIN TIPURI BIBLICE [40].

GRECII ANTICI CLASICI ȘI ALTE NAȚIUNI ANTICE AU POSEDAT SULFATUL DE ANTIMONIU NUMIT STIBITE, CARE A FOST EXTENSIV FOLOSIT PENTRU COSMETICĂ [41].

3.7.OLĂRITUL

S-A DESCOPERIT CĂ OLĂRITUL S-A INVENTAT CU 20000 DE ANI ÎN URMĂ DIN PREZENT, ȘI OALELE AU FOST FOLOSITE ȘI PE FOC [42].

DUPĂ CUM AM PREZENTAT MAI SUS, INVENȚIA OLĂRITULUI ESTE MAI VECHE CU 10000 DECÂT S-A CUNOScut, AȘA CUM ARATĂ DESCOPERIRILE DIN SUDUL CHINEI [43].

ÎN NORDUL ȘI ESTUL EUROPEI S-AU PRODUS OBIECTE DEN LUT ÎN PERIOADA MEZOLITICULUI, PÂNĂ LA ÎNCEPUTUL MILENIULUI 5 ȘI AL MILENIULUI 4 Î.E.N. [2].

CU 3000 DE ANI ÎN URMĂ DIN PREZENT, ÎN EPOCA BRONZULUI, ÎN BRITANIA, SE PRACTICA OLĂRITUL DIN LUT SAU ARGILĂ PENTRU CONFEȚIONAREA CĂNILOR, OALELOR, ȘI BORCANELOR PENTRU DEPOZITAREA ALIMNTELOR [44].

OBIECTE OBȚINUTE DIN MODELAREA LUTULUI, FĂRĂ ROATA OLARULUI, DESTINATE PENTRU UZ CASNIC, VÂNĂTOARE, ȘI PESCUIT, OBIECTE DE PORT ȘI PODOABĂ, ARATĂ COMUNITĂȚI UMANE, DIN SUDUL ROMÂNIEI, DIN MILENIILE V – IV ÎNAINTEA EREI NOASTRE, CU REGULI RESPECTATE CU STRICTEȚE, ȘI SUNT EXPUSE LA MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA [20].

SUNT EXPUSE ÎN ACEST MUZEU FRAGMENTE CERAMICE ȘI VASE DIN MILENIILE V-IV ÎNAINTEA EREI NOASTRE DIN ZONA CIULNIȚA [20].

ÎN CIVILIZAȚIA EL ARGAR DIN SPANIA, ÎNTRE ANII 2000 ȘI 1800 Î.E.N. SE FOLOSEAU VASE DIN CERAMICĂ [11].

OBIECTE DE OLĂRIT SE REALIZAU CU MÎNA ȘI LA ROATĂ ÎN TIMPUL CIVILIZAȚIEI GETO-DACICE, ȘI SUNT EXPUSE LA MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA [14].

AMFORE ȘI CERAMICĂ MODELATĂ LA ROATĂ, DESCOPERITE ÎN SUDUL ROMÂNIEI, DIN SECOLELE III – II ÎNAINTEA EREI NOASTRE, ARATĂ RAPORTURI CULTURALE ÎNTRE LUMEA GETO-DACĂ ȘI CEA ELENISTICĂ SAU ROMANĂ, ȘI SUNT EXPUSE LA MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA [20].

ÎN CIVILIZAȚIA MAYA SE CONFEȚIONAU OBIECTE CRESTATE DIN CERAMICĂ [9].

LA MUZEUL BRĂILEI CAROL I SUNT EXPUSE [3]:

- VAS DIN LUT DIN JUD, BRĂILA DIN EPOCA NEOLITICĂ, CCA 4799-4500 Î.E.N.;
- ULCIOR DIN LUT SEC IV Î.E.N. DIN JUD. BRĂILA;
- ULCIOR DIN LUT SEC II – III Î.E.N. DIN JUD. BRĂILA;
- SKYPHOS ELENISTIC DIN PERGAM SEC II Î.E.N. TOATE DIN JUD. BRĂILA;
- CASTRON DIN LUT DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN SEC. II Î.E.N. DIN JUD. BRĂILA;
- RÂȘNIȚĂ DE TIP ELENISCTICO-ROMAN DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN SEC. II Î.E.N. DIN JUD. BRĂILA;

-CANĂ DIN LUT CU TOARTĂ DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN JUD. BRĂILA DIN SEC. I Î.E.N.;

-BORCAN DIN LUT DIN AȘEZAREA GETO-DACICĂ DE LA GRĂDIȘTEA DIN JUD. BRĂILA DIN SEC. I Î.E.N.;

-OENOCHOE GRECEASCĂ SAU ULCIOR DIN LUT DIN HISTRIA 500 Î.E.N., DIN MORMÂNTUL DE INCINERAȚIE GETICĂ DIN JUD. BRĂILA 350-270 Î.E.N., CU O DUNGĂ SIMPLĂ ȘI DOUĂ PERECHI DE DUNGI DE JUR ÎMPREJUR, ȘI UN MODEL ONDULAT DE JUR ÎMPREJUR, COLORATE ÎN MARO.

3.8. ZINC

ACEASTĂ PARTE ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [45].

ZINCUL ARE CULOAREA ARGINTIU-ALB.

ZINCUL A FOST CUNOSCUȚ DE ROMANI ÎNSĂ A FOST RAR FOLOSIT.

PRIMA DATĂ A FOST RECUNOSCUȚ CA METAL ÎN INDIA.

REZIDUURILE DE ZINC TOPIT DE LA ZAWAR, ÎN RAJASTHAN, INDIA, ARATĂ CĂ A FOST RAFINAT PE SCARĂ LARGĂ ÎN PERIOADA ANILOR DE LA 1100 PÂNĂ LA 1500.

ÎN 1668, METALURGISTUL FLAMAND P. MORAS DE RESPOUR, A RAPORTAT EXTRACȚIA ZINCULUI DINTR-UN MATERIAL.

ÎN MINEREU, ZINCUL ESTE COMBINAT CU ALTE ELEMENTE CHIMICE.

ACESTĂ PARTE ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [46].

ZINCUL METALIC A APĂRUT ÎN ISTORIE MULT MAI TÂRZIU DECÂT CELELALTE METALE COMUNE.

CUPRUL, PLUMBUL, STANIUL, ȘI FIERUL SE POT OBȚINE CA METALE TOPITE PRIN ÎNCĂLZIREA MINEREURILOR LOR CU CĂRBUNI, UN PROCES NUMIT REDUCERE, ÎN FURNALE CU PUȚ, CARE S-AU DEZVOLTAT TIMPURIU ÎN ISTORIE.

MINEREUL DE ZINC NU SE POATE REDUCE CU CĂRBUNE PÂNĂ CÂND TEMPERATURA NU AJUNGE MULT PESTE PUNCTUL DE FIERBERE AL METALULUI.

DIN ACEASTĂ CAUZĂ, FURNALELE DEZVOLTATE PENTRU TOPIREA ALTOR METALE NU AU PUTUT PRODUC ZINC.

MICI CANTITĂȚI DE ZINC METALIC SE POT GĂSI CÂTEODATĂ ÎN REZIDUURILE FURNALELOR DE PLUMB.

SUNT PROBE CĂ GRECII ANTICI CUNOȘTEAU EXISTENȚA ZINCULUI, ȘI L-AU NUMIT ARGINT FALS.

ÎNSĂ EI NU AVEAU NICI O METODĂ PENTRU PRODUCEREA LUI ÎN CANTITATE.

ROMANII, ÎN ANUL 200 Î.E.N., PRODUCEAU CANTITĂȚI CONSIDERABILE DE ALAMĂ, UN ALIAJ DE ZINC ȘI CUPRU, PRIN ÎNCĂLZIREA ÎN CREUZETE A UNUI AMESTEC DE UN MINERAL DE ZINC ȘI CĂRBUNI, ACOPERIT CU BUCĂȚI DE CUPRU.

DIN 15 OAMENI CARE AU MUNCIT ÎNTR-O CAMERĂ DE GALVANIZARE CU ZINC A UNEI PLĂCI METALICE ÎNTRE 6 ȘI 22 ANI, 12 S-AU ÎMBOLNĂVIT DE ULCER DUODENAL [47].

3.9.ACIDUL SULFURIC

PRIN EXPERIMENTELE EFECTUATE CU PIRITĂ, UN COMPUS AL SULFULUI, UN ALCHEMIST, BASIL VALENTINE, ÎN SEC. AL 15-LEA, A DESCOPERIT ACIDUL

SULFURIC, UN PRODUS DEJA CUNOSCUȚ PE TIMPUL ALCHEMISTULUI ISLAMIC GEBER, 721 – 815 E.N. [37].

ACIDUL SULFURIC SE POATE FABRICA DIN PIRITĂ SAU SULF [48].

ÎN EVUL MEDIU, ACIDUL SULFURIC A FOST FOLOSIT PENTRU A CURĂȚA ȘI A TRATA METALELE [37].

ÎN SEC. AL 19-LEA, CEREREA INDUSTRIALĂ DE ACID SULFURIC A CRESCUT FOARTE MULT [37].

ACIDUL SULFURIC A DEVENIT SUBSTANȚA CHIMICĂ DOMINANTĂ A ÎNTREGII LUMI [37].

PARTEA URMĂTOARE ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [49].

ROBERT MORAY A COMUNICAT SOCIETĂȚII REGALE METODA PRIN CARE DIN ACEST MINERAL SE EXTRAG PUCIOASA ȘI VITRIOLUL, ȘI ACEST MINERAL A FOST PROCURAT DE LA LIEGE.

MINERALUL DIN CARE SE EXTRAGE PUCIOASA ȘI VITRIOLUL, CONȚINE ȘI MINEREU DE PLUMB [49]. PLUMBUL SE SCOATE DIN MINERAL.

MINELE SUNT ASEMĂNĂTOARE CU MINELE DE CARBUNI DIN ANGLIA. APA SE SCOATE DIN MINE CU POMPELE PUSE ÎN FUNCȚIUNE CU AJUTORUL APELOR DE SUPRAFAȚĂ.

PUCIOASA ȘI ACIDUL SULFURIC SE OBȚIN DINTR-UN MINERAL OBȚINUT DE LA LIEGE.

PENTRU A PRODUCEREA PUCIOASA, PIATRA SAU MINEREUL A FOST SPARTĂ ÎN BUCĂȚI MICI, PE CARE LE-AU PUS ÎN CREUZETE REALIZATE DIN PĂMÂNT. ÎNTRAREA ERA DE UN PICIOR PATRAT. FIECARE CREUZET AVEA PROPRIUL SAU FURNAL SAU CUPTOR. FURNALELE ERAU ASTFEL REALIZATE ÎNCĂȚ FOCUL SĂ VINĂ PEȘTE TOATE. CÂND PUCIOASA A FOST DIZOLVATĂ DE VIOLENȚA CALDURII, A CURS PE LA CAPATUL CREUZETULUI ÎNTR-UN GAT ȘI ÎNTR-UN RECIPIENT, COMUN PENTRU TOATE CREUZETELE. PENTRU RĂCIREA PRODUSULUI, CARE ESTE SULF DIZOLVAT, PEȘTE RECIPIENTUL CARE-L

CONȚINE TRECE UN JET DE APA PRIN CONDUCTE. NOI NU AM ÎNȚELES EXACT, ÎNSA PRESUPUNEM CA TOPIREA SULFULUI A DURAT PATRU ORE.

DUPA TERMINAREA ACESTUI PROCES, CENUȘA ESTE SCOASA CU FIER CALIT ȘI PUSA ÎNTR-UN REZERVOR DE FIER.

VITRIOLUL, NUMIT ACID SULFURIC, ESTE PRODUS DIN CENUȘA EXTRASA DIN CREUZETE.

PENTRU FABRICAREA VITRIOLULUI, NUMIT ȘI COPERAS, ȘI ACID SULFURIC, SE FACE ÎN PĂMÂNT O GROAPĂ PATRATĂ, DE PATRU PICIOARE ADÂNCIME ȘI OPT PICIOARE PĂTRAȚI. SE ARUNCA CENUȘA OBTINUTĂ ÎN ACEASTA GROAPĂ, SE ACOPERĂ ACEASTA CU APA ORDINARĂ, ȘI SE LASĂ 24 DE ORE, SAU PÂNĂ UN OU PLUTEȘTE PE LICHID, CEEA CE ESTE UN SEMN CA ESTE DESTUL DE PUTERNIC. LICHIDUL A FOST INTRODUS ÎN REZERVOARE DE PLUMB PRIN CONDUCTE. REZERVORUL DE PLUMB A FOST DE 4 ȘI ½ PICIOARE ÎNĂLȚIME, 6 PICIOARE ÎNĂLȚIME, ȘI TREI PICIOARE LĂȚIME [49]. REZERVOARELE AU FOST PUSE PE BARE DE FIER GROASE. ÎN ACESTE REZERVOARE, LICHIDUL ESTE FIERT 24 DE ORE, SAU MAI MULTE, CU UN FOC PUTERNIC DE CARBUNI, ÎN FUNCȚIE DE TĂRIA LICHIDULUI. DUPĂ CE A FOST FIERT, FOCUL SE ÎNLĂȚURĂ ȘI LICHIDUL ESTE RĂCIT. DUPĂ FIERBERE, LA LICHIDUL OBTINUT SE ADĂUGĂ O CANTITATE DE APA MĂDĂ EGALĂ CU ACEEA A LICHIDULUI RĂMĂS. LICHIDUL OBTINUT ESTE DRENAT PRIN DISPOZITIVE DIN LEMN, PRIN GĂURILE DIN REZERVOARELE DE PLUMB, ÎN ALTE REZERVOARE, CARE AU TREI PĂȘI ADÂNCIME, ȘI PATRU PĂȘI LUNGIME, ÎNDE RĂMÂN 14 SAU 15 ZILE, SAU ATĂTĂ TIMP PÂNĂ CÂND COPERAS SE SEPARĂ DE APA, ȘI DEVINE CA GHEAȚĂ ȘI DUR. APA RĂMASĂ ESTE APA MĂDĂ [49]. CENUȘA RĂMASĂ ESTE CAPUL DE MORT.

PENTRU A PUTEA LUCRA ÎN MINE, ESTE NECESARĂ INTRODUCEREA AERULUI PROASPĂT DE LA SUPRAFAȚĂ ȘI EVACUAREA VAPORILOR [50]. PENTRU A REZOLVA ACEASTĂ PROBLEMĂ S-A GĂSIT O SOLUȚIE [50].

3.10. MERCURUL

ELEMENTUL CHIMIC MERCUR ESTE UN LICHID ARGINTIU STRĂLUCITOR [51].

SIMBOLUL LUI CHIMIC, HG, VINE DIN CUVÂNTUL GRECESC HYDRARGYRUM, CARE ÎNSEAMNĂ ARGINT VIU, SAU ARGINT RAPID [51].

PRINCIPALUL MINEREU ÎN CARE SE GĂSEȘTE MERCURUL NATURAL ESTE CINABRUL [52].

S-A DESCOPERIT MERCUR ÎNTR-UN MORMÂNT EGIPTEAN DIN ANUL 1500 Î.E.N. [51].

CU 4500 ANI ÎN URMĂ, ÎN CIVILIZAȚIA MESOPOTAMIANĂ, SE FOLOSEA MERCUR PENTRU ÎMBĂLSĂMARE [9].

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [53].

ÎNTR-O REGIUNE CARE APARTÎNEA VENEȚIEI A FOST EXTRAS MERCUR DIN MAI MULTE MINE. ACEST MINERAL SE SAPA CU TARNACOPUL. CEA MAI MARE PARTE ESTE TARE CA PIATRA. EI AU URMARIT VENELE, FILOANELE [53]. ARE GREUTATE MAI MARE DECAT PIATRA. ACEASTA AVEA CULOAREA FICATULUI, BORDO, SAU ACEEA A CROCUS METALLORUM. ERA, DE ASEMENEA, ȘI UN PAMANT MOALE, ÎN CARE SE VEDEA MERCUR ÎN BELȘUG ÎN MICI PARTICULE. DE ASEMENEA, ÎN ACESTE MINE SE GASEAU PIETRE ROTUNDE CA FLINTUL, DE MAI MULTE MARIMI, CARE SEAMANA CU GLOBURILE DE PAR VAZUTE DES ÎN ANGLIA, SCOASE DIN BURȚILE OILOR.

AU FOST VAZUȚI BARBAȚI CARE AU LUCRAT MAI PUȚIN DE 6 ORE PE ZI, MAI PUȚIN DE ȘASE LUNI ÎN MINA, ȘI AU DEVENIT PARALITICI. EI NU AU PUTUT SĂ DUCĂ UN PAHAR PE JUMĂTATE PLIN CU VIN LA GURA CU AMBELE MAINI FĂRĂ SĂ-L SCAPĂ ȘI SĂ-L VERSE, DEȘI LE PLĂCEA.

ÎN ACESTE MINE ERAU DE ASEMENEA MAI MULTE PIETRE, CARE PAREA CĂ AU UN CONȚINUT DE AUR. ÎNSĂ, DUPĂ ANALIZELE EFECTUATE NU S-A GĂSIT AUR ÎN ELE. O PARTE DINTRE ACESTE PIETRE ROTUNDE AVEAU

DENSITATE FOARTE MARE, ȘI ERAU IMPREGNATE CU MERCUR. ALTELE AVEAU DENSITATE MICA, ȘI CONȚINEAU PUȚIN MERCUR, SAU DE LOC.

OBȚINEREA MERCURULUI A FOST URMATOAREA: PAMANTUL A FOST PUS IN CUTII CU FUNDUL DIN PLASA DE SARMA, CU OCHIUL PLASEI DE GROSIMEA DEGETULUI. CUTIA A FOST PUSA SUB UN JET DE APA PANA CAND A TRECUT TOTUL PRIN SITA. PAMANTUL CARE A TRECUT A FOST PUS IN A DOUA SITA ȘI PRELUAT DE AL DOILEA OM. ASTFEL, PAMANTUL A FOST TRECUT PRIN ZECE SAU DOUASPREZECE SITE. OCHIURILE SITELOR ERAU DESCRESCATOARE CATRE CAPATUL ȘIRULUI. ÎN ULTIMELE SITE MERCURUL ERA IN PROPORȚIE MARE. PAMANTUL RAMAS IN SITE ȘI PUS DEOPARTE A FOST ZDROBIT ȘI OPERAȚIA A FOST REPETATA. PAMANTUL FIN CARE A RAMAS, ȘI DIN CARE NU SE MAI POATE SPALA MERCUR, A FOST PUS IN REZERVOARE DE FIER. FOCUL A FORȚAT MERCURUL IN RECIPIENTE.

APA ERA SCOASA DIN MINE CU MAI MULTE POMPE, CARE ERAU PUSE IN MIȘCARE DE ROȚI MARI, CARE ERAU PUSE IN MIȘCARE DE JETURI DE APA DRENATE DE PE MUNȚI.

3.11. CĂRBUNELE

CĂRBUNELE A FOST EXTRAS DIN MINE ÎN ANGLIA [49].

3.12. STICLA

EGIPTENII AVEAU ÎNDEMÂNARE PRACTICĂ ÎN PRELUCRAREA STICLEI, ÎNSĂ NU A REZULTAT NICI UN SISTEM AL CHIMIEI [54].

STICLA OBSIDIANĂ A FOST FOLOSITĂ DE SOCIETĂȚILE DIN EPOCA DE PIATRĂ DEOARECE SE RUPE ÎN LUNGUL UNOR LATURI ASCUȚITE, CEEA CE O

FACE IDEALĂ PENTRU UNELTE DE TĂIAT ȘI ARME [55]. STICLA OBSIDIANĂ ESTE O STICLĂ VULCANICĂ, ESTE PRODUSĂ NATURAL DIN LAVA EMANATĂ CARE SE RĂCEȘTE RAPID [56].

DATELE DE PRODUCEREA STICLEI AU CEL PUȚIN 6000 DE ANI VECHIME, MULT ÎNAINTE CA OAMENII SĂ FI DESCOPERIT CUM SĂ TOPEASCĂ FIERUL [55]. EVIDENȚE ARHEOLOGICE ATESTĂ CĂ PRIMA STICLĂ SINTETICĂ A FOST PRODUSĂ ÎN LIBAN ȘI COASTA DE NORD A SIRIEI, MESOPOTAMIA SAU EGIPTUL ANTIC [55]. CELE MAI VECHI OBIECTE DIN STICLĂ, AU FOST DIN MIJLOCUL MILENIULUI AL TREILEA Î.E.N., ȘI AU FOST BOABE, PROBABIL CĂ AU FOST CREATE ÎNȚIAL ACCIDENTAL CA PRODUSE ALE METALURIGIEI, SAU ÎN TIMPUL PRODUCERII FAIANȚEI, UN MATERIAL PRE-GLASS PRODUS ÎNTR-UN PROCES SIMILAR CU GEAMUL [55]. STICLA VECHIE A FOST RAREORI TRANSPARENTĂ ȘI, DESEORI, CONȚINEA IMPURITĂȚI ȘI IMPERFECȚIUNI [55], ȘI TEHNIC ESTE MAI DEGRABĂ FAIANȚĂ DECÂT STICLĂ, CARE NU A APĂRUT DECÂT ÎN SECOLUL 15 E.N. [55].

AU FOST ESCAVATE GRĂUNȚE DE STICLĂ ROȘU-PORTOCALIU DIN CIVILIZAȚIA DIN VALEA INDUSULUI DIN PERIOADA 1700 Î.E.N., POSIBIL MAI VECHI DIN 1900 Î.E.N., CEEA CE DEMONSTREAZĂ PRODUCȚIA DE STICLĂ DIN ACEEA PERIOADĂ, CARE A APĂRUT ÎN MESOPOTAMIA ÎN 1600 Î.E.N. ȘI ÎN EGIPT ÎN 1500 Î.E.N. [55]. EPOCA TÂRZIE A BRONZULUI A CUNOSCUȚ O CREȘTERE RAPIDĂ A TEHNOLOGIEI PRODUCERII STICLEI ÎN EGIPT ȘI ASIA DE WEST [55]. DESCOPERIRILE ARHEOLOGICE DIN ACEASTĂ PERIOADĂ INCLUD LINGOURI COLORATE DE STICLĂ, CEȘTI ȘI CUPE, ȘI GRĂUNȚE SAU BILE [55]. PRODUCȚIA ANTICĂ DE STICLĂ A FOST BAZATĂ PE TEHNICILE DE POLIZARE ÎMPRUMUTATE DIN PRELUCRAREA PIETREI, CA POLIZAREA ÎN STARE RECE [55].

LA MUZEUL BRĂILEI CAROL I LA SECȚIA ARHEOLOGIE LA GALERIA FOTO SE POT VEDEA [3]:

-MĂRGELE DIN STICLĂ, DE CULOARE MARO OPAȚE, DINTR-O AȘEZARE GETO-DACICĂ DIN SEC. II-I Î.E.N. DIN JUD BRĂILA;

-MĂRGRLR DIN STICLĂ DINTR-UN MORMÂNT ARISTOCRATIC GETIC DIN JUD. BRĂILA 350-300 Î.E.N., COLORATE LA FEL SI ÎN INTERIOR CA ȘI ÎN EXTERIOR, CEEA CE POATE SĂ ÎNSEMNE CĂ SUNT DIN STICLĂ.

4. DEPOZITELE NATURALE DE SUBSTANȚE

COMPOZIȚIA, STRUCTURA, ȘI FORMAREA DEPOZITELOR DE SUBSTANȚE NATIVE, SAU COMBINATE CU ALTE ELEMENTE CHIMICE ALE PĂTURII DE SUPRAFAȚĂ ALE PĂMÂNTULUI, ALE CRUSTEI TERESTRE, ESTE STUDIATĂ DE GEOLOGIE [5].

A FOST STUDIATĂ O ADÂNCIME DE 14 KM A CRUSTEI TERESTRE [5].

GEOLOGIA A APĂRUT ÎN PALEOLITIC PENTRU EXTRAGEREA SILEXULUI, A ARGILEI, ȘI A AVNSAT ÎN EPOCA METALELOR [5].

ETAPA ȘTIINȚIFICĂ A GEOLOGIEI S-A DEZVOLTAT ÎN SECOLELE XVII-XVIII [5]. ÎN ACEASTĂ ETAPĂ S-A DEZVOLTAT MINERALOGIA, ȘTIINȚA MINERALELOR [5].

ÎN ULTIMA JUMĂTATE DE SECOL S-AU DEZVOLTAT URMĂTOARELE LATURI ALE GEOLOGIEI: SEDIMENTOLOGIA, CARE ESTE FORMAREA ȘI EVOLUȚIA SEDIMENTELOR ÎN MĂRI ȘI PE CONTINENTE, ȘI GEOCHIMIA, CARE ESTE COMPOZIȚIA CHIMICĂ A ROCILOR ȘI MINERALELOR [5].

ÎN EPOCA MODERNĂ S-A DEZVOLTAT COSMOGEOLOGIA, CARE ESTE ALCĂTUIREA CORPURIILOR COSMICE DIN SISTEMUL SOLAR [5].

GEOLOGUL COLECTEAZĂ EȘANTIOANE PE TEREN CARE SUNT ANALIZATE ÎN LABORATOR, ȘI FOLOSEȘTE BUSOLA GEOLOGICĂ, CARE DETERMINĂ ORIENTAREA CONCENTRAȚIEI MINERALELOR PRIN CRUSTA TERESTR [5].

GEOLOGIA S-A PREDAT DE LA ÎNFIINȚAREA UNIVERSITĂȚILOR DIN ROMÂNIA: UNIVERSITATEA DIN IAȘI ÎN ANUL 1862, ȘI UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI ÎN ANUL 1864 [5].

ROCILE SEDIMENTARE SE FORMEAZĂ ÎN ZONA DE INTERACȚIUNE DINTRE APĂ, AER, STRUCTURILE BIOLOGICE, ȘI PĂMÂNTUL [5].

ÎN ZONELE CONTINENTALE CEL MAI PUTERNIC ACȚIONEAZĂ APA, GHEAȚA, ȘI AERUL [5].

APELE CURGĂTOARE PRODUC DEZAGREGAREA ROCILOR PREEXISTENTE [5]. PARTICULELE REZULTATE ÎN APĂ SE DEPUN PRIN CĂDERE GRAVITAȚIONALĂ [5]. ACESTE PROCESE EXPLICĂ FORMAREA SEDIMENTELOR [5].

5. ALCHEMIA

DERIVATA SULFULUI, CINBARUL, ȘI SULFUL, AMBELE DE CULOARE GALBENĂ, A CĂLĂUZIT UN GRUP DE OAMENI DE ȘTIINȚĂ, FILOZOFI, ÎNTREPRINZĂTORI, ȘI VISĂTORI, DIN EVUL MEDIU, NUMIȚI ALCHEMIȘTI, SĂ ÎNCERCE OBȚINEREA AURULUI [37].

ALCHEMIA ESTE O PRACTICĂ ANTICĂ ÎN CARE SCOPUL A FOST FOLOSIREA UNOR REȚETE ȘI UNOR MATERIALE TRANSFORMATIVE PENTRU A CREA SUBSTANȚE PREȚIOASE [57].

OBȚINEREA BRONZULUI SE FACE PRIN AMESTECAREA UNOR SUBSTANȚE, AȘA CUM AM PREZENTAT MAI ÎNAINTE ÎN ACEASTĂ CARTE, ȘI BRONZUL A FOST FABRICAT DE GETO-DACI [3], CEEA CE ÎNSEAMNĂ CĂ ȘI EI REALIZAU AMESTECAREA UNOR SUBSTANȚE CA ALCHEMIȘTII.

FONDAREA CHIMIEI MODERNE S-A POTICHNIT DE EXPERIMENTELE ALCHEMIȘTILOR [37].

UN MATERIAL TRANSFORMATIV FOLOSIT DE ALCHEMIȘTI A FOST NUMIT PIATRA FILOZOFILOR [57].

ALCHEMIȘTII AU CREZUT CĂ AURUL, ARGINTUL, ȘI PIETRELE PREȚIOASE SE POT RECREA PRIN METODE TRANSFORMATIVE [57].

ALTE SCOPURI ALE ALCHIMIȘTILOR AU FOST CREȘTEREA PUTERII MEDICINEI, SĂ GĂSESCĂ ELIXIRUL CARE PRELUNGESTE VIAȚA, ȘI SALVAREA SUFLETULUI [57].

VITICULTURA A FOST PRACTICATĂ 4000 ANI Î.E.N. ÎN ORIENTUL MIJLOCIU [58]. VINUL A FOST PRODUS DE EGIPTENI CU 2500 ANI Î.E.N., DE GRECII ANTICI ȘI DE ROMANII ANTICI [58]. EFECTUL VINULUI DE A PRODUCEREA BUNĂ DISPOZIȚIE ȘI BUCURIE PENTRU MUNCILE ÎNDEPLINITE ALE ZILEI, I-A DUS CU SIGURANȚĂ PE MEDICI ȘI PE ALCHIMIȘTI SĂ CAUTE ȘI SĂ GĂSEASCĂ ȘI ALTE SUBSTANȚE CARE AU ACESTE EFECTE.

GÂNDITORII DIN CULTURILE ANTICE AU PUS ÎNTREBĂRI ALE FILOZOFIEI NATURII CA [57]: CUM IAU NAȘTERE OBIECTELE? DIN CE SUNT FĂCUTE OBIECTELE? DACĂ SE POT TRANSFORMA UNELE OBIECTE ÎN ALTE OBIECTE?

GÂNDIREA ALCHIMIȘTILOR A CONSTAT DIN FAPTUL CĂ DACĂ GĂSESC RĂSPUNSUL LA PRIMELE DOUĂ ÎNTREBĂRI, ATUNCI CAUTĂ SĂ DESCOPERE REȚETE ȘI APARATE SĂ PRODUCĂ SUBSTANȚE PREȚIOASE [57].

DOUĂ MARI REALIZĂRI DE CHIMIE ALE ALCHIMIȘTILOR AU FOST [57]:

-AU CREZUT CĂ POT SĂ EXTRAGĂ IMPURITĂȚILE DINTR-O SUBSTANȚĂ [57], ȘI EXEMPLE DE AMESTECURI DE SUBSTANȚE SUNT BRONZUL, OȚELUL, ȘI ANUMITE SUBSTANȚE NATURALE ÎN CARE SE GĂSEȘTE SULF ÎN COMPOZIȚIE CU ALTE SUBSTANȚE PE CARE LE-AM PREZENTAT MAI ÎNAINTE ÎN ACEASTĂ CARTE [57];

-AU AMESTECAT SUBSTANȚE ȘI AU CREAT NOI SUBSTANȚE CU PROPRIETĂȚI DIFERITE [57].

UNU TEXT CARE A SUPRAVIEȚIUT DESPRE ALCHIMIA DIN GRECIA ANTICĂ ȘI IMPERIUL ROMAN ANTIC ESTE DIN SECOLELE III SAU IV Î.E.N. ȘI ESTE FORMAT DIN DOUĂ PĂRȚI: PAPIRUS X DIN LEIDEN ȘI POPYRUSUL DIN STOCKHOLM [57].

UN AUTOR CITAT FRECVEN ESTE FILOZOFUL DEMOCRITUS 460-370 Î.E.N. [57].

CHIMIȘTII ANTICI AU DESCOPERIT FABRICAREA STICLEI, AU VOPSIT HAINE, AU EXTRAS METALELE DIN MINEREURILE LOR, ȘI AU PRODUS ALIAJE DIN METALE [59].

O PRACTICĂ A ALCHIMIȘTILOR A FOST ANALOGIA, ȘI CU ACEASTĂ METODĂ AU SUPUS SUBSTANȚE DIFERITE LA CONDIȚII EXPERIMENTALE IDENTICE [59].

UN ALCHIMIST DIN SECOLELE IV-V A PUTUT SĂ FORMULEZE URMĂTOEREELE CONCLUZII DIN EXPERIMENTELE LUI [59]:

1.PRIN ÎNCĂLZIREA APEI ÎNTR-UN VAS DESCHIS, APA A DISPĂRUL ÎNCET ȘI ÎN VAS A RĂMAS O CANTITATE DE SUBSTANȚĂ SOLIDĂ ALBĂ ASEMĂNĂTOARE CU PĂMÂNTUL, ATUNCI, ALCHIMISTUL A PUTUT SĂ SPUNĂ CĂ APA A FOST SCHIMBATĂ ÎN PĂMÂNT ȘI AER [59].

2.PRIN SCUFUNDAREA ÎN APĂ A UNEI BUCĂȚI DE FIER ÎNCĂLZIT LA CULOAREA ROȘIE, SUB UN VAS DE STICLĂ DE FORMA UNUI CLOPOT, O PARTE DIN APĂ S-A SCHIMBET ÎN AER, ȘI ATUNCI CÂND O LUMÂNARE A FOST INTRODUSĂ SUB CLOPOT, AERUL A LUAT FOC, ȘI ATUNCI ALCHIMISTUL A FORMULAT CONCLUZIA CĂ APA A FOST SCHIMBATĂ ÎN FOC [59].

3.DACĂ SE ÎNCĂLZEȘTE PUTERNIC O BUCATĂ DE PLUMB ÎN AER, PRESUPUNEM CĂ SE ȚINE ÎN FLACĂRĂ, SAU ÎN CREUZET, NU MAI STRĂLUCEȘTE ȘI SE SCHIMBĂ ÎNTR-O PULBERE ALB-ROȘIATICĂ, ȘI DUPĂ CE ÎNCĂLZIM ACEASTĂ PULBERE ÎNTR-UN VAS CU PUȚIN GRÂU, SE PRODUCE DIN NOU PLUMB, ȘI ATUNCI ALCHIMISTUL A SPUS CĂ PLUMBUL ESTE DISTRUS DE FOC, ÎNSĂ POATE FI REPRODUS DIN CENUȘA LUI CU AJUTORUL CĂLDURII ȘI A CĂTORVA GRĂUNȚE DE GRÂU [59].

6. MINERITUL

PENTRU DEZVOLTAREA EPOCII CUPRULUI A FOST NECESARĂ DESCOPERIREA ȘI EXPLOATAREA DEPOZITELOR DE CUPRU NATIV ÎN

ABUNDENȚĂ LOCALĂ, ALTFEL OAMENII NU REUȘEAU ȘĂ DESCOPERE CĂ MINEREUL DE CUPRU NATIV SE POATE DEFORMA UȘOR PRIN LOVIREA CU PIATRA, CA SUCCESIUNE A EPOCII PIETREI [8], [10].

CUPRUL PRELUCRAT ÎN GRECIA ANTICĂ TREBUIA EXTRAS DIN MINE CU DEPOZITE DE CUPRU NATIV [7], [8], [10].

PENTRU TRECEREA DE LA EPOCA CUPRULUI LA EPOCA BRONZULUI, CONDIȚIA NECESARĂ A FOST DESCOPERIREA DEPOZITELOR NATURALE DE STANIU ȘI MINERITUL LOR [8], [10].

PENTRU TRECEREA LA EPOCA FIERULUI A FOST NECESARĂ DESCOPERIREA DEPOZITELOR DE MINEREU DE FIER, ȘI MINERITUL LOR [8], [10], [17].

PENTRU FOLOSIREA PLUMBULUI A FOST NECESARĂ DESCOPERIREA DE DEPOZITE DE PLUMB NATIV ȘI MINERITUL LOR [30].

DESPRE MINERITUL PLUMBULUI AM VORBIT MAI SUS ÎN ACEASTĂ CARTE.

PRINCIPALELE ZONE UNDE SUNT MINE DE ZINC SUNT CHINA, AUSTRALIA, ȘI PERU [45].

MULTE METALE DIN MINERIT POLUEAZĂ MEDIUL [60].

7. FORMULAREA CONCEPTELOR DE ATOM ȘI MOLECULĂ

CU ACESTE CÂTEVA SUBSTANȚE CHIMICE PE CARE LE VOM PREZENTA ÎN CONTINUARE, NU PUTEM SĂ DESCRIEM CUM AU FOST DESCOPERITE, LA CE AU FOST FOLOSITE, ȘI CARE AU FOST METODELE PRIN CARE S-AU DETERMINAT PROPRIETĂȚILE LOR FIZICE ȘI CHIMICE, PREZENTĂM DOAR CÂTEVA DATE DESPRE ACESTE PROBLEME, PENTRU A ARĂTA CĂ LE CUNOAȘTE.

DESCOPERIREA PROCEDEULUI DE A AMESTECA SUBSTANȚELE PENTRU A OBȚINE NOI SUBSTANȚE, A LE FIERBE, A LE DISTILA, ȘI A LE ÎNCĂLZI LA FOC, A DUS LA OBȚINEREA MULTOR SUBSTANȚE NOI. PRIN CÂNTĂRIRE S-AU OBȚINUT MASE ȘI DENSITĂȚI DIFERITE ALE NOILOR SUBSTANȚE, ȘI PROPRIETĂȚI CHIMICE DIFERITE.

8. ELEMENTELE CHIMICE

DESCOPERIREA ELEMENTELOR CHIMICE AFLATE ÎN MATERII PURE, NUMITE NATIVE, ȘI A MOLECULELOR, COMPUSE DIN ELEMENTE CHIMICE, ÎN MATERII FORMATE DIN ACESTE MOLECULE, AMBELE TIPURI DE MATERII GĂSITE ÎN ABUNDENȚĂ LOCALĂ ÎN SCOARȚA TERESTRĂ, S-A REALIZAT TREPTAT PRIN IDENTIFICAREA LOR, INVENTAREA APLICAȚIILOR LOR, ȘI NU SE POT DESPĂRȚII UNA DE CEALALTĂ, PENTRU CĂ NU S-A CUNOSCUȚ DE LA ÎNCEPUT DIN CE ELEMENTE CHIMICE SUNT FORMATE MOLECULELE, ȘI NICI CĂ MOLECULELE SUNT FORMATE DIN ELEMENTE CHIMICE, CEEA CE ÎNSEAMNĂ CĂ NU S-A CUNOSCUȚ CĂ MOLECULELE SUNT COMPUSE DIN ALTE ENTITĂȚI ELEMENTARE, DATORITĂ FAPTULUI CĂ TOATE TECHNOLOGIILE DE IDENTIFICARE ALE ELEMENTELOR CHIMICE AU FOST INVENTATE ULTERIOR, ÎN MOD TREPTAT.

9. CONSTRUCȚIA MATERIEI DIN PRICIPII, ÎN PREZENT ELEMENTE CHIMICE

ÎN LUCRAREA [61] ESTE PREZENTAT CĂ LA VREMEA RESPECTIVĂ TOATE SUBSTANȚELE ERAU NUMITE PRINCIPII, CARE SE POT OBȚINE DIN PRINCIPIILE VERITABILE SAREA, SULFUL, ȘI MERCURUL, CĂ PRIN COMPUNEREA MAI MULTOR PRINCIPII SE OBȚIN ALTE PRINCIPII, ȘI CĂ PRIN DESCOMPUNEREA PRINCIPIILOR SE OBȚIN IARĂȘI ALTE PRINCIPII, ȘI CĂ PRIN DESCOMPUNEREA PRINCIPIILOR SE POT OBȚINE PRINCIPIILE VERITABILE.

ÎN ANTICHITATE, ÎN TIMPUL GRECIEI ANTICE SUBSTANȚELE CUNOSCUTE ȘI IDENTIFICATE ERAU: CARBON, CUPRU, STANIU, SULF, PLUMB, MERCUR, AUR, ARGINT ȘI FIER [62], ȘI ÎN ACEEAȘI PERIOADĂ CU IMPERIULUI ROMAN, DUPĂ CUM ȘTIM, ARMELE ERAU DIN OȚEL, ȘI SE PURTAU BIJUTERII DIN AUR ȘI ARGINT, ȘI SE FABRICAU OALE DIN LUT. ASTFEL, O ALTĂ SUBSTANȚĂ CUNOSCUȚĂ ERA LUTUL, CARE COPT ÎN CUPTORUL ÎNCĂLZIT CU FOCUL CU LEMNE OFERĂ POSIBILITATEA PRODUCERII OALELOR DE LUT. OBSERVĂM CĂ DIN CALE MAI VECHI TIMPURI, MINTEA UMANĂ A FOST PREOCUPATĂ DE ELABORAREA UNEI TEORII A STRUCTURII MATERIEI, ȘI A FOLOSIT CUNOȘTINȚELE DIN VREMEA RESPECTIVĂ ȘI TOATĂ CAPACITATEA DE GÂNDIRE. ASTFEL, A REUȘIT SĂ ORDONEZE MATERIALELE. A DEOSEBIT ALIMENTELE, CARENA DE LA ANIMALE DE FRUCTE ȘI LEGUME. BLANA DE LA ANIMALE PENTRU ÎMBRĂCĂMINTE. PIETRELE DIN CARE SE OBȚINE CUPRU, DE CELE DIN CARE SE OBȚINE STANIU, ȘI DE CELELALTE PIETRE. ȘI ULTERIOR, PIETRELE DIN CARE SE OBȚINE FIERUL DE CELELALTE PIETRE.

GRECII ANTICI CREDEAU CĂ SUBSTANȚELE SUNT CONSTRUIE DINTR-UN SINGUR ELEMENT, ATOMUL [62], PENTRU CĂ SE OBSERVĂ DIVIZIBILITATEA TUTUROR MATERIALELOR PÂNĂ LA MICI PARTICULE DE PRAF. MAI TÂRZIU ELEMENTELE DE BAZĂ DIN CARE SE CONSIDERA CĂ SUNT CONSTRUIE SUBSTANȚELE AU FOST NUMITE PRINCIPII VERITABILE [63].

DE ASEMENEA, SUBSTANȚELE AU FOST NUMITE PRINCIPII [64], ȘI ERA CUNOSCUȚ CĂ VARUL ESTE FORMAT DIN PĂMÂNT, SARE ȘI FLEGMĂ [64], ȘI REACȚIA CHIMICĂ DEFINITĂ DINTRE ELEMENTELE CHIMICE ERA CONSIDERATĂ CA UNIREA PRINCIPIILOR PRIN CALCINARE [64]. NOI ȘTIM CĂ VARUL SE STINGE, AM VĂZUT CU SE STINGE VARUL ACASĂ ÎN LOCALITATEA UNDE AM COPILĂRIT PE VREMEA CÂND ERAM COPIL, PESTE VARUL CRUD SE TOARNĂ APĂ ȘI NU NE APLECĂM PE, ȘI NU INSPIRĂM DE PE ACEST AMESTEC PENTRU CĂ DEGAJĂ GAZE TOXICE, ȘI ÎN LUCRAREA [65] ESTE PREZENTAT CĂ ATUNCI CÂND VARUL A FOST STINS, A FOST ACOPERIT DE PĂMÂNT, FERIT, ȘI IZOLAT, DE ACȚIUNEA AERULUI. NOI TRAGEM CONCLUZIA CĂ SE CUNOȘTEA CĂ SE PRODUCE O REACȚIE CHIMICĂ A VARULUI CU AERUL.

DE ASEMENEA, SE CUNOȘTEAU MAI MULTE CATEGORII DE SUBSTANȚE: SĂRURI, ACIDE, ȘI ALCALINE, ȘI MULTE SUBSTANȚE: SARAMURĂ, OȚET, VIN, SAREA ORDINARĂ, ACIDUL SULFURIC, SULFAȚI CONFORM CELOR PREZENTATE ÎN LUCRAREA [65].

DE ASEMENEA SE CUNOȘTEA CĂ MASA ANTIMONIULUI, A CĂRĂMIZII, A MINERALELOR SULFURATE CA STANIUL ȘI PLUMBUL, CREȘTE CÂND SUNT CALCINATE [66]. MOLECULELE ERAU NUMITE MIXTURI, ȘI DE ASEMENEA ȘI PRINCIPII, CARE ERAU COMPUSE DIN PRINCIPII [63], ȘI PRINCIPIILE FUNDAMENTALE ERAU CONSIDERATE SAREA, SULFUL, ȘI MERCURUL, ȘI SE CONSIDERA CĂ PRINCIPIILE SE POT OBȚINE PRIN DESFACEREA MIXTURILOR ÎN PĂRȚILE LOR INTEGRANTE, ȘI CĂ PRINCIPIILE SE POT TRANSFORMA ÎN ALTE SUBSTANȚE ȘI MAI SIMPLE [63]. DE ASEMENEA SE CUNOȘTEA CĂ PRINCIPIILE, SUBSTANȚELE, SE OBȚIN PRIN COMPUNEREA PRINCIPIILOR VERITABILE.

DIZOLVAREA UNOR SUBSTANȚE ȘI PRECIPITAREA ALTOR SUBSTANȚE DE O SUBSTANȚĂ DATĂ, ADICĂ OBȚINEREA UNOR NOI SUBSTANȚE PRIN ACESTE DOUĂ FENOMENE CHIMICE, A FOST DESCOPERITĂ DE CLOS, POATE ȘI DE ÎNAINȚAȘII LUI, CARE A DESCOPERIT CĂ SAREA MARINĂ ESTE SULFURATĂ, DEOARECE SERVEȘTE LA DIZOLVAREA AURULUI, STANIULUI, ANTIMONIULUI, ȘI A ALTOR MINERALE SULFURATE, ȘI PRECIPITĂ MERCURUL, ARGINTUL, ȘI PLUMBUL, SE DIZOLVĂ ÎN APA TARE, ȘI CONȚINE PRINCIPII ACIDE, CARE SE DESCOPERĂ MAI DIFICIL, ȘI SE MANIFESTĂ MAI TÂRZIU ÎN OPERAȚII [67]. SAVOAREA SĂRII MARINE ESTE TEMPERATĂ, AGREABILĂ LA GUST, ȘI ARE UN EFECT DE UNIUNE A PRINCIPIILOR ACIDE, ACRE, SAU SULFURATE [67]. O DESCOPERIRE PREZENTATĂ DE CLOS ESTE CĂ ÎN APA DE MARE SUNT DOUĂ SĂRURI DIFERITE [67]. UNA ESTE FOARTE SULFURATĂ [67]. ACESTA SE CONDENSEAZĂ ATUNCI CÂND APA SE EVAPORĂ LA SOARE ÎN MĂRILE SĂRATE [67]. DE ASEMENEA, FOLOSIREA ACESTEI SĂRI ESTE ACEEA COMUNĂ, ÎN BUCĂTĂRIE [67]. A DOUA SARE ESTE FOARTE ACIDĂ, PICANTĂ PE LIMBĂ, ȘI CARE NU SE SEPARĂ DE APĂ PÂNĂ CÂND NU SE EVAPORĂ TOATĂ APA LA FOC [67]. PRIMA SARE AMESTECATĂ CU ULEIUL DE TARTRU NU COAGULEAZĂ [67]. A DOUA SARE SE ALBEȘTE [67]. DE ASEMENEA

MARCHEAZĂ ACIDITATEA SA CARE ACȚIONEAZĂ ASUPRA ULEIULUI DE TARTRU [67]. ULEIUL DE TARTRU ERA RECUNOSCUT DE TOȚI CHIMIȘTII PENTRU UN COMPORTAMENT ALCALIN, CU SĂRURILE ACRE ȘI SULFURATE [67].

TRAGEM CONCLUZIA CĂ SĂRURILE ACRE ȘI SULFURATE AU FOST RECUNOSCUTE PRIN ACȚIUNEA LOR ASUPRA ULEIULUI DE TARTRU, CONFORM CELOR PREZENTATE MAI SUS.

ÎN CONCLUZIE, CUNOAȘTEREA MAI MULTOR SUBSTANȚE, DESFACEREA SUBSTANȚELOR ÎN PĂRȚILE COMPONENTE, ÎN PRINCIPII, ȘI LEGAREA PRINCIPIILOR PENTRU FORMAREA SUBSTANȚELOR CARE SUNT ALTE PRINCIPII, REZULTATE OBȚINUTE PRIN REACȚII CHIMICE, CA DE EXEMPLU CALCINAREA, A CONDUS, PRIN CÂNTĂRIREA SUBSTANȚELOR, LA IDENTIFICAREA ELEMENTELOR CHIMICE.

10. STUDIUL APELOR MINERALE

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [68].

STUDIUL APELOR MINERALE A PRODUS O COTITURĂ ÎN CERCETĂRILE DIN CHIMIE. ACESTE STUDII LE PREZENTĂM MAI JOS.

ELE ANTRENEAZĂ ÎN CURSUL LOR SUBTERAN CORPUSCULI. ÎN PLUS, RIDICĂ, ÎMPREUNĂ CU ELE, VAPORI ȘI FUMURI. ACEȘTI CORPUSCULI, ACEȘTI VAPORI, ȘI ACESTE FUMURI DAU TOATE CALITĂȚILE LOR BUNE ȘI RELE. ELE SUNT AMESTECATE CU APELE MINERALE. ESTE GREU DE RECUNOSCUT AMESTECUL VAPORILOR CU APELE ȘI UNDE SE GĂSESC, DEOARECE ELE SE EMANĂ UȘOR. CORPUSCULII ACEȘTIA NU A SCĂPAT METODELOR PE CARE ȘTIINȚA LE PUTEA SERVI ÎN ANUL 1667. UNELE METODE ERAU NUMITE ÎN CHIMIE TINCTURI SPIRITUALE. ACESTE METODE SE RECUNOSC PRIN ANUMITE EFECTE PARTICULARE. ACESTELE DEMONSTREAZĂ CĂ ACEȘTI CORPUSCULI SUNT GROSIERI. CORPUSCULII SUNT DETAȘAȚI DE PĂMÂNT ÎN CURSUL

APELOR. INFUZIA DE ANTIMONIU CARE ESTE SUB FORMĂ DE STICLĂ SAU FLOARE, ARE O CALITATE PURGATIVĂ VIOLENTĂ DACĂ ESTE AMESTECATĂ CU VIN. SUBSTANȚA DE ANTIMONIU NU ESTE REȚINUTĂ DE NIMIC ÎN MOD SENSIBIL, ȘI DUPĂ UNII, SE GĂSEȘTE ÎN MASA EI ÎNȚIALĂ ȘI DUPĂ MII DE INFUZII. DEȘI, CONFORM EXPERIMENTELOR EFECTUATE DE DODART, ELIMINAREA STICLII DE ANTIMONIU ESTE SENSIBILĂ, NU NUMAI CA MASĂ, CI ESTE VIZIBILĂ CU OCHIUL LIBER.

DIN CORPURILE PE CARE LE CONȚINE PĂMÂNTUL, APELE MINERALE POT DETAȘA ACEȘTI CORPUSCULI PRIN CURGEREA LOR. CORPURILE PE CARE LE CONȚINE PĂMÂNTUL SUNT:

1. PIETRELE;
2. MINERALELE;
3. METALELE;
4. MARCASIT.

TOATE SPECIILE ACESTEIA AU O INFINITATE DE DIFERENȚE. DIN ACEASTĂ CAUZĂ ESTE POSIBIL CA ÎN ACEEAȘI APĂ SĂ SE GĂSEASCĂ UN AMESTEC DE CORPUSCULI DE DIFERITE SPECII. ACESTEIA ÎNTR-O INFINITATE DE DOZE DIFERITE. DE AICI AVEM CĂ POT FI O INFINITATE DE APE MINERALE. DE ASEMENEA, NU ESTE UȘOR DE DESCOPERIT NATURA LOR VERITABILĂ. DE ASEMENEA, O MARE PARTE DIN MATERIILE PE CARE LE CONȚINE PĂMÂNTUL NE SUNT NECUNOSCUTE. CA REZULTAT, ÎN ANUMITE APE, CÂND FACEM ANALIZA LOR, GĂSIM SĂRURI NOI ȘI UNICE.

EXACTITATEA CERCETĂRIILOR A FOST ÎMBUNĂȚĂȚITĂ DE ACESTE DIFICULTĂȚI. NE-AU LĂSAT SĂ DESCOPERIM PRINCIPII UNIVERSALE. ACESTEIA SUNT SĂRURILE VITRIOLICE ȘI SULFURATE [68]. DE ASEMENEA ȘI O A TREIA SPECIE A CESTORA DOUĂ. ULTIMA DOMINĂ ÎN APELE MINERALE. ACEASTA DIN URMĂ ESTE CEA MAI UTILĂ PENTRU SĂNĂTATE. VITRIOLURILE ȘI SULFURILE SUNT OPUSE. PRIMELE SUNT LUNGI, POTRIVITE PENTRU A PENETRA, ȘI INCISIVE. CELE DE A DOUA SUNT MOI, POT AGITA ȘI POT FI AGITATE, ȘI POT FI ELIMINATE DE CEL CARE LE PENETREAZĂ. SUNT DOUĂ

METODE DE DETECTARE A CONȚINUTULUI DE ESENȚĂ VITRIOLICĂ SAU ACIDĂ A UNEI APE, CARE ESTE ACELAȘI LUCRU:

1. SE COLOREAZĂ ÎN ROȘU DE LA PUDRA DE FIERE DE NUCĂ;
2. SE PRECIPITĂ SUB FORMĂ DE MATERIE ALBĂ PRODUSĂ DE LA CÂTEVA PICĂTURI DE ESENȚĂ DE SARE DE AMONIAC.

RECUNOAȘTEREA CARACTERULUI SULFURAT SAU ALCALIN A SĂRURILOR EXTRASE DINTR-O APĂ MINERALĂ SE FACE PRIN TREI METODE:

1. COLOREAZĂ ÎN ROȘU SOLUȚIA DE SUBLIMĂ, CUM FACE SAREA DE TARTRU;
2. COLOREAZĂ ÎN VERDE TINCTURA DE FLORI MOV SAU VIOLETE;
3. SUNT EFERVESCENTE CU ULEIUL DE VITRIOL.

ESTE LA FEL CA LA PRINCIPIILE ASCUNSE ÎN AMESTECURI, CARE SUNT DETERMINATE ORDINAR PRIN INDICII DAȚI DE NATURA LOR. CHIAȚ DACĂ SULFURILE ȘI VITRIOLURILE SUNT CONTRARE, EXISTĂ O ESENȚĂ DE VITRIOL SULFURAT. ACEASTA DEOARECE PRINCIPIILE NU SUNT NICIODATĂ PURE ÎN AMESTECURI, ȘI DIN ACEASTĂ CAUZĂ UNUL DINTRE PRINCIPII PARTICIPĂ CU O CALITATE CARE ÎI ESTE OPUSĂ. S-A OBȚINUT URMĂTORUL REZULTAT: CĂ DUPĂ CE S-A EXTRAS TOT VITRIOLUL DIN LICHIORUL LUI, S-A REÎNCEPUT DISTILAREA LA UN FOC LENT, ȘI S-A FĂCUT SĂ IASĂ O ESENȚĂ VOLATILĂ, ADICĂ UNA CARE SE EVAPORĂ, CARE A AVUT UN MIROS DE SULF, CARE NU A FOST COROSIV, ȘI CARE SE RĂSPÂNDEȘTE UȘOR ÎN AER. CEEA CE REIESE DIN CELE PREZENTATE MAI SUS ESTE CĂ ÎN AMESTECURI SUNT ÎNTOTDEAUNA ȘI PRINCIPII VITRIOLICE ȘI PRINCIPII SULFURATE.

APELE VITRIOLICE, ȘI CU CONȚINUT DE FIER, CARE SUNT CELE MAI COMUNE, ÎȘI DATOREAZĂ, CONFORM CU CLOS, TOATĂ FORȚA LOR ACESTEI ESENȚE. ADICĂ VITRIOLULUI. ȘI ACEASTA DEOARECE SE CREDE CĂ PUTEM EXTRAGE VITRIOLUL, ȘI CĂ DACĂ PUNEM CÂTEVA PICĂTURI ÎN APA COMUNĂ, ACEASTA REDUCE DUREREA BOLNAVILOR.

APA MINERALĂ ESTE CEVA NATURAL, AȘA CUM IZVORĂȘTE ÎN FRANȚA, IZVORĂȘTE ȘI ÎN ROMÂNIA.

ASTFEL, NOI VREM MAI PUȚIN CA SĂ ADUCEM APA MINERALĂ DE DEPARTE, PENTRU CĂ ESENȚA SA SULFURATĂ SE EVAPORĂ, ȘI RĂMÂNE ÎNCĂRCATĂ CU O MATERIE TERESTRĂ DĂUNĂTOARE.

OAMENII DE ȘTIINȚĂ CLOS ȘI BOURDELIN AU EXAMINAT DIFERITE APE MINERALE. EI AU ÎNCEPUT CU CELE CARE AU FOST CEL MAI APROAPE DE PARIS. APELE DE PASSI AU FOST PRIMELE. DUPĂ PROBA DE FIERE DE NUCĂ, AU GĂSIT CĂ ELE AU AVUT UN ANUMIT PROCENT DE ESENȚĂ VITRIOLICĂ, DEOARECE ELE S-AU COLORAT ÎN ROȘU. DACĂ JUDECĂM DUPĂ FAPTUL CĂ ACEST AMESTEC ÎNCĂLZIT LA FOC ÎȘI PIERDE CULOAREA ROȘIE, OBȚINEM CĂ ACEASTĂ ESENȚĂ ESTE ÎN CONCENTRAȚIE MICĂ. PRIN DISTILAREA A 7,0 LIVRE DIN ACEASTĂ APĂ, MATERIA CARE A RĂMAS PE FUNDUL VASULUI PUSĂ PE UN FIER CALD SE TRANSFORMĂ ÎNTR-O MATERIE CARE SEAMĂNĂ CU GHIPSUL CALCINAT. ȘI ACEASTĂ MATERIE OBȚINUTĂ SE DIZOLVĂ ÎN APĂ CA GHIPSUL. NU ARE DECÂT PUȚINĂ PUDRĂ GALBENĂ CARE PUS PE UN FIER ÎNCĂLZIT LA ROȘU SE TRANSFORMĂ ÎNTR-O SPECIE DE RUGINĂ DE FIER. REZULTĂ CĂ ÎN ACEASTĂ APĂ ESTE PUȚIN FIER ÎN RAPORT CU CANTITATEA DE GHIPS PE CARE O CONȚINE. DE AICI REZULTĂ PUTEREA MICĂ PE CARE O ARE.

11. REACȚII CHIMICE ENDOTERME

CUNOȘTINȚE INIȚIALE:

1. REACȚIILE CARE ABSORB CĂLDURĂ SE NUMESC REACȚII ENDOTERME [69].
URMĂTOAREA PARTE A LUCRĂRII ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [66].
2. CREȘTEREA MASEI UNUI OBIECT ESTE POSIBILĂ NUMAI PRIN ADĂUGAREA ALTUI OBIECT CU MASĂ.
3. PRIN CALCINARE CRESC MASELE URMĂTOARELOR MATERIALE:

3.1. ARGILA CÂND SE FACE CĂRĂMIDA;

3.2. STANIUL;

3.3. PLUMBUL.

ÎN PRIMA ETAPĂ, ANTIMONIUL ESTE PISAT LA STADIUL DE PUDRĂ.

PE URMĂ ESTE EXPUS LA FOCARUL UNEI OGLINZI ARZĂTOARE.

ÎN ACEASTĂ ETAPĂ ESTE REDUS ÎN CENUȘĂ DUPĂ O ORĂ DE ARDERE.

MATERIALUL OBȚINUT ARE MASA MAI MARE CU A ZECEA PARTE DECÂT ÎNAINTE.

PE MATERIAL AU APĂRUT FILAMENTE MICI ALBE.

CU FOCUL DE CĂRBUNI SE OBȚINE ACELAȘI EFECT CA MAI SUS.

OGLINDA SFERICĂ CONCAVĂ FOCALIZEAZĂ LUMINA DE LA SOARE ÎN FOCARUL EI [70].

DISTANȚA EI FOCALĂ ESTE JUMĂTATE DIN RAZA SFEREI [70].

ÎNSEMNĂ CĂ OGLINDA ARZĂTOARE ESTE O OGLINDĂ SFERICĂ CONCAVĂ.

AICI S-AU FOLOSIT REZULTATELE DIN OPTICĂ PREZENTATE MAI SUS.

DIN TERMODINAMICĂ S-A FOLOSIT CĂ FOCUL DE CĂRBUNI ÎNCĂLZEȘTE OBIECTUL.

URMĂTOAREA PARTE A LUCRĂRII ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [66].

ANTIMONIUL MĂRUNȚIT MAI MULT SE ÎNCĂLZEȘTA MAI REPEDE.

ȘI MASA LUI CREȘTE MAI MULT.

SAU FORMULAT URMĂTOARELE IPOTEZE:

1. ÎN AER SUNT PARTICULE SULFURATE VOLATILE;
2. ACESTE PARTICULE SE UNESC ÎNTRE ELE;
3. ELE SE FIXEAZĂ PE MATERIAL;

4. ELE FORMEAZĂ ACESTE FILAMENTE;
5. ELE REPREZINTĂ TOATĂ CREȘTEREA DE MASĂ.

PRESUPUN CĂ ESENȚA DE VIN, FOLOSITĂ ÎN EXPERIMENTUL PE CARE-L PREZENTĂM MAI JOS, ESTE ALCOOLUL COMESTIBIL SAU ALCOOLUL MEDICINAL, CARE SE OBȚINE PRIN DISTILAREA VINULUI SAU A FRUCTELOR.

SE TOARNĂ ESENȚA DE VIN PESTE ANTIMONIUL CALCINAT.

ÎN ETAPA URMĂTOARE, SE SEPARĂ ACEASTĂ ESENȚĂ DE VIN DE ANTIMONIUL CALCINAT.

ACEASTĂ ESENȚĂ DEVINE MAI GREU.

DE ASEMENEA, ACEASTĂ ESENȚĂ DE VIN SE COLOREAZĂ ÎN ROȘU.

DUPĂ ACEASTĂ ETAPĂ, MASA ANTIMONIULUI SE MODIFICĂ.

MASA ANTIMONIULUI A SCĂZUT.

PRIN COLORAREA ESENȚEI DE VIN, A CRESCUT MASA EI.

CU EGALI DE CALCINARE ASEMĂNĂTOARE, MASA ESENȚEI DE VIN CREȘTE NUMAI DACĂ ACEASTA SE COLOREAZĂ.

S-A PRESUPUS CĂ ESENȚA DE VIN S-A COLORAT PRIN ÎNCĂRCAREA EI CU PARTICULE SULFURATE.

S-A FORMULAT IPOTEZA CĂ PARTICULELE STRĂINE CU CARE S-A ÎNCĂRCAT ANTIMONIUL AU TRECU ÎN ESENȚA DE VIN.

UN ALT EXEMPLU DE CREȘTERE A MASEI PRIN CALCINARE ESTE CEL AL FIERULUI [71].

CREȘTEREA FINEȚII PUDREI DĂ POSIBILITATEA CA SĂ SE PRODUCĂ MAI MULTE REACȚII, APRINDERE MAI RAPIDĂ, ÎNCĂLZIRE MAI RAPIDĂ, ȘI REZULTĂ O MASĂ MAI MARE.

DEOARECE, ATUNCI CÂND PRAFUL DE ANTIMONIU A FOST MĂRUNȚIT MAI MULT, PRIN CALCINARE CREȘTEREA MASEI A FOST MAI MARE [66], SE CONFIRMĂ CĂ NU TOȚI ATOMII DE ANTIMONIU AU SUFERIT REACȚII.

ACESTE EXPLICAȚII NU ERAU POSIBILE PE ACEEA VREME ÎNTRUCÂT NU SE ȘTIA COMPOZIȚIA DIN ATOMI A SUBSTANȚELOR.

LUCRAREA [66] PREZINTĂ UN MARE PAS ÎNAINTE PRIN DESCOPERIREA CREȘTERII MASEI MATERIALELOR PRIN ARDERE, DEOARECE CONFORM CU ACEASTĂ LUCRARE ACEST FENOMEN SE CUNOȘTEA NUMAI PENTRU CĂRĂMIDĂ.

CONCLUZIE:

ÎN EXPERIMENTUL DE CALCINARE S-A APLICAT LEGEA CONSERVĂRII MASEI ÎN REACȚIILE CHIMICE, ȘI CA REZULTAT AL ACESTEI LEGI S-A CONSIDERAT CĂ MASA ANTIMONIULUI CREȘTE CU MASA PARTICULELOR ADĂUGATE DIN AER.

SOLIDIFICAREA UNUI LICHID SE PRODUCE PRIN CEDAREA DE CĂLDURĂ [66].

UNELE SUBSTANȚE AMESTECATE ABSORB CĂLDURĂ [72].

ACESTE AMESTECURI DE SUBSTANȚE ABSORB CĂLDURA DE LA APA DINTR-UN VAS SEPARAT, ȘI APA SE SOLIDIFICĂ.

12.SOLIDIFICAREA

S-AU EFECTUAT UN MARE NUMĂR DE EXPERIMENTE DESPRE COAGULAREA DIFERITELOR LICHIDE CUM SUNT LAPTELE, SÂNGELE, ATÂT VENOS CÂT ȘI ARTERIAL, FIEREA DE VITĂ, APA GĂSITĂ ÎN PERICARDUL UNUI CAL, ETC. [72]. ÎN ACESTE DIFERITE LICHIDE, AU FOST DIZOLVATE, SUCCESIV, DIFERITE SĂRURI, DIFERITE SUCURI DE PLANTE, PENTRU A VEDEA CARE SUNT MATERIALELE, CARE CAUZEAZĂ COAGULAREA, CARE O ÎMPIEDICĂ,

CARE O ÎNTÂRZIE, SAU CARE NU AU NICI UN EFECT [72]. AU FOST DE ASEMENEA CONSIDERATE ȘI DIFERITELE GRADE DE FERMENTAȚIE, ȘI ALTE ACCIDENTE DE DIFERITE COAGULĂRI [72].

CÂND AU FOST FURNIZATE SUFICIENTE FAPTE, ELE AU FOST GÂNDITE RAȚIONAL, ANALIZATE, SINTETIZATE, ȘI S-AU TRAS CONCLUZII [72].

CONFORM CU CLOS, SOLIDIFICAREA LICHIDELOR ESTE DIFERITĂ, PENTRU DIFERITE LICHIDE, ȘI PENTRU DIFERITELE CAUZE CARE LE PRODUC [72]. DACĂ LICHIDUL ESTE OMOGEN, SAU APROXIMATIV OMOGEN, CA APA, GRĂSIMILE, ȘI METALELE TOPITE, ELE SE SOLIDIFICĂ FĂRĂ SĂ FIE ALTERATE ÎN ESENȚA LOR [72]. ACEASTĂ SOLIDIFICARE NU ESTE DECÂT O SIMPLĂ CONGELARE [72].

DACĂ LICHIDUL NU ESTE OMOGEN, CU ALTE CUVINTE CONȚINE PARTICULE SOLIDE DISPERSATE ÎN VOLUMUL SĂU, SOLIDIFICAREA SE PRODUCE CÂND PARTICULELE SOLIDE SE SEPARĂ DE LICHID UNDE ELE ÎNOTAU, ȘI SE ÎNTÂLNESC ÎNTR-UN ANSAMBLU, ȘI ATUNCI NU SE PRODUCE NUMAI O SCHIMBARE DE CONSISTENȚĂ, CI ȘI DE ASEMENEA DE COMPOZIȚIE [72]. CÂND LAPTELE SE BRÂNZEȘTE, PĂRȚILE BRÂNZOASE SE SEPARĂ DE LICHIDUL SEROS [72]. ACEASTĂ SOLIDIFICARE ESTE SEPARAREA DIN LICHID A DOUĂ SUBSTANȚE, DINTRE CARE UNA SE SOLIDIFICĂ ȘI A DOUA RĂMÂNE LICHIDĂ. CÂND SEVA ARBORILOR DEVINE LEMN, ȘI CHILUL PRINDE ÎN ANIMALE SOLIDITATEA MEMBRELOR LOR, SE PRODUCE PRIN ACEASTĂ SPECIE DE COAGULARE [72].

ACESTE SPECII DIFERITE RĂSPUND LA DIFERITE CAUZE [72]. COAGULAREA, CARE NU ESTE DECÂT O SIMPLĂ CONGELARE, SE PRODUCE ÎNTOTDEAUNA LA FRIG [72]. APA ÎNGHEȚATĂ, SĂRURILE CRISTALIZATE, PRIN CĂLDURĂ ÎȘI RECAPĂTĂ LICHIDITATEA ÎNȚIALĂ, ȘI REDEVIN CU PRECIZIE CEEA CE AU FOST [72]. LA FEL ȘI METALELE, GRĂSIMILE, CEARA, ETC. [72].

SE POATE PRODUCERE RAREFIEREA PRIN CONGELARE LA UNELE MATERIALE, CA DE EXEMPLU APA [72]. RAREFIEREA ÎNSEAMNĂ CĂ SOLIDUL ARE ACEEAȘI MASĂ, ÎNSĂ VOLUMUL LUI A CRESCUT, ADICĂ DENSITATEA

MATERIALULUI A SCĂZUT, UNDE DENSITATEA ESTE DEFINITĂ PRIN RAPORTUL DINTRE MASĂ ȘI VOLUM [73]:

$$\text{DENSITATE} = M / V$$

UNDE M ESTE MASA, ȘI V ESTE VOLUMUL.

DENSITĂȚILE APEI ȘI GHEȚII PRELUATE DIN LUCRAREA [73], SUNT TRECUTE ÎN TABELUL 1.

TABELUL 1. DENSITĂȚILE APEI ȘI GHEȚII DIN LUCRAREA [73].

NR. CRT.	SUBSTANȚA	DENSITATEA (KG/METRU CUB)
1	APĂ	1000
2	GHEAȚĂ	917

LA ALTE MATERIALE, CA DE EXEMPLU METALELE, SE PRODUCE CONDENSAREA, ADICĂ O CREȘTERE A DENSITĂȚII [72]. CONDENSAREA ÎNSEAMNĂ CĂ DENSITATEA A CRESCUT. CELE CARE SE RAREFIAZĂ SUNT APOASE, ADICĂ AU ÎN COMPOZIȚIA LOR APĂ, ȘI SUNT PENETRATE DE AER, CARE LE EXTINDE ȘI LE DILATĂ ÎN TIMP CE SE CONGELEAZĂ [72]. CELE CARE SE CONDENSEAZĂ SUNT GRASE, ȘI SULFUROASE, ȘI PUȚIN PENETRABILE LA AER [72].

OMUL DE ȘTIINȚĂ DU CLOS A RAPORTAT CĂ GLAUBER SUSȚINEA CĂ O ANUMITĂ SARE ESTE ACEEA CARE ARE VIRTUTEA DE A CONGELA ÎN GHEAȚĂ, NU NUMAI APA COMUNĂ, CI ȘI ULEIURILE APOASE, VINUL, BEREA, APA VIEȚII, OȚETUL, ȘI CONGELEAZĂ LICHIORURILE ACRE DISTILATE, CUM SUNT APELE TARI, SPIRITUL DE SARE COMUNĂ, SPIRITUL DE ALAUN, ESENȚA DE VITRIOL, ȘI ÎN CONTINUARE REDUCE LEMNUL LA PIATRĂ, ȘI CARE FACE CA SĂ NU PUTEM ATINGE NICIODATĂ FRIGUL EXTREM AL AERULUI [72]. NOI AM ÎNȚELES AICI CĂ ESENȚELE SE OBTÎN PRIN DISTILARE [72].

NOI PRESUPUNEM CĂ SPIRITUL UNEI SUBSTANȚE SE REFERĂ LA ESENȚA SUBSTANȚEI CARE SE OBTINE PRIN DISTILARE PRECUM ESTE SPECIFICAT ÎN LUCRAREA [72]. NOI ȘTIM CĂ VITRIOLUL ESTE ACID SULFURIC.

DACĂ UMPLEM UN VAS CU ACEASTĂ MATERIE SALINĂ PREPARATĂ CUM TREBUIE, ȘI-L SUSPENDĂM DEASUPRA MIJLOCULUI UNEI MESE, ÎN JURUL CĂREIA SUNT AȘEZATE MAI MULTE PERSOANE, RĂSUFLAREA LOR ÎNGHEAȚĂ PE VAS, ACOPERĂ COMPLET VASUL CU O ZĂPADĂ, CARE CREȘTE ÎNCONTINUU PÂNĂ CADE PE MASĂ [72]. ACEST FENOMEN ÎL PUTEM OBSERVA DACĂ LĂSĂM UN CUI DE FIER, SAU ALT OBIECT DE FIER ÎN AER LIBER, ÎN FRIG, ȘI ÎL ADUCEM ÎN ÎNCĂPERE, ÎL PUNEM PE O MASĂ ȘI SUFLĂM PE EL. VEDEM CĂ PE EL SE DEPUNE O ZĂPADĂ CARE CREȘTE ÎNCONTINUU PÂNĂ SUFLĂM PE EL. DACĂ SCUFUNDĂM VASUL CU MATERIE SALINĂ ÎN VIN, PĂRȚILE APOASE DIN VIN SE CONGELEAZĂ ÎN JURUL ACESTUI VAS, FORMEAZĂ BUCĂȚI DE GHEAȚĂ INSIPIDĂ, ȘI ACESTE BUCĂȚI DE GHEAȚĂ CARE AU FOST ELIMINATĂ DIN VIN MĂRESC FORȚA VINULUI, ȘI PRIN ACEASTĂ METODĂ CONTINUĂ SE POATE FACE VINUL ȘI MAI TARE [72]. PUTEM FACE LA FEL CU BEREĂ ȘI CU OȚETUL [72].

PENTRU A SOLIDIFICA APA, VINUL, BEREĂ, ȘI ALTE LICHIDE ASEMĂNĂTOARE, NU TREBUIE DECÂT SĂ DIZOLVĂM ACEASTĂ MATERIE SALINĂ, ÎN LICHIDUL PE CARE VREM SĂ-L CONGELĂM [72]. NOI NU ȘTIM ÎN CE PROPORȚIE SE AMESTECĂ ACEASTĂ SARE CU LICHIDUL PE CARE VREM SĂ-L CONGELĂM, ÎNSĂ AM ÎNȚELES DIN LUCRAREA [72] CĂ SE AMESTECĂ O PARTE SARE LA TREI PĂRȚI LICHIDUL PE CARE VREM SĂ-L CONGELĂM [72].

PENTRU A AFLA CUM SE PRODUCE ACEASTĂ SARE, TREBUIE SĂ VĂ INSTRUIȚI DIN APENDICELE GENERAL AL LUI GLAUBER, CONFORM CU [72].

ACEASTĂ MATERIE NU POATE SĂ ACȚIONEZE DECÂT PRIN FRIGUL EI, DEOARECE EA ACȚIONEAZĂ ÎNCHISĂ ÎN VASUL EI [72].

FRIGUL MARE AL ACESTOR SĂRURI VINE DE LA MAREA LOR ACREALĂ [72]. APA SIMPLĂ NU ESTE AȘA DE RECE CA ACEEA ÎN CARE DIZOLVĂM O SARE OARECARE [72]. CU CÂT ACEASTĂ SARE ESTE MAI ACRĂ, CU ATÂT APA ESTE MAI RECE [72]. SAREA AMONIAK O FACE MAI RECE DECÂT CELELALTE

[72]. ESENȚELE ÎNCORPORATE MĂRESC MAI MULT FRIGUL APEI, UN FRIG PE CARE SĂRURILE NU O POT ATINGE, PENTRU CĂ SUNT MAI ACRE [72].

ACEST EFECT VINE DE LA ESENȚELE ACIDE ȘI MERCURIALE, SAU DE LA PARTICULELE TERESTRE [72]. OȚETUL ÎNGHEAȚĂ UȘOR [72]. ÎN MOD CONTRAR, LICHIDELE AMESTECATE CU ANUMITE ESENȚE SULFURATE, CA APA VIEȚII, NU SE CONGELEAZĂ, SAU SE CONGELEAZĂ CU GREUTATE [72].

CÂND A STUDIAT COAGULAREA, CLOS A ÎNCEPUT CU O COAGULARE PE CARE A NUMIT-O TRANSMUTATIVĂ, ȘI CARE ESTE PIETRIFICAREA APEI CARE PICĂ DIN TAVANELE ANUMITOR GROTE, ȘI FORMEAZĂ STALACTITE ȘI STALAGMITE, UN FENOMEN CARE NU ESTE DE LOC RAR [72]. EL REMARCĂ DE ASEMENEA CĂ ÎN RAPORTUL DOCTORULUI BANC, ÎN CARTEA LUI LIVRES DES EAUX MINERALES, APA DE LA S. ALYRE APROAPE DE CLERMONT ÎN AUVERGNE, SE PIETRIFICĂ PUȚIN CÂTE PUȚIN, ȘI CU TIMPUL DEVINE PIATRĂ [72].

TOATĂ LUMEA A FĂCUT EXPERIMENTUL FAIMOS AL LUI VAN-HELMONT, PRIN CARE EL A DEMONSTRAT CONSTANT CĂ SE FORMEAZĂ MAI MULT DE 164 DE LIVRE DE LEMN NUMAI DIN APA ABSORBITĂ TIMP DE 5 ANI DIN PĂMÂNTUL UNDE A FOST PLANTAT [72].

PENTRU A FACE DIFERENȚA DINTRE COAGULAREA NATURALĂ ȘI ACEEA ARTIFICIALĂ, CLOS S-A RAPORTAT LA UN EXPERIMENT, ÎN CARE A VĂZUT CĂ SAREA FIXĂ ȘI SULFURATĂ A TARTRULUI, ADĂUGATĂ SĂRII ACIDE ȘI VOLATILE A OȚETULUI A PENETRAT NISIPUL DE ERAMPES, A DEGAJAT SULFURA EI PIETROASĂ, ȘI ACEASTĂ SULFURĂ ASTFEL DEGAJATĂ DE ACEASTĂ SARE A COAGULAT APA ȘI A REDUS-O LA PIATRĂ [72].

EL A RAPORTAT CĂ, ÎN GENERAL, COAGULĂRILE TRANSMUTATIVE ALE SULFURILOR ȘI ALE SĂRURILOR SULFURATE, ACȚIONEAZĂ PRIN CĂLDURILE RĂCITOARE [72].

NOI ÎNȚELEGEM CĂ ACEASTA ÎNSEAMNĂ CĂ ACESTE AMESTECURI DE SUBSTANȚE, PREZENTATE MAI SUS, PRODUC NOI SUBSTANȚE, ȘI ÎN ACELAȘI TIMP PRODUC O CĂLDURĂ CARE RĂCEȘTE CORPURILE.

PUTEM SĂ REMARCĂM ÎNCĂ P SPECIE DE COAGULARE, ACEEA CARE SE PRODUCE PRIN AMESTECUL DE DOUĂ LICHIDE [72]. ASTFEL, ESENȚELE SALINE SE CONDENSEAZĂ ȘI SE COAGULEAZĂ, SAU PRIN ALTE ESENȚE SALINE, ADICĂ PRIN AMESTECAREA LOR, CA ESENȚA DE VIN CU ESENȚA DE SALPETRU, SAU CU ESENȚA DE URINĂ, SAU CU ACEEA DE SĂRURI SULFURATE, CA ESENȚA DE VIN CU SAREA DE TARTRU, SAU CU SULFURILE TERESTRE, CA OȚETUL DISTILAT CU PLUMBUL, CU CORALII, CU PERLELE, ETC. [72].

OAMENII DE ȘTIINȚĂ DE PE VREMEA ACEEA, CARE AU STUDIAT ȘI AU TRATAT ȘI CELELALTE PROBLEME ALE FIZICII ȘI CHIMIEI, CLOS, MARIOTTE, HUGHUENS, ȘI PERRAULT, AU TRATAT ACEST SUBIECT MAI FIZIC [72]. PĂRERILE LOR, CARE NU SUNT PEA DIFERITE, LE PREZENTĂM MAI JOS [72].

PROPRIETATEA CARACTERISTICĂ A LICHIDELOR ESTE ACEEA CĂ SUNT FORMATE DIN PĂRȚI MICI, CARE SUNT SEPARATE UNELE DE ALTELE, ȘI DINTR-O MATERIA FOARTE SUBTILĂ CARE SE AFLĂ ÎN INTERVALUL DINTRE ELE, CARE CURGE ȘI LE ȚINE ÎN MIȘCARE [72].

FĂRĂ ACEASTĂ MIȘCARE IMPRIMATĂ PĂRȚILOR LICHIDELOR DE ACEASTĂ MATERIE SUBTILĂ, ELE NU SUNT DECÂT CORPURI DURE [72].

TOATE LICHIDELE SUNT CA GRĂMEZILE DE GRÂU, CĂRORA NU LE LIPSEȘTE NIMIC PENTRU A FI LICHIDE, ASTFEL ÎNCÂT PĂRȚILE LOR SUNT ATÂT DE DEZLEGATE ÎNCÂT PRIMESC IMPRESIA MATERIEI SUBTILE, ȘI SUNT CONDUSE SEPARAT UNELE DE ALTELE [72]. ACEASTA ÎNSEAMNĂ CĂ PĂRȚILE SE MIȘCĂ SEPARAT UNELE DE ALTELE.

13.EVAPORAREA, ȘI CONDENSAREA

UN OM A DESCOPERIT O POSIBILITATE DE DESALINIZARE A APEI DE MARE, ȘI TRANSFORMAREA EI ÎN APĂ DE BĂUT, COMESTIBILĂ, ȘI A PREZENTAT ACEST PROCEDEU ACADEMIEI [74]. PROCEDEUL CONSTĂ ÎN TURNAREA APEI DE MARE ÎNTR-UN VAS DE PLUMB, ȘI ÎNCĂLZIREA VASULUI CU O LAMPĂ, CARE PRODUCE FOC, PUSĂ SUB VAS [74]. ASTFEL A OBȚINUT O APĂ PERFECT DULCE [74]. NOI NU CUNOAȘTEM ÎN CE CONSTĂ PROCEDEUL, CE VAS DE PLUMB A FOLOSIT ȘI CE REACȚII CHIMICE SE PRODUC. DOMNUL DU CLOS A REMARCAT CĂ APA DE MARE SE POATE DESALINIZA NUMAI PRIN URMĂTOARELE TEHNOLOGII [74]:

1. DISTILARE,
2. TRANSCOLARE, SAU
3. PRECIPITARE.

DISTILAREA ESTE UN PROCES ÎN CARE ARE LOC RIDICAREA VAPORILOR ÎN AER [74]. ÎN APA SĂRATĂ ESTE SARE DE BUCĂTĂRIE, CARE ESTE CRISTALINĂ [75]. ÎN [65] ESTE PREZENTAT CĂ SAREA COMUNĂ ESTE CRISTALINĂ. CREDEM CĂ SAREA COMUNĂ ESTE SARE DE BUCĂTĂRIE. DESALINIZAREA APEI PRIN DISTILARE ȘI TRANSCOLAȚIE IMITĂ NATURA CONFORM CU DU CLOS [74]. DIN NATURĂ ȘTIM CĂ APA DIN VASE SE EVAPORĂ, ȘI CANTITATEA DE APĂ DIN VAS SCADE, LA ORICE TEMPERATURĂ MAI MARE DECÂT TEMPERATURA DE ÎNGHEȚ A APEI, CUNOȘTINȚE PE CARE LE ÎNVĂȚĂM DIN CĂRȚI, DE EXEMPLU [76]. PRIN TRANSCOLARE APA TRAVERSEAZĂ UNELE NISIPURI, CARE O FILTREAZĂ, ȘI OPRESC SAREA ACESTUIA [74]. SAREA CARE RĂMÂNE ÎN URMA TRANSCOLĂRII NU ȘTIM DACĂ ESTE SAREA COMUNĂ CRISTALINĂ DIN [65], DEOARECE ÎN LUCRAREA [65] ESTE O REFERIRE LA O CLASĂ DE SUBSTANȚE NUMITE SĂRURI. PRECIPITAREA NU ARE UN EFECT BUN, DEOARECE SAREA MARINĂ SE PRECIPITĂ NUMAI CU O ALTĂ SARE CARE ÎI DĂ UN ALT GUST RĂU [65]. EVAPORAREA MASIVĂ ȘI RAPIDĂ A APEI ARE LOC CÂND ÎNCEPE FIERBEREA APEI [73]. DISTILAREA, CARE ESTE ÎNCĂLZIREA UNEI MIXTURI ȘI COLECTAREA DIFERITELOR COMPONENTE GAZOASE ALE ACESTUIA, ESTE FOLOSITĂ ÎN TRATAREA APEI REZIDUALE [69]. APA DE MARE CONȚINE SARE DE BUCĂTĂRIE [74]. CÂND APA DE EVAPORĂ, PE FUNDUL VASULUI SE DEPUN CRISTALE DE SARE DE BUCĂTĂRIE [74]. DACĂ VAPORII ATING O SUPRAFAȚĂ

SOLIDĂ RECE, ELE SE CONDENSEAZĂ, ȘI PICĂTURILE SUNT APĂ DE BĂUT [74]. OBSERVĂM CĂ DISTILAREA APEI DE MARE ESTE UN PROCES CHIMIC ȘI FIZIC CARE DEMONSTREAZĂ TEORIA DE MAI SUS CĂ MIXTURILE SUNT FORMATE DIN PRINCIPII, ÎN CAZUL NOSTRU SAREA DE BUCĂTĂRIE ȘI APA, CARE SE POT SEPARA DIN MIXTURĂ, ÎN CAZUL NOSTRU APA DE MARE.

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [77].

PENTRU CUNOAȘTEREA PLANTELOR A FOST FOLOSITĂ O METODĂ DE A LE REDUCE, PE CARE CHIMIȘTII AU NUMIT-O REDUCEREA LOR LA STAREA LOR PRIMARĂ, ADICĂ REDUCEREA LOR, FĂRĂ POSIBILITATEA PROCESULUI INVERS, ÎNTR-UN LICHIOR APARENT SIMPLU, CARE CONȚINE VIRTUȚIILE LOR, PRIN FOLOSIREA PREȚINȘILOR DIZOLVANȚI UNIVERSALI, DESCRIȘI ENIGMATIC DE PARACELSE, VAN-HELMONT, DEICONTI, ETC..

PENTRU STUDIUL PLANTELOR CU FOCUL S-AU PUS URMĂTOARELE PROBLEME:

1. S-A FORMULAT PROBLEMA DACĂ MIXTURILE, SUBSTANȚELE, EXTRASE CU FOCUL AU EXISTAT ÎNAINTE DE ACȚIUNEA FOCULUI, SAU AU FOST PRODUSE DE FOC.
2. CÂND SE FOLOSEȘTE FOCUL ÎN STUDIUL PLANTELOR, UNELE SUBSTANȚE SCAPĂ PRIN TRAVERSAREA VASULUI. ACESTE SUBSTANȚE SUNT CELE MAI SUBTILE, ȘI AVEM INTERESUL SĂ LE CUNOAȘTEM. ESTE POSIBIL CA SUBSTANȚA CARE SE DISIPĂ SĂ FIE DE ACEEAȘI NATURĂ CU ACEEA CARE RĂMÂNE. DISIPAREA SE POATE PRODUCDE DEOARECE ACEEA SUBSTANȚĂ ESTE MAI AGITATĂ. ACEASTĂ DISIPARE ȘI DIFERENȚĂ DE AGITARE A SUBSTANȚEI CARE SCAPĂ REZULTĂ DIN FAPTUL CĂ PĂRȚILE CORPULUI SUNT AGITATE DIFERIT DE FOC. ACEASTA REZULTĂ DIN FAPTUL CĂ, ȘI ÎN CAZUL CORPURILOR OMOGENE, FOCUL NU ATINGE IMEDIAT TOATE PĂRȚILE ACESTUIA, ȘI NU LE ATINGE ÎN MOD EGAL. CORPURILE OMOGENE SUNT CARACTERIZATE PRIN FAPTUL CĂ AU ACEEAȘI PROPRIETĂȚI FIZICE ȘI CHIMICE ÎN ORICE PUNCT: DENSITATE, COMPOZIȚIE CHIMICĂ, ETC. PARTEA DISIPATĂ ESTE MAI SUBTILĂ ȘI MAI EFICACE DECÂT RESTUL

[77]. NOI CUNOAȘTEM RESTUL, ȘI MULTE EFECTE ALE PLANTELOR SUNT DATE DE ACEST REST, ȘI NU DEPIND DE PORȚIUNEA SUBȚILĂ.

3. ÎN PLANTE SE PRODUC ANUMITE ALTERĂRI DE ACȚIUNEA FOCULUI. UNII CHIMIȘTI, TOȚI EPICURIENII, ȘI CÂȚIVA CARTEZIENI, AU PRETINS CĂ UNELE PRINCIPII SUNT INALTERABILE. ACEASTA NU ÎMPIEDICĂ POSIBILITATEA CA MATERIIILE PE CARE NOI LE EXTRAGEM DIN PLANTE SĂ NU FIE ALTERATE DE FOC. REDUCEREA ACESTOR MATERII LA SIMPLITATEA PRINCIPIILOR ÎNȚIALE NU ESTE REZULTATUL ASUMAT DE NOI. CHIAAR DACĂ ELE SUNT MAI SIMPLE DECÂT PLANTELE, ÎNCĂ SUNT CMPUSE.
4. NU SE POT DISTINGE TOATE SUBSTANȚELE LICHIDE ȘI SOLIDE CU METODELE DIN 1699 FOLOSITE ÎN ANALIZELE CHIMCE.

DEFINIREA ȘI CARACTERISTICILE SUBSTANȚELOR EXTRASE DIN PLANTE CU FOCUL:

1. LICHIDELE DISTILLATE INSIPIDE ȘI INODORE, ȘI PE CARE CHIMIȘTII LE NUMESC FLEGME, LE NUMIM APE. ÎNTR-UN CAPITOLUL MAI SUS AM PREZENTAT CĂ SE CONSIDERA CĂ VARUL ESTE FORMAT DIN PĂMÂNT, SARE, ȘI FLEGMĂ, CONFORM CU LUCRAREA. FLEGMA DESPRE CARE AM VORBIT ÎN CAPITOLUL 5 ESTE POSIBIL SĂ FIE APA DESPRE CARE AM VORBIT MAI SUS ÎN ACEST CAPITOL. AȘA CUM AM PREZENTAT MAI SUS, ACEASTĂ APĂ ESTE NUMITĂ FLEGMĂ DE CHIMIȘTI.
2. SĂRURILE CARE NU CONȚIN ACIZI SE NUMESC SĂRURI SULFURATE. ACESTE SĂRURI SUNT SAU VOLATILE SAU FIXE. CHIMIȘTII NUMESC SUBSTANȚELE INFLAMABILE ÎN MOD COMUN SULF, NUME SUB CARE EI ÎNȚELEG TOT CE POATE FI INFLAMABIL. ÎNSĂ NOI NU NUMIM SULFURI ACESTE SUBSTANȚE DIN ACEASTĂ CAUZĂ. LE NUMIM SULFURI DEOARECE SE LEAGĂ DE CÂTEVA SUBSTANȚE COMBUSTIBILE, CA GRĂSIMILE SAU ULEIURILE, ÎN MOD ASEMĂNĂTOR CU SULFUL, ADICĂ FORMEAZĂ NOI SUBSTANȚE CU CONTRIBUȚIA ACELORAȘI RAPOARTE ALE NATURII. ACEASTA ESTE SUFICIENT PENTRU FOLOSIREA ACESTUI CUVÂNT.

3. SAREA NUMITĂ ÎN FRANCEZĂ LIXIVIEL, O SARE FIXĂ, CARE ARE UN ANUMIT GUST, NUMIT ÎN FRANCEZĂ LEXIVEL.
4. SAREA FIXĂ, CARE ARE GUSTUL SĂRII COMUNE, SE NUMEȘTE SARE SALINĂ.
5. LICHIORURILE APOASE CARE AU UN GUST CARE SE MANIFESTĂ, SE NUMESC LICHIORURI SPIRITUALE.
6. LICHIORURILE CARE AU MULT GUST SE NUMESC ESENȚE.
7. LICHIORURILE CARE PRODUC ASUPRA LIMBII O SENZAȚIE DE CĂLDURĂ SE NUMESC ESENE ACRE. CÂND PRODUC ASUPRA LIMBII O SENZAȚIE DE COROZIUNE, SE NUMESC ACRE COROZIVE.
8. LICHIORURILE CARE AU UN GUST INTR-UN ANUMIT RAPORT CU SĂRURILE SULFURATE, SE NUMESC ESENȚE SULFURETE. CÂND AU ACEST GUST FOARTE PUTERNIC, LE NUMIM URINOASE.

UN NOU REZULTAT AL DISTILĂRII A FOST PREZENTAT DE BOURDELIN CARE A OBȚINUT UN CAP-MORT TRAS DUPĂ 26 DE DISTILĂRI ALE UNUI ULEI DIN DIVERSE PLANTE, LA CARE A ADĂUGAT DE FIECARE DATĂ O ANUMITĂ CANTITATE DE APĂ COMUNĂ, 10 UNCII DIN ACEST ULEI AU FURNIZAT 2 UNCII ȘI JUMĂTATE DE UN ULEI MAI PUR, APA DISTILATĂ DE 24 DE ORI A PRECIPITAT ÎN CONTINUARE MERCURUL DIZOLVAT [78].

PARTEA CARE URMEAȘĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [77].

S-A EFECTUAT DISTILAREA MAI MULTOR PLANTE.

ÎN TIMPUL DISTILĂRII MAI MULTOR PLANTE, PRIN CREȘTEREA TREPTATĂ A FOCULUI, S-AU OBȚINUT DIFERITE SUBSTANȚE CU CARACTERE DIFERITE. ÎN ACEEA PERIOADĂ, PENTRU DISTILARE SE FOLOSEA ALAMBICUL.

CREȘTEREA FOCULUI A FOST OPRITĂ CÂND LICHIORUL A ÎNCEPUT SĂ CURGĂ. FOCULA A FOST CRESCUT DUPĂ CE LICHIORUL NU A MAI VENIT. ACEASTA ÎNSEAMNĂ CĂ DIFERITE SUBSTANȚE AU FOST OBȚINUTE LA DIFERITE STĂRI DE ÎNCĂLZIRE A ALAMBICULUI, ȘI A SUBSTANȚEI DIN ACESTA. DISTILAREA S-A CONTINUAT PÂNĂ CÂND RECIPIENTUL A RĂMAS GOL.

PRIN ACEST PROCES, ÎN FUNCȚIE DE STAREA DE ÎNCĂLZIRE A ALAMBICULUI, S-AU OBȚINUT URMĂTOARELE SUBSTANȚE:

1. LA PRIMA CĂLDURĂ SE OBȚIN ESENȚELE FOARTE ACRE, CARE SUNT PRODUSE DE PUȚINE PLANTE.
2. LA URMĂTOAREA TREPTĂ SE OBȚIN ULEIURILE SUBTILE, NUMITE ȘI ULEIURI ESENȚIALE, AMESTECATE CU APĂ SAU SEPARATE.
3. ESENȚELE SULFURATE.
4. APELE SIMPLE.
5. ACID OCULT, FĂRĂ GUST, AMESTECAT CU APĂ.
6. SULFURĂ OCULTĂ ÎN AMESTEC CU APĂ.
7. ESENȚE ACIDE.
8. ESENȚE MIXTE.
9. ESENȚE URINOASE.
10. ESENȚE URINOASE AMESTECATE CU ACIZI.
11. SĂRURI VOLATILE.
12. ULEIURI NEGRE.
13. SAREA FIXĂ, SAU SALINĂ.
14. PĂMÂNTUL.

A FOST ANALIZATĂ ACEASTĂ METODĂ ȘI A FOST APLICATĂ PLANTELOR ÎNTREGI ȘI PĂRȚILOR LOR, ȘI AU FOST FORMULATE URMĂTOARELE REMARCI:

1. NU TOATE PLANTELE DAU ACESTE SUBSTANȚE; SUNT PUȚINE CARE DAU ESENȚELE FOARTE ACRE; AU FOST GĂSITE NUMAI CUCRIGUL NEGRU, ȘOFRANUL, VERONICA, ȘI O PLANTĂ NUMITĂ ÎN FRANCEZĂ L'ELLEBORÂTRE; TOATE AROMATICELE DAU ULEIUL ESENȚIAL, ȘI NICI UNA DINTRE CELELALTE NU O DAU; SUNT PUȚINE CARE DAU APA FĂRĂ TOT GUSTUL; CEA MAI MARE PARTE DAU ACIZII OCULȚI SAU SULFURILE OCULTE; SUNT CÂTEVA CARE NU DAU ESENȚELE MIXTE; MAI MULTE DINTRE ELE NU DAU MIROSUL SĂRII VOLATILE.
2. CÂTEVA PLANTE DAU SUBSTANȚE SINGULARE, CARE NU AU FOST VĂZUTE DECÂT ÎN ANALIZA A UNA SAU DOUĂ PLANTE, CA DE EXEMPLU O SUBSTANȚĂ CARE A TRECUT LA PRIMUL GRAD DE FOC CU ESENȚELE FOARTE ACRE ALE CUCRIGULUI NEGRU.

3. ÎN MOD ORDINAR CELE MAI MULTE PLANTE SUNT TINERE, CELE MAI MULTE DINTRE ELE DAU ESENȚELE URINOASE, ȘI MAI PUȚINE DINTRE ELE DAU ACIZII.
4. TIJELE, VREJURILE, TULPINILE NU DAU SĂRURILE VOLATILE, CU EXCEPȚIA CĂTORVA, CARE SUNT EXTREM DE ELASTICE, FRAGILE, CA ALE NARCISELOR, CARE DAU PUȚIN.
5. FRUNZELE CELOR MAI MULTE PLANTE CARE AU FOST ANALIZATE, DAU ÎNTR-O ANUMITĂ CANTITATE SĂRURILE VOLATILE ÎN CORP.

CONCLUZIILE CAPITOLULUI DIN CUNOȘTINȚELE PREZENTATE ÎN LUCRĂRILE [74] ȘI [77]:

1. NU NUMAI APA COMUNĂ SE EVAPORĂ PRIN DISTILARE, CI ȘI MULTE ALTE SUBSTANȚE OBȚINUTE DIN DISTILAREA PLANTELOR.
2. FOARTE MULTE SUBSTANȚE SE OBȚIN DIN DISTILAREA PLANTELOR LA DIFERITE TEMPERATURI.
3. FIECARE SUBSTANȚĂ EXTRASĂ COMPLET LA O TEMPERATURĂ MAI MICĂ NU SE MAI EXTRAGE LA O TEMPERATURĂ MAI MARE.

14.ATOMII ȘI MOLECULELE CONSIDERATE CORPURI

PRIN STUDIUL REACȚIILOR CHIMICE CUNOSCUTE PUTEM SĂ ÎNȚELEGEM CUM S-A DESCOPERIT CHIMIA.

UN ELEMENT AL PREZENTEI LUCRĂRI ESTE CĂ ÎN BETON, CÂND SE ÎNTĂREȘTE, SE PRODUC REACȚII CHIMICE ÎN CARE REZULTĂ MOLECULE NOI, CEEA CE ESTE UN FENOMEN CARE, ÎMPREUNĂ CU ALTE FENOMENE, A DUS LA CERCETAREA ȘI A ALTOR REACȚII CHIMICE ȘI LA DESCOPERIREA CHIMIEI.

DE ASEMENEA, PROPORȚIILE COMPONENTELOR BETONULUI AU DUS LA CERCETAREA PROPORȚIILOR SUBSTANȚELOR ȘI DIN ALTE REACȚII CHIMICE

ȘI LA DESCOPERIREA PROPOZIȚIILOR ÎN CARE SE PRODUC REACȚIILE CHIMICE.

ÎN ANUL 1667 A FOST SCRISĂ O CARTE DESPRE PREPARAREA VARULUI [64].

NOI NU ȘTIM DACĂ LUCRAREA [64] SE REFERĂ LA VAR SAU LA CIMENT, DEOARECE ÎN MULTE LOCURI SEAMĂNĂ CU VARUL ȘI ÎN ALTELE CIMENTUL SAU CĂRĂMIDA. ASTFEL DE EXEMPLU SPUNE CĂ VARUL BUN ESTE DIN PRAF DE MARMURĂ, ÎNSĂ NOI ȘTIM CĂ ACESTA ESTE CIMENT.

ÎN LUCRAREA NOTATĂ ÎN BIBLIOGRAFIE CU [64] SUNT PUBLICATE OBSERVAȚIILE LUI PERRAULT ȘI CLOS ASUPRA ACESTEI CĂRȚI DESPRE PREPARAREA VARULUI.

CONFORM CU LUCRAREA [64] VARUL ESTE O PIATRĂ PE CARE-L AMESTECĂM ÎN FUZIUNE, ȘI SERVEȘTE CA SĂ SUDEZE, CEL MAI TARE POSIBIL, UN ANSAMBLU DE ALTE PIETRE.

ÎN PREZENT SE FOLOSESC ÎN ACEST SCOP MATERIALE CARE, PE LÂNGĂ ALTE MATERIALE, CONȚIN CIMENT, NISIP, PIETRIȘ, ȘI APĂ, NUMITE BETOANE.

BETONUL SE OBTINE PRIN AMESTECAREA CIMENTULUI CU NISIP, PIETRIȘ, ȘI APĂ.

ELEMENTELE PREZENTATE ÎN CONTINUARE ÎN PREZENTA LUCRARE FOLOSITE ÎN CONSTRUCȚII SE POT IDENTIFICA POTRIVIT ELEMENTELOR PREZENTATE MAI SUS PENTRU OBTINEREA BETOANELOR, PLUS VARUL DIN ZIUA DE AZI [64].

CONFORM CU LUCRAREA [64] VARUL MAI BUN ESTE FĂCUT DIN PIATRĂ MAI DURĂ.

PRESUPUNEM CĂ DENUMIREA DE VAR FOLOSITĂ MAI SUS SE REFERĂ LA CIMENTUL DIN PREZENT.

DE ASEMENEA PRESUPUNEM CĂ DENUMIREA DE VAR CA PIATRĂ SE REFERĂ ȘI LA BETON, DEOARECE ACESTA ESTE COMPUS DIN MAI MULTE

MATERIALE, ȘI SE ÎNTĂREȘTE ȘI DEVINE DUR CA PIATRA, ȘI LEAGĂ PIETRELE ÎNTRE ELE.

CONFORM CU LUCRAREA [64] O PIATRĂ ESTE COMPUSĂ DIN PĂMÂNT, SARE, ȘI FLEGMĂ.

CONFORM CU LUCRAREA [64] ACEST PĂMÂNT ESTE USCAT, FĂRÂMICIOS, ȘI UȘOR, SAREA ESTE COMPACTĂ ȘI GREU, ȘI FLEGMĂ ESTE FLUIDĂ, ȘI SERVEȘTE LA INTRODUCEREA SĂRII ÎN PĂMÂNT ȘI AL ATAȘA.

CONFORM CU LUCRAREA [64] DURITATEA UNEI PIETRE DEPINDE DE CÂT DE MULTĂ SARE ESTE FIXATĂ, ȘI DE CÂT PĂMÂNT ESTE NECESAR PENTRU FIXAREA SĂRII, ȘI DE UMIDITATEA CARE ESTE NECESARĂ PENTRU A LEGA SAREA ȘI PĂMÂNTUL.

CEA CE RETROGRADEAZĂ IPSOSUL ÎN REALIZAREA BETONULUI, ESTE UN CONȚINUT MAI MARE DE PĂMÂNT DECÂT DE SARE FIXĂ, ȘI CĂ ACEASTĂ SARE ESTE SLAB LEGATĂ DE O FLEGMĂ PREA GROSIERĂ [64]. IPSOSUL ESTE UN PRAF ALB CARE SE OBTINE DIN GHIPSUL MĂCINAT PRIN DESHIDRATARE, ȘI PRIN ÎNCĂLZIRE ÎN FIERBĂTOARE SPECIALE, FOLOSIT CA LIANT [79]. GHIPSUL ESTE SULFAT NATURAL HIDRATAT DE CALCIU, CU DURITATE MICĂ [79]. DE AICI VINE CĂ SAREA IPSOSULUI, ADICĂ BETONUL REALIZAT DIN IPSOS, ESTE ATÂT DE UȘOR DIZOLVAT DE APĂ SAU DE UMIDITATEA DIN AER, DUPĂ CARE PĂRȚILE MIXTURII NU MAI AU UN LIANT COMUN [64]. ESTE POSIBIL CA DIN ACEEAȘI CAUZĂ UN STRAT PROTECTOR DE IPSOS SĂ REZISTE MAI PUȚIN LA O CĂLDURĂ MODERATĂ DECÂT ACELA CARE ERA DIN BETON, CĂCI SE POATE CA ACEASTĂ CĂLDURĂ NU FACE DECÂT SĂ DISIPEZE LICHIDUL DE PRISOS AL IPSOSULUI, FAȚĂ DE FAPTUL CĂ NU ESTE NIMIC DE PRISOS ÎN BETON, ȘI DIN ACEASTĂ CAUZĂ FOCUL ÎL RAREFIAZĂ MAI MULT, ȘI RUINEAZĂ PĂRȚILE MIXTURII [64].

BETONUL DIN PIETRE DE ROCĂ, ȘI CEL DIN MARMURĂ SUNT EXCELENTE [64]. STRATURILE PROTECTOARE ALE PEREȚILOR GARDURILOR, CARE SUNT FĂCUTE DIN BETOANE DIN MARMURĂ, ATUNCI CÂND NU SUNT APLICATE PE PEREȚI DE PĂMÂNT, DEVIN O SPECIE DE MASTIC, SAU CHIT [64]. A FOST GĂSITĂ O PIATRĂ DIN CARE SE FACE CEL MAI BUN BETON [64].

ÎN CONTINUARE NOI PRESUPUNEM CĂ PIETRELE CALCINATE DESPRE CARE SE VA VORBI SUNT CĂRĂMIZI DIN LUT, CARE ȘTIM CĂ SE ARD. ESTE POSIBIL SĂ FIE VORBA ȘI DE BETOANE CARE SE ARD PENTRU A PRODUCЕ CĂRĂMIZI. NOI NU ȘTIM DACĂ DIN VAR SE FAC CĂRĂMIZI, ÎNSĂ AM VĂZUT CĂRĂMIZI DIN LUT ȘI DIN BETON.

ESTE BINE CĂ PIETRELE PE CARE VREM SĂ LE CALCINĂM RĂMÂN, DE A LUNGUL CĂTORVA ANI, EXPUSE LA AER [64]. DACĂ EXHALEAZĂ O ANUMITĂ UMIDITATE TERESTRĂ, ACEASTA POATE ÎNRĂUTĂȚII UNIUNEA PRINCIPIILOR [64]. CÂND PRIMESC ANUMITE SĂRURI VOLATILE DIN AER, CARE SE UNESC VOLUNTAR CU SĂRURILE FIXE, SĂRURILE VOLATILE CRESC SOLIDITATEA SĂRURILOR FIXE [64].

PIATRA TREBUIE ARSĂ ÎN CUPTOR LA UN FOC MODERAT, POTRIVIT CA GAZUL GROSIER CARE SE RIDICĂ, SĂ NU RIDICE SĂRURILE VOLATILE [64]. NOI CONSIDERĂM ÎN CONTINUARE CĂ LICHIDUL CARE SE EVAPORĂ PROVINE DIN APA AMESTECATĂ ÎN VARUL CARE SE ARDE, ȘI CARE PRIN REACȚII CHIMICE CU CELELALTE COMPONENTE ALE VARULUI, ESTE POSIBIL SĂ FORMEZE ȘI ALTE MOLECULE, ȘI SĂ SE EVAPORA ȘI ALTE GAZE ÎN AFARĂ DE AER. DUPĂ CE LICHIDUL S-A EVAPORAT, FOCUL SE POATE FACE MARE, CARE DĂ ÎNAPOI PARTICULELE DE SARE ȘI PĂMÂNT MAI DELICATE ȘI MAI SUBTILE, ȘI LE DISPUNE ASTFEL ÎNCÂT SĂ SE UNEASCĂ MAI STRÂNS, ȘI DACĂ PĂRȚILE UNUI COMPUS SUNT MAI MICI, COMPUSUL ESTE MAI SOLID ȘI MAI COMPACT [64]. ASEMĂNĂTOR, SĂRURILE VOLATILE ALE LEMNULUI SE ALĂTURĂ SĂRURILOR FIXE ALE VARULUI, CĂRĂMIZII, CIMENTULUI, CARE FAC DIN NOU SOLIDITATEA ÎNTREGULUI [64].

DEOARECE PIATRA ELIMINĂ PRIN CALCINARE TOT LICHIDUL EI GROSIER, EA PIERDE DIN GREUTATE UN SFERT, SAU CEL MULT O TREIME [64]. ALTFEL, O PIERDERE MAI MARE DE MASĂ ÎNSEAMNĂ CĂ A AVUT PEA MULTĂ UMIDITATE, SAU ALT LICHID, ȘI PUȚINĂ SARE FIXĂ AMESTECATĂ CU UN PĂMÂNT PEA UȘOR [64].

DUPĂ CE VARUL A FOST ARS, EL SE GĂTEȘTE LA AER, ȘI NU-ȘI PIERDE SĂRURILE LUI, CI DIN CONTRĂ [64]. CLOS AFIRMĂ CĂ EL ACHIZIȚIONEAZĂ

ALTE SĂRURI NOI, ÎNSĂ AERUL ABANDONEAZĂ PĂRȚILE TERESTRE PE CARE LE CONȚINE, CARE SE TRANSFORMĂ ÎN PRAF [64].

PENTRU A PREVENI ACEST INCONVENIENT, S-A PROPUȘ CA PIETRELE DIN CARE S-A FĂCUT VARUL SĂ FIE ARSE PÂNĂ SE DEZACTIVEAZĂ [64]. ÎNSĂ, DACĂ LOCUL DE UNDE SE ADUCE VARUL ESTE DEPARTE, EL PIERDE MULT DIN FORȚA LUI [64].

OBSERVĂM, DIN CELE PREZENTATE MAI SUS, CĂ ATUNCI CÂND APA SE EVAPORĂ DIN BETON, ÎN ACEASTA SE PRODUC REACȚII CHIMICE ȘI SE PRODUCE UNIREA PRINCIPIILOR, FORMAREA PRINCIPIILOR NOI, ȘI SOLIDIFICAREA, ADICĂ FORMAREA MOLECULELOR NOI PRIN UNIREA MOLECULELOR ȘI ATOMILOR EXISTENȚI.

CEL MAI BINE ESTE CA VARUL SĂ FIE STINS [64]. STINGEREA VARULUI SE FACE CU APĂ, SE INTRODUC VARUL ÎN APĂ, SAU SE TOARNĂ APĂ PESTE VAR, ȘI SE PRODUC O EFERVESCENTĂ [64]. ACEST PROCES DE STINGERE A VARULUI CU APĂ NU SEPARĂ PARTICULELE UNELE DE ALTELE [64]. DE ASEMENEA, VARUL TREBUIE AMESTECAT CONTINUU, PÂNĂ DISPAR, ȘI EFERVESCENTA ESTE EGALĂ PESTE TOT [64]. TREBUIE, DE ASEMENEA, ADĂUGATĂ APĂ PENTRU A ÎMPIEDICA EVAPORAREA SĂRURILOR, CARE SUNT ÎNTR-O MARE MIȘCARE, ȘI PENTRU A REPRIMA VIOLENȚA ACȚIUNII LOR, ȘI CARE SUNT DE AȘA NATURĂ ÎNCÂT, FĂRĂ ACEASTĂ FRÂNĂ, INTRĂ ÎNTR-O CANTITATE FOARTE MARE ÎNTR-O ANUMITĂ PARTE A PĂMÂNTULUI, A AMESTECULUI, ȘI FORMEAZĂ MICI PIETRE DURE [64].

CÂTEODATĂ PIETRELE FOARTE BUNE REDUSE ÎN VAR AU FOST O ZI ÎNTREAGĂ ÎN APĂ RECE FĂRĂ SĂ PRODUCĂ NICI O EFERVESCENTĂ, ȘI ELE FAC EFERVESCENTA IMEDIAT CU APĂ CALDĂ, APARENT PENTRU CĂ SINGURA CALCINARE A LEGAT AȘA DE BINE PRINCIPIILE, CĂ APA RECE NU A AVUT PUTEREA SĂ LE PENETREZE [64]. ACEASTĂ REACȚIE CHIMICĂ A STINGERII VARULUI CU APĂ CALDĂ, DUPĂ CE APA RECE NU A PRODUS NICI UN EFECT, ESTE O REACȚIE ENDOTERMĂ CA TERMENUL DEFINIT ÎN LUCRAREA [80].

CÂND VARUL A DISPĂRUT, PĂMÂNTUL, ADICĂ AMESTECUL, TREBUIE ACOPERIT ȘI FERIT DE ACȚIUNEA AERULUI [64]. VARUL CARE ESTE ȚINUT

TIMP MAI LUNG ÎN ACEASTĂ STARE, ESTE MAI BUN [64]. ÎN ACEASTĂ STARE SE PRODUCE O FERMENTAȚIE LENTĂ ȘI INSENSIBILĂ A PĂRȚILOR CELE MAI DELICATE, CARE DESĂVÂRȘEȘTE CEEA CE A ÎNCEPUT PRIN EFERVESCENTĂ ȘI STINGEREA VARULUI [64]. ROMANII AU FOLOSIT ÎN CETĂȚILE LOR VAR STINS CU CEL PUȚIN TREI ANI ÎNAINTE [64].

DESPRE MANIERA DE A FACE MORTARUL SAU CIMENTUL, NU AU FOST FĂCUTE NICI UN FEL DE REMARCI [64].

CLOS ȘI BOYLE ERAU CONSIDERAȚI CHIMIȘTI [81]. CLOS A EXAMINAT CARTEA DE CHIMIE A LUI BOYLE ESEURI DE CHIMIE [81]. BOYLE A DESCRIS TOATE FENOMENELE CHIMICE CU FILOZOFIA CORPUSCULARĂ, CARE CONSIDERĂ CĂ ELE SUNT DESCRISE DE CORPURI MICI ȘI DE MIȘCĂRILE LOR [81]. CONFORM LUI CLOS, CHIMIA NU SE POATE REDUCE LA ACESTE PRINCIPII SIMPLE, LA CORPURI ȘI MIȘCĂRILE LOR, ȘI I-A ATRIBUIT O ANUMITĂ OBSCURITATE [81]. DE EXEMPLU, LEMNUL DE BRAZILIA FIERT ÎN CLĂBUCI DE SĂPUN DE SĂRURI SULFURATE GENEREAZĂ O CULOARE VIOLET, ȘI PRIN AMESTECAREA CU APĂ TARE, ESENȚĂ DE SALPETRU, SAU UNELE LICHIORURI MINERALE ACIDE, SE TRANSFORMĂ INSTANTANEU ÎN GALBEN [81]. CONFORM CU CLOS, ACEASTĂ CULOARE ROȘIE SE DATOREAZĂ EXTRAȚIEI DE SĂRURI SULFURATE, ȘI CONFORM LUI BOYLE UNEI NOI ȚESĂTURI A PARTICULELOR CARE FORMEAZĂ SUPRAFAȚA LICHIORULUI [81].

DACĂ SE ADAUGĂ MERCUR ÎNTR-O SOLUȚIE ÎN CARE S-A DIZOLVAT ARGINT TERMINAT ÎN APĂ TARE, DILUAT CU APĂ COMUNĂ, SE PRODUC CORPURI SOLIDE ARGINTII ÎN FORMĂ DE RAMURI, CARE SE HRĂNESC PRIN ACUMULARE DE SUBSTANȚĂ, SE ÎNTIND, ȘI SE MULTIPLICĂ ÎN TOT LICHIDUL CA ARBUȘTII [81]. BOYLE A APLICAT TEORIA LUI A PARTICULELOR, ȘI A EXPLICAT FENOMENUL PRIN FAPTUL CĂ ÎNAINTE DE A VĂRSA MERCURUL, PARTICULELE DE ARGINT DIZOLVATE ERAU ÎN MIȘCARE, ȘI CÂND S-A VĂRSAT MERCURUL, ELE S-AU REÎNTÂLNIT PRINTR-O SPECIE DE HAZARD, ȘI S-AU ATAȘAT [81]. CLOS AFIRMĂ CĂ PARTICULELE SE CAUTĂ MUTUAL, ȘI PENTRU A DEMONSTRA IMOBILITATEA PARTICULELOR DE ARGINT ÎNAINTE DE ADĂUGAREA MERCURULUI, EL ADUCE CA ARGUMENT ANUMITE SOLUȚII

ÎN CARE S-A DIZOLVAT AUR, SAU EL VORBEȘTE DE DIVIZAREA ÎN PĂRȚI STRĂLUCITOARE FOARTE MICI, DISPERSATE PRIN USCAREA LICHIDULUI [81].

CHIMIE, PRIN OPERAȚIUNI VIZIBILE REZOLVĂ CORPURILE, CEEA CE ÎNSEMNĂ CĂ CLASIFICĂ CORPURILE, ÎN ANUMITE PRINCIPII GROSIERE PALPABILE, SĂRURI, SULFAȚI, ETC. [81].

OBSERVĂM CĂ AICI SUBSTANȚELE CU PROPRIETĂȚI CHIMICE ASEMĂNĂTOARE SUNT CLASIFICATE ȘI CONSIDERATE PRINCIPII, SPRE DEOSEBIRE DE CONSIDERAREA CA PRINCIPII A SUBSTANȚELOR FĂRĂ CLASIFICAREA LOR PRIN PROPRIETĂȚILE CHIMICE PREZENTATĂ ÎN CAPITOLUL 0.

ÎNSĂ FIZICA, PRIN SPECULAȚII DELICATE ACȚIONEAZĂ ASUPRA ACESTOR PRINCIPII, CUM A FĂCUT CHIMIA ASUPRA CORPURILOR, ȘI LE REZOLVĂ ÎN ALTE PRINCIPII ȘI MAI SIMPLE, PREZENTATE ÎNTR-O INFINITATE DE MODURI [81].

ACESTE SUNT PRINCIPALELE DIFERENȚE ÎNTRE FIZICĂ ȘI CHIMIE, ȘI ACELEAȘI CARE SUNT ÎNTRE BOYLE ȘI CLOS [81].

SPIRITUL CHIMIEI ESTE MAI CONFUZ, MAI ÎNVELIT, EL SE REFERĂ MAI MULT LA MIXTURI, ÎN CARE PRINCIPIILE SUNT ÎNCĂRCATE UNELE CU ALTELE [81].

GÂNDIREA, LOGICA, FIZICII ESTE MAI SIMPLĂ, ȘI AJUNGE PÂNĂ LA ORIGINILE ELEMENTARE [81].

DIN CELE PREZENTATE MAI SUS ÎN OBȚINEREA ACESTEI SĂRI NOI, EXISTĂ DOUĂ POSIBILITĂȚI

1. ÎN COMPOZIȚIA SĂRII DE MARE EXISTĂ ȘI O ALTĂ SARE ÎN CANTITATE MICĂ CARE SE SEPARĂ PRIN PROCESELE PREZENTATE.
2. PRIN CALCINARE, SAREA REACȚIONEAZĂ CU UNA DIN MOLECULELE DIN AER ȘI REZULTĂ O NOUĂ SARE.

OBSERVĂM CĂ, ÎN CHIMIE, SUNT CONSIDERATE PRINCIPII TIPURILE DE MOLECULE CLASIFICATE DUPĂ PROPRIETĂȚILE LOR CHIMICE, ÎNSĂ ȘI ELEMENTELE CHIMICE DE DIFERITE TIPURI SE CLASIFICĂ DUPĂ PROPRIETĂȚILE LOR ÎN PRINCIPII, ȘI ÎN REACȚIILE CHIMICE, UNELE ELEMENTE CHIMICE SAU MOLECULE TREC DE LA O MOLECULĂ LA ALTA, ASTFEL ÎNCÂT SE POATE CONSIDERA CĂ MOLECULELE SUNT ÎNCĂRCATE UNELE CU ALTELE.

ACEST FENOMEN DE PRODUCERE A CORPURIILOR SOLIDE DE ARGINT ÎN FORMĂ DE RAMURI, ȘI CREȘTEREA LOR ÎN TIMP, ÎN SOLUȚIA ÎN CARE S-A DIZOLVAT ARGINT, TERMINAT CU APĂ TARE, DILUATĂ CU APĂ COMUNĂ, DUPĂ ADĂUGAREA MERCURULUI, EXPLICAT MAI SUS PRIN MIȘCAREA ȘI ÎNTÂLNIREA PARTICULELOR, ESTE SIMILAR CU CRISTALIZAREA PARTICULELOR DE SARE DE BUCĂTĂRIE CARE SE PRODUCE PRIN EVAPORAREA APEI DIN SOLUȚIA DE APĂ SĂRATĂ, ȘI ACEST AL DOILEA FENOMEN ESTE PREZENTAT MAI JOS ÎN CAPITOLUL 0 DEASUPRA. ÎN ACESTE DOUĂ FENOMENE SE VORBEȘTE DESPRE O TEORIE CARE ESTE MIȘCAREA ÎN LICHID A PARTICULELOR, ȘI ÎNTÂLNIREA PARTICULELOR CARE SE LIPESC ȘI FORMEAZĂ SOLIDUL. ACEASTĂ TEORIE ESTE CONFIRMATĂ ÎN PREZENT ÎN LUCRAREA [82].

CONCLUZIILE DIN CELE PREZENTATE MAI SUS SUNT URMĂTOARELE:

1. PENTRU A LEGA SAREA ȘI PĂMÂNTUL PENTRU A FORMA BETONUL ESTE NEVOIE DE UMIDITATE, ADICĂ DOUĂ SUBSTANȚE AMESTECATE CU O A TREI SUBSTANȚĂ FORMEAZĂ O NOUĂ SUBSTANȚĂ, ADICĂ REACȚIE CHIMICĂ ÎN CARE INTRĂ TREI SUBSTANȚE, ȘI SE FORMEAZĂ A PATRA SUBSTANȚĂ, BETONUL.
2. DEOARECE LICHIDUL ÎN CARE ERA FIERT LEMNUL DE BRAZILIA CONȚINEA SĂRURILE SULFURATE, EXTRAȚIA SĂRURILOR SULFURATE SE REFERĂ LA TRANSFERUL PARTICULELOR, AICI PARTICULELE SUNT SĂRURILE SULFURATE, DIN LICHID LA LEMN PRIN FIERBERE, SAU INVERS, DIN LEMN SOLUȚIE ȘI ÎN SOLUȚIE A MAI APĂRUT UN TIP DE SĂRURI SULFATATE.

3. ACESTE DOUĂ FENOMENE DE MAI SUS VORBESC DESPRE DESPĂRȚIRE PARTICULELOR ATUNCI CÂND SOLIDUL ESTE DIZOLVAT ÎN LICHID, MIȘCAREA PARTICULELOR ÎN LICHID, ȘI LIPIREA PARTICULELOR ATUNCI CÂND ÎN LICHID SE FORMEAZĂ UN SOLID.
4. CONFORM CU CAPITOLUL 0 DEASUPRA PRINCIPIILE SE COMBINĂ ÎNTRE ELE PENTRU A FORMA NOI PRINCIPII, ADICĂ CEEA CE AM PREZENTAT LA PUNCTELE 1, 2, ȘI 3.
5. UNELE PRINCIPII, PARTICULE, PENTRU A SE LEGA ÎNTRE ELE TREBUIE ÎNCĂLZITE, ADICĂ SE PRODUC REACȚII ENDOTERME.

S-A OBȚINUT CĂ APA DE BOURBON-L'ARCHAMBAUT, ȘI CEL DE VICHY, CARE SE PARE CĂ AU ACELAȘI EFECT CA SAREA FIXATĂ DE PLANTE, AU O SARE SULFUROASĂ ȘI NITROASĂ, PE CARE APA DE BOURBON-LANCY ȘI DE BAREGE NU O AU [83]

MORTARUL SE OBȚINE PRIN FOLOSIREA VARULUI, CONFORM CU LUCRAREA [84]. CIMENTURILE CALCAROASE ȘI MORTARELE ERAU OBȚINUTE CU REGULI EXPERIMENTALE [84]. EXPERIMENTAL, S-AU ÎNLOCUIT CĂRĂMIZILE ZDROBITE CU PUZZOLANA, CONFORM CU LUCRAREA [84].

ÎN CONSTRUCȚII SE FOLOSEAU OALA DE ZGURĂ ȘI LACTATE DE FIER FORJAT, CONFORM CU LUCRAREA [84].

INGREDIENTELE CARE INTRAU ÎN COMPOZIȚIA MORTARELOR ÎN MOD UZUAL SUNT: VAR, NISIP SILICIOS, ȘI PUZZOLANA, CONFORM CU LUCRAREA [84].

PIATRĂ DE VAR SUNT ȘI CARBONAȚII DE CALCAR, CARE ARSE CU FOC, SE ÎNCĂLZESC CU ARPA ȘI FAC PASTĂ CU ACEST LICHID [84]. PIATRĂ DE VAR SUNT ȘI MARMURA ALBĂ ȘI MARNA GROSIERĂ [84]. EXISTĂ NUMEROASE VARIANTE A CELOR DE MAI SUS [84].

DIN ACESTE PIETRE DE VAR SE OBȚINEA VAR, CONFORM CU LUCRAREA [84]. ERAU OBȚINUTE VARURI GRASE ȘI VARURI SLABE, CONFORM CU LUCRAREA [84].

PUNÂND IN CONTACT, CHIAȚ SI LA FRIG, CREȚA CU SILICAȚI ALCALINI DIZOLVAȚI, SE PRODUCE UN ANUMIT SCHIMB DE ACIZI INTRE CELE DOUA SĂRURI; O PARTE DIN CREȚA SE TRANSFORMA IN SILICAT DE VAR, SI O CANTITATE CORESPONDENTA DE POTASIU IN CARBONAT DE POTASIU, CONFORM CU LUCRAREA [85]. PASTA CARE SE OBȚINE DIN AMESTECUL CREȚEI PUDRĂ, PARȚIAL TRANSFORMAT IN SILICAT DE VAR, CU APA SE ÎNTĂREȘTE LA AER SI CĂPĂȚA O DURITATE LA FEL DE MARE SAU MAI MARE CA CIMENTURILE HIDRAULICE, CONFORM CU LUCRAREA [85].

15.DEOSEBIREA SUBSTANȚELOR CHIMICE PRIN GUST, ȘI CU SOLUȚII DE TINCTURĂ DE TURNESOL ȘI SUPERBA COROZIVĂ

GUSTUL ESTE FOLOSIT ÎN CHIMIE PENTRU IDENTIFICAREA SUBSTANȚELOR [86].

GUSTUL ESTE O CARACTERISTICĂ A UNEI PLANTE PRIN CARE O PUTEM IDENTIFICA ȘI ANALIZA.

PRIN FIERBEREA PLANTELOR ÎN APĂ OBȚINEM DIFERITE GUSTURI. PRIN DISTILAREA ACESTOR FIERTURI OBȚINEM DIFERITE ESENȚE ALE UNOR PANTE. FIERBEREA ȘI DISTILAREA ACESTOR FIERTURI SUNT PROCESE CHIMICE.

PRIN FIERBEREA ȘI DISTILAREA PLANTELOR S-AU OBȚINUT O MULȚIME DE SUBSTANȚE DIFERITE, CU GUST SAU FĂRĂ GUST.

UNELE SUBSTANȚE CHIMICE SE DEOSEBESC PRIN GUST, ÎNSĂ NUMEROASE MATERII DISTILATE NU AU GUST ȘI NU SE DEOSEBESC PRIN GUST [86].

PENTRU UNELE SUBSTANȚE GUSTUL NU DIFERĂ ȘI NU LE PUTEM DISTINGE PRIN GUST [86].

A TREBUIT GĂSITE CÂTEVA SUBSTANȚE, CARE LUCREAZĂ, CARE VORBESC ASTFEL, GUSTĂ MAI SIMPLU CA NOI, CARE DISTING DIFERITE GRADE ALE SAVORII, CĂRORA NU LE SCAPĂ SAVOAREA UȘOR DE CONFUNDAT, ȘI CARE DISTING O SAVOARE NULĂ, DEOARECE PENTRU SUBSTANȚELE FĂRĂ GUST EI AU ATRIBUIT SAVOAREA CARE O DETECTEAZĂ ACESTE SUBSTANȚE DE ANALIZĂ [86].

PENTRU TOATE SUBSTANȚELE, CU GUST ȘI FĂRĂ GUST, INCLUSIV CELE OBȚINUTE DIN PLANTE, S-A GĂSIT METODA SOLUȚIILOR DE TINCTURĂ DE TURNESOL ȘI SUPERBA COROZIVĂ, PRIN FAPTUL CĂ ELE SE COLOREAZĂ

CÂND SUNT ADĂUGATE ÎN SOLUȚIE [86]. UNA SE COLOREAZĂ ÎN SOLUȚIILE ACIDE, CEALALTĂ ÎN SOLUȚIILE SULFURATE [86].

TURNESOLUL ARE CULOAREA ALBASTRĂ, CARE SE SCHIMBĂ ÎN ROȘU ÎN LICHIDE ACIDE, CHIAI DACĂ ACIDITATEA ESTE MAI SLABĂ, ȘI CULOAREA ROȘIE ESTE MAI INTENSĂ DACĂ ACIDITATEA ESTE MAI PUTERNICĂ [86].

TREBUIE SĂ SPUNEM AICI CĂ ALBUL ESTE LUMINA CARE NU ARE ALTĂ MODIFICARE DECÂT SLĂBIREA PRIN REFLEXIE, ȘI NEGRUL ESTE O PRIVAȚIUNE DE LUMINĂ [86]. NU AU RĂMAS DECÂT DOUĂ CULORI VERITABILE ȘI PRIMITIVE, ROȘUL ȘI VIOLETUL [86]. GALBENUL ESTE UN ROȘU DIMINUAT, ALBASTRUL ESTE UN VIOLET SLĂBIT, ȘI VERDELE ESTE UN AMESTEC DE GALBEN ȘI ALBASTRU [86].

PRIN URMARE, ROȘUL CARE ȚINE DE ALBASTRU, CA VIOLETUL, CA ROȘUL APRINS, ESTE MAI PUȚIN ROȘU, CA CEL CARE ȚINE DE GALBEN, CUM ESTE CULOAREA FOCULUI, PORTOCALIUL [86]. ÎNTRE ACESTEA DOUĂ ESTE ROȘUL PERFECT [86]. DIFERITE GRADE DE ACIDITATE PRODUC DIFERITE GRADE DE ROȘU [86].

SOLUȚIA DE SUPERBĂ, CONFORM CU DIFERITELE NATURI ALE ESENȚELOR SULFURATE CU CARE O AMESTECĂM, DEVINE MURDAR, DEVINE LĂPTOS, PUȚIN DUPĂ ACEEA SE PRECIPITĂ, SE PRECIPITĂ PE CÂMP, SAU SE COAGULEAZĂ, ADICĂ SE SOLIDIFICĂ, CEEA CE MARCHEAZĂ ÎN ESENȚELE SULFURATE PATRU GRADE DE FORȚĂ ÎN ACEASTĂ ORDINE [86]. DEOARECE CANTITATEA DIN ACESTE ESENȚE NU ȚINE LOC DE A CEEA CE LE LIPSEȘTE PRIN NATURA LOR, ELE PRODUC UN ANUMIT EFECT PRIN NATURA LOR, INDEPENDENT DE CANTITATE [86]. CEEA CE NU POATE DECÂT SĂ DEA UN ALB DE LAPTE SOLUȚIEI DE SUPERBĂ, NU O COAGULEAZĂ ÎN CANTITATEA ÎN CARE SUNT, ȘI CEEA CE ARE FORȚA DE A COAGULA, COAGULEAZĂ MAI PUȚIN, PUȚINUL PE CARE ÎL ATING, CÂND SUNT ÎN CANTITATE MICĂ [86].

PENTRU A SE ASIGURA CĂ ACESTE EFECTE ALE TURNESOLULUI ȘI SUPERBEI RĂSPUND ÎNTOTDEAUNA LA ACIZI ȘI LA SOLUȚIILE SULFURATE, EI AU VĂRSAT ESENȚE CONSTANT ACIDE SAU SULFURATE ÎNTR-O MARE CANTITATE DE APĂ, PÂNĂ CÂND SOLUȚIA OBȚINUTĂ NU A AVUT NICI O

SAVOARE SENSIBILĂ, ȘI EFECTELE TURNESOLULUI ȘI SUPERBEI S-AU ARĂTAT ÎNTOTDEAUNA [86].

EXISTĂ ESENȚE MIXTE, AMESTECURI DE ACIZI ȘI SUBSTANȚE SULFURATE, ȘI SE PUNE PROBLEMA CUM DETERMINĂM ACESTE DOUĂ SUBSTANȚE TARI, CARE AU FIECARE EFECTELE LOR PARTICULARE ASUPRA TURNESOLULUI ȘI SUBLIMEI [86]. ACESTE ESENȚE MIXTE AU INDICELE LOR, ELE ÎNROȘESC SOLUȚIA DE VITRIOL DE GERMANIA, ȘI DACĂ SEPARĂM ACIZII ȘI SULFURILE, NICI UNELE NICI CELELALTE NU MAI AU ACEST EFECT [86].

OAMENII DE ȘTIINȚĂ AU VRUT SĂ REALIZEZE ESENȚE MIXTE ARTIFICIALE, ÎN LABORATOR, ÎNSĂ NUMAI LICHIORUL DOMINANT A FĂCUT MARCAJUL DE ACID SAU SULFURAT, DUPĂ CUM A FOST DOMINANT UNUL SAU ALTUL, ȘI NICIODATĂ NU AU OBȚINUT ACEST EFECT MIXT DE ÎNROȘIRE A VITRIOLULUI [86]. REZULTĂ CĂ ÎN LICHIORURILE MIXTE NATURALE, SOLUȚIILE ACIDE SAU SULFURATE SUNT AMESTECATE DE O MANIERĂ PARTICULARĂ, SAU ÎN ACEST AMESTEC INTERVINE O TERTĂ SUBSTANȚĂ [86]. POATE CĂ ESTE O SUBSTANȚĂ PĂMÂNTOASĂ, AGRESIVITATEA UNOR LICHIORURI MIXTE LE POATE FACE SUSPECTE [86], NOI PRESUPUNEM CĂ ÎN LUCRAREA [86] SE AFIRMĂ CĂ SUNT SUSPECTE DEOARECE NU ÎNROȘESC VITRIOLUL. ESTE DE REMARCAT CĂ ÎN ACESTE LICHIORURI DOMINĂ ACIDUL, MAI PUȚIN CONFORM CU GUSTUL [86], CEEA CE NOI PRESUPUNEM CĂ ÎNSEMNĂ CĂ GUSTUL NU ESTE ACID [86].

SAVOAREA PUR SALINĂ PRECIPITĂ SOLUȚIA DE SARE DE SATURN; ÎNSĂ CUM ACEST INDICE ESTE AȘA DE NECLAR, NU O PUTEM COMPLETA DECÂT DACĂ NE SERVIM DE MAI MULTE PRECAUȚII [86].

NU AU FOST AMINTITE PÂNĂ ACUM DECÂT ESENȚE, SAU LICHIORURI SPIRITUALE; ÎNSĂ CELELALTE SUBSTANȚE PE CARE LE EXTRAGEM DIN PLANTE, SĂRURI VOLATILE, ULEIURI, SĂRURI FIXE, DECI SALINE, TOATE AU FOST EXAMINATE CU ACEEAȘI ATENȚIE [86]. EI AU RECUNOSCUȚ CÂTEVA TESTE CHIMICE CARE DEZVĂLUIE NATURA ACESTOR SUBSTANȚE, FIECARE A AVUT O SPECIE, AU FOST ȘI DIFERITE AMESTECURI ALE ACESTOR SPECII ÎNTRE ELE, AU FOST CÂTEVA APARTENENȚE PENTRU A GĂSI REGULILE

GENERALE, ȘI AU ACORDAT O ATENȚIE EXTREMĂ EXCEPȚIILOR, CARE SE FAC VĂZUTE FOARTE DES [86].

DETALIILE TUTUROR ACESTOR EXPERIMENTE, ȘI TOATE ACESTE REFLEXII ALE GÂNDIRII, IAU CONDUS FOARTE DEPARTE; EI AU REMARCAT NUMAI DOUĂ CONCLUZII: ORDINEA DIFERITELOR SUBSTANȚE PE CARE FOCUL LA FACE SĂ IASĂ DINTR-O PLANTĂ, ȘI RAPORTUL PE CARE CHIMIA STOMACULUI O POATE AVEA CU CHIMIA ARTIFICIALĂ [86].

ODATĂ CU CREȘTEREA CĂLDURII, ORDINEA ÎN CARE APAR MATERIILE ESTE [86]:

1. ESENȚELE, NUMITE LICHIORURI, CARE AU SAVOARE,
2. LA CĂLDURĂ MAI MARE, LA FOC MARE, SE PRODUC ULEIURILE VOLATILE,
3. MATERIA CAP DE MORT APARE ÎN VASUL DISTILATOR,
4. ȘI DUPĂ CALCINARE ȘI FIARTĂ CU MULTĂ APĂ, CARE ESTE LĂSATĂ SĂ SE EVAPORE, SE OBTÎN SĂRURILE FIXE, ȘI SURPLUSUL ESTE CENUȘĂ.

SULFURILE FAC PARTE DINTRE ESENȚE, APAR PRIMELE, SLĂBESC CU PROGRESUL DISTILĂRII, PÂNĂ CÂND APAR ACIZII [86]. MAI ÎNTÂI VIN ACIZII MAI SLABI, PE URMĂ ACIZII MAI TARI [86]. ÎNTRE SULFURI ȘI ACIZI APAR ESENȚELE MIXTE [86]. ULTIMELE APAR CÂTEODATĂ DUPĂ ACIZI [86]. ACEASTĂ ORDINE ESTE GRADATĂ ÎN MOD GENERAL [86].

EXISTĂ PLANTE, CA TRANDAFIRUL CRĂCIUNULUI, CARE ESTE OTRĂVITOR, ȘI ȘOFRANUL, CARE DAU ESENȚE FOARTE ACRE, CARE POT FI CLASIFICATE MAI TARI DECÂT ESENȚELE SULFURILOR, ȘI VIN DE ASEMENEA LA PRIMA CĂLDURĂ [86].

APROAPE TOATE PLANTELE AROMATICE DAU ULEIURI SUBTILE, CARE VIN ÎNAINTE DE ESENȚELE SULFURATE [86]. ACESTE ULEIURI SUNT NUMITE ESENȚIALE, ȘI VIN LA O CĂLDURĂ SLABĂ [86]. SE DISTING ULEIURILE NEGRE, CARE VIN LA SFÂRȘITUL DISTILĂRII CU SĂRURILE VOLATILE [86]. NU IES ACELEAȘI SUBSTANȚE DIN TOATE PLANTELE, ȘI NICI DIN TOATE PĂRȚILE ACELEIAȘI PLANTE [86].

ACESTE STUDII CHIMICE APLICATE LA DIFERITE PLANTE DIN BOTANICĂ, PREZENTATE MAI SUS, AU DUS LA URMĂTOARELE CONCLUZII:

1. CU CREȘTEREA CĂLDURII, ȘI PRIN DISTILARE, ÎN DIFERITE ETAPE, SE OBȚIN DIFERITE SUBSTANȚE,
2. DIN DIFERITE PLANTE, PRIN CĂLDURĂ, SE OBȚIN DIFERITE SUBSTANȚE,
3. DIN DIFERITE PĂRȚI ALE ACELEIAȘI PLANTE, PRIN CĂLDURĂ, SE OBȚIN DIFERITE SUBSTANȚE.

OBSERVĂM DE ASEMENEA O CLASIFICARE A CĂLDURII: SLABĂ, TARE, ȘI FOARTE TARE.

16. PROCEDEE DE OBȚINERE A SUBSTANȚELOR NOI

CLOS A FĂCUT CĂRȚII LUI BOYLE O ANALIZĂ LUNGĂ ȘI PROFUNDĂ [81]. ESTE DAT UN EXEMPLU ÎN SENSUL ACESTA [81]. BOYLE A PREZENTAT O METODĂ, PREZENTATĂ ȘI DE ALȚI CHIMIȘTI, DE A REDA SAREA INSIPIDĂ, ADICĂ FĂRĂ GUST, DE A ELIMINA ESENȚA ACESTEIA [81]. FILTRĂM SAREA MARINĂ DIZOLVATĂ ÎN APĂ CALDĂ COMUNĂ PRIN HÂRTIE GRI, SAU O PURIFICĂM PRIN ALTĂ METODĂ DE SEDIMENTELE PE CARE LE CONȚINE, ȘI O SOLIDIFICĂM LA FOC [81]. ÎNTR-O OALĂ, O CALCINĂM CINCI ORE, LA UN FOC PUTERNIC, PE URMĂ, PRIN CONTACT CU AERUL UMED, O REZOLVĂM, CÂND ESTE REZOLVATĂ, ȘI CÂND PĂMÂNTURILE SUNT SEPARATE, O DISTILĂM PRIN REPLICĂ, ÎMPINGÂND TOATĂ UMIDITATEA APOASĂ ÎN RECIPIENT [81]. EXPUNEM LA AER NOUA SUBSTANȚĂ OBȚINUTĂ, CEEA CE A RĂMAS ÎN REPLICĂ, ȘI O REZOLVĂM; DE ASEMENEA REPETĂM ACESTE REZOLVĂRI LA AER, ȘI ACESTE DISTILĂRI LA FOC, PÂNĂ CÂND, A OPTA OARĂ, TOATĂ SAREA, A TRECUT ÎN RECIPIENT ÎN APĂ INSIPIDĂ, ȘI NU A RĂMAS DECÂT PUȚIN

SEDIMENT PĂMÂNTOS FĂRĂ GUST, APROXIMATIV DOUĂ UNCII DIN ZECE LIVRE [81].

CLOS A OBSERVAT CE A SCĂPAT LUI BOYLE, ȘI ALTOR CHIMIȘTI, CĂ LICOAREA, LICHIDUL INSIPID AL ACESTOR SĂRURI REZOLVATĂ CU AJUTORUL AERULUI, CONȚINE O SARE SUBTILĂ, CARE PREIA CORPURILE VIZIBILE ȘI PALPABILE ALE SĂRII, PRINTR-O DIGESTIE LENTĂ ȘI LUNGĂ CU AJUTORUL UNUI FOC EXTERN, ȘI CĂ ACEASTĂ SARE A DOBÂNDIT O CALITATE NOUĂ, CARE O FACE CAPABILĂ DE MARI EFECTE ÎN CHIMIE, ȘI ÎN MEDICINĂ [81].

PRIN FILTRAREA PRIN HÂRTIE GRI, TRECE NUMAI APA, CU MOLECULELE DE APĂ, ȘI CU IONII DE Na^+ ȘI Cl^- DIZOLVAȚI DIN SARE, ȘI PARTICULELE MAI MARI DE O ANUMITĂ DIMENSIUNE, CARE SUNT SEDIMENTELE, NU TREC.

DUPĂ CUM ȘTIM DIN CAPITOLUL 0, PRIN DISTILAREA SĂRII DIZOLVATE ÎN APĂ, APA SE EVAPORĂ, ȘI RĂMÂNE SAREA COMUNĂ SOLIDĂ ȘI CRISTALINĂ. SOLIDIFICAREA LA FOC A SOLUȚIEI DE SARE DIZOLVATĂ ÎN APĂ ESTE TOT O METODĂ DE DISTILARE, CA ACEEA PREZENTATĂ MAI SUS, ȘI ARE ACELAȘI REZULTAT DE OBȚINERE A SĂRII SOLIDE CRISTALINE.

PRIN CALCINARE, METODĂ DESCRISĂ ÎN CAPITOLUL 11, SUBSTANȚA ESTE MENȚINUTĂ LA TEMPERATURĂ FOARTE MARE, CU FOC DE CĂRBUNI, SAU CU OGLINDĂ CU LUMINA DE LA SOARE. TOT ÎN CAPITOLUL 11 AM PREZENTAT CĂ REZULTATUL CALCINĂRII ESTE PRODUCEREA DE NOI MOLECULE, ÎN CARE UNA DIN MOLECULELE DIN AER, O_2 , N_2 , SAU CO_2 , REACȚIONEAZĂ CU SUBSTANȚA.

DUPĂ CUM AM PREZENTAT MAI SUS, CLOS, ÎN LUCRAREA [81], A OBSERVAT CĂ ÎN PROCESUL DE MAI SUS, SE OBȚINE O ALTĂ SARE, O ALTĂ MOLECULĂ CU ALTE PROPRIETĂȚI CHIMICE ȘI MEDICALE.

S-A EFECTUAT ANALIZA MAI MULTOR PĂMÂNTURI, ȘI NICI UNA NU A DAT O LICOARE ACIDĂ, CU EXCEPȚIA UNUI PĂMÂNT ROȘIATIC DE LA MONT-PARNASSE, ÎN SPATELE LUI CHARTREUX [78].

DINTR-UN MATERIAL NUMIT ÎN FRANCEZĂ MARNE S-A TRAS O LICOARE CARE A FOST EFERVESCENTĂ CU ESENȚA SĂRII [78].

S-AU EXAMINAT DE ASEMENEA LIMONITUL, ȘI PĂMÂNTUL UMBREI [78]. ACESTA DĂ O ESENȚĂ FOARTE ACRĂ, ANALOGĂ CU ESENȚA DE SARE [78].

MULTE FLORI AU REZERVOARE UMPLUTE CU O LICOARE SIROPOASĂ CARE SE DISTILEAZĂ LENT, LA CĂLDURĂ MARE [87].

SE PARE CĂ ACEASTĂ LICOARE SEPARATĂ DE RESTUL PLANTEI, FILTRATĂ, ȘI ARSĂ ÎN CANALELE PARTICULARE CARE DUC AFARĂ, CONSTITUIE MIEREA PE CARE O ADUNĂ ALBINELE [87].

OBSERVĂM DIN CELE PREZENTATE MAI SUS CĂ, O LICOARE SIROPOASĂ SE DISTILEAZĂ ÎN FLORI ȘI DIN ACEASTA REZULTĂ MIEREA.

DODART A REMARCAT CĂ FRUCTELE, CA PIERSICA, MĂRUL, PRUNA, CARE SE PARE CĂ NU AU DECÂT APĂ, DEOARECE NU S-A TRAS APROAPE NICI UN ULEI PRIN DISTILARE, NU SUNT PREA SĂȚIOASE [88]. TREBUIE SĂ CONȚINĂ FIXAT UN ULEI PE CARE ÎL TRAGE STOMACUL [88]. ÎN ETER, ACESTE FRUCTE LASĂ MULT CARBON, ȘI ACEST CARBON LASĂ PUȚINĂ CENUȘĂ, CEEA CE INDICĂ O MARE CANTITATE DE ULEI FIXAT CARE NU A PUTUT FI SEPARAT [88].

AU FOST EXAMINATE EXCREMENTELE DIFERITELOR ANIMALE DIN PUNCT DE VEDERE CHIMIC [89]. CELE ALE ANIMALELOR CARNIVORE CONȚIN ÎN GENERAL ULEI ȘI SARE VOLATILĂ, ȘI FOARTE PUȚIN ACID [89]. CELE ALE ANIMALELOR ERBIVORE, PRINTRE CARE CALUL ȘI VACA, CONȚIN MULT ACID, ȘI FOARTE PUȚIN LICHIOR SULFUROS, ȘI SARE VOLATILĂ [89].

BOURDELIN A ANALIZAT 90 DE PLANTE PE LÂNGĂ TEREVENTINĂ, RÂME, TRUFE, DIFERITE TIPURI DE CARNE, SÂNGELE COAGULAT, LIMFA CĂTORVA ANIMALE, LICHIORURILE ACIDE ALE DIVERSELOR LEMNE ȘI A DIVERSELOR PLANTE [90].

CU AJUTORUL ULEIULUI DE TARTRU, CLOS A PRODUS COAGULAREA APEI DE MARE ÎNTR-UN MOMENT [91]. EL A REDUS SĂRURILE FOARTE ACRE,

DUPĂ MAI MULTE LOȚIUNI, ÎN PĂMÂNT INSIPID [91]. SAREA DE TARTRU ESTE UN EXEMPLU DE SARE ACRĂ PE CARE EL A REDUS-O ÎN PĂMÂNT INSIPID [91]. URMĂTORUL EXPERIMENT REALIZAT DE EL A FOST DISTILAREA SPIRITULUI DE VIN, CEEA CE ÎNSEAMNĂ ESENȚA DE VIN CARE SE OBȚINE DIN DISTILARE DIN VIN, CARE ESTE ALCOOLUL ȘI METILIC ȘI ETILIC [91]. ÎNSĂ, ALCOOLUL APRINS CU CHIBRITUL ARDE CU FLACĂRĂ, ȘI ASTFEL NOI NU ȘTIM DACĂ EL ÎN EXPERIMENTUL LUI A STUDIAT FLACĂRA ALCOOLULUI ETILIC SAU METILIC, SAU A AMESTECULUI, SAU A REALIZAT DISTILAREA VINULUI CU FLACĂRĂ ȘI A OBȚINUT CELE DOUĂ TIPURI DE ALCOOLURI, SAU UNA DIN ELE [91]. ÎNTR-UN ALT EXPERIMENT, EL A FĂCUT VIZIBIL CA MANGANUL CARE ERA VERDE SĂ IA CULOAREA VERDE A STICLEI [91].

PRINTRE PROCEDEELE CHIMICE DE OBȚINERE A SUBSTANȚELOR NOI PREZENTATE MAI ÎNAINTE ÎN ACEASTĂ CARTE AMINTIM:

1. AMESTECUL SUBSTANȚELOR, A PRINCIPIILOR,
2. EVAPORAREA,
3. CALCINAREA,
4. FIERBEREA,
5. DISTILAREA,
6. SOLIDIFICAREA PRIN SEPARAREA UNEI SUBSTANȚE, CA FERMENTAȚIA BRÂNZETURILOR,
7. FERMENTAȚIA,
8. EFERVESCENTĂ.

ÎN TABELUL 7.1 PREZENTĂM SUBSTANȚELE, PRINCIPIILE CUNOSCUTE ÎN PERIOADA 1665 – 1699.

TABELUL 7.1.

SUBSTANȚA	BIBLIOGRAFIE
AERUL	[92]
ANTIMONIU	[67]

APA DE MARE	[74]
APA TARE	[67]
APA VIEȚII	[72]
APĂ	[64]
APELE TARI	[72]
ARGILA	[66]
ARGINT	[67]
AUR / [67]	[67]
BEREA	[72]
BETONUL	[64]
BRÂNZA	[72]
CĂRĂMIDĂ	[66]
CĂRBUNE	[49]
CEARA	[72]
CORALII	[72]
CUPRU	[62]
ESENȚA DE SALPETRU	[72]
ESENȚA DE URINĂ	[72]
ESENȚA DE VIN	[66]
ESENȚE ACIDE	[72]
ESENȚE ÎN GENERAL	[72]
ESENȚE MERCURIALE	[72]

ESENȚE SALINE	[72]
FIER	[62]
FIEREA DE VITĂ	[72]
FLEGMĂ	[64]
GHEAȚA	[72]
GHIPS	[64]
GRĂSIMILE	[72]
IPSOS	[64]
LAPTELE	[72]
LICHIORURI MINERALE ACIDE	[81]
MARMURĂ	[64]
MERCURUL / [61]	[61]
METALELE	[72]
MINERALE SULFURATE	[67]
OȚETUL	[72]
PARTICULE SULFURATE	[66]
PARTICULE SULFURATE VOLATILE	[66]
PĂMÂNT	[64]
PERLELE	[72]
PIATRĂ	[64]
PLUMB	[67]
ROCĂ	[64]

SARAMURA	[74]
SARE FIXATĂ DE PLANTE	[83]
SARE FIXĂ	[64]
SARE SULFUROASĂ ȘI ACIDĂ	[83]
SAREA	[61]
SAREA ACIDĂ ȘI VOLATILĂ A OȚETULUI	[72]
SAREA AMONIAK	[72]
SAREA CRISTALINĂ DE BUCĂTĂRIE	[65]
SAREA DE TARTRU	[72]
SAREA FIXĂ ȘI SULFURATĂ	[72]
SĂPUN DE SĂRURI SULFURATE	[81]
SĂRURI	[72]
SĂRURI CRISTALIZATE	[72]
SĂRURI SULFURATE	[72]
SĂRURI VOLATILE	[64]
SÂNGELE ARTERIAL	[72]
SÂNGELE VENOS	[72]
SPIRITUL, ESENȚA, DE ALAUN	[72]
SPIRITUL, ESENȚA, DE SARE COMUNĂ	[72]
SPIRITUL, ESENȚA, DE VITRIOL, ACID SULFURIC	[72]
STANIU	[67]
SUBSTANȚE APOASE	[72]

SUBSTANȚE SULFUROASE	[72]
SUCURI DE PLANTE	[72]
SULF	[61], [93]
SULFURĂ PIETROASĂ	[72]
SULFURI	[72]
SUPERBA COROZIVĂ	[86]
TINCTURĂ DE TURNESOL	[86]
ULEIURI APOASE	[72]
VARUL	[64]
VINUL	[72]

A FOST DEOSEBITĂ O FORMĂ A MATERIEI, NUMITĂ FORMA CRISTALINĂ, PENTRU CARE ERA CUNOSCUȚĂ SUBSTANȚA SAREA COMUNĂ, SAREA DE BUCĂTĂRIE [65].

17.NATURA AERULUI

FILOZOFII ANTICI NU AU AVUT NICI O IDEE DESPRE NATURA AERULUI [92]. MARIOTTE A CUPRINS ÎNTR-UN TRATAT TOT CE S-A FĂCUT PÂNĂ LA EL DESPRE ACEST SUBIECT, ȘI TOT CE A DESCOPERIT EL PRIN EXPERIMENTELE LUI [92].

AERUL ARE MASĂ, ȘI REZULTĂ CĂ ARE GREUTATE [92]. TORRICELLI A EFECTUAT UN EXPERIMENT PRIN CARE A DESCOPERIT ACEASTĂ PROPRIETATE, NECUNOSCUȚĂ DE ANTICI, ȘI CONTARĂ PREJUDECĂȚILOR [92].

MAI ARE O PROPRIETATE NOUĂ, SE DILATĂ, CEEA CE ESTE ASEMĂNAT CU UN RESORT [92]. DILATAREA AERULUI ESTE CONFORM CU GREUTĂȚILE CU CARE ESTE ÎNCĂRCAT [92]. DEOARECE DEFORMAREA UNUI RESORT ESTE PROPORȚIONALĂ CU FORȚA, ȘI GREUTATEA ESTE O FORȚĂ [94], ACEASTA ÎNSEMNĂ, CONFORM CU [92], CĂ DACĂ PE PITONUL UNUI CILINDRU, ÎN CARE AERUL ESTE ÎNCHIS ERMETIC, PUNEM GREUTĂȚI, VOLUMUL AERULUI, $V = S L$, SCADE PROPORȚIONAL CU GREUTATEA, ÎNSĂ CONFORM LEGII GAZELOR IDEALE VOLUMUL ESTE INVERS PROPORȚIONAL CU PRESIUNEA [94]

$$P = C / V$$

$$G / S = C / (S L)$$

$$G = C / L$$

ADICĂ LUNGIMEA AERULUI DIN CILINDRU ESTE INVERS PROPORȚIONALĂ CU GREUTATEA, CEEA CE ÎNSEAMNĂ CĂ ÎN LUCRAREA [92] NU S-AU REFERIT LA UN RESORT.

EXPERIMENTUL LUI TORRICELLI CONSTĂ ÎN ÎNCHIDEREA CU MERCUR A UNEI PORȚIUNI DE AER ÎNTR-UN BAROMETRU, ȘI DEOARECE MERCURUL ȘI AERUL ÎNCHIS SUSȚIN ÎMPREUNĂ GREUTATEA ÎNTREGII COLOANE DE AER EXTERIOR, VEDEM ÎNTOTDEAUNA CĂ AERUL SE DILATĂ ÎN TUB, CONFORM

CU ÎNĂLȚIMEA MERCURULUI CARE ÎI LASĂ O PARTE MAI MARE SAU MAI MICĂ PENTRU A SUSȚINE COLOANA EXTERIOARĂ [92]. DEȘI ȘTIM CĂ MERCURUL ESTE OTRĂVITOR, ȘI NU TREBUIE SĂ EXECUTĂM EXPERIMENTUL FĂRĂ MĂSURI DE PRECAUȚIE, ADICĂ NU TREBUIE SĂ ÎNGHIȚIM MERCURUL, ȘI NU ȘTIM DACĂ POATE FI ATINS CU DEGETUL, PREZENTĂM O EXPLICAȚIE A EXPERIMENTULUI DE MAI SUS, ȘI ACEST EXPERIMENT SE REFERĂ LA EXPERIMENTUL DIN ÎNVĂȚĂMÂNTUL PREUNIVERSITAR, ÎN CARE O EPRUBETĂ, UN TUB DE STICLĂ ÎNCHIS LA UN CAPĂT, ÎN CARE SE TOARNĂ MERCUR ȘI SE LASĂ O ÎNĂLȚIME PENTRU AER, SE ASTUPĂ UN CAPĂT CU DEGETUL, SE RĂSTOARNĂ TUBUL, SE SCUFUNDĂ CAPĂTUL ÎNTR-UN VAS CU MERCUR, ȘI SE ELIBEREAZĂ CAPĂTUL.

VOM OBSERVA ÎN CONTINUARE CĂ DIMENSIUNEA DE LUNGIME INCH FOLOSITĂ ÎN LUCRAREA [92] NU COINCIDE CU ACEEA DIN PREZENT DE 2,54 CM.

MARIOTTE A UMPLUT UN TUB DE 40 INCH CU 27 ȘI ½ INCH DE MERCUR, ȘI A LĂSAT 12 INCH ȘI ½ PENTRU AER [92]. ACEST TUB DE STICLĂ TREBUIE SĂ FI FOST O EPRUBETĂ. CÂND A INVERSAT TUBUL LA NORMAL, ȘI CÂND L-A SCUFUNDAT 1 INCH ÎNTR-UN ALT MERCUR, ÎN TUB MERCURUL A COBORÂT, ȘI S-A OPRIT LA 14 INCH [92]. DEOARECE GREUTATEA AERULUI EXTERIOR ESTE DE 28 INCH, ACUM MERCURUL SUSȚINE JUMĂTATE DIN GREUTATEA ACESTUIA [92]. ÎN CONSECINȚĂ, AERUL ÎNCHIS ÎN TUB SUSȚINE NUMAI CEALALTĂ JUMĂTATE [92]. REZULTĂ CĂ AERUL S-A DILATAT LA DUBLU, DEOARECE EL OCUPĂ CEI 25 INCH RĂMAȘI AI TUBULUI, ÎN COMPARAȚIE CU CEI 12 ȘI 1 / 2 INCH PE CARE IA OCUPAT ANTERIOR [92].

CEEĂ CE REZULTĂ DIN CELE PREZENTATE MAI SUS DIN LUCRAREA [92] ESTE CĂ PRESIUNEA ATMOSFERICĂ, DEFINITĂ CA PRESIUNEA PRODUSĂ DE COLOANA DE AER DIN ATMOSFERĂ [94], DE LA BAZA TUBULUI DE STICLĂ, ESTE EGALĂ CU PRESIUNEA PRODUSĂ DE COLOANA DE MERCUR PLUS PRESIUNEA PRODUSĂ DE AERUL DIN TUB, CARE, CONFORM CU LEGEA GAZELOR IDEALE, DATĂ ÎN LUCRAREA [92], ESTE ACUM

$$P_1 = C / (2 V) = P_0 / 2$$

UNDE P_1 ESTE NOUA PRESIUNEA, P_0 ESTE PRESIUNEA ÎNȚIALĂ, ȘI C ESTE O CONSTANTĂ.

AERUL CARE ATINGE SUPRAFAȚA PĂMÂNTULUI ESTE CEL MAI CONDENSAT, DEOARECE ASUPRA EI ACȚIONEAZĂ GREUTATEA TOTALITĂȚII AERULUI SUPERIOR [92]. PE MĂSURĂ CE AERUL ESTE LA ÎNĂLȚIME MAI MARE, ESTE MAI RAREFIAT, ȘI ÎN FINAL LA ULTIMA SUPRAFAȚĂ A ATMOSFEREI EL ARE EXTINDEREA SA NATURALĂ [92].

RESORTUL AERULUI DE LA BAZĂ ESTE COMPRIMAT DE GREUTATEA AERULUI SUPERIOR, ȘI NU ESTE NEVOIE CA ACEASTĂ GREUTATE SĂ ACȚIONEZE ASUPRA LUI, EA POATE SĂ ACȚIONEZE ASUPRA UNEI PICĂTURI DE AER DE LA SUPRAFAȚA PĂMÂNTULUI, CARE NU ESTE MAI MULT PRESAT DE AERUL SUPERIOR, ȘI NU SE POATE DILATA MAI MULT DECÂT CORESPUNDE GREUTĂȚII ÎNTREGII ATMOSFERE [92]. NU ESTE UIMITOR DACĂ FACEM RAȚIUNEA CĂ TENSIUNEA PE ELE ESTE EGALĂ CU FORȚA ÎNTREGII ATMOSFERE, PE CARE ELE O SUSȚIN ÎN ACEASTĂ STARE, ȘI LE SUPUNE LA TENSIUNE MAI MARE DACĂ AERUL ESTE MAI GREU [92]. DE AICI REZULTĂ CĂ BAROMETRUL ESTE RIDICAT LA ACEEAȘI ÎNĂLȚIME, INDICĂ ACEEAȘI ÎNĂLȚIME, ATÂT ÎNTR-O CAMERĂ ÎNCHISĂ CÂT ȘI ÎN CÂMP DESCHIS [92].

CELE PREZENTATE MAI SUS CORESPUND LA CUNOȘTINȚELE NOASTRE, ÎN CARE PRESIUNEA ESTE DEFINITĂ CA RAPORTUL DINTRE FORȚA PERPENDICULARĂ PE SUPRAFAȚĂ ȘI ARIA SUPRAFEȚEI [94]

$$P = F / S$$

ȘI ÎN CAZUL NOSTRU FORȚA ESTE EGALĂ CU GREUTATEA COLOANEI DE AER VERTICALE CORESPUNZĂTOARE SUPRAFEȚEI ORIZONTALE DE ARIE S [94]

$$F = G$$

DE ASEMENEA CUNOAȘTEM CĂ PRESIUNEA SE EXERCITĂ ÎNTR-UN PUNCT CU ACEEAȘI VALOARE ÎN TOATE DIRECȚIILE [94], ȘI ATUNCI PRESIUNEA ATMOSFERICĂ ÎMPINGE ÎN SUS SUPRAFAȚA ORIZONTALĂ DE LA CAPĂTUL DE JOS AL MERCURULUI DIN TUB ȘI EGALAEZĂ SUMA PRESIUNILOR MERCURULUI DIN TUB ȘI A AERULUI DIN TUB.

AERUL NU SE SEPARĂ PREA UȘOR DE ALT AER [92]. CÂND UMPLEM GÂTUL UNEI BUTELII, DE MAI PUȚIN DE PATRU LINII DIAMETRU, CU APĂ, ȘI CÂND O RĂSTURNĂM PERPENDICULAR FĂRĂ SĂ PIARDĂ NICI O PICĂTURĂ, ACEST LUCRU SE PRODUC DEOARECE AERUL CARE AR TREBUI SĂ INTRE PE O PARTE A GULERULUI ÎN TIMPUL ÎN CARE APA AR FORTIFICA CELĂLALT CAPĂT, NU SE DIVIDE UȘOR ÎN PĂRȚI ATÂT DE MICI CÂT AR TREBUI [92].

ACEST FENOMEN ESTE EXPLICAT PRIN TENSIUNEA SUPERFICIALĂ CARE ACȚIONEAZĂ ASUPRA SUPRAFEȚEI APEI DIN TUB, ȘI CARE ESTE DEFINITĂ CA RAPORTUL DINTRE FORȚA CU CARE STICLA ACȚIONEAZĂ ASUPRA APEI PE CERCUL CARE CONSTITUIE CONTACTUL DINTRE SUPRAFAȚA APEI DIN TUB ȘI LUNGIMEA ACESTUI CERC [95]. MATEMATIC [95]

$$\Sigma = T / L$$

UNDE Σ ESTE TENSIUNEA SUPERFICIALĂ, T ESTE FORȚA CU CARE STICLA ACȚIONEAZĂ ASUPRA APEI PE LUNGIMEA CERCULUI CARE ESTE CONTACTUL DINTRE SUPRAFAȚA APEI ȘI STICLĂ, ȘI L ESTE LUNGIMEA CERCULUI DE CONTACT DINTRE SUPRAFAȚA APEI ȘI STICLĂ. ACEASTĂ FORȚĂ T ACȚIONEAZĂ ÎN LUNGUL GENERATOAREI CILINDRULUI STICLEI, ȘI PENTRU LICHIDELE CARE UDĂ PEREȚII STICLEI ESTE ORIENTATĂ SPRE EXTERIORUL LICHIDULUI, ȘI PENTRU LICHIDELE CARE NU UDĂ PEREȚII STICLEI, ESTE ORIENTATĂ ÎNSPRE INTERIORUL LICHIDULUI. ACESTE FENOMENE ÎN CARE LICHIDUL URCĂ SAU COBOARĂ ÎNTR-UN TUB CAPILAR PESTE SAU SUB NIVELUL LICHIDULUI DIN VAS, CARE ESTE UN TUB CU DIAMETRUL MIC, SE NUMESC FENOMENE CAPILARE. ATUNCI CÂND FORȚA T ACȚIONEAZĂ CĂTRE INTERIORUL LICHIDULUI, TENSIUNEA SUPERFICIALĂ NU LASĂ APA SĂ IASĂ DIN TUBUL CAPILAR ÎN POZIȚIE ORIZONTALĂ.

O ALTĂ CAUZĂ A ACESTUI EFET ESTE URMĂTOAREA. PE SUPRAFAȚA UNUI FLUID ÎN CONTACT CU UN GAZ EXISTĂ DE ASEMENEA O FORȚĂ REZULTANTĂ, CARE ACȚIONEAZĂ CĂTRE INTERIORUL FLUIDULUI, ÎN JOS, CA REZULTAT AL FORȚELOR CU CARE MOLECULELE DIN INTERIORUL FLUIDULUI ATRAG STRATURILE DE MOLECULE DE LA SUPRAFAȚA FLUIDULUI, CU O FORȚĂ MAI MARE DECÂT ACEEA CU CARE MOLECULELE DE GAZ ATRAG

ACESTE MOLECULE DE LA SUPRAFAȚA FLUIDULUI. DACĂ NOTĂM ACEASTĂ FORȚĂ CU FS, ATUNCI REZULTĂ O TENSIUNE SUPERFICIALĂ PE CARE O PUTEM NOTA CU ΣS , ȘI CARE ESTE DEFINIT CA RAPORTUL DINTRE FS ȘI ARIA SUPRAFEȚEI LICHIDULUI, A. MATEMATIC

$$\Sigma S = FS / A$$

DE ASEMENEA, O BUTELIE GOALĂ DE ACELAȘI DIAMETRU RĂMÂNE PE FUNDUL UNUI VAS PLIN CU APĂ FĂRĂ SĂ INTRE ÎN EA NICI O PICĂTURĂ [92].

DACĂ O BUTELIE, CU GÂTUL DE ACELAȘI DIAMETRU, PLIN CU VIN BINE PURIFICAT, ȘI MAI UȘOR DECÂT APA, O SCUFUNDĂM ÎNTR-UN VAS CU APĂ, ATUNCI APA INTRĂ ÎN BUTELIE ȘI FACE CA VINUL SĂ IASĂ [92].

MARIOTTE A OBSERVAT ÎN MAI MULTE EXPERIMENTE CĂ, ÎNTR-UN ANUMIT MOD, AERUL SE DIZOLVĂ ÎN APĂ ȘI ÎN CÂTEVA ALTE LICHIORURI [92].

MARIOTTE A FIERT APA TIMP DE O ORĂ, DUPĂ CARE LA RĂCIT, A UMPLUT O FIOLĂ, ÎN CARE A LĂSAT SĂ INTRE AERUL PE GROSIMEA UNEI ALUNE [92]. PE URMĂ A INVERSAT FIOLA, ȘI A SCUFUNDAT VÂRFUL LUI ÎNTR-UN VAS DE STICLĂ ÎN CARE A AVUT ACEEAȘI APĂ [92]. ÎN 3 SAU 4 ZILE, CEA MAI MARE PARTE A AERULUI RĂMAS ÎN FIOLĂ A INTRAT ÎN APĂ, ȘI PUȚINUL CARE A RĂMAS, A INTRAT MULT MAI DIFICIL, PROPORȚIONAL CU CANTITATEA LUI [92]. ACEST REST DE AER ATÂT DE DIFICIL DE DIZOLVAT PARE ÎNTOTDEAUNA DIFERIT DE AERUL CELĂLALT, DEOARECE EL SE ATAȘEAZĂ DE STICLĂ, ȘI NU-ȘI SCHIMBĂ AȘA UȘOR LOCUL, CÂND LOVIM BUTELIA [92].

ACEASTĂ DIZOLVARE A AERULUI ÎN APĂ SEAMĂNĂ CU CEL AL SĂRURILOR, ÎN ACEEA CĂ, DACĂ APA ESTE DEJA IMPREGNATĂ CU AER, EA NU MAI ABSORBE MAI MULT AER DECÂT CU MULTĂ DIFICULTATE [92]. DE ASEMENEA ÎN ACEST EXPERIMENT APA A FOST FIARTĂ ÎN PRIMUL RÂND, PENTRU A SE PURIFICA DE AER, ȘI PENTRU A PRELUA MAI TARE AER NOU [92].

CONFORM CU CELE PREZENTATE MAI SUS, ÎNSEAMNĂ CĂ DACĂ DIZOLVĂM O SARE ÎN APĂ, LA UN MOMENT DAT NU SE MAI DIZOLVĂ MAI

MULTĂ SARE [92]. ACEASTĂ PROBLEMĂ SE POATE VERIFICA UȘOR CU SARE DE BUCĂTĂRIE DIZOLVATĂ ÎNTR-O CANĂ DE APĂ, ÎN CARE PUNEM NUMAI 1 CM DE APĂ ȘI ADĂUGĂM SARE PÂNĂ NU SE MAI DIZOLVĂ ȘI RĂMÂNE PE FUNDUL CĂNII UN START DE 1 MM. DACĂ APA CU SARE, NUMITĂ SARAMURĂ O TURNĂM ÎNTR-O ALTĂ CANĂ, FĂRĂ SĂ TURNĂM ȘI SAREA DE PE FUND, DUPĂ 5-7 ZILE, CÂND APA S-A EVAPORAT, PE FUNDUL CĂNII APAR CRISTALELE DE SARE DE FORMĂ PARALELIPIPED DREPT CU FAȚA ORIZONTALĂ CUBICĂ. SOLUȚIA ÎN CARE S-A DIZOLVAT SARE PÂNĂ CÂND ACEASTA NU SE MAI DIZOLVĂ, SE NUMEȘTE SOLUȚIE SATURATĂ [80].

ACEST AER DIZOLVAT ÎN APĂ ESTE PRESAT ȘI CONDENSAT, ȘI MARIOTTE A FOST CONVINS DE ACEST EXPERIMENT [92]. DUPĂ CE A FĂCUT ULEIUL SĂ FIARBĂ, ȘI LA LĂSAT SĂ SE RĂCEASCĂ, A POZIȚIONAT O MICĂ STICLĂ CILINDRICĂ FOARTE SCURTĂ ȘI SUBȚIRE, ASTFEL ÎNCÂT SE CONTINUĂ DREPT ÎN ULEI, CU CAPĂTUL ÎNCHIS LA PARTEA SUPERIOARĂ, ȘI ÎN ÎNTREGIME PLIN CU ACEST LICHIOR, CARE AJUNGE PUȚIN PESTE JUMĂTATEA ÎNĂLȚIMII SALE [92]. NOI PRESUPUNEM CĂ STICLA ERA SCUFUNDATĂ CU UN CAPĂT ÎN ULEI, ȘI CĂ ERA UMPLUT CU ULEI. PE URMĂ A ÎNCĂLZIT ULEIUL DEDESUBT, DIRECT SUB MICA STICLĂ, UNDE A FĂCUT SĂ URCE AERUL [92]. DUPĂ ACEEA, MARIOTTE A FĂCUT SĂ CURGĂ CU PRICEPERE O PICĂTURĂ DE APĂ ÎN MIJLOCUL ULEIULUI SUB MICA STICLĂ, ȘI A CONTINUAT SĂ ÎNCĂLZEASCĂ ULEIUL [92]. DUPĂ PUȚIN TIMP, EL A VĂZUT IEȘIND MICI BULE DE AER DIN PICĂTURA DE APĂ, CARE S-AU RIDICAT PRIN MICA STICLĂ, ȘI CARE, RĂCITE, AU OCUPAT DE 8 SAU 10 ORI MAI MULT SPAȚIU DECÂT ÎNTREAGA PICĂTURĂ [92]. ACESTUI AER ASTFEL DIZOLVAT, ȘI PRESAT, MARIOTTE I-A DAT NUMELE DE MATERIE AERIANĂ CA AERUL [92]. NOI PRESUPUNEM CĂ PICĂTURA DE APĂ A FOST DIRECT SUB STICLĂ, ASTFEL ÎNCÂT TOT AERUL CARE A IEȘIT DIN PICĂTURA DE APĂ, A INTRAT ÎN TUBUL DE STICLĂ ȘI MARIOTTE A PUTUT SĂ-I MĂSOARE VOLUMUL, PE CARE L-A COMPARAT CU VOLUMUL PICĂTURII DE APĂ. MATERIA AERIANĂ CA AERUL PE CARE A DESCOPERIT-O MARIOTTE TREBUIE SĂ FIE UN GAZ CARE REZULTĂ DIN REACȚIA CHIMICĂ A APEI CU ULEIUL LA UN ANUMIT GRAD DE ÎNCĂLZIRE, ADICĂ LA O ANUMITĂ TEMPERATURĂ, ȘI ESTE O REACȚIE ENDOTERMĂ.

DACĂ, ÎN ULTIMUL EXPERIMENT, ÎNCĂLZIM PREA TARE PICĂTURA DE APĂ, ATUNCI DIN TIMP ÎN TIMP SE PRODUC MICI EXPLOZII, CARE RIDICĂ MICA STICLĂ, ȘI-L PUN ÎN PERICOL PE CEL CARE A ÎNTORS-O [92]. MATERIA CARE SE PRODUCE ESTE NUMAI ÎN PICĂTURA DE APĂ, ȘI ESTE DIFERITĂ DE AERUL CARE S-A RIDICAT PENTRU CĂ SE RĂSPÂNDEȘTE ÎN TOT ULEIUL DIN STICLĂ, ȘI EA OCUPĂ TIMP DE UN MOMENT APROAPE TOATĂ CAPACITATEA, ȘI EA SE REDUCE REPEDE LA NIMIC, ȘI NU CREȘTE SENSIBIL CANTITATEA DE AER, CARE ERA DEJA LA CAPĂTUL DE SUS AL STICLEI, ȘI, ÎN CONSECINȚĂ, ESTE O MATERIE CARE SE DILATĂ MAI MULT DECÂT AERUL, ATUNCI CÂND A DOBÂNDIT UN ANUMIT GRAD DE CĂLDURĂ [92]. ACEST AL DOILEA GAZ CARE PRODUC MICILE EXPLOZII ÎN PICĂTURA DE APĂ TREBUIE SĂ FIE REZULTATUL ALTOR REACȚII CHIMICE ÎNTRE APĂ ȘI ULEI, LA UN GRAD MAI MARE DE ÎNCĂLZIRE, O ALTĂ REACȚIE ENDOTERMĂ.

NOI AM FĂCUT UN EXPERIMENT ÎN CARE AM PICURAT 2 – 3 PICĂTURI DE APĂ ÎNTR-O CANĂ DE TABLĂ CARE AVEA PE FUND ULEI COMESTIBIL CU ÎNĂLȚIMEA DE 3 – 4 MM, ASTFEL ÎNCÂT SĂ ACOPERE PICĂTURILE DE APĂ. PICĂTURILE DE APĂ S-AU LĂSAT PE FUNDUL ULEIULUI PENTRU CĂ AU DENSITATE MAI MARE. AM PUS CANA CU ULEI ȘI PICĂTURILE DE APĂ PE FOCUL DE GAZ METAN, CU FOCUL MIC. DUPĂ UN TIMP AU IEȘIT DIN PICĂTURILE DE APĂ O MULȚIME DE MICI BULE DE GAZ VIZIBILE CARE S-AU RIDICAT LA SUPRAFAȚA ULEIULUI. DUPĂ MAI MULT TIMP ULEIUL A ÎNCEPUT SĂ FIARBĂ. DACĂ AM DAT FOCUL MAI TARE, ULEIUL SAU APĂ AU ÎNCEPUT SĂ POCNEASCĂ ȘI SĂ STROPEASCĂ LA 30 – 40 CM ÎNĂLȚIME CU STROPI DE ULEI, CARE POT SĂ PRODUCĂ ARSURI PE PIELE. ACESTE FENOMENE L-AU OBSERVAT CU SIGURANȚĂ TOATE GOSPODINELE. ACESTE MICI BULE DE GAZ CARE IES DIN PICĂTURILE DE APĂ TREBUIE . SĂ FIE VAPORI DE APĂ. ACESTE MICI BULE DE VAPORI DE APĂ OBȚINUTE DE NOI MAI SUS, TREBUIE SĂ FIE CELE PE CARE LE-AM PREZENTAT MAI SUS ÎN EXPERIMENTUL ANTERIOR CELUIA PE CARE L-AM EFECTUAT NOI.

18.FOSFORUL

A FOST PREZENTATĂ O METODĂ DE OBȚINERE A FOSFORULUI PRIMITĂ DE LA CHIMISTUL LEIBNITS [96].

SE EVAPORĂ URINA PÂNĂ DEVINE CA UN SIROP [96]. SE DISTILEAZĂ ACEST SIROP PÂNĂ CÂND TOATĂ FLEGMA IESE, ȘI APAR PICĂTURI ROȘII [96]. SE SEPARĂ CAPUL DE MORT [96]. PARTEA INFERIOARĂ ESTE SARE DURĂ ȘI INUTILĂ PENTRU FOSFOR [96]. PARTEA SUPERIOARĂ ESTE O MATERIE NEAGRĂ ȘI SPONGIOASĂ [96]. ACEASTA ESTE MAI PUȚIN COMPACTĂ [96].

SE PUNE ÎNTR-O RETORTĂ ULEIUL OBȚINUT DIN PRIMA DISTILARE [96]. ÎN ACEASTĂ ETAPĂ SE PRODUCE IEȘIREA ÎNTREGII PĂRȚI APOSE CU FORȚA FOCULUI [96]. DUPĂ ACEST PROCES RĂMÂNE O MATERIE NEAGRĂ ASEMĂNĂTOARE CU ACEEA DEJA SEPARATĂ DE CAPUL DE MORT LA PRIMA DISTILARE [96]. ACESTE DOUĂ MATERII SE AMESTECĂ [96]. SE PUN 12 UNCII DIN ACEST AMESTEC ÎNTR-O RETORTĂ DE PĂMÂNT DE MĂRIME MEDIOCRĂ, LA CARE SE ADAUGĂ UN RECIPIENT [96]. SE MĂREȘTE FOCUL PÂNĂ CE RETORTA DEVINE ROȘIE [96]. SE MENȚINE FOCUL 16 ORE, ȘI PESTE TOT ULTIMELE 8 [96].

ULTERIOR SE MAI APLICĂ O SERIE DE PROCESE CHIMICE DUPĂ CARE SE OBȚINE O MATERIE CU PROPRIETĂȚILE FOSFORULUI [96]

19.REACȚII CHIMICE CUNOSCUTE ÎN PERIOADA 1665 – 1699 ȘI ALTE REACȚII CHIMICE

O REACȚIE CHIMICĂ ESTE ACEEA ÎN CARE INTRĂ UNUL SAU MAI MULTE PRINCIPII ȘI REZULTĂ UN ALT PRINCIPIU SAU ALTE PRINCIPII, CONFORM CELOR PREZENTATE ÎN ACEASTĂ CARTE.

O REACȚIE CHIMICĂ ESTE ACEEA ÎN CARE ESENȚELE SALINE SE CONDENSEAZĂ ȘI SE COAGULEAZĂ PRIN AMESTECAREA LOR CU ALTE ESENȚE [72]. ASTFEL, ÎN ACEASTĂ CATEGORIE DE REACȚII CHIMICE SE CLASEAZĂ ȘI UNELE DIN URMĂTOARELE REACȚII [72]:

1. ESENȚA DE VIN CU:
 - 1.1. ESENȚA DE SALPETRU,
 - 1.2. CU ESENȚA DE URINĂ,
 - 1.3. CU ESENȚA DE SĂRURI SULFURATE,
 - 1.4. CU SAREA DE SALPETRU,
 - 1.5. CU SULFURILE TERESTRE,
2. OȚETUL DISTILAT
 - 2.1. CU PLUMBUL,
 - 2.2. CU CORALII,
 - 2.3. CU PERLELE.
3. O REACȚIE CHIMICĂ ESTE CALCINAREA, ÎN CARE O SUBSTANȚĂ CHIMICĂ ÎNCĂLZITĂ SUFERĂ O CREȘTERE DE MASĂ [66].
4. O REACȚIE CHIMICĂ ESTE ÎN CARE SUBSTANȚELE ALCALINE REACȚIONEAZĂ CU [67]
 - 4.1. SUBSTANȚELE ACIDE,
 - 4.2. CU SĂRURILE ACRE,
 - 4.3. CU SĂRURILE SULFURATE.
5. MULTE REACȚII CHIMICE SE PRODUC PRIN AMESTECAREA UNEI SUBSTANȚE CU APA:
 - 5.1. BETONUL SE OBTINE PRIN AMESTECAREA PRAFULUI DE MARMURĂ CU APĂ ȘI LĂSAREA LUI LA AER LIBER SĂ SE SOLIDIFICE [64];
 - 5.2. VARUL SE STINGE PRIN AMESTECAREA LUI CU APĂ ȘI LĂSAREA UN TIMP SĂ SE TRANSFORME ÎN VARUL UTILIZAT ÎN APLICAȚII [64].

6. NOI AM OBSERVAT O REACȚIE ÎN CARE CUPRUL SE CORODEAZĂ DE PE PLĂCILE DE CIRCUITE ELECTRONICE IMPRIMATE ÎN CONTACT CU ACIDUL SULFURIC DILUAT 50 % ÎN APĂ.
7. SAREA FIXĂ ȘI SULFURATĂ A TARTRULUI CU SAREA ACIDĂ ȘI VOLATILĂ A OȚETULUI PENETREAZĂ NISIPUL DE ERAMPES, DEGAJĂ SULFURA EI PIETROASĂ, ȘI ACEASTĂ SULFURĂ ASTFEL DEGAJATĂ COAGULEAZĂ APA [72], AȘA CUM AM PREZENTAT ÎN CAPITOLUL 12 DEASUPRA.
8. CELE DOUĂ METODE DE DETECTARE A CONȚINUTULUI DE ESENȚĂ VITRIOLICĂ SAU ACIDĂ A UNEI APE [68]:
 - 8.1. SE COLOREAZĂ ÎN ROȘU DE LA PUDRA DE FIERE DE NUCĂ;
 - 8.2. SE PRECIPITĂ ÎN MATERIE ALBĂ DE LA CÂTEVA PICĂTURI DE SARE DE AMONIAC.
9. CARACTERULUI SULFURAT SAU ALCALIN A SĂRURILOR EXTRASE DINTR-O APĂ MINERALĂ SE RECUNOAȘTE PRIN TREI METODE [68]:
 - 9.1. COLOREAZĂ ÎN ROȘU SOLUȚIA DE SUBLIMĂ, CUM FACE SAREA DE TARTRU [68];
 - 9.2. COLOREAZĂ ÎN VERDE TINCTURA DE FLORI MOV SAU VIOLETE [68];
 - 9.3. SUNT EFERVESCENTE CU ULEIUL DE VITRIOL [68].

UN FENOMEN FIZIC, CARE NU ESTE REACȚIE CHIMICĂ, ESTE DISTILAREA, ÎN CARE O SUBSTANȚĂ CHIMICĂ ÎNCĂLZITĂ SE EVAPORĂ, SE CONDENSEAZĂ, ȘI SE SEPARĂ DE O ALTĂ SUBSTANȚĂ CHIMICĂ RĂMASĂ LICHIDĂ, SAU ÎN LICHID, CA DISTILAREA APEI DE MARE [97], ȘI DISTILAREA ALCOOLULUI DIN VIN [91]. ÎN DISTILARE MOLECULELE DE APĂ RĂMÂN MOLECULE DE APĂ.

20. REACȚII CHIMICE COMPLETE

ÎN ANUL 1682 A FOST STUDIATĂ CANTITATEA DE ESENȚĂ DE SARE CARE TREBUIE AMESTECATĂ CU O CANTITATE DATĂ DE SARE VOLATILĂ PÂNĂ CÂND ACEST AMESTEC NU MAI PRODUCE EFERVESCENTĂ, ȘI REZULTATUL ACESTUI EXPERIMENT A FOST PUBLICAT ÎN LUCRAREA [98].

ACEST EXPERIMENT REPREZINTĂ CĂUTAREA ȘI OBȚINEREA MASEI DINTR-O SUBSTANȚĂ, CARE AMESTECATĂ CU O MASĂ DATĂ DINTR-O ALTĂ SUBSTANȚĂ, PRODUCE O REACȚIE COMPLETĂ, CEEA CE ÎNSEAMNĂ CĂ, ADĂUGAREA UNEI MASE ÎN PLUS DIN PRIMA SUBSTANȚĂ NU MAI PRODUCE REACȚIE.

BOURDELIN, ÎN ACEST EXPERIMENT, A AMESTECAT O CANTITATE DATĂ DINTR-O SARE VOLATILĂ, TRASĂ DIN EXCREMENT DE VACĂ, CU O CANTITATE DATĂ DE APĂ, ȘI MODIFICATĂ SUCCESIV, PÂNĂ CÂND O MICĂ CANTITATE DE ESENȚĂ DE SARE, AMESTECATĂ CU AMESTECUL DE MAI SUS, NU A MAI PRODUS EFERVESCENTĂ, ȘI REZULTATELE LUI AU FOST PUBLICE ÎN ANUL 1682 ÎN ACEEAȘI LUCRARE [98].

TOT ÎN ACEASTĂ LUCRARE, EL A GĂSIT CĂ, O CANTITATE DATĂ DE SARE VOLATILĂ AMESTECATĂ CU O CANTITATE DATĂ DE APĂ PURĂ, DĂ O CULOARE LĂPTOASĂ SLABĂ SOLUȚIEI DE SUBLIMĂ, REZULTAT PUBLICAT ÎN LUCRAREA [98].

TOATĂ LUMEA CUNOAȘTE CĂ ÎNTR-O CANĂ CU O CANTITATE DATĂ DE APĂ SE POATE DIZOLVA NUMAI O CANTITATE ANUMITĂ DE SARE ORDINARĂ DE BUCĂTĂRIE, ȘI SAREA ADĂUGATĂ ÎN PLUS SE DEPUNE PE FUNDUL CĂNII.

ACEST AMESTEC SE NUMEȘTE SOLUȚIE SATURATĂ.

FENOMENUL SE OBSERVĂ CÂND PUNEM VARZĂ, GOGONELE, SAU CASTRAVEȚI LA MURAT, CÂND SAREA RĂMÂNE PE FUNDUL VASULUI. ATUNCI AM PUS SARE DESTULĂ PENTRU MURĂTURI.

ÎNSĂ ESTE MAI MULTĂ DECÂT PENTRU SOLUȚIA SATURATĂ.

CÂND PUNEM GEM DE FRUCTE, UNEORI ZAHĂRUL SE CRISTALIZEAZĂ PE FUNDUL BORCANULUI DUPĂ 1-2 LUNI, DACĂ AM PUS O CANTITATE PEA MARE.

21. CARACTERISTICI ALE SUBSTANȚELOR

ÎN ANUL 1683, AU FOST COMPARATE CARACTERISTICILE A 10 SPECII DE APĂ DIN FRANȚA, ȘI REZULTATELE AU FOST PUBLICATE ÎN LUCRAREA [99], ȘI ACESTE CARACTERISTICI SUNT:

- 1) AU AVUT ACEEAȘI LIMPEZIME;
- 2) ACELAȘI GUST;
- 3) ACELAȘI MIROS;
- 4) DENSITĂȚI DIFERITE;
- 5) UNELE AU DIZOLVAT PERFECT SĂPUNUL, ALTELE MAI PUȚIN PERFECT;
- 6) GĂTIREA LEGUMELOR A FOST ACEEAȘI PENTRU TOATE;
- 7) PRIN EVAPORAREA TOTALĂ NU S-AU GĂSIT DIFERENȚE ÎN REZIDUURI.

22.SUBSTANȚE NOI

PERRAULT ȘI BOURDELIN, ÎN ANUL 1683, AU VIZITAT APEDUCTUL DE LA ROQUENCOUR, ȘI AU EXAMINAT APA DIN ACEST APEDUCT, ȘI AU GĂSIT ÎN ACEASTĂ APĂ O MARE CANTITATE DE FORMAȚIUNI SOLIDE, CARE SUNT CIUPERCI, ȘI CARE SE DIZOLVĂ UȘOR ÎN APĂ, ȘI LICHIORUL CARE SE OBTINE DIN DISTILAREA ACESTOR FORMAȚIUNI SOLIDE, ESTE CAUSTIC, ȘI CE PICĂ PE ÎMBRĂCĂMINTE DIN ACEST LICHIOR O GĂUREȘTE ȘI LE DECOLOREAZĂ CA APA TARE, ȘI ACESTE REZULTATE AU FOST PUBLICATE ÎN LUCRAREA [100].

23.RECUNOAȘTEREA MINERALELOR

PÂNĂ ÎN SECOLUL AL XVIII-LEA AU FOST DESCOPERITE URMĂTOARELE MINERALE: CUPRUL [14], FIERUL [20], ARGINTUL [3], [26], PLUMB [31], SULFUL [37], MERCURUL [53].

PENTRU ETALONAREA UNUI TERMOMETRU CU MERCUR S-A FOLOSIT PROPRIETATEA CĂ MERCURUL SE DILATĂ LINIAR CU TEMPERATURA [101].

LEGEA DILATĂRII LINIARE A SOLIDELOR ESTE [102]:

$$\Delta l = \alpha \cdot \Delta t \cdot l_0,$$

UNDE Δl ESTE ALUNGIREA DATORITĂ DILATĂRII TERMICE, α ESTE COEFICIENTUL DE DILATARE TERMICĂ A SOLIDULUI CARACTERISTICĂ A SUBSTANȚEI, ȘI l_0 ESTE LUNGIMEA ÎNȚIALĂ A SOLIDULUI, UNDE

$$\Delta l = l - l_0,$$

UNDE l ESTE LUNGIMEA FINALĂ A SOLIDULUI.

EFORTUL UNITAR LA RUPERE, NUMIT UNEORI TENSIUNE, ESTE O CARACTERISTICĂ A SOLIDELOR ȘI ESTE DEFINIT PRIN [103]:

$$\sigma = \frac{F}{S},$$

UNDE F ESTE FORȚA ȘI S ESTE ARIA SUPRAFEȚEI.

PARTEA CARE URMEAZĂ ARE BIBLIOGRAFIA LUCRAREA [104].

ALUNGIREA SUB ACȚIUNEA UNEI FORȚE ESTE TOT O CARACTERISTICĂ A CORPURILOR SOLIDE.

CORPURILE SOLIDE NU SE ALUNGESC CONTINUU CI PRINTR-UN SALT BRUSC SUB ACȚIUNEA UNEI FORȚE DE TRACȚIUNE.

ÎN FUNCȚIE DE MĂRIMEA FORȚEI DE TRACȚIUNE, MOLECULELE CORPURILOR SOLIDE ABANDONEAZĂ BRUSC POZIȚIILE LOR DE ECHILIBRU ȘI AJUNG ÎNTR-O ALTĂ STARE DE ECHILIBRU DUPĂ UN ANUMIT TIMP.

DACĂ MĂRIM FORȚA ÎN TIMPUL ACESTEI MIȘCĂRI, MOLECULELE AJUNG DUPĂ UN TIMP ÎNTR-O ALTĂ POZIȚIE DE ECHILIBRU.

SUPUNEREA CORPURILOR SOLIDE LA ÎNTINDERE ȘI COMPRESIUNE PRODUCE DEPĂRTAREA SAU APROPIEREA MOLECULELOR LOR.

LEGEA ALUNGIRII LINIARE LA TRACȚIUNE A UNOR SOLIDE ESTE:

$$\sigma = E \frac{\Delta l}{l_0},$$

UNDE E ESTE MODULUL DE ELASTICITATE, Δl ESTE ALUNGIREA, l_0 ESTE LUNGIMEA ÎNȚIALĂ, ȘI σ ESTE EFORTUL UNITAR.

CĂLDURA SPECIFICĂ ESTE CĂLDURA PE UNITATEA DE MASĂ EXTRASĂ DIN CORP PENTRU A PRODUCE VARIAȚII DETERMINATE DE TEMPERATURĂ [105], ȘI VARIAȚIA DE TEMPERATURĂ POATE FI 1 GRAD:

$$c = \frac{Q}{m \cdot \Delta t},$$

UNDE Q ESTE CĂLDURA EXTRASĂ, m ESTE MASA CORPULUI, Δt ESTE VARIAȚIA DE TEMPERATURĂ, ȘI c ESTE CĂLDURA SPECIFICĂ, ȘI CĂLDURA SPECIFICĂ ESTE FOLOSITĂ PENTRU CARACTERIZAREA SOLIDELOR, LICHIDELOR, ȘI GAZELOR.

VITEZA LUMINII A FOST DETERMINATĂ APROXIMATIV, ESTE O CARACTERISTICĂ A SOLIDELOR [106], ȘI ESTE DETERMINATĂ CU MARE PRECIZIE [107].

BIBLIOGRAFIA PĂRȚII CARE URMEAZĂ ESTE LUCRAREA [108].

SE CUNOȘTEAU URMĂTOARELE MATERIALE: CALCAROASE, ARGILOASE, SILICIOASE, STEATIT, CALCEDONIE, ARGILĂ COLORATĂ, TALC, CUARTZ, OPAL, NISIP GRANITIC, PIETRE COLORATE ÎN VERDE, SILICIU AMESTECAT CU ALUMINĂ DE SARE, COLORATĂ DE OXIDUL DE NIKEL. ACESTEA APAR ÎN NATURĂ.

ÎN CONTINUARE PREZENTĂM PROPRIETĂȚI OPTICA ALE CRISTALELOR [109]:

-TEORIA LUI HUGHUENS A REFRAȚIEI SPUNE CĂ VITEZA LUMINII ESTE DIFERITĂ ÎN CELE DOUĂ MEDII, ACEEA DIN CARE VINE LUMINA ȘI ACEEA ÎN CARE INTRĂ LUMINA, ȘI RAPORTUL DINTRE VITEZELE LUMINII ÎN PRIMUL ȘI AL DOILEA MEDIU ESTE EGAL CU INDICELE DE REFRAȚIE, ȘI CU RAPORTUL SINUSURILOR UNGHIIULUI DE INCIDENTĂ ȘI AL CELUI DE REFRAȚIE;

-O RAZĂ CARE CADE PE CRISTALUL DE ISLANDA SE DESFACE ÎN DOUĂ RAZE : UNA CARE SE REFRACTĂ DUPĂ LEGEA REFRAȚIEI, ȘI A DOUA CARE NU RESPECTĂ LEGEA REFRAȚIEI.

ÎN CRISTALE, SUPRAFEȚELE SUNT ORIENTATE PE DIRECȚIILE ARANJĂRII ATOMILOR COMPONENTI [110].

BIBLIOGRAFIA PĂRȚII CARE URMEAZĂ ESTE DIN LUCRAREA [111], DACĂ NU SE SPECIFICĂ ALTFEL.

PENTRU CARACTERIZAREA MINERALELOR SE FOLOSESC PROPRIETĂȚILE LOR FIZICE ȘI CHIMICE. UNELE DIN ACESTE PROPRIETĂȚI SE STUDIAZĂ ÎN ACEST CAPITOL.

ÎN SCOARȚA TERESTRĂ SOLIDĂ SE GĂSESC MINERALE ȘI ROCI. ROCILE SUNT ASCOCIAȚII ALE MINERALELOR.

TOATE SUBSTAȚELE CARE SE FORMEAZĂ ÎN SCOARȚA SOLIDĂ A PĂMÂNTULUI, FAC PARTE DIN EA, SUNT OMOGENE DIN PUNCT DE VEDERE FIZICO-CHIMIC, ANORGANICE, SOLIDE ȘI LICHIDE, SE NUMESC MINERALE.

MERCURUL ȘI APA SUNT LICHIDE OMOGENE, ȘI SUNT SINGURELE LICHIDE CARE SE CONSIDERĂ MINERALE.

O SERIE DE SUBSTAȚE NU SUNT OMOGENE DIN PUNCT DE VEDERE AL COMPOZIȚIEI LOR CHIMICE, ȘI ACEASTĂ COMPOZIȚIE VARIAZĂ ÎN TIMP ȘI LOC. ASTFEL DE SUBSTAȚE SUNT SUBSTAȚELE GELATINOASE, COLOIDALE, LICHIDE ȘI GAZOASE, CA DE EXEMPLU UNELE OPALURI GELATINOASE, STICLELE NATURALE VULCANICE, LAVELE, APELE SUBTERANE ȘI MINERALE CARE CURG ȘI ÎN DRUMUL LOR DIZOLVĂ O MULȚIME DE ELEMENTE CHIMICE ȘI ASFEL COMPOZIȚIA LOR CHIMICĂ SE MODIFICĂ ÎN TIMP CE ÎNAINTEAZĂ ÎN DRUMUL LOR, ȘI PRODUC ȘI DEPUNERI DE SUBSTAȚE. ASTFEL DE SUBSTAȚE POT FI ȘI SOLIDE. ASTFEL DE SUBSTAȚE SUNT UNELE GAZE NATURALE, DE EXEMPLU: HELIU, BIOXID DE CARBON, HIDROGEN SULFURAT, VAPORII DE APĂ, ETC. AMESTECAREA ACESTOR GAZE CU AERUL DUCE LA MODIFICAREA ÎN TIMP ȘI SPAȚIU A CONCENTRAȚIEI LOR. ACESTE SUBSTAȚE FORMEAZĂ O CLASĂ MAI LARGĂ, NUMITĂ SUBSTAȚE MINERALE.

MATERIA SOLIDĂ ARE ȘI O STARE DE AGREGARE NUMITĂ CRISTALINĂ, CARE SE POATE FORMA ȘI ÎN NATURĂ, ȘI ÎN LABORATOARE, ȘI ÎN UZINE.

FORMELE COLOFORME, CARE SUNT FORME ROTUNJITE, SFEROIDALE, RENIFORME, STALACTITICE, SUNT FORMELE ÎN CARE APAR DE OBICEI MINERALELE AMORFE.

FORMAȚIUNILE COLOIDALE ȘI GELURILE PRIN ÎNTĂRIRE PRODUC MINERALE AMORFE.

TOATE PROPRIETĂȚILE FIZICE SUNT IDENTICE ÎN TOATE DIRECȚIILE ÎN CORPURILE AMORFE.

DE OBICEI, UNELE PROPRIETĂȚI FIZICE ALE CRISTALELOR, NU SUNT IDENTICE ÎN TOATE DIRECȚIILE.

CORPURILE SOLIDE CARE AU ACELEAȘI TOATE PROPRIETĂȚILE FIZICE ÎN TOATE DIRECȚIILE SE NUMESC IZOTROPE.

CORPURILE SOLIDE CARE NU AU ACELEAȘI TOATE PROPRIETĂȚILE FIZICE ÎN TOATE DIRECȚIILE SE NUMESC ANIZOTROPE.

CU ACESTE CUNOȘTINȚE DESPRE DILATAREA LINIARĂ A SOLIDELOR S-A ANALIZAT DILATAREA UNEI SFERE DIN STICLĂ, CARE ESTE ANORF, ȘI A UNEI SFERE DIN CURȚ, CARE ESTE CRISTALIN.

SFERA DIN STICLĂ DUPĂ DILATARE RĂMÂNE TOT SFERICĂ, ȘI SFERA DIN CUARȚ DUPĂ DILATARE DEVINE ELIPSOIDALĂ. ACEASTA ÎNSEAMNĂ CĂ LA DILATARE TERMICĂ STICLA ESTE IZOTROPĂ, ARE ACELAȘI COEFICIENT DE DILATARE TERMICĂ ÎN TOATE DIRECȚIILE, ȘI CUARȚUL ESTE ANIZOTROP, NU ARE ACELAȘI COEFICIENT DE DILATARE TERMICĂ ÎN TOATE DIRECȚIILE.

VITEZA LUMINII SE FOLOSEȘTE ÎN STUDIUL PROPRIETĂȚILOR CRISTALELOR.

PENTRU UNELE PROPRIETĂȚI, UNELE CRISTALE POT FI IZOTROPE, ȘI PENTRU ALTE PROPRIETĂȚI ANIZOTROPE. DE EXEMPLU, PENTRU CRISTALUL DE SARE, CARE ARE FORMA DE CUB A CRISTALULUI, VITEZA LUMINII ESTE ACEEAȘI ÎN TOATE DIRECȚIILE. CRISTALUL DE SARE ESTE IZOTROP DIN PUNCT DE VEDERE OPTIC. FORMA CUBICĂ A CRISTALULUI DE SARE ÎNSEAMNĂ CĂ ATOMII SUNT DISPUȘI ÎN CEEA MAI MICĂ CELULĂ ÎN VÂRFURILE UNUI CUB.

CU ACEASTĂ LEGE A ALUNGIRII, LA ACELAȘI EFORT DE TRACȚIUNE, ALUNGIREA CUBULUI VARIAZĂ ÎN FUNCȚIE DE DIRECȚIA FORȚEI APLICATE ÎN CUB.

ȘI RUPEREA SE PRODUCE LA EFORTURI DIFERITE PENTRU CELE TREI DIRECȚII.

MATERIA OMOGENĂ ARE DOUĂ CATEGORII DE PROPRIETĂȚI:

1. PROPRIETĂȚILE SCALARE SE DEFINESC PRINTR-O VALOARE NUMERICĂ. ÎN TOATE PUNCTELE ȘI ÎN TOATE DIRECȚIILE ELE AU ACEEAȘI VALOARE ÎNTR-UN CORP OMOGEN. NUMAI VARIAȚIILE DE TEMPERATURĂ ȘI DE PRESIUNE INFLUENȚEAZĂ ACESTE PROPRIETĂȚI. DENSITATEA ȘI CĂLDURA SPECIFICĂ SUNT ASTFEL DE PROPRIETĂȚI. PIRITA DE EXEMPLU ARE ACEEAȘI DENSITATE ÎN TOATE PUNCTELE MINERALULUI.

2. PROPRIETĂȚILE VECTORIALE AU VALORI DIFERITE ÎN DIRECȚII DIFERITE. CÂTEVA PROPRIETĂȚI CARE VARIAZĂ CU DIRECȚIA SUNT: VITEZA LUMINII, CONDUCTIVITATEA TERMICĂ, VITEZA DE CREȘTERE A CRISTALELOR, COEZIUNEA, ETC.

ÎN TOATE DIRECȚIILE PARALELE, PROPRIETĂȚILE VECTORIALE AU ACEEAȘI VALOARE ÎN TOATE CORPURILE OMOGENE.

TEORIA ARANJAMENTULUI ORDONAT DE PARTICULE ELIPSOIDALE DIN CARE ESTE CONSTRUIT CRISTALUL A FOST ELABORATĂ DE HUYGENS ÎN 1690. CU ACEASTĂ TEORIE EL A EXPLICAT PROPRIETĂȚILE OPTICE ALE CALCITULUI.

AȘEZAREA ORDONATĂ ȘI COMPACTĂ A UNOR PARTICULE SFERICE CARE CONSTITUIE CRISTALUL ESTE TEORIA INTRODUSĂ DE LOMONOSOV, ÎN PRIMA JUMĂTATE A SECOLULUI AL XVIII-LEA, PENTRU A EXPLICA FORMELE REGULATE ALE CRISTALELOR DE SALPETRU.

PRIN FOLOSIREA CLIVAJULUI CRISTALELOR, CARE ASTFEL SE POT DIVIZA ÎN PĂRȚI CÂT MAI MICI, CEEA MAI MICĂ PARTICULĂ CARE SE OBTINE ARE FORMA PARALELIPIPEDICĂ, R. I. HAÜY , ÎN 1871 A EMIS TEORIA CĂ CRISTALELE SUNT FORMATE DIN ACESTE PARTICULE INDIVIZIBILE.

UNELE MINERALE APAR SUB FORMA UNOR CRISTALE. SAREA APARE SUB FORMA UNOR CRISTALE CUBICE. CRISTALELE DE SARE SE GĂSESC ÎN OCNELE DE SARE. ALTE MINERALE CRISTALINE SUNT AURUL, CUARȚUL ȘI PIRITA. FORMA MINERALELOR DIN NATURĂ ESTE DE CELE MAI MULTE ORI A UNOR GRANULE CARE NU AU CONTURURI REGULATE. ELE APAR CA PĂRȚILE COMPONENTE ALE ROCILOR ȘI MINEREURILOR.

SUNT ȘI MINERALE CARE SE GĂSESC ÎN STARE AMORFĂ. EXEMPLE SUNT: OPALUL, STICLA VULCANICĂ, LIMONITUL.

PENTRU CONSTRUIREA MAȘINILOR ȘI MAȘINILOR UNELTE SE FOLOSEȘTE FIERUL EXTRAS DIN MINEREURI OXIDICE ȘI CARBONATE CARE SUNT: MAGNETIT, HEMATIT, LIMONIT, ȘI SIDERIT.

24. TERMODINAMICĂ

24.1. PRESIUNEA, MASA, ȘI FORȚA EXPANSIVĂ A AERULUI

ÎN ANUL 1780 SE CUNOȘTEA CĂ MASA COLOANEI AERULUI DIN ATMOSFERĂ CARE APASĂ ASUPRA MERCURULUI ESTE ARĂTATĂ DE BAROMETRU [112].

TOT ATUNCI SE CUNOȘTEA CĂ ACEASTĂ APĂSARE ESTE PRESIUNEA ÎN LOCUL UNDE ESTE PLASAT BAROMETRUL [112].

ÎN PLUS, ÎN ANUL 1780 SE CUNOȘTEA CĂ DOUĂ CAUZE DETERMINĂ PRESIUNEA AERULUI: GREUTATEA LUI, ȘI FORȚA LUI EXPANSIVĂ [112].

O PROPRIETATE CARE REZULTĂ CÂND ESTE PRESAT AERUL, CUNOSCUTĂ ÎN 1780, ESTE CĂ DENSITATEA LUI CREȘTE ȘI FORȚA LUI EXPANSIVĂ CREȘTE [112].

NOI ȘTIM CĂ PRESIUNEA ESTE DEFINITĂ DE ECUAȚIA [113]:

$$P = F / S, \quad (1.1.1.)$$

UNDE F ESTE FORȚA PEPENDICULARĂ PE SUPRAFAȚĂ ȘI S ESTE ARIA SUPRAFETEI.

MAI ȘTIM CĂ DENSITATEA AERULUI ESTE DEFINITĂ DE ECUAȚIA [114]:

$$(RO) = M / V, \quad (1.1.2.)$$

UNDE M ESTE MASA, V ESTE VOLUMUL AERULUI, ȘI (RO) ESTE DENSITATEA.

DE AICI, DIN EC. (1.1.2.) REZULTĂ CĂ ATUNCI CÂND APĂSĂM ASUPRA AERULUI DINTR-UN TUB LEGAT LA UN BALON DE STICLĂ, VOLUMUL AERULUI DIN BALON ȘI DIN TUB SCADE, ȘI DENSITATEA AERULUI CREȘTE.

DE ASEMENEA, FORȚA CU CARE APĂSĂM CREȘTE CU SCĂDEREA VOLUMULUI, CEEA CE CONSTATĂM EXPERIMENTAL, ȘI FORȚA CU CARE APĂSĂM SE ADUNĂ CU FORȚA PRODUSĂ DE PRESIUNEA ATMOSFERICĂ, ȘI ESTE EGALĂ CU FORȚA DE EXPANSIUNE A AERULUI [113].

AȘA SUNT LEGATE CUNOȘTIȚELE NOASTRE DIN PREZENT DE CELE DIN ANUL 1870.

DIN CELE PREZENTATE MAI SUS, PUTEM SPUNE CĂ FORȚA EXPANSIVĂ A AERULUI ESTE DATĂ DE ECUAȚIA:

$$(F_E) = (F_A) + (F_{PA}), \quad (1.1.3.)$$

UNDE (F_E) ESTE FORȚA EXPANSIVĂ A AERULUI, (F_A) ESTE FORȚA CU CARE APĂSĂM NOI ASUPRA AERULUI DIN TUB ȘI DIN BALONUL DE STICLĂ, ȘI (F_{PA}) ESTE FORȚA PRODUSĂ DE PRESIUNEA ATMOSFERICĂ.

UN EXEMPLU DE INSTRUMENT CU CARE ACȚIONĂM CU O FORȚĂ ASUPRA AERULUI DIN TUB ȘI DIN BALON ESTE INSTRUMENTUL PENTRU MĂSURAREA PRESIUNII SÂNGELUI FOLOSIT ÎN MEDICINĂ ÎN PREZENT.

ACEST INSTRUMENT ARE LEGAT LA UN TUB UN MIC BALON DE CAUCIUC, DE DIMENSIUNEA PALMEI SEMIDESCHISE, PE CARE ASISTENTA MEDICALĂ O STRÂNGE ÎN PUMN.

ATUNCI AERUL DIN ACEST BALON DE CAUCIUC INTRĂ ÎN TUB ȘI ÎN REZERVORUL APARATULUI. ASISTENTA MEDICALĂ A ACȚIONAT CU O FORȚĂ ASUPRA BALONULUI DIN CAUCIUC. PENTRU CĂ AERUL A INTRAT ÎN TUB ȘI ÎN REZERVORUL APARATULUI, ACESTEA CONȚIN O MASĂ MAI MARE DE AER.

VOLUMUL COMPLET AL APARATULUI, CU BALONUL DE CAUCIUC ÎMPREUNĂ, A SCĂZUT.

ÎNSĂ NOI NU PUTEM APRECIA ACEST VOLUM.

DE ASEMENEA, BALONUL DE CAUCIUC ESTE PREVĂZUT CU O SUPAPĂ CARE ÎMPIEDICĂ AERUL DIN APARAT SĂ SE ÎNTOARCĂ ÎN BALONUL DE CAUCIUC.

DACĂ BALONUL DE CAUCIUC ESTE LEGAT PRINTR-UN TUB DE CAUCIUC SAU DE STICLĂ, DE BALONUL DE STICLĂ, REZULTĂ CĂ VOLUMUL APARATULUI SCADE CÂND VOLUMUL BALONULUI DE CAUCIUC SCADE.

O ÎNTREBARE CARE A FOST PUSĂ ÎN ANUL 1780 ESTE DACĂ DENSITATEA AERULUI ESTE PROPORȚIONALĂ CU FORȚA LUI EXPANSIVĂ [112].

ACEASTĂ ÎNTREBARE A FOST IGNORATĂ ÎN ACEEA ETAPĂ [112].

ÎN 1780, PENTRU A AJUNGE LA ACEASTĂ CUNOȘTINȚĂ, A FOST NECESARĂ CUNOAȘTEREA MASEI REALE A UNEI CANTITĂȚI DE AER, LA O TEMPERATURĂ ȘI PENTRU O ÎNĂLȚIME A BAROMETRULUI DATE, ȘI DUPĂ ACEEA CUNOAȘTEREA MASEI UNUI VOLUM DE AER IDENTIC AFLAT ÎN CIRCUMSTANȚE DIFERITE DE PRIMA MASĂ CONSIDERATĂ CA ETALON [112].

PENTRU ACEASTA FOUCHY A CONSTRUIT UN INSTRUMENT ÎN ANUL 1780 [112].

DIFERITE ÎNĂLȚIMI ALE BAROMETRULUI SE REFERĂ LA DIFERITE ÎNĂLȚIMI ÎN ATMOSFERĂ.

ECUAȚIA CARE DĂ ACEASTĂ LEGE DE PROPORȚIONALITATE, PREZENTATĂ ÎN LUCRAREA [112], ESTE:

$$F \sim M / V, \quad (1.1.4.)$$

UNDE:

F ESTE FORȚA EXPANSIVĂ A AERULUI;

M ESTE MASA AERULUI;

V ESTE VOLUMUL AERULUI.

DEOARECE S-A OBSERVAT CĂ AERUL ÎNCHIS ÎNTR-UN BALON DE STICLĂ, ESTE AFECTAT DE TEMPERATURĂ PRIN FORȚA EXPANSIVĂ, S-A IMPUS CUNOAȘTEREA TEMPERATURII AERULUI [112].

24.2. CĂLDURA

UN CORP CALD, ÎN CONTACT TERMIC CU UN CORP MAI RECE, ÎL ÎNCĂLZEȘTE ȘI PRIN ÎNCĂLZIRE ÎL DILATĂ PE CEL RECE [115]. UN CORP MAI RECE, ÎL RĂCEȘTE ȘI ÎL CONTRACTĂ PE CEL CALD [115]. ACEASTĂ PROPRIETATE DE DILATARE SAU CONTRACTARE SE OPREȘTE CÂND ÎNTRE ACESTE CORPURI DIFERITE SE STABILEȘTE O STARE DE ECHILIBRU [115]. ACEASTĂ PROPRIETATE DE DILATARE SAU CONTRACTARE DE CĂLDURĂ A CORPURILOR ESTE MĂSURABILĂ [115].

MĂSURĂM CĂLDURA CORPURILOR PRIN CREȘTEREA SAU DIMINUAREA VOLUMELOR LOR, PRIN DILATAREA SAU CONTRACTAREA SUBSTANȚELOR SUPUSE ACȚIUNII LOR [115].

UN CORP SCUFUNDAT ÎN BUCĂȚI DE GHEAȚA CARE SE TOPESC, PREIA ACELAȘI GRAD DE ÎNCĂLZIRE PE CARE O ARE GHEAȚA [115]. NUMIM ZERO ACEST GRAD DE ÎNCĂLZIRE [115]. ÎMPĂRȚIM ÎN PĂRȚI EGALE CREȘTEREA SAU CONTRACTAREA ACELUIAȘI CORP CARE A PRIMIT O CALDURA MAI MARE SAU UN FRIG MAI MARE [115]. INSTRUMENTELE GRADATE PE ACEST PRINCIPIU SE NUMESC TERMOMETRE [115]. ELE MĂSOARĂ ÎN MOD REAL GRADUL DE CONTRACTARE SAU DE DILATARE PE CARE UN CORP, ÎNTR-O ANUMITĂ STARE DE CALDURĂ, ÎNTR-O TEMPERATURA DATĂ, O PRODUCĂ ASUPRA UNEI SUBSTANȚE DATE [115].

ÎN ANUL 1780 S-A PUBLICAT CĂ DOUĂ MASE EGALE DE APĂ, UNA DE ZECE GRADE, ȘI CEALALTĂ DE DOUĂZECI, AMESTECATE, NU DAU ACELAȘI GRAD DE CĂLDURĂ CA DOUĂ MASE EGALE DE APĂ ȘI MERCUR, DE ASEMENEA UNA DE ZECE GRADE, ȘI CEALALTĂ DE DOUĂ ZECI [115].

DEOARECE CĂLDURA SE COMUNICĂ ȘI TINDE SĂ AJUNGĂ LA UN ECHILIBRU ÎNTRE CORPURILE DIN SISTEM, DIN ACESTE OBSERVAȚII REZULTĂ, CĂ ÎNTR-UN CORP ESTE MAI MULTĂ FORȚĂ CARE PRODUCĂ CĂLDURA DECÂT ÎN CELĂLALT [115].

DE WOOLIWICH, IN LUCRAREA [116], PREZINTA CA A FOLOSIT O BATERIE DE TIP VOLTA, ȘI DACA PLACILE DE ARGINT SI ZINC DE LA EXTREMITATI SUNT PUSE IN COMUNICARE CU DOUA FIRE DE ARGINT SI ZINC, CARE SE INTRODUC IN APA DINTR-UN VAS, ATUNCI SE PRODUCE DESCOMPUNEREA APEI, SI SE DEGAJA UN GAZ FORMAT DIN HIDROGEN SI OXIGEN, FENOMENE DEJA OBSERVATE DE NICHOLSON SI CARLISLE.

DE WOOLIWICH, IN LUCRAREA [116], A OBTINUT CA IN DESCOMPUNEREA APEI GAZUL CARE SE DEGAJA ESTE FORMAT DIN DOUĂ PARTI ATOMICE DIN HIDROGEN SI O PARTE ATOMICĂ DIN OXIGEN. ACEST MOD DE VERIFICARE A PROCENTULUI DE ATOMI DE HIDROGEN ȘI APA IN MOLECULA DE APA ESTE CONFIRMATA ȘI PREZENTATA IN LUCRAREA [80].

VERIFICARE PROPORȚIILOR CANTITAȚILOR DE HIDROGEN ȘI OXIGEN CARE REZULTA DIN ELECTROLIZA APEI SE POATE EFECTUA IN MODUL PREZENTAT IN CONTINUARE.

ȘTIM CA MASA OXIGENULUI ESTE DE 16 ORI MAI MARE DECAT MASA HIDROGENULUI [117]. MATEMATIC ACEASTĂ RELAȚIE ESTE

$$M_O = 16M_H$$

RAPORTUL DINTRE MASA GAZULUI DE HIDROGEN, M_{GH} , ȘI MASA ATOMULUI DE HIDROGEN, M_H , IMPARTITA LA RAPORTUL DINTRE MASA GAZULUI DE OXIGEN ȘI MASA ATOMULUI DE OXIGEN ESTE

$$\frac{\frac{M_{GH}}{M_H}}{\frac{M_{GO}}{M_O}} = \frac{M_{GH}}{M_{GO}} \frac{M_O}{M_H} = 16 \frac{M_{GH}}{M_{GO}}$$

DE ASEMENEA, RAPORTUL DINTRE MASA GAZULUI DE HIDROGEN ȘI MASA ATOMULUI DE HIDROGEN ESTE EGAL CU NUMARUL DE ATOMI DE HIDROGEN DIN GAZ, N_H . LA FEL ȘI PENTRU OXIGEN. RAPORTUL NUMARULUI ATOMILOR DE HIDROGEN ȘI OXIGEN ESTE EGAL CU 2. REZULTĂ CĂ

$$\frac{\frac{M_{GH}}{M_H}}{\frac{M_{GO}}{M_O}} = \frac{N_H}{N_O} = 2$$

PRIN EGALAREA ULTIMELOR DOUA ECUAȚII DE MAI SUS REZULTA CA

$$16 \frac{M_{GH}}{M_{GO}} = 2$$

REZULTĂ CĂ RAPORTUL MASELOR GAZELOR DE OXIGEN ȘI HIDROGEN ESTE EGAL CU 8

$$\frac{M_{GO}}{M_{GH}} = 8$$

PRIN MASURAREA MASELOR CELOR DOUA GAZE SE VERIFICA RELAȚIA DE MAI SUS.

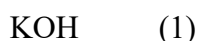
MASURAREA MASELOR CELOR DOUA GAZE SE EFECTUEAZA IN MODUL PREZENTAT IN CONTINUARE.

CEI DOI ELECTROZI SE ACOPERA CU CATE UN CLOPOT ETANȘ, DE EXEMPLU SCUFUNDAȚI CU FUNDUL IN APA. ASTFEL, GAZELE DE LA CEI DOI ELECTROZI SE DEGAJA SUB CELE DOUA CLOPOTE. CELE DOUA CLOPOTE SUNT LEGATE

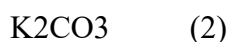
SIMETRIC LA CELE DOUA BRAȚE ALE UNEI BALANȚE. ÎNȚIAL, BALANȚA ESTE ECHILIBRATA. DUPA ELECTROLIZA, MASELE GAZELOR DE SUB CLOPOTE AU CRESCUT, ȘI PENTRU ECHILIBRAREA BALANȚEI, PE DOUA TALERE ATAȘATE LA BRAȚELE BALANȚEI SE PUN GREUTAȚI. NUMAI PE BRAȚUL BALANȚEI CU HAZUL DE HIDROGEN TREBUIE PUSE GREUTAȚI ÎN CANTITATE DE 32 DE UNITAȚI. DACA NIVELUL APEI ÎNTR-UN CLOPOT SE RIDICA MAI MULT DECAT ÎN CELALALT CLOPOT, TREBUIE LUATA ÎN CALCUL FORȚA LUI ARHIMEDE.

25.ATOMUL, ELEMENTUL CHIMIC ȘI ELEMENTUL FIZIC

POTASIUL ESTE UN ELEMENT CHIMIC ȘI ARE SIMBOLUL K [76]. HIDROXIDUL DE POTASIU ARE FORMULA CHIMICĂ [117] ȘI [118]



CARBONATUL DE POTASIU ARE FORMULA CHIMICĂ [118, p. 88]



FORMULA CHIMICA A ACIDULUI CARBONIC DATA DE [117] NU COINCIDE CU FORMULA CHIMICA A ACIDULUI CARBONIC DIN PREZENT DATA DE [118, p. 102]. [117] DEFINEȘTE ACIDUL CARBONIC CA



ÎNSĂ ACESTA ESTE BIOXIDUL DE CARBON [118, p. 70].

DACĂ SE DIGERĂ HIDROXIDUL DE POTASIU ORDINAR, SAU CARBONATUL DE POTASIU NESATURAT DE BIOXID DE CARBON, CU PRUSIAT DE FIER, ACESTA SE DECOLOREAZĂ; ȘI DACĂ FACEM SĂ SE EVAPORE LICHIORUL, OBȚINEM CRISTALELE ACESTEI COMBINAȚII CARE SE NUMEȘTE PRUSIAT DE POTASIU FERUGINOS SATURAT, ȘI CARE ÎN LUCRAREA [119] ESTE DENUMIT PRUSIAT DE POTASIU; DUPĂ ACEEA SE FORMEAZĂ CRISTALELE DE CARBONAT DE OXID DE POTASIU [119].

CONFORM CELOR PREZENTATE MAI SUS OBSERVĂM CĂ ÎN ANUL 1789 ERAU IDENTIFICATE, FĂRĂ SPECIFICAREA FORMULELOR CHIMICE, PRIN

PROPRIETĂȚILE LOR CHIMICE, SUBSTANȚELE CARE AU MOLECULELE DIN ECUAȚIILE (1) – (3) ȘI ALTE MOLECULE ALE CĂROR FORMULE CHIMICE NOI NU LE CUNOAȘTEM. DE ASEMENEA SE CUNOȘTEA CA DACA SE EVAPORA UN LICHID ATUNCI SE FORMEAZA CRISTALE.

NATURA A DOTAT TOATE CORPURILE CU PROPRIETAȚI SENSIBILE IMEDIAT SAU MEDIAT [120]. ACESTE SUNT BAZELE TUTUROR METODELOR MINERALOGICE [120].

UN MIJLOC DE A FACE CUNOȘTINȚELE NOASTRE UTILE, ESTE DE A STABILI UNITAȚILE PRIN CARE LE RAPORTAM, SI DIN CARE INTREBUINȚAM PE URMA SUMELE SI PARȚILE [120]. ÎN CHIMIE S-AU DAT NUME TUTUROR SUBSTANȚELOR. DE ASEMENEA S-AU FORMAT SPECII DE SUBSTANȚE, GRUP DE SUBSTANȚE CARE AU ACEEAȘI PROPRIETAȚI CHIMICE. ASTFEL, PE BAZA CUNOȘTINȚELOR ACUMULATE S-AU STABILIT ACESTE DENUMIRI ȘI SPECII DE SUBSTANȚE. ÎN ARTICOL [120], CHENEVIX CUTA PRINCIPIUL CEL MAI GENERAL SI CEL MAI PUȚIN VARIABIL, PENTRU CA SA-L FOLOSEASCA DREPT BAZA PENTRU DETERMINAREA ACESTOR UNITAȚI, SI A CONVENIT IN ISTORIA NATURALA CA SA-L NUMEASCA PE ACESTA SPECIE [120].

ÎN REGNUL VEGETAL SI ANIMAL, FACULTATEA DE REPRODUCERE A UNOR INDIVIZI ASEMANATORI CU PARINȚII LOR, CONSTITUIE SPECIA [120]. ACEST PRINCIPIU DE SPECIFICAȚIE A FOST RECUNOSCUT, INSA NU ESTE APLICABIL REGNULUI MINERAL [120].

CONSULTAND LUCRARILE DIN ANTICHITATE DESPRE MINERALOGIE, CHENEVIX SPUNE CA ELE LIPSESC IN TOTALITATE [120]. ÎN TIMPURILE MODERNE, WERNER A GASIT DOCTRINE ȘI PRINCIPII BAZATE PE CUNOAȘTEREA PRIN SENSURILE NOASTRE, CU CARE A CLASIFICAT MINERALELE [120]. ACESTE CARACTERISTICI DE CLASIFICARE SUNT: CULOAREA, STRALUCIREA, GREUTATEA SPECIFICA, RUPEREA, ALTE PROPRIETAȚI, ȘI CALITAȚI LATENTE [120].

WERNER A SPUS IN LUCRAREA (MEMOIRE DE M. DAUBUISSON, JOURNAL DE PHYSIQUE, POUR FRIMAIRE AN 10) A SPUS CA [120]:

„ TOATE MINERALELE CARE SUNT ESENȚIAL ACEEAȘI PARȚI CONSTITUTIVE, ATAT PRIN RAPORT CALITATIV CAT SI CANTITATIV, FORMEAZA ACEEAȘI SPECIE; SI CA TOATE CARE DIFERA ESENȚIAL, APARTIN DE SPECII DIFERITE [120]. DACA IN ACEEAȘI SPECIE, DIFERITE MINERALE, AVAND INTRE ELE ACEEAȘI CARACTERE, CU O SINGURA EXCEPȚIE, SI DIFERA DE ALTELE PRIN DOUA SAU TREI (UN NUMAR MAI MARE DETERMINA O DIFERENȚA DE SPECII), ELE FORMEAZA SUB SPECII PARTICULARE... [120]. ÎN FINAL, ATUNCI CÂND UN INDIVID, ÎNTR-O SPECIE SAU SUBSPECIE, NU PREZINTĂ DECÂT UN CHARACTER DIFERIT, EL FORMEAZĂ O VARIETATE [120].” [120].

[120] OBIECTEAZĂ DOUA LUCRURI LA CUVÂNTUL ESENȚIAL. ÎN PRIMUL RÂND, EL NU TREZEȘTE ACEEAȘI IDEE LA TOȚI OAMENII; ȘI NOI NU PUTEM AVEA NOȚIUNI PRECISE DESPRE SEMNIFICAȚIA LUI, ATÂTA TIMP CÂT NU AM ÎNVĂȚAT NIMIC FIX DESPRE SEMNIFICAȚIA LUI [120]. ÎN AL DOILEA RAND, MIJLOACELE CHIMICE CARE POT SA NE AJUTE SA NE PRONUNȚAM CU UNELE CERTITUDINI ASUPRA CE APARTINE ESENȚIAL SAU ACCIDENTAL LA COMPOZIȚIA A UNUI MINERAL, NE LIPSESC IN TOTALITATE [120]. ÎNSA SA PRESUPUNEM, PENTRU MOMENT, CA NOI AM ACHIZIȚIONAT CUNOȘTINȚELE NECESARE [120]. DE ACEEA COMPOZIȚIA CHIMICA ESTE BAZA VERITABILA A SPECIFICAȚIEI IN ACEST SISTEM [120]. ÎNSA AM AFLAT DIN CITAȚIA DE MAI SUS CA ATUNCI CAND DOUA MINERALE DIN ACEEAȘI SPECIE DIFERA PRINTR-UN SINGUR CHARACTER, ELE SUNT VARIETAȚI; DACA DIFERA PRIN DOUA SAU TREI, ELE FORMEAZA SUB SPAȚII [120]. DACA NUMARUL DE CARACTERE SPECIFICE DEPAȘEȘTE TREI, MINERALELE APARTIN LA SPECII DIFERITE [120]. ACEASTA ESTE O A DOUA IDEE DE SPECIE; SI PENTRU A SE CONCILIA CU PRIMA, [120] SUSȚINE CA VARIAȚIA A MAI MULT DE TREI CARACTERE SPECIFICE ESTE O CONSECINȚA INSEPARABILA A UNEI DIFERENȚE ESENȚIALE IN COMPOZIȚIA CHIMICA A MINERALELOR [120].

SUNTEM TENTAȚI SA CREDEM CA NUMARUL TREI DE CARACTERE PENTRU A CHARACTERIZA O SCHIMBARE IN COMPOZIȚIA CHIMICA A FOST ACCEPTATA PRIN HAZARD [120].

[120] DA CA EXEMPLU URMATOARELE TREI CARACTERE PRIN CARE POT SA DIFERE DOUA SPECII DE MINERALE: TRANSPARENȚA, DUCTILITATEA, SI REZISTENȚA LA VAR.

IATA UN AL DOILEA EXEMPLU DE INCONVENIENT FOARTE GRAV, DACA FACEM DEPENDENȚA SPECIEI DE UN NUMAR DEFINIT DE CATEVA CARACTERE [120]. FORMA ESTE UN CARACTER, CRISTALIZAREA ESTE CUPRINSA IN FORME [120]. WERNER NU ADMITE PRISMA DECAT PRIN ANUMITE RAPOARTE EXISTENTE INTRE INALȚIME SI LAȚIME; SI DIMINUAND ACEASTA DIN URMA, PRISMA DEVINE O TABLA [120]. UN ALT EXEMPLU DE CARACTER ESTE FORMA, CRISTALIZAREA ESTE CUPRINSA IN FORMA [120]. PRISMA SI TABLA SUNT CONSIDERATE CA FORMEAZA DOUA SPECII DIFERITE DE FORME PRIMITIVE [120]. CONSIDERAM UN CRISTAL DE CALCAR IN FORMA DE PRISMA HEXAEDRICA, SI UN ALT CRISTAL DE ACELAȘI FEL IN FORMA DE TABLA HEXAEDRICA, SI REZULTA UN CARACTER SPECIFIC DIFERIT IN CELE DOUA BUCĂȚI DE CALCAR [120]. PRESUPUNEM TABLA APROAPE DE A DEVENI O PRISMA, SI PRISMA APROAPE DE A DEVENI O TABLA [120]. ÎN ACEST FEL PRISMA SI TABLA NU DIFERA, INSA DACA SE CONSIDERA CARACTER RAPORTULUI INTRE INALȚIME SI LAȚIME, ACEST CARACTER DIFERA PENTRU ELE. PRESUPUNEM IN PLUS CA UNA ESTE TRANSLUCIDA, SI CEALALTA OPACA; ADAUGAND DOUA CARACTERE SPECIFICE, NU MAI NESEMNIFICATIVE CA CELE DOUA, SE OBTINE O NOUA SPECIE [120]. ÎNSA, DACA COMPLETAM CAUZA CARE A DETERMINAT CRISTALIZAREA CU CATEVA MOLECULE DE CARBONAT DE VAR IN SENSUL AXEI PRISMEI PE CARE AM CONSIDERAT-O TABLA, ACEASTA SEPARARE FORȚATA A FOST SALVATA CU CELE SIMILARE [120].

WERNER A ÎMPĂRȚIT CARACTERELE EXTERIOARE, ÎN CARACTERE GENERICI, CARACTERE SPECIFICE, ȘI CARACTERE DE VARIETATE CARE INFLUENȚEAZĂ DISTRIBUȚIA METODICĂ A MINERALELOR, INFERIOR DENUMIRILOR ANALOAGE [120]. CULOAREA, STRĂLUCIREA, ȘI GREUTATEA SPECIFICĂ AU SUBDIVIZIUNI [120, p. pagina 13]. ALBUL, GRIUL, NEGRUL, ALBASTRUL, VERDELE, GALBENUL, ȘI MAROUL SUNT SPAȚII PRINTRE CULORI [120]. NUANȚELE ACESTOR CARACTERE SUNT SUBDIVIZIUNI, ȘI LE

PRONUNȚĂM FOLOSIND UN EPITET LA CUVÂNTUL CARE DESEMNEAZĂ CARACTERUL SPECIFIC [120].

ALȚI AUTORI, CARE AU SCRIS LUCRĂRI DUPĂ PRINCIPIILE LUI WERNER, NE SPUN CĂ DEȘI ACEST SAVAT CONSIDERA CĂ TOATE MINERALELE CARE AU ACEEAȘI CARACTERE EXTERIOARE ȘI ACEEAȘI COMPOZIȚIE CHIMICĂ APARTIN ACELEIAȘI SPECII, EL NU PRETINDE CĂ ARANJAMENTUL SĂU TREBUIE SĂ FIE DE ACORD CU EXPERIMENTELE CHIMIȘTILOR [120]. ACEASTA ÎNSEAMNĂ CĂ SE CONSIDERĂ AFIRMAȚIILE TEORETICE SUPERIOARE EXPERIMENTELOR, ȘI SISTEMUL CARE SE ADOPTĂ CA PREFERABIL PENTRU PRINCIPIILE ȘTIINȚEI [120]. PENTRU DETERMINAREA SPECIEI NOI VOM CONSIDERA CARACTERELE SENSIBILE REUNITE ÎN COMPOZIȚIA CHIMICĂ; ÎNSĂ ACEASTĂ ȘTIINȚĂ NU VA AVEA NICI O GREUTATE DACĂ STUDIILE ȘI CLASIFICAREA NU VOR FI ÎN ACORD CU REZULTATELE CHIMIEI [120]. ACEASTA ÎNSEAMNĂ CĂ DACĂ PENTRU MINERALE CU ACEEAȘI CARACTERE SENSIBILE VOM OBȚINE REZULTATE CHIMICE DIFERITE, DEȘI, CONFORM CU TEORIA LUI WERNER, APARTIN ACELEIAȘI SPECII, ELE NU AU ACEEAȘI COMPOZIȚIE CHIMICĂ, ȘI ATUNCI ACEASTA ȘTIINȚĂ NU VA MAI FI VALABILĂ.

CHENEVIX [120] A AMINTIT DEJA DIFICULTATEA DE A CONCILIA NUMARUL IMENS DE PRINCIPII PE CARE ACEST SISTEM LE-A FORMULAT SI CONTRADICȚIILE PE CARE MINERALELE ELE INSELE LE FAC INDISPENSABILE CELUIA CARE LE ADOPTA CA BAZA. CHENEVIX [120] EXAMINEAZA UN NUMAR FOARTE MIC DE EXEMPLE PENTRU A VEDEA DACA CELEBRUL AUTOR A PUTUT SA FACA LEGILE UNIFORME [120]. EL ANALIZEAZA URMATOARELE CINCI LUCRURI:

- 1.DACA TOATE MINERALELE CARE AU ESENȚIAL ACEEAȘI COMPOZIȚIE CHIMICA, SUNT DISTRIBUITE IN ACEEAȘI SPECIE [120, p. 18];
- 2.DACA TOATE CARE AU O DIFERENȚA ESENȚIALA IN COMPOZIȚIA LOR CHIMICA, SUNT PLASATE IN SPECII DIFERITE [120, p. 18];
- 3.DACA TOATE MINERALELE CARE DIFERA PRIN MAI MULT DE TREI CARACTERE SPECIFICE, INDIFERENT CARE ESTE NUMARUL CELORA CARE SUNT IN COMUN, APARTIN LA SPECII DIFERITE [120, p. 18];

4.DACA TOATE CARE NU DIFERA PRIN MAI MULT DE TREI CARACTERE DIFERITE, SUNT ARANJATE IN ACEEEAȘI SPECIE [120, p. 18];

5.DACA MINERALELE SUNT INTOTDEAUNA CLASIFICATE IN GENURI, SPECII SI VARIETAȚI, RAȚIONAND DUPA DIFERENȚELE LOR; ADICA DACA CELE PLASATE IN GENURI SEPARATE DIFERA INTRE ELE IN PLUS INTOTDEAUNA CA CELE CARE APARTIN LA SPECII, SI VARIETAȚI DIFERITE [120].

CONDITIA NR. 1 ESTE VIOLATA DE GENUL ZIRCONIAN AL LUI WERNER, CARE ESTE DIVIZATA IN TREI SPECII, SI PENTRU CARE ANALIZA CHIMICA DA ACELEASI REZULTATE [120, p. 19]. CORINDONUL SI SPATUL ADAMANTIN APARTIN LA DOUA SPECII CU ACEEASI COMPOZITIE CHIMICA; SE INTALNESTE ACEEASI SITUATIE LA APATITA, LA PIATRA DE ASPERGE, CARE SE TRADUCE SPARANGHEL, SI LA FOSFORIT [120, p. 19]. GHIPSUL SI FRAUENEISUL SUNT INTR-UN CAZ SIMILARE; SI VARUL CARBOGAZOS PREZINTA PAISPREZECE SPECII CARE CONȚIN OPT SUBSPECII SI ȘASE VARIETAȚI [120, p. 19].

PENTRU NUMARUL 2 UN EXEMPLU ESTE BERILUL, CARE PRESUPUNEM CA SE TRADUCE BERILIU, CARE CONTINE PAMANTUL DE GLUCIN, SI BERILUL SCOLIFORM CARE NU-L CONTINE, INSA CONTINE ACIDUL FLUORIC [120, p. 19]. ACESTE MINERALE, FARA COMPOZITIE CHIMICA COMUNA, APARTIN ACELEASI SPECII [120, pp. 19-20].

ÎN MULȚIMEA PROPRIETAȚILOR CARE DISTING CORPURILE, OAMENII AU FOST FERICIȚI SA LE GASEASCA PE ACELEA CARE OFERA O DETERMINARE MAI EXACTA SI MAI RIGUROASA, SI AU SPERAT CA DEZVOLTAREA LE VA CONVERTI IN PRINCIPII [120, p. 23].

CUNOȘȚINȚELE CARE AU FOST ACUMULATE PANA LA DATA RESPECTIVA AU OFERIT DOUA MIJLOACE PENTRU IDENTIFICAREA ACELOR CALITAȚI ALE CORPURIILOR CARE AU SCAPAT OBSERVAȚIILOR SENSURILOR OMULUI [120, pp. 23-24]. ACESTE MIJLOACE SUNT FIZICA SI CHIMIA [120, p. 24]. ELE AU AVANTAJUL DE A PUTEA EVALUA CU MAI MULTA PRECIZIE PROPRIETAȚILE CARE SUNT IMPERFECTE LA PRIMA ABORDARE, SI IN PLUS AVANTAJUL SI MAI MARE DE A GASI NOI PROPRIETAȚI CARE NU SE MANIFESTA PRIN CAI IMEDIATE [120]. DEOARECE AM VAZUT SUCCESUL SLAB

OBȚINUT CU METODA PROPRIETAȚILOR IMEDIAT SENSIBILE, DEOARECE WERNER NU L-A FACUT MAI BUN, CHENEVIX ALEGE A DOUA DIN ACESTE ȘTIINȚE ÎN STABILIREA SPECIILOR MINERALOGICE [120].

FIZICA SI CHIMIA NE OFERA DOUA MIJLOACE PENTRU A AJUNGE LA ULTIMUL REZULTAT ÎN DIVIZIUNEA CORPURILOR [120]. FARA A INTRA ÎN DISCUȚII METAFIZICE SI INUTILE DESPRE INFINIT, PRESUPUNEM O SUBSTANȚA OARECARE REDUSA ÎN PARCELE, ÎNSA CELE MAI FINE, SI CELE MAI IMPERCEPTIBILE PE CARE SPIRITUL UMAN LE POATE IMAGINA [120, p. 24]. ACESTA ESTE ULTIMUL TERMEN AL DIVIZIUNII FIZICE; SI O SINGURA GRANULA DINTRE ACESTEA NE REPREZINTA ELEMENTUL FIZIC AL CORPURILOR [120, pp. 24-25]. ÎNSA ACEST ELEMENT ESTE FOARTE COMPUS ÎN UNELE CAZURI DINTR-UN ALT PUNCT DE VEDERE, SI APARE O ALTA SPECIE DE DIVIZIUNE PRIN MIJLOACE CARE SUNT NUMAI DE DOMENIUL CHIMIEI [120, p. 25]. CAND ACESTA ESTE DE ASEMENEA IMPINS PANA LA ULTIMUL LUI TERMEN, OBȚINEM ELEMENTUL CHIMIC [120, p. 25]. ÎNȚELEGEM PRIN ELEMENTUL FIZIC CEL CARE OCUPA CEA MAI MICA PORȚIUNE DIN SPAȚIU; ELEMENTUL CHIMIC PRESUPUNE CEL MAI MIC NUMAR DE PRINCIPII COMPONENTE [120, p. 25]. PRIMA SCAPA SENSURILOR NOASTRE CU MULT TIMP ÎNAINTE DE A ATINGE LIMITA SA; ULTIMA NU VA FI MAI PUȚIN EXACT REPREZENTATA PRINTR-UN MUNTE DE SILICIU PUR DECAT PRIN CEL MAI MIC ATOM [120, p. 25]. FUNCȚIA ELEMENTULUI FIZIC ESTE DE A SE AGREGA ÎN SUME MAI MULT SAU MAI PUȚIN CONSIDERABILE PENTRU A FORMA MASELE [120, p. 25]. FUNCȚIA ELEMENTULUI CHIMIC ESTE DE A FORMA CORPURILE PE CARE NOI LE NUMIM COMPUSE [120, p. 25]. ASTFEL, SIMPLITATEA UNUIA DINTRE ACESTE ELEMENTE NU-L INCURCA PE CEL AL CELUIALT [120, p. 25]. REZULTATUL COMBINATIEI ACESTOR ELEMENTE ÎN RAPOARTE DIFERITE ESTE VARIETATEA INFINITA A NATURII [120, p. 26].

CONFORM CU LUCRAREA [120, p. 27] HAÜY A SPUS CA SPECIA MINERALOGICA ESTE O COLECTIE DE MINERALE ÎN CARE MOLECULELE DIN COMPOZITIA LOR SUNT SIMILARE SI COMPUSE DIN ACEEASI ELEMENTE UNITE ÎN ACEEAAȘI PROPORȚII [120, p. 27].

S-A EMIS DEFINIȚIA ÎN CARE ELEMENTUL CHIMIC ESTE CEL MAI MIC ATOM [120]. DE ASEMENEA S-A EMIS DEFINIȚIA CA ELEMENTUL CHIMIC ESTE COMPUS DIN CEL MAI MIC NUMAR POSIBIL DE ELEMENTE COMPONENTE [120].

CONCLUZIA CARE REIESE DIN CELE PREZENTATE MAI SUS ESTE CA CHENEVIX, ȘI ALȚII ÎNAINTEA LUI [120], AU CLASIFICAT MINERALELE PE URMATOARELE CRITERII:

1. FORMA GEOMETRICĂ,
2. URMĂTOARELE PROPRIETĂȚI FIZICE:
 - 2.1. DENSITATEA,
 - 2.2. CULOAREA,
 - 2.3. NUANȚA CULORII,
 - 2.4. TRANSPARENȚA,
 - 2.5. RUPEREA, SAU DURITATEA LA SPARGEREA SAU LA ÎNTINDERE,
3. SUBSTANȚELE CHIMICE PE CARE LE CONȚIN ACESTE,
4. PROPORȚIILE ÎN CARE APAR SUBSTANȚELE CHIMICE ÎN ACESTE,
5. REZISTENȚA LA VAR.

ÎN FIGURA 1 PREZENTAM O FOTOGRAFIE CU PIETRE DE DIFERITE CULORI ADUNATE DE AUTORI DE LA BALASTIERA DE LANGA DEDEMAN DIN BUZAU, DIN MARACINENI. ÎN ACEASTA FIGURA PUTEM OBSERVA URMATOARELE CULORI: 1.ALB, 2.ROSU ÎNCHIS, 3.PORTOCALIU, 4.GRI, 5.SEMITRANSPARENTE SPRE GRI, 6.SEMITRANSPARENTE SPRE PORTOCALIU, 7.GRI ÎNCHIS, 8.NEGRU, 9.ALB CU O DUNGA NEAGRA, SI LANGA EA, UNA ALBA CU PORTIUNI NEGRE. PIETRELE ALBE MATE SUNT POROASE, DEGAJA GAZ CÂND SUNT INTRODUSE ÎN APA, SI MASA LOR CREȘTE DUPA CE AU FOST ȚINUTE ÎN APA 5 MIN, ÎNSA NOI NU ȘTIM DACA ABSORB APA SAU FAC REACTIE CHIMICA CU APA , ÎNSA NU ȘTIM CE COMPOZIȚIE CHIMICA ARE GAZUL DEGAJAT.

ÎN FIGURA 2 PREZENTAM O FOTOGRAFIE REALIZATA DE AUTOR CU PIETRE NUMITE AGATE, CARE SUNT SEMITRANSPARENTE, AU CULORI DE ALB, GRI,, PORTOCALIU, ȘI ALBASTRU. DINTRE PIETRELE ADUNATE DE AUTOR ȘI REPREZENTATE ÎN FIGURA 1, CELE SEMITRANSPARENTE DE CULORILE ALB,

GRI, SI PORTOCALIU SEAMANA CU AGATELE DIN FIGURA 2. PRESUPUNEM CA GREUTATEA SPECIFICA PE CARE O AMINTEȘTE [120] TREBUIE SA FIE DENSITATEA DEFINITA DE [70]. CA SA DEOSEBIM PIETRELE DIN FIGURA 1 DUPA DENSITAȚI, CONFORM CU CELE PREZENTATE DE [120], TREBUIE SA FOLOSIM FORMULA DENSITAȚII, ρ , DATA DE [70], IN CARE SE FOLOSESC MASELE PIETRELOR, m , ȘI VOLUMELE PIETRELOR, V , PE CARE TREBUIE SA LE MASURAM. DEFINIȚIA DENSITAȚII, DATĂ DE [70], ESTE

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (4)$$

ÎN CONTINUARE, ÎNCERCĂM SĂ IDENTIFICĂM PRINTRE PIETRELE NOASTRE, CÂTEVA AGATE, ȘI ALTE MINERALE, PRIN FOLOSIREA METODEI DENSITAȚII, A CULORILOR, ȘI A TRANSPARENȚEI.

METODA DE DETERMINARE A MASELOR SE EFECTUEAZĂ CU UN CÂNTAR, ȘI METODA DE DETERMINARE A VOLUMELOR SE POATE EFECTUA CU UN BORCAN DE STICLA ÎN CARE TURNAM APA PANA LA UN NIVEL, PE CARE ÎL MARCĂM CU UN CREION SAU UN PIX, INTRODUCEM PIETRELE DE ACELAȘI FEL ÎN APĂ, ȘI SCOATEM APA CU O SIRINGĂ GRADATĂ PÂNĂ LA ACEL NIVEL MARCAT, ȘI VOLUMUL DE APĂ SCOS NE INDICĂ VOLUMUL PIETRELOR INTRODUSE.

CUNOAȘTEREA COMPOZIȚIEI ACESTOR MINERALE, ȘI A ALTOR MINERALE, CLASIFICAREA LOR, ȘI OBȚINEREA, PRIN ANALIZE CHIMICE, A COMPOZIȚIEI CHIMICE, ADICĂ A ELEMENTELOR DIN CARE SUNT FORMATE ȘI A PROPORȚIILOR ÎN CARE SUNT UNITE ACESTE ELEMENTE, PERMITE DEFINIREA ELEMENTULUI FIZIC, ELEMENTULUI CHIMIC, ȘI CUNOAȘTEREA PROPORȚIILOR ÎN CARE SUNT UNITE ELEMENTELE PENTRU A FORMA MOLECULELE CONFORM CELOR PREZENTATE MAI SUS.

DENSITATILE PIETRELOR PREZENTATE MAI SUS IN ACEST CAPITOL AU FOST DETERMINATE DE NOI SI SUNT PREZENTATE IN TABELUL 1. OBSERVAM CA PIETRELE GRI MAT SPRE ALBASTRU SI GRI MAT DESCHIS AU APROXIMATIV ACEEASI DENSITATE. NOI PRESUPUNEM CA ACEASTA POATE SA INSEMNE CA FAC PARTE DIN ACEEASI SPECIE DE MINERALE SI CA AU

ACEEASI COMPOZITIE CHIMICA. PIETRELE DE LA POZITIILE 2 SI 8 DIN TABEL AU APROXIMATIV ACEEASI DENSITATE SI SUNT SEMITRASPARENTE, SI IN CONCLUZIE, DESI CULORILE LOR DIFERA, PRESUPUNEM CA SUNT DIN ACEEASI SPECIE DE MINERALE. CONFORM CA VARUL ESTE ALB, SI CALCARUL ESTE ALB, NOI PRESUPUNEM CA PIETRELE ALBE SUNT CRETA, PIATRA DE VAR, SAU CALCAR [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/CHALK](https://en.wikipedia.org/wiki/Chalk) , CARE CONFORM CU LUCRAREA [84] ESTE CARBONAT DE CALCIU. CONFORM CU LUCRAREA [117] VARUL ARE FORMULA CHIMICA CaO . CARBONATUL DE CALCIU ARE FORMULA CHIMICA $CaCO_3$ [69, p. 171]. NOI PRESUPUNEM CA PIETRELE DIN POZITIILE 2 SI 8 DIN TABEL POT FI AGATE, SiO_2 , DEOARECE CORESPUNDE DENSITATEA LOR [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/AGATE](https://en.wikipedia.org/wiki/agate) , SI PIETRELE DE LA POZITIILE 1 SI 3 POT FI JASPER [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/JASPER](https://en.wikipedia.org/wiki/Jasper) DEOARECE ACESTE A U CULORILE ROSU SI NEGRU SI CORESPUNDE DE ASEMENEA DENSITATEA LOR, DEOARECE ELE POT FI DE CULORILE ROSU, GALBEN, MARO, SAU VERDE, SI MAI RAR ALBASTRU.

PE LINIA DE CALE FERATA BUZAU – FETESTI ESTE O GARA NUMITA CIRESU, PREZENTATA IN FOTOGRAFIA DIN FIGURA 1 REALIZATA DE INVENTATORI, CEEA CE INSEAMNA CA IN ROMANIA SE CUNOASTE CIRESUL.

1.REVENDICAM O METODA DE CLASIFICARE A MINERALELOR CARACTERIZATA PRIN ACEEA CA LE DEOSEBIM PRIN CULOARE, TRANSPARENȚA, SI DENSITATE, CA IN LUCRAREA [120].

TABELUL 1. DENSITATILE PIETRELOR PREZENTATE MAI SUS IN ACEST CAPITOL. OBSERVAM CA PIETRELE GRI MAT SPRE ALBASTRU SI GRI MAT DESCHIS AU APROXIMATIV ACEEASI DENSITATE. NOI PRESUPUNEM CA ACEASTA POATE SA INSEMNE CA FAC PARTE DIN ACEEASI SPECIE DE MINERALE SI CA AU ACEEASI COMPOZITIE CHIMICA. PIETRELE DE LA POZITIILE 2 SI 8 DIN TABEL AU APROXIMATIV ACEEASI DENSITATE SI SUNT SEMITRASPARENTE, SI IN CONCLUZIE, DESI CULORILE LOR DIFERA, PRESUPUNEM CA SUNT DIN ACEEASI SPECIE DE MINERALE. CONFORM CA VARUL ESTE ALB, SI CALCARUL ESTE ALB, NOI PRESUPUNEM CA PIETRELE

ALBE SUNT CRETA, PIATRA DE VAR, SAU CALCAR [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/CHALK](https://en.wikipedia.org/wiki/Chalk) , CARE CONFORM CU LUCRAREA [84] ESTE CARBONAT DE CALCIU. CONFORM CU LUCRAREA [117] VARUL ARE FORMULA CHIMICA CaO . CARBONATUL DE CALCIU ARE FORMULA CHIMICA $CaCO_3$ [69, p. 171]. NOI PRESUPUNEM CA PIETRELE DIN POZITIILE 2 SI 8 DIN TABEL POT FI AGATE, SiO_2 , DEOARECE CORESPUNDE DENSITATEA LOR [121] [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/AGATE](https://en.wikipedia.org/wiki/Agate) , SI PIETRELE DE LA POZITIILE 1 SI 3 POT FI JASPER [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/JASPER](https://en.wikipedia.org/wiki/Jasper) DEOARECE ACESTE AU CULORILE ROSU SI NEGRU SI CORESPUNDE DE ASEMENEA DENSITATEA LOR.

	CULOARE	MAS A (G) $\pm 1 G$	VOLU M (ML) $\pm 6ML$	DENSITAT E (G/ML) $=10^{-3}KG/m^3$	DENSITAT E (KG/m ³)	IDENTIFICA RE
1	NEGRU MAT	68	30	2.26		
2	ALB SEMITRANSPARENT	132	54	2.44		AGATĂ
3	ROȘU MAT	91	35	2.6		
4	GRI MAT SPRE ALBASTRU	124	54	2.29		
5	GRI MAT DESCHIS	89	39	2.28		
6	ALB MAT	41	24	1,7		CRETA, PIATRA DE

						VAR, SAU CALCAR.
7	ALB MAT DUPA CE A ABSORBIT APA 5 MIN	48				
8	SEMITRANSPAREN TE, GALBENE, PORTOCALII, ROȘII ȘI MARO.	58	24÷30	1.73÷2.41		AGATĂ
9						

26. PROPORȚIILE DETERMINATE ÎN CARE SE REGĂSESC REUNITE ELEMENTELE NATURII INORGANICE

C.-L. BERTHOLLET ÎN CERCETAREA LUI INGENIOASA DESPRE LEGILE AFINITĂȚII, A CĂUTAT SĂ GĂSEASCĂ, CA CORPURILE POT INTRA ÎN COMBINAȚII ÎN PROPORȚII PROGRESIVE ȘI NEDETERMINATE ALE ELEMENTELOR, PRINCIPIILOR [122]. UN ALT SAVANT, L. PROUST, A DEMONSTRAT CONTRAR LUI, CA NU SUNT PROPORȚII PROGRESIVE NEDETERMINATE DE ACESTE SPECII, DAR CA TOATE CORPURILE COMPUSE, SE DISTING PRINTR-UN CARACTER SPECIFIC, ȘI NU EXISTA DECAT INTR-O SINGURA SI INVARIABILA PROPORȚIE INTRE ELEMENTE, DE EXEMPLU

PENTRU A FACE CA OXIDUL UNUI METAL SA TREACA IN STAREA DE OXID, CANTITATEA UNUI ELEMENT CONSTITUENT ESTE CRESCUTA, ACEASTA CREȘTERE SE FACE PRINTR-UN SALT LA O ALTA CANTITATE IN MOD EGAL SI INVARIABIL, SI NICI O SERIE DE COMBINAȚII NU POATE AVEA LOC INTRE ACESTE CANTITAȚI DEFINITE [122].

IN EXPERIMENTELE LA CARE A LUAT PARTE [122] A GĂSIT CÂTEVA REGULI GENERALE ALE COMBINAȚIILOR [122]. [122] A FOST CONDUS CATRE ACESTE CERCETARI DE CATEVA EXPERIMENTE, PE CARE LE-A EFECTUAT PENTRU A DETERMINA CANTITATEA DE OXIGEN IN AMONIAK [122]. [122] A OBȚINUT ÎN ACESTE EXPERIMENTE, CA ÎN TOATE MURIATURILE, ÎN CARE CANTITATEA DE ACID MURIATIC A FOST DETERMINATA ÎN URMA ANALIZELOR MURIATULUI DE ARGINT DE BUCHOLZ ȘI ROSE, PARTEA DE BAZA CARE SATUREAZĂ O ANUMITA CANTITATE DE ACID, CONȚINE ACEEAȘI CANTITATE DE OXIGEN [122]. ACELAȘI LUCRU SE CONSTATA LA SULFAȚI, ESTIMATĂ DUPĂ ANALIZELE SULFATULUI DE BARITA DE BUCHOLZ, DEȘI ÎN ALTA PARTE ACESTE DOUA SERII NU SUNT BINE ASAMBLATE, NICI NU AU FOST DE ACORD ÎN ACESTE CAZURI, LA CARE ESTIMAREA UNUIA DIN ACEȘTI ACIZI INTR-O SARE A FOST EFECTUATA DE ALTA MANIERA [122]. [122] A GASIT IN PLUS CA IN MURIATUL DE PLUMB SI DE CUPRU CARE AU EXCES DE BAZA, ACIDUL A LUAT PENTRU SATURARE DE PATRU ORI MAI MULTA BAZA CA IN SARURILE NEUTRALIZATE [122].

[122] IN TIMP CE ERA OCUPAT CU ACEASTA MUNCA, A CAZUT PESTE EXPERIMENTELE LUI WOLASTON (JOURNAL DE NICHOLSON, NOVEMBRE 1808) DESPRE SARURI ACIDULE, SI PRIN RAPORTAREA LA IPOTEZA LUI DALTON: CAND CORPURILE SE POT COMBINA IN PROPORȚII DIFERITE, ACESTE PROPORȚII SUNT INTOTDEAUNA O MULTIPLICARE SIMPLA A 1, 2, 3, 4, ETC. CU GREUTAȚILE, PONDERILE, UNUIA DINTRE CORPURI, A GASIT CA EXPERIMENTELE LUI WOLLASTON PAREAU DE ASEMENEA CONFIRMATE [122].

CAND DOUA CORPURI, DE EXEMPLU A SI B, SE POT COMBINA IN MAI MULTE PROPORȚII DIFERITE, ACESTE VOR FI 1. 1A CU 1B (SAU CE NUMIM COMBINAȚIA LA MINIMUM); 2. 1A CU $1 + \frac{1}{2}$ B (SAU 2A CU 3B); 3. 1A CU 2B; SAU

4. 1A CU 4B; DAR IN ACESTE EXPERIMENTE NU VOM GASI EXEMPLUL 1A CU 3B [122].

GASIM IN PLUS CA, DACA DOUA CORPURI A SI B AU AMANDOUA AFINITAȚI PENTRU ALTE DOUA C SI D, C CARE SATUREAZA A ESTE PENTRU D, CARE SATUREAZA A CUM ESTE C PENTRU D CAND B ESTE SATURAT [122]. DACA, DE EXEMPLU, 100 PARȚI SAU G DE PLUMB LA MINIMUM, IAU 15.6 PARTI DE SULF SI 7.8 PARTI DE OXIGEN, SI DACA 100 PARTI DE FIER, CONFORM ANALIZELOR FACUTE DE [122], IAU 58.8 PARTI DE SULF, COMPOZIȚIA OXIDULULUI DE FIER SE POATE GASI PRINTR-UN CALCUL SIMPLU, INTRUCAT [122]

$$15.6:7.8 = 58.8:29.4$$

SI 100 DE PARTI DE FIER IAU 29.4 PARTI DE OXIGEN [122]. ACEST LUCRU A FOST CONFIRMAT DE EXPERIMENTELE EFECTUATE DE [122]. PUTEM FACE IN ACEASTA MANIERA ESTIMAREA TUTUROR COMBINAȚIILOR BINARE, LA FEL CA LA COMPOZIȚIA SARURILOR PE CARE A GASIT-O PRIN ACELAȘI CALCUL SAVATUL RICHTER [122].

DIN EXPERIMENTELE EFECTUATE DE EL [122] A OBȚINUT CA 100 DE PARTI DE OXID DE PLUMB GALBEN, SAU 100 G, SUNT FORMAȚI DIN 92.765 PARTI SAU G DE PLUMB SI 7.235 PARTI SAU G DE OXIGEN SAU IN OXIDUL DE PLUMB GALBEN 100 G DE PLUMB IAU 7.8 G DE OXIGEN [122].

TOT DIN EXPERIMENTELE LUI [122] A OBȚINUT CA OXIDUL DE PLUMB GALBEN LA MINIMUM CONȚINE 100 PARTI SAU G DE PLUMB SI 11.08 PARTI SAU G DE OXIGEN [122].

TOT DIN EXPERIMENTELE LUI [122] A OBȚINUT CA OXIDUL DE PLUMB MARO CONȚINE 86.51 PARTI SAU G DE PLUMB SI 13.49 PARTI SAU G DE OXIGEN, SAU 100 PARTI SAU G DE PLUMB SI 15.6 PARTI SAU G DE OXIGEN [122].

[122] PREZINTA CONCLUZIA CA PLUMBUL ARE TREI STARI DE OXIDARE SI PREIA OXIGEN CA $1, \frac{3}{2}$, SI 2. ACESTE STARI DE OXIDARE SE POT VERIFICA PRIN CALCUL FOLOSIND REZULTATELE LUI [122] CONSIDERAND CA IN

PRIMUL OXID LA 100 G DE PLUMB CORESPUND 7.8 G DE OXIGEN, SI SE IMPART PARTILE DE OXIGEN CORESPUNZATOARE LA 100 G DE PLUMB DIN CEILALȚI DOI OXIZI LA PARTEA DE OXIGEN DIN PRIMUL OXID, ASTFEL SE OBTIN RAPOARTELE DE MAI INAINTE INTRE MASELE OXIGENULUI IN CEI TREI OXIZI.

MAI MULȚI CHIMIȘTI AU INCERCAT SA DETERMINE PROPORȚIA DE SULF IN ACIDUL SULFURIC, PRINTRE CARE KLAPROTH, BUCHOLZ SI RICHTER [122].

TOT IN EXPERIMENTELE SALE [122] A OBTINUT PENTRU COMPOZIȚIA ACIDULUI SULFURIC CA 100 PARTI SAU G DE SULF SE COMBINA CU 146.426 PARTI SAU G DE OXIGEN [122].

[123] A PRODUS EXPLOZIA UNUI AMESTEC DE GAZ DE HIDROGEN SI DE GAZ DE OXIGEN CU O SCANTEIE IN EUDIOMETRUL LUI VOLTA.

[124] A EFECTUAT UN MARE NUMAR DE EXPERIMENTE CU UN MARE NUMAR DE CORPURI FOLOSIND DENSITATEA STARII DE GAZ SAU DE VAPORI [124]. DUMAS A AJUNS LA CONCLUZIA CA A RAMAS DE FACUT O SINGURA IPOTEZA IN ACEST CAZ CU CARE TOȚI FIZICIENII AU FOST DE ACORD [124]. ACEASTA IPOTEZA ESTE CA SE PRESUPUNE CA IN TOATE FLUIDELE ELASTICE IN ACELEAȘI CONDIȚII, MOLECULELE SE AFLA PLASATE LA DISTANTE EGALE CEEA CE INSEAMNA CA SUNT IN ACELAȘI NUMAR [124].

ACEEAȘI CONDIȚII INSEAMNA ACELAȘI VOLUM , ACEEAȘI PRESIUNE SI ACEEAȘI TEMPERATURA.

REZULTATUL IMEDIAT ESTE DE A CONSIDERA MOLECULELE GAZULUI SIMPLU CA SUSCEPTIBILE LA O DIVIZIUNE ULTERIOARA, DIVIZIUNE CARE SE PRODUCE IN MOMENTUL COMBINARII SI CARE VARIAZA IN FUNCȚIE DE NATURA COMPUSULUI [124]. ACEASTA CONSECINȚA NU ESTE INCA ADMISA IN GENERAL [124]. DACA MOLECULELE UNUI CORP SIMPLU TRECAND IN STARE GAZOASA RAMAN GRUPATE INTR-UN ANUMIT NUMAR, ASTFEL SE POATE CONSIDERA ACELAȘI NUMAR DE ACESTE GRUPURI, DAR IN ACEST MOMENT NU SE POATE ȘTI CATE MOLECULE ELEMENTARE EXISTA IN FIECARE [124].

IN SISTEMUL ADOPTAT DE BERZELIUS, AM URMAT PENTRU FORMAREA COMPUȘILOR UN PLAN GENERAL CARE CONSTA IN A REPREZENTA ATOMII LOR CUM AR FI FORMAȚI DIN ATOMI SIMPLI REUNIȚI INTOTDEAUNA IN NUMERE INTREGI [124]. ASTFEL, IN ACEST SISTEM, APA ESTE FORMATA DIN DOI ATOMI DE HIDROGEN SI UN ATOM DE OXIGEN, ACIDUL CLORHIDRIC DINTR-UN ATOM DE CLOR SI UN ATOM DE HIDROGEN, IN TIMP CE, PENTRU A FI CONSECVENT CU IDEILE ENUNȚATE DESPRE CONSTITUȚIA GAZELOR, APA ESTE REPREZENTATA DINTR-UN ATOM DE HIDROGEN SI O JUMATATE DE ATOM DE OXIGEN, ACIDUL CLORHIDRIC DINTR-O JUMATATE DE ATOM DE CLOR SI O JUMATATE DE ATOM DE HIDROGEN [124].

DE ACEEA FORMULA UNUI COMPUS AR TREBUI SA FIE REPREZENTATA DE CE INTRA INTR-UN VOLUM DIN ACESTE CORPURI LUATE IN STARE GAZOASA [124].

NU AVEN INCA DECAT PATRU CORPURI SIMPLE ALE CAROR DENSITAȚI AU FOST DETERMINATE IN MOD DIRECT, CEEA CE NU NE PERMITE SA AJUNGEM LA LEGI GENERALE ASUPRA MODULUI DE DIVIZIUNE PE CARE MOLECULELE LOR LE SUFERA IN TRECEREA IN STARE DE COMBINAȚIE [124].

DENSITATEA UNUI CORP SUB FORMA DE VAPORI A FOST DETERMINATA MASURAND MASA SI VOLUMUL SI PRESIUNEA GAZULUI DINTR-UN BALON LA O ANUMITA TEMPERATURA [124].

CANTITAȚILE PONDERALE A DOUA SUBSTANȚE SE CONSERVA, IN TOATE COMBINAȚIILE PE CARE ELE LE POT FORMA CU ACEEAȘI MASA DIN TOATE CELELALTE CORPURI, UN RAPORT CONSTANT AL CARUI VARIAȚII, DACA SUNT OBȚINUTE SI DEMONSTRATE, SUNT MULTIPLI SAU SUBMULTIPLI AI UNEIA DIN VALORILE SALE [125].

REZULTA IMEDIAT URMATOAREA LEGE, CA PROPORȚIA UNUI ELEMENT, IN TOATE COMBINAȚIILE SALE, POATE FI REPREZENTATA PRINTR-UN ANUMIT NUMAR MULTIPLICAT SAU DIVIZAT PRIN UNA DIN PRIMII TERMENI AI SERIEI NUMERELOR INTREGI; SI CA DACA POSEDAM UN TABEL CARE CONȚINE NUMERELE RELATIVE ALE FIECARUI CORP SIMPLU, SE POT ORICAND VERIFICA REZULTATELE ANALIZELOR, SI SE POT CHIAR PREZICE

PROPORȚIILE COMBINAȚIILOR CARE NU AU FOST ÎNCĂ REALIZATE [125]. ACEST TABEL, PE CARE ȘTIINȚA O POSEDA AZI, SE DATOREAZA MUNCII LUI BERZELIUS [125].

VEDEM CA LEGILE PROPORȚIILOR CHIMICE CONDUC ÎNEVITABIL LA CATEVA IPOTEZE DESPRE NUMARUL DE MOLECULE DIN FIECARE SPECIE CARE ÎNTRA ÎN TOATE COMBINAȚIILE [125]. ACEASTA IDEE A FOST PRIMA DATA ÎMBRĂȚIȘATA DE M. DALTON [125].

SIMPLITATEA RAPORTULUI OBSERVAT ÎNTRE VOLUMELE FLUIDELOR ELASTICE CARE SE COMBINA NU ESTE OPUSA IPOTEZEI LUI DALTON, CI ESTE CONTRAR O CONFIRMARE EVIDENTĂ, ȘI OBSERVAREA RAPOARTELOR VOLUMELOR, ATUNCI CÂND ACEASTA OBSERVAȚIE ESTE POSIBILĂ, LASĂ ÎN GENERAL MAI PUȚINE INCERTITUDINI CA CEL AL MASELOR ASUPRA NUMARULUI MOLECULELOR ELEMENTARE CARE ÎNTRA ÎNTR-UN COMPUS [125].

[117] DA TABELUL MASELOR ATOMISTICE ALE CORPURILOR SIMPLE, ALE SIMBOLURILOR LOR, ȘI ALE OXIZILOR LOR CONSIDERAND MASA ATOMULUI DE HIDROGEN EGALĂ CU 1 [117]. ÎN TABELUL 1 DAM MASELE CĂTORVA ATOMI ȘI COMPUȘI ÎNTRE ATOMII ȘI COMPUȘII DAȚI DE [117].

LEGILE ELECTROCHIMIEI AU FOST DESCOPERITE DE MICHAEL FARADAY ȘI AU FOST PUBLICATE ÎN 1834 [80].

TEORIA FORȚEI ELECTROMOTOARE A LUI VOLTA, ATACATA DE LA ORIGINILE SALE DE FABRONI, WOLLASTON, MICHELOTTI, AVOGADRO, NU A PUTUT REZISTA ÎN ULTIMUL TIMP LA DESCOPERIRILE REMARCABILE ALE LUI BECQUEREL ȘI RIVE [126].

PRIMUL REZULTAT OBTINUT DE [126] ÎN EXPERIMENTELE EFECTUATE DE EL ȘI PREZENTATE DE EL ÎN LUCRAREA AMINTITA MAI ÎNAINTE ESTE URMĂTOAREA TEORIE: O CANTITATE DATĂ DINTR-UN METAL OARECARE, DIZOLVATĂ DE UN ACID OARECARE MAI MULT SAU MAI PUȚIN RAPID, ÎN FUNCȚIE DE GRADUL DE CONCENTRAȚIE AL ACIDULUI, TEMPERATURA DE DIZOLVARE, ETC., DEZVOLTA ÎNTOTDEAUNA O CANTITATE EGALĂ DE FORȚĂ

ELECTROCHIMICA, IN TIMP CE ACȚIUNEA GALVANOMETRICA ESTE FOARTE VARIABILA [126].

DIN STUDIILE EXPERIMENTALE [126] A OBȚINUT URMATOAREA TEORIE: INTRODUCAND IN PILA DIFERITE METALE, IN MODUL IN CARE CANTITAȚILE LOR DESCOMPUSE SUNT IN ACELAȘI RAPORT CA ECHIVALENȚII LOR CHIMICI, OBȚINEM O ACȚIUNE ELECTROCHIMICA EGALA [126].

STOICHIOMETRIA ESTE RELAȚIA DINTRE MASELE MOLECULELOR CARE REACȚIONEAZĂ COMPLET INTR-O REACȚIE CHIMICA [127].

CA O CONCLUZIE A DISCUȚIEI DESPRE FORȚA ELECTROMOTOARE [126] SPUNE CA: METALUL ATACAT RĂSPÂNDEȘTE ÎN LICHID ELECTRICITATEA DEZVOLTATA CARE ESTE COLECTATA DE CELALALT [126].

[128] TEORIA ATOMICA: PREZINTĂ CA PENTRU UNII TEORIA ATOMICA NU ESTE ALTCEVA DECÂT TEORIA VOLUMELOR, CORPURILE FIIND TOATE PRESUPUSE ÎN STARE DE FLUIDE ELASTICE; PENTRU ALȚII ATOMUL NU ESTE DECÂT CANTITATEA CÂNTĂRIBILĂ DINTR-UN CORP SOLID, DETERMINATA ÎN RAPORTUL COMBINAȚIILOR PE CARE ACESTA LE POATE PRODUCEREA CU O CANTITATE DINTR-UN ALT CORP LUATA CA UNITATE, ȘI PENTRU ALȚII ACESTA ESTE SIMULTAN O TEORIE A VOLUMELOR, UNDE CORPURILE SUNT REPREZENTATE ÎN STARE DE GAZ, MASELE LOR ATOMICE SUNT PROPORȚIONALE CU DENSITĂȚILE; ȘI O TEORIE ZISA CORPUSCULARA, UNDE CORPURILE SUNT REPREZENTATE ÎN STARE SOLIDA [128].

CORPURILE SE COMBINA INTR-UN RAPORT DEFINIT SI CANTARIBIL, LEGE INCONTESTABILA [128]. NUMERELE CARE EXPRIMA RAPORTUL CARE EXISTA INTRE CANTITAȚILE A DOUA CORPURI CARE SE COMBINA SUNT MASELE RELATIVE ALE ATOMILOR PRESUPUSE IN STARE SOLIDA IN TIMP CE CONSIDERATE IN STARE DE GAZ, ACESTE MASE SE POT INMULȚI SAU IMPARȚI CU UN NUMAR INTREG [128].

[128] PREZINTĂ CA ACIDUL SULFURIC ARE COMPOZIȚIA ELEMENTARA SO_3 ȘI COMPOZIȚIA MOLECULARA 2 VOL. GAZ SULFUROS ȘI 1 VOL. OXIGEN.

[128] PREZINTĂ COMPOZIȚIA UNOR ACIZI PREZENTAȚI ÎN TABELUL 2.

TABELUL 2. COMPOZIȚIA UNOR ACIZI PREZENTATA DE [128].

ACIDUL	COMPOZIȚIA
SULFURIC	SO ₃
SELENIC	SeO ₃
TELURIC	TeO ₃
CROMIC	CrO ₃
MOLIBDENIC	MoO ₃
MANGANIC	MnO ₃
NITROS	N ₂ O ₃
CLOROS	Cl ₂ O ₃
CLORIC	Cl ₂ O ₅
HIPERCLORIC	Cl ₂ O ₇
IODIC	I ₂ O ₅
BROMIC	Br ₂ O ₅
FOSFORIC	P ₂ O ₅
FOSFOROS	P ₂ O ₃
ARSENIC	As ₂ O ₅
ARSENIOS	As ₂ O ₃

[128] PREZINTA URMATORII COMPUȘI AI HIDROGENULUI IN FUNCȚIE DE CAPACITATE DE SATURARE PREZENTATA IN TABELUL 3.

TABELUL 3. COMPUȘII HIDROGENULUI IN FUNCȚIE DE CAPACITATEA DE SATURARE PREZENTATA DE [128].

GRUPA 1	
APA 2 VOL.	2 VOL. HIDROGEN+1 VOL. OXIGEN
HIDROGEN SULFURAT 2 VOL.	2 VOL. HIDROGEN+1 VOL. SULF
HIDROGEN SELENIZAT 2 VOL.	2 VOL. HIDROGEN+1 VOL. SELENIU
HIDROGEN TELURIZAT 2 VOL.	2 VOL. HIDROGEN+1 VOL. TELUR
GRUPA 2	
ACID FLUORHIDRIC 4 V.	2 V. HIDROGEN+2 V. FLUOR
ACID CLORHIDRIC 4 V.	2 V. HIDROGEN+2 V. CLOR
ACID BROMHIDRIC 4 V.	2 V. HIDROGEN+2 V. BROM
ACID IODHIDRIC 4 V.	2 V. HIDROGEN+2 V. IOD
GRUPA 3	
HIDROGEN ARSENIZAT 4 VOL.	2 VOL. AS+6 VOL. H
HIDROGEN FOSFORIZAT 4 VOL.	2 VOL. P+6 VOL. H
AMONIAK 4 VOL.	2 VOL. N+6 VOL. H

[129] PREZINTĂ CA WILLIAM HENRY ANN. OF PHILOS., MAI 1826 [130], A OBȚINUT CA ÎN FURNALUL DE FABRICARE AL ACIDULUI SULFURIC SAU GĂSIT CRISTALE CU COMPOZIȚIA

ACID SULFURIC SEC68.800

ACID AZOTOS.....13.073

APA.....18.927

EL PREZINTĂ CA PRESUPUNÂND IDENTITATEA ACESTOR CRISTALE CU CELE DIN CAMERA, S-A OBȚINUT CA FORMULA ACESTORA ESTE $\text{AZ}_2\text{O}_3,5\text{SO}_3+5\text{H}_2\text{O}$.

[131] PREZINTA CA FORMULA ACIDULUI NITRIC ESTE

AZO₅

DACA VERIFICAM ECUAȚIA DE MAI SUS A ACIDULUI SULFURIC DIN TABELUL 1 PRIN CALCULUL MASEI ACESTUI COMPUS SI IL COMPARAM CU CEL DIN TABELUL 1 CONSIDERAND UN ATOM DE SULF SI TREI ATOMI DE OXIGEN CU MASELE DIN TABELUL 1 DATE DE [117], OBȚINEM MASA COMPUSULUI DIN TABELUL 1 DATA DE [117]

$$32.239 + 3 \times 16.026 = 80.317$$

ACEST ACID CORESPUNDE ACIDULUI SULFUROS FARA ATOMII DE HIDROGEN DIN [80].

[128] PREZINTA CA ACIDUL SILICIC ARE COMPOZIȚIA ELEMENTARA SIO₃ SI COMPOZIȚIA MOLECULARA 2 VOL. SIO₂ SI 1 VOL. OXIGEN.

COMPOZIȚIA SULFATULUI DE PLUMB ESTE DE 100 g PLUMB SI 15.6 g SULF [132]. DIN TABELUL 1 IN CARE MASELE ATOMILOR DATE DE [117] COINCID APROXIMATIV CU MASELE DIN TABELUL PERIODIC AL ELEMENTELOR [133], DEOARECE IN AMBELE CAZURI MASA ATOMULUI DE HIDROGEN ESTE 1 SI APROXIMATIV 1, SI ESTE APROXIMATIV EGALA CU UNITATEA ATOMICA DE MASA, ȘTIM CA MASA ATOMICA A PLUMBULUI DATA DE [117] ESTE 207.458, SI ESTE APROXIMATIV EGALA CU 207.2 u. a., SI MASA ATOMICA A SULFULUI DATA DE [117] ESTE 32.239, CARE ESTE APROXIMATIV EGALA CU 32.06 u. a.. CALCULAM CATI ATOMI DE PLUMB INTRA IN COMPOZIȚIA SULFATULUI DE PLUMB OBȚINUTA MAI SUS [127] [134]

$$\frac{100}{207.458} = 0.4820 N_A$$

SI CAȚI ATOMI DE SULF INTRA IN ACEASTA SUBSTANȚA

$$\frac{15.6}{32.239} = 0.4838 N_A$$

OBSERVAM CA NUMARUL DE ATOMI DE PLUMB DIN ACESTA SUBSTANȚA ESTE EGAL CU NUMARUL DE ATOMI DE SULF. REZULTA CA FORMULA CHIMICA A MOLECULEI DE SULFAT DE PLUMB ESTE



ANALIZAND CA 100 g DE PB SE COMBINA CU $(m_S)_{Pb}$ GRAME DE SULF SI $(m_O)_{Pb}$ GRAME DE OXIGEN, SI CA 100 g DE CU SE COMBINA CU $(m_S)_{Cu}$ GARME DE SULF SI CU $(m_O)_{Cu}$ GRAME DE OXIGEN SE OBTINE CA [132]

$$\frac{(m_S)_{Pb}}{(m_O)_{Pb}} = \frac{(m_S)_{Cu}}{(m_O)_{Cu}} \quad (5)$$

RELAȚIA (5) SE EXPLICA PRIN FAPTUL CA NUMĂRUL ATOMILOR DE SULF CARE SE COMBINA CU 100 g DE PB ESTE EGAL CU NUMARUL ATOMILOR DE OXIGEN CARE SE COMBINA CU ACEASI CANTITATE DE PB, ȘI REZULTA RAPORTUL MASELOR ATOMICE ALE SULFULUI ȘI OXIGENULUI ÎN AMBII TERMENI AI ECUAȚIEI (5).

COMPOZIȚIA APEI ESTE 11.754 HIDROGEN SI 88.246 OXIGEN [135].

MOLECULA DE APA ARE FORMULA CHIMICA H_2O [127] SI [80].

CALCULAM MASA MOLECULARA A MOLECULEI DE APA [127]. DIN TABELUL PERIODIC AL ELEMENTELOR [133] ȘTIM CA HIDROGENUL ARE MASA 1.008 U.A. ȘI OXIGENUL ARE MASA 16 U.A.. REZULTA CA MOLECULA DE APA ARE MASA 18.016 U.A.. APLICAM REGULA DE TREI SIMPLA

$$18.016 \dots\dots\dots 100\%$$

$$2.016 \dots\dots\dots x$$

OBTÎNEM PENTRU HIDROGEN CONCENTRAȚIA MASICA IN APA DE 11.1900 %. IN MOD SIMILAR PENTRU OXIGEN OBTÎNEM 88.8099 %. OBSERVAM CA DATELE OBTINUTE DE [135] SUNT IN ACORD CU DATELE OBTÎNUTE DE NOI.

COMPOZIȚIA HIDROGENULUI SULFURAT ESTE 94.2 SULF SI 5.8 HIDROGEN [135]. DIN TABELUL PERIODIC AL ELEMENTELOR [136] ȘTIM CA SULFUL ARE MASA 32.06 U.A.. NOTAM MASA MOLECULARA TOTALA A

HIDROGENULUI SULFURAT CU M SI FOLOSIND REGULA DE TREI SIMPLA
OBȚINEM

$$M \dots\dots\dots 100\%$$

$$32.06 \dots\dots\dots 94.2\%$$

OBȚINEM CA MASA MOLECULARA A HIDROGENULUI SULFURAT ESTE 34.04
U.A.. REZULTA CA ACEASTA MOLECULA CONTINE UN ATOM DE SULF SI DOI
ATOMI DE HIDROGEN SI ARE FORMULA CHIMICA H_2S [137]. SE POATE
VERIFICA CU REGULA DE TREI SIMPLA NUMARUL DE ATOMI DE HIDROGEN
DIN ACEASTA MOLECULA CALCULAND MASA TOTALA CU MASELE
CUNOSCUTE ALE ATOMILOR

$$34.076 \dots\dots\dots 100\%$$

$$2.016 \dots\dots\dots x$$

REZULTA CA ACEASTA MOLECULA CONȚINE 5.91% HIDROGEN ȘI ACEST
REZULTAT ESTE ÎN ACORD CU REZULTATELE OBȚINUTE DE [135]. PENTRU
MOLECULA DE APA SE POATE FACE ACELAȘI CALCUL PENTRU A DETERMINA
NUMARUL DE ATOMI DE OXIGEN SI HIDROGEN DIN MOLECULA.

OBȚINEM VOLUMUL ATOMIC AL UNEI SUBSTANȚE
OARECARE PRIN IMPARTIREA MASEI ATOMICE LA MASA SPECIFICA [138].

UNELE SUBSTANȚE CHIMICE POT FI TOXICE, OTRAVITOARE, SI
EXPLOZIVE, DACA SUNT INGHIȚITE, AJUNG IN CONTACT CU PIELEA, SAU SE
INHALEAZA VAPORII ACESTORA.

1.REVENDICAM O METODA DE OBȚINERE A COMPOZIȚIEI APEI
CARACTERIZATA PRIN ACEEA CA, SE IAU MASURILE PENTRU PROTECȚIA
IMPOTRIVA APRINDERII, ARDERII SI EXPLOZIEI IN TIMPUL EXPERIMENTULUI,
SE AMESTECA UN VOLUM DAT DE GAZ DE HIDROGEN CU ACEL VOLUM DE
OXIGEN, SI SE PRODUCE EXPLOZIA ACESTUI AMESTEC CU O SCANTEIE CA IN
LUCRAREA [123], CU CARE SE PRODUCE APA, ASTFEL INCAT SA SE CONSUME
TOT GAZUL DE HIDROGEN, SE MASOARA MASA DE APA, SE DETERMINA CATE
MOLECULE DE APA SAU FORMAT, SE DETERMINA CATI ATOMI DE HIDROGEN

SAU CONSUMAT PENTRU OBȚINEREA ÎNTREGII CANTITĂȚI DE APA, ȘI SE COMPARA CU NUMARUL DE ATOMI DE HIDROGEN DIN GAZUL CONSUMAT.

ÎN REACȚIILE CHIMICE SE CONSERVĂ NUMĂRUL DIN FIECARE ELEMENT CHIMIC [80].

EXISTĂ REACȚII CHIMICE ENDOTERME, CARE ABSORB CĂLDURĂ, REACȚII CHIMICE EXOTERME CARE DEGAJĂ CĂLDURĂ, ȘI REACȚII CHIMICE CARE SE ÎNIȚIAZĂ PRIN ABSORBȚIE DE CĂLDURĂ, ÎNSĂ SE AUTOÎNTREȚIN DIN CĂLDURA EMISĂ ȘI REZULTĂ O CĂLDURĂ NETĂ DEGAJATĂ, CA EXEMPLU ESTE APRINDEREA FOSFORULUI ÎN AER CARE SE PRODUCE LA TEMPERATURĂ MAI MARE DE 50 GRADE CELSIUS, SE AUTOÎNTREȚINE, ȘI ÎN FINAL REZULTĂ O CĂLDURĂ DEGAJATĂ [80].

ÎN REACȚIILE CHIMICE, ATOMII ÎȘI COMPLETEAZĂ VALENȚELE, ASTFEL ATOMUL UNUI ELEMENT CHIMIC SAU RADICALUL ELECTROPOZITIV ÎN NUMĂR N CU VALENȚA A , CU ATOMUL ALTUI ELEMENT CHIMIC SAU RADICALUL ELECTRONEGATIV ÎN NUMĂR M CU VALENȚA B TREBUIE SĂ DEA REZULTATUL ÎN MOLECULA REZULTANTĂ ASTFEL ÎNCÂT SĂ SE VERIFICE EGALITATEA [80]:

$$N_A = M_B$$

ACEASTA DEOARECE NUMĂRUL DE ELECTRONI CEDAȚI DE ATOMII ELEMENTULUI ELECTRONEGATIV TREBUIE SĂ FIE EGAL CU CEL PRIMIT DE ATOMII ELEMENTULUI ELECTRONEGATIV [80].

29. CHIMIE

29.1. THE STRUCTURE OF THE ATOM

Bibliografia acestui capitol este la sfârșitul cărții.

In the theory of Hendry, the element has two different senses: basic substance and simple substance [139]. By research was obtained that the nature of the oxygen is not the same for all the elements [139]. We know that the chemical properties of the oxygen is the same for the elements in the same column of the Periodic Table, and is different from that of the other elements from the Periodic Table [80], and this difference was presented above.

The atom is the smallest particle of one element [140].

We know that the negative charged electron was discovered by the English physicist Joseph Thomson in 1897 [80]. It resulting that the structure of the atom wasn't known until this discovery.

Scientific discoveries in physics, chemistry, mathematics and biology, after more than 200 years of research in the *Histoire de l'Académie Royale des Sciences Paris* [141], *Annales de chimie et de Physique Paris*, and *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, conducted to the discovery of the structure of the atom, which is that the nucleus with the positive charge, and the electrons with the negative charge, are the building bricks of the atom, as presented in [142].

One model of the atom was proposed by Sir Joseph Thomson [142]. Named the plum-pudding model, in this model the electrons with negative charge, the plums, exist in the positive material from the volume of the atom [142].

Rutherford discovered his model of the atom in 1911 [143]. By an experiment, Ernest Rutherford, found that the nucleus is small relative to the dimension of the atom, has almost all the mass of the atom, and the electrons are existing round the nucleus [142]. Positive charged particles in a beam bombarded thin metal foils [142]. He saw that majority of the particles were not deviated, and sometimes particles were deviated by a large angle [142]. In his model, the electrons are moving round the nucleus, which is in the center [142].

The positive charges from the nucleus are contained by the protons [142]. The other particles from the nucleus are the neutrons that are neutral [142].

The atomic number is the number of protons from the nucleus of the atom [140]. The atomic number is also the charge of the nucleus, in electronic units [140]. The atomic number is also the number of electrons in one neutral atom [140]. The atomic number is also the numerical basis for the periodic classification of the elements [140].

The isotopes of one chemical element have different numbers of neutrons [80].

The mass number of one element is the sum of the number of protons and the number of neutrons [143].

A particular element is symbolized by chemists by [143]



where A is the mass number, Z is the atomic number, and X is the symbol of the element.

The atomic mass is the relative mass of one atom [140]. In the present international convention for the relative mass is considered that the isotope C-12 has the relative mass equal with 12 [140]. We see that the unit for the atomic mass is the 12 – th part of the mass of the C – 12 isotope. This is the atomic mass unit and has, in kg, the value [144]

$$m_u = 1,660\,5402 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

The mass of the proton in atomic mass units, noted by a.m.u., is [142]

$$\text{The mass of the proton} = 1,007825 \text{ a.m.u.}$$

The mass of the neutron in atomic mass units is [142]

$$\text{The mass of the neutron} = 1,008665 \text{ a.m.u.}$$

The electron is one subatomic particle with the charge $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ and the mass of $9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ [140].

The electron configuration of the atom is the arrangement of electrons in the various energy levels and orbitals of an atom [140].

The electron shells are the arrangement of electrons in the principal energy levels, noted by the principal quantum number n [140].

Fraunhofer, in 1850, observed that the dark lines in the absorption spectrum of the light of the sun coincide with the bright lines from the emission lines of all elements [145].

The emission and absorbtion spectral linea of the atoms and molecules were determined with spectrometer, which use an optical prism [142].

The continuation of the model of the atom of Rutherford is that the atom is formed from one small nucleus with the charge Z , surrounded by Z electrons that are attracted by the nucleus, attraction described by the law of Coulomb [145].

In the model of Rutherford, the Coulomb force of attraction between the electron and the nucleus is equal with the centripetal force of the movement of the electron round the nucleus in a circle [144]. We obtain the equation [144]

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} = \frac{mv^2}{R}$$

In this model can be computed the radius of the orbital of the electron and the total energy of the electron as the sum of the kinetic energy and the potential energy [144].

Planck supposed that the light is formed from quanta of energy [145]. The energy of a quantum of light is [142]

$$h\nu$$

where $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}$ is the Planck's constant, and ν is the frequency of the light.

According to experimental results, Niels Bohr postulated that the energies of the electron in the atom are quantified, and the angular momentums of the electron in the atom are quantified [144]. With these suppositions he computed the energy levels of the electron in the hydrogen atom and saw that they were verifying the experimental results [144].

Bohr postulated also that the light is absorbed and emitted by the atom in quanta of energy, with the energy given above, and that the energy of the light absorbed and emitted by an atom is equal with the difference of the energies of the final state and the initial state of the electron [142].

From the Bohr postulates can be computed, by general school mathematical calculus, the radius of the orbital of the electron in the hydrogen atom, which is [142]

$$r_0 = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi m e^2}$$

where ϵ_0 is the permittivity of the vacuum, h is the Planck's constant, $n = 1, 2, 3, \dots$ is the quantification number of the angular momentum, $\pi = 3,14$, m is the mass of the electron, and e is the charge of the electron.

Using the postulates of Bohr, by general school mathematical calculus, can be computed the energy of the electron in the hydrogen atom, which, in function of the ionization energy, E_0 , and the quantification number of the angular momentum, n , which can have the values 1, 2, 3, $\dots$, is [142]

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

For the electron, and all subatomic particles, was introduced an intrinsic angular momentum named the spin [144]. The spin of the electron can have two values, $\frac{1}{2}$ and $-\frac{1}{2}$ [144].

The energies of the electron, given by the quantum numbers n and l , are split in an external magnetic field in $(2l+1)$ levels [144].

Because the spin-orbit interaction, which is the interaction of the magnetic field produced by the rotation of the electron on the orbit because is an electric charge, and the spin of the electron, each energy level with $l \neq 0$ is split in two energy levels [144].

Einstein supposed that the light is formed from particles [145].

29.2. ELECTRON CONFIGURATION

The arrangements of the electrons in the atom in regions named shells were presented in the Chapter 5. As predicted by the model of Rutherford and that of Bohr, both presented in the Chapter 5, for the hydrogen atom is resulting that nearer the nucleus are the electrons with lower energy, and by increasing the energy of the electrons, they are at greater distance from the nucleus. The chemical properties of one element, as the number of bindings with other elements, and the nature of elements with which is binding, are determined by the electrons in the highest energy shell, called valence electrons [80]. Each shell is composed from subshells, which are corresponding to the orbital quantum number l , that can have the values $0, 1, 2, \dots, n-1$, where n is the principal quantum number [80]. The names of the subshells are s, p, d, f, corresponding respectively to the values of the orbital quantum number l [80]. Each subshell contains orbitals [80], which are mentioned in the Chapter 5. The numbers of orbitals corresponding to each subshell are 1, 2, 3, or 7, respectively [80]. The valence electrons of the elements from the same vertical group are arranged in the same subshells and

orbitals [80]. This is the cause because these elements have similar chemical properties [80], as presented the example of oxygen in the Chapter 5.

Until the 3p subshell, the energy of the orbitals is increasing in the order of n and l , which is [143]

1s, 2s, 2p, 3s, 3p,

Then the 4s subshell has lower energy than the 3d subshell [143]. Then the order is [143]

4p, 5s, 4d, 5p

All the electrons from the atom are corresponding certain orbitals as described by the quantum theory [80].

Each orbital can have maximum two electrons with opposite spins [143].

Electrons occupy completely the energy levels in the increasing order [143].

Is a rule which give the order of occupation the orbitals by electrons, named the Hund's rule [143].

This rule say that electrons occupy successively with only one electron all the orbitals of a subshell, than begun to occupy all the orbitals of the subshell with the second electron, then start to occupy the next subshell [143].

The first example is the oxygen, for which, from the Periodic Tabel are resulting 8 electrons [143]. The first two electrons, 1 and 2 occupy the 1s subshell. The next two, 3 and 4 occupy the 2s subshell. The next three, 5, 6, and 7, occupy one orbital each from the 2p subshell. The last electron, 8, occupy one orbital from the 2p subshell, not impotant which, and complete this orbital up to two electrons.

The second example, from the Periodic Tabel we see that the hydrogen atom has 1 electron. This electron occupy the 1s subshell, and one place is vacant.

The third example is the boron atom. From the Periodic Tabel we see that it has 5 electrons. The electrons 1 and 2 occupy the 1s subshell. The electrons 3 and 4 occupy the 2s subshell. The electron 5 occupy one orbital from the 2p subshell, is not important which orbita.

The forth example is the oxygen, for which, from the Periodic Tabel are resulting 8 electrons. The first two electrons, 1 and 2 occupy the 1s subshell. The next two, 3 and 4 occupy the 2s subshell. The next three, 5, 6, and 7, occupy one orbital each from the 2p subshell. The last electron, 8, occupy one orbital from the 2p subshell, not impotant which, and complete this orbital up to two electrons.

The forth example is the F atom, for which, from the Periodic Tabel, we see that has 9 electrons. The electrons 1 and 2 occupy the 1s subshell. The electrons 3 and 4 occupy the 2s subshell. Each electron 5, 6, and 7 occupy one orbital from the 2p subshell. Remain three vacant places on these three orbitals. The next electrons 8 and 9 occupy two orbitals from this subshell, and are resulting two complet orbitals, and one orbital with one electron and one vacant place.

A short notation for the representation of the energy configuration of the element is named electron configuration [143].

The electron configuration for the oxygen is $1s^2 2s^2 2p^4$ [143].

The explanation is the following. The 1s subshell has the first two electrons [143]. We note this by $1s^2$ [143]. The enrgy level is noted by 1, the orbital by s, and the 2 electrons by the superscript [143]. The 2s subshell has the next two electrons [143]. We write this by $2s^2$ [143]. In the 2p orbital we have 4 electrons [143]. We write this by $2p^4$ [143].

The subshell with the highest number contains all the valence electrons [80].

The short notation for the electron configuration is by giving the subshell with the highest number [80]. For example $2p^1$ for the boron, or $2p^5$ for fluorine.

The distance of the electrons from the nuclei increase with the number of the subshell [80].

The valence of the ions is equal with the electric charge [80]. The atom in the molecule can have a charge and this is the oxidation number [80]. In the FeO molecule, the Fe has the oxidation number +2, and the O has -2.

Table 1 Electron configuration of some elements [80].

Element Name	Atomic number	Electron configuration	Valence shell	Common Oxidation numbers
Hydrogen	1	$1s^1$	$1s^1$	+1, - 1
Helium	2	$1s^2$	$1s^2$	0
Lithium	3	$1s^2, 2s^1$	$2s^1$	+1
Beryllium	4	$1s^2, 2s^2$	$2s^2$	+2
Boron	5	$1s^2, 2s^2, 2p^1$	$2s^2, 2p^1$	+3
Carbon	6	$1s^2, 2s^2, 2p^2$	$2s^2, 2p^2$	+4, +2, - 4
Nitrogen	7	$1s^2, 2s^2, 2p^3$	$2s^2, 2p^3$	+5, +3, - 3
Oxygen	8	$1s^2, 2s^2, 2p^4$	$2s^2, 2p^4$	-2
Fluorine	9	$1s^2, 2s^2, 2p^5$	$2s^2, 2p^5$	-1
Neon	10	$1s^2, 2s^2, 2p^6$	$2s^2, 2p^6$	0
Sodium	11	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$	$3s^1$	+1
Magnesium	12	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2$	$3s^2$	+2
Aluminium	13	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^1$	$3s^2, 3p^1$	+3
Silicon	14	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^2$	$3s^2, 3p^2$	+4
Phosphorus	15	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^3$	$3s^2, 3p^3$	+5, +3, -3
Sulfur	16	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^4$	$3s^2, 3p^4$	+6, +4, +2, -2
Chlorine	17	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^5$	$3s^2, 3p^5$	-1
Argon	18	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$	$3s^2, 3p^6$	0
Potassium	19	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^1$	$4s^1$	+1

Calcium	20	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2$	$4s^2$	+2
Scandium	21	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^1$	$4s^2, 3d^1$	
Titanium	22	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^2$	$4s^2, 3d^2$	+4

We observe in the Table 1 that potassium and calcium are filling the 2s subshell before the 3d subshell, because the 4s subshell has lower energy than 3d subshell as presented above.

Biatomic molecules have the property that the number of electrons lost by one atom is equal with the number of electrons gain by the second atom.

In triatomic molecules, one atom acquires or lost the electrons from or to the other two.

The valence electrons show how many electrons acquire or lost one atom in the molecule.

The elements were arranged function on the atomic mass beginning with the hydrogen, by Dimitri Mendeleev, a Russian chemist in the XIX – th century [143]. He observed that the chemical properties of the elements, known at that time, were repeating [143]. The Periodic Table is the arrangemet of the elements by increasing the atomic number [143].

29.3. LEGĂTURA CHIMICĂ

ÎN SECOLUL XX S-A EXPLICAT MODUL ÎN CARE ATOMII SUNT LEGAȚI PENTRU A FORMA COMPUȘI [80]. EXISTĂ DOUĂ TIPURI DE LEGĂTURI CHIMICE: LEGĂTURA COVALENTĂ, ÎN CARE ATOMII PUN ÎN COMUN 1, 2, 3, SAU 4 PERECHI DE ELECTRONI, ȘI LEGĂTURA IONICĂ ÎN CARE UN ATOM TRANSFERĂ UNUL SAU MAI MULȚI ELECTRONI ALTUI ATOM ȘI FORMEAZĂ IONI POZITIVI ȘI NEGATIVI [80]. LA LEGĂTURĂ PARTICIPĂ ELECTRONII DE VALENȚĂ [80]. NUMAI ELECTRONII DE VALENȚĂ SUNT ARĂTAȚI ÎN SIMBOLUL LEWIS

PENTRU ELEMENTE [80]. CU OPT ELECTRONI PĂTURA DE VALENȚĂ DEVINE UNIC STABILĂ [80]. PRIN FORMAREA LEGĂTURILOR CU ALȚI ATOMI, MULTE ELEMENTE TIND SĂ-ȘI COMPLETEZE PĂTURA DE VALENȚĂ CU OPT ELECTRONI [80].

FORMAREA LEGĂTURILOR PRIN PUNEREA ÎN COMUN A ELECTRONILOR SE EFECTUEAZĂ ÎNTRE NEMETALE, ȘI LEGĂTURILE IONICE SE FORMEAZĂ ÎNTRE METALE ȘI NEMETALE [80]. UN ATOM DEVINE ION CU SARCINA +1 SAU +2 DACĂ PIERDE COMPLET UNUL SAU DOI ELECTRONI, DE EXEMPLU Li^+ SAU Mg^{2+} [80]. UN ATOM VA AVEA SARCINA -1 SAU -2 DACĂ PRIMEȘTE UNUL SAU DOI ELECTRONI, DE EXEMPLU F^- , SAU O^{2-} [80]. ÎN REACȚII METALELE TIND SĂ DEVINĂ IONI POZITIVI ȘI NEMETALELE IONI NEGATIVI [80].

ELEMENTELE DIN ULTIMA COLOANĂ DIN DREAPTA, NUMITE GAZE INERTE, AU CONFIGURAȚIA ELECTRONICĂ A PĂTURII DE VALENȚĂ, COMPLETĂ [80].

29.4. LEGĂTURA COVALENTĂ

ÎN LEGĂTURA COVALENTĂ, CEI DOI ATOMI PUN ÎN COMUN ELECTRONI DE VALENȚĂ ASTFEL ÎNCÂT FIECARE ÎȘI COMPLETEAZĂ O SUBPĂTURĂ ȘI ASTFEL DEVIN MAI STABILI [80].

FLORUL ARE 7 ELECTRONI PE PĂTURA DE VALENȚĂ, 2 ELECTRONI PE SUBPĂTURA 2s ȘI 5 ELECTRONI PE SUBPĂTURA 2p [80]. DOI ATOMI DE FLUOR FORMEAZĂ MOLECULA STABILĂ DE F_2 PRIN PUNEREA ÎN COMUN A CÂTE UNUI ELECTRON DE PE SUBPĂTURA 2p [80]. ASTFEL, CEI DOI ATOMI DE FLUOR ÎȘI COMPLETEAZĂ FIECARE OCTETUL PE PĂTURA DE VALENȚĂ [80].

MOLECULELE DIATOMICĂ, CEEA CE ÎNSEAMNĂ CĂ AU DOI ATOMI DE ACELAȘI TIP, FORMEAZĂ LEGĂTURI COVALENTE [143]. ÎN AFARĂ DE H, SUNT 6 ELEMENTE CARE FORMEAZĂ MOLECULE DIATOMICĂ: O, N, F, Cl, Br, I [143].

LEGĂTURILE COVALENTE APAR ÎNTRE NEMETALE [143].

FOSFORUL ARE CINCI ELECTRONI PE PĂTURA DE VALENȚĂ, ȘI CLORUL ARE 7 [80]. FOSFORUL ÎȘI COMPLETEAZĂ OCTETUL CU 3 ELECTRONI PE CARE 3 ATOMI DE CLOR ÎI PUN ÎN COMUN, ȘI FIECARE ATOM DE CLOR ÎȘI COMPLETEAZĂ OCTETUL CU CÂTE UN ELECTRON PE CARE FOSFORUL ÎI PUNE ÎN COMUN [80].

ÎN FIGURA 1 REPREZENTĂM MOLECULA DE PCl_3 CU ELECTRONII PUȘI ÎN COMUN ;I CU EILALȚI ELECTRONI DE PE PĂTURA DE VALENȚĂ [80]. O ALTĂ REPREZENTARE A ACESTEI MOLECULE ESTE PREZENTATĂ ÎN FIGURA 2 [80].

ÎN MOLECULA DE ACID CLORHIDRIC, HCl , HIDROGENUL ȘI CLORUL PUN ÎN COMUN CÂTE UN ELECTRON [80].

ÎN MOLECULA DE ETILENĂ, C_2H_4 , DOI ATOMI DE CARBON AU ÎN COMUN 4 ELECTRONI ȘI FIECARE ATOM DE CARBON ARE ÎN COMUN CÂTE 2 ELECTRONI CU CÂTE DOI ATOMI DE HODROGEN [80].

O LEGĂTURĂ TRIPLĂ SE REALIZEAZĂ ÎNTRE DOI ATOMI DE AZOT ÎN MOLECULA DE N_2 , ÎN CARE CEI DOI ATOMI DE AZOT AU ÎN COMUN 6 ELECTRONI [80].

UN ALT EXEMPLU ÎN CARE SE FORMEAZĂ LEGĂTURI COVALELTE ESTE BIOXIDUL DE CARBON, CO_2 [143]. ÎN ACEASTĂ MOLECULĂ, CARBONUL PUNE ÎN COMUN CÂTE DOI ELECTRONI DE VALENȚĂ CU FIECARE ATOM DE O, CARE PUN ȘI EI ÎN COMUN CÂTE DOI ELECTRONI, ȘI CARBONUL FORMEAZĂ CÂTE DOUĂ LEGĂTURI COVALENTE CU FIECARE ATOM DE OXIGEN [143].

FIGURA 1

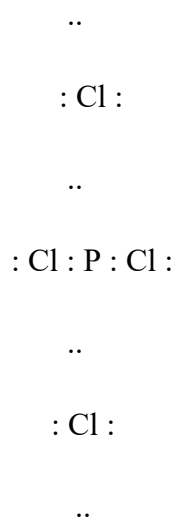


FIGURA 2

 $\text{Cl} - \text{P} - \text{Cl}$

|

 Cl 

29.4. LEGĂTURA IONICĂ

ÎN LEGĂTURA IONICĂ, UN ATOM POATE SĂ DONEZE ELECTRONI CELUIALT ATOM, SE PRODUC DOI IONI, UNUL POZITIV ȘI CELĂLALT NEGATIV, CARE SE ATRAG CU FORȚE ELECTROSTATICE ȘI SE PRODUCE O MOLECULĂ STABILĂ [80].

ELEMENTELE METALICE CEDEAZĂ ELECTRONII ÎN EXCES PENTRU A FORMA CONFIGURAȚIA STABILĂ DE OCTET, ȘI FORMEAZĂ IONI PZITIVI [80].

DEOARECE SUNT MAI MULȚI PROTONI ÎN NUCLEU DECÂT ELECTRONI ÎN JURUL NUCLEULUI ÎN IONUL METALIC, ACESTA ARE SARCINA PZITIVĂ [80].

NEMETALELE, CARE SUNT ÎN PARTEA DREAPTĂ A TABELULUI PERIODIC, SUNT DISPUSE SĂ ACHIZIȚIONEZE ELECTRONI PENTRU A-ȘI FORMA CONFIGURAȚIA STABILĂ [80]. ELE FORMEAZĂ IONI CARE AU SARCINA NEGATIVĂ [80].

METALELE ȘI NEMETALELE ÎȘI ATING CONFIGURAȚIA ELECTRONICĂ STABILĂ PRIN SCHIMB DE ELECTRONI [80]. PRIN ACEST SCHIMB DE ELECTRONI, ELE FORMEAZĂ LEGĂTURI IONICE [80]. ÎN ACEASTĂ LEGĂTURĂ REZULTĂ O FORȚĂ DE ATRACȚIE ELECTROSTATICĂ ÎNTRE IONI [80].

ÎN CAZUL LEGĂTURII IONICE SE POATE SCRIE FORȚA LUI COULOMB DE ATRACȚIE DINTRE CEI DOI IONI, CARE ESTE DATĂ DE ECUAȚIA [80]:

$$\text{FORȚA} = Q_{+} Q_{-} / D^2$$

UNDE Q_{+} ESTE SARCINA CATONULUI POZITIV, Q_{-} ESTE SARCINA ANIONULUI NEGATIC, ȘI D ESTE DISTANȚA DINTRE CENTRELE CELOR DOI IONI SFERICI, DEOARECE SARCINILE SE POT CONSIDERA LOCALIZATE ÎN CENTRELE FIECĂREI SFERE.

OBSERVĂM CĂ DISTANȚA DINTRE CENTRELE CELOR DOI IONI ESTE SUMA RAZELOR IONILOR [80]. REZULTĂ CĂ FORȚA ELECTROSTATICĂ DE INTERACȚIUNE DINTRE IONI ESTE DATĂ DE ECUAȚIA [80]:

$$\text{FORȚA} = Q_{+} Q_{-} / (R_{+} + R_{-})^2$$

MOLECULA DE NaCl ARE LEGĂTURA IONICĂ, ȘI FORMEAZĂ UN CRISTAL, ÎN CARE UN ION INTERACȚIONEAZĂ CU PRIMUL VECIN, ION, CU AL DOILEA VECIN, CU AL TREILEA VECIN, ETC. [144]. RAZELE IONCE ALE IONILOR DE Na^{+} ȘI Cl^{-} SUNT DATE ÎN TABELUL 2 [80].

TABELUL 2 RAZELE IONICE ALE CĂTORVA IONI [80].

ION	RAZA IONICĂ ÎN AMSTROM
Na^{+}	0,97
Cl^{-}	1,81

REZULTĂ CĂ DISTANȚA DINTRE CENTRELE IONILOR ESTE

$$D = 0,97 \text{ AMSTROM} + 1,81 \text{ AMSTROM} = 2,78 \text{ AMSTROM}$$

NOI, ÎN ACEASTĂ LUCRARE, APLICĂM METODA DIN LUCRAREA [146] DIN MECANICA CUANTICĂ PENTRU LEGĂTURI COVALENTE, PREZENTATĂ DE SNYDER, PENTRU CALCULAREA SARCINII ECRANATE A IONILOR DE Na^{+} ȘI Cl^{-} , ȘI CONSIDERĂM CĂ ACEASTĂ SARCINĂ ESTE SARCINA PE CARE O VEDE ELECTRONUL $3s^1$ AL Na – LUI ȘI $3p^5$ AL Cl – LUI, PE CARE LE CONSIDERĂM SARCINILE IONIOE, PENTRU A CALCULA ENERGIA DE LEGĂTURĂ A MOLECULEI DE NaCl.

CONFORM CU LUCRAREA [146] CONSTANTELE DE ECRANARE ATOMICE SUNT DATE DE ECUAȚIILE

$$s_1 = (N_1 - 1) (0,30)$$

$$s_2 = (N_1) (0,85) + (N_2 - 1) (0,35)$$

$$S_3 = (N_1) (1,0) + (N_2) (0,85) + (N_3 - 1) (0,35)$$

ȘI PRESUPUNEM CĂ

$$S_4 = (N_1)(1,0) + (N_2)(0,85) + (N_3)(0,85) + (N_4 - 1)(0,35)$$

UNDE N_n ESTE OCUPAREA PĂTURII CU NUMĂR CUANTIC PRINCIPAL n , ȘI SARCINILE ECRANATE SUNT DATE DE ECUAȚIA [146]:

$$Q = Z - s_n$$

NOI CONSIDERAĂM SARCINA IONULUI EGALĂ CU SARCINA ECRANATĂ A IONULUI, ASTFEL PENTRU IONUL DE Na^+ CONSIDERĂM CĂ PE PĂTURA CU $n = 3$ ESTE UN ELECTRON ÎN PLUS FAȚĂ DE CEI 10 ELECTRONI AI IONULUI, ȘI SARCINA ECRANATĂ ESTE SARCINA PE CARE O VEDE ACEST ELECTRON, ASTFEL ÎNCĂT

$$N_1 = 2$$

$$N_2 = 8$$

$$N_3 = 1$$

$$S_3 = 8,8$$

$$Z_{\text{Na}} = 10$$

$$Z_3 = 1,2$$

PENTRU Cl^- , PENTRU UN ELECTRON ÎN PLUS FAȚĂ DE CEI 8 ELECTRONI AI IONULUI, CONSIDERĂM

$$N_1 = 2$$

$$N_2 = 8$$

$$N_3 = 8$$

$$N_4 = 1$$

$$S_4 = 15,6$$

$$Z_{Cl^-} = 18$$

$$Z_4 = 2,4$$

PENTRU ENERGIA POTENȚIALĂ AVEM RELAȚIA [147]

$$V = Q_1 Q_2 / D$$

OBȚINEM REZZULTATUL

$$V = 1,2 \text{ e} \times 2,4 \text{ e} / (2,78 \text{ AMSTROM} / 0,529 \text{ AMSTROM}) = 2,88 / 5,25$$

$$= 0,548 \text{ HARTREE} = 14,911 \text{ Ev}$$

ACEASTĂ ENERGIE ESTE MULT MAI MARE DECÂT 9 eV OBȚINUTĂ CU METODA MULT MAI EXACTĂ ÎN LUCRAREA [144], ȘI DECÂT VALOAREA DE 3,4 eV PREZENTATĂ TOT ÎN LUCRAREA [144], ÎNSĂ NOI AM FĂCUT O EVALUARE CU IPOTEZELE PENTRU LEGĂTURA COVALENTĂ.

DACĂ SE CONSIDERĂ SARCINIE +1 ȘI -1 ALE IONILOR REZULTĂ ENERGIA LEGĂTURII CA ÎN LUCRAREA [144]

$$V = 5,177 \text{ eV}$$

29.5. LEGĂTURA POLARĂ

LEGĂTURA POLARĂ ESTE O LEGĂTURĂ INTERMEDIARĂ ÎNTRE LEGĂTURA IONICĂ ȘI LEGĂTURA POLARĂ [80]. CARACTERISTICA ACESTEI LEGĂTURI POLARE ESTE CĂ UNUL DINTRE ELEMENTE ATRAGE MAI MULT PERECHEA DE ELECTRONI PUSĂ ÎN COMUN DECÂT CELĂLALT ELEMENT [80]. DE EXEMPLU ÎN MOLECULA DE HF PERECHEA DE ELECTRONI ESTE ATRASĂ MAI MULT DE FLUOR DECÂT DE HIDROGEN [80]. ASTFEL, DATORITĂ DISTRIBUȚIEI INEGALE A PERECHII DE ELECTRONI DE LEGĂTURĂ, SE PRODUC SARCINI ELECTRICE FRAȚIONARE PE CEI DOI ATOMI [80].

SARCINILE ELECTRICE FRAȚIONARE DE PE CEI DOI ATOMI SUNT NOTATE CU LITERA GRECEASCĂ DELTA MICĂ, δ [80]. DE EXEMPLU, ÎN MOLECULA DE HF, PE ATOMUL DE HIDROGEN ESTE O SARCINĂ FRAȚIONARĂ POZITIVĂ $\delta+$, ȘI PE ATOMUL DE F ESTE O SARCINĂ ELECTRICĂ FRAȚIONARĂ NEGATIVĂ $\delta-$, DEOARECE PERECHEA DE ELECTRONI DE LEGĂTURĂ ESTE DEPLASATĂ MAI APROAPE DE ATOMUL DE F [80].

O ASTFEL DE LEGĂTURĂ POLARĂ, CARE PREZINTĂ O PUNERE ÎN COMUN INEGALĂ A ELECTRONILOR DIN LEGĂTURA COVALENTĂ, ARE UN CARACTER PARȚIAL IONIC [80].

ÎN JURUL ANILOR 1935, CHIMISTUL AMERICAN LINUS PAULING A DEZVOLTAT O SCALĂ A ELECTRONEGATIVITĂȚII PENTRU A DESCRIE CE ATRACȚIE ARE UN ELEMENT PENTRU ELECTRONII DINTR-O LEGĂTURĂ CHIMICĂ [80]. VALORILE DIN FIGURA 5-13 DIN LUCRAREA [80] SUNT MAI MARI PENTRU ELEMENTELE CARE ATRAG MAI MULT ELECTRONII [80].

ÎN FIGURA 5-13 DIN LUCRAREA [80] SE VEDE CĂ NEMETALELE DIN COLȚUL DIN DREAPTA SUS AU O TENDINȚĂ PUTERNICĂ SĂ CÂȘTIGE ELECTRONI [80]. TOT ÎN FIGURA 5-13 DIN LUCRAREA [80] SE VEDE CĂ METALELE ALCALINE ȘI PĂMÂNTURILE ALCALINE AU ATRACȚIE SLABĂ PENTRU ELECTRONI ȘI DIN ACEASTĂ CAUZĂ AU TENDINȚA SĂ PIARDĂ ELECTRONI [80].

ÎN MULTE CAZURI DE LEGĂTURI POLARE, MOLECULELE PREZINTĂ UN CAPĂT POZITIV ȘI UN CAPĂT NEGATIV, ȘI ASTFEL SUNT DIPOLI ELECTRICI [143].

UN ALT EXEMPLU DE MOLECULĂ POLARĂ ESTE NH_3 [143]. ÎN ACEASTĂ MOLECULĂ AZOTUL ARE O ELECTRONEGATIVITATE MAI MARE DECÂT HIDROGENUL, ASTFEL ÎNCÂT PERECHILE DE ELECTRONI DE LEGĂTURĂ SUNT ATRAȘI MAI MULT DE EL DECÂT DE ATOMII DE HIDROGEN [143].

30. REACȚII CHIMICE

PROPRIETĂȚILE FIZICE ȘI CHIMICE ALE SUBSTANȚELOR, ANALIZA AMESTECURILOR, ȘI OBTINEREA DE NOI SUBSTANȚE ESTE REALIZATĂ DE CHIMIȘTI [143]. REALIZAREA MOLECULELOR ESTE UN PROCES NUMIT SINTEZĂ [143].

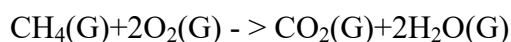
30.1. REACTANȚI ȘI PRODUȘI

DACĂ SUBSTANȚELE, ELEMENTE SAU COMPUȘI, SUNT SCHIMBATE ÎN ALTE SUBSTANȚE, ELEMENTE SAU COMPUȘI, ATUNCI A AVUT LOC O REACȚIE CHIMICĂ [143]. NUMAI ÎN REACȚII NUCLEARE SE SCHIMBĂ UN ELEMENT ÎNTR-UN ALT ELEMENT [143].

ÎNTR-O REACȚIE CHIMICĂ SE PRODUC O SERIE DE FENOMENE: SE DEGAJĂ UN GAZ, SE ABSORBE SAU SE DEGAJĂ CĂLDURĂ, ETC. [143]. REACTANȚII SUNT SUBSTANȚELE CARE SE SCHIMBĂ, ȘI PRODUȘII DE REACȚIE SUNT SUBSTANȚELE CARE SE FORMEAZĂ [143]. REACTANȚII, PRODUȘII DE REACȚIE, ȘI ALȚI FACTORI CA SCHIMBĂRILE DE ENERGIE, CATALIZATORI, ETC., SUNT ARĂTAȚI DE EQUAȚIA CHIMICĂ [143]. ÎN EQUAȚIA CHIMICĂ, O SĂGEATĂ ARATĂ CĂ REACȚIA CHIMICĂ A AVUT LOC [143]. FORMATUL UNEI REACȚII CHIMICE ESTE URMĂTORUL [143]:

REACTANȚI - > PRODUȘI DE REACȚIE

CONSIDERĂM DE EXEMPLU REACȚIA CARE ARE LOC ÎN ARDEREA GAZULUI METAN FOLOSIT ÎN BUCĂTĂRIE LA ÎNCĂLZIREA ALIMENTELOR [143]. GAZUL NATURAL, METANUL, REACȚIONEAZĂ CU OXIGENUL DIN ATMOSFERĂ, ȘI REZULTĂ BIOXID DE CARBON ȘI VAPORI DE APĂ [143]. FLACĂRA DIN ACEASTĂ ARDERE TREBUIE SĂ FIE DE CULOARE ALBASTRĂ, ALTFEL SE PRODUC MONOXID DE CARBON CARE ESTE OTRĂVITOR [143]. ECUAȚIA CHIMICĂ A ACESTEI REACȚII ESTE [143]:



ACEASTĂ ECUAȚIE EXPRIMĂ URMĂTORUL FAPT: O MOLECULĂ DE GAZ METAN, $\text{CH}_4(\text{G})$, REACȚIONEAZĂ CU DOUĂ MOLECULE DE OXIGEN SUB FORMĂ DE GAZ, $\text{O}_2(\text{G})$, ȘI REZULTĂ O MOLECULĂ DE BIOXID DE CARBON GAZOS, $\text{CO}_2(\text{G})$, ȘI DOUĂ MOLECULE DE VAPORI DE APĂ, $\text{H}_2\text{O}(\text{G})$ [143].

REACTANȚII SUNT METANUL ȘI OXIGENUL [143]. BISOCA ESTE O LOCALITATE ÎN BUZĂU, ȘI NOI FOLOSIM NUMĂRUL DOI SAU BI ȘI ÎN CAZUL OXIGENULUI CARE ESTE O MOLECULĂ BIATOMICĂ [143]. BIOXIDUL DE CARBON ȘI APA SUNT PRODUȘII DE REACȚIE [143]. TOȚI REACTANȚII ȘI PRODUȘII DE REACȚIE SUNT GAZE, INDICAT DE G ÎN PARANTEZĂ [143]. REACTANȚII ȘI PRODUȘII DE REACȚIE DIN ACEASTĂ REACȚIE SUNT INVIZIBILI [143]. NOI NU VEDEM OXIGENUL DIN AER, ȘI NICI ATUNCI CÂND DESCHIDEM ROBINETUL, 2 SECUNDE, ÎNAINTE DE A APRINDE FLACĂRA, NU VEDEM GAZUL METAN. INDICAȚIA CĂ REACȚIA ARE LOC ESTE DATĂ DE CĂLDURA DEGAJATĂ [143]. DE ASEMENEA, NOI VEDEM CULOAREA ALBASTRĂ A FLĂCĂRII, PREZENTATĂ MAI SUS, CEEA CE ESTE O ALTĂ DOVADĂ A PRODUCERII REACȚIEI [143]. ACEASTA ESTE O REACȚIE ÎN CARE SE DEGAJĂ CĂLDURĂ [143]. REACȚIA ÎN CARE SE DEGAJĂ CĂLDURĂ SE NUMEȘTE EXOTERMĂ [143]. O MULȚIME DE REACȚII SUNT EXOTERME [143]. ANUMITE REACȚII ABSORB CĂLDURĂ [143]. ACESTE REACȚII SE NUMESC REACȚII ENDOTERME [143]. FIERBEREA MORCOVILOR, CARTOFILOR, ȘI CEPIL ÎN CIORBĂ IMPLICĂ REACȚII ENDOTERME ÎN ELE.

METANUL CARE IESE DIN ARZĂTOR SE APRINDE CU CHIBRITUL [143]. PENTRU A PRODUCERE REACȚIA NOI FURNIZĂM ENERGIE [143]. ENERGIA PE CARE O FURNIZĂM PENTRU A PRODUCERE REACȚIA SE NUMEȘTE ENERGIE DE ACTIVARE A REACȚIEI [143].

30.2. TEORIA CIOCNIRILOR

PENTRU CA O REACȚIE CHIMICĂ SĂ AIBĂ LOC, REACTANȚII TREBUIE SĂ SE CIOCNEASCĂ [143]. PRIN CIOCNIRE SE TRANSFERĂ ENERGIE CINETICĂ DE

LA O MOLECULĂ LA CEALALTĂ [143]. ESTE NECESARĂ ENERGIE PENTRU A DESFACE O LEGĂTURĂ DINTRE ATOMI ȘI SE ELIBEREAZĂ ENERGIE CÂND SE CREEAZĂ O LEGĂTURĂ [143]. TEORIA CIOCNIRILOR SUSȚINE CĂ CIOCNIREA DINTRE MOLECULE POATE SĂ FURNIZEZE ENERGIE PENTRU A RUPE LEGĂTURILE NECESARE PENTRU CA SĂ SE POATĂ PRODUC NOI LEGĂTURI [143]. CIOCNIREA SE PRODUC ÎN LOCURILE POTRIVITE ALE MOLECULELOR ȘI TRANSFERĂ SUFICIENTĂ ENERGIE [143].

ATUNCI CÂND MOLECULELE NU SE MIȘCĂ DESTUL DE REPEDE, ADICĂ NU AU VITEZĂ DESTUL DE MARE, NU ESTE DISPONIBILĂ SUFICIENTĂ ENERGIE CINETICĂ PENTRU A FI TRANSFERATĂ [143]. PENTRU A DEPĂȘI ACEASTĂ BARIERĂ, PUTEȚI ÎNCĂLZI AMESTECUL DE REACTANȚI [143]. ENERGIA CINETICĂ A MOLECULELEOR ESTE PROPORȚIONALĂ CU TEMPERATURA [73]. PRIN CREȘTEREA TEMPERATURII, CREȘTE ENERGIA CINETICĂ DISPONIBILĂ RUPERII LEGĂTURILOR ÎN TIMPUL CIOCNIRII [143].

30.3. REACȚII EXOTERME

ÎN REACȚIILE EXOTERME SE ELIBEREAZĂ ENERGIE, ȘI STAREA DE ENERGIE A REACTANȚILOR ESTE MAI MARE DECÂT STAREA DE ENERGIE A PRODUȘILOR [143].

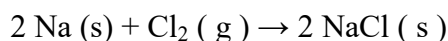
30.4. REACȚII ENDOTERME

ÎN REACȚIILE ENDOTERME SE ABSORBE ENERGIE, ȘI STAREA DE ENERGIE A REACTANȚILOR ESTE MAI MICĂ DECÂT STAREA DE ENERGIE A PRODUȘILOR [143].

30.5. TIPURI DE REACȚII

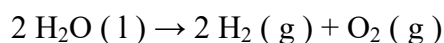
30.5.1. REACȚII DE COMBINARE

ÎN REACȚIILE DE COMBINARE, DOI SAU MAI MULȚI REACTANȚI FORMEAZĂ UN PRODUS [143]. DE EXEMPLU REACȚIA CLORULUI CU SODIUL PENTRU A FORMA CLORURA DE SODIU [143]:



30.5.2. REACȚII DE DECOMPUNERE

ÎN REACȚIILE DE DESCOMPUNERE, UN SINGUR REACTANT SE DESFACE ÎN DOI SAU MAI MULȚI PRODUȘI [143]. PRODUȘII POT FI ELEMENTE SAU MOLECULE [143]. DE EXEMPLU DESCOMPUNEREA APEI ÎN GAZELE HIDROGEN ȘI OXIGEN [143]:



31.ACIZI ȘI BAZE

ACIZII ȘI BAZELE SUNT DOUĂ CLASE IMPORTANTE DE COMPUȘI ÎN CHIMIE [80]. TOȚI ACIZII AU CÂTEVA PROPRIETĂȚI ÎN COMUN: AU UN GUST ACRU, REACȚIONEAZĂ CU CELE MAI MULTE METALE ȘI PRODUC GAZUL DE HIDROGEN, H_2 , ȘI REACȚIONEAZĂ CU PRAFUL DE COPT, CARE ESTE BICARBONATUL DE SODIU, PENTRU A FORMA BIOXIDUL DE CARBON, CO_2 [80]. TOȚI ACIZII ÎNROȘESC HÂRTIA ALBASTRĂ DE TURNESOL [80]. SOLUȚIILE ACIZILOR CONDUC ELECTRICITATEA DEOARECE FORMEAZĂ IONI CÂND SUNT DIZOLVAȚI ÎN APĂ [80].

ȘI TOATE BAZELE AU CÂTEVA PROPRIETĂȚI ÎN COMUN: AU UN GUST AMAR, SOLUȚIILE LOR SUNT ALUNECOASE CA APA CU SĂPUN, ȘI TRANSFORMĂ HÂRTIA ROȘIE DE TURNESOL ÎN ALBASTRU [80]. ȘI SOLUȚIILE DE BAZE CONDUC ELECTRICITATEA DEOARECE ȘI ELE FORMEAZĂ IONI CÂND SE DIZOLVĂ ÎN APĂ [80].

32.ELECTROCHIMIE

ELECTROCHIMIA EXPLICĂ CUM FUNCȚIONEAZĂ BATERIILE [80]. ÎN REACȚIILE DE OXIDO-REDUCERE SE TRANSFERĂ ELECTRONI DE LA O SPECIE LA ALTA, ELEMENT, MOLECULĂ, ION, SAU COPUȘI IONICI [80]. BATERIILE FOLOSESC REACȚIILE DE OXIDO-REDUCERE, ȘI ELECTRONII SE MIȘCĂ PRINTR-O SÂRMĂ CONDUCTOARE [80].

32.1. ELECTROLIZA

ELECTRICITATEA POATE SĂ PRODUCĂ DE ASEMENEA O REACȚIE CHIMICĂ [80]. FOLOSIREA UNUI CURENT ELECTRIC PENTRU A PRODUCERE O REACȚIE CHIMICĂ SE NUMEȘTE ELECTROLIZĂ, O TEHNICĂ FOLOSITĂ PE SCARĂ LARGĂ PENTRU A SEPARA ELEMENTE DIN COMPUȘII LOR [80].

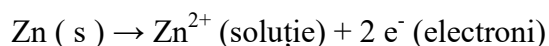
32.2. CELULA ELECTROCHIMICĂ

DISPOZITIVUL CARE FOLOSEȘTE O REACȚIE CHIMICĂ PENTRU A PRODUCERE SAU A FOLOSIREA ELECTRICITATE ÎNTR-O CELULĂ ELECTROCHIMICĂ SE NUMEȘTE CELULĂ VOLTAICĂ [80]. ELECTROLITUL ESTE O SOLUȚIE LICHIDĂ CARE CONȚINE IONI ȘI CONDUCE ELECTRICITATEA [80]. MULTE CELULE ELECTROCHIMICE SUNT CONSTRUIE PRIN FOLOSIREA ELECTROLIȚILOR [80].

O CELULĂ ELECTROCHIMICĂ SIMPLĂ ESTE CONSTRUITĂ DIN DOUĂ TUBURI DE STICLĂ VERTICALE, CONECTATE LA MIJLOC PRINTR-UN AL TREILEA TUB ORIZONTAL [80]. CELE DOUĂ TUBURI SUNT UMLUTE SIMULTAN CU SOLUȚII DIFERITE, PRIMUL CU O SOLUȚIE APOASĂ DE SULFAT DE ZINC, ȘI AL DOILEA CU O SOLUȚIE DE SULFAT DE CUPRU [80]. ÎN SOLUȚIA DE $ZnSO_4$ SE SCUFUNDĂ O BUCATĂ DE Zn, ȘI ÎN SOLUȚIA DE $CuSO_4$ SE SCUFUNDĂ O BUCATĂ DE CUPRU, ȘI CAPETELE DIN AER ALE LOR SE LEAGĂ CU O SÂRMĂ DINTR-UN CONDUCTOR [80].

32.3. REACȚIA DE OXIDARE DIN CELULA ELECTROCHIMICĂ

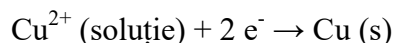
REAȚIA DE OXIDARE DE LA ZINC, CARE SE NUMEȘTE ANOD, ESTE [80]



ÎN ACEASTĂ REACȚIE DE OXIDARE SE PRODUC ELECTRONI LIBERI CARE SUNT DONAȚI ANODULUI [80]. ATUNCI CÂND ANODUL ESTE LEGAT LA UN FIR CONDUCTOR, ȘI CELĂLALT CAPĂT AL FIRULUI CONDUCTOR ESTE LIBER, ÎN AER, ȘI NU ESTE LEGAT LA CATOD, ATUNCI PRIN FIRUL CONDUCTOR, CARE POATE FI UN METAL, ACEȘTI ELECTRONI LIBERI SE DEPLASEAZĂ PÂNĂ CÂND SARCINA ELECTRICĂ NEGATIVĂ VA FI UNIFORM DISTRIBUITĂ PE SUPRAFAȚA CONDUCTORULUI, ADICĂ POTENȚIALUL ELECTRIC VA FI ACELAȘI ÎN ORICE PUNCT DE PE SUPRAFAȚA CONDUCTORULUI [142].

32.4. REACȚIA DE REDUCERE DIN CELULA ELECTROCHIMICĂ

REAȚIA DE REDUCERE DE LA CUPRU, CARE SE NUMEȘTE CATOD, ESTE [80]:



ACEȘTI ELECTRONI CARE VIN LA CATOD NEUTRALIZEAZĂ IONII DIN SOLUȚIE, ȘI ATOMII NEUTRI SE DEPUN PE CATOD [80]. CÂND ANODUL ȘI CATODUL SUNT LEGAȚI PRINTR-UN FIR CONDUCTOR, ELECTRONII LIBERI PRIMIȚI LA ANOD, PRIN REACȚIA DE OXIDARE, VIN LA CATOD, NEUTRALIZEAZĂ IONII DIN SOLUȚIE DE CARE SE FIXEAZĂ, ȘI PRIN FIRUL METALIC CIRCULĂ ASTFEL UN CURENT DE LA CATOD LA ANOD [80]. CURENTUL ESTE DE LA CATOD LA ANOD DEOARECE ESTE SENSUL DE MIȘCARE AL SARCINILOR POZITIVE [80].

ACESTĂ CELULĂ PRODUCE O TENSIUNE DE 1,1 V [80].

32.5. EFECTELE PILEI VOLTAICE

FIGURA 1 REPREZINTĂ FOTOGRAFIA REALIZATĂ DE AUTORUL DOMOKOS STEFAN ÎN CARE SE VEDE UN APARAT DE MĂSURĂ PENTRU INTENSITATEA ȘI TENSIUNEA CURENTULUI CONTINUU, FABRICAT LA SC AEM SA TIMIȘOARA ÎNAINTE DE REVOLUȚIA DIN 1989.



FIGURA 1

ALESSANDRO VOLTA A DESCOPERIT PRIMA BATERIE ELECTRICA, FORMATĂ DIN DISCURI DE CUPRU ȘI ZINC ALTERNATIVE, FIECARE PERECHE DE METAL SEPARATE CU PÂNZA ÎNMUIATA ÎNTR-UN ACID SLAB [148].

ÎN LUCRAREA [149] ESTE PREZENTAT CA VOLTA A PREZENTAT DEJA ÎN VOLUMUL XIII AL PERIODICULUI ANNALES DE CHIMIE DE BRUGNATELLI, CĂ GALVANISMUL CONSTĂ ÎN ELECTRICITATE ARTIFICIALĂ, CARE SE ÎNNOIEȘTE CÂND ESTE PUS ÎN MIȘCARE PRIN CONTACTUL CONDUCTORILOR DE NATURI DIFERITE; ACEȘTIA SUNT CEI CARE ACȚIONEAZĂ ÎN MOD NATURAL, ACEȘTIA SUNT MOTOARELE ORIGINALE.

ÎN LUCRAREA [149] ESTE PREZENTAT CA GALVANI A CONSIDERAT ACEST FLUID CA O ELECTRICITATE ESENȚIAL ORGANICĂ.

ÎN LUCRAREA [149] ESTE PREZENTAT CA VOLTA A CONSIDERAT CA FLUIDUL ELECTRIC POATE FI PUS ÎN MIȘCARE PRIN TREI METODE, CARE SE

REDUC LA A FACE SA INTRE IN ARC SAU CERC MAI PUȚIN DE TREI CONDUCTORI DE NATURI DIFERITE. ÎN LUCRAREA [149] ESTE PREZENTAT CA CELE TREI METODE SUNT:

1.DOUA METALE SAU CONDUCTORI DE CLASA 1, CARE SUNT DE SPECII DIFERITE, CARE SUNT IN CONTACT LA O EXTREMITATE, SI NU COMUNICA LA CEALALTA DECAT PRIN INTERMEDIUL MAI MULTOR CONDUCTORI UMEZI, SAU DE CLASA A 2 – A.

2.PRIN PLASAREA UNUI SINGUR METAL INTRE DOI CONDUCTORI UMEZI DE NATURI DIFERITE SI COMUNICAND INTRE ELE.

3.PRIN PUNEREA IN COMUNICARE A TREI CONDUCTORI DE NATURI DIFERITE.

DE WOOLIWICH, IN LUCRAREA [150], PREZINTA CA A STUDIAT ACȚIUNEA GALVANICA ASUPRA DIFERITELOR FLUIDE, ACEST FENOMEN FIIND NUMIT ELECTRICITATE GALVANICA, A FOLOSIT UN APARAT CA CEL AL LUI VOLTA, NUMIT PILA, CARE ESTE FORMAT DIN MAI MULTE PLACI DIN ARGINT SI ZINC, CU ARII PE CARE NU LE-AM ÎNȚELES, PLASATE ALTERNATIV, IN NUMAR DE LA 40 LA 100 PENTRU CREȘTEREA FORȚEI CU CREȘTEREA NUMARULUI DE PLACI, SEPARATE PRIN HARTIE SAU ALT MATERIAL CARE ABSORBE APA, ACEASTA CONSTRUCTIE FIIND CONFIRMATA DE CELE PREZENTATE MAI SUS DIN LUCRAREA [149] DESPRE PUNEREA IN MIȘCARE A FLUIDULUI ELECTRIC PREZENTAT DE VOLTA. ÎN LUCRAREA [151], DE WOOLIWICH PREZINTA CA IMBIBAND HARTIA CU MURIAT DE AMONAC IN LOC DE APA A OBȚINUT REZULTATE MULT MAI BUNE, S-AU PRODUS SCANTEI VIZIBILE ZIUA. ELECTROMETRUL CU FOLIE DE AUR, PLASAT IN CERCUL DE COMUNICARE, A FOST FOARTE AFECTAT CONFORM CU LUCRAREA [151]. DE WOOLIWICH, IN LUCRAREA [151], PREZINTA CA DACA PLACILE DE ARGINT SI ZINC DE LA EXTREMITATI SUNT PUSE IN COMUNICARE CU UN FIR DE ARGINT SAU ZINC, ATUNCI SE PRODUC SCANTEI, SI DACA DOUA FIRE DE ARGINT SI ZINC CARE VIN DE LA CELE DOUA PLACI DE LA EXTREMITATI SUNT INTRODUSE IN APA DINTR-UN VAS, ATUNCI SE PRODUCE DESCOMPUNEREA APEI, SI SE DEGAJA UN GAZ FORMAT DIN HIDROGEN SI OXIGEN, FENOMENE DEJA OBSERVATE DE NICHOLSON SI CARLISLE.

PRIMUL EXPERIMENT DIN LUCRAREA [151]

ÎNTR-UN TUB DE STICLĂ SE PUNE APĂ ORDINARĂ [151].

LA CELE DOUĂ EXTREMITĂȚI SE PUN DOUĂ DOPURI [150].

PRIN DOPURI SE TREC FIRE DE ARGINT [150].

FIRELE DE ARGINT SE APROPIE ÎN APĂ LA DISTANȚA DE UN DEGET UNA DE CEALALTĂ [150].

CELĂLALT CAPĂT AL UNUIA DINTRE FIRELE DE ARGINT SE ATAȘEAZĂ LA BAZA PLĂCII DE ZINC DIN PILĂ [150].

AL DOILEA DINTRE FIRELE DE ARGINT SE ATAȘEAZĂ LA CAPĂTUL DE SUS AL PLĂCII DE ARGINT DIN PILĂ [150].

CÂND CONTACTELE AU FOST FĂCUTE, LA CAPĂTUL FIRULUI DE ARGINT ATAȘAT LA PLACA DE ARGINT, AU ÎNCEPUT SĂ SE DEGAJE MICI BULE DE AER, CA CELE PE CARE LE-AU OBSERVAT NICHOLSON ȘI CARLISLE [150].

LA CAPĂTUL CELUILALT FIR, CARE COMUNICĂ CU PLACA DE ZINC, S-A PRODUS, ÎN ACELAȘI TIMP, O LUMINĂ ALBĂ [150].

ACEASTĂ LUMINĂ S-A INTENSIFICAT [150].

ȘI ÎN JURUL ACESTUI FIR AU APĂRUT CÂTEVA BULE DE AER [150].

CU INTENSIFICAREA ACTIVITĂȚII MAȘINII, NUMĂRUL BULELOR A CRESCUT CU RAPIDITATE [150].

DE WOOLIWICH, ÎN LUCRAREA [151], PREZINTA CA A OBȚINUT CA ÎN DESCOMPUNEREA APEI REZULTA UN GAZ FORMAT DIN TREI PARTI DIN HIDROGEN ȘI O PARTE DIN OXIGEN. DE WOOLIWICH.

FIRUL DE ZINC A FOST, ÎNTR-O PORȚIUNE MARE, DIZOLVAT ÎN TIMPUL ACESTUI EXPERIMENTULUI DE MAI SUS [150].

ACEST FENOMEN PREZENTAT MAI SUS ESTE PROCESUL DE ELECTROLIZĂ CARE SE PRODUCE ÎN CELULA ELECTROLITICĂ ȘI ÎN CELULA ELECTROCHIMICĂ ȘI CARE ESTE AMINTIT ÎN LUCRAREA [152] ȘI ACESTE FENOMENE SUNT PE LARG PREZENTATE ÎN LUCRĂRILE [153] ȘI [154].

ÎN LUCRAREA [151], PREZINTA CA SCANTEILE PRODUSE ERAU ÎNSOTITE DE SUNETE, SAU PRODUS COMOTII FOARTE PUTERNICE, SI CONECTAREA ÎN CIRCUIT A ELECTROMETRULUI CU FOLIE DE AUR A FOST AFECTAT FOARTE MULT.

32.6. LEGEA LUI OHM CU PILA VOLTAICĂ PRIN ELECTROCUTARE

ÎN LUCRAREA [155] ESTE PREZENTAT CA BATERIA DESCOPERITA DE VOLTA ERA CONFEȚIONATA DIN DOUA PLACI, UNA DE CUPRU SI UNA DE ZINC, ÎNTRE CARE ERA PLASATA O BUCATA DE PANZA ÎMBIBATA ÎN APA.

FIZICIENII AU OBSERVAT DEJA CA ATUNCI CÂND SE ÎNCHIDE CIRCUITUL UNUI APARAT VOLTAIC ACUL MAGNETIC Î-SI SCHIMBA DIREȚIA, SI ACEST EFECT NU SE PRODUCE CÂND CIRCUITUL ESTE ÎNTRERUPT [156].

APARATUL FOLOSIT DE [156] A FOST FORMAT DIN DOUAZECI DE PILE VOLTAICE. PILELE SUNT FORMATE DIN VASE RECTANGULARE, PARALELIPIPED DREPTUNGHIC, DE CUPRU [156]. ELECTROZI SUNT DE CUPRU SI ZINC [156]. O BAGHETA DE CUPRU SUSȚINE LAMA DE ZINC DIN VASUL VECIN [156]. VASELE DE CUPRU SUNT UMPLUTE CU UN AMESTEC DE APA, 1/60 DIN MASA ACID SULFURIC SI 1/60 ACID NITRIC [156].

SE PUN ÎN COMUNICARE POLII OPUȘI AI APARATULUI VOLTAIC PRINTR-UN FIR DE METAL NUMIT FIR CONDUCTOR SAU CONJUNCTIV, SI EFECTUL CARE SE MANIFESTA ÎN CONDUCTOR SI ÎN JURUL LUI ÎN TIMPUL ACȚIUNII VOLTAICE ESTE NUMIT CONFLICT ELECTRIC [156].

VOLTA A INVENTAT ELECTROFORUL, CONDENSATORUL, SI ALTE APARATE ELECTRICE PREȚIOASE FIZICIENILOR, CONFORM CU LUCRAREA [157].

APARATUL PENTRU PUNEREA ÎN EVIDENȚA A GALVANISMULUI DESCOPERIT DE VOLTA ERA FORMAT DINTR-UN NUMAR OARECARE DE

DISCURI SAU PLACI DE CUPRU, SAU ARGINT, ȘI UN NUMAR EGAL DE DISCURI DE ACEEAȘI DIMENSIUNE DIN STANIU, COSITOR, SAU ZINC, ȘI UN NUMAR EGAL DE RONDELE DE CARTON, SAU PIELE, SAU O SUBSTANȚA OARECARE CAPABILA SA RAMANA MULT TIMP UMED, CONFORM CU LUCRAREA [157]. SE SCUFUNDA RONDELELE IN APA SAU SARAMURA, SAU LEȘIE ALCALINA, CONFORM CU LUCRAREA [157]. SE FORMEAZA O PILA PRIN SUPRAPUNEREA ALTERNATIVA A ZINCULUI PE ARGINT SI A CARTONULUI PE ZINC SI AȘA MAI DEPARTE, CONFORM CU LUCRAREA [157], INSA NOI STIM CA PE CU SE POATE PUNE CARTONUL IMBIBAT IN SARAMURA, PESTE ACESTA ZN-CUL, CARE SE LEAGA LA CU, SAU PE CARE SE PUNE CU, PE CARE CARTONUL IMBIBAT IN SARAMURA, SI PE CARE ZN, CARE ESTE ACEEASI METODA CA ACEEA DE MAI INAINTE. ASTFEL PILA DEVINE FOARTE INALTA SI TREBUIE MENȚINUTA IN TREI TUBURI DE STICLA, CONFORM CU LUCRAREA [157]. ACEASTA PILA ESTE O SURSA CONSTANTA SI INEPUIZABILA DE CURENT ELECTRIC CARE PARCURGE TOTI CONDUCTORII CARE SUNT PUȘI IN CONTACT CU CELE DOUA EXTREMITAȚI ALE SALE, CONFORM CU LUCRAREA [157]. DACA ACEST CONDUCTOR ESTE UN ANIMAL SI BAZA SI CAPACUL PILEI SUNT IN CONTACT CU DOUA PARTI ALE ANIMALULUI, ANIMALUL PRIMEȘTE O PUTERNICA COMOȚIE ELECTRICA, CONFORM CU LUCRAREA [157]. VOLTA CU AJUTORUL CONDENSATORULUI LUI, A DEMONSTRAT CA ACESTE EFECTE SUNT ELECTRICE, A DETERMINAT TIPUL DE ELECTRICITATE, SI A OBȚINUT SCANTEI, CONFORM CU LUCRAREA [157]. PENTRU OBȚINEREA UNEI SCANTEI PICTET A FOLOSIT 57 DE PIESE DE ARGINT SI ZINC FARA CONDENSATOR, CONFORM CU LUCRAREA [157]. SENZAȚIA DE COMOȚIE ELECTRICA, NUMITA SOC ELECTRIC, CRESTE CU PATRATUL INALȚIMII PILEI FOLOSITE CONFORM CU EXPERIMENTELE EFECTUATE DE PICTET, REZULTAT PREZENTAT IN LUCRAREA [157]. REZULTATUL PREZENTAT MAI SUS ESTE CONFIRMAT DE REZULTATELE OBȚINUTE MAI TARZIU PRIN CARE INTENSITATEA CURENTULUI PILELOR LEGATE IN SERIE, CU FORȚELE ELECTROMOTOARE E_1 , E_2 , ..., REZISTENTELE INTERNE R_1 , R_2 , ..., SI REZISTENTA EXTERNA R , ESTE, CONFORM CU LUCRAREA [158]

$$I=(E_1+E_2+...)/(R+R_1+R_2+...) \quad (1)$$

ȘI CALDURA DEGAJATA IN UNITATEA DE TIMP DE UN CURENT CONSTANT CARE TRAVERSEAZA UN FIR METALIC POATE FI REPREZENTATA DE FORMULA LUI JOULE, PREZENTATA IN LUCRAREA [159], CARE ESTE

$$Q=I^2 R t \quad (2)$$

UNDE A REPREZINTA O CONSTANTA, R ESTE REZISTENȚA FIRULUI, ȘI I ESTE INTENSITATEA CURENTULUI, ȘI ȘOCUL ELECTRIC PRODUS DE CURENT ESTE PROPORȚIONAL CU ACEASTA CALDURA Q DATA DE ECUAȚIA (2) , ȘI CONFORM CU ECUAȚIILE (1) ȘI (2), ESTE PROPORȚIONAL CU NUMARUL DE PILE LEGATE IN SERIE. DE ASEMENEA, REZISTENTA FIRULUI CRESTE CU TEMPERATURA SI POATE FI REPREZENTATA DE FORMULA PREZENTATA DE CLAUSIUS IN LUCRAREA [159], CARE A FOST OBȚINUTA DE EL IN URMA REZULTATELOR OBȚINUTE DE EDMOND BECQUEREL ȘI LENZ DESPRE CONDUCTIBILITATEA METALELOR, SI CARE ESTE

$$R=R_0(1+Kt) \quad (3)$$

UNDE K ESTE O CONSTANTA, R₀ ESTE REZISTENTA LA 0 GRADE CELSIUS, ȘI T ESTE TEMPERATURA IN GRADE CELSIUS. OBSERVAM CA ATUNCI CAND VOLTA A INVENTAT PILA LUI PREZENTATA MAI SUS, NU EXISTA DEFINIȚIA INTENSITAȚII CURENTULUI SI NICI BUSOLA TANGENTA NU ERA INVENTATA PENTRU MASURAREA INTENSITAȚII CURENTULUI, SI SE CUNOȘTEAU NUMAI CATEVA EFECTE ALE CURENTULUI DINTRE CARE AM AMINTIT MAI SUS PRODUCEREA SCANTEII SI SOCUL ELECTRIC. IN LUCRAREA [157] S-AU FOLOSIT TOATE POSIBILITAȚILE DE PE VREMEA ACEEA PENTRU STUDIUL FENOMENULUI. ECUAȚIILE (1)-(3) SUNT VERIFICATE SI IN ZIUA DE AZI, SI SUNT PREZENTATE IN LUCRAREA [160].

PILA DE TIP VOLTA PREZENTATA MAI SUS IN CARE SE FOLOSESTE SARAMURA DESCOMPUNE NaCl IN IONI DE Cl⁻ SI DE Na⁺ SI POATE SA DEGAJE GAZ DE Cl₂ LA UN ELECTROD CONFORM CU [154] SI [161], SI GAZUL DE Cl₂ ESTE OTRAVITOR SI TREBUIE CALCULATA CANTITATEA DE GAZ DE Cl₂ DEGAJATA IN INTERVALUL DE TIMP DE 5-10 S AL EXPERIMENTULUI PENTRU A FI SUB NIVELUL PERICULOS, SI DE ASEMENEA DEVIATIA ACULUI MAGNETIC ALIMENTAT CU ACEST TIP DE PILE SCADE IN TIMP SI EXPERIMENTUL TREBUIE

RELUAT IMEDIAT PENTRU A VERIFICA ACEEASI DEVIATIE INITIALA DACA SE PRODUCE ACEST EFECT.

ECUATIA (1) ESTE ACEEASI CU ACEEA CARE SE OBTINE DACA SE APLICA LEGEA OCHIULUI DE RETEA A LUI KIRCHOFF SI LEGEA LUI OHM PREZENTATE IN LUCRAREA [147] SI CARE SUNT

$$NE-IR-IR=0 \quad (4)$$

SI

$$I=U/R \quad (5)$$

ECUATIA (5) SE APLICA PENTRU REZISTENTA INTERNA R SI PENTRU REZISTENTA EXTERNA R SEPARAT.

1.REVENDICAM O PILA DE TIP VOLTA CARACTERIZAT PRIN ACEEA CA ESTE FORMAT DIN MAI MULTE PLACI DE ARGINT SI ZINC, PLASATE ALTERNATIV, SEPARATE CU HARTIE SAU ALT MATERIAL IMBIBAT CU APA, SI ATUNCI CAND PLACILE DE NATURI DIFERITE DE ARGINT SI ZINC DE LA EXTREMITAȚI SUNT PUSE IN CONTACT CU UN FIR DE ARGINT SAU ZINC CONFORM CU LUCRAREA [151], SAU PUSE IN CONTACT CU UN FIR DINTR-UN CONDUCTOR CONFORM CU LUCRAREA [149], ATUNCI SE PRODUC SCANTEI, SAU SE PRODUCE DESCOMPUNEREA APEI CAND CEI DOI CONDUCTORI DE LA CELE DOUA PLACI SUNT SCUFUNDAȚI IN APA, CONFORM CU LUCRAREA [151].

2.REVENDICAM UN APARAT, NUMIT PILA, PENTRU PRODUCEREA UNOR SCANTEI CARACTERIZAT PRIN ACEEA CA SE AȘEAZA SUCCESIV PLACILE DE CU, ZN, SI CARTON IMBIBAT IN SARAMURA IN MAI MULTE STRATURI SUCCESIV, SI SE CONECTEAZA DOI CONDUCTORI CARE SUNT IN CONTACT CU CELE DOUA EXTREMITAȚI ALE APARATULUI, ȘI IN MOMENTUL CONTACTULUI ACESTOR DOI CONDUCTORI, IN PUNCTUL DE CONTACT, SE PRODUC SCANTEI, CONFORM CU LUCRAREA [157].

3.REVENDICAM UN PROCEDEU SI INSTRUMENT DE DEMONSTRARE A PROPORTIONALITATII CURENTULUI PRODUS DE PILELE IDENTICE LEGATE IN SERIE, CU NUMARUL DE PILE, CARACTERIZAT PRIN ACEEA CA SE FOLOSESC

MAI MULTE PILE DE TIP VOLTA FORMATE DIN STRATURI SUCCESIVE DE PLACI DE CU, ZN, SI CARTON IMBIBAT IN SARAMURA, CARE ESTE O BATERIE FORMATA DIN MAI MULTE PILE DE TIPUL PREZENTAT IN INVENȚIE DIN LUCRAREA [157], CARE SE LEAGA LA O BUSOLA TANGENTA FORMATA DINTR-O BOBINA VERTICALA IN FATA CAREIA SE SUSPENDA UN AC MAGNETIC PARALELE CU PLANUL CERCULUI BOBINEI, SI SE VERIFICA PROPORTIONALITATEA DINTRE INTENSITATEA CURENTULUI DATA DE UNGHIIUL DE DEVIATIE AL ACULUI MAGNETIC SI NUMARUL DE PILE LEGATE IN SERIE, SI ACEST TIP DE PILA POATE SA DEGAJE GAZ DE CL, SI GAZUL DE CL ESTE OTRAVITOR SI TREBUIE CALCULATA CANTITATEA DE GAZ DE CL DEGAJATA IN INTERVALUL DE TIMP DE 5-10 S CAT TIMP SE INCHIDE CIRCUITUL IN EXPERIMENT PENTRU A FI SUB NIVELUL PERICULOS, SAU CAT TIMP SUNT IN CONTACT SUBSTANȚELE, ADICA ELECTROZII ȘI SARAMURA, ADICA IN TIMPUL IN CARE SE DEGAJA GAZUL DE CLOR, SI DE ASEMENEA DEVIATIA ACULUI MAGNETIC ALIMENTAT CU ACEST TIP DE PILE SCADA IN TIMP SI EXPERIMENTUL TREBUIE RELUAT IMEDIAT PENTRU A VERIFICA ACEEASI DEVIATIE INITIALA DACA SE PRODUCE ACEST EFECT.

32.7. PILĂ VOLTAICĂ CU ELECTROZI DE CUPRU ȘI ZINC ȘI ELECTROLIT DIN ACID SULFURIC PENTRU ACUMULATORI DE AUTOMOBIL CARE EMITE UN GAZ TOXIC

IN LUCRAREA [155] ESTE PREZENTAT CA BATERIA DESCOPERITA DE VOLTA ERA CONFEȚIONATA DIN DOUA PLACI, UNA DE CUPRU SI UNA DE ZINC, INTRE CARE ERA PLASATA O BUCATA DE PANZA IMBIBATA IN APA.

FIZICIENII AU OBSERVAT DEJA CA ATUNCI CAND SE INCHIDE CIRCUITUL UNUI APARAT VOLTAIC ACUL MAGNETIC I-SI SCHIMBA DIREȚIA, SI ACEST EFECT NU SE PRODUCE CAND CIRCUITUL ESTE INTRERUPT [156].

APARATUL FOLOSIT DE [156] A FOST FORMAT DIN DOUAZECI DE PILE VOLTAICE. PILELE SUNT FORMATE DIN VASE RECTANGULARE, PARALELIPIPED DREPTUNGHIC, DE CUPRU [156]. ELECTROZI SUNT DE CUPRU

SI ZINC [156]. O BAGHETA DE CUPRU SUSȚINE LAMA DE ZINC DIN VASUL VECIN [156]. VASELE DE CUPRU SUNT UMPLUTE CU UN AMESTEC DE APA, 1/60 DIN MASA ACID SULFURIC SI 1/60 ACID NITRIC [156].

SE PUN IN COMUNICARE POLII OPUȘI AI APARATULUI VOLTAIC PRINTR-UN FIR DE METAL NUMIT FIR CONDUCTOR SAU CONJUNCTIV, SI EFECTUL CARE SE MANIFESTA IN CONDUCTOR SI IN JURUL LUI IN TIMPUL ACȚIUNII VOLTAICE ESTE NUMIT CONFLICT ELECTRIC [156].

CONFORM INFORMATIILOR DE PE INTERNET WWW.DIVVOS.RO ELECTROLITUL DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA ESTE UN AMESTEC DE APA DISTILATA SI ACID SULFURIC.

NOI IN INVENȚIE FOLOSIM ELECTROZI DE CUPRU SI CUI DE FIER CA IN LUCRAREA [158], AMESTEC DE APA CU 1/30 DIN VOLUM ELECTROLIT DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA CONFORM CALCULELOR DE MAI SUS ASEMANATOR CU LUCRAREA [158], DEOARECE ELECTROLITUL DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA IN CONTACT CU ELECTRODUL DE ZINC DEGAJA UN GAZ PUTERNIC CU MIROS ÎNȚEPATOR CARE PRESUPUNEM CA POATE FI ACID SULFHIDRIC, CARE ESTE TOXIC, POATE PROVOCA MOARTEA SAU IMBOLNAVIREA, SI IN CONTACT CU ELECTRODUL DE FIER NU SE OBSERVA DEGAJAREA UNUI GAZ DETECTABIL, ASTFEL INCAT ESTE POSIBIL SA NU FIE PERICULOS.

IN INVENȚIE AM FOLOSIT O BOBINA CU 550 DE SPIRE REALIZATE PE O CUTIE DE MEDICAMENTE DIN PLASTIC, CARE POATE SA AIBA DIAMETRUL DE 29-40 MM, CARE SE POATE REALIZA DIN FIR DE CUPRU DE 1-3 MM DIAMETRU, DE PREFERABIL MAI GROS PENTRU A PUTEA FI NEIZOLAT CU CUȚITUL SAU CU PISTOLUL DE LIPIT SI SA NU SE RUPA CAND SE FACE CONTACTUL, BOBINA REPREZENTATA IN FIGURA 1.

AM REPETAT EXPERIMENTUL DE MAI SUS CU UN LICHID IN CARE AM AMESTECAT 50 % ELECTROLIT DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA, 50 % APA, CU ACEEAȘI ELECTROZI, CU ACEEASI BOBINA, CU ACELASI AC MAGNETIC SI AM OBTINUT O DEVIATIE MARE A ACULUI MAGNETIC, VIZIBILA CU OCHIUL LIBER, MAI MARE DE 5°, POATE SI DE 10°,

FARA NICI O DEGAJARE VIZIBILA DE GAZ, DESI CUIUL ERA RUGINIT, SI AM OBTINUT IN ACEST CAZ O DEVIATIE A ACULUI MAGNETIC MULT MAI MARE DECAT IN PRIMUL CAZ, DEOARECE UN NUMAR MAI MARE DE MOLECULE DE ACID SULFURIC SUNT IN CONTACT CU FIERUL SI CU AL DOILEA METAL, CARE ESTE CUPRUL, SI CIRCUITUL SE POATE TINE INCHIS FARA SA OBSERVAM DEGAJARE DE GAZE PANA LA 3 SECUNDE. ACEST APARAT CONFECTIONAT DE AUTORI. APARATUL COMPLET CU AC MAGNETIC ESTE REPREZENTAT IN FIGURA 2.

CU ACEST APARAT SE POATE DEMONSTRA PRODUCEREA CURENTULUI PRIN DEVIATIA ACULUI MAGNETIC, DACA SE CALCULEAZA CANTITATEA DE GAZE DEGAJATA PENTRU A NU PUNE IN PERICOL SANATATEA OAMENILOR, FOLOSIND CA LICHID APA IN CARE S-A DIZOLVAT SARE DE BUCATARIE, CU ACEEASI METALE, CUPRU SI FIER, CU ACEEASI BOBINA, SI CU ACELASI AC MAGNETIC.

ACUL MAGNETIC DIN FIER, FIER CALIT, SAU OTEL, ESTE MAGNETIZAT ASEMANATOR CU [162] INTR-O BOBINA CU LUNGIMEA DE 64 MM, 2000 DE SPIRE, DIAMETRUL INTERIOR DE 5 MM, SI DIAMETRUL FIRULUI DE 0.25 MM, IN CARE S-A MAGNETIZAT UN AC DE CUSUT DE 55 MM LUNGIME, SI DIAMETRUL DE 0.61 MM, SI NOI ALIMENTAM BOBINA DE MAGNETIZARE LA O PILA VOLTAICA CU ELECTROZI DE CUPRU SI ZINC SI ELECTROLIT PENTRU ACUMULATORI DE MAȘINA DE TIP DIVVOS, SAU 4 BATERII R 6 LEGATE IN SERIE, IN CARE BOBINA A FOST INFAȘURATA PE UN PAI PENTRU SUC SI A FOST CONFECTIONATA MANUAL DE INVENTATORI, SI ESTE REPREZENTATA IN FIGURA 2, SI DISPOZITIVUL DE MAGNETIZARE ESTE PREZENTAT IN FIGURA 3.

O BATERIE ALCALINA TIPICA ESTE FORMATA DINTR-UN ELECTROD CILINDRIC CENTRAL DE ALAMA, INCONJURAT DE UN STRAT INELAR DE HIDROXID DE POTASIU KOH, CARE ESTE INVELIT DE UN SEPARATOR DE HARTIE CILINDRIC, CARE ESTE INCONJURAT DE UN STRAT INELAR DE DIOXID DE MANGAN MnO_2 , CARE ESTE INVELIT DE UN STRAT CILINDRIC DE OTEL [95, p. 347].

1. REVENDICAM O PILA DE TIP VOLTA CARACTERIZAT PRIN ACEEA CA ESTE FORMAT DIN MAI MULTE PLACI DE ARGINT SI ZINC, PLASATE ALTERNATIV, SEPARATE CU HARTIE SAU ALT MATERIAL IMBIBAT CU APA, ȘI ATUNCI CAND PLACILE DE NATURI DIFERITE DE ARGINT ȘI ZINC DE LA EXTREMITAȚI SUNT PUSE IN CONTACT CU UN FIR DE ARGINT SAU ZINC, SAU PUSE IN CONTACT CU UN FIR DINTR-UN CONDUCTOR CONFORM CU LUCRAREA [163], ATUNCI SE PRODUC SCANTEI, SAU SE PRODUCE DESCOMPUNEREA APEI CAND CEI DOI CONDUCTORI DE LA CELE DOUA PLACI SUNT SCUFUNDAȚI IN APA, CONFORM CU LUCRAREA [150].

32.8. DISPOZITIV PENTRU DEMONSTRAREA DEVIATIEI ACULUI MAGNETIC DE UN CURENT PRODUS DE O PILA VOLTAICA FARA DEGAJARE VIZIBILA DE GAZE

ESTE POSIBIL CA SI IN APARATUL DIN PREZENTUL CAPITOL SA SE DEGAJE GAZE TOXICE, DESI ACESTEA NU SUNT VIZIBILE.

ÎN [156] ESTE PREZENTAT CA PENTRU PRODUCEREA CURENTULUI CU CARE S-A OBȚINUT DEVIATIA ACULUI MAGNETIC POZIȚIONAT PARALEL CU CONDUCTORUL, DEASUPRA SAU DEDESUBTUL LUI, S-AU FOLOSIT PILE VOLTAICE ELECTROZI DE CUPRU SI ZINC. S-AU SCUFUNDAT ELECTROZII INTR-UN AMESTEC DE APA, 1/60 DIN MASA ACID SULFURIC SI 1/60 ACID NITRIC.

[164] PREZINTA A OBȚINUT DEVIATIA ACULUI MAGNETIC SUSPENDAT IN FATA UNEI BOBINE CU 2000 DE SPIRE CU O PILA VOLTAICA CU ELECTROZI DE CUPRU SI ZINC SCUFUNDAȚI IN APA.

[165] PREZINTA O PILA CU UN ELECTROD DE CUPRU SI UNUL DE FIER SCUFUNDAȚI INTR-UN AMESTEC DE O PARTE DIN MASA ACID SULFURIC SI 16 PARȚI APA.

DACA AM FOLOSII NUMAI ACID SULFURIC IN AMESTEC CU APA CU COMPOZIȚIA CALCULATA CU FORMULA

$$1/60 + 1/60 = 1/30$$

DIN MASA ACID SULFURIC SI RESTUL APA AM FI APROAPE DE NUMARUL DE MOLECULE DE ACID DIN LUCRAREA LUI [156].

CONFORM INFORMATIILOR DE PE INTERNET WWW.DIVVOS.RO ELECTROLITUL DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA ESTE UN AMESTEC DE APA DISTILATA SI ACID SULFURIC.

NOI IN INVENȚIE FOLOSIM ELECTROZI DE CUPRU SI CUI DE FIER CA IN LUCRAREA [158], AMESTEC DE APA CU 1/30 DIN VOLUM ELECTROLIT DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA CONFORM CALCULELOR DE MAI SUS ASEMANATOR CU LUCRAREA [158], DEOARECE ELECTROLITUL DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA IN CONTACT CU ELECTRODUL DE ZINC DEGAJA UN GAZ PUTERNIC CU MIROS ÎNȚEPATOR CARE PRESUPUNEM CA POATE FI ACID SULFHIDRIC, CARE ESTE TOXIC, POATE PROVOCA MOARTEA SAU IMBOLNAVIREA, SI IN CONTACT CU ELECTRODUL DE FIER NU SE OBSERVA DEGAJAREA UNUI GAZ DETECTABIL, ASTFEL INCAT ESTE POSIBIL SA NU FIE PERICULOS.

AM REPETAT EXPERIMENTUL DE MAI SUS CU UN LICHID IN CARE AM AMESTECAT 50 % ELECTROLIT DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA, 50 % APA, CU ACEEAȘI ELECTROZI, CU ACEEASI BOBINA, CU ACELASI AC MAGNETIC SI AM OBTINUT O DEVIATIE MARE A ACULUI MAGNETIC, VIZIBILA CU OCHIUL LIBER, MAI MARE DE 5°, POATE SI DE 10°, FARA NICI O DEGAJARE VIZIBILA DE GAZ, DESI CUIUL ERA RUGINIT, SI AM OBTINUT IN ACEST CAZ O DEVIATIE A ACULUI MAGNETIC MULT MAI MARE DECAT IN PRIMUL CAZ, DEOARECE UN NUMAR MAI MARE DE MOLECULE DE ACID SULFURIC SUNT IN CONTACT CU FIERUL SI CU AL DOILEA METAL, CARE ESTE CUPRUL, SI CIRCUITUL SE POATE TINE INCHIS FARA SA OBSERVAM DEGAJARE DE GAZE PANA LA 3 MINUTE. ACEST APARAT CONFECTIONAT DE AUTORI ESTE REPREZENTAT IN FOTOGRAFIA DIN FIGURA 1.

CU ACEST APARAT SE POATE DEMONSTRA PRODUCEREA CURENTULUI PRIN DEVIATIA ACULUI MAGNETIC, DACA SE CALCULEAZA CANTITATEA DE GAZE DEGAJATA PENTRU A NU PUNE IN PERICOL SANATATEA OAMENILOR, FOLOSIND CA LICHID APA IN CARE S-A DIZOLVAT SARE DE BUCATARIE, CU ACEEASI METALE, CUPRU SI FIER, CU ACEEASI BOBINA, SI CU ACELAȘI AC MAGNETIC.

1. REVENDICAM UN DISPOZITIV PENTRU DEMONSTRAREA DEVIATIEI ACULUI MAGNETIC POZITIONAT IN FATA UNEI BOBINE CU 550 DE SPIRE PREZENTAT IN **ERROR! REFERENCE SOURCE NOT FOUND.** PRIN CARE TRECE UN CURENT PRODUS DE O PILA VOLTAICA CU UN ELECTROD DE CUPRU DIN FORMATA DINTR-O PLACA DE CABLAJ DUBLU PENTRU CIRCUITE ELECTRONICE CU LATIMEA DE 8.5 CM SI LUNGIMEA DE 10.5 CM, UN ELECTROD DIN FIER FORMAT DINTR-UN CUI DE FIER CU LUNGIMEA DE 20 CM, ELECTRODUL DE FIER FIIND PREZENTAT DE [75, pp. 115-118], SCUFUNDAȚI INTR-UN AMESTEC DE APA CU 1/30 DIN VOLUM ELECTROLIT DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MAȘINA CA IN CALCULELE DE MAI SUS IN CARE, SPRE DEOSEBIRE DE LUCRAREA LUI [156], AM FOLOSIT NUMAI ELECTROLIT DIVVOS PENTRU ACUMULATORI IN CANTITATEA DE 1/30 DIN VOLUM ELECTROLIT SI RESTUL APA FATA DE [156] CARE A FOLOSIT UN AMESTEC DE APA CU 1/60 DIN MASA ACID SULFURIC SI 1/60 DIN MASA ACID NITRIC, SI AM OBTINUT O DEVIATIE MARE A ACULUI MAGNETIC FARA DEGAJAREA UNUI GAZ TOXIC VIZIBIL SI UN CURENT DE 5 MA, CARE ESTE MULT MAI MIC DECAT 30 MA IN CAZUL FOLOSIRII ELECTROZILOR DE CUPRU CU ACEEAȘI SUPRAFAȚA SI ZINC CU LATIMEA DE 3 CM SI LUNGIMEA DE 15 CM, SI CARE, IN CAZUL DEGAJARII ACIDULUI SULFHIDRIC IN CARE FIECARE ATOM DE SULF AR PRIMI DOUA SARCINI ELECTRICE ELEMENTARE DIN CURENT, CANTITATEA DE ACID SULFHIDRIC DEGAJAT SUB FORMA DE GAZ AR FI DE 6 ORI MAI MICA, SI AM REPETAT EXPERIMENTUL DE MAI SUS CU UN LICHID IN CARE AM AMESTECAT 50 % ELECTROLIT DIVVOS PENTRU ACUMULATORI DE MASINA, 50 % APA, CU ACEEAȘI ELECTROZI, CU ACEEASI BOBINA, CU ACELASI AC MAGNETIC SI AM OBTINUT O DEVIATIE MARE A ACULUI MAGNETIC, VIZIBILA CU OCHIUL LIBER, MAI MARE DE 5°, POATE SI DE 10°, FARA NICI O DEGAJARE VIZIBILA DE GAZ, DESI CUIUL ERA RUGINIT, SI AM OBTINUT IN ACEST CAZ O DEVIATIE A ACULUI MAGNETIC MULT MAI MARE DECAT IN PRIMUL CAZ, DEOARECE UN NUMAR MAI MARE DE MOLECULE DE ACID SULFURIC SUNT IN CONTACT CU FIERUL SI CU AL DOILEA METAL, CARE ESTE CUPRUL, SI CIRCUITUL SE POATE TINE INCHIS FARA SA OBSERVAM DEGAJARE DE GAZE PANA LA 3 MINUTE, SI IN CARE ACUL MAGNETIC DIN FIER, FIER CALIT, SAU OTEL, ESTE MAGNETIZAT ASEMANATOR CU [162] INTR-O O BOBINA CU LUNGIMEA DE 64

MM, 2000 DE SPIRE, DIAMETRUL INTERIOR DE 5 MM, SI DIAMETRUL FIRULUI DE 0.25 MM, IN CARE S-A MAGNETIZAT UN AC DE CUSUT DE 55 MM LUNGIME, SI DIAMETRUL DE 0.61 MM, SI NOI ALIMENTAM BOBINA DE MAGNETIZARE LA O PILA VOLTAICA CU ELECTROZI DE CUPRU SI ZINC SI ELECTROLIT PENTRU ACUMULATORI DE MASINA DE TIP DIVVOS, SAU 4 BATERII R 6 LEGATE IN SERIE, IN CARE BOBINA A FOST INFASURATA PE UN PAI PENTRU SUC SI A FOST CONFECTIONATA MANUAL DE INVENTATORI.

32.9. PRODUCEREA SARCINILOR ELECTRICE IN PILA VOLTAICA

OERSTED, ÎN LUCRAREA [156], PREZINTĂ CĂ A PRODUS UN CURENT ELECTRIC CU O PILĂ VOLTAICĂ, ÎN ACEASTA UN ELECTROD A FOST DE ZINC ȘI UNUL DE CUPRU, SCUFUNDAȚI ÎN AMESTEC DE APĂ CU ACID SULFURIC CU CONCENTRAȚIA DE 1/60 DIN MASĂ ȘI CU ACID NITRIC TOT CU CONCENTRAȚIA 1/60.

CURENTUL A TRECUT PRINTR-UN CONDUCTOR LEGAT LA CEI DOI ELECTROZI, CU UNUL DINTRE CAPETE LA UN ELECTROD, ȘI CELĂLALT CAPĂT LA CELĂLALT ELECTROD [156].

ACEST CURENT A DEVIAT UN AC MAGNETIC AȘEZAT LÂNGĂ EL [156].

OERSTED A FOST PRIMUL CARE A DESCOPERIT CĂ CURENTUL CONTINUU DEVIAZĂ ACUL MAGNETIC [156].

CONDUCTIVITATEA ELECTRICĂ ESTE PROPRIETATEA CORPURILOR DE A CONDUCE CURENTUL ELECTRIC.

ÎN CONTINUARE NE REFERIM LA PROPRIETATEA ELEMENTELOR CHIMICE METALOIDE CĂ NU SUNT CONDUCTOARE [166].

ELEMENTELE METALOIDE SUNT: BROMUL, IODUL, SULFUL, ETC [166].

METALOIDELE NU SUNT CONDUCTOARE NICI ÎN STARE SOLIDĂ ȘI NICI ÎN STARE LICHIDĂ [166].

MATTEUCCI A STUDIAT CĂ METALOIDELE AU O ACȚIUNE CHIMICĂ ASUPRA METALELOR, ȘI CĂ ACEASTĂ ACȚIUNE PRODUCE ELECTRICITATE [166].

CURENTUL ELECTRIC PRODUCE REACȚII CHIMICE, ȘI ACEST FENOMEN SE NUMEȘTE ACȚIUNEA ELECTROCHIMICĂ A CURENTULUI [153].

PENTRU STUDIUL LUI, MATTEUCCI A FOLOSIT ACȚIUNEA ELECTROCHIMICĂ PE CARE O ARE CURENTUL [166].

ÎN PRIMUL EXPERIMENT, MATTEUCCI A STUDIAT CE SE CUNOȘTEA DESPRE ACȚIUNEA ELECTROCHIMICĂ A CURENTULUI [166].

PILA VOLTAICĂ FOLOSITĂ DE MATTEUCCI A FOST FORMATĂ DINTR-O CAPSULĂ MARE DIN PORȚELAN ȘI UN VAS MAI MIC DIN ARGILĂ INTRODUS ÎN CAPSULA MARE [166].

A FOLOSIT O SOLUȚIE DE SULFAT DE CUPRU SATURAT ÎN VASUL MARE [166].

A TURNAT APA DISTILATĂ ÎN VASUL MIC [166].

ÎN APA DISTILATĂ A DIZOLVAT SULFAT DE POTASIU PÂNĂ LA MARCAREA CU TREI SAU PATRU GRADE A SOLUȚIEI [166].

CAPSULA DE ARGILĂ A FOST IMPERFECT ARSĂ [166].

NIVELUL LICHIDULUI DIN CAPSULA EXTERIOARĂ A FOST MENȚINUTĂ CU CÂȚIVA MILIMETRII SUB NIVELUL LICHIDULUI DIN CAPSULA INTERIOARĂ [166].

CURENTUL A FOST PRODUS DE UN CUPLU VOLTAIC FORMAT PRIN SUDAREA UNUI FIR GROS DE PLATINĂ LA O LAMĂ DINTR-UN METAL ELECTROPOZITIV [166].

A SCUFUNDAT FIRUL DE PLATINĂ ÎN LICHIDUL DIN CAPSULA MARE, ȘI FIRUL DIN CELĂLALT METAL ÎN LICHIDUL DIN CEALALTĂ CAPSULĂ [166].

A ÎNCĂLZIT CUPLUL [166].

PRIN ACEST PROCES A PRODUS UN CURENT ELECTRIC [166].

PE PLATINĂ S-A DEPUȘ CUPRUL [166].

ÎN ACEST TIMP CELĂLALT METAL S-A DIZOLVAT [166].

METALUL DIZOLVAT ȘU CUPRUL REDUS AU FOST ÎN CANTITĂȚI, DATE DE MASELE LOR, ECHIVALENTE ÎNTRE ELE [166].

CURENTUL ELECTRIC A TRECUT DINTR-O CAPSULĂ ÎN CEALALTĂ, CU SENSUL CARE ESTE CUNOSCUȚ, AȘA CUM AM OBSERVAT CĂ SE DESFĂȘOARĂ ACEST EXPERIMENT, FAPT CUNOSCUȚ ÎN ANUL 1844 DE MATTEUCCI, AȘA CUM SPUNE MATTEUCCI CA PRIN EXPERIMENTUL DE MAI SUS, ÎN CARE CANTITATEA DE CUPRU DEPUȘ SI METAL DIZOLVAT SUNT ECHIVALENTE ÎNTRE ELE, CONFIRMA LEGEA ELECTROLIZEI DESCOPERITA DE FARADAY [166].

ÎN CONTINUARE, PENTRU UN NOU STUDIU, ÎNTR-UN PRIM EXPERIMENT, [166] A FOLOSIT UN CUPLU DE ZINC SI PLATINA, SI SOLUTIA DE SULFAT DE POTASIU ÎN CAPSULA INTERIOARA.

ÎNCALZIND TOT APARATUL, [166] A OBTINUT ECHIVALENȚA CANTITATILOR DE ZINC DIZOLVAT SI CUPRU REDUS. FACÂND SĂ TREACĂ UN CURENT DE CLOR ÎN LICHIDUL DIN CAPSULA INTERIOARA SI ÎNCALZIND CAPSULA ÎN ACELAȘI TIMP [166] A OBTINUT CĂ ZINCUL DIZOLVAT ESTE ÎNTR-O CANTITATE APROAPE DUBLĂ DECÂT ECHIVALENȚUL DE CUPRU REDUS. MATTEUCCI A OBTINUT ACEST REZULTAT ÎNTR-UN MARE NUMĂR DE EXPERIMENTE [166]. [166] PREZINTĂ CĂ, EVIDENT, ACEST EXCES DE ZINC A FOST COMBINAT CU CLORUL. ÎNTR-UN ALT EXPERIMENT MATTEUCCI PREZINTĂ CĂ A FOLOSIT UN CUPLU DE CUPRU SI PLATINA; LICHIDUL ÎN CARE A SCUFUNDAT CUPRUL ESTE ÎNTOTDEAUNA SULFATUL DE POTASIU [166]. CU ACEST CUPLU NU A OBTINUT CUPRU REDUS PE PLATINA NICI ATUNCI CÂND A ÎNCALZIT APARATUL [166]. CUPRUL A APĂRUT CÂND MATTEUCCI A ADĂUGAT LA SOLUTIA DE SULFAT DE POTASIU PUTIN ACID SULFURIC SAU CLORHIDRIC [166]. PENTRU A OBTINE O CANTITATE DE CUPRU SUFICIENTĂ PENTRU A DETERMINA MASELE, MATTEUCCI A TREBUIT SĂ ADĂUGE MAI MULT ACID

SULFURIC SI A TREBUIT SA INCALZEASCA APARATUL [166]. MATTEUCCI NU A OBTINUT NICIODATA REDUS TOT CUPRUL CARE SE DIZOLVA, SI DIFERENTA A FOST MARE [166].

MATTEUCCI, IN LUCRAREA LUI [166], PREZINTA CA FACAND SA ACTIONEZE METALOIDELE ASUPRA CUPRULUI, PANA CAND NU EXISTA DECAT O SOLUTIE DE SULFAT DE POTASIU IN CONTACT CU CUPRUL, SE POT DIZOLVA CANTITATI MARI DE CUPRU FARA A OBSERVA NICI O URMA DE CUPRU REDUS PE PLATINA [166].

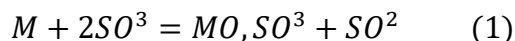
IN ULTIMUL EXPERIMENT PREZENTAT DE MATTEUCCI IN LUCRAREA LUI [166] IN CAPSULA EXTERIOARA A TURNAT SULFAT DE CUPRU, IN CAPSULA INTERIOARA A TURNAT SULFAT DE POTASIU, IN CAPSULA EXTERIOARA IN SULFATUL DE CUPRU A SCUFUNDAT FIRUL DE PLATINA, SI IN CAPSULA INTERIOARA, IN SULFATUL DE POTASIU A SCUFUNDAT FIRUL DE CUPRU. CURENTUL A FOST PRODUS DE UN CUPLU VOLTAIC [166]. IN ACEST EXPERIMENT CUPRUL SE DEPUNE PE PLATINA IN CAPSULA EXTERIOARA, SI CUPRUL SE DIZOLVA IN CAPSULA INTERIOARA [166].

DE ASEMENEA, FACAND SA ACTIONEZE BROMUL IN ACESTE EXPERIMENTE, IN LUCRAREA [166], S-AU OBTINUT 1 DECIGRAME DE CUPRU, FARA SA APARA CUPRUL PE PLATINA. PENTRU A PUTEA DIZOLVA BROMURA DE CUPRU, IN LUCRAREA [166], S-AU ADAUGAT LA LICHID CATEVA PICATURI DE ACID CLORHIDRIC. INTR-UN EXPERIMENT IN CARE S-A PUTUT CANTARI CUPRUL REDUS, IN LUCRAREA [166], S-A GASIT O CANTITATE DE CUPRU CARE ERA A CINCIA PARTE A CUPRULUI REDUS. IN LOC DE BROM, IN LUCRAREA [166], S-A FOLOSIT UN CURENT DE CLOR, DUPA ADAUGAREA LA LICHID A CATORVA PICATURI DE ACID CLORHIDRIC. ASTFEL, IN LUCRAREA [166], S-AU PUTUT DIZOLVA CANTITATI DE CUPRU, FARA SA SE OBTINA REDUCEREA CUPRULUI PE PLATINA.

ATENTIE. PERICOL DE MOARTE ! GAZUL DE SO_2 PREZENTAT MAI JOS TREBUIE SA FIE SO_2 SI ESTE OTRAVITOR, SI STANDARDUL STABILIT IN STATELE UNITE ALE AMERICII PRIN NAAQS IN 1971 ESTE DE 0.02 PPM, MEDIE ARITMETICA ANUALA, SI O MEDIE DE 500 PPB TIMP DE TREI ORE, CARE NU

POATE FI DEPOSITA DECAT O DATA PE AN [167]. ACIDUL SULFURIC CONCENTRAT IN CONTACT CU METALELE SI INCALZIT LA 100-200 GRADE DEGAJA ACID SULFUROS GAZOS, OXIZII ACESTOR METALE SI LE TRANSFORMA IN SULFATI NEUTRII [168].

ACEASTA REACTIE SE EXPRIMA, DE O MANIERA GENERALA, PRIN FORMULA URMATOARE [168]



IN ECUATIA (1) SO^3 DIN PARTEA STANGA ESTE ACIDUL SULFURIC SI SO^2 ESTE ACIDUL SULFUROS CONFORM CU CARTEA [169] PAGINILE 13 - 15 TABELUL 1. UNUL DINTRE OXIZII CUPRULUI ESTE CuO CONFORM CU LUCRAREA [117].

[166] PREZINTA CA FAPTUL CA DESCOMPUNEREA ELECTROCHIMICA, IN CARE S-A PRODUS DISTRUGEREA UNEI COMBINATII, SI TRANSPORTUL SI DEGAJAREA CELOR DOUA ELEMENTE ALE COMBINATIEI LA POLII OPUSI AI PILEI, CONDUC LA CONCLUZIA CA IN ACESTE DOUA ELEMENTE ESTE O STARE ELECTRICA OPUSA. [166] SUSTINE CA LA MOMENTUL RESPECTIV A DEMONSTRAT CA NEUTRALIZAREA CELOR DOUA STARI ELECTRICE CONTRARE PRODUCE AFINITATEA CHIMICA, SI CA NIMIC NU CONTRAZICE EXISTENTA CELOR DOUA STARI ELECTRICE CONTRARE IN CELE DOUA ELEMENTE ALE COMBINATIEI DISTRUSA DE CURENT. [166] PREZINTA CA DE ACEEA SPUNEM CA PRODUCEREA CURENTULUI ELECTRIC ESTE DATORAT FAPTULUI CA, PRIN AFINITATEA CHIMICA, UNUL DIN CELE DOUA ELEMENTE ALE UNEI COMBINATI, SAU AMBELE SIMULTAN, SUNT SEPARATE SI SE COMBINA CU METALELE SAU CONDUCTORII SOLIZI AI CUPLULUI. [166] PREZINTA CA DEGAJAREA DE ELECTRICITATE VA FI MAI PUTERNICA, IN GENERAL, DEOARECE CELE DOUA ELEMENTE ALE CUPLULUI SE COMBINA SEPARAT CU CELE DOUA ELEMENTE ALE COMBINATIEI LICHIDE. [166] PREZINTA CA ACEASTA ESTE CEEA CE SE INTAMPLA IN PILA CU PEROXID DE PLUMB A LUI DE LA RIVE, SI IN CELE ALE LUI GROVE, BUNSEN SI DANIELL. [166] PREZINTA CA, IN LIMBAJUL ADOPTAT, CURENTUL ESTE UN SINGUR FLUID, SI IN CONCLUZIE DIRECTIA CURENTULUI ESTE INTOTDEAUNA CEL IN

CARE SE MISCA HIDROGENUL SAU ELEMENTUL POZITIV AL COMBINATIEI LICHIDE.

SI IN PREZENT, CONFORM CU LUCRAREA [75], ESTE RECUNOScut FAPTUL SE PRODUCE O DESCOMPUNERE ELECTROCHIMICA DE CURENT A UNUI COMPUS IN ELEMENTELE CONSTITUENTE CONFORM CELOR PREZENTATE MAI SUS DIN LUCRAREA [166].

[166] PREZINTA CA UN ECHIVALENT DE SARE FORMAT DEZVOLTA O CANTITATE DE ELECTRICITATE CAPABILA SA DESCOMPUNA ACEEASI CANTITATE DE SARE, SAU O CANTITATE ECHIVALENTA DIN TOATE CELELALTE SARURI.

AVOGADRO IN LUCRAREA LUI [170] PREZINTA CA A PUBLICAT IN LUCRARILE (JOURNAL DE PHYSIQUE DE LAMETHERIE, IULIE 1811 SI 11 FEBRUARIE 1814) ARGUMENTELE PENTRU CARE PENTRU GAZELE PERMANENTE LA ACEEASI TEMPERATURA SI PRESIUNE, SI DESTUL DE DEPARTE DE PUNCTUL DE LICHEFIERE, CENTRELE MOLECULELOR COMPONENTE SE AFLA LA ACEEASI DISTANTA, SI IN CONSECINTA UN VOLUM DAT DIN ACESTE GAZE CONTINE ACELASI NUMAR DE MOLECULE, SI CA DENSITATEA LOR POATE FI CONSIDERATA CA O MASURA A MASEI ACESTOR MOLECULE, SI CA ACEST PRINCIPIU ERA ADMIS DE FIZICIENI SI DE CHIMISTI SI LA MOMENTUL RESPECTIV AL ARTICOLULUI [170].

DUMAS IN LUCRAREA LUI [171] PREZINTA CA INTR-O ANUMITA LOCALITATE SE DEGAJA VAPORI DE APA CARE CONTIN ACID BORIC SI HIDROGEN SULFURAT, SI CA HIDROGENUL SULFURAT SE TRANSFORMA IN ACID SULFURIC.

32.10. PROCEDEU PENTRU STUDIUL PROPAGĂRII ELECTRICITĂȚII SUB FORMĂ DE CURENT ȘI DEMONSTRAREA CĂ NU ESTE TRANSMISĂ PRIN RADIAȚIE

[172] PREZINTA CA SE CUNOȘTEAU PATRU FLUIDE IMPONDERABILE: LUMINA, CALDURA RADIATA, ELECTRICITATEA, SI MAGNETISMUL [172].

[172] A DEMONSTRAT EXPERIMENTAL CA ELECTRICITATEA SUB FORMA DE CURENT NU ESTE TRANSMISA PRIN RADIAȚIE RECTILINIE [172].

DISPOZITIVUL FOLOSIT DE WARTMANN ESTE FORMAT DINTR-UN TUB DE STICLA ORIZONTAL CARE PATRUNDE INTR-UN VAS CILINDRIC UMPLUT CU MERCUR, PRIN TUB SE PRODUCE UN CURENT PRIN CONECTAREA MERCURULUI DE LA CAPATUL DIN EXTERIORUL VASULUI CILINDRIC LA UN POL AL UNEI PILE VOLTAICE, CELALALT CAPAT AL PILEI ESTE CONECTAT LA DOUA FIRE A SI B CU REZISTENTE EGALE, CARE SUNT CUFUNDATE IN MERCURUL DIN VASUL CILINDRIC IN DOUA PUNCTE Z SI Z', AFLATE LA DISTANTE EGALE BZ SI BZ' DE CENTRUL VASULUI CILINDRIC UNDE ESTE CAPATUL TUBULUI DE STICLA, SI ROTIND CAPATUL Z' AL FIRULUI B PE UN CERC CU RAZA BZ' CU CENTRUL IN B, CURENTII MASURATI IN CELE DOUA FIRE SUNT EGALI, CEEA CE INSEAMNA CA DACA Z ESTE IN PRELUNGIREA AXEI TUBULUI SI PE DIRECTIONAZIUNEA RAZELOR ELECTRICE CARE IES INTR-UN FASCICUL PARALEL DIN TUB, CURENTUL DIN FIRUL A NU ESTE MAI MARE DECAT CURENTUL DIN FIRUL B CAND BZ' ESTE ROTIT FATA DE AXA TUBULUI [172].

1.REVENDICAM UN DISPOZITIV PENTRU STUDIUL PROPAGARII ELECTRICITATII CARACTERIZAT PRIN ACEEA CA ESTE CONSTRUIT CA DISPOZITIVUL FOLOSIT DE [172] SI ESTE FORMAT DINTR-UN TUB DE STICLA ORIZONTAL CARE PATRUNDE INTR-UN VAS CILINDRIC UMPLUT CU MERCUR, PRIN TUB SE PRODUCE UN CURENT PRIN CONECTAREA MERCURULUI DE LA CAPATUL DIN EXTERIORUL VASULUI CILINDRIC LA UN POL AL UNEI PILE VOLTAICE, CELALALT CAPAT AL PILEI ESTE CONECTAT LA DOUA FIRE A SI B CU REZISTENTE EGALE, CARE SUNT CUFUNDATE IN MERCURUL DIN VASUL CILINDRIC IN DOUA PUNCTE Z SI Z', AFLATE LA DISTANTE EGALE BZ SI BZ' DE CENTRUL VASULUI CILINDRIC UNDE ESTE CAPATUL TUBULUI DE STICLA, SI ROTIND CAPATUL Z' AL FIRULUI B PE UN CERC CU RAZA BZ' CU CENTRUL IN B, CURENTII MASURATI IN CELE DOUA FIRE SUNT EGALI, CEEA CE INSEAMNA CA DACA Z ESTE IN PRELUNGIREA AXEI TUBULUI SI PE DIRECTIONAZIUNEA RAZELOR ELECTRICE CARE IES INTR-UN FASCICUL PARALEL DIN TUB, CURENTUL DIN FIRUL A NU ESTE MAI MARE DECAT CURENTUL DIN FIRUL B CAND BZ' ESTE ROTIT FATA DE AXA TUBULUI [172].

32.11. PROCEDEU PENTRU DEMONSTRAREA PRODUCERII CURENTULUI ELECTRIC CÂND ACȚIUNEA CHIMICĂ ARE LOC ÎNTRE O MOLECULĂ ELEMENTARĂ ȘI UN COMPUS DIN DOUĂ MOLECULE ETEROGENE

BECQUEREL A RAPORTAT DOUĂ LEGI [173] CARE SUNT:

1. ORICARE ESTE LUNGIMEA UNUI FIR METALIC, DACA DIAMETRUL LUI ESTE CONSTANT, SI CANTITATEA DE ELECTRICITATE ESTE INVARIABILA, CRESTEREA TEMPERATURII ESTE ACEEASI IN ORICE PUNCT [173].

2. CANTITATEA DE CALDURA PRODUSA ESTE DIRECT PROPORTIONALA CU REZISTENTA LA CONDUCTIBILITATE SI PROPORTIONALA CU PATRATUL CANTITATII DE ELECTRICITATE CARE TRECE [173].

BECQUEREL A AJUNS LA CONCLUZIA CA ATUNCI CAND CORPURILE SLAB CONDUCTOARE DE ELECTRICITATE SE GASESC INTR-O MARE STARE DE DIVIZIUNE IN PREZENTA APEI, ELE DEVIN CONDUCTOARE [173].

[173] A AJUNS LA CONCLUZIA CA NU SE PRODUCE TENSIUNE ELECTRICA, SI NICI CURENT IN COMBINAREA A DOUA MOLECULE ELEMENTARE ETEROGENE, NICI IN SEPARAREA ACESTOR MOLECULE, CAND ELE SUNT COMBinate, SI CA TENSIUNEA ELECTRICA SI CURENTUL APAR CAND ACTIUNEA CHIMICA ARE LOC INTRE O MOLECULA ELEMENTARA SI UN COMPUS DIN ALTE DOUA MOLECULE ETEROGENE [173].

1. REVENDICAM UN DISPOZITIV PENTRU PRODUCEREA ELECTRICITATII CARACTERIZAT PRIN ACEEA CA SE FOLOSESTE UN JET DE GAZ DE HIDROGEN CARE SE DEGAJA DINTR-UN TUB DE STICLA, SE APRINDE JETUL DE GAZ, SI O MICA BOBINA DE PLATINA SE ELECTRIZEAZA NEGATIV CAND ESTE PLASATA IN CENTRU UNDE FLACARA INCA NU ESTE IN CONTACT CU AERUL, SI POZITIV CAND INFASOARA FLACARA CA IN LUCRAREA [173].

32.12. PROPAGAREA ELECTRICITĂȚII ÎN ELECTROLIȚI

VERDET, IN LUCRAREA [174], PREZINTĂ CA CLAUSIUS, IN ARTICOLUL DIN ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, SERIA 3, VOLUMUL 42, P. 122, PENTRU CALCULUL CANTITĂȚII DE CĂLDURA DEGAJATA IN UNITATEA DE

TIMP INTR-O PORȚIUNE OARECARE DINTR-UN CONDUCTOR, A DAT URMĂTOAREA ECUAȚIE A DESCOPERIT O ECUAȚIE.

VERDET, IN LUCRAREA LUI [174], PREZINTĂ CA, LA PRIMA VEDERE, SE PARE CA ACEASTA FORMULA NU CORESPUNDE PENTRU ELECTROLIȚI, DEOARECE INTR-UN CONDUCTOR SOLID PUTEM CONSIDERA LUCRUL FORȚELOR ELECTRICE CA FIIND SINGURA IMPLICATA IN PRODUCEREA CĂLDURII, ȘI SE PUNE ÎNTREBAREA DACA INTR-UN ELECTROLIT O PORȚIUNE DIN ACEST LUCRU ESTE ABSORBIT DE DESCOMPUNEREA ELECTROLITULUI. PRIN ANALIZA MAI ATENTĂ A ACESTEI PROBLEME SE POATE CONSTATA CĂ, PENTRU O PORȚIUNE DE ELECTROLIT CARE NU CONȚINE NICI UN ELECTROD, LUCRUL NEGATIV AL DESCOMPUNERII UNUI NUMĂR OARECARE DE MOLECULE ESTE EXACT COMPENSAT DE LUCRUL POZITIV AL RECONSTITUIRII SIMULTANE AL UNUI NUMĂR EGAL DE MOLECULE [174]. DIN ACEASTA ANALIZA SE POATE FORMULA CONCLUZIA CA FORMULA TREBUIE SA SE APLICE LA CAZUL ELECTROLIȚILOR CA ȘI IN CAZUL CONDUCTORILOR SOLIZI [174].

CLAUSIUS A EXAMINAT MAI DE APROAPE MANIERA IN CARE SE OPEREAZA DESCOMPUNERILE ELECTROCHIMICE, SI, DUPA PAREREA LUI, EXISTA O CONTRADICȚIE INTRE IDEILE GENERALE ADMISE DE GROTHUSS SI FARADAY SI EXPERIENȚA [174]. CONFORM CU CLAUSIUS DACA MODELAM UN ELECTROLIT LICHID CA FORMAT DIN MOLECULE COMPUSE, RAMASE IN REPAUS SAU OSCILAND SIMPLU IN JURUL POZIȚIEI LOR DE ECHILIBRU, SI CA O FORȚA ELECTRICA ACȚIONEAZA ASUPRA ACESTUI LICHID, CARE DEPLASEAZA IN DIRECȚII OPUSE ELEMENTELE ELECTRONEGATIVE SI ELECTROPOZITIVE ALE FIECAREI MOLECULE, ACESTE ELEMENTE FIIND MOLECULELE SIMPLE SAU COMPUSE CARE SE DEGAJA SEPARAT LA SUPRAFAȚA CELOR DOI ELECTROZI, CARE SUNT IONII LUI FARADAY, EFECTUL ACESTEI FORTE VA FI DUBLU [174]. CLAUSIUS CONSIDERA CA ELEMENTELE FIECAREI MOLECULE SE SEPARA SI SE MIȘCA IN SENSURI OPUSE, ASTFEL INCAT ELEMENTUL ELECTROPOZITIV AL UNEI MOLECULE SE COMBINA CU ELEMENTUL ELECTRONEGATIV AL MOLECULEI URMATOARE [174]. CLAUSIUS A COMPLETAT CA, PENTRU A SEPARA CELE DOUA ELEMENTE

ALE UNEI MOLECULE COMPUSE, ESTE NECESARA O FORȚA DE O MARIME DETERMINATA, SI A AJUNS LA CONCLUZIA CA ATATA TIMP CAT FORȚA CARE ACȚIONEAZA ASUPRA MOLECULELOR CONDUCTORULUI NU ATINGE ACEASTA VALOARE, DESCOMPUNEREA ESTE IMPOSIBILA, SI IN MOMENTUL IN CARE EA ATINGE ACEASTA VALOARE, UN MARE NUMAR DE MOLECULE SUNT SIMULTAN DESCOMPUSE VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252. CONFORM CU CLAUSIUS, IN ALȚI TERMENI, ATATA TIMP CAT FORȚA ESTE SUB O ANUMITA LIMITA, NU ESTE CURENT, SI CAND ACEASTA LIMITA ESTE DEPAȘITA BRUSC SE NAȘTE UN CURENT INTENS (VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252).

ACEASTA CONCLUZIE ESTE EVIDENT CONTRARA EXPERIENȚEI CONFORM CU LUCRAREA VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252. CONFORM CU LUCRAREA VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252 PENTRU A SCAPA CLAUSIUS A RECURS LA O IDEE DESPRE CONSTITUTIA LICHIDELOR, PE CARE A DEZVOLTAT-O INTR-O LUCRARE PUBLICATA IN ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, SERIA 3, VOLUMUL 4, PAGINA 497. CONFORM CU LUCRAREA VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252 NE AMINTIM CA CLAUSIUS IN ACEEA LUCRAREA, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, SERIA 3, VOLUMUL 4, PAGINA 497, A CONSIDERAT MOLECULELE UNUI LICHID ANIMATE DE MISCARI DE TRANSLATIE, DE ROTATIE, SI DE OSCILATIE, IN ASA FEL INCAT ELE I-SI SCHIMBA NENCETAT LOCUL LOR UNELE CU ALTELE, INSA RAMAN SUPUSE CONDITIEI DE INVARIABILITATE A DISTANTEI LOR MEDII. VERDET, IN LUCRAREA VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252, PREZINTA MAI DEPARTE CA CLAUSIUS, IN ARTICOLUL DIN ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, SERIA 3, VOLUMUL 42, P. 122, SUSTINE CA DACA SE CONSIDERA DOUA MOLECULE A SI B, CARE SE APROPIE UNA DE CEALALTA IN TIMPUL ACESTEI MIȘCARI LA O DISTANTA MULT MAI MICA DECAT DISTANTA LOR MEDIE, PUTEM SA TRAGEM CONCLUZIA CA, IN ANUMITE CAZURI, ATRACȚIA ELEMENTULUI NEGATIV AL MOLECULEI A ASUPRA ELEMENTULUI POZITIV AL MOLECULEI B DEPAȘEȘTE ATRACȚIILE RECIPROCE ALE CELOR DOUA ELEMENTE ALE ACELORASI MOLECULE; REZULTA CA ELEMENTUL NEGATIV AL MOLECULEI A SE COMBINA CU ELEMENTUL POZITIV AL

MOLECULEI B, SI CELELALTE DOUA ELEMENTE, ADICA ELEMENTUL POZITIV AL MOLECULEI A SI ELEMENTUL NEGATIV AL MOLECULEI B, SAU SE COMBINA INTRE ELE, SAU SE APROPIE DE ALTE MOLECULE COMPUSE PE CARE LE DESCOMPUN LA RANDUL LOR, SI ASA MAI DEPARTE. VERDET, IN LUCRAREA VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252, PREZINTA MAI DEPARTE CA CLAUSIUS, IN ARTICOLUL DIN ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, SERIA 3, VOLUMUL 42, P. 122, SUSTINE CA DACA ACUM O FORȚA ELECTRICA ACȚIONEAZA ASUPRA UNUI LICHID COMPUS IN MODUL PREZENTAT MAI SUS, EFECTUL EI ESTE DE A DIRIJA CATRE ELECTRODUL POZITIV TOATE ELEMENTELE NEGATIVE, SI CATRE ELECTRODUL NEGATIV TOATE ELEMENTELE POZITIVE. VERDET, IN LUCRAREA VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252, PREZINTA MAI DEPARTE CA CLAUSIUS, IN ARTICOLUL DIN ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, SERIA 3, VOLUMUL 42, P. 122, SUSTINE CA ACESTA ESTE SINGURUL EFECT AL TRECERII CURENTULUI.

LA VREMEA RESPECTIVA SE CUNOȘTEA CREȘTEREA CONDUCTIBILITAȚII CARE REZULTA PENTRU LICHIDELE ELECTROLIZABILE CU CREȘTEREA TEMPERATURII CONFORM CU LUCRAREA VERDET, ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE, 1858, V 53 P 252.

32.13. OXIDAREA UNUI MILIGRAM DE ZINC

EFECTELE PRODUSE DE CURENTUL ELECTRIC SUNT DIFERITE DE CELE PRODUSE DE ELECTRICITATEA STATICA [175].

CEL PRODUS DE CURENT SE NUMEȘTE ACȚIUNE DINAMICA, ȘI AL DOILEA, CEL PRODUS DE ELECTRICITATEA STATICA SE NUMEȘTE ACȚIUNE STATICA [175].

PENTRU MASURAREA CURENTULUI, PELTIER A FOLOSIT UN AC MAGNETIC ȘI UN MULTIPLICATOR CE 3000 DE SPIRE [175].

PELTIER A DETERMINAT CURENTUL NECESAR ȘI TIMPUL IN CARE SE MENȚINE ACEST CURENT PENTRU OXIDAREA UNUI MILIGRAM DE ZINC [175].

32.14. MASURAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A UNEI BATERII

CURENTUL ELECTRIC ESTE MISCAREA SARCINILOR ELECTRICE [147].

INTENSITATEA CURENTULUI ESTE SARCINA Q IMPARTITA LA TIMPUL T [147]:

$$I = \frac{Q}{t} \quad (1)$$

TENSIUNEA ESTE EGALA CU DIFERENTA DE POTENTIAL DINTRE DOUA PUNCTE SI SE NOTEAZA CU V [147].

DIFERENTA DE POTENTIAL DINTRE DOUA PUNCTE ESTE LUCRUL MECANIC W PRODUS PENTRU MISCAREA SARCINII Q INTRE CELE DOUA PUNCTE SI SARCINA [147]:

$$V = \frac{W}{Q} \quad (2)$$

LEGEA LUI OHM ESTE VALABILA CAND REZISTENTA R NU DEPINDE DE INTENSITATEA CURENTULUI SI REZISTENTA R ESTE DATA DE [147]:

$$R = \frac{V}{I} \quad (3)$$

DIN ECUATIA (3) SE POATE CALCULA TENSIUNEA V:

$$V = RI \quad (4)$$

REZISTORUL SE NOTEAZA CA IN FIG. 1. [147].

CELULA ELECTROCHIMICA SAU BATERIA SE NOTEAZA CA IN FIG. 2. [147].

AMPERMETRUL SE NOTEAZA CA ÎN FIG. 3. [147].

VOLTMETRUL SE NOTEAZA CA ÎN FIG. 4. [147].

REZISTENTA REOSTATULUI SE POATE VARIA CONTINUU [176].
REOSTATUL SE REPREZINTA CA ÎN FIG. 5. [176].

FOLOSIND MONTAJUL DIN FIG. 6. TESIUNEA DE LA CAPETELE REZISTORULUI R ESTE OPUSA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A BATERIEI CARE SUNTEAZA REZISTORUL R SI CAND CELE DOUA TENSIUNI SUNT EGALE ATUNCI INTENSITATEA CURENTULUI PRIN BATERIE ESTE ZERO SI AMPERMETRUL INDICA UN CURENT CU INTENSITATEA ZERO [176]. NOI PROPUNEM O METODA DE MASURARE A TENSIUNII ELECTROMOTOARE A BATERIEI FOLOSIND MONTAJUL DIN FIG. 6. ÎN CARE PRIN VARIATIA REZISTENTEI REOSTATULUI SE OBTINE OF TENSIUNE LA CAPETELE REZISTORULUI R EGALA CU TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI DEOARECE ACEASTA TENSIUNE VARIAZA CONFORM ECUATIEI (4), REZULTA UN CURENT ZERO PRIN BATERIE SI UN CURENT ZERO INDICAT DE AMPERMETRU, SI MASURAND CURENTUL PRIN REZISTORUL R SI CUNOSCAND REZISTENTA REZISTORULUI R, CU ECUAȚIA (4) SE POATE CALCULA TENSIUNEA DE LA CAPETELE REZISTORULUI SI TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI.

NOI PROPUNEM PENTRU MASURAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A UNEI BATERII MONTAJUL DIN FIG. 7. IN CARE PRIN VARIATIA REZISTENTEI REOSTATULUI SE OBTINE O TENSIUNE LA CAPETELE REOSTATULUI EGALA CU TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI PENTRU CARE CURENTUL PRIN BATERIE ESTE ZERO SI AMPERMENTRUL INDICA UN CURENT ZERO, SE MASOARA INTENSITATEA CURANTULUI PRIN REOSTAT CU AMPERMETRUL, DUPA CARE SE SCOATE REOSTATUL, SE APLICA O TENSIUNE DE LA O BATERIE PE REOSTATUL LEGAT LA UN AMPERMETRU, SE MASOARA TENSIUNEA SI INTENSITATEA CURENTULUI, SE CALCULEAZA REZISTENTA REOSTATULUI CU FORMULA (3) SI SE CALCULEAZA TENSIUNEA ELECTROMOTOARE CU FORMULA (4). PENTRU DETERMINAREA REZISTENTEI REOSTATULUI PROPUNEM FOLOSIREA MONTAJULUI DIN FIG. 8.

NOI PROPUNEM PENTRU MASURAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A UNEI BATERII MONAJUL DIN FIG. 9. IN CARE PRIN VARIATIA REZISTENTEI REOSTATULUI OBTINEM VARIATIA CURENTULUI PRIN REZISTOR SI O TENSIUNE LA CAPETELE ANSAMBLULUI REZISTOR REOSTAT EGALA CU TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI, SE MASOARA INTENSITATEA

CURRENTULUI PRIN ANSAMBLUL REZISTOR REOSTAT, DUPA CARE SE SCOATE ANSAMBLUL REZISTOR REOSTAT SI SE DETERMINA REZISTENTA ANSAMBLULUI REZISTOR REOSTAT FOLOSIND MONTAJUL DIN FIG. 8. IN CARE IN LOC DE REZISTOR SE INLOCUIESTE ANSAMBLUL REZISTOR REOSTAT, SE CALCULEAZA REZISTENTA ANSAMBLULUI REZISTOR REOSTAT CU FORMULA (3) SI SE CALCULEAZA TENSIUNEA ELECTROMOTOARE CU FORMULA (4).

1.NOI PROPUNEM O METODA DE MASURARE A TENSIUNII ELECTROMOTOARE A BATERIEI FOLOSIND MONTAJUL DIN FIG. 6. IN CARE PRIN VARIATIA REZISTENTEI REOSTATULUI SE OBTINE O TENSIUNE LA CAPETELE REZISTORULUI R EGALA CU TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI DEOARECE ACEASTA TENSIUNE VARIAZA CONFORM ECUATIEI (4), REZULTA UN CURENT ZERO PRIN BATERIE SI UN CURENT ZERO INDICAT DE AMPERMETRU, SI MASURAND CURENTUL PRIN REZISTORUL R SI CUNOSCAND REZISTENTA REZISTORULUI R, CU ECUATIA (4) SE POATE CALCULA TENSIUNEA DE LA CAPETELE REZISTORULUI SI TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI.

2.NOI PROPUNEM PENTRU MASURAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A UNEI BATERII MONTAJUL DIN FIG. 7. IN CARE PRIN VARIATIA REZISTENTEI REOSTATULUI SE OBTINE O TENSIUNE LA CAPETELE REOSTATULUI EGALA CU TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI PENTRU CARE CURENTUL PRIN BATERIE ESTE ZERO SI AMPERMENTRUL INDICA UN CURENT ZERO, SE MASOARA INTENSITATEA CURANTULUI PRIN REOSTAT CU AMPERMETRUL, DUPA CARE SE SCOATE REOSTATUL, SE APLICA O TENSIUNE DE LA O BATERIE PE REOSTATUL LEGAT LA UN AMPERMETRU, SE MASOARA TENSIUNEA SI INTENSITATEA CURENTULUI, SE CALCULEAZA REZISTENTA REOSTATULUI CU FORMULA (3) SI SE CALCULEAZA TENSIUNEA ELECTROMOTOARE CU FORMULA (4). PENTRU DETERMINAREA REZISTENTEI REOSTATULUI PROPUNEM FOLOSIREA MONTAJULUI DIN FIG. 8.

3.NOI PROPUNEM PENTRU MASURAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A UNEI BATERII MONAJUL DIN FIG. 9. IN CARE PRIN VARIATIA REZISTENTEI REOSTATULUI OBTINEM VARIATIA CURENTULUI PRIN REZISTOR SI O TENSIUNE LA CAPETELE ANSAMBLULUI REZISTOR REOSTAT EGALA CU

TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI, SE MASOARA INTENSITATEA CURENTULUI PRIN ANSAMBLUL REZISTOR REOSTAT, DUPA CARE SE SCOATE ANSAMBLUL REZISTOR REOSTAT SI SE DETERMINA REZISTENTA ANSAMBLULUI REZISTOR REOSTAT FOLOSIND MONTAJUL DIN FIG. 8. IN CARE IN LOC DE REZISTOR SE INLOCUIESTE ANSAMBLUL REZISTOR REOSTAT, SE CALCULEAZA REZISTENTA ANSAMBLULUI REZISTOR REOSTAT CU FORMULA (3) SI SE CALCULEAZA TENSIUNEA ELECTROMOTOARE CU FORMULA (4).

4.SCOATERA REOSTATULUI SI ANSAMBLULUI REZISTOR REOSTAT DIN MONTAJELE PREZENTATE SI DETERMINAREA SEPARATA A REZISTENTELOR ACESTORA CU MONTAJUL DIN FIG. 8.

DESENELE EXPLICATIVE

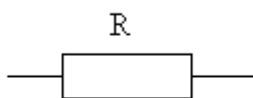


FIG. 1.



FIG. 2.



FIG. 3.

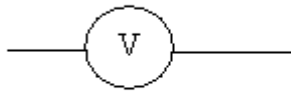


FIG. 4.

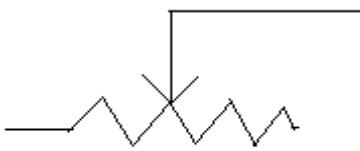


FIG. 5.

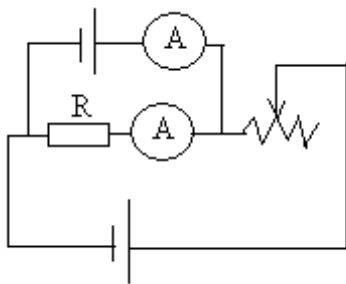


FIG. 6.

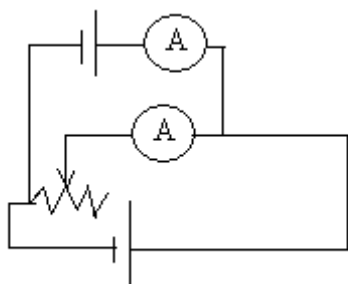


FIG. 7.

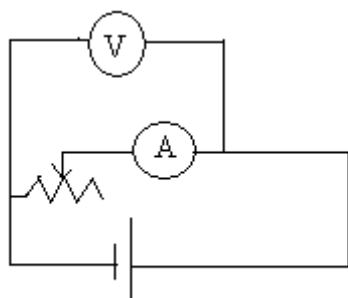


FIG. 8.

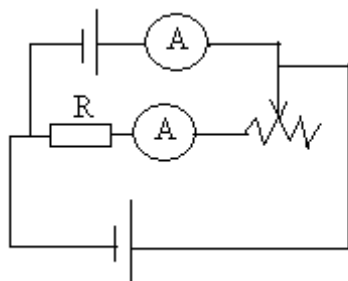


FIG. 9.

REZUMATUL INVENTIEI

PROPUNEM DETERMINAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE A UNEI BATERII FOLOSIND CIRCUITELE DIN FIGURILE FIG. 6., FIG. 7. SI FIG. 9. ÎN CARE PRIN VARIATIA REZISTENTEI REOSTATULUI SE OBTINE O TENSIUNE EGALA CU TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A BATERIEI CAND AMPERMETRUL INDICA UN CURENT CU INTENSITATEA ZERO SI CALCULAREA ACESTEI TENSIUNI

ELECTROMOTOARE CONFORM CU CELE PREZENTATE ÎN DESCIEREA INVENTIEI.

32.15. PILĂ VOLTAICĂ CU DOUA CAPSULE

OERESTED A DESCOPERIT CA O PILA VOLTAICA, CU UN ELECTROD DE CUPRU, UN ELECTROD DE ZINC, ȘI UN AMESTEC DE APA. ACID SULFURIC ȘI ACID NITRIC DEVIAZĂ UN AC MAGNETIC [156].

BEQUEREL A DESCOPERIT EFECTELE ELECTRICE CARE SE MANIFESTĂ ÎN ACȚIUNEA CHIMICĂ A METALELOR ÎN CONTACTUL CU SOLUȚIILE SALINE, ȘI ACEEA ÎN CONTACTUL SOLUȚIILOR ÎNTRE ELE, CONFORM CU LUCRAREA [177]. BEQUEREL NUMEȘTE ACESTE EFECTE ELECTROCHIMICE, CONFORM CU LUCRAREA [177].

FOLOSIREA UNEI DIAFRAGME CARE SEPARĂ DOUĂ LICHIDE DIFERITE ÎN CARE SE SCUFUNDĂ DOI ELECTROZI, CÂTE UN ELECTROD ÎN FIECARE LICHID, A FOST INTRODUSĂ DE BEQUEREL [177].

PILA DANIEL AVEA UN ELECTROD DE ZINC ȘI UNUL DE CUPRU, CONFORM CU LUCRAREA [178].

ÎN LUCRAREA [179] ESTE PREZENTAT CA S-A DETERMINAT EXPERIMENTAL TENSIUNEA ELECTROMOTOARE A PILEI DANIEL ȘI S-A OBȚINUT VALOAREA 1,12 VOT, ȘI CONFORM CU LUCRAREA [118] FORȚA ELECTROMOTOARE A UNEI CELULE ELECTROCHIMICE, PILA VOLTAICA, CU UN ELECTROD DE CUPRU ȘI UNUL DE ZINC, ESTE DE 1,1 VOLT.

UN APARAT PENTRU MASURAREA TENSIUNII ELECTRICE SE BAZEAZA PE PRINCIPIUL FORȚEI CARE ACȚIONEAZA ASUPRA UNUI CONDUCTOR LINIAR PARCURS DE UN CURENT PERPENDICULAR PE LINIILE UNUI CAMP MAGNETIC UNIFORM, CARE ESTE DAT DE [180], ȘI CARE ESTE

$$F = B I L \quad (1)$$

UNDE B ESTE INDUCȚIA MAGNETICA, I ESTE INTENSITATEA CURENTULUI, ȘI L ESTE LUNGIMEA CONDUCTORULUI ÎN CAMPUL MAGNETIC.

INVENȚIA CONSTA INTR-O PILA VOLTAICA FORMATA DIN DOUA CAPSULE, INTR-UNUL ESTE ACID SULFURIC AMESTECAT CU APA IN PROPORȚIE DE 50 % DE VOLUME, IN CEALALTA ESTE SARAMURA SATURATA SAU DILUATA TREPTAT PANA LA 50 % APA CU SARAMURA SATURATA, SARAMURA SATURATA SE OBTINE PRIN DIZOLVAREA SARII DE BUCATARIE, CLORURA DE SODIU NaCl , IN APA PANA CAND RAMANE SARE NEDIZOLVATA, IN CAPSULA CU ACID SULFURIC DILUAT SE INTRODUC ELECTRODUL DE CUPRU, IN CAPSULA CU SARAMURA SE INTRODUC ELECTRODUL DIN FIER, ȘI LEGATURA DINTRE CAPSULE SE REALIZEAZA CU O BUCATA DE LANA, ȚESATURA SAU STOFA IMBIBATA IN APA SAU SARAMURA, CARE TRECE PESTE GURILE CELOR DOUA CAPSULE ȘI ARE CAPETELE SCUFUNDATE IN CELE DOUA LICHIDE, TENSIUNEA ELECTROMOTOARE SE MASOARA CU ACUL MAGNETIC, SAU CU UN APARAT PENTRU MASURAREA TENSIUNII ELECTRICE BAZAT PE PRINCIPIUL FORȚEI CARE ACȚIONEAZA ASUPRA UNUI CONDUCTOR LINIAR PARCURS DE UN CURENT PERPENDICULAR PE LINIILE UNUI CAMP MAGNETIC $F = B I L$ ȘI CARE SE COMPARA CU DEVIATIA PRODUSA DE O PILA DANIEL PENTRU AFLAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE PENTRU ETALONAREA ACULUI MAGNETIC, ȘI NOI ȘTIM CA SAREA IN CONTACT CU FIERUL NU PRODUCE GAZE PEA MULTE ȘI PEA TOXICE, ȘI CUPRUL IN CONTACT CU AMESTECUL DE APA ȘI ACID SULFURIC NU PRODUCE GAZE PEA MULTE ȘI PEA TOXICE, DEȘI AM OBSERVAT DOAR CA NU SE PRODUC BULE ȘI ATUNCI NU SE POT EMITE GAZE.

1.REVENDICAM O PILA VOLTAICA CARACTERIZATA PRIN ACEEA CA CONSTA INTR-O PILA VOLTAICA FORMATA DIN DOUA CAPSULE, INTR-UNUL ESTE ACID SULFURIC AMESTECAT CU APA IN PROPORȚIE DE 50 % DE VOLUME, IN CEALALTA ESTE SARAMURA SATURATA SAU DILUATA TREPTAT PANA LA 50 % APA CU SARAMURA SATURATA, SARAMURA SATURATA SE OBTINE PRIN DIZOLVAREA SARII DE BUCATARIE, CLORURA DE SODIU NaCl , IN APA PANA CAND RAMANE SARE NEDIZOLVATA, IN CAPSULA CU ACID SULFURIC DILUAT SE INTRODUC ELECTRODUL DE CUPRU, IN CAPSULA CU SARAMURA SE INTRODUC ELECTRODUL DIN FIER, ȘI LEGATURA DINTRE CAPSULE SE REALIZEAZA CU O BUCATA DE LANA, ȚESATURA SAU STOFA IMBIBATA IN APA SAU SARAMURA, CARE TRECE PESTE GURILE CELOR DOUA CAPSULE ȘI

ARE CAPETELE SCUFUNDATE IN CELE DOUA LICHIDE, PILA CARE ESTE REPREZENTATA IN FIGURA 1, TENSIUNEA ELECTROMOTOARE SE MASOARA CU ACUL MAGNETIC, SAU CU UN APARAT PENTRU MASURAREA TENSIUNII ELECTRICE BAZAT PE PRINCIPIUL FORȚEI CARE ACȚIONEAZA ASUPRA UNUI CONDUCTOR LINIAR PARCURS DE UN CURENT PERPENDICULAR PE LINIILE UNUI CAMP MAGNETIC $F = B I L$ ȘI CARE SE COMPARA CU DEVIATIA PRODUSA DE O PILA DANIEL PENTRU AFLAREA TENSIUNII ELECTROMOTOARE PENTRU ETALONAREA ACULUI MAGNETIC, ȘI NOI ȘTIM CA SAREA IN CONTACT CU FIERUL NU PRODUCE GAZE PEA MULTE ȘI PEA TOXICE, ȘI CUPRUL IN CONTACT CU AMESTECUL DE APA ȘI ACID SULFURIC NU PRODUCE GAZE PEA MULTE ȘI PEA TOXICE, DEȘI AM OBSERVAT DOAR CA NU SE PRODUC BULE ȘI ATUNCI NU SE POT EMITE GAZE.

32.16. PILĂ CU SULFAT DE CUPRU, ELECTROD DE CU, ȘI SARAMURĂ CU ELECTROD DE FE

ÎN ACEST TIP DE PILA VOLTAICA FORMATA DIN DOUA CAPSULE, INTR-O CAPSULA ESTE SULFAT DE CUPRU DILUAT CU APA, IN CARE SE SCUFUNDA UN ELECTROD DE CU, CA IN LUCRAREA [161], IN CEALALTA CAPSULA ESTE SARAMURA DILUATA CU APA, IN CARE SE SCUFUNDA UN ELECTROD DE FE, ȘI O CARPA UMEDA, SAU INMUIATA IN SARAMURA, ARE CAPETELE SCUFUNDATE IN CELE DOUA CAPSULE ȘI TRECE PESTE MARGINILE SUPERIOARE ALE CAPSULELOR. CAND CARPA ESTE SCUFUNDATA IN SARAMURA, CONDUȚIA PRIN SARAMURA SE REALIZEAZA DE IONII DE Na^+ ȘI Cl^- DIZOLVAȚI IN SARAMURA, CA IN LUCRAREA [161]. CONDUȚIA CURENTULUI IN APA SE PRODUCE PRIN IONII DE HIDROGEN ȘI HIDROXIL, ȘI SALTUL DE PROTONI DE LA UN ION LA ALTUL [181].

PARTEA A II-A CHIMIE CUANTICĂ

1. MOLECULA DE HIDROGEN

33. **ENERGIA MOLECULEI DE HIDROGEN ÎN MODELUL LEGĂTURII DE VALENȚĂ CU STĂRI IONICE**
34. **OPTIMIZAREA DISTANTEI INTERNUCLEARE PENTRU MOLECULA DE HIDROGEN CU STĂRI IONICE SI CONSTANTA DE ECRANARE CU METODA LEGATURII DE VALENȚĂ**

Cele mai simple funcții de undă pentru cei electroni din cei doi atomi de hidrogen din molecula de hidrogen, care pot fi folosite în toate calculele din acest volum, și cu o mică modificare și în metoda îmbunătățită cu un coeficient constant în exponent tot din acest volum, sunt cele scrise în unități atomice, sunt cele date de Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933), și sunt următoarele

$$a(r_1) = e^{-r_1}$$

și

$$a(r_2) = e^{-r_2}$$

unde r_1 și r_2 sunt distanțele primului electron față de primul nucleu căruia îi aparține și al celui de al doilea electron față de al doilea nucleu.

Capul de tabel din toate tabelele din acest volum conține primele trei distanțe internucleare în ordine crescătoare, și următoarele două au fost alese în jurul celei de a doua distanțe pentru mărirea preciziei, și din această cauză nu sunt în ordine crescătoare.

În această carte efectuăm calcule algebrice de înmulțire de polinoame de gradul I, care dau argumentele de sub integrale, pe care noi le-am calculat cu programul MATLAB R2014a. Ulterior, din condiția de minim a energiei obținută prin derivarea acestuia, ajungem la o ecuație de gradul II în funcție de un parametru pe care-l calculăm.

Calculăm procentul funcției de unda Heitler-London, notată cu c , în funcția de unda cu stări ionice a moleculei de hidrogen cu metoda Slater-Pauling, cu funcțiile de unda set de baza și de ordinul întâi și metoda dată de Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933). Aceasta funcție de unda set de baza este

$$\begin{aligned}\psi &= c[a(1)b(2) + b(1)a(2)] + a(1)a(2) + b(1)b(2) \\ &= c(ab + ba) + aa + bb\end{aligned}\quad (1)$$

unde a si b sunt functiile de unda 1s ale celor doi atomi de hidrogen, 1 si 2 reprezinta atomul 1 si 2, si c este un parametru. Conform cu lucrarea Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011 functiile de unda atomice 1s ale atomului de hidrogen, a si b , sunt date de ecuatie

$$a(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (2)$$

unde r este distanta electronului fata de nucleu, si a_0 este raza Bohr.

In invenție calculam energia moleculei si parametrul c din ecuația (1) pentru a obține distanta internucleară corespunzătoare minimului energiei.

Conform acestei metode energia moleculei de hidrogen este

$$W = \frac{W_N}{d} = \frac{\int H [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau}{\int [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau} \quad (3)$$

Daca nu includem în Hamiltonianul H energia de repulsie Coulombiana dintre nuclee, care este funcție numai de distanta internucleară, din ecuația (3) obținem

$$W = \frac{c^2 A + cB + C}{c^2 D + cE + F} \quad (4)$$

In aceasta metoda de aplica principiul ca parametrul c din ecuația (4) sa se calculeze din condiția de minim a energiei, care este

$$\frac{dW}{dc} = 0 \quad (5)$$

Din ecuațiile (4) si (5) rezulta

$$\frac{dW}{dc} = \frac{c^2(AE - BD) + 2c(AF - CD) + BF - CE}{(c^2 D + cE + F)^2} = 0 \quad (6)$$

si obținem o ecuație de gradul 2 în parametrul c

$$Mc^2 + Nc + O = 0 \quad (7)$$

Notam distanta internucleară

$$d = pa_0 \quad (8)$$

unde a_0 este raza Bohr. Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) a obținut minimul energiei moleculei de hidrogen în acest model pentru

$$p = 1.67 \quad (9)$$

la care pentru parametrul c a obținut valoarea 6.322 și pentru energia moleculei a obținut valoarea -30.3443 eV.

Cu metoda Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931)

$$W = \frac{\langle ab|H|ab\rangle + \langle ab|H|ba\rangle}{1 + \langle ab|ba\rangle} \quad (10)$$

noi am obținut pentru minimul energiei

$$p = 1.65 \quad (11)$$

pentru care am obținut energia minima a moleculei egala cu -30.4802 eV. în invenție calculam parametrul c în funcție de distanta internucleară p .

Conform lui Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) potențialul moleculei de hidrogen este

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (12)$$

și conform celor prezentate mai sus în calculele noastre nu includem energia de repulsie Coulombiană dintre nuclee.

În invenție folosim un orbital atomic pentru atomul de hidrogen cu constanta de ecranare de forma data de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933)

$$a(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-Z \frac{r}{a_0}} \quad (13)$$

unde Z este constanta de ecranare. Pentru constanta de ecranare si pentru distanta internucleara pentru care energia moleculei de hidrogen este minima folosim rezultatele obținute de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933), adică

$$Z = 1.193 \quad (14)$$

$$p = 1.41 \quad (15)$$

În aceeași lucrare cu valorile din ecuațiile (14) și (15) pentru parametrul c din ecuația (1) a fost obținută valoarea

$$c = 3.9 \quad (16)$$

Tabelul 1. Integralele calculate de noi pentru calculul energiei moleculei de hidrogen pentru valoarea constantei de ecranare $Z=1.193$ și valorile distanței internucleare $p=1.21, 1.41, 1.61$. Capul de tabel din toate tabelele din acest volum conține primele trei distanțe internucleare în ordine crescătoare, și următoarele două au fost alese în jurul celei de a doua distanțe pentru mărirea preciziei, și din această cauză nu sunt în ordine crescătoare.

Mărimea sau integrala	Notația	Valoarea totală K pentru p 1.21 1.41 1.61 1.46 1.51
$E_1 = -E_0/Z^4$	K_1	-6.7139

$\langle ab ba\rangle$	K_2	0.1904 0.1577 0.1282 0.1500 0.1425
$\langle a(1) V_1 b(1)\rangle$	K_3	-11.0253 -9.5330 -8.1774 -9.1807 -8.8372
$\left\langle a(1)\left -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2\right b(1)\right\rangle$	K_4	4.7071 3.6868 2.8241 3.4564 3.2360
$\langle a(1) b(1)\rangle$	K_5	0.4363 0.3971 0.3581 0.3873 0.3775
E_N	K_6	22.4793 19.2908

		16.8944
		18.6301
		18.0132
$\left\langle ab \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right ab \right\rangle$	K_7	5.5618
		5.2128
		4.8712
		5.1264
		5.0405
$\left\langle ab \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right ba \right\rangle$	K_8	3.4772
		2.8089
		2.2273
		2.6551
		2.5068
$\left\langle a(1)b(2) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_9	-6.7387
		-6.0736
		-5.4955
		-5.9212
		-5.7741
$\langle a(1) b(1) \rangle \left\langle b(2) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(2) \right\rangle$	K_{10}	-4.8109
	$= K_3$	-3.7857
	K_5	-2.9279
		-3.5557

		-3.3360
$\left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_1	2.1723

Tabelul 2. Valorile integralelor calculate de noi folosite în calculul energiei moleculei de hidrogen cu metoda Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stări ionice cu constanta de ecranare în funcție de diferite valori ale distanței internucleare.

Mărimea sau integrala	Notăția	Valoarea	Valoarea pentru $p =$ 1.21 1.41 1.61 1.46 1.51
$A_1 = 2 \times K_1 + K_7 + 2 \times K_9 + 2 \times K_4 \times K_5 + 2$ $\times K_3 \times K_5 + K_8 + 2 \times K_{10} + 2 \times J_1$			-28.6573 -25.4234 -22.6651 -24.6896 -23.9852
Energia moleculei de hidrogen data de ecuația (10) (eV)			-30.8602 -31.0962 -30.8153

			-31.0607 -30.9993
Energia de legătura cu ecuația (10) (eV)			3.6602 3.8962 3.6153 3.8607 3.7993
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) b(2) \rangle$	K_{12}	$-Z^2 E_0 K_2$	-3.6854 -3.0525 -2.4815 -2.9034 -2.7583
$\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{13}	K_8	3.4772 2.8089 2.2273 2.6551 2.5068
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{14}	K_{10}	-4.8109 -3.7857 -2.9279 -3.5557 -3.3360

$J_2 = \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_2	$J_{20}K_5$ $= -K_3K_5$ $(Z-1)$	0.9285 0.7306 0.5651 0.6862 0.6439
$A_2 = 2 \cdot K_{12} + K_{13} + 2 \cdot K_{14} + 2J_2$			-11.6584 -9.4062 -7.4613 -8.8906 -8.3941
$K_{15} = \left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right b(1) \right\rangle$	K_{15}		11.4055
$K_{16} = \left\langle b(1) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right b(1) \right\rangle K_{15}'$	K_{16}	K_9	-6.7387 -6.0736 -5.4955 -5.9212 -5.7741
$K_{15}' = \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{15}'	$1/Z^3$	0.5890
$K_{17} = \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{17}		5.5559 5.1986 4.8505 5.1117

			5.0246
$K_{18} = - \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{18}	-27.2 $K_{15}'I_{18}$ $/3.14$ $I_{18} = I_{15}'$ $\neq 3.14$	-11.2611 -11.2611 -11.2611 -11.2611 -11.2611
$K_{19} = - \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{19}	K_{18}	-11.2611 -11.2611 -11.2611 -11.2611 -11.2611
$A_3 = 2 \cdot K_{15} \cdot K_{15}' + 2 \cdot K_{16} + K_{17} + K_{18} + K_{19}$			-17.0091 -16.0362 -15.2281 -15.8183 -15.6112
$A = A_1 + A_2 + A_3$			-57.3248 -50.8657 -45.3545 -49.3985 -47.9905

$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle b(2) a(2) \rangle$	K_{20}	$(-\frac{E_0}{Z})$ $\cdot K_5$	-4.9743 -4.5270 -4.0817 -4.4152 -4.3034
$\left\langle b(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{21}	$(K_4 + K_3)$ $/Z^3$	-3.7211 -3.4431 -3.1528 -3.3713 -3.2988
$K_{22} = \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{22}		4.6497 4.1099 3.5958 3.9787 3.8490
$K_{23} = - \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{23}	$\frac{K_{10}}{K_5 Z^3}$ $= \frac{K_3}{Z^3}$	-6.4934 -5.6145 -4.8161 -5.4070 -5.2047
$K_{24} = - \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{24}	$K_9 Z^3 K_5$	-4.9926 -4.0953

			-3.3410
			-3.8938
			-3.7010
$J_3 = \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_3	$J_1 Z^3 K_5$	1.6095
			1.4648
			1.3207
			1.4286
			1.3924
$B_1 = K_{20} + K_{21} + K_{22} + K_{23} + K_{24} + J_3$			-13.9222
			-12.1052
			-10.4751
			-11.6800
			-11.2666
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{25}	K_{20}	-4.9743
			-4.5270
			-4.0817
			-4.4152
			-4.3034
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle b(1) a(1) \rangle$	K_{26} $\neq K_{21}$	$K_{15}K_5$ $+ K_{16}K_5$ $/K_{15}'$	-0.0159
			0.4340
			0.7428
			0.5235

			0.6045
$\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{27}		4.6386 4.0942 3.5771 3.9630 3.8329
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{28}	$-\frac{J_1 K_5 Z^3}{Z-1}$ $= I_{28} K_5$	-8.3392 -7.5894 -6.8428 -7.4018 -7.2146
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{29}	K_{23} $= \frac{K_{10}}{K_5 Z^3}$	-6.4934 -5.6145 -4.8161 -5.4070 -5.2047
$J_4 = \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_4	$J_2/(Z^3 K_5)$	1.2532 1.0836 0.9295 1.0435 1.0045
$B_2 = K_{25} + K_{26} + K_{27} + K_{28} + K_{29} + J_4$			-13.9310

			-12.1191 -10.4913 -11.6939 -11.2807
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) b(2) \rangle$	K_{30}	K_{20}	-4.9743 -4.5270 -4.0817 -4.4152 -4.3034
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right b(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{31}	K_{20}	-4.9743 -4.5270 -4.0817 -4.4152 -4.3034
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{32}	K_{22}	4.6497 4.1099 3.5958 3.9787 3.8490
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{33}	K_{23}	-6.4934 -5.6145 -4.8161

			-5.4070
			-5.2047
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{34}	K_{24}	-4.9926
			-4.0953
			-3.3410
			-3.8938
			-3.7010
$J_5 = \left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_5	J_3	1.6095
			1.4648
			1.3207
			1.4286
			1.3924
$J_6 = \left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_2} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_6	J_4	1.2532
			1.0836
			0.9295
			1.0435
			1.0045
$B_3 = K_{30} + K_{31} + K_{32} + K_{33} + K_{34} + J_5 + J_6$			-13.9222
			-12.1056
			-10.4745
			-11.6803
			-11.2667

$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right b(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{35}	K_{21} $= (K_4$ $+ K_3)/Z^3$	-3.7211 -3.4431 -3.1528 -3.3713 -3.2988
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) b(1) \rangle$	K_{36}	K_{26}	-0.0159 0.4340 0.7428 0.5235 0.6045
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{37}	K_{27}	4.6386 4.0942 3.5771 3.9630 3.8329
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{38}	K_{28}	-8.3392 -7.5894 -6.8428 -7.4018 -7.2146
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{39}	K_{29}	-6.4934 -5.6145

			-4.8161 -5.4070 -5.2047
$B_4 = K_{35} + K_{36} + K_{37} + K_{38} + K_{39}$			-13.9310 -12.1188 -10.4919 -11.6937 -11.2806
$B = 2(B_1 + B_2 + B_3 + B_4)$			-111.4128 -96.8975 -83.8656 -93.4959 -90.1891
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{40}	K_1	-6.7139
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{41}	$K_{26} / (K_5 Z^3)$	-0.0214 0.6437 1.2218 0.7961 0.9432
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{42}		6.9340 6.9175

			6.9008
			6.9157
			6.9121
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{43}	$I_{43} = I_{15}'$ $= 27.2$ $\frac{I_{15}'}{Z^3 3.14}$ $= K_{18}$	-11.2611 -11.2611 -11.2611 -11.2611 -11.2611
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{44}	$I_{44} = I_{16}'$ $K_{44} = K_{16}$ $= K_9$ $= K_{34}$ $/(K_5 Z^3)$	-6.7387 -6.0736 -5.4955 -5.9212 -5.7741
$J_7 = \left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_7	$\frac{J_3}{(K_5 Z^3)}$ $= J_1$	2.1723
$C_1 = K_{40} + K_{41} + K_{42} + K_{43} + K_{44} + J_7$			-15.6288 -14.3151 -13.1756 -14.0121 -13.7215
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle b(2) a(2) \rangle$	K_{45}	K_{12}	-3.6854

			-3.0525
			-2.4815
			-2.9034
			-2.7583
$\left\langle b(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle b(1) a(1) \rangle$	K_{46}	$K_{21} Z^3 K_5$ $= (K_4 + K_3) K_5$	-2.7569
			-2.3216
			-1.9168
			-2.2170
			-2.1145
$\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{47}	K_8	3.4772
			2.8089
			2.2273
			2.6551
			2.5068
$-\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{48}	K_{10}	-4.8109
			-3.7857
			-2.9279
			-3.5557
			-3.3360
$-\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{49}	K_{10}	-4.8109
			-3.7857
			-2.9279

			-3.5557
			-3.3360
$J_8 = \left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_8	J_2	0.9285
			0.7306
			0.5651
			0.6862
			0.6439
$C_2 = K_{45} + K_{46} + K_{47} + K_{48} + K_{49} + J_8$			-11.6941
			-9.7966
			-8.1330
			-9.3584
			-8.9347
$C = 2(C_1 + C_2)$			-54.6458
			-48.2234
			-42.6173
			-46.7409
			-45.3124

Tabelul. 3. Coeficienții din ecuațiile (4) și (7), parametrul c din ecuația (1), energia moleculei fără energia de interacțiune nucleară, energia totală a moleculei și energia de legătură a moleculei în funcție de distanța internucleară.

Coeficientul	Valoarea
--------------	----------

	pentru p= 1.21 1.41 1.61 1.46 1.51
A	-57.3248 -50.8657 -45.3545 -49.3985 -47.9905
B	-111.4128 -96.8975 -83.8656 -93.4959 -90.1891
C	-54.6458 -48.2234 -42.6173 -46.7409 -45.3124
D	1.0745

	1.0091
	0.9501
	0.9937
	0.9787
E	2.0559
	1.8710
	1.6870
	1.8248
	1.7786
F	1.0745
	1.0091
	0.9501
	0.9937
	0.9787
M	1.8617
	2.6096
	3.1702
	2.7666
	2.9130
N	-5.7574
	-5.3329
	-5.2015

	-5.2818
	-5.2422
O	-7.3696
	-7.5536
	-7.7879
	-7.6162
	-7.6763
c	4.0661
	3.0064
	2.5894
	2.8688
	2.7558
$W - E_N$	-53.5095
	-50.7315
	-48.2403
	-50.0804
	-49.4486
W	-31.0302
	-31.4407
	-31.3459
	-31.4503
	-31.4354

E_{leg}	3.8302
	4.2407
	4.1459
	4.2503
	4.2354

Toate calculele si Fig. 2 din invenție le-am realizat cu programul MATLAB R2014 a.

În Figura 2 am reprezentat energia moleculei de hidrogen în funcție de distanța internucleară calculată de noi cu metoda din Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) notată cu S, cu metoda din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stări ionice fără constantă de ecranare notată cu WSI, cu metoda din Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) cu ecranare notată cu SE, și cu metoda din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stări ionice și cu ecranare notată cu WSIE.

Tabelul 4. Variația energiei de interacțiune a electronilor între ei și cu nucleele și variația energiei de interacțiune a nucleelelor pe diferite intervale de distanțe internucleare.

Intervalu de distanță internucleară în unități a_0	Variația energiei de interacțiune a electronilor între ei și cu nucleele (eV)	$\frac{\Delta(W - E_N)}{\Delta p}$	Variația energiei de interacțiune a nucleelelor (eV)	$\frac{\Delta E_N}{\Delta p}$
1.41-1.46	0.6511		0.6607	
1.46-1.51	0.6318		0.6169	

Din tabelele 1 si 3 observam ca energia de interactiune a electronilor, $W - E_N$, creste cu cresterea distantei internucleare si energia de interactiune a nucleelor, E_N , scade cu cresterea distantei internucleare, si din tabelul 4 observam ca minimul energiei moleculei de hidrogen se afla la distanta internucleara la care derivata energiei electronilor în funcție de distanta internucleara este egala cu derivata energiei de interactiune a nucleelor în funcție de distanta internucleara.

În Figura 3 am reprezentat variatia medie a energiei electronilor raportata la distanta internucleara si variatia medie a energiei de interactiune a nucleelor raportata la distanta internucleara. Observam din Figura 3 si din tabelul 4 ca acest raport pentru electroni este mai mic decat pentru nuclee pe primul interval si se produce o scadere a energiei moleculei, si este mai mare pe al doilea interval si se produce o crestere a energiei.

În prezenta inventie calculam integralele folosite în calculul energiei moleculei de hidrogen cu stari ionice si cu constanta de ecranare cu metoda data de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) si prezentata în ecuatiile (3) – (7) si cu functia de unda atomica a atomului cu un electron cu constanta de ecranare data în ecuația (13) pentru distantele internucleare 1.21, 1.41, 1.46, 1.51, 1.61 unitati atomice.

Optimizarea exponentului, distantei internucleare, si energiei moleculei de hidrogen cu metoda legaturii de valenta (VB) au fost realizate în lucrarea Magnasco, V., Orbital exponent optimizatin în elementary VB calculations of the chemical bond în the ground state of simple molecular systems, J. Chem. Edu. 85, 1686-1691 (2008).

Observam ca valoarea minima a energiei moleculei de hidrogen obtinuta de noi cu metoda WSIE este cea mai apropiata de valoarea experimentală dintre cele patru metode calculate de noi, care, conform cu Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933), este de -31.9056 eV, inasa mai mare decat aceasta, si satisface principul Slater-Pauling din Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) si Pauling, Linus, The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, Journ. Am. Chem. Soc. 53, 1367 (1931).

1.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca integralele folosite în calculul energiei în funcție de distanta internucleara cu stari ionice si cu constanta de ecranare cu

metoda din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) au valorile din tabelele 1 si 2.

2.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca energia moleculei de hidrogen în funcție de distanta internucleara calculata de noi cu metoda Heitler-London-Slater-Pauling (HLSP) din Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) cu constanta de ecranare cu valoarea 1.193 din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) data de ecuația (10) are valorile din tabelul 2 si are valoarea minima de -31.0962 eV la distanta internucleara de 1.41 u.a..

3.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca energia moleculei în funcție de distanta internucleara calculata de noi cu stari ionice si cu constanta de ecranare cu metoda din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933), cu constanta de ecranare cu valoarea de 1.193 din aceeași lucrare, are un minim cu valoarea de -31.4503 eV la distanta internucleara de $1.46 a_0$ pentru care parametrul c al functiei de unda Heitler-London din ecuația (1) are valoarea de 2.8688, aceasta metoda fiind cel mai bine fundamentata teoretic din cele patru metode calculate de noi, si pentru care energiile moleculei de hidrogen în funcție de distanta internucleara sunt reprezentat în Figura 2 cu triunghiuri orientate în jos.

4.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca dupa cum se observa din tabelul 3 în metoda WSIE energia de interactiune a electronilor între ei si cu nucleeele, $W - E_N$, creste cu cresterea distantei internucleare, energia de interactiune dintre nucleee, E_N , din tabelul 1 scade cu cresterea distantei internucleare, si din suma lor rezulta un minim al energiei totale a moleculei la distanta internucleara de aproximativ $1.46 a_0$.

5.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca dupa cum se observa din tabelul 4 în metoda WSIE variatia energiei de interactiune a electronilor între ei si cu nucleeele este mai mica decat variatia energiei de interactiune a nucleelor pe primul interval, este mai mare decat aceasta din urma pe al doilea interval, si astfel rezulta un minim al energiei totale a moleculei de hidrogen.

6.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca în metoda WSIE minimul energiei se afla la distanta internucleara la care derivata energiei electronilor în funcție de

distanța internucleară este egală cu derivata energiei de interacțiune a nucleelor în funcție de distanța internucleară.

7. Revindicăm molecula de hidrogen caracterizată prin aceea că energia calculată de noi cu metoda WSIE în funcție de distanța internucleară se poate fi cu o funcție polinomială de gradul doi care este reprezentată în Figura 2, pentru care noi am obținut ecuația din Figura 2, și care este

$$y = 6.1x^2 - 18x - 18 \quad (17)$$

DESENE EXPLICATIVE

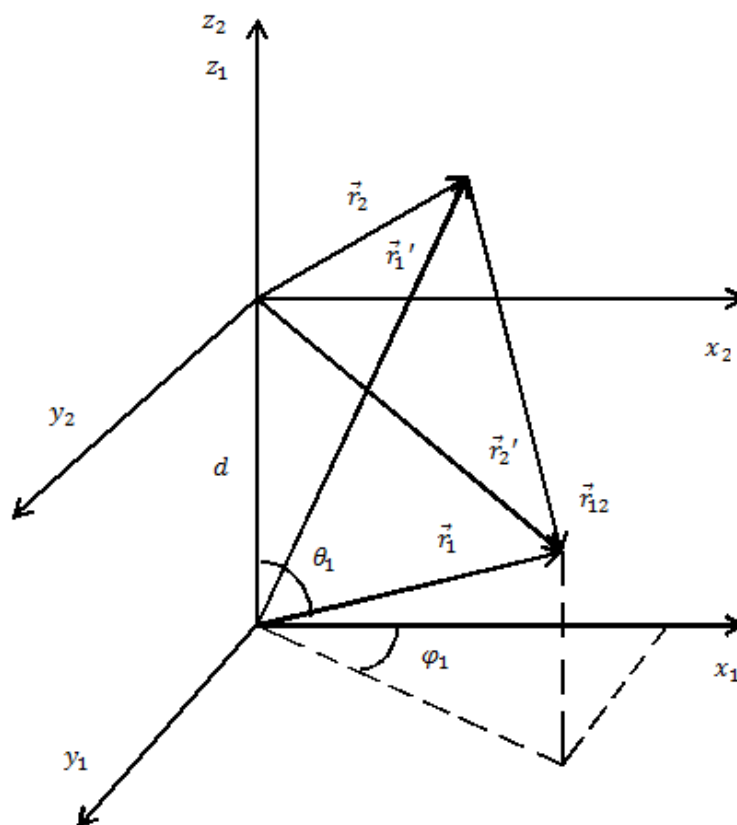


Fig. 1.

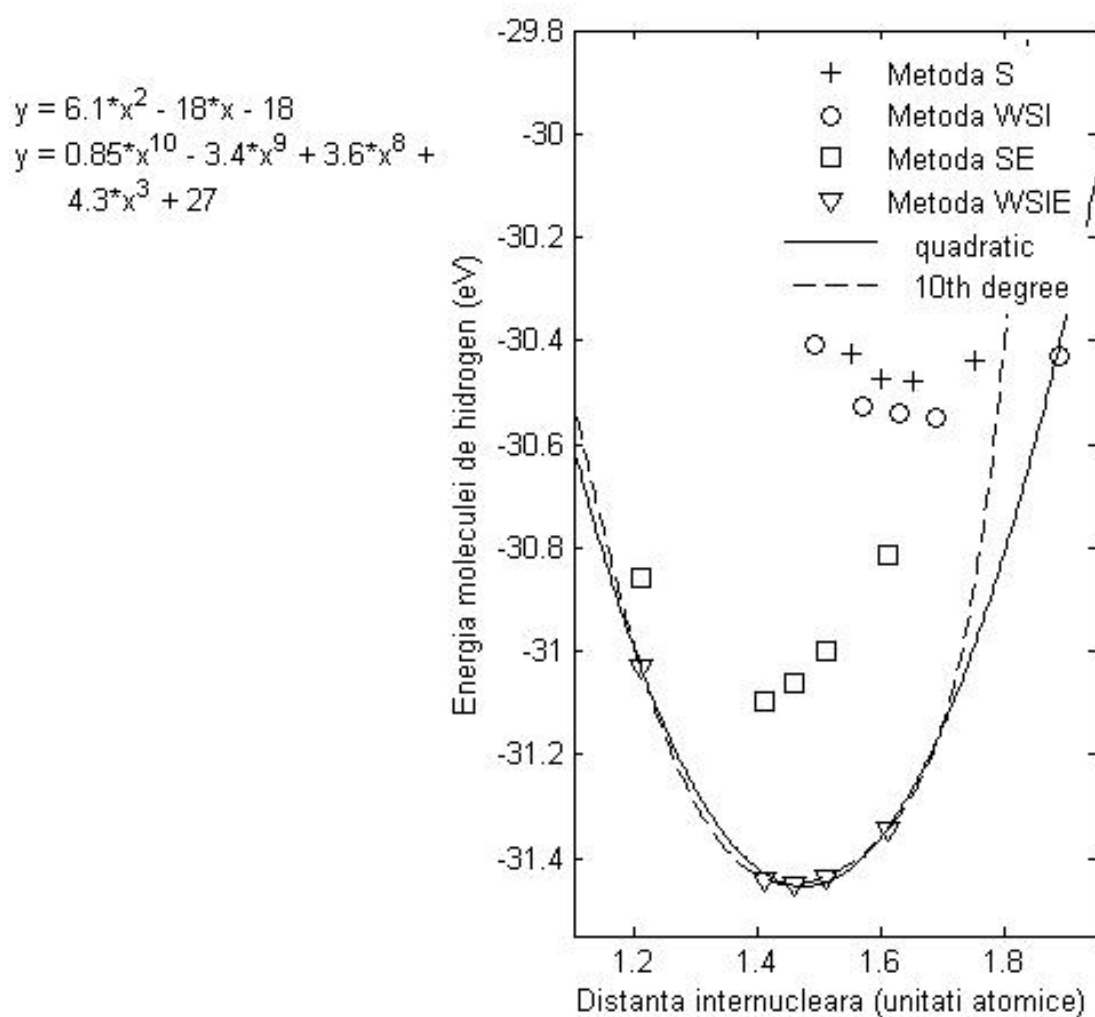


Fig. 2.

REZUMATUL INVENTIEI

Molecula de hidrogen caracterizată prin aceea că energia moleculei în funcție de distanța internucleară calculată de noi cu stări ionice și cu constanta de ecranare cu metoda din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933), cu constanta de ecranare cu valoarea de 1.193 din aceeași lucrare, are un minim de valoare de -31.4503 eV la distanța internucleară de $1.46 a_0$, pentru care parametrul c din ecuația (1) are valoarea 2.8688, aceasta metodă fiind cel mai bine fundamentată teoretic din

cele patru metode calculate de noi si reprezentat în Figura 2, si minimul energiei moleculei se afla la distanta internucleara la care derivata energiei electronilor în funcție de distanta internucleara este egala cu derivata energiei de interactiune a nucleelor în funcție de distanta internucleara.

BIBLIOGRAFIE

Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011.

Magnasco, V., Orbital exponent optimizatin în elementary VB calculations of the chemical bond în the ground state of simple molecular systems, J. Chem. Edu. 85, 1686-1691 (2008).

Magnasco, Valerio, Methods of Molecular Quantum Mechanics An Introduction to Electronic Molecular Structure, Wiley, 2009.

Moore, John T., Chemistry for dummies, 2nd Edition, Wiley, 2011, pag. 138, 230-233.

Pauling, Linus, The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, Journ. Am. Chem. Soc. 53, 1367 (1931).

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008.

Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931).

Wang, S. C., The Problem of Normal Hydrogen Molecule în the New Quantum Mechanics, Phys. Rev. 31, 579 (1928).

Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933).

35. OPTIMIZAREA EXPONENTULUI PENTRU MOLECULA DE HIDROGEN CU STĂRI IONICE

Calculăm procentul funcției de unda Heitler-London, notată cu c , în funcția de unda cu stări ionice a moleculei de hidrogen cu metoda Slater-Pauling, cu funcțiile de unda set de baza și de ordinul întâi și metoda dată de Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933). Această funcție de unda set de baza este

$$\begin{aligned}\psi &= c[a(1)b(2) + b(1)a(2)] + a(1)a(2) + b(1)b(2) \\ &= c(ab + ba) + aa + bb\end{aligned}\quad (1)$$

unde a și b sunt funcțiile de unda 1s ale celor doi atomi de hidrogen, 1 și 2 reprezintă atomul 1 și 2, și c este un parametru. Conform cu lucrarea Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011 funcțiile de unda atomice 1s ale atomului de hidrogen, a și b , sunt date de ecuația

$$a(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (2)$$

unde r este distanța electronului față de nucleu, și a_0 este raza Bohr.

În invenție calculăm energia moleculei și parametrul c din ecuația (1) pentru a obține distanța internucleară corespunzătoare minimului energiei.

Conform acestei metode energia moleculei de hidrogen este

$$W = \frac{W_N}{d} = \frac{\int H [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau}{\int [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau} \quad (3)$$

Dacă nu includem în Hamiltonianul H energia de repulsie Coulombiană dintre nuclee, care este funcție numai de distanța internucleară, din ecuația (3) obținem

$$W = \frac{c^2 A + cB + C}{c^2 D + cE + F} \quad (4)$$

În această metodă de aplica principiul că parametrul c din ecuația (4) să se calculeze din condiția de minim a energiei, care este

$$\frac{dW}{dc} = 0 \quad (5)$$

Din ecuațiile (4) și (5) rezulta

$$\frac{dW}{dc} = \frac{c^2(AE - BD) + 2c(AF - CD) + BF - CE}{(c^2D + cE + F)^2} = 0 \quad (6)$$

și obținem o ecuație de gradul 2 în parametrul c

$$Mc^2 + Nc + O = 0 \quad (7)$$

Notăm distanța internucleară

$$d = pa_0 \quad (8)$$

unde a_0 este raza Bohr. Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) a obținut minimul energiei moleculei de hidrogen în acest model pentru

$$p = 1.67 \quad (9)$$

la care pentru parametrul c a obținut valoarea 6.322 și pentru energia moleculei a obținut valoarea -30.3443 eV.

Cu metoda Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931)

$$W = \frac{\langle ab|H|ab\rangle + \langle ab|H|ba\rangle}{1 + \langle ab|ba\rangle} \quad (10)$$

noi am obținut pentru minimul energiei

$$p = 1.65 \quad (11)$$

pentru care am obținut energia minimă a moleculei egală cu -30.4802 eV. în invenție calculăm parametrul c în funcție de distanța internucleară p .

Conform lui Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) potențialul moleculei de hidrogen este

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (12)$$

si conform celor prezentate mai sus în calculele noastre nu includem energia de repulsie Coulombiana dintre nuclee.

În invenție folosim un orbital atomic pentru atomul de hidrogen cu constanta de ecranare de forma data de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933)

$$a(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-Z \frac{r}{a_0}} \quad (13)$$

unde Z este constanta de ecranare. Pentru constanta de ecranare și pentru distanța internucleară pentru care energia moleculei de hidrogen este minimă folosim rezultatele obținute de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933), adică

$$Z = 1.193 \quad (14)$$

$$p = 1.41 \quad (15)$$

În aceeași lucrare cu valorile din ecuațiile (14) și (15) pentru parametrul c din ecuația (1) a fost obținută valoarea

$$c = 3.9 \quad (16)$$

Tabelul 1. Integralele calculate de noi pentru calculul energiei moleculei de hidrogen în funcție de constanta de ecranare.

Marimea sau integrala	Nota tia	Valoarea totala K pentru Z 1.153

		1.173
		1.193
		1.213
		1.233
$E_1 = -E_0/Z^4$	K_1	-7.6952
		-7.1837
		-6.7139
		-6.2820
		-5.8842
$\langle ab ba \rangle$	K_2	0.1933
		0.1701
		0.1500
		0.1324
		0.1170
$\langle a(1) V_1 b(1) \rangle$	K_3	-10.1979
		-9.6737
		-9.1807
		-8.7167
		-8.2798
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right b(1) \right\rangle$	K_4	3.8096
		3.6288
		3.4564

		3.2921
		3.1354
$\langle a(1) b(1)\rangle$	K_5	0.4396
		0.4125
		0.3873
		0.3639
		0.3421
E_N	K_6	18.6301
$\left\langle ab \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right ab \right\rangle$	K_7	6.1806
		5.6250
		5.1264
		4.6784
		4.2751
$\left\langle ab \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right ba \right\rangle$	K_8	3.3283
		2.9710
		2.6551
		2.3755
		2.1276
$\left\langle a(1)b(2) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_9	-7.1989
		-6.5239
		-5.9212
		-5.3820

		-4.8989
$\langle a(1) b(1)\rangle \left\langle b(2) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1'} \right a(2) \right\rangle$	K_{10}	-4.4830
	$= K_3$	-3.9904
	K_5	-3.5557
		-3.1720
		-2.8325
$\left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_1	2.0423
		2.1189
		2.1723
		2.2062
		2.2239

Tabelul 2. Valorile integralelor calculate de noi folosite în calculul energiei moleculei de hidrogen cu metoda Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stări ionice cu constanta de ecranare în funcție de constanta de ecranare.

Marimea sau integrala	Notatia	Valoarea	Valoarea pentru $Z =$
			1.153
			1.173
			1.193
			1.213
			1.233

$A_1 = 2 \times K_1 + K_7 + 2 \times K_9 + 2 \times K_4 \times K_5 + 2$ $\times K_3 \times K_5 + K_8 + 2 \times K_{10} + 2 \times J_1$			-30.7774 -27.5491 -24.6895 -22.1536 -19.9006
Energia moleculei de hidrogen data de ecuația (10) (eV)			-31.1015 -31.0930 -31.0606 -31.0022 -30.9202
Energia de legatura cu ecuația (10) (eV)			3.9015 3.8930 3.8606 3.8022 3.7202
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) b(2) \rangle$	K_{12}	$-Z^2 E_0 K_2$	-3.4949 -3.1830 -2.9034 -2.6494 -2.4191
$\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{13}	K_8	3.3283 2.9710

			2.6551
			2.3755
			2.1276
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{14}	K_{10}	-4.4830
			-3.9904
			-3.5557
			-3.1720
			-2.8325
$J_2 = \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_2	$J_{20}K_5$	0.6859
		$= -K_3K_5$	0.6903
		$(Z-1)$	0.6862
			0.6756
			0.6600
$A_2 = 2 \cdot K_{12} + K_{13} + 2 \cdot K_{14} + 2J_2$			-11.2556
			-9.9952
			-8.8906
			-7.9161
			-7.0557
$K_{15} = \left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right b(1) \right\rangle$	K_{15}		11.8006
			11.6006
			11.4055
			11.2172

			11.0354
$K_{16} = \left\langle b(1) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right b(1) \right\rangle K_{15}'$	K_{16}	K_9	-7.1989 -6.5239 -5.9212 -5.3820 -4.8989
$K_{15}' = \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{15}'	$1/Z^3$	0.6524 0.6196 0.5890 0.5603 0.5335
$K_{17} = \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{17}		6.1635 5.6091 5.1117 4.6647 4.2625
$K_{18} = - \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{18}	-27.2 $K_{15}' I_{18}$ $/3.14$ $I_{18} = I_{15}'$ $\neq 3.14$	-13.3547 -12.2549 -11.2611 -10.3628 -9.5491

$K_{19} = - \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{19}	K_{18}	-13.3547 -12.2549 -11.2611 -10.3628 -9.5491
$A_3 = 2 \cdot K_{15} \cdot K'_{15} + 2 \cdot K_{16} + K_{17} + K_{18} + K_{19}$			-19.5463 -17.5731 -15.8183 -14.2549 -12.8594
$A = A_1 + A_2 + A_3$			-61.5793 -55.1174 -49.3984 -44.3246 -39.8156
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle b(2) a(2) \rangle$	K_{20}	$(-\frac{E_0}{Z})$ $\cdot K_5$	-5.1852 -4.7826 -4.4152 -4.0800 -3.7734
$\left\langle b(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{21}	$(K_4 + K_3)$ $/Z^3$	-4.1677 -3.7454

			-3.3713 -3.0394 -2.7444
$K_{22} = \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{22}		4.8722 4.4000 3.9787 3.6022 3.2652
$K_{23} = - \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{23}	$\frac{K_{10}}{K_5 Z^3}$ $= \frac{K_3}{Z^3}$	-6.6531 -5.9937 -5.4070 -4.8839 -4.4170
$K_{24} = - \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{24}	$K_9 Z^3 K_5$	-4.8508 -4.3434 -3.8938 -3.4955 -3.1415
$J_3 = \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_3	$J_1 Z^3 K_5$	1.3761 1.4107 1.4286 1.4329

			1.4261
$B_1 = K_{20} + K_{21} + K_{22} + K_{23} + K_{24} + J_3$			-14.6085 -13.0544 -11.6800 -10.4637 -9.3850
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{25}	K_{20}	-5.1852 -4.7826 -4.4152 -4.0800 -3.7734
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle b(1) a(1) \rangle$	K_{26} $\neq K_{21}$	$K_{15}K_5$ $+ K_{16}K_5$ $/K_{15}'$	0.3368 0.4419 0.5235 0.5864 0.6337
$\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{27}		4.8543 4.3833 3.9630 3.5875 3.2515

$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{28}	$-\frac{J_1 K_5 Z^3}{Z-1}$ $= I_{28} K_5$	-8.9943 -8.1544 -7.4018 -6.7272 -6.1207
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{29}	K_{23} $= \frac{K_{10}}{K_5 Z^3}$	-6.6531 -5.9937 -5.4070 -4.8839 -4.4170
$J_4 = \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_4	$J_2/(Z^3 K_5)$	1.0179 1.0369 1.0435 1.0403 1.0292
$B_2 = K_{25} + K_{26} + K_{27} + K_{28} + K_{29} + J_4$			-14.6236 -13.0686 -11.6939 -10.4769 -9.3967
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) b(2) \rangle$	K_{30}	K_{20}	-5.1852 -4.7826

			-4.4152 -4.0800 -3.7734
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right b(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{31}	K_{20}	-5.1852 -4.7826 -4.4152 -4.0800 -3.7734
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{32}	K_{22}	4.8722 4.4000 3.9787 3.6022 3.2652
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{33}	K_{23}	-6.6531 -5.9937 -5.4070 -4.8839 -4.4170
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{34}	K_{24}	-4.8508 -4.3434 -3.8938 -3.4955

			-3.1415
$J_5 = \left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_5	J_3	1.3761 1.4107 1.4286 1.4329 1.4261
$J_6 = \left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_2} \right a(1)b(2) \right\rangle$	J_6	J_4	1.0179 1.0369 1.0435 1.0403 1.0292
$B_3 = K_{30} + K_{31} + K_{32} + K_{33} + K_{34} + J_5 + J_6$			-14.6081 -13.0547 -11.6804 -10.4640 -9.3848
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right b(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{35}	K_{21} $= (K_4$ $+ K_3)/Z^3$	-4.1677 -3.7454 -3.3713 -3.0394 -2.7444

$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) b(1) \rangle$	K_{36}	K_{26}	0.3368 0.4419 0.5235 0.5864 0.6337
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{37}	K_{27}	4.8543 4.3833 3.9630 3.5875 3.2515
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{38}	K_{28}	-8.9943 -8.1544 -7.4018 -6.7272 -6.1207
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{39}	K_{29}	-6.6531 -5.9937 -5.4070 -4.8839 -4.4170
$B_4 = K_{35} + K_{36} + K_{37} + K_{38} + K_{39}$			-14.6240 -13.0683

			-11.6936 -10.4766 -9.3969
$B = 2(B_1 + B_2 + B_3 + B_4)$			-116.9283 -104.4921 -93.4960 -83.7624 -75.1267
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{40}	K_1	-7.6952 -7.1837 -6.7139 -6.2820 -5.8842
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{41}	K_{26} $/(K_5 Z^3)$	0.4998 0.6637 0.7961 0.9029 0.9882
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{42}		8.2096 7.5295 6.9157 6.3608

			5.8582
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{43}	$I_{43} = I_{15}'$ $= 27.2$ $\frac{I_{15}'}{Z^3 3.14}$ $= K_{18}$	-13.3547 -12.2549 -11.2611 -10.3628 -9.5491
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{44}	$I_{44} = I_{16}'$ $K_{44} = K_{16}$ $= K_9$ $= K_{34}$ $/(K_5 Z^3)$	-7.1989 -6.5239 -5.9212 -5.3820 -4.8989
$J_7 = \left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_7	$\frac{J_3}{(K_5 Z^3)}$ $= J_1$	2.0423 2.1189 2.1723 2.2062 2.2239
$C_1 = K_{40} + K_{41} + K_{42} + K_{43} + K_{44} + J_7$			-17.4971 -15.6504 -14.0121 -12.5569 -11.2619

$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle b(2) a(2) \rangle$	K_{45}	K_{12}	-4.1677 -3.7454 -3.3713 -3.0394 -2.7444
$\left\langle b(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle b(1) a(1) \rangle$	K_{46}	$K_{21}Z^3K_5$ $= (K_4$ $+ K_3)K_5$	-2.8083 -2.4935 -2.2170 -1.9740 -1.7599
$\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{47}	K_8	3.3283 2.9710 2.6551 2.3755 2.1276
$-\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{48}	K_{10}	-4.4830 -3.9904 -3.5557 -3.1720 -2.8325
$-\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{49}	K_{10}	-4.4830 -3.9904

			-3.5557
			-3.1720
			-2.8325
$J_8 = \left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z-1}{r_1} \right a(1)a(2) \right\rangle$	J_8	J_2	0.6859
			0.6903
			0.6862
			0.6756
			0.6600
$C_2 = K_{45} + K_{46} + K_{47} + K_{48} + K_{49} + J_8$			-11.9278
			-10.5584
			-9.3584
			-8.3063
			-7.3817
$C = 2(C_1 + C_2)$			-58.8498
			-52.4176
			-46.7410
			-41.7264
			-37.2872

Tabelul. 3. Coeficientii din ecutiile (4) si (7), parametrul c din ecuația (1), energia moleculei fara energia de interactiune nucleara, energia totala a moleculei si energia de legatura a moleculei în funcție de distanta internucleara.

Coeficientul	Valoarea pentru $Z=$ 1.153 1.173 1.193 1.213 1.233
A	-61.5793 -55.1174 -49.3984 -44.3246 -39.8156
B	-116.9283 -104.4921 -93.4960 -83.7624 -75.1267
C	-58.8498 -52.4176 -46.7410 -41.7264 -37.2872

D	1.2378
	1.1080
	0.9937
	0.8927
	0.8032
E	2.2944
	2.0447
	1.8248
	1.6311
	1.4600
F	1.2378
	1.1080
	0.9937
	0.8927
	0.8032
M	3.4463
	3.0787
	2.7648
	2.4768
	2.2110
N	-6.7572
	-5.9828

	-5.2813
	-4.6388
	-4.0616
O	-9.7089
	-8.5990
	-7.6140
	-6.7148
	-5.9025
c	2.9241
	2.9048
	2.8698
	2.8307
	2.7929
$W - E_N$	-50.0410
	-50.0725
	-50.0812
	-50.0673
	-50.0341
W	-31.4109
	-31.4424
	-31.4511
	-31.4372

	-31.4040
E_{leg}	4.2109
	4.2424
	4.2511
	4.2372
	4.2040

Toate calculele și Fig. 2 din invenție le-am realizat cu programul MATLAB R2014 a.

În invenție am calculat integralele folosite în calculul energiei moleculei de hidrogen cu metoda din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu ecuațiile (1) (3) și (13) cu stări ionice în funcție de constanta de ecranare la distanța internucleară de 1.46 unități atomice corespunzătoare minimului energiei.

În Figura 2 am reprezentat energia moleculei de hidrogen calculată de noi cu stări ionice cu metoda din Weinbaum, Sidney, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) la distanța internucleară de 1.46 unități atomice în funcție de constanta de ecranare, și observăm că energia are un minim egal cu minimul în funcție de distanța internucleară la valoarea constantei de ecranare de 1.193.

În Figura 3 am reprezentat energia de legătură a moleculei de hidrogen calculată de noi cu metoda Weinbaum, Sidney, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stări ionice și constanta de ecranare în funcție de distanța internucleară și de constanta de ecranare și observăm că are un maxim.

1.Revendicăm molecula de hidrogen caracterizată prin aceea că integralele folosite în calculul energiei în funcție de constanta de ecranare cu stări ionice și cu constanta de ecranare cu metoda din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) au valorile din tabelele 1 și 2.

2.Revendicăm molecula de hidrogen caracterizată prin aceea că energia moleculei calculată de noi în funcție de distanța internucleară cu constanta de ecranare cu valoarea de 1.193 data

de Weinbaum, Sidney, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) si cu stari ionice are valoarea minima de -31.4503 eV la distanta internucleara de 1.46 unitati atomice, si în funcție de constanta de ecranare la distanta internucleara de 1.46 unitati atomice are un minim cu aceeași valoare la valoarea constantei de ecranare de 1.193.

DESENE EXPLICATIVE

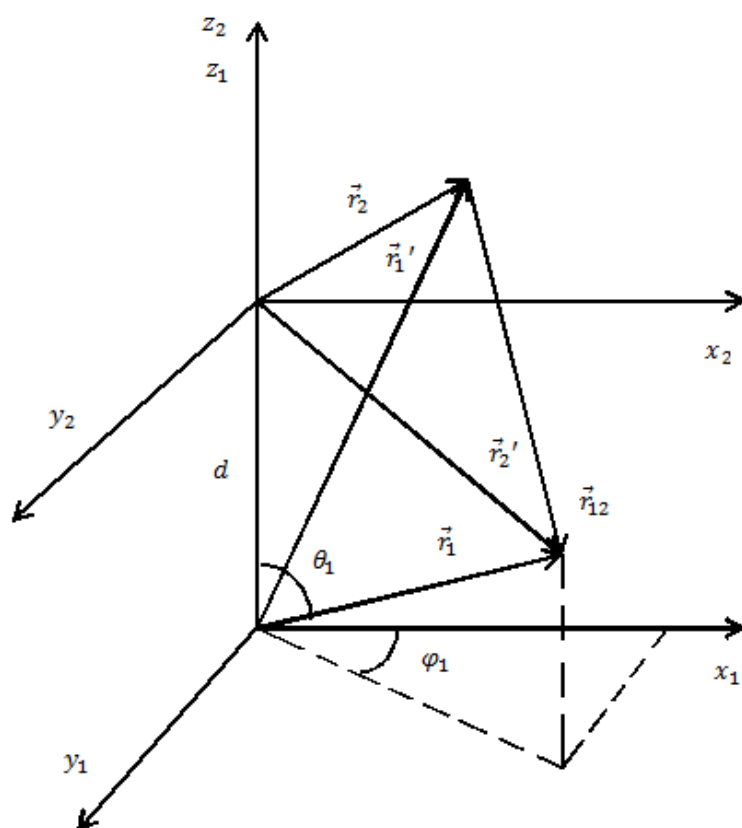


Fig. 1.

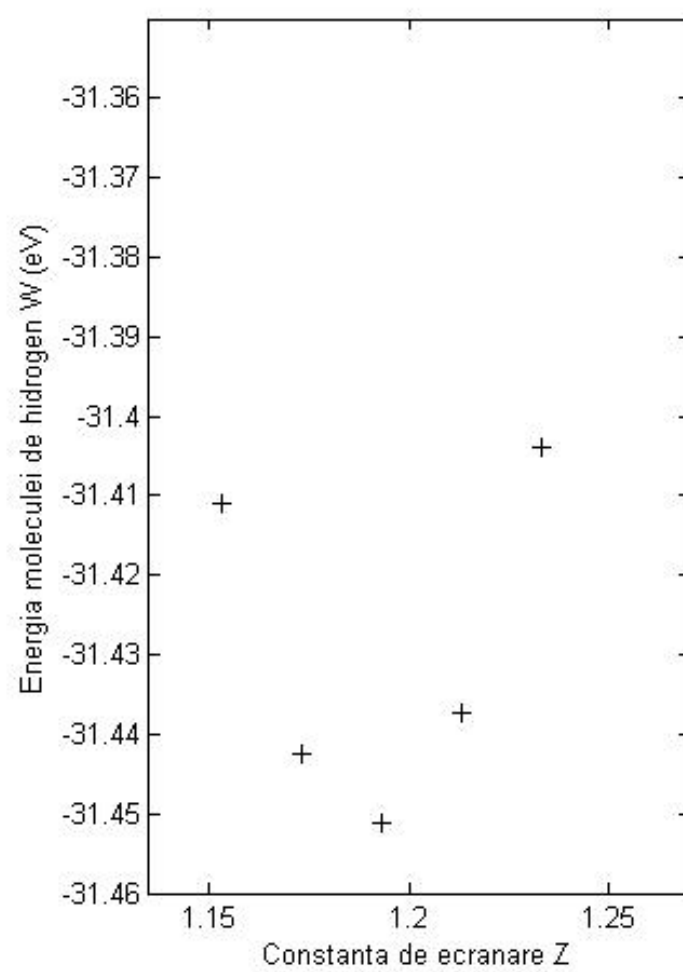


Fig. 2.

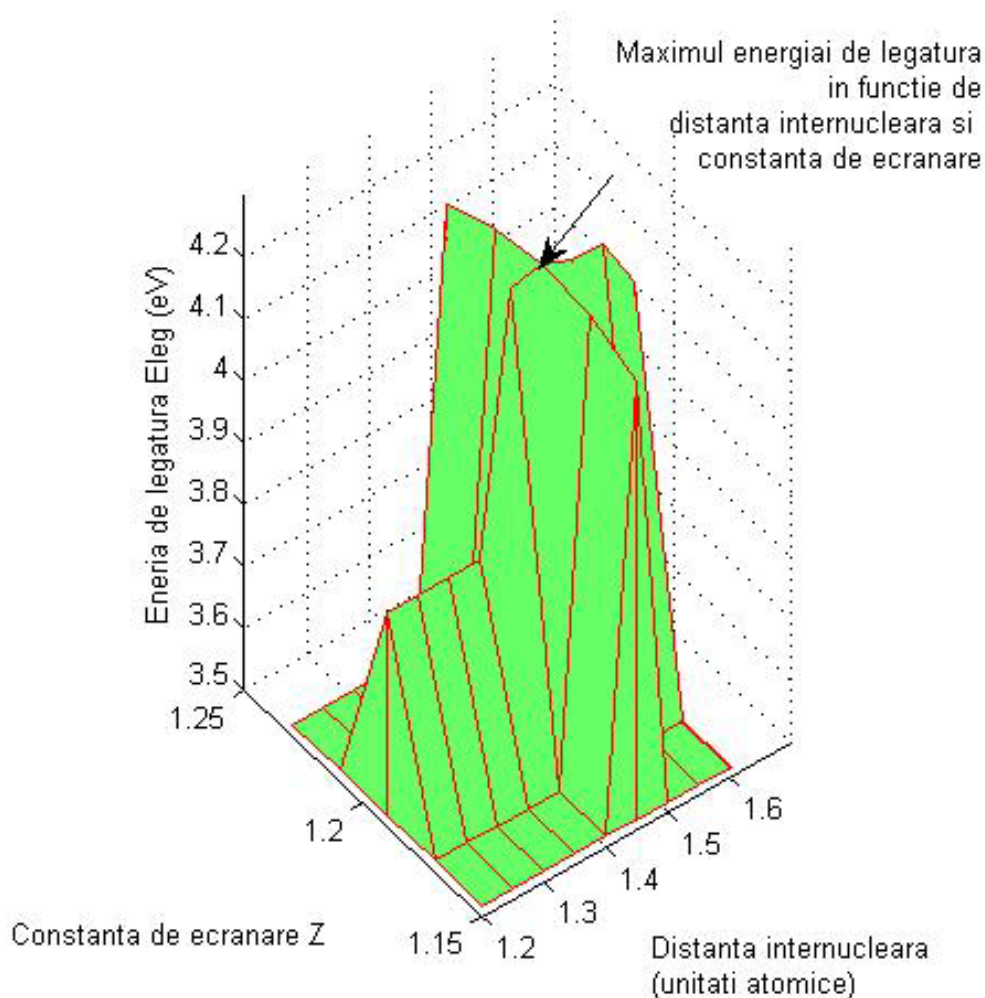


Fig. 3.

BIBLIOGRAFIE

Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011.

Magnasco, V., Orbital exponent optimization in elementary VB calculations of the chemical bond in the ground state of simple molecular systems, J. Chem. Edu. 85, 1686-1691 (2008).

Magnasco, Valerio, Methods of Molecular Quantum Mechanics An Introduction to Electronic Molecular Structure, Wiley, 2009.

Moore, John T., Chemistry for dummies, 2nd Edition, Wiley, 2011, pag. 138, 230-233.

Pauling, Linus, The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, Journ. Am. Chem. Soc. 53, 1367 (1931).

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008.

Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931).

Wang, S. C., The Problem of Normal Hydrogen Molecule in the New Quantum Mechanics, Phys. Rev. 31, 579 (1928).

Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933).

36. PARTE INSTRUCTIVĂ, ECUATIA ENERGIEI MOLECULEI DE HIDROGEN CU STARI IONICE, CALCULUL FORMULELOR INTEGRALELOR CU REZULTATE NUMERICE GREȘITE,

Calculam procentul functiei de unda Heitler-London în functia de unda cu stari ionice a moleculei de hidrogen cu metoda Slater-Pauling, metoda prezentata în lucrarea Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933). Aceasta funcție de unda este

$$\begin{aligned}\psi &= c[a(1)b(2) + b(1)a(2)] + a(1)a(2) + b(1)b(2) \\ &= c(ab + ba) + aa + bb\end{aligned}\quad (1)$$

unde a și b sunt funcțiile de unda 1s ale celor doi atomi de hidrogen, 1 și 2 reprezintă atomul 1 și 2, și c este un parametru. Conform cu lucrarea Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011 funcțiile de unda atomice 1s ale atomului de hidrogen, a și b , sunt date de ecuația

$$a(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (2)$$

unde r este distanța electronului față de nucleu, și a_0 este raza Bohr.

Conform acestei metode energia moleculei de hidrogen este

$$\begin{aligned}W &= \frac{W_N}{d} = \frac{\int H [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau}{\int [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau} \\ &= \frac{\int (c \cdot u + v) H (c \cdot u + v) d\tau}{\int (c \cdot u + v)^2 d\tau}\end{aligned}\quad (3)$$

În ecuația (3) ordinea termenilor trebuie respectată deoarece H conține o operație de tipul

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx} \frac{d}{dx}$$

unde $\frac{d}{dx}$ este derivata, și funcțiile u și v conțin funcții de tipul

$$e^{cx}$$

unde c este o constanta. Deoarece

$$\frac{d}{dx}e^x = e^x$$

si

$$\frac{d}{dx}e^{cx} = ce^{cx}$$

obtinem

$$\frac{d}{dx}\frac{d}{dx}e^{cx} = c^2e^{cx}$$

si observam ca derivata a doua $\frac{d^2}{dx^2}$ produce o schimbare asupra functiei e^{cx} , si astfel H produce o schimbare asupra functiilor u si v .

Daca nu includem în Hamiltonianul H energia de repulsie Coulombiana dintre nuclee, care este funcție numai de distanta internucleara, din ecuația (3) obtinem

$$W = \frac{c^2A + cB + C}{c^2D + cE + F} \quad (4)$$

unde

$$A = \int (ab + ba) H(ab + ba) d\tau \quad (5)$$

$$B = \int [2(ab + ba)Haa + 2aaH(ab + ba)] d\tau \quad (6)$$

$$\begin{aligned} C &= 2 \int aaHaa d\tau + \int aaHbbd\tau + \int bbHaad\tau \\ &= 2 \int aaHaa d\tau + 2 \int bbHaad\tau \end{aligned} \quad (7)$$

In continuare notam

$$A = \int ab H(ab + ba) d\tau + \int ba H(ab + ba) d\tau = A_0 + A_1 \quad (8)$$

unde

$$A_0 = \int ab H(ab + ba) d\tau \quad (9)$$

$$A_1 = \int ba H(ab + ba) d\tau = \int ba Habd\tau + \int ba Hbad\tau = A_2 + A_3 \quad (10)$$

unde

$$A_2 = \int ba Habd\tau \quad (11)$$

$$A_3 = \int ba Hbad\tau \quad (12)$$

În această metodă de aplică principiul că parametrul c din ecuația (4) să se calculeze din condiția de minim a energiei, care se obține pentru

$$\frac{dW}{dc} = 0 \quad (13)$$

Pentru calculul derivatei din ecuația (13) se folosește proprietatea derivatei unui raport de funcții $\frac{u(x)}{v(x)}$

$$\frac{d}{dx} \frac{u(x)}{v(x)} = \frac{v \frac{du}{dx} - u \frac{dv}{dx}}{v^2}$$

Din ecuațiile (4) și (13) rezultă

$$\frac{dW}{dc} = \frac{c^2(AE - BD) + 2c(AF - CD) + BF - CE}{(c^2D + cE + F)^2} \quad (14)$$

de unde rezultă

$$c^2(AE - BD) + 2c(AF - CD) + BF - CE = 0 \quad (15)$$

Notând

$$M = AE - BD \quad (16)$$

$$N = 2(AF - CD) \quad (17)$$

$$O = BF - CE \quad (18)$$

obtinem o ecuație de gradul 2 în parametrul c

$$Mc^2 + Nc + O = 0 \quad (19)$$

Notam distanta internucleara

$$d = pa_0 \quad (20)$$

unde a_0 este raza Bohr. Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) a obtinut minimul energiei în acest model pentru

$$p = 1.67 \quad (21)$$

si pentru parametrul c a obtinut valoarea 6.322.

Cu metoda Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931)

$$W = \frac{\langle ab|H|ab\rangle + \langle ab|H|ba\rangle}{1 + \langle ab|ba\rangle} \quad (22)$$

noi am obtinut pentru minimul energiei

$$p = 1.65 \quad (23)$$

pentru care am obtinut energia minima a moleculei egala cu -30.4802 eV. în inventie calculam parametrul c cu valoarea lui p din ecuația (23).

Conform lui Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) potentialul moleculei de hidrogen este

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (24)$$

si conform celor prezentate mai sus în calculele noastre nu includem energia de repulsie Coulombiana dintre nuclee.

Am folosit valorile integralelor din Tabelul 1 pentru constanta A_0 din ecuația (9) si am obtinut valoarea

$$A_0 = 2 \times K_1 + K_7 + 2 \times K_9 + 2 \times K_4 \times K_5 + 2 \times K_3 \times K_5 + K_8 + 2 \times K_{10}$$

$$= -68.9070 \text{ eV} \quad (25)$$

Pentru constanta A_2 din ecuația (11) obținem

$$\begin{aligned} A_2 = & \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2) | b(2) \rangle \\ & + \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| b(2) \right\rangle \langle a(1) | b(1) \rangle \\ & + \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)b(2) \right\rangle \\ & - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \\ & - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \quad (26) \end{aligned}$$

Notam

$$\begin{aligned} K_{12} = & \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2) | b(2) \rangle \\ = & \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| b(2) \right\rangle \langle a(1) | b(1) \rangle \quad (27) \end{aligned}$$

$$K_{13} = \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)b(2) \right\rangle = K_8 = 7.0178 \text{ eV} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} K_{14} = & - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \\ = & - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \\ = & - \langle b(1) | a(1) \rangle \left\langle a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| b(2) \right\rangle = K_{10} = -9.4666 \quad (29) \end{aligned}$$

$$K_{12} = K_1 K_2 = -6.3539 \text{ eV} \quad (30)$$

Rezulta ca

$$\begin{aligned} A_2 &= 2 \cdot K_{12} + K_{13} + 2 \cdot K_{14} = 2 \cdot K_{12} + K_8 + 2 \cdot K_{10} \\ &= -24.6332 \text{ eV} \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} A_3 &= \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle \langle a(2) | a(2) \rangle \\ &+ \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | b(1) \rangle \\ &+ \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| b(1)a(2) \right\rangle \\ &- \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \\ &- \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \end{aligned} \quad (32)$$

$$K_{15} = \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right| b(1) \right\rangle \quad (33)$$

$$K_{16} = \left\langle b(1) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle \quad (34)$$

$$K_{17} = \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| b(1)a(2) \right\rangle \quad (35)$$

$$K_{18} = - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \quad (36)$$

$$K_{19} = - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \quad (37)$$

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 b(1) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_2'^2} + \frac{2}{r_2'} \frac{\partial}{\partial r_2'} \right) e^{-\frac{r_2'}{a_0}} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{1}{a_0} \frac{2}{r_2'} \right) e^{-\frac{r_2'}{a_0}} \quad (38)
\end{aligned}$$

$$\frac{\hbar^2}{m} = a_0 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = a_0^2 \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (39)$$

$$\begin{aligned}
K_{15} &= -a_0^2 \frac{1}{2} \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right) \frac{1}{a_0^2} a_0^3 (I_{15} - 2I_{15}') \\
&= -\frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2\pi} (I_{15} - 2I_{15}') \quad (40)
\end{aligned}$$

$$I_{15} = \iiint e^{-2m} m^2 \sin \theta_2' dm d\theta_2' d\varphi_2' \quad (41)$$

$$I_{15}' = \iiint e^{-2m} m \sin \theta_2' dm d\theta_2' d\varphi_2' \quad (42)$$

$$I_{15} = 3.1416 \quad (43)$$

$$I_{15}' = I_{15} = 3.1416 \quad (44)$$

$$K_{15} = 13.6 \text{ eV} \quad (45)$$

$$K_{16} = \left\langle b(1) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle$$

$$= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0} \right) \iiint e^{-2x_2'} x_1 \sin \theta_1 dx_1 d\theta_1 d\varphi_1$$

$$= -\frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi} I_{16} \quad (46)$$

$$I_{16} = \iiint e^{-2x_2'} x_1 \sin \theta_1 dx_1 d\theta_1 d\varphi_1 \quad (47)$$

$$I_{16} = 1.7179 \quad (48)$$

$$K_{16} = -14.8811 \text{ eV} \quad (49)$$

In constanta A_3 integralele K_{15} si K_{16} se considera de 2 ori din considerente de simetrie.

Pentru calculul constantei A_3 trebuie calculata integrala $\langle a(2)|a(2)\rangle$.

$$K'_{15} = \langle a(2)|a(2)\rangle \quad (50)$$

$$A_3 = 2 \cdot K_{15} \cdot K'_{15} + 2 \cdot K_{16} \cdot K'_{15} + K_{17} + K_{18} + K_{19} \quad (51)$$

$$K'_{15} = \frac{1}{\pi} I_{15} = 1 \quad (52)$$

$$\begin{aligned} K_{18} &= - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \\ &= - \langle b(1)|b(1)\rangle \left\langle a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(2) \right\rangle \\ &= - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right) a_0^2 \iiint e^{-2x_1'} x_1' \sin \theta_1' dx_1' d\theta_1' d\varphi_1' \\ &= - \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi} I_{18} \quad (53) \end{aligned}$$

$$I_{18} = \iiint e^{-2x_1'} x_1' \sin \theta_1' dx_1' d\theta_1' d\varphi_1' \quad (54)$$

$$I_{18} = I'_{15} = 3.1416 \quad (55)$$

$$K_{18} = -27.2 \text{ eV} \quad (56)$$

$$K_{19} = - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| b(1)a(2) \right\rangle = K_{18} = -27.2 \text{ eV} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} K_{17} &= \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| b(1)a(2) \right\rangle \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right)^2 \iiint \iiint \frac{1}{r_{12}} e^{-2\frac{|\vec{d}+\vec{r}_2|}{a_0}} e^{-2\frac{|\vec{r}_2+\vec{r}_{12}|}{a_0}} dv_{12} dv_2 \\ &= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 \end{aligned}$$

$$\iiint \iiint e^{-2x_1'} e^{-2x_2'} x_{12} \sin \theta_{12} dx_{12} d\theta_{12} d\varphi_{12} x_2^2 \sin \theta_2 dx_2 d\theta_2 d\varphi_2$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 I_{17} \quad (58)$$

$$I_{17} = 4.5909 \quad (59)$$

$$K_{17} = 12.665 \text{ eV} \quad (60)$$

Folosind relatia (51) obtinem

$$A_3 = -44.2972 \text{ eV} \quad (61)$$

Folosind ecuatiile (8), (9), si (10) obtinem

$$A = A_0 + A_2 + A_3 = -137.8374 \text{ eV} \quad (62)$$

Folosind ecuația (6) obtinem

$$\begin{aligned} B &= 2 \int abHaad\tau + 2 \int baHaad\tau + 2 \int aaHabbd\tau + 2 \int aaHbad\tau \\ &= 2(B_1 + B_2 + B_3 + B_4) \end{aligned} \quad (63)$$

$$B_1 = \int abHaad\tau \quad (64)$$

$$B_2 = \int baHaad\tau \quad (65)$$

$$B_3 = \int aaHabbd\tau \quad (66)$$

$$B_4 = \int aaHbad\tau \quad (67)$$

$$\begin{aligned} B_1 &= \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle b(2) | a(2) \rangle \\ &+ \left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle a(1) | a(1) \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\
& - \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\
& - \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (68)
\end{aligned}$$

$$K_{20} = \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle b(2) | a(2) \rangle \quad (69)$$

$$K_{21} = \left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle a(1) | a(1) \rangle \quad (70)$$

$$K_{22} = \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (71)$$

$$K_{23} = - \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (72)$$

$$K_{24} = - \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (73)$$

$$K_{20} = -13.6 \cdot K_5 = -9.2956 \text{ eV} \quad (74)$$

$$\begin{aligned}
K_{21} &= \left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \right| a(2) \right\rangle + \left\langle b(2) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \\
&= K_4 + K_3 \\
&= 4.56 - 13.85 = -9.29 \text{ eV} \quad (75)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 a(2) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1'^2} + \frac{2}{r_1'} \frac{\partial}{\partial r_1'} \right) e^{-\frac{r_1'}{a_0}} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{1}{a_0} \frac{2}{r_1'} \right) e^{-\frac{r_1'}{a_0}}
\end{aligned}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} = a_0 \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = a_0^2 \frac{1}{2} \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \right| a(2) \right\rangle = -\frac{1}{2} \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right) (I_{21} - 2I_{21}')$$

$$I_{21} = \iiint e^{-x_2} e^{-m} m^2 \sin \theta_2' dm d\theta_2' d\varphi_2'$$

$$I_{21}' = \iiint e^{-x_2} e^{-m} m \sin \theta_2' dm d\theta_2' d\varphi_2'$$

$$I_{21} = 2.1464$$

$$I_{21}' = 1.5989$$

$$\left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \right| a(2) \right\rangle = 4.5538$$

$$K_{22} = \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2$$

$$\iiint \iiint e^{-2x_1} e^{-x_2} e^{-x_1'} x_{12} \sin \theta_{12} dx_{12} d\theta_{12} d\varphi_{12} x_2^2 \sin \theta_2 dx_2 d\theta_2 d\varphi_2$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 I_{22} \quad (76)$$

$$I_{22} = 3.6747 \quad (77)$$

$$K_{22} = 10.1375 \text{ eV} \quad (78)$$

$$K_{23} = -\left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$= -\left\langle b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(2) \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} a_0^2 \iiint e^{-x_2} e^{-x_1'} x_1' \sin \theta_1' dx_1' d\theta_1' d\varphi_1' \\
&= -\frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi} I_{23} \quad (79)
\end{aligned}$$

$$I_{23} = 1.5989 \quad (80)$$

$$K_{23} = -13.8503 \quad (81)$$

$$\begin{aligned}
K_{24} &= -\left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\
&= -\left\langle a(1) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1) \right\rangle \langle b(2)|a(2) \rangle \quad (82)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle a(1) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1) \right\rangle &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0} \iiint e^{-2x_1} x_2' \sin \theta_2' dx_2' d\theta_2' d\varphi_2' \\
&= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0} I_{24} \quad (83)
\end{aligned}$$

$$I_{24} = I_{16} = 1.7179 \quad (84)$$

$$\left\langle a(1) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1) \right\rangle = 14.8811 \quad (85)$$

$$K_{24} = -10.1712 \text{ eV} \quad (86)$$

$$B_1 = K_{20} + K_{21} + K_{22} + K_{23} + K_{24} \quad (87)$$

$$B_1 = -32.4696 \text{ eV} \quad (88)$$

$$\begin{aligned}
B_2 &= \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2)|a(2) \rangle \\
&+ \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1)|a(1) \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\
& - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\
& - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (89)
\end{aligned}$$

$$K_{25} = \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2) | a(2) \rangle \quad (90)$$

$$K_{26} = \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle \quad (91)$$

$$K_{27} = \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (92)$$

$$K_{28} = - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (93)$$

$$K_{29} = - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (94)$$

$$K_{25} = \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right| a(1) \right\rangle + \left\langle b(1) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \quad (95)$$

$$\left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right| a(1) \right\rangle = K_4 = 4.56 \quad (96)$$

$$\left\langle b(1) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle = K_3 = -13.85 \quad (97)$$

$$K_{25} = -9.29 \quad (98)$$

$$K_{26} = \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle$$

$$= \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle + \left\langle a(2) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle \quad (99)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 a(2) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1'^2} + \frac{2}{r_1'} \frac{\partial}{\partial r_1'} \right) e^{-\frac{r_1'}{a_0}} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{1}{a_0} \frac{2}{r_1'} \right) e^{-\frac{r_1'}{a_0}} \quad (100) \end{aligned}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} = a_0 \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = a_0^2 \frac{1}{2} \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (101)$$

$$\begin{aligned} \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \right| a(2) \right\rangle &= -\frac{1}{2} \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right) (I_{26} - 2I_{26}') \\ &= -\frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2\pi} (I_{26} - 2I_{26}') \quad (102) \end{aligned}$$

$$I_{26} = \iiint e^{-2m} m^2 \sin \theta_2' dm d\theta_2' d\varphi_2' = I_{15} \quad (103)$$

$$I_{26}' = \iiint e^{-2m} m \sin \theta_2' dm d\theta_2' d\varphi_2' = I_{15}' \quad (104)$$

$$\left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \right| a(2) \right\rangle = K_{15} = 13.6 \text{ eV} \quad (105)$$

$$\left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle = 9.2956 \text{ eV} \quad (106)$$

$$\left\langle a(2) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle = K_{16} = -14.8811 \text{ eV} \quad (107)$$

$$\left\langle a(2) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle = -10.1712 \text{ eV} \quad (108)$$

$$K_{26} = -0.8756 \quad (109)$$

$$K_{27} = \left\langle b(1) a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1) a(2) \right\rangle$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi}\right)^2$$

$$\iiint \iiint e^{-x_2'} e^{-2x_1'} e^{-x_1} x_{12} \sin \theta_{12} dx_{12} d\theta_{12} d\varphi_{12} x_2^2 \sin \theta_2 dx_2 d\theta_2 d\varphi_2$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 I_{27} \quad (110)$$

$$I_{27} = 3.6604 \quad (111)$$

$$K_{27} = 10.0980 \text{ eV} \quad (112)$$

$$K_{28} = - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$= - \left\langle a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1)|a(1) \rangle \quad (113)$$

$$\left\langle a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(2) \right\rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0}\right) I_{28} \quad (114)$$

$$I_{28} = I'_{26} = 3.1416 \quad (115)$$

$$\left\langle a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(2) \right\rangle = 27.2138 \text{ eV} \quad (116)$$

$$K_{28} = -18.6006 \text{ eV} \quad (117)$$

$$K_{29} = - \left\langle b(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$= - \left\langle b(1) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1) \right\rangle = \frac{K_{10}}{K_5} = -13.8501 \text{ eV} \quad (118)$$

$$B_2 = K_{25} + K_{26} + K_{27} + K_{28} + K_{29} = -32.5183 \text{ eV} \quad (119)$$

$$B_3 = \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2)|b(2) \rangle$$

$$\begin{aligned}
& + \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| b(2) \right\rangle \langle a(1)|a(1)\rangle \\
& + \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)b(2) \right\rangle \\
& - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \\
& - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \quad (120)
\end{aligned}$$

$$K_{30} = \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2)|b(2)\rangle \quad (121)$$

$$K_{31} = \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| b(2) \right\rangle \langle a(1)|a(1)\rangle \quad (122)$$

$$K_{32} = \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)b(2) \right\rangle \quad (123)$$

$$K_{33} = - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \quad (124)$$

$$K_{34} = - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)b(2) \right\rangle \quad (125)$$

$$\begin{aligned}
K_{30} &= \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2)|b(2)\rangle \\
&= -13.6 \cdot 0.6835 = -9.2956 \text{ eV} \quad (126)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_{31} &= \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| b(2) \right\rangle \langle a(1)|a(1)\rangle \\
&= \langle a(2)|b(2)\rangle (-13.6) \\
&= -13.6 \cdot 0.6835 = -9.2956 \text{ eV} \quad (127)
\end{aligned}$$

$$K_{32} = \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)b(2) \right\rangle$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2$$

$$\iiint \iiint e^{-2x_1} e^{-x_1'} e^{-x_2} x_{12} \sin \theta_{12} dx_{12} d\theta_{12} d\varphi_{12} x_2^2 \sin \theta_2 dx_2 d\theta_2 d\varphi_2$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 I_{32} \quad (128)$$

$$I_{32} = I_{22} = 3.6747 \quad (129)$$

$$K_{32} = K_{22} = 10.1375 \text{ eV} \quad (130)$$

$$K_{33} = - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)b(2) \right\rangle = K_{23} = -13.8503 \text{ eV} \quad (131)$$

$$K_{34} = - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)b(2) \right\rangle = K_{24} = -10.1712 \text{ eV} \quad (132)$$

$$B_3 = K_{30} + K_{31} + K_{32} + K_{33} + K_{34} = B_1 = -32.4752 \text{ eV} \quad (133)$$

$$B_4 = \int aaHbad\tau$$

$$= \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle \langle a(2) | a(2) \rangle$$

$$+ \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle a(1) | b(1) \rangle$$

$$+ \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| b(1)a(2) \right\rangle$$

$$- \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| b(1)a(2) \right\rangle$$

$$-\left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \quad (134)$$

$$K_{35} = \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle \langle a(2)|a(2) \rangle \quad (135)$$

$$K_{36} = \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle a(1)|b(1) \rangle \quad (136)$$

$$K_{37} = \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| b(1)a(2) \right\rangle \quad (137)$$

$$K_{38} = -\left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \quad (138)$$

$$K_{39} = -\left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| b(1)a(2) \right\rangle \quad (139)$$

$$K_{37} = K_{27} = 10.0980 \text{ eV} \quad (140)$$

$$K_{38} = K_{28} = -18.6006 \text{ eV} \quad (141)$$

$$K_{39} = K_{29} = -13.8501 \text{ eV} \quad (142)$$

$$K_{35} = \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle \langle a(2)|a(2) \rangle$$

$$= \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle \quad (143)$$

$$\left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right| b(1) \right\rangle = K_4 = 4.56 \quad (144)$$

$$\left\langle a(1) \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| b(1) \right\rangle = \langle a(1)|V_1|b(1) \rangle = K_3 = -13.85 \quad (145)$$

$$K_{35} = 4.56 - 13.85 = K_{25} = -9.29 \text{ eV} \quad (146)$$

$$K_{36} = \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle a(1)|b(1) \rangle$$

$$= (K_{15} + K_{16}) \langle a(1)|b(1) \rangle = K_{26} = -0.8756 \quad (147)$$

$$B_4 = B_2 = -32.5183 \text{ eV} \quad (148)$$

$$B = 2(B_1 + B_2 + B_3 + B_4) = 4(B_1 + B_2) = -259.974 \text{ eV} \quad (149)$$

$$C = 2 \left(\int aaHaad\tau + \int bbHaad\tau \right) = 2(C_1 + C_2) \quad (150)$$

$$C_1 = \int aaHaad\tau \quad (151)$$

$$C_2 = \int bbHaad\tau \quad (152)$$

$$C_1 = \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2)|a(2) \rangle$$

$$+ \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle a(1)|a(1) \rangle$$

$$+ \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$- \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$- \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (153)$$

$$K_{40} = \left\langle a(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle a(2)|a(2) \rangle \quad (154)$$

$$K_{41} = \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle a(1)|a(1) \rangle \quad (155)$$

$$K_{42} = \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (156)$$

$$K_{43} = - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (157)$$

$$K_{44} = - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (158)$$

$$\langle a(2)|a(2) \rangle = \frac{1}{\pi} I_{15} = \frac{1}{\pi} 3.14 = 1 \quad (155)$$

$$K_{40} = -13.6 \quad (156)$$

$$K_{41} = \left\langle a(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle = K_{15} + K_{16}$$

$$= 13.6 - 14.8811 = -1.2811 \text{ eV} \quad (157)$$

$$K_{42} = \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2$$

$$\iiint \iiint e^{-2x_1} e^{-2x_1'} x_{12} \sin \theta_{12} dx_{12} d\theta_{12} d\varphi_{12} x_2^2 \sin \theta_2 dx_2 d\theta_2 d\varphi_2$$

$$= \frac{1}{a_0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 I_{42} \quad (158)$$

$$I_{42} = 6.0972 \quad (159)$$

$$K_{42} = 16.8205 \text{ eV} \quad (160)$$

$$K_{43} = - \left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle$$

$$= - \left\langle a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(2) \right\rangle$$

$$= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0} I_{43} \quad (161)$$

$$I_{43} = I_{18} \quad (162)$$

$$K_{43} = K_{18} = -27.2 \text{ eV} \quad (163)$$

$$\begin{aligned} K_{44} &= -\left\langle a(1)a(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\ &= -\left\langle a(1) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1) \right\rangle \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0} I_{44} \end{aligned} \quad (164)$$

Conform ecuatiei (85)

$$K_{44} = -14.8811 \text{ eV} \quad (165)$$

$$C_1 = K_{40} + K_{41} + K_{42} + K_{43} + K_{44} = -40.1417 \text{ eV} \quad (166)$$

$$\begin{aligned} C_2 &= \int bbHaad\tau \\ &= \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle b(2)|a(2) \rangle \\ &+ \left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1)|a(1) \rangle \\ &+ \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\ &- \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \\ &- \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \end{aligned} \quad (167)$$

$$K_{45} = \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle b(2) | a(2) \rangle \quad (168)$$

$$K_{46} = \left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle \quad (169)$$

$$K_{47} = \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (170)$$

$$K_{48} = - \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (171)$$

$$K_{49} = - \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle \quad (172)$$

$$K_{45} = \left\langle b(1) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right| a(1) \right\rangle \langle b(2) | a(2) \rangle$$

$$= -13.6 \cdot \langle b(1) | a(1) \rangle \langle b(2) | a(2) \rangle$$

$$= -13.6 \cdot 0.6835 \cdot 0.6835 = -6.3535 \text{ eV} \quad (173)$$

$$K_{46} = \left\langle b(2) \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right| a(2) \right\rangle \langle b(1) | a(1) \rangle$$

$$= (K_{15} + K_{16}) \langle b(2) | a(2) \rangle \langle b(1) | a(1) \rangle$$

$$= (-1.2811) \cdot 0.6835 \cdot 0.6835 = -0.5984 \text{ eV} \quad (174)$$

$$K_{47} = \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| a(1)a(2) \right\rangle = \left\langle a(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| b(1)a(2) \right\rangle$$

$$= K_8 = 7.0178 \text{ eV} \quad (175)$$

$$K_{48} = - \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right| a(1)a(2) \right\rangle = K_{10} = -9.4666 \text{ eV} \quad (176)$$

$$K_{49} = - \left\langle b(1)b(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right| a(1)a(2) \right\rangle = K_{10} = -9.4666 \text{ eV} \quad (177)$$

$$C_2 = K_{45} + K_{46} + K_{47} + K_{48} + K_{49} = -18.8673 \text{ eV} \quad (178)$$

$$C = 2(C_1 + C_2) = 2(-40.1417 - 18.8673) = -118.018 \text{ eV} \quad (179)$$

$$\begin{aligned} & [c(ab + ba) + (aa + bb)]^2 \\ &= c^2(ab + ba)^2 + 2c(ab + ba)(aa + bb) + (aa + bb)^2 \\ &= c^2D + cE + F \end{aligned} \quad (180)$$

$$D = (ab + ba)^2 \quad (181)$$

$$E = 2(ab + ba)(aa + bb) \quad (182)$$

$$F = (aa + bb)^2 \quad (183)$$

$$D = \langle ab|ab \rangle + \langle ab|ba \rangle + \langle ba|ab \rangle + \langle ba|ba \rangle \quad (184)$$

$$\langle ab|ab \rangle = 1 \quad (185)$$

$$\langle ab|ba \rangle = \langle ba|ab \rangle = K_2 = 0.4672 \quad (186)$$

$$\langle ba|ba \rangle = 1 \quad (187)$$

$$D = 2 + 2 \cdot 0.4672 = 2.9344 \quad (188)$$

$$E = 2(\langle ab|aa \rangle + \langle ba|aa \rangle + \langle ab|bb \rangle + \langle ba|bb \rangle) \quad (189)$$

$$\langle ab|aa \rangle = \langle ba|aa \rangle = \langle ab|bb \rangle = \langle ba|bb \rangle = K_5 = 0.6835 \quad (190)$$

$$E = 8 \cdot 0.6835 = 5.468 \quad (191)$$

$$F = (aa + bb)^2 = \langle aa|aa \rangle + \langle aa|bb \rangle + \langle bb|aa \rangle + \langle bb|bb \rangle \quad (192)$$

$$\langle aa|aa \rangle = \langle bb|bb \rangle = 1 \quad (193)$$

$$\langle aa|bb \rangle = \langle bb|aa \rangle = 0.6835 \cdot 0.6835 = 0.4671 \quad (194)$$

$$F = 2 + 2 \cdot 0.4671 = 2.9342 \quad (195)$$

$$M = AE - BD = 13.7517 \quad (196)$$

$$N = 2(AF - CD) = -116.2609 \quad (197)$$

$$O = BF - CE = -117.4932 \quad (198)$$

Pentru ecuația (19) am obținut

$$13 \cdot c^2 - 116 \cdot c - 117 = 0 \quad (199)$$

$$c = \frac{58 - \sqrt{4885}}{13} \quad (200)$$

sau

$$c = \frac{\sqrt{4885} + 58}{13} \quad (201)$$

Solitiile ecuatiei (19) sunt

$$c = 9.8379 \quad (202)$$

si

$$c = -0.9148 \quad (203)$$

Daca în ecuația (199) folosim unitatea de energie 27.06 eV folosita de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) în loc de 27.2 eV folosita de noi inmultim ecuația (199) cu raportul celor doua energii si obtinem ecuatia

$$13.67c^2 - 115.39c - 116.39 = 0$$

care are solutiile

$$c = 9.35$$

si

$$c = -0.91$$

Pentru $c = 1$ obtinem energia

$$W = -45.5012 \text{ eV} \quad (204)$$

si rezulta energia moleculei de hidrogen

$$W_{H_2} = -45.5012 + 16.4848 = -29.0164 \text{ eV}$$

Rezulta ca energia de legatura a moleculei de hidrogen este

$$E_{leg} = 2E_H - H_2 = 1.8164 \text{ eV}$$

Pentru valoarea coeficientului c data de ecuația (202) am obtinut energia

$$W = -46.739 \text{ eV} \quad (205)$$

Adunand energia de interactiune nucleara E_N notata cu K_6 obtinem energia totala a moleculei de hidrogen

$$W_{H_2} = -46.739 + 16.4848 = -30.2542 \text{ eV} \quad (206)$$

Pentru energia de legatura a moleculei de hidrogen obtinem

$$E_{leg} = -27.2 + 30.2542 = 3.0542 \text{ eV} \quad (207)$$

Pentru $c = 6.322$ obtinut de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) noi, cu valorile coeficientilor din Tabelul 1 pentru $p = 1.65$, obtinem energia totala a moleculei de hidrogen

$$W_{H_2} = \frac{-7270.27}{154.55} + 16.4848 = -47.0415 + 16.4848 = -30.5567 \text{ eV} \quad (208)$$

si obtinem energia de legatura

$$E_{leg} = -27.2 + 30.5567 = 3.3567 \text{ eV} \quad (209)$$

Conform cu lucrarea Wang, S. C., The Problem of Normal Hydrogen Molecule în the New Quantum Mechanics, Phys. Rev. 31, 579 (1928) energia de disociere a moleculei de hidrogen este suma energiei de legatura si energiei de vibratie a nucleelor.

Cunoasterea teoretica a energiilor de legatura ale moleculelor care intra într-o reactie chimica da posibilitatea verificarii energiilor de legatura experimentale si calcularea caldurii produse într-o reactie cu un numar cunoscut de molecule. De asemenea, da posibilitatea verificarii structurii fine a nivelelor de energie care conform Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011 este datorata interactiunii dintre spinul si momentul unghiular al electronului, numita interactiunea spin-orbita. Astfel, conform cu Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011 energia potentiala de interactiune dintre vectorii spin $\mathbf{S}$ al electronului si moment unghiular $\mathbf{L}$ al electronului pentru atomul de

hidrogen, numita energia spin-orbita, care da structura fina a nivelelor de energie, este data de ecuatia

$$U = \frac{\mu_0 e^2}{8\pi m_e^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

De asemenea da posibilitatea verificarii structurii hiperfine a nivelelor de energie care conform Mansfield, M., and O'Sullivan, C., *Understanding Physics*, Wiley, 2011 este datorata interactiunii dintre momentul dipolar magnetic al nucleului si momentul magnetic al atomului. în lucrarea amintita anterior este prezentat ca momentul magnetic dipolar al nucleonului este

$$\mathbf{m} = \frac{e^2}{2m_n} \mathbf{L}$$

unde m_n este masa nucleonului. Aceste structuri ale nivelelor de energie dau posibilitatea determinarii compozitiei si concentratiilor materialelor folosind spectroscopia.

Pachucki, Krzysztof, and Komasa, Jacek, Schrödinger equation solved for the hydrogen molecule with unprecedented accuracy, *J. Chem. Phys.* 144, 164306 (2016) prezinta ca molecula de hidrogen poate fi folosita pentru determinarea unor constante fizice, incluzand raza de sarcina a protonului, si pentru un test imbunatatit al fortei ipotetice de raza lunga dintre hadroni, care pretinde cunoasterea suficient de precisa a nivelelor moleculare. în lucrarea amintita mai sus este prezentat ca ei realizeaza primul pas catre o imbunatatire semnificativa în predictiile teoretice ale H_2 si rezolva ecuația Schrödinger nerelativista pana la precizia neasteptata de 10^{-12} .

Tatal meu, Imre Domokos, a avut o Dacia combi si ma invatat ca sa verific nivelul uleiului cu joja, cand motorul este oprit sa scot joja din motor si sa verific dacă nivelul uleiului pe joja este mai mic decat minimul, si dacă este mai mic sa completez uleiul pe care sa-l torn prin capacul de la motor dar sa nu depaseasca nivelul maxim.

Baiatul meu, Eduard Stefan Domokos, mi-a explicat ca la un service ia aratat ca la scuter benzina intra în motor printr-un tub de plastic transparent, se trage cu gura sa se verifice dacă intra benzina si dacă nu intra benzina se regleaza cu un robinet.

1.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca valoarea coeficientului c din functia de unda cu stari ionice calculata de noi din ecuația (19) are valoarea 9.8379.

2.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca pentru valoarea coeficientului c de la punctul 3 de la revendicari am orbtinut ca energia moleculei de hidrogen are valoarea -30.2542 eV .

DESENE EXPLICATIVE

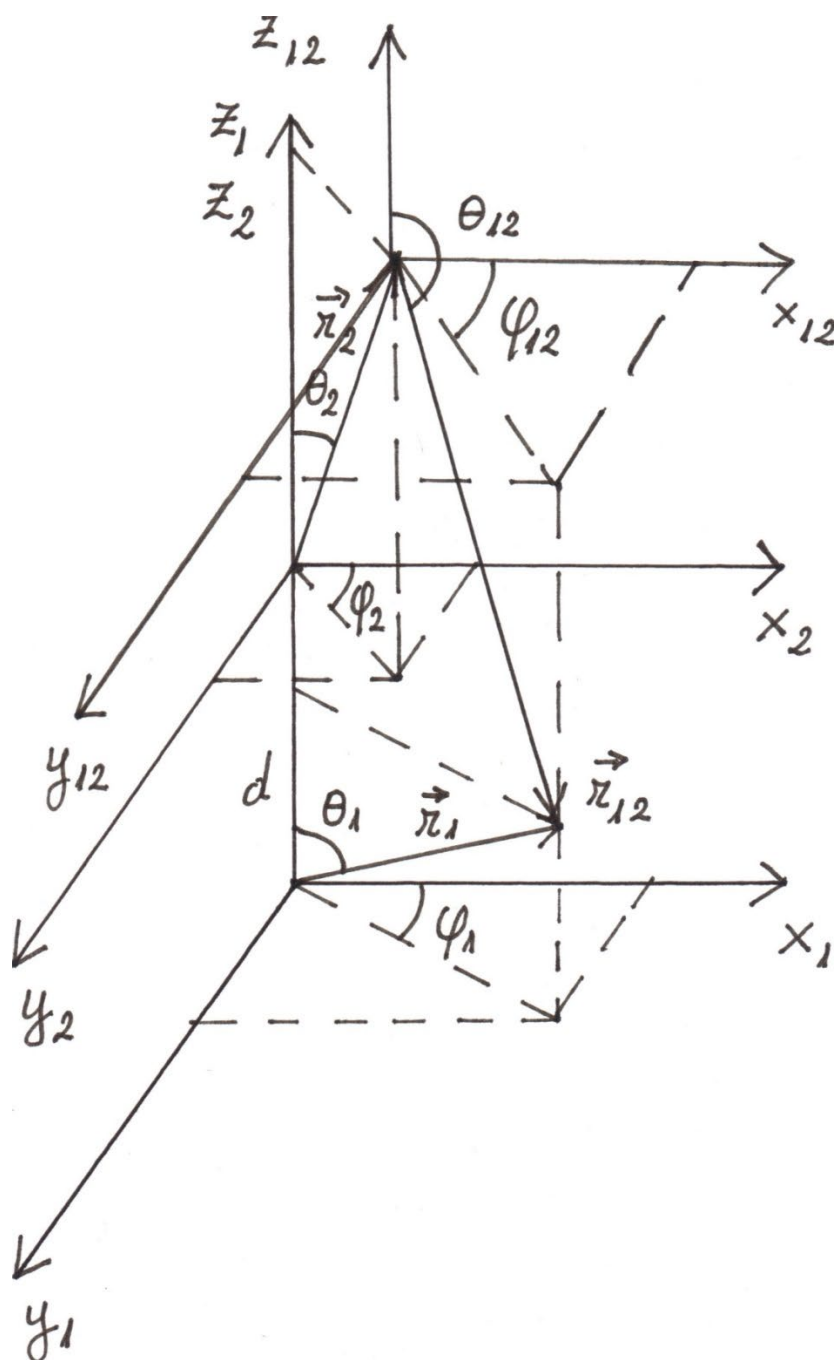


Fig. 1.

BIBLIOGRAFIE

Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011.

Pachucki, Krzysztof, and Komasa, Jacek, Schrödinger equation solved for the hydrogen molecule with unprecedented accuracy, J. Chem. Phys. 144, 164306 (2016).

Pauling, Linus, The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, Journ. Am. Chem. Soc. 53, 1367 (1931).

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008.

Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931).

Wang, S. C., The Problem of Normal Hydrogen Molecule in the New Quantum Mechanics, Phys. Rev. 31, 579 (1928).

Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) Copyright Clearance Center RightLink License Number 3872960520202 License Date May 20, 2018.

37. MINIMUL ENERGIEI MOLECULEI DE HIDROGEN ÎN FUNCȚIE DE DISTANȚA INTERNUCLEARĂ CA REZULTAT AL VARIAȚIEI DIFERITE PE UNITATEA DE DISTANȚĂ A ENERGIEI ELECTRONILOR ȘI AL INTERACȚIEI DINTRE NUCLEE SAU EGALITATEA DERIVATELOR CELOR DOUĂ ENERGII ÎN FUNCȚIE DE DISTANȚA INTERNUCLEARĂ

Am făcut observațiile de mai jos deoarece toate integralele calculate de noi pentru calculul energiei totale a moleculei de hidrogen, în capitolele precedente și în capitolul următor, au variații continuu descrescătoare sau crescătoare în funcție de distanța internucleară.

Dacă prezentăm într-un tabel energia moleculei de hidrogen fără energia de interacțiune dintre nuclee și energia de interacțiune dintre nuclee în funcție de distanța internucleară din Tabelul 3 din Capitolul 9 VIII.I. obținem Tabelul 1 din acest capitol.

Tabelul 1.

p	$W - E_N$ (eV)	E_N (eV)
1.21	-53.5095	22.4793
1.41	-50.7315	19.2908
1.46	-50.0804	18.6301
1.51	-49.4486	18.0132
1.61	-48.2403	16.8944

Din Tabelul 1 noi am obținut Figura 1 prezentată mai jos.

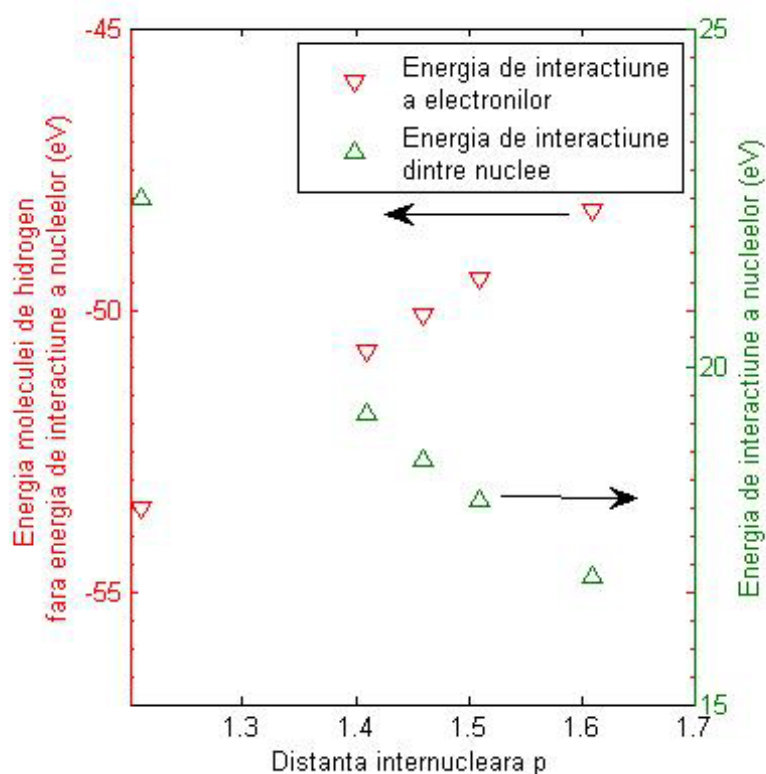


Fig.1.

Din Tabelul 1 și Figura 1 de mai sus observăm ca ambele energii variază monoton, prima crește și a doua scade, și energia totală este suma lor. Din această variație a energiilor, observată de noi, am dedus că minimul energiei totale rezultă din faptul că cele două energii variază diferit în funcție de distanța internucleară, deoarece dacă ele ar varia liniar atunci suma lor ar fi liniară și nu ar avea minim, ceea ce se poate demonstra prin aplicarea ecuației drepte din lucrarea (Kelley, W. Michael, 2004, pp. 23-24), și atunci ecuațiile celor două drepte ar fi

$$y_1 = m_1x + b_1 \quad (1)$$

$$y_2 = m_2x + b_2 \quad (2)$$

și adunând ecuațiile (1) și (2) obținem

$$y = y_1 + y_2 = (m_1 + m_2)x + b_1 + b_2 \quad (3)$$

În Tabelele 2 și 3 am calculat aceste variații. Conform Tabelului 2 observăm că, la distanțe internucleare mai mici de minimul energiei totale, creșterea energiei de interacțiune a

electronilor este mai mică decât scăderea energiei de interacțiune dintre nuclee și rezultă o scădere a energiei totale, și, la distanțe mai mari decât minimul, creșterea primei energii este mai mare decât scăderea celei de a doua și rezultă o creștere a energiei totale.

Tabelul 2.

Poziția variației	Intervalul de distanță internucleară $p_{i+1} \div p_i$	Δp (unități atomice)	$ \Delta(W - E_N) $ (eV)	$ \Delta E_N $ (eV)
1	1.41÷1.21	0.2	2.778	3.1885
2	1.46÷1.41	0.05	0.6511	0.6607
3	1.51÷1.46	0.05	0.6318	0.6169
4	1.61÷1.51	0.1	1.2083	1.1188

Tabelul 3.

Poziția variației	Intervalul de distanță internucleară (unități atomice) $p_{i+1} \div p_i$	Δp (unități atomice)	$ \Delta(W - E_N)/\Delta p $ $\left(\frac{eV}{unități\ atomice}\right)$	$ \Delta E_N/\Delta p $ $\left(\frac{eV}{unități\ atomice}\right)$
1	1.41÷1.21	0.2	13.89	15.9425
2	1.46÷1.41	0.05	13.022	13.214
3	1.51÷1.46	0.05	12.636	12.338
4	1.61÷1.51	0.1	12.083	11.188

În Figura 2 reprezentată de noi cu datele din Tabelul 2 observăm aceste variații diferite a celor două energii.

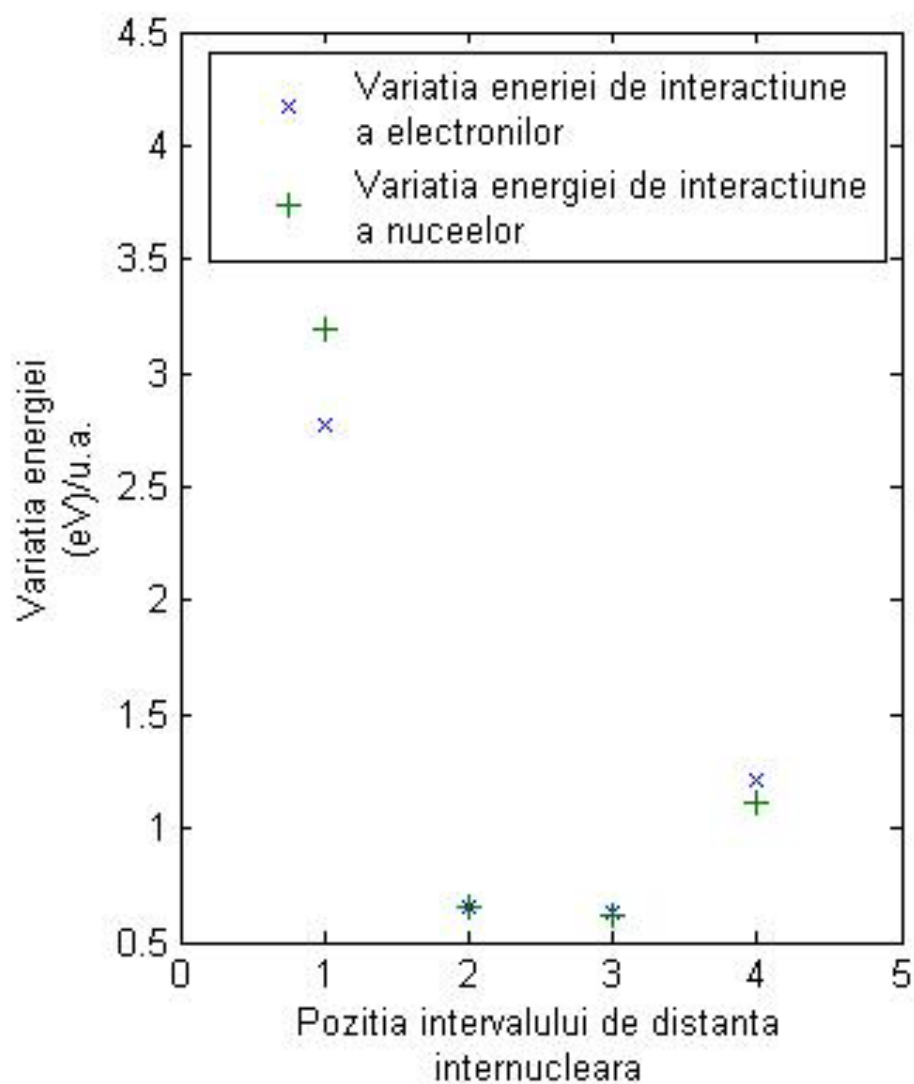


Fig. 2.

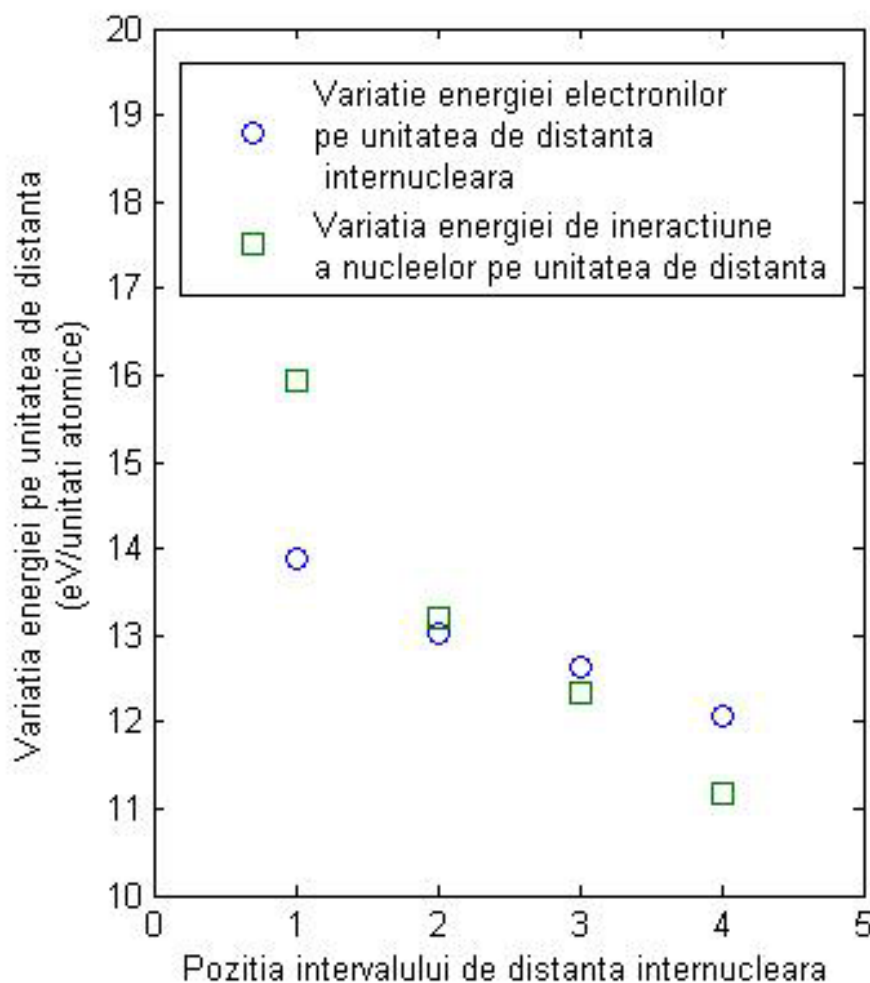


Fig. 3.

Din rezultatele din Tabelul 3 și din Figura 3 noi am dedus că cele două energii variază monoton pe unitatea de lungime și că minimumul energiei moleculei de hidrogen rezultă din faptul că variația energiei de interacțiune a electronilor pe unitate de lungime o depășește într-un punct, corespunzător minimumului energiei, pe aceea a nucleelor.

BIBLIOGRAFIE

Kelley, W. Michael, CliffsQuickReview Precalculus, Wiley, 2004.

38. MINIMUL ENERGIEI MOLECULEI DE HIDROGEN CA REZULTAT AL CRESTERII ENERGIEI INTERACTIUNII ELECTRONILOR SI SCADEREA ACESTEIA DATORITA INTERACTIUNII DINTRE NUCLEE ÎN FUNCȚIE DE DISTANTA INTERNUCLEARA II

În lucrarea Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011 este prezentat calculul energiei stării fundamentale a atomului de hidrogen cu modelul lui Bohr. Acelas calcul este inclus în materia de fizica de liceu de clasa a 12 – a și este prezentat în Rusu, O., Traistaru, C., Dinica, L., Nistor, M., Fizica F1+F2 manual pentru clasa a XII-a, Editura Corint, Bucuresti, 2007. Aceeasi valoare a energiei fundamentale a atomului de hidrogen este obtinuta și prin rezolvarea ecuației Schrödinger conform cu Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011. În inventie folosim aceasta valoare.

Calculam procentul funcției de unda Heitler-London în funcția de unda cu stări ionice a moleculei de hidrogen cu metoda Slater-Pauling, cu funcțiile de unda set de baza și de ordinul întâi și metoda date de Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933). Aceasta funcție de unda este

$$\begin{aligned}\psi &= c[a(1)b(2) + b(1)a(2)] + a(1)a(2) + b(1)b(2) \\ &= c(ab + ba) + aa + bb\end{aligned}\quad (1)$$

unde a și b sunt funcțiile de unda 1s ale celor doi atomi de hidrogen, 1 și 2 reprezintă atomul 1 și 2, și c este un parametru. Conform cu lucrarea Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011 funcțiile de unda atomice 1s ale atomului de hidrogen, a și b , sunt date de ecuația

$$a(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (2)$$

unde r este distanța electronului față de nucleu, și a_0 este raza Bohr.

În inventie calculam energia moleculei și parametrul c din ecuația (1) la trei distanțe internucleare 1.57, 1.63 și 1.69 u.a. pentru a obține distanța internucleară corespunzătoare minimului energiei.

Conform acestei metode energia moleculei de hidrogen este

$$W = \frac{W_N}{d} = \frac{\int H [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau}{\int [c(|a(1)b(2)\rangle + |b(1)a(2)\rangle) + |a(1)a(2)\rangle + |b(1)b(2)\rangle]^2 d\tau} \quad (3)$$

Daca nu includem în Hamiltonianul H energia de repulsie Coulombiana dintre nuclee, care este funcție numai de distanta internucleara, din ecuația (3) obținem

$$W = \frac{c^2 A + cB + C}{c^2 D + cE + F} \quad (4)$$

În aceasta metoda de aplica principiul ca parametrul c din ecuația (4) sa se calculeze din conditia de minim a energiei, care este

$$\frac{dW}{dc} = 0 \quad (5)$$

Din ecuațiile (4) și (5) rezulta

$$\frac{dW}{dc} = \frac{c^2(AE - BD) + 2c(AF - CD) + BF - CE}{(c^2 D + cE + F)^2} = 0 \quad (6)$$

și obținem o ecuație de gradul 2 în parametrul c

$$Mc^2 + Nc + O = 0 \quad (7)$$

Notam distanta internucleara

$$d = pa_0 \quad (8)$$

unde a_0 este raza Bohr. Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) a obținut minimul energiei moleculei de hidrogen în acest model pentru

$$p = 1.67 \quad (9)$$

la care pentru parametrul c a obținut valoarea 6.322 și pentru energia moleculei a obținut valoarea -30.3443 eV.

Cu metoda Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931)

$$W = \frac{\langle ab|H|ab\rangle + \langle ab|H|ba\rangle}{1 + \langle ab|ba\rangle} \quad (10)$$

noi am obtinut pentru minimul energiei

$$p = 1.65 \quad (11)$$

pentru care am obtinut energia minima a moleculei egala cu -30.4802 eV. în inventie calculam parametrul c în funcție de distanta internucleara p .

Conform lui Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) potentialul moleculei de hidrogen este

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (12)$$

si conform celor prezentate mai sus în calculele noastre nu includem energia de repulsie Coulombiana dintre nuclee.

Tabelul 1. Integralele calculate de noi pentru calculul energiei moleculei de hidrogen pentru valorile distantei internucleare $p=1.57, 1.63$, si 1.69 .

Marimea sau integrala	Nota tia	Valoarea totala K pentru p 1.57 1.63 1.69 1.49 1.89
$E_1 = -E_0$	K_1	-13.6
$\langle ab ba \rangle$	K_2	0.4947 0.4745

		0.4516
		0.5299
		0.3800
$\langle a(1) V_1 b(1)\rangle$	K_3	-14.5432
		-14.0160
		-13.5009
		-15.2640
		-11.8755
$\left\langle a(1)\left -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2\right b(1)\right\rangle$	K_4	4.9469
		4.6481
		4.3614
		5.3638
		3.4913
$\langle a(1) b(1)\rangle$	K_5	0.7033
		0.6888
		0.6720
		0.7279
		0.6164
E_N	K_6	17.3248
		16.6871
		16.0947
		18.2550

		14.3915
$\left\langle ab \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right ab \right\rangle$	K_7	13.0118 12.7949 12.5789 13.3017 11.8694
$\left\langle ab \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right ba \right\rangle$	K_8	7.5500 7.1488 6.7608 8.1041 5.5669
$\left\langle a(1)b(2) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_9	-15.4055 -15.0100 -14.6280 -15.9543 -13.4491
$\langle a(1) b(1) \rangle \left\langle b(2) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1'} \right a(2) \right\rangle$	K_{10}	-10.2334 -9.6591 -9.0772 -11.1163 -7.3237

Tabelul 2. Valorile calculate de noi ale integralelor folosite în calculul procentului funcției de unda Heitler-London în funcția de unda a moleculei de hidrogen cu stări ionice și în calculul energiei corespunzătoare a moleculei folosind modelul din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) în funcție de distanța internucleară la valorile distanței internucleare de $p = 1.57, 1.63, 1.69$.

Marimea sau integrala	Notatia	Valoarea corespunz atoare	Valoarea pentru $p =$ 1.57 1.63 1.69 1.49 1.89
$A_0 = 2 \times K_1 + K_7 + 2 \times K_9 + 2 \times K_4 \times K_5 + 2 \times K_3 \times K_5 + K_8 + 2 \times K_{10}$			-71.4142 -69.4997 -67.5542 -74.3481 -61.6453
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) b(2) \rangle$	K_{12}	$K_1 K_2$ $= K_1 K_5^2$	-6.7279 -6.4532 -6.1417 -7.2066 -5.1680
$\left\langle b(1) a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1) b(2) \right\rangle$	K_{13}	K_8	7.5500

			7.1488
			6.7608
			8.1041
			5.5669
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{14}	K_{10}	-10.2334
			-9.6591
			-9.0772
			-11.1163
			-7.3237
$A_2 = 2 \cdot K_{12} + K_{13} + 2 \cdot K_{14}$			-26.3726
			-25.0758
			-23.6770
			-28.5418
			-19.4165
$K_{15} = \left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right b(1) \right\rangle$	K_{15}		13.6
			13.6
			13.6
$K_{16} = \left\langle b(1) \left -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right b(1) \right\rangle$	K_{16}	K_9	-15.4055
			-15.0100
			-14.6280
			-15.9543
			-13.4491

$K'_{15} = \langle a(2) a(2)\rangle$	K'_{15}		1 1 1
$K_{17} = \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{17}		12.9588 12.7384 12.5189 13.2533 11.7977
$K_{18} = - \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{18}	$I_{18} = I_{15}'$	-27.2 -27.2 -27.2
$K_{19} = - \left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{19}		-27.2 -27.2 -27.2
$A_3 = 2 \cdot K_{15} \cdot K'_{15} + 2 \cdot K_{16} \cdot K'_{15} + K_{17} + K_{18} + K_{19}$			-45.0522 -44.4816 -43.9371 -45.8553 -42.3005
$A = A_0 + A_2 + A_3$			-142.8390 -139.0571 -135.1683

			-148.7452 -123.3623
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle b(2) a(2) \rangle$	K_{20}	$-13.6 \cdot K_5$	-9.5649 -9.3677 -9.1392 -9.8994 -8.3830
$\left\langle b(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{21}	$K_4 + K_3$	-9.5963 -9.3679 -9.1395 -9.9002 -8.3842
$K_{22} = \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{22}		10.5757 10.2465 9.9208 11.0192 8.8675
$K_{23} = - \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{23}	$\frac{K_{10}}{K_5}$	-14.5505 -14.0231 -13.5077 -15.2717 -11.8814

$K_{24} = - \left\langle a(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{24}	$K_9 \cdot K_5$	-10.8347 -10.3389 -9.8300 -11.6131 -8.2900
$B_1 = K_{20} + K_{21} + K_{22} + K_{23} + K_{24}$			-33.9707 -32.8511 -31.6957 -35.6653 -28.0712
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{25}	$K_{20} = K_1 \cdot K_5$	-9.5649 -9.3677 -9.1392 -9.8994 -8.3830
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle b(1) a(1) \rangle$	$K_{26} \neq K_{21}$	$(K_{15} + K_{16})K_5 = (K_{15} + K_9)K_5$	-1.2698 -0.9712 -0.6908 -1.7137 0.0930
$\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{27}		10.5387 10.2076

			9.8802 10.9846 8.8215
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{28}	$2K_1K_5$	-19.1298 -18.7354 -18.2784 -19.7989 -16.7661
$-\left\langle b(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{29}	K_{23} $= \frac{K_{10}}{K_5}$	-14.5505 -14.0231 -13.5077 -15.2717 -11.8814
$B_2 = K_{25} + K_{26} + K_{27} + K_{28} + K_{29}$			-33.9763 -32.8898 -31.7359 -35.6991 -28.1160
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) b(2) \rangle$	K_{30}	K_{20}	
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right b(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{31}	K_{20}	

$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{32}	K_{22}	
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{33}	K_{23}	
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)b(2) \right\rangle$	K_{34}	K_{24}	
B_3			-33.9393 -32.8508 -31.6954 -35.6644 -28.0699
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right b(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{35}	K_{21} $= K_4$ $+ K_3$	-9.5963 -9.3679 -9.1395
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) b(1) \rangle$	K_{36}	K_{26}	
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{37}	K_{27}	
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{38}	K_{28}	
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right b(1)a(2) \right\rangle$	K_{39}	K_{29}	
B_4			-34.0077 -32.8900

			-31.7362 -35.6999 -28.1172
$B = 2(B_1 + B_2 + B_3 + B_4)$			-271.7879 -262.9632 -253.7262 -285.4574 -224.7485
$\left\langle a(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle a(2) a(2) \rangle$	K_{40}	K_1	-13.6 -13.6 -13.6
$\left\langle a(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle a(1) a(1) \rangle$	K_{41}	K_{26}/K_5	-1.8055 -1.4100 -1.0280
$\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{42}		16.8330 16.8238 16.8142 16.8448 16.7792
$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{43}	$I_{43} = I_{15}'$	-27.2 -27.2 -27.2

$-\left\langle a(1)a(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{44}	$I_{44} = I_{16}$	-15.4055 -15.0100 -14.6280 -15.9543 -13.4491
$C_1 = K_{40} + K_{41} + K_{42} + K_{43} + K_{44}$			-41.1780 -40.3962 -39.6418 -42.2638 -37.3190
$\left\langle b(1) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right a(1) \right\rangle \langle b(2) a(2) \rangle$	K_{45}	$K_{12} = K_1 K_2$	-6.7279 -6.4532 -6.1417 -7.2066 -5.1680
$\left\langle b(2) \left -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right a(2) \right\rangle \langle b(1) a(1) \rangle$	K_{46}	$K_{35} K_5 = (K_4 + K_3) K_5$	-6.7491 -6.4526 -6.1417 -7.2064 -5.1680
$\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{47}	K_8	7.5500 7.1488

			6.7608
			8.1041
			5.5669
$-\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{48}	K_{10}	-10.2334
			-9.6591
			-9.0772
			-11.1163
			-7.3237
$-\left\langle b(1)b(2) \left \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2'} \right a(1)a(2) \right\rangle$	K_{49}	K_{10}	-10.2334
			-9.6591
			-9.0772
			-11.1163
			-7.3237
$C_2 = K_{45} + K_{46} + K_{47} + K_{48} + K_{49}$			-26.3938
			-25.0752
			-23.6770
			-28.5415
			-19.4165
$C = 2(C_1 + C_2)$			-135.1436
			-130.9428
			-126.6376
			-141.6106

			-113.4710
--	--	--	-----------

Tabelul. 3. Coeficientii ecuației energiei moleculei de hidrogen cu stări ionice data de ecuațiile (4) și (7), parametrul c din ecuația (7) și energia calculate de noi pentru distanța internucleară $p = 1.49, 1.57, 1.63, 1.69, 1.89$.

Coeficientul	Valoarea pentru $p=$ 1.57 1.63 1.69 1.49 1.89
A	-142.8390 -139.0571 -135.1683 -148.7452 -123.3623
B	-271.7879 -262.9632 -253.7262 -285.4574 -224.7485

C	-135.1436
	-130.9428
	-126.6376
	-141.6106
	-113.4710
D	2.9894
	2.9490
	2.9032
	3.0598
	2.7600
E	5.6264
	5.5104
	5.3760
	5.8232
	4.9312
F	2.9894
	2.9490
	2.9032
	3.0598
	2.7600
M	8.8133
	9.2183

	9.9532
	7.2695
	11.9814
N	-46.0093
	-47.8581
	-49.5327
	-43.6608
	-54.5999
O	-52.1107
	-53.9313
	-55.8142
	-48.8156
	-60.7574
c	6.1776
	6.1493
	5.9233
	6.9695
	5.4821
W	-30.5263
	-30.5418
	-30.5499
	-30.4067

	-30.4283
E_{leg}	3.3263
	3.3418
	3.3499
	3.2067
	3.2283

La distantele internucleare $p = 1.57, 1.63$ si 1.69 u.a. pentru coeficientii din ecuația (4) si (7) si pentru parametrul c din ecuația (7) am obtinut valorile din Tabelul 3.

Folosind coeficientii din Tabelul 3 pentru ecuația (7) am obtinut pentru parametrul c valorile din Tabelul 3 în funcție de distanta internucleara si am obtinut pentru energia moleculei de hidrogen valorile din Tabelul 3 în funcție de distanta internucleara.

În Fig. 2. am reprezentat energia moleculei de hidrogen în funcție de distanta internucleara obtinuta de noi cu metoda Heitler-London-Slater-Pauling cu triunghiuri orientate în jos, si cu metoda Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stari ionice fara constanta de ecranare cu triunghiuri orientate inspre dreapta. Din Fig. 2. observam ca la distanta internucleara $1.69a_0$ energia moleculei de hidrogen cu metoda Weinbaum tinde catre un minim, prezis de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933), pentru care noi am obtinut valoarea de -30.5499 eV si care este mai mica decat minimul cu metoda Heitler-London-Slater-Pauling.

Aceste rezultate se supun principiului variational Slater-Pauling prin care functii de unda set de baza si de ordinul intai mai exacte date de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) conduc la o energiei mai precisa a moleculei dar mai mare decat aceea exacta.

Rezultatele din Figura 2 demonstreaza ca molecula de hidrogen are o stare covalenta si doua stari ionice reprezentate de functia de unda din ecuația (1), care este mai buna decat

functia de unda Hetitler-London-Slater-Pauling fara stari ionice deoarece are o energie mai mica decat în modelul Heitler-London-Slater-Pauling fara stari ionice si mai mare decat energia exacta.

Daca calculam cresterea energiei moleculei de hidrogen fara interactiunea dintre nuclee cu cresterea distantei internucleare pentru valorile din Tabelul 3 si scadea energiei de interactiune Coulombiana dintre nuclee obtinem rezultatele din Tabelul 4.

Tabelul 4.

Intervalul	Δw	ΔE_n
1.49-1.57	0.8106	0.9302
1.57-1.63	0.6222	0.6377
1.63-1.69	0.5843	0.5924
1.69-1.89	1.8247	1.7031

Din Tabelul 4 observam ca valoarea cu care creste energia moleculei de hidrogen fara interactiunea dintre nuclee scade, insa scade si valoare cu care scade energia de interactiune dintre nuclee. Pentru distante internucleare mai mici de 1.69 u.a. energia moleculei de hidrogen fara interactiunea dintre nuclee creste cu o valoare mai mica decat valoarea cu care scade energia de interactiune dintre nuclee. De la distanta internucleara de aproximativ 1.69 u.a. energia de interactiune dintre nuclee scade cu o valoare mai mica decat cresterea energiei moleculei fara interactiunea dintre nuclee si rezulta o crestere a energiei moleculei de hidrogen si un minim la o valoare a distantei internucleare de aproximativ 1.69 u.a..

In Fig. 3 am reprezentat variatia energiei de interactiune a electronilor si variatia energiei de interactiune a nucleelor pe diferite intervale ale distantei internucleare. Din rezultatele din Tabelul 3 observam ca energia de interactiune a electronilor produce o cerstere a energiei moleculei de hidrogen cu creterea distantei internucleare si energia de interactiune a nucleelor produce o scadere. în aceasta Fig. 3 observam ca cretserea energiei moleculei de hidrogen produsa de energia de interactiune a electronilor este mai mica decat scaderea

produsa de energia de interactiune a nucleelor pe primele trei intervale si este mai mare pe ultimul interval, de unde rezulta un minim a energiei moleculei.

Toate calculele si reprezentarea din Fig. 2 din inventie le-am realizat cu programul MATLAB R2014 a.

1.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca pentru valorile constantelor din ecuatiile (4) si (7), valorile corespunzatoare ale parametrului c din ecuația (7) si valorile energiei moleculei de hidrogen am obtinut, cu metoda Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stari ionice si fara constanta de ecranare, valorile din Tabelul 3 care tind catre un minim al energiei la distanta internucleara de aproximativ 1.69 u.a. pentru care pentru parametrul c din ecuația (1) si (7) am obtinut valoarea de 5.9233 si pentru energia moleculei am obtinut valoarea de -30.5499 eV.

2.Revendicam molecula de hidrogen caracterizata prin aceea ca folosind modelul Heitler-London-Slater-Pauling cu functia de unda cu stari ionice fara constanta de ecranare data de Weinbaum (1933) se obtine ca minimul energiei rezulta din cresterea energiei de interactiune a electronilor si scaderea energiei de interactiune dintre nuclee cu cresterea distantei internucleare, si pentru distante mai mici cretserea este mai mica decat scaderea, si de la distanta corespunzatoare minimului energiei cresterea este mai mare decat scaderea.

DESENE EXPLICATIVE

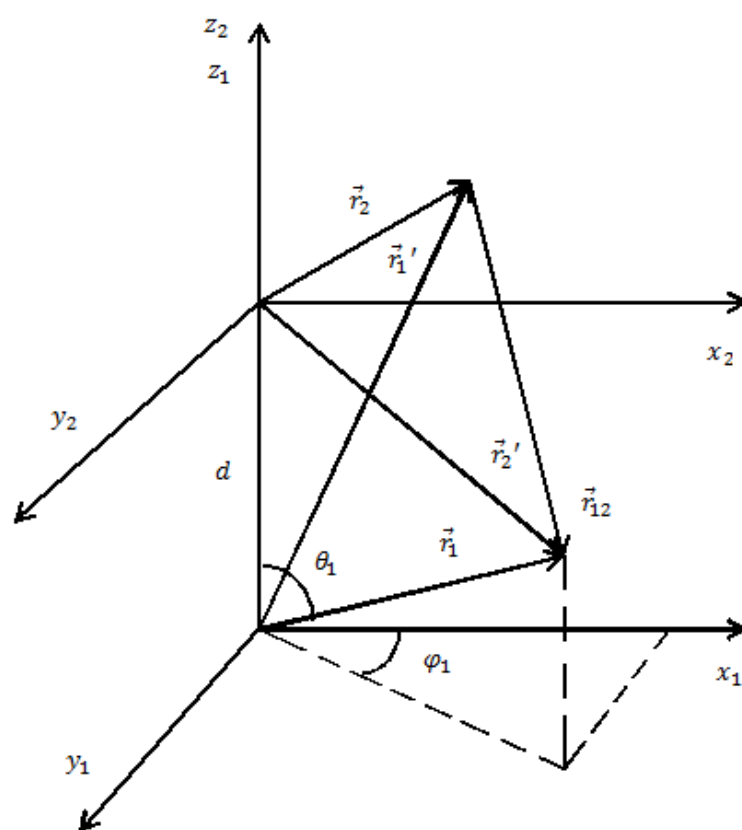


Fig. 1.

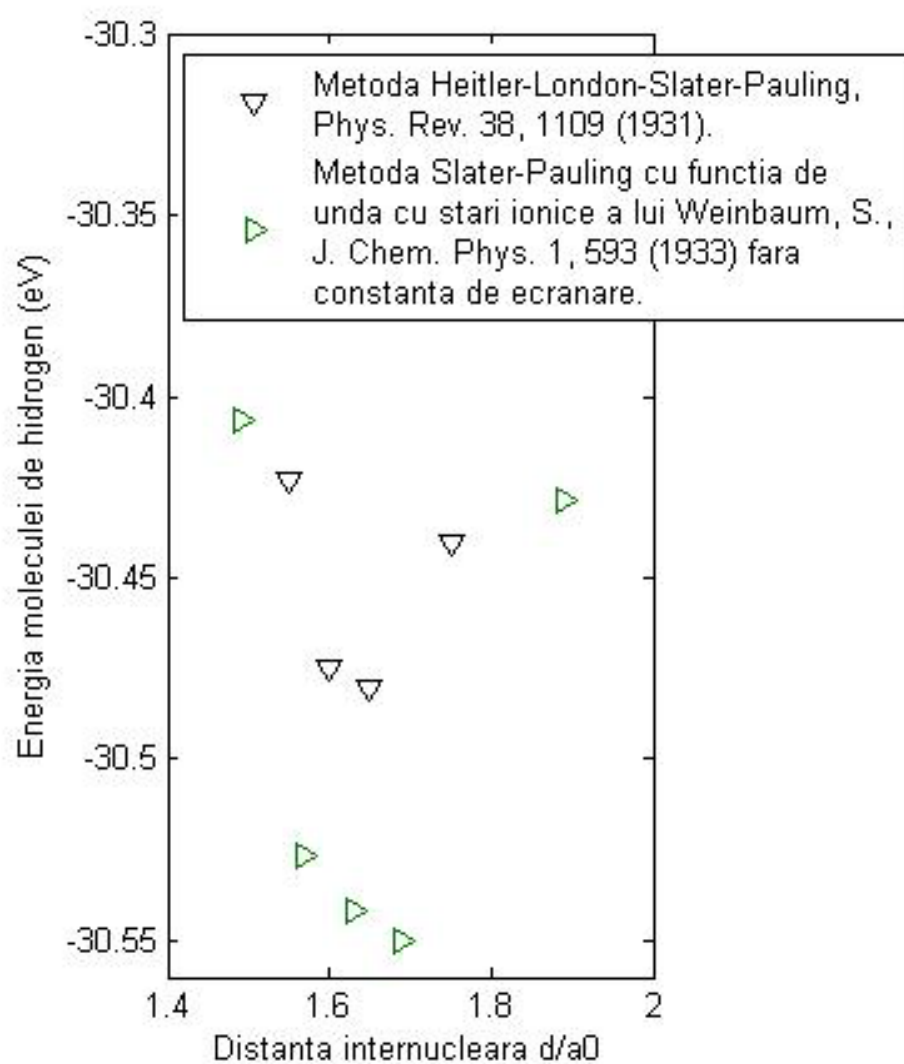


Fig. 2.

Variatia energiei de interactiune a electronilor intre ei si cu nucleele
si a nucleeelor intre ele in functie de intervale de distante internucleare

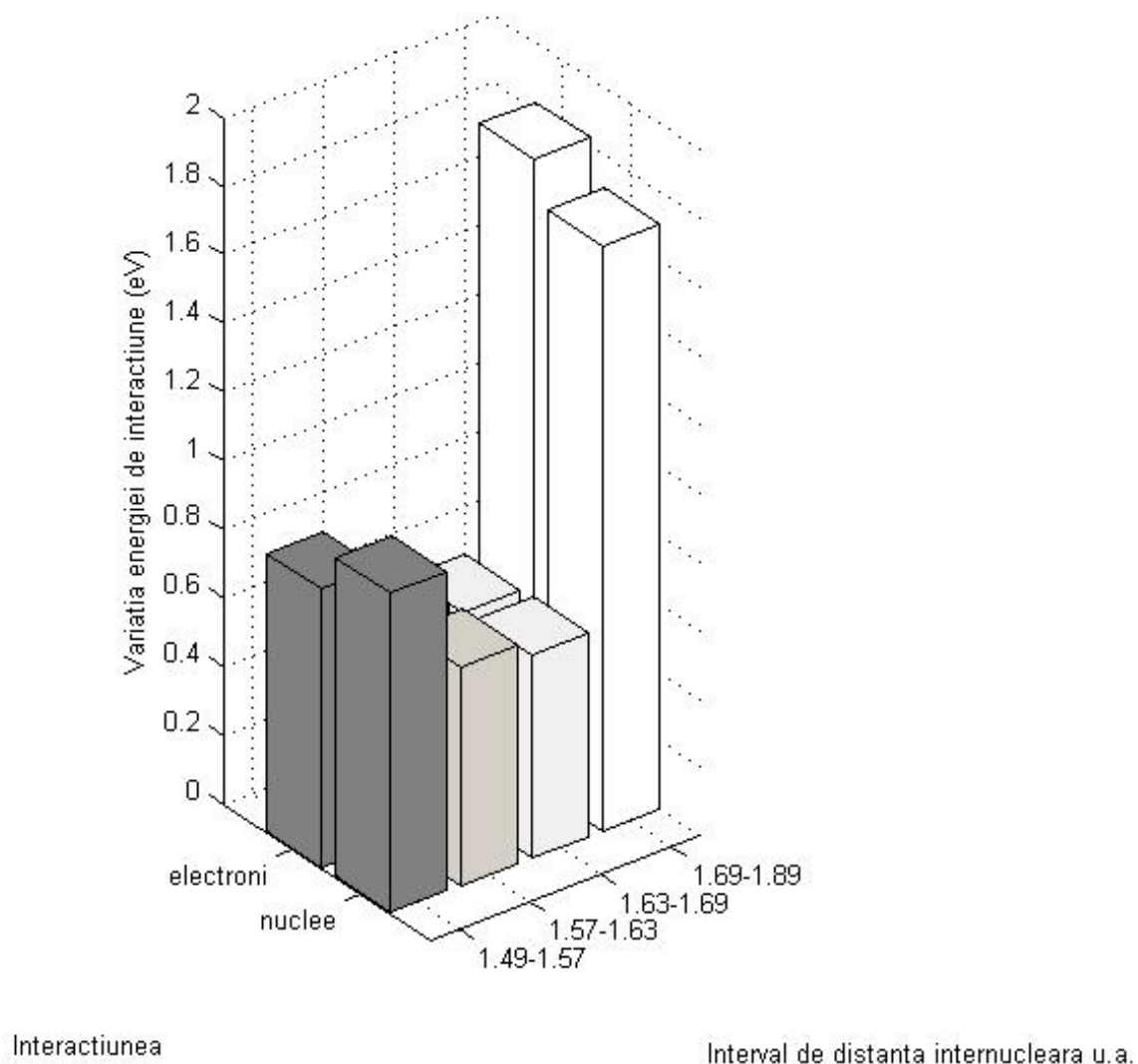


Fig. 3.

REZUMATUL INVENTIEI

Am calculat minimul energiei moleculei de hidrogen în funcție de distanta internucleara cu modelul lui Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) cu stari ionice fara constanta de ecranare si am obtinut ca aceasta se gaseste la distanta internucleara de aproximativ 1.69 u.a. pentru care pentru parametrul c al procentului starii covalente Heitler-London în functia de unda cu stari

ionice am obtinut valoarea de 5.9233 si pentru energia corespunzatoare a moleculei am obtinut valoarea de -30.5499 eV.

BIBLIOGRAFIE

Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011.

Moore, John T., Chemistry for dummies, 2nd Edition, Wiley, 2011, pag. 138, 230-233.

Rusu, O., Traistaru, C., Dinica, L., Nistor, M., Fizica F1+F2 manual pentru clasa a XII-a, Editura Corint, Bucuresti, 2007.

Pauling, Linus, The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, Journ. Am. Chem. Soc. 53, 1367 (1931).

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008.

Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931).

Wang, S. C., The Problem of Normal Hydrogen Molecule in the New Quantum Mechanics, Phys. Rev. 31, 579 (1928).

Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933).

În acest capitol prezentăm o parte din programele de calcul realizate de autor în programul MATLAB R2017a pentru calculul integralelor folosite pentru calculul energiei moleculei de hidrogen din această carte, și cu care am efectuat și calculele din această carte. Unele din aceste programe pot să ruleze până la zece ore pe calculatorul nostru LENOVO. Aceste programe se pot realiza și în Fortran și în Pascal.

```
%integrala k8 interuc ion r12 per
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
%Se schimba 40 cu 20.
```

```
%Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30 si in integrala.
```

```
%Se inmulteste exponentul cu zc.
```

```
i=20;
```

```
j=30;
```

```

k=30;

u=20;

v=30;

w=30;

f=0;

for x20=1:i

for y2=1:j

for z2=1:k

for x120=1:u

for y12=1:v

for z12=1:w

x2=x20.*0.30;

x12=x120.*0.30;

x1=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).^
2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2+
(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p+x12.*cos(y12.*(pi./30))).^2;

x0=sqrt(x1);

x1p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30)))
.^2+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p).^2;

x1p0=sqrt(x1p);

x2p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).
^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2
+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+x12.*cos(y12.*(pi./30))).^2;

```



```
x2p0=sqrt(x2p);
```

```
f=f+exp(-zc.*x0).*exp(-zc.*x2).*exp(-zc.*x1p0).*exp(-
zc.*x2p0).*x12.*sin(y12.*(pi./30)).*x2.^2.*sin(y2.*(pi./30)).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.30.^
2;
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
k8=27.2.*f./3.14.^2;
```

```
disp(['k8 in functie de distanta internucleara cu constanta de ecranare.']);
```

```
disp(['m p zc f k8']);
```

```
[m,p,zc,f,k8]
```

```
end
```

```
%integrala k7 internuc ion r12 z dis
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
%Se schimba 40 cu 20
```

```
disp(['Se schimba 40 cu 20.']);
```

```
%Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30
```

```
disp(['Se schimba incremetul 0.15 cu 0.30.']);
```

```
disp(['Se inmulteste exponentul cu zc.']);
```

```
i=20;
```

```
j=30;
```

```
k=30;
```

```
u=20;
```

```
v=30;
```

```
w=30;
```

```
f=0;
```

```
for x20=1:i
```

```
for y2=1:j
```

```
for z2=1:k
```

```
for x120=1:u
```

```
for y12=1:v
```

```
for z12=1:w
```

```
x2=x20.*0.3;
```

```
x12=x120.*0.3;
```

```
x1=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p+x12.*cos(y12.*(pi./30))).^2;
```

```
x0=sqrt(x1);
```

```
f=f+exp(-zc.*2.*x0).*exp(-
```

```
zc.*2.*x2).*x12.*sin(y12.*(pi./30)).*x2.^2.*sin(y2.*(pi./30)).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.3.^2;
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
k7=27.2.*f./3.14.^2;
```

```
disp(['k7 cu constanta de ecranare in functie de distanta.']);
```

```
disp(['m= p= Z= f= k7=']);
```

```
a=[m,p,zc,f,k7]
```

```
end
```

```
%integrala k10 internuc r1p per
```

```
%Se calculeaza k9 in functie de distanta internucleara p.
```

```
%Cu constanta de ecranare zc.
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
    sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)-p).^2;
```

```
    sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));
```

```
%Se inmulteste in exponent cu zc.
```

```
    sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*x).*exp(-zc.*sqr2(x,y,z)).*x.*sin(y);
```

```
    q2(m)=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);
```

```
    ki10(m)=-27.2.*q2(m)./3.14;
```

```
%ki10*k5
```

```
    disp(['ki10*k5']);
```

```
    Prompt=['Se inmulteste'];
```

```
    Rezultat=input(Prompt,'s');
```

```
    disp(['ki10*k5',Rezultat]);
```

```
    disp(['k10 in functie de distanta internucleara cu constanta de ecranare.']);
```

```
    [m,p,zc,q2(m),ki10(m)]
```

```
end
```

```
%integrala internuc ion rlp fp k24 z dist
```

```
%Se calculeaza k24 in functie de distanta internucleara p.
```

```
%Cu constanta de ecranare zc.
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
    sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)+p).^2;
```

```
    sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));
```

```
%Se inmulteste cu zc in expnent.
```

```
    sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*2.*sqr2(x,y,z)).*x.*sin(y);
```

```
    q2(m)=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);
```

```
    k90(m)=-27.2.*q2(m)./3.14;
```

```
    k9(m)=k90(m)./zc.^3;
```

```
    disp(['k24 in functie de distanta inernucleara cu constanta de ecranare.']);
```

```
    [m,p,zc,q2(m),k90(m),k9(m)]
```

```
end
```

```
%integrala k9 internuc ion rlp fp k9 z dist
```

```
%Se calculeaza k9 in functie de distanta internucleara p.
```

%Cu constanta de ecranare zc.

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

p=p+0.2;

sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)-p).^2;

sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));

%Se inmulteste cu zc in expnent.

sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*2.*sqr2(x,y,z)).*x.*sin(y);

q2(m)=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);

k90(m)=-27.2.*q2(m)./3.14;

k9(m)=k90(m)./zc.^3;

disp(['k9 in functie de distanta internucleara cu constanta de ecranare.']);

[m,p,zc,q2(m),k90(m),k9(m)]

end

%integrala k28 internuc ion pot z dist

k280=zeros(1,3);

%Se calculeaza k280 in functie de distanta internucleara p.

%Cu constanta de ecranare zc.

```

disp(['Se calculeaza k280 in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

    p=p+0.2;

    sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*2.*x).*x.*sin(y);

    q2=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);

    k280(m)=-27.2.*q2./pi;

    disp(['m=  p=  zc=  q2=  k280=']);

    [m,p,zc,q2,k280(m)]

end

```

%integrala k3 internuc ion pot z dist

%Calculul in functie de p.

```

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

    p=p+0.2;

    sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)-p).^2;

```

```
sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));
```

```
%Se inmulteste cu zc in exponent.
```

```
sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*x).*exp(-zc.*sqr2(x,y,z)).*x.*sin(y);
```

```
q2=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);
```

```
k3=-27.2.*q2./pi;
```

```
disp(['Varieaza p.']);
```

```
disp(['m= p= Z= q2= k3=']);
```

```
a=[m,p,zc,q2,k3]
```

```
end
```

```
%integrala j6 sau j20 internuc ion pot
```

```
%Se calculeaza j2 in functie de distanta internucleara p.
```

```
%Cu constanta de ecranare zc.
```

```
disp(['Se calculeaza j20 in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
%Se inmulteste exponentul cu zc.
```

```
sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)+p).^2;
```



```
sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));
```

```
%Se inmulteste in exponent cu zc.
```

```
sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*x).*exp(-zc.*sqr2(x,y,z)).*x.*sin(y);
```

```
q2(m)=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);
```

```
j20(m)=27.2.*q2(m)./3.14;
```

```
%j20*k5
```

```
disp(['j20*k5']);
```

```
Prompt=['Se inmulteste'];
```

```
Rezultat=input(Prompt,'s');
```

```
disp(['j20*k5',Rezultat]);
```

```
%Se obtine j20.
```

```
disp(['Se obtine j20.']);
```

```
j20(m)=(zc-1).*j20(m);
```

```
[m,p,zc,q2(m),j20(m)]
```

```
end
```

```
%Se calculeaza integrala j2 in functie de distanta internucleara p.
```

```
%internuc ion pot j2 z dist
```

```
%Cu constanta de ecranare zc.
```

```
disp(['Se calculeaza j20 in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);
```

```

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

    p=p+0.2;

    %Se inmulteste exponentul cu zc.

    sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)-p).^2;

    sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));

    %Se inmulteste in exponent cu zc.

    sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*x).*exp(-zc.*sqr2(x,y,z)).*x.*sin(y);

    q2(m)=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);

    j20(m)=27.2.*q2(m)./3.14;

    %j20*k5

    disp(['j20*k5']);

    Prompt=['Se inmulteste'];

    Rezultat=input(Prompt,'s');

    disp(['j20*k5',Rezultat]);

    %Se obtine j20.

    disp(['Se obtine j20.']);

    j20(m)=(zc-1).*j20(m);

    [m,p,zc,q2(m),j20(m)]

end

```

%Se calculeaza integrala j1 in functie de distanta internucleara p.

%Cu constanta de ecranare zc.

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

 p=p+0.2;

%Se inmulteste exponentul cu zc.

sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*2.*x).*x.*sin(y);

q2=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);

j1(m)=(zc-1).*27.2.*q2./pi;

disp(['m= p= zc= q2= j1=']);

[m,p,zc,q2,j1(m)]

end

j1

%integrala k2 internuc ion mun k2 z dist

%Calculul in functie de p.

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

p=p+0.2;

sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)+p).^2;

sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));

sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*x).*exp(-zc.*sqr2(x,y,z)).*x.^2.*sin(y);

q2=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);

k2=q2.^2./pi.^2;

disp(['Rezultatele calculelor pentru K2 in functie de dist p.']);

disp(['p=1.21; 1.41; 1.61; Z=1.193;']);

a=[m,p,zc,q2,k2]

end

%integrala k6 energia de interactiune dintre nuclee

p=1.01;

for m=1:3

p=p+0.2;

k6=27.2./p;

```

disp(['Energia de interactiune dintre nuclee EN k6 in functie de distanta.']);

a=[m,p,k6]

end

%integrala k4 i5 i6 internuc ion grad

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

    p=p+0.2;

    sqr1=@(x,y,z)(x.*sin(y).*cos(z)).^2+(x.*sin(y).*sin(z)).^2+(x.*cos(y)+p).^2;

    sqr2=@(x,y,z)sqrt(sqr1(x,y,z));

    %Se introduce zc in exponent.

    sqr3I5=@(x,y,z)exp(-zc.*x).*exp(-zc.*sqr2(x,y,z)).*x.^2.*sin(y);

    sqr3I6=@(x,y,z)exp(-zc.*x).*exp(-zc.*sqr2(x,y,z)).*x.*sin(y);

    I5=integral3(sqr3I5,0,100,0,pi,0,2.*pi);

    I6=integral3(sqr3I6,0,100,0,pi,0,2.*pi);

    k4=-27.2.*(zc.^2.*I5-zc.*2.*I6)./(2.*pi);

    disp(['Integrala k4 in functie de p.']);

    disp(['m= p= zc= I5= I6= k4=']);

    a=[m,p,zc,I5,I6,k4]

end

```

%integrala i24 a1a2 r12 a1a2 per z dist

k42=zeros(1,3);

%Se calculeaza k42 in functie de distanta internucleara p.

%Cu constanta de ecranare zc.

disp(['Se calculeaza k42 in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);

p=1.01;

zc=1.193;

for m=1:3

 p=p+0.2;

%Se schimba 40 cu 20.

%Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30.

%Se inmulteste exponentul cu zc.

%Se poate porni de la 0.

disp(['Se schimba 40 cu 20. Se schimba incrementul 0.15 cu 0.3.']);

disp(['In claculul integralei se inmulteste cu 0.3^2 in loc de 0.15^2.']);

disp(['Se inmulteste exponentul cu zc.']);

disp(['Se poate porni de la 0.']);

i=20;

j=30;

```

k=30;

u=20;

v=30;

w=30;

f=0;

for x20=1:i

for y2=1:j

for z2=1:k

for x120=1:u

for y12=1:v

for z12=1:w

x2=x20.*0.3;

x12=x120.*0.3;

x1=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).^2+
(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2+
(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p+x12.*cos(y12.*(pi./30))).^2;

x10=sqrt(x1);

x1p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))).^2+
(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p).^2;

x1p0=sqrt(x1p);

f=f+exp(-zc.*2.*x10).*exp(-
zc.*2.*x1p0).*x12.*sin(y12.*(pi./30)).*x2.^2.*sin(y2.*(pi./30)).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.3.
^2;

```

end

end

end

end

end

end

%Nu se inmulteste cu Z

disp(['Nu se inmulteste cu Z']);

k42(m)=27.2.*f./3.14.^2;

disp(['Nr. ord.= ;p= ;Z=zc ;f= ;K42= ']);

[m,p,zc,f,k42(m)]

end

%integrala i27 b1a2 r12 a1a2 per z dist

k27=zeros(1,3);

%Se calculeaza k27 in functie de distanta internucleara p.

%Cu constanta de ecranare zc.

disp(['Se calculeaza k27 in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);

p=1.01;

zc=1.193;


```
for m=1:3

    p=p+0.2;

    %Se schimba 40 cu 20.

    %Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30.

    disp(['Se schimba 40 cu 20. Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30.']);

    i=20;

    j=30;

    k=30;

    u=20;

    v=30;

    w=30;

    f=0;

    for x20=1:i

        for y2=1:j

            for z2=1:k

                for x120=1:u

                    for y12=1:v

                        for z12=1:w

                            x2=x20.*0.3;

                            x12=x120.*0.3;
```

```
x1=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p+x12.*cos(y12.*(pi./30))).^2;
```

```
x0=sqrt(x1);
```

```
x1p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p).^2;
```

```
x1p0=sqrt(x1p);
```

```
x2p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+x12.*cos(y12.*(pi./30))).^2;
```

```
x2p0=sqrt(x2p);
```

```
f=f+exp(-zc.*x0).*exp(-zc.*2.*x1p0).*exp(-zc.*x2p0).*x12.*sin(y12.*(pi./30)).*x2.^2.*sin(y2.*(pi./30)).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.3.^2;
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
%Nu se inmulteste cu Z
```

```
disp(['Nu se inmulteste cu Z']);
```

```
k27(m)=27.2.*f./3.14.^2;
```

```
disp(['Nr. ord.= ;p= ;Z=zc ;f= ;K27= ']);
```

```
a=[m,p,zc,f,k27(m)]
```

```
end
```

```
%integrala i22 a1b2 r12 a1a2 per z dist
```

```
k22=zeros(1,3);
```

```
%Se calculeaza k22 in functie de distanta internucleara p.
```

```
%Cu constanta de ecranare zc.
```

```
disp(['Se calculeaza k22 in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
%Se schimba 40 cu 20.
```

```
%Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30.
```

```
disp(['Se schimba 40 cu 20. Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30.']);
```

```
i=20;
```

```
j=30;
```

```
k=30;
```

```
u=20;
```

```
v=30;
```

```

w=30;

f=0;

for x20=1:i

for y2=1:j

for z2=1:k

for x120=1:u

for y12=1:v

for z12=1:w

x2=x20.*0.3;

x12=x120.*0.3;

x1=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).^
2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2+
(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p+x12.*cos(y12.*(pi./30))).^2;

x0=sqrt(x1);

x1p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30)))
.^2+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p).^2;

x1p0=sqrt(x1p);

f=f+exp(-zc.*2.*x0).*exp(-zc.*x2).*exp(-
zc.*x1p0).*x12.*sin(y12.*(pi./30)).*x2.^2.*sin(y2.*(pi./30)).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.3.^2;

end

end

end

```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
%Nu se inmulteste cu Z.
```

```
disp(['Nu se inmulteste cu Z']);
```

```
k22(m)=27.2.*f./3.14.^2;
```

```
disp(['Nr. ord.= ;p= ;Z=zc ;f= ;K22= ']);
```

```
[m,p,zc,f,k22(m)]
```

```
end
```

```
%integrala i 17 bla2 r12 bla2 per z dist
```

```
k17=zeros(1,3);
```

```
%Se calculeaza k17 in functie de distanta internucleara p.
```

```
%Cu constanta de ecranare zc.
```

```
disp(['Se calculeaza k17 in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
%Se inmulteste exponentul cu zc.
```

```
%Se schimba 40 cu 20
```

```
%Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30
```

```
disp(['Se schimba 40 cu 20. Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30.']);
```

```
i=20;
```

```
j=30;
```

```
k=30;
```

```
u=20;
```

```
v=30;
```

```
w=30;
```

```
f=0;
```

```
for x20=1:i
```

```
for y2=1:j
```

```
for z2=1:k
```

```
for x120=1:u
```

```
for y12=1:v
```

```
for z12=1:w
```

```
x2=x20.*0.30;
```

```
x12=x120.*0.30;
```

```
x1p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))).^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30)))  
.^2+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+p).^2;
```

```
x1p0=sqrt(x1p);
```

```
x2p=(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*cos(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*cos(z12.*(2.*pi./30))).
^2+(x2.*sin(y2.*(pi./30)).*sin(z2.*(2.*pi./30))+x12.*sin(y12.*(pi./30)).*sin(z12.*(2.*pi./30))).^2
+(x2.*cos(y2.*(pi./30))+x12.*cos(y12.*(pi./30)))^2;
```

```
x2p0=sqrt(x2p);
```

```
%Se inmulteste exponentul cu zc.
```

```
f=f+exp(-zc.*2.*x1p0).*exp(-
zc.*2.*x2p0).*x12.*sin(y12.*(pi./30)).*x2.^2.*sin(y2.*(pi./30)).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.3
0.^2;
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
k17(m)=27.2.*f./3.14.^2;
```

```
disp(['m= p= zc= f= k17=']);
```

```
[m,p,zc,f,k17(m)]
```

```
end
```

```
%integrala i15p ion z dist
```

```
%Se calculeaza I15' in functie de distanta internucleara p.
```

```
%Cu constanta de ecranare zc.
```

```
disp(['Se calculeaza I15p in functie de distanta internucleara cu ecranare.']);
```

```
p=1.01;
```

```
zc=1.193;
```

```
for m=1:3
```

```
    p=p+0.2;
```

```
%Se inmulteste exponentul cu zc.
```

```
sqr3=@(x,y,z)exp(-zc.*2.*x).*x.*sin(y);
```

```
q2(m)=integral3(sqr3,0,100,0,pi,0,2.*pi);
```

```
%zc apare in exponent
```

```
%La fel ca I18.
```

```
disp(['zc apare in exponent']);
```

```
disp(['I15p si I18']);
```

```
[m,p,zc,q2(m)]
```

```
end
```


Bibliografia acestui capitol se află la sfârșitul cărții.

The electron is characterized by one of the atomic orbitals in the atom, as presented in the Chapter 4. One computation of the simplest quantum model, the potential well, is presented in the Chapter 8, and show the quantification of the energy of the particle, give these energies, and give the wave functions of the corresponding states. We use quantified energies and the corresponding wave functions below in this Chapter.

In the theory of binding of molecular orbitals (MO), the molecular orbital is formed by combining the atomic orbitals of the individual atoms [182]. The combination of two atomic orbitals form two molecular orbitals [144], [182]. In one MO can be two electrons [182].

The energy of the bounding molecular orbital is lower then the energies of the atomic orbitals [182].

The energy of the the antibonding molecular orbital is higher then the energy of original atomic orbitals [182].

The electrons in the highest occupied MO (HOMO) are the valence electrons [182]. These electrons can be donated to an other molecule and the molecule become with electric charge, or can participating in a covalent binding with an other molecule [182], [80].

The absorbtion and emission of light by atoms was presented in the Chapter 4, and below we aply the same mechanism of transion of the electron from one energy of one molecular orbital to other energy of other molecular orbital by absorbtion or emission of light [182] and [183].

In the present paper we present that transitions between molecular orbital's is made by photon emission or absorbtion [183] and we present a model for molecular orbital's [182].

The lowest unoccupied MO is noted by LUMO [182].

In quantum mechanics if two identical particles are part of the same system and their probability distribution overlap then they can not be distinguished [144].

Is resulting that the labels used for the particles must not change the observable properties of the system [144].

This can be applied to the MO's on which are two identical particles, two electrons.

Is resulting that if the labels of identical particles are changed then the wavefunctions must satisfy the condition that the observable results must not change [144]. For example, to apply this statement we consider a system of two identical particles, and we apply this to the two electrons in a helium atom [144]. We label the states of the two particles with a and b [144]. The label for the one-electron atom refers to a particular set of values of the quantum numbers n , l , m_l and m_s [144]. We label the coordinates of the two particles with (1) and (2) respectively [144]. Is resulting that the eigenfunction of a particle in state a and at position (1) is specified by $\psi_a(1)$ [144]. The total eigenfunction ψ_T of the system of two particles is given by the product of the eigenfunctions of the individual particles [144]. Are resulting two possible eigenfunctions, which are [144]

$$\psi_T = \psi_a(1)\psi_b(2) \quad (1)$$

$$\psi_T = \psi_a(2)\psi_b(1) \quad (2)$$

When are exchanged the particles, which mean the exchange of the position coordinates, indistinguishability is satisfied if the probability density is not changing, is resulting that [144]

$$P(1,2) = P(2,1) \quad (3)$$

The two probability densities are [144]

$$P(1,2) = \psi_a^*(1)\psi_b^*(2)\psi_a(1)\psi_b(2) \quad (4)$$

$$P(2,1) = \psi_a^*(2)\psi_b^*(1)\psi_a(2)\psi_b(1) \quad (5)$$

In general $P(1,2) \neq P(2,1)$ because $\psi_a^*(2)$ is computed at the position (2) and $\psi_a^*(1)$ is computed at the position (1) [144].

In the equation (4) are the probability densities that the particle a to be at the position (1) and that the particle b to be at the position (2) [144]. In the equation (5) are the probability densities that the particle a to be in the position (2) and that the particle b to be in the position (1) [2].

We consider as an example two hydrogen atoms at the distance $2a_0$ in horizontal direction, one electron in vertical position at the distance a_0 from the nucleus of the first atom, where a_0 is the Bohr radius [144], and the second electron in opposite direction of the first electron at the distance $3a_0$ from the nucleus. We consider the wave function of one electron as the sum of the wave functions of the two atoms with the normalization factor $\frac{1}{\sqrt{2}}$, as the normalization factor used in the reference [144] because the two wave functions are normalized, and then we can write

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{a1} + \psi_{a2}] \quad (6)$$

We consider the first electron in the state given by the two states $n = 1, l = 0$ of the two atoms, with the wave function given by the equation (6), with the two wave functions corresponding to the two states, and the second electron in the states $n = 2, l = 0$ of the two atoms, with the wave function computed in a similar way as for the first electron. Then we obtain

$$\psi_a^* \psi_a = \frac{1}{2}[\psi_{a1}^* \psi_{a1} + \psi_{a1}^* \psi_{a2} + \psi_{a2}^* \psi_{a1} + \psi_{a2}^* \psi_{a2}] = \frac{1}{2}[\psi_{a1}^2 + 2\psi_{a1} \psi_{a2} + \psi_{a2}^2] \quad (7)$$

The two wavefunction corresponding to the two states mentioned above, $n = 1, l = 0$, and $n = 2, l = 0$, respectively, of the hydrogen atom are [144]

$$\psi_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (8)$$

$$\psi_{20}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (9)$$

The wavefunction ψ_{a1} is computed for the distance a_0 from the first nucleus and the wavefunction ψ_{a2} is computed for the distance $\sqrt{5}a_0$ from the second nucleus using the equation (8) which are corresponding to the position (1), because the right triangle has the two legs a_0 and $2a_0$, and for the length of the hypotenuse, L , is use the Pitagora theorem [184]

$$L = \sqrt{a_0^2 + (2a_0)^2} = \sqrt{5}a_0$$

The wavefunction ψ_{b1} is computed for the distance $3a_0$ and the wavefunction ψ_{b2} is computed for the distance $\sqrt{13}a_0$ from the second nucleus using the equation (9) which are corresponding to the position (2). Then the positions are exchanged.

Table 1. The values of the wavefunctions in units of $\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}$.

Column1	Column2	Column3	Column4	Column5	Column6	Column7
position	distance	r/a0	wavefunction	value in units of (1/a0)exp(3/2)	square	2Xproduct
1	a0	1	a1	0.20824083	0.04336424	
1	SQRT(5)*a0	2.23606798	a2	0.060727641	0.00368785	0.025291949
2	3*a0	3	a1	0.028354847	0.000804	
2	SQRT(13)*a0	3.60555128	a2	0.015503944	0.00024037	0.000879224
2	3*a0	3	b1	-0.022361774	0.00050005	
2	SQRT(13)*a0	3.60555128	b2	-0.026548371	0.00070482	0.001187337
1	a0	1	b1	0.060600407	0.00367241	
1	SQRT(5)*a0	2.23606798	b2	-0.007725434	5.9682E-05	0.000936329

$$\psi_{a1}(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{e} = 0.208 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (10)$$

$$\psi_{a2}(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{e^{\sqrt{5}}} = 0.060 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (11)$$

$$\psi_{a1}(2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{e^3} = 0.028 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (12)$$

$$\psi_{a1}(2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{e^{\sqrt{13}}} = 0.015 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (13)$$

$$\psi_{a1}^*(1)\psi_{a2}(1) = 0.012 \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 \quad (14)$$

$$\psi_{a1}^*(2)\psi_{a2}(2) = 0.00042 \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 \quad (15)$$

$$\psi_{a1}^2(1) = 0.043 \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 \quad (16)$$

$$\psi_{b1}(2) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (-1) \frac{1}{e^{\frac{3}{2}}} = -0.22 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (17)$$

$$\psi_{b2}(2) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (2 - \sqrt{13}) \frac{1}{e^{\frac{\sqrt{13}}{2}}} = -0.026 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (18)$$

In units of $(1/a_0)^{\frac{3}{2}}$ the probability densities computed by us are

$$\begin{aligned} P(1,2) &= \frac{1}{4} [0.0433 + 0.0036 + 0.0252] \times [0.0005 + 0.0007 + 0.0011] \\ &= 4.14 \times 10^{-5} \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P(2,1) &= \frac{1}{4} [0.0036 + 0.0002 + 0.0008] \times [0.0036 + 0.00005 - 0.0009] \\
 &= 3.1 \times 10^{-6} \quad (20)
 \end{aligned}$$

We observe that the two probability densities are different because the functions are not made symmetric or antisymmetric.

It is possible to satisfy the condition $P(1,2) = P(2,1)$ by constructing linear combinations of the equations (1) and (2), because the Schrodinger equation is a linear equation in $\psi(x, t)$ and any linear combination of solutions is also a solution [144]. There are two cases of linear combinations [144]. The first is a symmetric function which is [144]

$$\psi_B = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)] \quad (21)$$

When the particles are exchanged $1 \rightarrow 2$ and $2 \rightarrow 1$ then this function is unchanged [144]. Is resulting that for this function $P(1,2) = P(2,1)$ [144]. The factor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ is used to normalize ψ_B if $\psi_a(1)\psi_b(2)$ and $\psi_a(2)\psi_b(1)$ are normalized [144].

The second case is an antisymmetric function which can be written [144]

$$\psi_F = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)] \quad (22)$$

When the particles are exchanged $1 \rightarrow 2$ and $2 \rightarrow 1$ then this function change sign [2]. In this case the indistinguishability is satisfied also because $P(1,2) = \psi_F^* \psi_F$ and $P(2,1) = (-\psi_F^*)(-\psi_F)$ and $P(1,2) = P(2,1)$ [144]. $\frac{1}{\sqrt{2}}$ is also a normalization factor [144].

In quantum mechanical systems of identical particles are two types of particles [144]. One type of particles are bosons, which have always symmetric total wavefunction [144]. The second type of particles are fermions which have the total wavefunction always antisymmetric [144].

The LUMO can be an electron acceptor site, in this case is named electrophilic site [182].

As presented in the reference [144] for the excitation of the atoms that the electron is absorbing a photon with the energy $h\nu$ equal with the difference of the energies of the two levels, the initial level and the excited level,, in the reference [182] is presented that in a photochemical process is producing the excitation of an electron to the LUMO, and we conclude that this can be produced if one electron of the molecule is absorbing a photon with the energy $h\nu$ equal with the difference of the energy of the LUMO and the energy of the electron, but the electron can be excited by phototchemical processes at a level with higher energy that the LUMO.

Fluorescence emission spectra was used to study molecules and for the studied molecule the maximum of the fluorescence spectra was obtained between 680 nm and 690 nm [183]. A new, simple and sensitive method was presented for determination of a certain molecule by red fluorescence [183]. A molecule is emitting characteristic spectral lines [143]. The maximum of the wavelength [143] presented above that is resulting from the florescence spectra must correspond to the spectral line emitted by the studied molecule.

The radial wavefunction for $n = 1$ and $l = 0$ is [144]

$$R_{nl}(r) = R_{10}(r) = Ae^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (23)$$

Example of the normation constant A is by using the integral property [185]

$$\int u dv = uv - \int v du \quad (24)$$

The value of the integral of the wavefunction on all space must be 1 [144], is resultin that

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Ae^{-\frac{2Zr}{a_0}} dr d\theta d\varphi = 1 \quad (25)$$

We use that [186]

$$e^{-x} dx = -de^{-x} \quad (26)$$

Then

$$\int_0^\infty x^2 e^{-x} dx = - \int_0^\infty x^2 de^{-x}$$

$$\begin{aligned}
&= -x^2 e^{-x} (\text{in } \infty \text{ minus in } 0) + \int_0^{\infty} e^{-x} dx^2 \\
&= 2 \int_0^{\infty} x e^{-x} dx \\
&= -2 \int_0^{\infty} x d e^{-x} \\
&= -2 x e^{-x} (\text{in } \infty \text{ minus in } 0) + 2 \int_0^{\infty} e^{-x} dx \\
&= -2 e^{-x} (\text{in } \infty \text{ minus in } 0) \\
&= 2
\end{aligned}$$

The coefficient noted by c of the exponent is introducing a result multiplied with c^{-3} and the integration on the solid angle is introducing 4π and r^2 which we used [2,8].

Bibliografia acestui capitol se află la sfârșitul cărții.

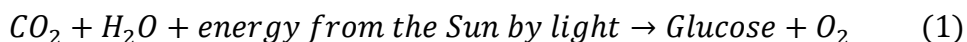
The molecular orbital of the electron is denoted by MO [182].

The lowest unoccupied molecular orbital (MO) is denoted by LUMO [182].

The electrons are excited to the LUMO in photochemical processes [182] or states with higher energy.

Carbohydrates are molecules composed of carbon, hydrogen, and oxygen; the ratio of hydrogen atoms to oxygen atoms is 2:1 [187]. Carbohydrates composed from one molecule are monosaccharides [187]. The glucose is a monosaccharide with the molecular formula $C_6H_{12}O_6$ [187].

The equation of the photosynthesis is [188]



The light from the Sun, or radiant energy, which is electromagnetic radiation, [189], is absorbed by chlorophyll and carotenoid photopigments (contained in cytoplasm in prokaryotes and chloroplasts in eukaryotes) in two main steps [189]:

A.Light - dependent reactiuns (Light reactions): a photon is absorbed by an electron from H_2O and this electron is excited to LUMO [1,2,5]; O_2 is one of the products of the reaction [189];

B.Light - independent reactions (Dark reactions): The excited electrons are transferred to CO_2 (reduction reactions) to form glucose (in the Calvin-Benson cycle) [189].

We suppose that the photosynthesis is a photochemical process.

Near - infrared electromagnetic radiation was used to study banana and coffee residues for fuel [190].

Bibliografia acestui capitol se află la sfârșitul cărții.

Introduction

In the paper [191] is presented that one scope of chemistry is the controlled dissociation of molecules, for example the FeC molecule, followed by the formation of new molecules. The FeC alloy, when an established concentration of C is respected and thermal processes are respected, is a good steel [192]. Fe has the valences 2 and 3, and C has the valence 4 [80].

The dissociation of the FeC molecule is the process in which are resulting the Fe and the C atoms [80]. The dissociation energy of this chemical reaction can be determined by intermediate reactions, in which the Fe is forming one other molecule with one other chemical element or molecule, and the C is forming an other molecule with one other chemical element or molecule.

To measure the dissociation energy of FeC we must separate this molecule from the steel, or to produce this molecule by mixing Fe and C and heat or with electromagnetic radiation, to produce FeC molecules.

We know that the NaCl molecule form a crystalline structure with the smaller cell of cubic form and by alternating the Na^+ and Cl^- ions [144]. The iron and the steel are forming also crystalline structures and we do not know if the FeC molecule can be separated from this crystal.

The separation of FeC molecules from steel can be made with mass spectroscopy, in electric and magnetic field, as presented in [147].

When separated the Fe and C molecules by one of the processes which measure the dissociation energy, the Fe and C atoms can be separated from the sample by mass spectroscopy also to verify the results of the dissociation process.

The separation of the FeC molecule from the Fe, C and other atoms and molecules from the sample can be made by producing a fascicle of the sample by spray of air current, irradiate the fascicle by electromagnetic radiation with the wavelength corresponding to the ionization of this molecule, then accelerate the ions in the mass spectrometer which separate the FeC ions.

The dissociation in the FeC molecule can be made by irradiation of the FeC ion beam directly when is produced and separated from the other atoms and molecules, with a radiation which is corresponding to the dissociation energy. This wavelength can be computed from other theoretical or experimental results of the dissociation energy.

Also, with the FeC molecules obtained in the previous method, can be made an other beam which is irradiated to dissociate this molecule, and, is necessary to make the mass spectroscopy directly on this beam by the ionization of the Fe and the C atoms.. An other possibility is that after obtaining the dissociation and collecting the resulting Fe and C atoms on a plate, is made an other beam to separate the Fe and the C atoms by irradiation the beam with radiation with wavelength corresponding to the ionization energies of these two atoms and making the mass spectroscopy of the Fe and C atoms. In this way we find the dissociation energy of this molecule from the wavelength of the electromagnetic radiation from the equation

$$E = h c / (\lambda)$$

where h is the Planck's constant, c is the velocity of light, and λ is the wavelength of the electromagnetic radiation.

One effect of the light on one certain molecule is the fluorescence presented in the Chapter 9. One photochemical reaction is presented in the Chapter 10.

One other method for the measurement of this dissociation energy is by photochemical reaction, which is that the light with certain wavelength is selected with a prism as in the book [147], and, when the energy of this light given in the Chapter 4 is equal with the binding energy

of the molecule, than is produce the photodissociation of the atoms. In a sample can be produce many photodissociation processes. The Fe atoms can react with the O₂ molecule from the air, as we know that iron form FeO and Fe₂O₃ molecules and is rusting [80].

One other method for measure the dissociation energy of FeC is by melting a piece of solid, crystalline, FeC, and measure the melting heat, which divided by the number of FeC molecules from the crystal is giving the FeC dissociation energy. We don't know if the FeC molecule has ionic or covalent binding. If is ionic bonding, in the case of the FeC crystal, the Fe is interacting by electrostatic attraction with the first C atom, by electrostatic repulsion with the second Fe atom, by electrostatic attraction with the third C atom, etc., as in the NaCl crystal [144].

Results

In the paper of [191] is presented that they measured the bond dissociation energies of FeC, NiC, FeS, NiS, FeSe, and NiSe.

Bibliografia acestui capitol se află la sfârșitul cărții.

În lucrarea [193], Kastler, prin aplicarea metodei legăturii de valență a obținut pentru energia moleculei de HF 0.205 u.a., pentru momentul dipolar 2.7 Debye, și pentru procentajul ionic 64 %. În invenție calculăm integralele folosite pentru calculul energiei moleculei de FH în metoda II cu funcții de unda fără noduri din lucrarea [193] și le comparăm cu cele din lucrarea [193]. În continuare prezentăm această metodă din lucrarea [193].

În prezent sunt alte teorii mult mai precise pentru aceste calcule, însă noi le aplicăm pe cele amintite mai sus.

Termenul orbital desemnează o funcție de coordonatele de translație x, y, z ale unui electron. Orbitalul $a(x_i, y_i, z_i)$ de coordonatele electronului i este notat prin $a(i)$.

Este numit spinorbital o funcție de coordonatele de translație x, y, z și de coordonata de spin s ale unui electron. Cum se neglijează acțiunea spinului, se utilizează ca spinorbital produsul orbitalului cu una din funcțiile $\alpha(s), \beta(s)$ care descriu respectiv stările de componenta de spin $+\frac{1}{2}$ și $-\frac{1}{2}$ de pe axa Oz. Spinorbitalul

$$A(x_i, y_i, z_i, s_i) = a(x_i, y_i, z_i) \cdot \eta(s_i)$$

funcție de coordonatele electronului i se notează prin

$$A(i) = \underset{\eta}{a(i)}$$

Pentru un sistem de n electroni, se numește P.A. (produsul antisimetric de spinorbitali) funcția de unda obținută prin aplicarea operatorului de antisimetrizare A unui produs

$$\prod = A(1)B(2) \dots L(n)$$

de n spinorbitali corespunzători la n electroni diferiți. A este definit prin

$$A = \sum_{\mu=1}^{n!} \delta(P_{\mu}) \cdot P_{\mu}$$

P_{μ} fiind diferitele permutari de argumentele 1, 2 ... n in Π . $\delta(P_{\mu})$ este paritatea permutarii P_{μ} . P.A. satisface principiul lui Pauli:

$$P_{\mu} A \prod = \delta(P_{\mu}) A \prod$$

In definitia lui A P.A.-urilor putem inlocui

$$A = \sum_{\nu=1}^{n!} \delta(Q_{\nu}) \cdot Q_{\nu}$$

unde Q_{ν} semnifica diferitele permutari ale simbolurilor A, B ... L in Π . Este mai comod ca in calcule sa fie folosita acesta definitie.

Se poate fara restrictie adopta in Π ordinea naturala pentru argumentele 1, 2, ..., n si o ordine oarecare pentru simbolurile A, B, ..., L. Schimbarile eventuale de semn sunt date de formulele

$$A P_{\mu} Q_{\nu} \prod = \delta(P_{\mu}) \delta(Q_{\nu}) A \prod$$

Se folosesc ca functii de unda pentru descrierea unui sistem de n electroni combinatii liniare de P.A. Determinarea coeficientilor se face astfel incat sa se obtina minim pentru energia sistemului.

Diferitele metode utilizate in chimia cuantica: metoda Heitler-London, metoda rezonantei ionice, metoda M.O.L.C.A.O., si metoda orbitalilor semilocalizati conduc toate la o functie de unda de acest tip avand anumite restrictii asupra sistemului de coeficienti posibili pentru combinatiile liniare considerate.

Diferitii spinorbitali sunt normati si mutual ortogonali.

Operatorii intalniti sunt operatorul unitate, operatorii de tip

$$F = \sum_{i=1}^n f_i$$

f_i actionand in mod unic numai asupra coordonatelor electronului i , si operatorii de tip

$$G = \sum_{i < j=1}^n g_{ij}$$

actionand asupra coordonatelor electronilor i si j .

Folosirea proprietatii

$$\left(\frac{1}{\sqrt{n!}} A \prod_{i=1}^n \mid \sum_{j=1}^n \mid \frac{1}{\sqrt{n!}} A \prod_{i=1}^n \right) = \left(\prod_{i=1}^n \mid \sum_{j=1}^n \mid A \prod_{i=1}^n \right)$$

pentru toti operatorii $\sum$ simetrici in raport cu n electroni, permite exprimarea elementelor de matrice $(\Psi|\Psi')$, $(\Psi|F|\Psi')$ si $(\Psi|G|\Psi')$ intre doua P.A. oarecare

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} A \prod_{i=1}^n = \frac{1}{\sqrt{n!}} A \cdot A(1) \cdot B(2) \cdot C(3) \dots L(n)$$

si

$$\Psi' = \frac{1}{\sqrt{n!}} A' \prod_{i=1}^n = \frac{1}{\sqrt{n!}} A' \cdot A'(1) \cdot B'(2) \cdot C'(3) \dots L'(n)$$

in functie de integrale mono si bielectronice.

Se folosesc notatiile

$$\int A^*(i) A'(i) d\tau_i = (A|A')$$

$$\int A^*(i) f_i A'(i) d\tau_i = (A|f|A')$$

$$\int A^*(i) A'(i) g_{ij} B^*(j) B'(j) d\tau_i d\tau_j = (AA'|g|BB')$$

$$d\tau_i = dx_i dy_i dz_i ds_i$$

in care integrarea se face in functie de variabilele de translatie si de spi. Este valabila proprietatea de ortonormare

$$(A|A') = \begin{cases} 1 & \text{daca } A = A' \\ 0 & \text{daca } A \neq A' \end{cases}$$

Se disting patru cazuri pentru enuntul acestor proprietati

- a) Cele doua serii de spinorbitali $A, B, C \dots L$ si $A', B', C' \dots L'$ contin mai putin de $n - 2$ spinorbitali identici;
- b) Numarul de spinorbitali identici in cele doua serii este egal cu $n - 2$. In acest caz se presupun produsele Π si Π' sunt scrise astfel incat primii $n - 2$ sunt respectiv identici in cele doua produse:

$$A = A', B = B' \dots J = J' \quad K \neq \begin{Bmatrix} K' \\ L' \end{Bmatrix} \quad L \neq \begin{Bmatrix} K' \\ L' \end{Bmatrix}$$

- c) Numarul de spinorbitali identici in cele doua produse este egal cu $n - 1$. Atunci se presupune cu Π si Π' sunt scrise astfel incat $A = A', B = B' \dots K = K', L \neq L'$;
- d) Cele doua serii contin aceeasi spinorbitali scrise in aceeasi ordine.

Atunci elementele de matrice intre Ψ si Ψ' sunt

pentru operatorul unitate:

cazurile a) b) si c): $(\Psi|\Psi') = 0$

cazul d): $(\Psi|\Psi') = 1$

pentru operatorul F:

cazurile a) si b): $\langle \Psi|F|\Psi' \rangle = 0$

cazul c): $\langle \Psi|F|\Psi' \rangle = \langle L|f|L' \rangle$

cazul d): $\langle \Psi|F|\Psi' \rangle = \langle A|f|A \rangle + \dots + \langle B|f|B \rangle + \langle C|f|C \rangle + \langle L|f|L \rangle$

Pentru distanța internucleară de echilibru s-a folosit

$$\rho = 1.733154 a_0 \quad (1)$$

unde a_0 este raza Bohr.

Pentru orbitalii atomici fara noduri de tip Slater corespunzatoare electronilor 1s, 2s, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ ai atomului de F sau folosit ecuatiile

$$1s(a) = (a^3/\pi)^{1/2} \exp(-ar) \quad (2)$$

$$2s(\mu) = (\mu^5/3\pi)^{1/2} r \exp(-\mu r) \quad (3)$$

$$2p_x(v) = (v^5/\pi)^{1/2} r \exp(-vr) \sin \theta \cos \varphi \quad (4)$$

$$2p_y(v) = (v^5/\pi)^{1/2} r \exp(-vr) \sin \theta \sin \varphi \quad (5)$$

$$2p_z(v) = (v^5/\pi)^{1/2} r \exp(-vr) \cos \theta \quad (6)$$

Pentru orbitalul atomic al hidrogenului se folosește ecuația

$$h(\beta) = (\beta^3/\pi)^{1/2} \exp(-\beta r), \text{ cu } \beta = 1 \quad (7)$$

Pentru orbitalii 1s, 2s, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ ai atomului de F ei folosesc sau orbitalii Coulson-Duncanson, sau orbitalii Slater ortogonalizati. Pentru cele doua cazuri notate cu (I) si (II) se folosesc combinatii liniare ale functiilor (2)-(6) date de formulele

$$1s = 1s(a) \quad (8)$$

$$2s = N[2s(\mu) - K1s(b)] \quad (9)$$

$$2p_x = 2p_x(v) \quad (10)$$

$$2p_y = 2p_y(v) \quad (11)$$

$$2p_z = 2p_z(v) \quad (12)$$

unde K este o constanta aleasa astfel incat sa faca 2s si 1s ortogonali, N este un factor de normare:

$$K = (3)^{1/2} b^{-3/2} \mu^{5/2} (a+b)^3 (a+\mu)^{-4} \quad (13)$$

$$\frac{1}{N^2} = 1 + K^2 - 16(3)^{\frac{1}{2}} K b^{\frac{3}{2}} \mu^{\frac{5}{2}} (b+\mu)^{-4} \quad (14)$$

Astfel orbitalii considerati sunt normati si mutual ortogonali.

Pentru cazurile (I) si (II) sunt obtinuti prin urmatoarele valori ale constantelor de ecranare a, b, μ, v :

(I)

$$a = 8.67 \quad (15)$$

$$b = 8.02 \quad (16)$$

$$\mu = 2.611 \quad (17)$$

$$\nu = 2.55 \quad (18)$$

(II)

$$a = b = 8.67 \quad (19)$$

$$\mu = \nu = 2.6 \quad (20)$$

Se obtine

pentru (I)

$$N = 1.038\,4883 \quad (21)$$

$$K = 0.241\,1542 \quad (22)$$

pentru (II)

$$N = 1.029\,8481 \quad (23)$$

$$K = 0.239\,0105 \quad (24)$$

Este comod sa se considere functia

$$2s' = (\nu^5/3\pi)^{1/2} r \exp(-\nu r) \quad (25)$$

Orbitalii $2p_x$ si $2p_y$ sunt notati prin $2p_\pi$ si $2p_z$ este notat prin $2p_\sigma$.

Hamiltonianul atomului de F izolat este

$$H_0 = \sum_{i=1}^9 \left(-\frac{1}{2} \Delta_i - \frac{9}{r_i} \right) + \sum_{i<j}^9 \frac{1}{r_{ij}}$$

Se notează

$$V_{e_0} = \sum_{i<j}^9 \frac{1}{r_{ij}}$$

Hamiltonianul moleculei de HF este

$$H_m = \frac{1}{\rho} + \sum_{i=1}^{10} \left(-\frac{1}{2} \Delta_i - \frac{9}{r_i} - \frac{1}{r_i'} \right) + \sum_{i < j}^{10} \frac{1}{r_{ij}}$$

Se notează

$$V_e = \sum_{i < j}^{10} \frac{1}{r_{ij}}$$

Funcția de unda folosită pentru molecula de HF este o combinație liniară de P.A. următoare

$$\psi_i = (10!)^{-1/2} A \begin{matrix} 1s(1) & 1s(2) & 2s(3) & 2s(4) & 2p_x(5) & 2p_x(6) & 2p_y(7) & 2p_y(8) & 2p_z(9) & 2p_z(10) \\ \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta \end{matrix}$$

$$\psi_{p\alpha} = \frac{(10!)^{-1/2}}{A} A \begin{matrix} 1s(1) & 1s(2) & 2s(3) & 2s(4) & 2p_x(5) & 2p_x(6) & 2p_y(7) & 2p_y(8) & 2p_z(9) & h(10) \\ \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta \end{matrix}$$

$$\psi_j = \frac{(10!)^{-1/2}}{A^2} A \begin{matrix} 1s(1) & 1s(2) & 2s(3) & 2s(4) & 2p_x(5) & 2p_x(6) & 2p_y(7) & 2p_y(8) & h(9) & h(10) \\ \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta \end{matrix}$$

$$\psi_{s\alpha} = \frac{(10!)^{-1/2}}{B} A \begin{matrix} 1s(1) & 1s(2) & 2p_z(3) & 2p_z(4) & 2p_x(5) & 2p_x(6) & 2p_y(7) & 2p_y(8) & 2s(9) & h(10) \\ \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta \end{matrix}$$

$$\psi_k = \frac{(10!)^{-1/2}}{B^2} A \begin{matrix} 1s(1) & 1s(2) & 2p_z(3) & 2p_z(4) & 2p_x(5) & 2p_x(6) & 2p_y(7) & 2p_y(8) & h(9) & h(10) \\ \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta \end{matrix}$$

$$\psi_{1\alpha} = \frac{(10!)^{-1/2}}{AB} A \begin{matrix} 1s(1) & 1s(2) & 2s(3) & 2p_z(4) & 2p_x(5) & 2p_x(6) & 2p_y(7) & 2p_y(8) & h(9) & h(10) \\ \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta & \alpha & \beta \end{matrix}$$

$\psi_{p\beta}$, $\psi_{s\beta}$ și $\psi_{1\beta}$ se obțin din $\psi_{p\alpha}$, $\psi_{s\alpha}$ și $\psi_{1\alpha}$ prin schimbarea simbolurilor $2p_z$ și h , $2s$ și h , $2s$ și $2p_z$ respectiv.

A , B , A^2 , B^2 sunt factori de normalizare.

Funcția ψ_i descrie starea ionică F^-H^+ a moleculei.

Dacă noi încercăm să aplicăm metoda legăturii de valență din lucrarea [194] la molecula de FH, și considerăm că atomul de F se află în centrul sistemului de axe de coordonate, și atomul de H se află pe direcția axei z , considerând numai funcția de undă a

electronului atomului de H, notată cu h , și funcția de undă a electronului p_z a atomului de F, notată cu $2p_z$, deoarece această funcție de undă are acoperirea cea mai mare a probabilității de localizare cu funcția de undă a electronului hidrogenului, și dă integrala de acoperire cea mai mare, și celelalte funcții de undă dau integrale de acoperire mult mai mici, obținem funcția de undă

$$\psi = c[h(1)2p_z(2) + h(2)2p_z(1)] + h(1)h(2) + 2p_z(1)2p_z(2)$$

Este posibil ca în termenii de sus să apară coeficienți deoarece molecula nu este simetrică și este foarte puțin probabil ca atomul de hidrogen să aibă ambii electroni. Astfel termenul $h(1)h(2)$ ar trebui neglijat.

În acest caz energia este dată de

$$W = \frac{\int H\psi^2 d\tau}{\int \psi^2 d\tau}$$

Noi calculăm integralele date în lucrarea [193].

Descriem în continuare calculele efectuate de noi în invenție.

Din Figura 1 rezulta

$$\begin{aligned} |\vec{r}_1|^2 &= a_0^2 x_1^2 = |\vec{r}_2 + \vec{r}_{12} - \vec{d}|^2 \\ &= a_0^2 (x_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2 + x_{12} \sin \theta_{12} \cos \varphi_{12})^2 \\ &\quad + a_0^2 (x_2 \sin \theta_2 \sin \varphi_2 + x_{12} \sin \theta_{12} \sin \varphi_{12})^2 \\ &\quad + a_0^2 (x_2 \cos \theta_2 + x_{12} \cos \theta_{12} - p)^2 \end{aligned} \quad (26)$$

$$|\vec{r}_1'|^2 = |\vec{r}_2 - \vec{d}|^2 \quad (27)$$

$$\begin{aligned} |\vec{r}_2'|^2 &= |\vec{r}_2 + \vec{r}_{12}|^2 \\ &= a_0^2 (x_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2 + x_{12} \sin \theta_{12} \cos \varphi_{12})^2 \\ &\quad + a_0^2 (x_2 \sin \theta_2 \sin \varphi_2 + x_{12} \sin \theta_{12} \sin \varphi_{12})^2 \\ &\quad + a_0^2 (x_2 \cos \theta_2 + x_{12} \cos \theta_{12})^2 \end{aligned} \quad (28)$$

Atomul 1 este F și atomul 2 este H. Atomul de F se considera în centrul sistemului de axe ortogonale $Ox_2y_2z_2$ și atomul de H deplasat cu distanța d în sensul negativ al axei Oz_2 în centrul sistemului de axe ortogonale $Ox_1y_2z_1$.

$$\cos \theta_2' = \cos(\pi - \alpha) = -\cos \alpha = -\frac{p^2 + x_2'^2 - x_1^2}{2px_2'} \quad (29)$$

În invenție calculăm integralele folosite în calculul energiei moleculei de HF cu funcții de undă fără noduri cu metoda II din lucrarea [193] și le comparăm cu cele calculate în lucrarea [193].

Pentru calculele următoare folosim funcțiile de undă date de ecuațiile (2) – (7). Funcția de undă $2p_\sigma$ este funcția de undă $2p_z$.

$$\begin{aligned} K55 &= [1s(a)2p_\sigma(v)|1s(a)h(\beta)] = \left\langle 1s(a)(1)2p_\sigma(v)(1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| 1s(a)(2)h(\beta)(2) \right\rangle \\ &= a^3 v^{\frac{5}{2}} \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 \end{aligned}$$

$$\iiint \iiint e^{-ax_2} e^{-\mu x_2} \cos \theta_2 e^{-ax_2'} e^{-x_1} x_{12} \sin \theta_{12} dx_{12} d\theta_{12} d\varphi_{12} x_2^3 \sin \theta_2 dx_2 d\theta_2 d\varphi_2 \quad (30)$$

În continuare prezentăm programul realizat de noi în programul MATLAB R2014a pentru calculul integralei K55II.

%Se calculeaza pentru molecula de FH VB K55II (1s(a)(1)2ps(niu)(1)|r12|1s(a)(2)h(2)).

%Se schimba 40 cu 20.

%Se schimba 0.15 cu 0.30.

disp(['Se schimba 40 cu 20. Se schimba incrementul 0.15 cu 0.30.']);

disp(['Se calculeaza integrala K55II (1s(a)12ps(niu)1|r12|1s(a)2h2).']);

za=8.67;

zb=8.02;

```

mu=2.6;

p=1.733154;

i=60;

j=30;

k=30;

u=60;

v=30;

w=30;

f55II=0;

for x20=1:i

    x2=x20.*0.07;

for x120=1:u

    x12=x120.*0.07;

for y2=1:j

    T2=y2.*pi./30;

for z2=1:k

    F2=z2.*2.*pi./30;

for y12=1:v

    T12=y12.*pi/30;

for z12=1:w

    F12=z12.*2.*pi./30;

x1=(x2.*sin(T2).*cos(F2)+x12.*sin(T12)*cos(F12)).^2+(x2.*sin(T2).*sin(F2)+x12.*sin(T12)
)*sin(F12)).^2+(x2.*cos(T2)+x12.*cos(T12)-p).^2;

```

```

x10=sqrt(x1);

%x1p=(x2.*sin(T2).*cos(F2)).^2+(x2.*sin(T2).*sin(F2)).^2+(x2.*cos(T2)-p).^2;

%x1p0=sqrt(x1p);

x2p=(x2.*sin(T2).*cos(F2)+x12.*sin(T12)*cos(F12)).^2+(x2.*sin(T2).*sin(F2)+x12.*sin(T1
2)*sin(F12)).^2+(x2.*cos(T2)+x12.*cos(T12)).^2;

x2p0=sqrt(x2p);

%xcos=-(p.^2+x2p-x1)/(2.*p.*x2p0);

%if xcos>=-1

%if xcos<=1

f55II=f55II+exp(-za.*x2).*exp(-mu.*x2).*cos(T2).*exp(-za.*x2p0).*exp(-
x10).*x12.*sin(T12).*x2.^3.*sin(T2).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.07.^2;

%else

%end

%else

%end

end

end

end

end

end

end

K55II=za.^3.*mu.^2.5.*f55II.*(1./pi).^2;

disp(['(1s(a)12ps(niu)1|r12|1s(a)2h2)']);

```

```
disp(['f55II=;K55II=']);
```

```
[f55II,K55II]
```

Timpul de calcul cu Leptopul a fost mai mic de 1 ore si 50 min.

$$f_{55II} = 0.000\,001\,654 \quad (31)$$

$$K_{55II} = 0.0001\,190\,u.a. \quad (32)$$

Cand am calculat K_{1II} , am marit i si u la 80 si am scazut increamatul la 0.05 am obtinut doar variatia la a parta cifra dupa virgula si timp de calcul mult mai lung.

Observam ca folosind calculator cu hardware modern, Laptop, si software modern, programul MATLAB R2014a, putem calcula toate integralele folsite in metoda legaturii de valenta pentru molecula de FH cu metoda din Kastler, D., Théorie quantique de la molécule de HF, J. Chim. Phys. 50, 556 (1953) si calculate in aceasi lucrare.

Tabelul 1. Integralele Coulomb fara noduri calculate in lucrarea [193] si calculate de noi din metoda II.

Integrala	Metoda (I)		Metoda (II)	
	Kastler, D., J. Chim. Phys. 50, 556 (1953)	Calculata de noi	Kastler, D., J. Chim. Phys. 50, 556 (1953)	Calculata de noi
$K1 = J[1s(a), h(\beta)]$	0.526 892	0.512 454	0.526 892	0.512 454
$K2 = J[(1s(b), h(\beta)]$	0.526 750	0.513 282	0.526 892	0.512 454
$K3$ $= [1s(a)1s(b) h(\beta)h(\beta)]$	0.525 627	0.511 682	0.526 892	0.512 454
$K4 = J[2s(\mu), h(\beta)]$			0.501 653	0.488 339

$K5 = J[2s(v), h(\beta)]$			0.501 653	0.488 339
$K6 = J[2p(v), h(\beta)]$			0.527 751	0.511 887
$K7$ $= [1s(a)2s(\mu) h(\beta)h(\beta)]$			0.125 328	0.122 904
$K8$ $= [1s(b)2s(\mu) h(\beta)h(\beta)]$			0.125 328	0.122 904
$K9$ $= [1s(a)2p_{\sigma}(v) h(\beta)h(\beta)]$			0.010 678	0.011 112
$K10$ $= [1s(b)2p_{\sigma}(v) h(\beta)h(\beta)]$			0.010 678	0.011 112
$K11$ $= [2s(\mu)2p_{\sigma}(v) h(\beta)h(\beta)]$			0.102 447	0.108 722

Tabelul 2. Integralele de schimb fara noduri calculate de noi si calculate in lucrarea [193] din metoda II.

Integrala	Metoda (I)		Metoda (II)	
	Kastler, D., J. Chim. Phys. 50, 556 (1953)	Calculata de noi	Kastler, D., J. Chim. Phys. 50, 556 (1953)	Calculata de noi
$K12 = K[1s(a), h(\beta)]$			0.008 314	0.008 239
$K13 = K[1s(b), h(\beta)]$			0.008 314	0.008 239

$K14$ $= [1s(a)h(\beta)1s(b)h(\beta)]$			0.008 314	0.008 239
$K15 = K[2s(\mu), h(\beta)]$			0.164 126	0.163 297
$K16 = K[2p_{\sigma}(v), h(\beta)]$			0.112 252	-0.111 600
$K17 = K[2p_{\pi}(v), h(\beta)]$				
$K18$ $= [1s(a)h(\beta) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.024 549	0.025 154
$K19$ $= [1s(b)h(\beta) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.024 549	0.025 154
$K20$ $= [1s(a)h(\beta) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.013 790	0.014 015
$K21$ $= [1s(b)h(\beta) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.013 790	0.014 015
$K22$ $= [2s(\mu)h(\beta) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.117 089	0.116 200

Tabelul 3. Integralele hibride fara noduri calculate de noi si calculate in lucrarea [193] din metoda II.

Integrala	Metoda (I)		Metoda (II)	
	Kastler, D., J. Chim. Phys. 50, 556 (1953)	Calculata de noi	Kastler, D., J. Chim. Phys. 50, 556 (1953)	Calculata de noi

$K23$ $= [1s(a)1s(a) 1s(a)h(\beta)]$	0.195 084	0.190 722	0.195 084	0.190 722
$K24$ $= [1s(b)1s(b) 1s(b)h(\beta)]$			0.195 084	0.190 722
$K25$ $= [1s(a)1s(a) 1s(b)h(\beta)]$			0.195 084	0.190 722
$K26$ $= [1s(b)1s(b) 1s(a)h(\beta)]$			0.195 084	0.190 722
$K27$ $= [1s(a)1s(b) 1s(a)h(\beta)]$			0.195 084	0.190 722
$K28$ $= [1s(a)1s(b) 1s(b)h(\beta)]$			0.195 084	0.190 722
$K29$ $= [1s(a)1s(s) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.449 500	0.444 493
$K30$ $= [1s(b)1s(b) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.449 500	0.444 493
$K31$ $= [1s(a)1s(b) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.449 500	0.444 493
$K32$ $= [1s(a)1s(a) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.236 684	-0.233 556

$K33$ $= [1s(b)1s(b) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.236 684	-0.233 556
$K34$ $= [1s(a)1s(b) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.236 684	-0.233 556
$K35$ $= [2s(\mu)2s(\mu) 1s(a)h(\beta)]$			0.068 495	0.069 192
$K36$ $= [2s(\mu)2s(\mu) 1s(b)h(\beta)]$			0.068 495	0.069 192
$K37$ $= [2s(v)2s(v) 1s(a)h(\beta)]$			0.068 495	0.069 192
$K38$ $= [2s(v)2s(v) 1s(b)h(\beta)]$			0.068 495	0.069 192
$K39$ $= [2s(\mu)2s(\mu) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.367 579	0.366 332
$K40$ $= [2s(v)2s(v) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.367 579	0.366 332
$K41$ $= [2s(\mu)2s(\mu) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.210 684	-0.209 689
$K42$ $= [2s(v)2s(v) 2p_{\sigma}(\mu)h(\beta)]$			0.210 684	-0.209 689

$K43$ $= [2p_{\sigma}(v)2p_{\sigma}(v) 1s(a)h(\beta)]$			0.068 667	0.068 789
$K44$ $= [2p_{\sigma}(v)2p_{\sigma}(v) 1s(b)h(\beta)]$			0.068 667	0.068 789
$K45$ $= [2p_{\sigma}(v)2p_{\sigma}(v) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.374 607	0.372 442
$K46$ $= [2p_{\sigma}(v)2p_{\sigma}(v) 2p_{\sigma}(v)h(\beta)]$			0.228 106	-0.226 327
$K47$ $= [1s(a)2s(\mu) 1s(a)h(\beta)]$			0.034 777	0.034 590
$K48$ $= [1s(b)2s(\mu) 1s(b)h(\beta)]$			0.034 777	0.034 590
$K49$ $= [1s(a)2s(\mu) 1s(b)h(\beta)]$			0.034 777	0.034 590
$K50$ $= [1s(b)2s(\mu) 1s(a)h(\beta)]$			0.034 777	0.034 590
$K51$ $= [1s(a)2s(\mu) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.104 918	0.104 643
$K52$ $= [1s(b)2s(\mu) 2s(\mu)h(\beta)]$			0.104 918	0.104 643

K53 $= [1s(a)2s(\mu) 2p_{\sigma}(\nu)h(\beta)]$			0.056 107	-0.055 857
K54 $= [1s(b)2s(\mu) 2p_{\sigma}(\nu)h(\beta)]$			0.056 107	-0.055 857
K55 $=[1s(a)2p_{\sigma}(\nu) 1s(a)h(\beta)]$			0.0001 211	0.0001 190
K56 $=[1s(b)2p_{\sigma}(\nu) 1s(b)h(\beta)]$			0.0001 211	0.0001 190
K57 $=[1s(a)2p_{\sigma}(\nu) 1s(b)h(\beta)]$			0.0001 211	0.0001 190
K58 $=[1s(b)2p_{\sigma}(\nu) 1s(a)h(\beta)]$			0.0001 211	0.0001 190

1.Revendicam molecula de FH caracterizata prin aceea ca valorile integralelor folosite in calculul energiei moleculei cu metoda legaturii de valenta din lucrarea [193] sunt calculate de noi, sunt date in Tabelele 1, 2, si 3, si comparate cu cele calculate in lucrarea [193] au valorile foarte apropiate.

DESENE EXPLICATIVE

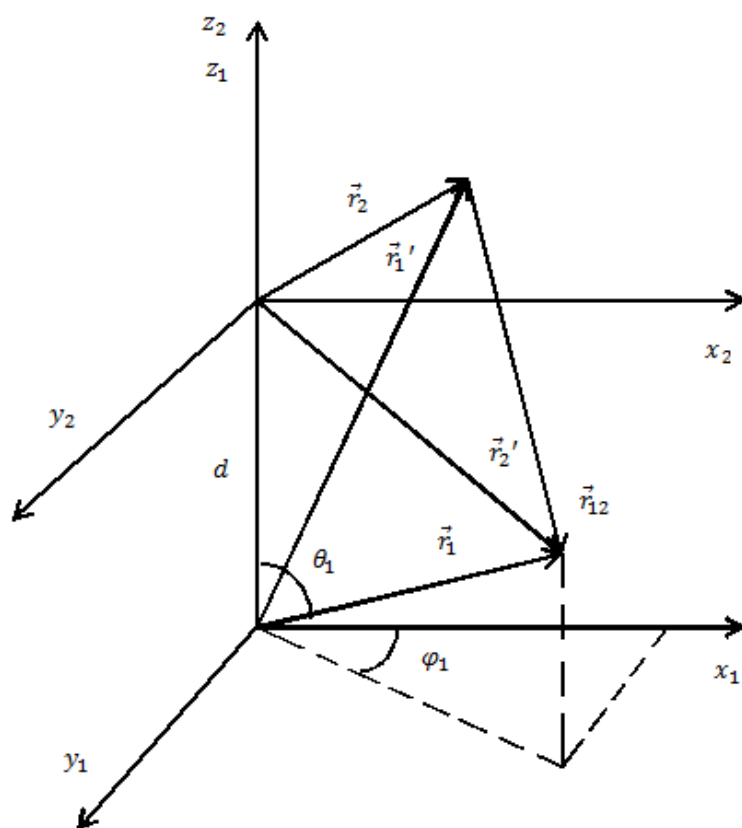


Fig. 1.

PHOTO DISSOCIATION AND EXCITATION

Abstract

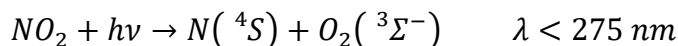
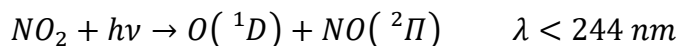
Because was measured and theoretically computed that the NO_2 molecule has photo dissociation in excited states of the O and N [1], we conclude that the H_2 molecule is dissociating by photo dissociation in excited states of one or the both atoms.

Keywords: Photo dissociation

Article

The nitrogen dioxide, NO_2 , is important in the atmospheric chemistry and combustion [1]. It was studied the photo dissociation of this molecule for the wavelength in the visible range, $\lambda > 250 \text{ nm}$ [1]. The results obtained on this molecule were applied to the spectrum of vibrations, excited states up to the dissociation limit, unimolecular dissociation, and application of statistical models [1].

For the range of the wavelength in the ultraviolet region, $\lambda < 250 \text{ nm}$, the absorption is produced in the second band [1]. It was measured experimentally and computed in theory that, for these wavelengths, are produced the following photo dissociation reactions [1]



Because the fundamental states of N and O are $2p^3$ and $2p^4$ [2], we observe that are produced the excited states $O(^3P)$, $O(^1D)$ and $N(^4S)$.

Applying to the H_2 molecule [2], the photo dissociation can be produced also on one or both atoms in excited states in the final states, for greater wavelengths than that for photo dissociation on the ground states, and a part of the photon energy is absorbed for excitation. All these reactions are photochemical processes [3].

One process that can be produced is that one electron is excited on one state from which is produced the dissociation, or an other process in which one electron is emitted, and the resulting proton and the other hydrogen atom are dissociated. Also the both electrons can be emitted, but no excited states are produce. The two protons can not be in excited states.

Conclusions

The photo dissociation can be produced at greater energies than the limit.

References

[1] R. Schinke et al., Chem. Phys. 346 (2008) 99 – 114 license 3258781404413 copyright clearance center rightslink.

[2] M. Mansfield et al., Understanding physics, Wiley, 2011.

[3] M. Jackson, Organic chemistry fundamentals Quickstudy Academic, BarCharts, 2001.

THE MAXIMUM OF THE POTENTIAL ENERGY IN ELECTRON TRANSFER REACTIONS WHEN THE ORBITALS OF THE REACTING MOLECULES ARE NOT OVERLAPPING

Abstract

In this paper we present that in the electron transfer reactions in which the overlap of the electronic orbitals of the two reacting molecules is very small the potential energy pass through a maximum in the collision. This is resulting from the deformation of the bonds, the decrease of the distance between the ions in the molecule, and increase of the overlap of the electronic orbitals from the bonds in the molecule.

I. Introduction

Marcus (1956) is presenting that in the collisions, if is not overlapping of the electronic orbitals of the reacting molecules, then the potential energy of the system pass through a maximum.

II. Theory

Marcus (1956) describesh a mechanism for electron transfer reactions, in which the spatial overlap of the electronic orbitals of the two reacting molecules in the activated complex is very small.

Marcus (1956) is presenting that between ions differing only in their valence the isotopic exchange reactions are generally slow if simple cations are involved and fast if the ions are relatively large, such as complex ions.

Marcus (1956) is presenting that this behavior has been explained qualitatively by Libby using the theory of Franck, applying the Franck-Cordon principle. Marcus (1956) is presenting that the degree of orientation of the solvent molecules toward an ion is function on the charge of that ion.

Marcus (1956) is presenting that in biomolecular reactions, the interatomic distances are generally strongly changing in each molecule during a collision. The conclusion is

presented as the pass of the potential energy of this system through a maximum in the collision, resulting from the stretching and compression of various chemical bonds, which was presented by Marcus (1965). This is resulting from that the kinetic energy of the molecules is transformed in the increase of the potential energy of the bonds in which the ions are approaching as in the ionic binding presented by Mansfield et al. (2011), and the overlap of the orbitals of the electrons from the covalent bonds is increasing, which are implied in the binding as presented by Pauling (1931) and Van Vleck (1933). Marcus (1965) is presenting that the configuration of the atoms at the maximum is named activated complex, and a detailed knowledge of it permits a calculation of the reaction rate.

Marcus (1956) is considering the Schrödinger's wave equation of the activated complex that has the wave function ϕ describing the electrons of the reacting particles, considering their interactions with each other and with all the solvent molecules. First, Marcus (1956) is considering any given configuration of all the atoms in the system, i.e., of the atoms of the two reacting particles and of the solvent. If is not overlapping of the electronic orbitals of the two reacting particles, than Marcus (1956) is presenting that there is not electronic interaction of the two molecules. Marcus (1956) is presenting that is resulting that an exact solution of the wave equation is the wave function which characterizes the electronic configuration of the two reactants when they are far apart in the solvent. For the given atomic configuration Marcus (1956) is noting this wave function by ϕ_x^* . For the solution of the wave equation which characterizes the electronic configuration of the two products Marcus (1956) is considering the solution when the two products are far apart in the solvent. For the given atomic configuration of the reacting particles Marcus (1956) is noting this wave function of the two products by ϕ_x . Marcus (1956) is presenting that the appropriate wave function for the activated complex, in the case of weakly interacting electronic orbitals of the two reacting particles, is the linear combination $(\phi_x + c\phi_x^*)$, where c is a constant. Marcus (1956) is presenting that this solution can be considered corresponding to this system for weakly interacting orbitals only if the total energy of the system is the same for each electronic configuration ϕ_x and ϕ_x^* in any given configuration.

Marcus (1956) is presenting that it can be supposed that in this activated complex the two electronic configurations, ϕ_x and ϕ_x^* , have equal contributions to the total wave function. Marcus (1956) is presenting that for every atomic configuration of the activated complex the total energy of a hypothetical system having the electronic configuration of the

reactants (ϕ_x^*) must be the same as that of a hypothetical system having the electronic configuration of the products (ϕ_x). Marcus (1956) is presenting that this is a thermodynamic system, and is resulting that there are many atomic configurations of all the solvent molecules and of the reacting pair of molecules in the activated complex which is in agreement with this energy restriction. This can be explained by that can be other configurations with more molecules with smaller energy and a smaller number of molecules with greater energy that have the same total energy. Marcus (1956) is presenting that the energy in a thermodynamic sense, which is the average of the energies of all the suitable atomic configurations, must be the same for both electronic configurations. Marcus (1956) name these two hypothetical thermodynamic states of the system as the intermediate states, X^* and X .

Warshel and Chu (1990) are presenting a method for the calculation of quantized rate constants of chemical reactions in condensed phases.

Warshel and Chu (1990) are presenting that in chemistry and biology the electron transfer (ET) and proton transfer (PT) reactions have an important role.

Warshel and Chu (1990) are presenting that in their previous studies which treated tunneling corrections by using the standard diabatic approach they obtained tunneling corrections in microscopic simulation of ET reactions.

Warshel and Chu (1990) in their work use the dispersed polaron model to quantize the classical free energy functional introduced in earlier studies.

Warshel and Chu (1990) are presenting that many chemical reactions can be described as crossing between two diabatic state ψ_1 and ψ_2 that are coupled by the Hamiltonian of the total system

$$\begin{aligned} H\psi_1 &= \epsilon_1\psi_1 + H_{12}\psi_2, \\ H\psi_2 &= \epsilon_2\psi_2 + H_{21}\psi_1. \end{aligned} \quad (1)$$

Warshel and Chu (1990) are presenting that different reactions can be classified function on the magnitude of H_{12} by diabatic or adiabatic theories, by using either the diabatic potential surfaces ($\epsilon_i = \int \psi_i H \psi_i d\tau$) or the ground-state adiabatic surface E_g obtained by diagonalizing H

$$E_g = \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2) - \{[(\epsilon_2 - \epsilon_1)^2 + 4H_{12}^2]^{1/2}\} \quad (2)$$

Warshel and Chu (1990) are presenting the equation for the approximation of the classical rate constant for both diabatic and adiabatic reactions given by

$$k_{12} \cong P(X^\ddagger)K(X^\ddagger)_{12} = \exp\{-\Delta g^\ddagger \beta\}K(X^\ddagger)_{12} \quad (3)$$

where $\beta = 1/k_B T$ (with k_B the Boltzmann constant), $P(X^\ddagger)$ is the probability that the system will reach the transition state $X^\ddagger$ and where the reaction coordinate X is defined in terms of the energy gap, $\epsilon_2 - \epsilon_1$, by $X = (\epsilon_2 - \epsilon_1)$ and $X^\ddagger$ is located at $X = 0$.

References

Mansfield et al., Understanding physics, Wiley, 2011.

Marcus, R. A., On the Theory of Oxidation-Reduction Reactions Involving Electron Transfer. I, J. Chem Phys. 24, 966 (1956).

Pauling, Linus, The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, J. Am. Chem. Soc. 53, 1367 (1931).

Van Vleck, J. H., On the theory of the structure of CH_4 and related molecules: Part II, J. Chem. Phys. 1, 219 (1933b).

Warshel, A., and Chu, Z. T., Quantum corrections for rate constants of diabatic and adiabatic reactions in solutions, J. Chem. Phys. 93, 4003 (1990).

În lucrarea Kassel, Louis S., The Limiting High Temperature Rotational Partition Function of Nonrigid Molecules IV. Ethylene, Propylene, 1-Butene, Cis and Trans 2-Butene,

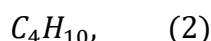
Isobutene, Trimethylethylene, Tetramethylethylene and Butadiene V. Equilibrium Constants for Reactions of Paraffins, Olefins and Hydrogen, J. Chem. Phys. 4, 435 (1936) este prezentată formula chimică a moleculei de propan



În lucrarea Nathan, Harold D., and Henrickson, Charles, CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011 este prezentat ca moleculele care sunt formate numai din carbon și hidrogen se numesc hidrocarburi. În aceeași lucrare este prezentat ca hidrocarburile includ constituenții petrolului și gazelor naturale. În aceeași lucrare este prezentat ca alchenele sunt hidrocarburi care nu conțin legături duble sau triple. În aceeași lucrare este prezentat ca exemple de alchene sunt propanul



butanul



și hexanul



În lucrarea Smythe, C. P., and McAlpine, K. B., The Constancy of the Polarization of Non-Polar Molecules, J. Chem. Phys. 2, 571 (1934) este prezentat că deoarece hexanul și heptanul sunt în general folosite ca solvenți în măsurători de moment dipolar, s-a verificat valoarea zero atribuită momentelor lor prin examinarea vaporilor. În aceeași lucrare este prezentat că pentru vaporii de n-hexan și n-heptan au măsurat constanta dielectrică și au obținut că moleculele acestor substanțe nu au momente dipolare detectabile. În aceeași lucrare este prezentat că pentru polarizarea gazului, P , au folosit formula

$$P = [(\epsilon - 1)/(\epsilon + 2)]V \quad (4)$$

unde ϵ este constanta dielectrică și V este volumul molar.

1. Răspundeam moleculele de hexan și heptan caracterizate prin aceea că au momente dipolare zero.

2.Revendicam moleculele de hexan si heptan caracterizate prin aceea ca se folosesc ca solvenți pentru anumite molecule.

BIBLIOGRAFIE

Nathan, Harold D., and Henrickson, Charles, CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011.

Kassel, Louis S., The Limiting High Temperature Rotational Partition Function of Nonrigid Molecules IV. Ethylene, Propylene, 1-Butene, Cis and Trans 2-Butene, Isobutene, Trimethylethylene, Tetramethylethylene and Butadiene V. Equilibrium Constants for Reactions of Paraffins, Olefins and Hydrogen, J. Chem. Phys. 4, 435 (1936).

Smythe, C. P., and McAlpine, K. B., The Constancy of the Polarization of Non-Polar Molecules, J. Chem. Phys. 2, 571 (1934).

Despre radiație, care a fost baza cuantificării energiei, Kirchhoff a demonstrat că radiația termică din interiorul unei incinte, care nu poate fi parcursă de radiație, este la fel în cantitate și intensitate ca cea de la un corp negru cu aceeași temperatură, și este independentă de natura și forma corpului și este funcție numai de temperatură, conform cu [195].

Kirchhoff spune că radiația din interiorul unei incinte izoterme se numește radiația corpului negru [195]. Kirchhoff spune că intensitatea radiației monocromatice în spectrul corpului negru este o funcție de lungimea de undă și de temperatură [195].

Ulterior s-a descoperit că radiația electromagnetică este cuantificată, și cuanta de energie este [142]

$$h\nu$$

unde h este constanta lui Planck și ν este frecvența radiației electromagnetice.

Ulterior s-a descoperit că exista un dualism undă-corpusul, și toate particulele, electroni, radiații gama, protoni și neutroni în experimente de difracție se comportă ondulatoriu, ca unde, și în experimente de ciocniri se comportă corpuscular, cu respectarea legilor de conservare a energiei și impulsului [95].

Pentru pasul următor în mecanica cuantică s-a folosit expresia energiei totale în funcție de impuls și poziție, numită Hamiltonianul sistemului [95]. Hamiltonianul sistemului este

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$$

Schroedinger a folosit această ecuație, cu modificarea că energia cinetică a fost înlocuită cu Laplacianul înmulțit cu o constantă, care se numește operator. În continuare prezentăm cum a folosit această ecuație.

Schroedinger a aplicat teoria undelor în cuantică pentru cuantificarea valorilor proprii ale energiei [196]. Schroedinger a asociat particulelor și atomilor o funcție ca funcția unei unde, numită funcție de undă, și a aplicat ecuația undei cu suma Laplacianului și energiei potențiale pentru a obține valorile proprii ale energiei [196].

Ulterior ecuația Schroedinger a fost aplicată moleculelor de către [197].

[198] prezintă că a dezvoltat un calcul formal care include dinamica matriceala a lui Born și Jordan, și de asemenea condiția cuantică remarcabilă a lui Schroedinger [198].

În invenție calculăm integralele folosite în modelul orbitalului molecular câmp self consistent combinație liniară de orbitali atomici MO SCF LCAO pentru molecula de BH cu metoda din lucrarea [199] și le comparăm cu cele calculate de [199] Sahni, Roop C., *Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH*, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956). În tabelele 1-5 am însemnat cu X integralele calculate de noi și observăm că am obținut aceleași valori ca cele calculate de Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956). În unele tabele avem semnul schimbat față de rezultatele din Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) deoarece formulele noastre au semnul schimbat. Pentru calculul integralelor am folosit programele realizate de noi în MATLAB R2014a. Pentru calculul sarcinii ecranate pe care o vad electronii atomului de B folosim metoda prezentată de Snyder, Lawrence C., *Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants*, J. Chem. Phys. 55, 95 (1971) care dă aceleași valori pe care le obține Sahni, Roop C., *Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH*, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956). Sahni, Roop C., *Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH*, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) aplică teoria orbitalilor moleculari care sunt formați din combinația liniară a orbitalilor atomici pentru molecula de BH. În aceeași lucrare se folosesc două metode, A și B pentru calculul energiei de legătură a moleculei de BH. În metoda A a fost inclusă explicit interacțiunea tuturor electronilor. În a doua metodă, numită B, mixarea stratului interior și stratului exterior este neglijată dar toți orbitalii sunt făcuți ortogonali unul pe altul și pe straturile interioare. În aceeași lucrare cu metoda A s-a obținut pentru energia de legătură a moleculei de BH valoarea de -1.8 eV și s-a calculat momentul dipolar.

Toți electronii sunt atribuiți orbitalilor moleculari ai moleculei. În lucrarea amintită anterior orbitalii moleculari sunt construiți din următorii orbitali atomici de tip Slater:

$$b = (\beta^3/\pi)^{\frac{1}{2}} \exp(-\beta r) \quad (1)$$

$$s = (\delta^5/3\pi)^{\frac{1}{2}} r \exp(-\delta r) \quad (2)$$

$$z = (\delta^5/\pi)^{\frac{1}{2}} r \cos \theta \exp(-\delta r) \quad (3)$$

$$h = (1/\pi)^{\frac{1}{2}} \exp(-r) \quad (4)$$

unde $\beta = 4.7$, si $\delta = 1.3$. Cu b, s , si z se noteaza orbitalii atomici 1s, 2s, si $2p_z$ ai borului; h noteaza orbitalul atomic al hidrogenului. Orbitalul atomic $2p_z$ este directionat in lungul axei internucleare avand nucleul de bor in origine, si directia pozitiva a axei z orientat catre nucleul de hidrogen.

In metoda A se folosesc orbitalii atomici de tip Slater dati de ecuatiile (1) – (4).

In metoda A in lucrarea [199] Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) au fost obtinuti urmatoarii orbitali moleculari

$$\sigma_1 = 1.0004(b) + 0.0177(s) + 0.0062(z) - 0.0071(h) \quad (5)$$

$$\sigma_2 = -0.0483(b) + 0.5583(s) + 0.2171(z) + 0.4814(h) \quad (6)$$

$$\sigma_3 = -0.0276(b) - 0.7999(s) + 0.5529(z) + 0.4466(h) \quad (7)$$

si orbitalul neocupat

$$\sigma^* = -0.1030(b) - 0.9064(s) - 1.1459(z) + 1.4222(h) \quad (8)$$

Conform cu Figura 1, rezulta

$$\vec{r}'_1 = \vec{r}_2 + \vec{d} \quad (9)$$

$$\vec{r}'_2 = \vec{r}_1 - \vec{d} \quad (10)$$

$$r'_1 = \sqrt{(r_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2)^2 + (r_2 \sin \theta_2 \sin \varphi_2)^2 + (r_2 \cos \theta_2 + d)^2} \quad (11)$$

$$r'_2 = \sqrt{(r_1 \sin \theta_1 \cos \varphi_1)^2 + (r_1 \sin \theta_1 \sin \varphi_1)^2 + (r_1 \cos \theta_1 - d)^2} \quad (12)$$

Consideram ca Z_1' trebuie sa fie sarcina nucleului de bor pe care o vede electronul 1s al borului $Z_b = 4.7$.

$$r_1 = x_1 a_0 \quad (13)$$

$$r_2 = x_2 a_0 \quad (14)$$

$$r_{12} = x_{12} a_0, \quad (15)$$

Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) prezinta ca lungimea legaturii in molecula de BH este

$$d = 1.2325 \text{ \AA} = 2.3294 a_0 \quad (16)$$

Notam

$$d = p a_0 \quad (17)$$

Pentru orbitalul 2s al borului in loc de functia de unda din ecuatia (2) consideram functia de unda a atomului cu un electron din [95] Mansfield, Michael, and O'Sullivan, Colm, Understanding Physics, Wiley, 2011, care este asemanatoare cu orbitalul ortogonalizat din lucrarea Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956), si este data de ecuatia

$$s = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z_s}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Z_s}{a_0} r \right) e^{-\frac{Z_s r}{2a_0}} \quad (18)$$

unde sarcina Z_s este calculata cu metoda data de [200] Snyder, Lawrence C., Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants, J. Chem. Phys. 55, 95 (1971) pentru orbitalii de tip Slater

$$s_2 = N_1 0.85 + (N_2 - 1) 0.35 \quad (19)$$

$$Z_s = Z_1 = Z - s_2 = 2\delta = 2.6 \quad (20)$$

In lucrarea Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) in modelul orbitalului molecular camp self consistent combinatie liniara de orbitali atomici aplicata moleculei de BH cu cei patru orbitali atomici dati de ecuatiile (1), (3), (4), si (14) se obtin alti patru orbitali moleculari prin combinatia liniara a acestora.

În lucrarea Mansfield, Michael, and O'Sullivan, Colm, Understanding Physics, Wiley, 2011 este prezentat ca funcția de undă $1s$ a atomului cu un electron cu sarcina nucleului egală cu Z_b , care coincide cu orbitalul b din lucrarea Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) din ecuația (1), este

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z_b}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Z_b r}{a_0}} \quad (21)$$

În lucrarea Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) este prezentat ca orbitalul atomic $2s$ al borului ortogonal pe orbitalii $1s$ și $2p_z$ este format din orbitalii atomici $1s$ și $2s$ ai borului în forma următoare

$$\begin{aligned} \psi_{2s} &= \frac{(2s) - 0.209918531(1s)}{0.997719} \\ &= \frac{1}{0.997719} \left[\frac{1}{4\sqrt{6\pi}} Z_s^{\frac{5}{2}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{Z_s r}{2a_0}} - 0.209918531 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z_b}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Z_b r}{a_0}} \right] \\ &= 0.6293 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{Z_s r}{2a_0}} - 1.2071 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Z_b r}{a_0}} \quad (22) \end{aligned}$$

Observăm că orbitalul atomic dat de ecuația (18) este diferit de orbitalul atomic dat de ecuația (14) și rezultatele obținute pentru integralele energiei cu ecuația (18) sunt diferite de cele obținute cu ecuația (14).

Folosim ecuația (2) pentru metoda A. Atomul de Bor este pe axa Oz sub centrul axelor de coordonate cu distanța d . Atomul de Hidrogen este în centrul axelor de coordonate. Electronul considerat al atomului de bor are vectorul de poziție $\vec{r}_1$. Electronul atomului de hidrogen are vectorul de poziție $\vec{r}_2$. Conform cu Figura 1 rezulta

$$\begin{aligned} |\vec{r}_1|^2 &= a_0^2 x_1^2 = |\vec{r}_2 + \vec{r}_{12} - \vec{d}|^2 \\ &= a_0^2 (x_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2 + x_{12} \sin \theta_{12} \cos \varphi_{12})^2 \\ &\quad + a_0^2 (x_2 \sin \theta_2 \sin \varphi_2 + x_{12} \sin \theta_{12} \sin \varphi_{12})^2 \\ &\quad + a_0^2 (x_2 \cos \theta_2 + x_{12} \cos \theta_{12} - p)^2 \quad (23) \end{aligned}$$

Conform cu Figura 2

$$\cos \theta_1 = \cos(\theta_2 + \theta) = \cos \theta_2 \cos \theta - \sin \theta_2 \sin \theta \quad (24)$$

Conform cu Figura 2

$$\cos \theta = \frac{r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2}{2r_1 r_2} \quad (25)$$

Conform cu Figura 1

$$\cos \theta_1' = \frac{p^2 + x_1'^2 - x_2^2}{2px_1'} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} K74 = (bs:zh) &= \left\langle b(1)s(1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| z(2)h(2) \right\rangle \\ &= \beta^{\frac{3}{2}} \delta^5 \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 \left(\frac{1}{3} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

$$\iiint \iiint e^{-\beta x_1} x_1 e^{-\delta x_1} x_1' \cos \theta_1' e^{-\delta x_1'} e^{-x_2} x_{12} \sin \theta_{12} dx_{12} d\theta_{12} d\varphi_{12} x_2^2 \sin \theta_2 dx_2 d\theta_2 d\varphi_2 \quad (27)$$

În continuare prezentăm programul realizat de noi în programul MATLAB R2014a descris în lucrarea [201] pentru calculul integralei K73. Timpul de calcul al acestei integrale cu Leptopul a fost mai mic de 40 min. Se poate folosi și FORTRAN și PASCAL pentru calculul tuturor integralelor din invenție.

%Se calculează integrala K74 (bs:zh)=(b1s1|r12|z2h2).

%Se schimbă 40 cu 20.

%Se schimbă 0.15 cu 0.30.

disp(['Se schimbă 40 cu 20. Se schimbă incrementul 0.15 cu 0.30.']);

disp(['Se calculează integrala K74 pentru molecula de BH']);

disp(['în modelul orbitalului molecular(bs:zh).']);

%zb este beta care este exponentul orbitalului b care este orbitalul 1s

%al atomului de bor

zb=4.7;

zs=2.6;

%de=zs/2.

%de este delta care este exponentul orbitalilor s si z care sunt orbitalii

%2s si 2pz ai atomului de bor

de=1.3;

%p este distanta dintre nuclee in molecula de bor in unitati atomice,

%in care unitatea de lungime este a0, unde a0 este raza primei orbite

%a electronului in atomul de hidrogen in modelul Bohr, numita raza bohr

p=2.329;

%i este 40 care este numarul de iteratii pentru calculul esantioanelor

%distanței x2 cu pasul 0.15 si rezulta un maxim de 6, care o explicam

%prin expnentii orbitalilor 1s, 2s si 2pz ai atomului de bor care reduc

%densitatea de probabilitate de localizare a electronului la distanta x2

%care pentru orbitalul 2s da 0,0015

i=40;

j=30;

k=30;

u=40;

v=30;

w=30;

f74=0;

```

for x20=1:i

    x2=x20.*0.15;

for x120=1:u

    x12=x120.*0.15;

for y2=1:j

    T2=y2.*pi./30;

for z2=1:k

    F2=z2.*2.*pi./30;

for y12=1:v

    T12=y12.*pi/30;

for z12=1:w

    F12=z12.*2*pi./30;

x1=(x2.*sin(T2).*cos(F2)+x12.*sin(T12)*cos(F12)).^2+(x2.*sin(T2).*sin(F2)+x12.*sin(T12)
).*sin(F12)).^2+(x2.*cos(T2)+x12.*cos(T12)-p).^2;

x10=sqrt(x1);

x1p=(x2.*sin(T2).*cos(F2)).^2+(x2.*sin(T2).*sin(F2)).^2+(x2.*cos(T2)-p).^2;

x1p0=sqrt(x1p);

%x2p=(x2.*sin(T2).*cos(F2)+x12.*sin(T12)*cos(F12)).^2+(x2.*sin(T2).*sin(F2)+x12.*sin(
T12).*sin(F12)).^2+(x2.*cos(T2)+x12.*cos(T12)).^2;

%x2p0=sqrt(x2p);

%cosinusul lui teta 1 prim

xcosT1p=(p.^2+x1p0.^2-x2.^2)./(2.*p*x1p0);

if xcosT1p <= 1

```

```

if xcosT1p >= -1

f74=f74+exp(-zb.*x10).*x10.*exp(-de.*x10).*x1p0.*xcosT1p.*exp(-de.*x1p0).*exp(-
x2).*x12.*sin(T12).*x2.^2.*sin(T2).*(pi./30).^2.*(2.*pi./30).^2.*0.15.^2;

else

end

else

end

end

end

end

end

end

end

K74=zb.^1.5.*de.^5.*f74.*(1./pi).^2.*(1./3).^0.5;

disp(['(b1s1|r12|z2h2)']);

disp(['f74=;K74=']);

[f74,K74]

```

$$f_{74} = 0.023\,4 \quad (28)$$

$$K_{74} = 0.051\,9\,u.a. \quad (29)$$

In stadiul actual de dezvoltare metoda legăturii de valență este mai bine fundamentată teoretic și are rezultate mai bune decât metoda orbitalului molecular conform cu lucrarea [202] Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008.

Aplicații ale energiei de legătură a unei molecule se găsește în lucrarea [118] în care energia de legătură este căldura conținută în moleculă și suma energiilor de legătură a moleculelor care reacționează, adică a reactanților, este căldura reactanților, și ceea a produșilor de reacție este căldura produșilor, și diferența dintre căldura reactanților și produșilor este căldura de reacție, și în lucrarea [182] în care energia de activare a unei reacții este energia pe care trebuie să o primească reactanții pentru a trece de maximul curbei de coordonate a reacției și este calculată față de suma energiilor de legătură a reactanților, și ale proprietăți de a fi dipolare ale moleculelor se găsesc în lucrarea [143] pentru solvenți și în lucrarea [181] și explicații ale aplicațiilor la dielectrici în [142] unde se explică orientarea moleculelor dipolare în câmp electric extern între sarcini de tip opus, și aplicații și descrierea dielectricilor în [203].

Descrierea unui atom se găsește în lucrarea [147].

Tabelul 1. Integralele de energie potentiala nucleara ale moleculei de BH calculate de noi, notate cu X, si calculate in lucrarea Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) folosite in aceeași lucrare in modelul orbitalului molecular camp self consistent combinatie liniara de orbitali atomici. Observam ca valorile integralelor calculate de noi coincid cu cele calculate de Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956),
 $(A: \chi_p \chi_q) = \int \chi_p(1) \frac{1}{r_A} \chi_q(1) dT.$

Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi	Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi	Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi
(H: hh) 1 u.a.	K20 X -1 u.a. =-27.2 eV	(H: hs) =0.37637 u.a.	K26 X Cu ec. (2) -0.3763	(H: bb)	K32 X
(B: bb)	K21	(H: hz)	K27	(H: ss)	K33

4.7 u.a.	X Rezultat greșit -4.7 u.a. =-127.88 eV		X	0.40524	X Rezultat gresit Cu ec. (2) -0.4052 u.a.
(B: ss) 0.65 u.a.	K22 X Rezultat gresit Cu ec. (2) -0.6503 u.a.	(B: hb)	K28 X	(H: bs) 0.09013 u.a.	K34 X Cu ec. (2) -0.0901 u.a.
(B: zz) 0.65 u.a.	K23 X Rezultat gresit -0.65 u.a.	(B: hs) 0.31016 u.a.	K29 X Cu ec (2) -0.3103 u.a.	(H: bz) 0.01489 u.a.	K35 X 0.0150 u.a.
(B: bs) 0.41984 u.a.	K24 X Rezultat gresit Cu ec. (18) 0.5658 u.a.	(B: hz)	K30 X	(H: zz)	K36 X

	Cu ec. (2) -0.4202 u.a.				
(H:hb) 0.03599 u.a.	K25 X Rezultat gresit -0.036 u.a.	(B:hh)	K31 X	(H:sz) 0.16038 u.a.	K37 Cu ec. (2) 0.1603 u.a.

Tabelul 2. Integralele Coulomb ale moleculei de BH calculate in lucrarea Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) folosite in aceeasi lucrare in modelul orbitalului molecular camp self consistent, si cele calculate de noi notate cu X, $(\chi_p\chi_q:\chi_r\chi_t) = \iint \chi_p(1)\chi_r(2)\frac{1}{r_{12}}\chi_q(1)\chi_t(2)dT_1dT_2$.

Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi
(bb:bb) 2.93750 u.a.	K38 X 2.8012 u.a.
(ss:ss) 0.47227 u.a.	K39 X 0.4693 u.a.
(zz:zz) 0.50883 u.a.	K40 X 0.6733 u.a.

(hh:hh) 0.62500 u.a.	K41 X 0.6202 u.a.
(ss:zz) 0.47227 u.a.	K42 X 0.4682 u.a.
(bb:ss) 0.64632 u.a.	K43 X 0.7476 u.a.
(bb:zz) 0.64632 u.a.	K44 X 0.7235 u.a.
(bs:bs) 0.06059 u.a.	K45 X 0.0602 u.a.
(bz:bz) 0.01285 u.a.	K46 X 0.0115 u.a.
(sz:sz) 0.10438 u.a.	K47 X 0.1042 u.a.
(bb:bs)	K48

0.37227 u.a.	X 0.3744 u.a.
(bs:ss) 0.13134 u.a.	K49 X 0.1301 u.a.
(bs:zz) 0.13134 u.a.	K50 X 0.1299 u.a.
(bz:sz) 0.02006 u.a.	K51 X 0.0198 u.a.
(hh:ss) 0.37167 u.a.	K52 X 0.3660 u.a.
(hh:sz) 0.11276 u.a.	K53 X 0.1160 u.a.
(hh:zz) 0.41278 u.a.	K54 X 0.4041 u.a.
(hh:bb)	K55 X

(hh:bs)	K56
0.08645 u.a.	X
	0.1101 u.a.
(hh:bz)	K57
0.01200 u.a.	X
	0.0156 u.a.

Tabelul 3. Integralele de energie cinetica ale moleculei de BH calculate de Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) in modelul orbitalului molecular si cele calculate de noi notate cu X. Observam ca valorile integralelor calculate de noi coincide cu cele calculate de Sahni, Roop C., Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH, J. Chem. Phys. 25, 332 (1956), $\left(\chi_p: -\frac{1}{2}\Delta: \chi_q\right) = -\frac{1}{2} \int \chi_p(1) \Delta \chi_q(1) dT$.

Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi	Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi
$\left(h: -\frac{1}{2}\Delta h\right)$ 0.5 u.a.	K58 X 0.5 u.a.= 13.6 eV	$\left(b: -\frac{1}{2}\Delta s\right)$ -0.34532 u.a.	K62 X Cu ec. (2) -0.3455 u.a.
$\left(b: -\frac{1}{2}\Delta b\right)$ 11.045 u.a.	K59 X 11.0329 u.a. =300.0948 eV	$\left(h: -\frac{1}{2}\Delta b\right)$	K63 X

$\left(z: -\frac{1}{2}\Delta z\right)$ 0.845 u.a.	K60 X 0.8455 u.a. =22.9980 eV	$\left(h: -\frac{1}{2}\Delta s\right)$ 0.09383 u.a.	K64 X Cu ec. (2) 0.0938 u.a.
$\left(s: -\frac{1}{2}\Delta s\right)$ 0.28167 u.a.	K61 X Cu ec. (2) 0.2818 u.a.	$\left(h: -\frac{1}{2}\Delta z\right)$ 0.21375 u.a.	K65 X 0.2137 u.a.

Tabelul 4. Integralele hibride ale moleculei de BH calculate in lucrarea Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) in modelul orbitalului molecular si cele calculate de noi si insemnate cu X cu aceeasi metoda, $(\chi_p\chi_q:\chi_r\chi_t) = \iint \chi_p(1)\chi_r(1)\frac{1}{r_{12}}\chi_q(2)\chi_t(2)dT_1dT_2$.

Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi
$(hh:hb)$ 0.033 87	K66 X 0.033 53
$(hh:hs)$ 0.287 20	K67 X 0.284 09
$(hh:hz)$ 0.329 62	K68 X

	0.326 43
$(bb: bh)$	K69
0.147 25	X
	0.129 77
$(bb: sh)$	K70
0.308 52	X
	0.330 80
$(bb: zh), (bb:zh)$	K71
0.251 20	X
	0.263 77
$(bs: bh)$	K72
0.022 86	X
	0.020 96
$(bs: sh), (bs:sh)$	K73
0.063 23	X
	0.062 69
$(bs: zh)$	K74
0,052 21	0,051 9
$(ss: bh)$	K75
$(ss: sh)$	K76
$(ss: zh)$	K77
$(bz: bh)$	K78

$(bz:zh)$	K79
$(bz:sh)$	K80
$(sz:bh)$	K81
$(zz:bh)$	K82
$(sz:sh)$	K83
$(sz:zh)$	K84
$(zz:sh)$	K85
$(zz:zh)$	K86

Tabelul 5. Integralele de schimb ale moleculei de BH calculate in lucrarea Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956) in modelul orbitalului molecular si cele calculate de noi notate cu X, $(\chi_p\chi_q:\chi_r\chi_t) = \iint \chi_p(1)\chi_r(2)\frac{1}{r_{12}}\chi_q(2)\chi_t(1)dT_1dT_2$.

Sahni, Roop C., J. Chem. Phys. 25, 332 (1956)	Calculate de noi
$(hs:hs)$	K87
$(hs:hz)$	K88
$(hz:hz)$	K89
	X
$(hb:hb)$	K90
	X
$(hb:hs)$	K91
$(hb:hz)$	K92

1.Revendicam molecula de BH caracterizata prin aceea ca integralele folosite in calculul energiei in modelul orbitalului molecular camp self consistent combinatie liniara de orbitali atomici (LCAO) din Tabelele 1-5 calculate cu metoda A din lucrarea [199] au valorile calculate de noi si insemnate cu X si au aceleasi valori cu cele calculate in lucrarea [199] cu metoda A.

REVENDICARI

1.Revendicam molecula de BH caracterizata prin aceea ca integralele folosite in calculul energiei in modelul orbitalului molecular camp self consistent combinatie liniara de orbitali atomici (LCAO) din Tabelele 1-5 calculate cu metoda A din lucrarea [199] au valorile calculate de noi si insemnate cu X si au aceleasi valori cu cele calculate in lucrarea [199] cu metoda A.

DESENE EXPLICATIVE

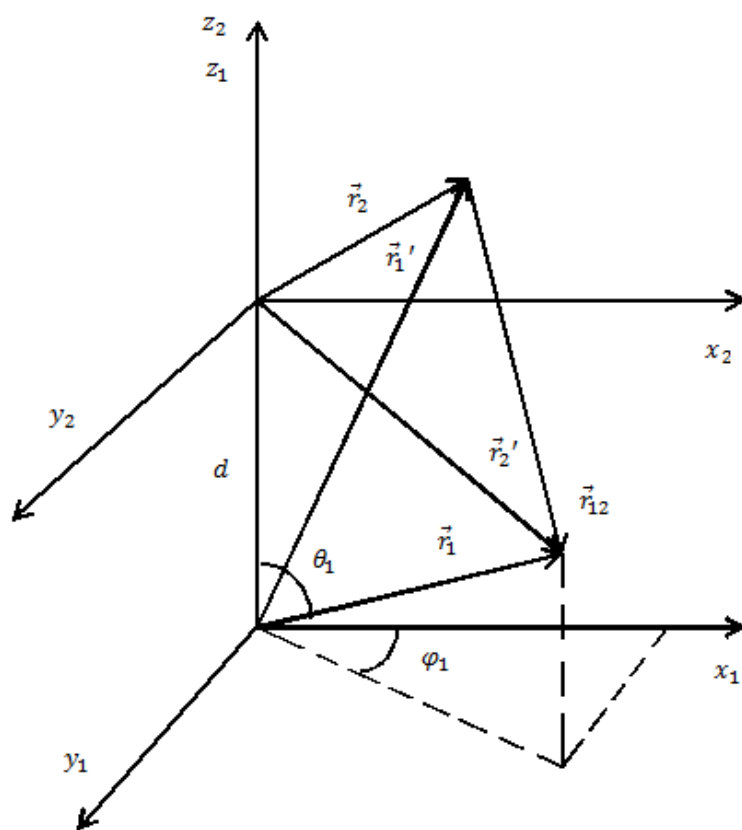


Fig. 1.

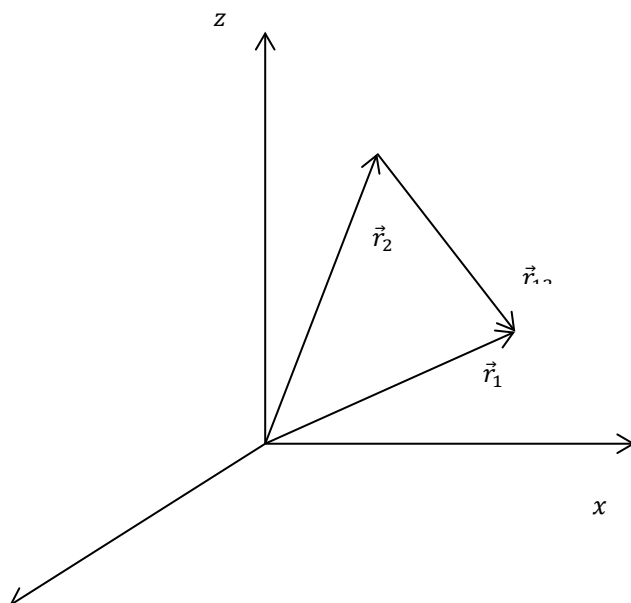


Fig. 2.

REZUMATUL INVENTIEI

Integralele folosite in calculul energiei moleculei de BH in modelul orbitalului molecular camp self consistent combinatie liniara de orbitali atomici calculate de noi cu metoda A din lucrarea [199] comparate cu cele calculate in lucrarea [199] cu metoda A.

BIBLIOGRAFIE

- [1] A. GRAFTON, «OF CHYMISTS AND KINGS,» ÎN: *SCIENCE*, vol. 338, n° 16114, pp. 1540-1541, 21 12 2012.
- [2] L. SAAG et A. ET, «GENETIC ANCESTRY CHANGES IN STONE TO BRONZE AGE TRANSITION IN THE EAST EUROPEAN PLAIN,» ÎN: *SCIENCE ADVANCES*, vol. 7, n° 14, 20 JAN 2021.
- [3] MUZEULBRAILEICAROLIARH, «ARHEOLOGIE PATRIMONIU,» MUZEUL BRAILEI CAROL I, [En ligne]. Available: <https://www.muzeulbrailei.ro/arheologie/patrimoniu/>. [Accès le 18 03 2024].
- [4] H. CORNWALL, «A SUMMARY OF IDEAS ON THE ORIGIN OF NATIVE COPPER DEPOSITS,» ÎN: *ECONOMICAL GEOLOGY AND THE BULLETIN OF THE SOCIETY OF ECONOMIC GEOLOGISTS*, vol. 51, n° 17, p. 1, 1956.
- [5] D. GRIGORESCU, N. ANASTASIU, M. ȘECLĂMAN et P3, GEOLOGIE MANUAL PENTRU CLASA A XI - A, BUCUREȘTI: EDITURA DIDACTICĂ ȘI PEDAGOGICĂ, R.A., 1995, p. 3.

- [6] L. R. BURGER et B. R. GORDON, «EARLY CENTRAL ANDEAN METAL WORKING FROM MINA PERDIDA, PERU,» *ÎN: SCIENCE*, vol. 282, n° %15391, p. 1108, 6 NOI 1998.
- [7] R. MONASTERSKY, «ANCIENT METAL MINES SULLIED GLOBAL SKIES,» *ÎN: SCIENCE NEWS*, vol. 149, n° %115, 13 APR 1996.
- [8] UNKNOWNCUPPER, «USES OF CUPPER,» [En ligne]. Available: <https://geology.com/usgs/uses-of-copper/>. [Accès le 29 12 2023].
- [9] A. GIBBONS, «THE ULTIMATE SACRIFICE,» *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, n° %16083, pp. 834-837, 18 5 2012.
- [10] M. HAUSTEIN, C. GILLIS et E. PERNICKA, «TIN ISOTOPY - A NEW METHOD FOR SOLVING OLD QUESTIONS,» *ÎN: ARCHAEOLOGY*, vol. 52, n° %15, p. 816, 16 AUG 2010.
- [11] V. VILLALBA-MOUCO et ET AL., «GENOMIC TRANSFORMATION AND SOCIAL ORGANIZATION DURING THE COPPER AGE-BRONZE AGE TRANSITION IN SOUTHERN IBERIA,» *ÎN: SCIENCE ADVANCES*, vol. 7, n° %147, 17 NOE 2021.
- [12] E. HISTORY.COM, «BRONZE AGE,» A & E TELEVISION NETWORKS, 24 8 2021. [En ligne]. Available: <https://www.history.com/topics/pre-history/bronze-age>. [Accès le 25 10 2022].
- [13] WWW.DEX.RO, «BRONZ,» WWW.DEX.RO, 2023. [En ligne]. Available: <https://www.dex.ro/bronz>. [Accès le 25 10 2023].
- [14] MUZEULJUDEȚEANIALOMIȚAOLĂRIT1, «COLECȚIA DE ARHEOLOGIE,» MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA SLOBOZIA JUD. IALOMIȚA ROMÂNIA, 13 09 2017. [En ligne]. Available: <https://mjalomita.ro/colectia-de-arheologie/>. [Accès le 18 03 2024].
- [15] UNKNOWNCUCOIN, «EARLY COPPER COINS,» *ÎN: LIBERTY COIN & CURRENCY*, [En ligne]. Available: <https://libertycoinandcurrency.com/coins/early-copper-coins-2/>. [Accès le 23 10 2022].
- [16] A. CURRY, «SWORD-WIELDING SCIENTISTS SHOW HOW ANCIENT FIGHTING TECHNIQUES SPREAD ACROSS BRONZE AGE EUROPE,» *ÎN: SCIENCE*, 17 4 2020.
- [17] B. BOWER, «ARCTIC HUNTER-GATHERS WERE ADVANCED IRON WORKERS MORE THAN 2000 YEARS AGO,» *ÎN: SCIENCE NEWS*, vol. 201, n° %12, 3 IAN 2022.
- [18] E. HISTORY.COM, A. ONION, M. SULLIVAN et M. MULLEN, «IRON AGE,» A & E TELEVISION NETWORK, 27 8 2021. [En ligne]. Available: <https://www.history.com/topics/pre-history/iron-age>. [Accès le 25 10

2022].

- [19] V. KUMAR et A. ET, «BRONZE AND IRON AGE POPULATION MOVEMENTS UNDERLIE XINJIANG POPULATION HISTORY,» ÎN: *SCIENCE*, vol. 376, n° %16588, pp. 62-69, 31 3 2022.
- [20] MUZEULJUDEȚEANIALOMIȚACERAMICĂV-IV, «EXPOZIȚIE PERMANENTĂ,» MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA, 01 12 2003. [En ligne]. Available: <https://mjalomita.ro/expozitie-permanenta/>. [Accès le 25 10 2023].
- [21] E. HISTORY.COMIRON, «5 IRON AGE TOOLS AND INNOVATIONS,» A & E TELEVISION NETWORKS, [En ligne]. Available: <https://www.history.com/news/iron-age-tools-innovations>. [Accès le 25 10 2022].
- [22] C. HOLDEN, «AFRICA'S IRON AGE HEALERS?,» ÎN: *SCIENCE*, vol. 327, n° %15969, p. 1065, 26 2 2010.
- [23] I. STĂNUȚĂ et ET AL., DIALOGURILE FASCINANTEI GENEZE, BUZĂU: EDITGRAPH, 2023.
- [24] M. CARTWRIGHT, «SILVER IN ANTIQUITY,» WORLD HISTORY ENCYCLOPEDIA, 19 SEP 2017. [En ligne]. Available: <https://www.worldhistory.org/Silver/>. [Accès le 1 JAN 2024].
- [25] M. B. ABBOTT et A. P. WOLFE, «INTENSIVE PRE-INCAN METALLURGY RECORDED BY LAKE SEDIMENTS FROM BOLIVIAN ANDES,» ÎN: *SCIENCE*, vol. 301, n° %15641, p. 1893, 26 SEP 2003.
- [26] MUZEULJUDEȚEANIALOMITANUMISMATICA, «COLECȚIA DE NUMISMATICĂ,» MUZEUL JUDEȚEAN IALOMITA, 2025. [En ligne]. [Accès le 07 07 2025].
- [27] S. ACHARIA, «LEAD BETWEEN THE LINES,» *NATURECHEMISTRY*, vol. 5, p. 894, 2013.
- [28] B. P. LANPHEAR, «THE PARADOX OF LEAD POISONING PREVENTION,» ÎN: *SCIENCE*, vol. 281, n° %15383, p. 1617, 11 SEP 1998.
- [29] F. MORRIS, «BEFORE IT WAS DANGEROUS, LEAD WAS THE MIRACLE METAL THAT WE LOVED,» ÎN: *HEALT*, 6 APR 2016.
- [30] T. BELL, «A BRIEF HISTORY OF LEAD PROPERTIES, USES AND CHARACTERISTICS,» ÎN: *THOUGHTCO., SCIENCE, TECH, MATH, SCIENCE*, 20 JAN 2020.
- [31] J. LEWIS, «LEAD POISONING: A HISTORICAL PERSPECTIVE,» ÎN: *EPA JOURNAL*, MAI 1985.
- [32] R. MONASTERSKY, «FOULING THE AIR: NOT JUST A MODERN PROBLEM,» ÎN: *SCIENCE NEWS*, vol. 145,

n° 113, p. 198, 26 MARCH 1994.

- [33] A. EICHLER et ET AL., «PB POLLUTION FROM LEADED GASOLINE IN SOUTH AMERICA IN THE CONTEXT OF A 2000 YEARS METALLURGICAL HISTORY», *ÎN: SCIENCE ADVANCES*, vol. 1, n° 12, 6 3 2015.
- [34] C. ARMATAS, B. LOPEZ, A. TANDOC et B. L. MATERNA, «INDUSTRIES WITH THE HIGHEST OCCUPATIONAL BLOOD LEAD TEST RESULTS, CALIFORNIA OCCUPATIONAL BLOOD LEAD REGISTRY, 2020-2021», *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, 30 09 2022.
- [35] R. RABIN, «THE LEAD INDUSTRY AND LEAD WATER PIPES "A MODEST CAMPAIGN",» *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, 10 10 2011.
- [36] Oldenburg_1665_vol_1_pag_10, «Of a peculiar lead-ore in Germany, and the use thereof,» *Philosophical transactins of the Royale society of London*, vol. 1, n° 11, p. 10, 1665.
- [37] G. KUTNEY, *ÎN: SULFUR. HISTORY, TECHNOLOGY, APPLICATIONS & INDUSTRY*, 2 éd., TORONTO, ONTARIO: CHEMTECHPUBLISHING, 2012.
- [38] S. PAPPAS, «FACTS ABOUT SULFUR,» *ÎN: LIVESCIENCE PARTE A FUTURE US INC*, 29 9 2017.
- [39] M. C. BATTIGELLI et J. F. GAMBLE, «FROM SULFUR TO SULFATE: ANCIENT AND RECENT CONSIDERATIONS,» *ÎN: JOURNAL OF OCCUPATIONAL MEDICINE*, vol. 18, n° 15, p. 334, 5 1976.
- [40] K. KLOCHKO, «ANTIMONY STATISTICS AND INFORMATION,» USGS SCIENCE FOR A CHANGING WORLD U.S. DEPARTMENT OF THE INTERIOR, [En ligne]. Available: <https://www.usgs.gov/centers/national-minerals-information-center/antimony-statistics-and-information>. [Accès le 29 10 2022].
- [41] F. M. ENDLICH, «ON SOME INTERESTING DERIVATIONS OF MINERAL NAMES,» *ÎN: THE AMERICAN NATURALIST*, vol. 22, n° 1253, pp. 21-32, JAN 1888.
- [42] X. E. A. WU, «EARLY POTTERY AT 20000 YERS AGO IN XIANRENDONG CAVE, CHINA,» *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, n° 16089, p. 1696, 29 IUN 2012.
- [43] G. SHELBAACH, «ON THE INVENTION OF POTTERY,» *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, n° 16089, pp. 1644-1645, 29 IUN 2012.
- [44] E. STOKSTAD, «A TIME CAPSULE FROM BRONZE AGE BRITAIN,» *ÎN: SCIENCE*, vol. 353, n° 16296, pp. 210-211, 15 IUL 2016.

- [45] ZINC, «ZINC, PERIODIC TABLE,» ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY, 2024. [En ligne]. Available: <https://www.rsc.org/periodic-table/element/30/zinc>. [Accès le 5 JAN 2024].
- [46] UNKNOWNHISTORYZINC, «HISTORY_ZINC,» BRITANICA, [En ligne]. Available: <https://www.britannica.com/science/zinc/History>. [Accès le 5 JAN 2024].
- [47] C. P. McCORD et A. FRIEDLANDER, «AN OCCUPATIONAL SINDROME AMONG WORKERS IN ZINC,» *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, vol. 16, n° %13, p. 274, 3 1926.
- [48] H. C. LEWIS, «MINERALOGY,» *ÎN: THE AMERICAN NATURALIST*, vol. 17, n° %111, pp. 1158-1163, 1883.
- [49] Oldenburg_1665_vol_1_pag_45, «Of the mineral of Liege, yelding both brimstone, and vitriol, and the way of extracting them out of it, used at Liege,» *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, n° %13, p. 45, 1665.
- [50] R. Moray, «An account how adits and mines are wrought at Liege without air-shafts, comunicated by Robert Mray,» *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, n° %15, p. 79, 1665.
- [51] MERCURY, «MERCURY,» BERKELEY, [En ligne]. Available: <https://nature.berkeley.edu/classes/eps2/wisc/hg.html>. [Accès le 3 JAN 2024].
- [52] MERCURY_BRITANICA, «MERCURY,» BRITANICA, [En ligne]. Available: <https://www.britannica.com/science/mercury-chemical-element>. [Accès le 3 JAN 2024].
- [53] Oldenburg_1665_vol_1_pag_21, «Extract of a letter written from Venice, concerning the mines of mercury in Friuly,» *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, n° %12, p. 21, 1665.
- [54] H. C. King, *The History of the Telescope*, Mineola, New York: Dover Publications, Inc., 1955.
- [55] 2NECUNOSCU02, «GLASS,» WIKIPEDIA, 31 03 2022. [En ligne]. Available: <https://en.wikipedia.org/wiki/Glass#History>. [Accès le 06 04 2022].
- [56] 3NECUNOSCU01, «OBSIDIAN,» WIKIPEDIA, 20 03 2022. [En ligne]. Available: <https://en.wikipedia.org/wiki/Obsidian>. [Accès le 06 04 2022].
- [57] M. CARTWRIGHT, «ALCHEMY,» WORLD HISTORY ENCYCLOPEDIA, 24 AUG 2023. [En ligne]. Available: https://www.worldhistory.org/Alchemy/#google_vignette. [Accès le 20 03 2024].
- [58] A. A. MAYNARD, «WINE,» BRITANNICA, 08 03 2024. [En ligne]. Available:

<https://www.britannica.com/topic/wine>. [Accès le 20 03 2024].

- [59] M. M. P. MUIR, HEROS OF SCIENCE: CHEMISTS, THE STORY OF ALCHEMY AND BEGINNINGS OF CHEMISTRY, DIGICAT, 2022, pp. 1-20.
- [60] E. RYLOTT et N. BRUCE, «PLANTS TO MINE METALS AND REMEDIATE LAND,» *ÎN: SCIENCE*, vol. 377, n° 16613, p. 1380, 22 9 2022.
- [61] Fontenelle_1666_1668_pag_18, «Physique preliminaires,» *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces Paris*, vol. 1, p. 18, 1733.
- [62] M. E. Weeks, «Discovery of the elements,» *J. Chem. Educ.*, vol. 9 (1), p. 4, 1932, v. 9 (1), p. 4.
- [63] Fontenelle_pag_20_Hamel, *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1666*, vol. 1, p. 20, 1733.
- [64] Fontenelle_1667_pag_47, «Observations sur la chaux,» *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces 1667 Paris*, vol. 1, p. 47, 1733.
- [65] Fontenelle_pag_23, «Experience d un sel doux,» *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 23, 1733.
- [66] C. 1. PERRAULT¹⁴, «Experiences de l'augmentation du poids de certain matieres par calcination,» *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces Paris 1666*, vol. 1, p. 14, 1729-1734.
- [67] Fontenelle_pag_24_1666, «Autres experience de chimie,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1666*, vol. 1, p. 24, 1733.
- [68] C. V. PERRAULT²⁷, «Analise de plusiers eaux minerales,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666*, vol. 1, p. 27, 1733.
- [69] J. T. Moore, Chemistry for dummies, 2nd Edition éd., Wiley, 2011, p. 223.
- [70] L. Huetinck et S. Adams, CliffsQuickReview Physics, Wiley, 2001, p. 184.
- [71] LAVOISIER, «MEMOIRE SUR LA COMBUSTION DU FER,» *ÎN: ANNALES DE CHIMIE*, vol. 1, pp. 19-30, 1789.
- [72] C. PERRAULT⁸⁷, «Sur la coagulation,» *ÎN: Histoire de l'Academie Royale des Scienecs Paris 1669*, vol. 1, pp. 87-94, 1733.

- [73] S. Holzner, *Physics I For Dummies*, Wiley, 2011.
- [74] PERRAULT50V1, «Experience pour dessaler l'eau de la mer,» *ÎN: Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 50, 1733.
- [75] H. D. Nathan, C. Henrickson et R. L. Ford, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, ISBN 978-0-470-90543-2 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu ordinul nr. 105-6630974-6331466 din 16 August 2012 cu cartile Precalculus 2004 si Calculus 2001 valoarea \$45.95, Wiley, 2011, p. 13.
- [76] S. Holzner, *Physics I For Dummies*, Wiley, 2011.
- [77] Dodart_vol_4_121, «Memoire pour servir a l'Histoire des plantes,» *Memoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666 - 1699*, vol. 4, p. 121, 1731.
- [78] Fontenelle_1675_p_198, «Experiences diverces,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1675*, vol. 1, p. 198, 1733.
- [79] Dex_Necunoscut, www.dex.ro.
- [80] H. D. Nathan et C. Henrickson, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 13.
- [81] Fontenelle_pag_79_1669 et Hamel, «Phisique Chimie,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1669 Paris*, vol. 1, p. 79, 1733.
- [82] J. T. Moore, *ÎN: Chemistry for dummies* ISBN 978-1-118-00730-3 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea *Physics I for Dummies 2011* valoarea \$37.62, 2nd Edition éd., Wiley, 2011, p. 223.
- [83] Fontenelle_1670_pag_123, «Eux minerales,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1670*, vol. 1, p. 123, 1733.
- [84] I. d. P. e. C. Vicat, «Extrait de l'ouvrage intitule: Recherches experimentales sur les chaux de construction, les betons et les mortiers ordinaires; etc,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 15, p. 365, 1820.
- [85] F. Kuhlmann, «Ciment,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 21, p. 364, 1847.

- [86] Fontenelle_pag_161_1673, «Physique Botanoque et Chimie,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1673 Paris*, vol. 1, p. 161, 1733.
- [87] Fontenelle_1678_p_250, «Experiences,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1678*, vol. 1, p. 250, 1733.
- [88] Fontenelle_1678_p_252, «Chimie,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1678*, vol. 1, p. 252, 1733.
- [89] Fontenelle_and_Hamel_1679_pag_282, «Chimie et botanique,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences*, vol. 1, p. 282, 1733.
- [90] Fontenelle_1680_pag_307, «Botanique et chimie,» *Histoire de l'Academie Royele des Sciences 1680*, vol. 1, p. 307, 1733.
- [91] Fontenelle_1681_pag_318, «ANÉE MDCLXXI,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1681*, vol. 1, p. 318, 1733.
- [92] Fontenelle_1679_p_270, «Sur la nature de l'air,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1679*, vol. 1, p. 270, 1733.
- [93] G. KUTNEY, ÎN: SULFUR. HISTORY, TECHNOLOGY, APPLICATIONS & INDUSTRY, 2 éd., TORONTO, ONTARIO: CHEMTECHPUBLISHING, 2012, p. 3.
- [94] L. Huetinck et S. Adams, CliffsQuickReview Physics ISBN 978-0-7645-6383-6 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon cu factura numarul 103-9554549-5951447 in data de 17 Ianuarie 2013 impreuna cu cartea Economics Cliffs Quick Review scrisa de John Duffy, Wiley, 2001, p. 184.
- [95] M. Mansfield et C. O'Sullivan, Understanding Physics, Wiley, 2011.
- [96] Fontenelle_1682__pag_342, «Sur la Phosphore,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1682*, vol. 1, p. 342, 1733.
- [97] Fontenelle_pag_50, «Experience pour dessaler l'eau de la mer,» *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 50, 1733.
- [98] ACADEMIAREGALĂDEȘTIINȚEAFRANȚEI_224, «EXPERIENCE CHIMIQUE,» *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES BIBLIOTECA NAȚIONALĂ A FRANȚEI*, vol. 1, p. 224, 1666-1699.
- [99] IDEM_P_238, «CHIMIE, EXAMEN DES EAUX DE VERSAILLES,» 1683.

- [100] IDEM_P_240, 1683.
- [101] A. F. D. ȘTIINȚE238, «CHIMIE EXAMEN DES EAUX DE VERSAILLES,» *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTECA NAȚIONALĂ A FRANȚEI*, vol. 1, p. 238, 1683.
- [102] I. CUCULESCU, M. I. POPESCU, 182 et E. AL., CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, p. 182.
- [103] M. Navier, «EXPERIENCES SUR LA RESISTANCE DE DIVERSES SUBSTANCES A LA RUPTURE CAUSEE PAR UNE TENSION LONGITUDINALE,» *ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE*, vol. 33, pp. 225-240, 1826.
- [104] A. Masson, «Sur l'elasticite du corps solides,» *Annales de chimie et de physique*, Vols. %1 sur %2S3, T3, pp. 451-462, 1841.
- [105] Dulong et Petit, «Recherches sur le lois de dilatation des solides, des liquides et des fluides elastiques, et sur le mesure exacte des temperatures,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 2, p. 240, 1816, v. 2, p. 240.
- [106] L. Foucault, «Sur la vitesses relatives de la lumiere dans l'air et dans l'eau,» *Ann. chim. phys.*, vol. 41, pp. 129-164, 1854.
- [107] R. Ionescu-Andrei et al., Fizică F1/F2 manual pentru clasa a XII-a, București: Grup Editorial Art, 2010.
- [108] ACADEMIAȘTIINȚEAFRANȚEI, «NOTICE SUR LA FOUILLE DE LA CHRYSOPRASE,» *ANNALES DE CHIMIE OU RECUEIL DE MEMOIRES CONCERNANT LA CHIMIE ET LES ARTS QUI DEPENDANT PARIS*, vol. 1, p. 142, 1789.
- [109] Fontenelle_pag_283, «Mathematique, Dioptrique, Sur la lumier,» *Histoire Acad. R. Sci. Paris 1679*, vol. 1, p. 283, 1733 pag 283.
- [110] D. G. MAHAN, «CRYSTAL,» *BRITANICA*, 06 06 2025. [En ligne]. Available: WWW.BRITANICA.COM/SCIENCE/CRYSTAL. [Accès le 08 07 2025].
- [111] A. CODARCEA, MINERALOGIE PARTEA I CRISTALOGRAFIA, BUCUREȘTI: EDITURA DE STAT DIDACTICĂ ȘI PEDAGOGICĂ, 1961.
- [112] ACADEMIAREGALĂDEȘTIINȚEAFRANȚEI, «PHYSIQUE GENERALE, SUR UN INSTRUMENT PROPRE A MESURER LA DENSITE DE L'AIR,» *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTECA NATIONALA A FRANTEI*, p. 1, 1780.

- [113] I. CUCULESCU, CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, pp. 237, PROBLEMA: V.5.A, ECUATIA(1).
- [114] IDEM 178, p. 178.
- [115] ACADEMIA REGALĂ DE ȘTIINȚEA FRANȚEI, «SUR LA CHALEUR,» *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTECA NATIONALA A FRANTEI*, p. 3, 1780.
- [116] C. de Wooliwich, «Experiences et observations sur l'electricite galvanique,» *Journal de physique, de chimie, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [117] J. J. Autorul lucrării științifice: Berzelius, «Titlul articolului: TABLE des Poids atomistique des corps simples et de leurs oxides, d'après les analyses les plus exactes et les plus récentes,» *Revista: Annales de chimie et de physique Orașul: Paris*, vol. volumul 38, p. pagina 426, anul 1828.
- [118] H. D. Nathan, C. Henrickson et R. L. Ford, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 13.
- [119] Berthollet_pag_30, *Annales de chimie*, vol. 1, p. 30, 1789.
- [120] M. Chenevix, «Réflexions Sur quelques Méthodes minéralogiques,» *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 65 31 janvier, pp. 5-43, 1808.
- [121] Necunscut Wikipedia 1agate, «Agate,» 2019. [En ligne]. Available: <https://en.wikipedia.org/wiki/Agate>.
- [122] M. L. Berzelius, «Sur les proportions déterminées dans lesquelles se trouvent réunis les élémens de la nature inorganique,» *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 78 30 Avril, p. 5, 1811, 2.
- [123] Gay-Lussac, *Annales de chimie et de physique*, vol. 81, p. 98, 1812.
- [124] J. Dumas, «Mémoire sur quelques Point de la Théorie atomistique,» *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 33, pp. 337-391, 1826.
- [125] Gay-Lussac et Dulong, «Rapport fait à L'Académie par MM. Gay-Lussac et Dulong, sur un Mémoire de M. Dumas qui a pour objet plusieurs points de la théorie atomistique,» *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 34, p. 326, 1827.
- [126] C. Matteucci, «Sur la Force électro-chimique de la pile,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 58, p. 75, 1835.

- [127] J. T. Moore, Chemistry for dummies ISBN 978-1-118-00730-3 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea Physics I for Dummies 2011 valoarea \$37.62, 2nd Edition éd., Wiley, 2011, p. 223.
- [128] J. Persoz, «Mémoire sur l'Etat moléculaire des Corps composés, et Exposition d'une nouvelle Théorie moléculaire servant d'introduction à des recherches expérimentales sur plusieurs composés chimiques,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 60, p. 113, 1835.
- [129] F. de la Provostaye, «Action de l'acide sulfureux sur l'acide hypoazotique; cristaux des chambres de plomb; théorie de la fabrication de l'acide sulfurique,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 73, p. 362, 1840.
- [130] W. Henry, *Ann. of Philos.* 1826, May 1826.
- [131] E. Millon, *Annales de chimie et de physique*, Vols. 1 sur 2, T6, p. 73, 1842.
- [132] M. L. Berzelius, «Mémoire Sur les proportions déterminées dans lesquelles se trouvent réunis les élémens de la nature inorganique,» *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 78 30 Avril, 1811,3.
- [133] S. Domokos, Tabelul Periodic al Elementelor, D. E. S. PFA, Éd., 2016, p. 1.
- [134] S. Holzner, Physics I For Dummies ISBN 978-0-470-90324-7 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea Chemistry for Dummies 2011 valoarea \$37.62, Wiley, 2011.
- [135] M. J. Berzelius, «Fin du Mémoire sur les proportions déterminées, dans laquelle se trouvent combinées les élémens de nature inorganique,» *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 81 31 janvier, p. 5, 1812.
- [136] J. Lindon et al., «Periodic Table of Elements,» *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry*, p. 2528, 2000.
- [137] H. D. Nathan, C. Henrickson et R. L. Ford, CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011, p. 13.
- [138] H. Kopp, *Annales de chimie et de physique*, vol. 75, p. 406, 1840.
- [139] E. R. Scerri, *Studies in History and Philosophy of Science Part A*, vol. 37, p. 308, 2006.
- [140] N. D. Epiotis et D. K. Henze, «Periodic Table (Chemistry),» *Encyclopedia of Physical Sciences and Technology (Third Edition)*, p. 671, 2001.

- [141] many authors, *Histoire the l'Academie Royale des Scieneces Paris*, 1666-1780.
- [142] L. Huetinck et S. Adams, *CliffsQuickReview Physics*, Wiley, 2001, p. 184.
- [143] J. T. Moore, *Chemistry for dummies*, 2nd Edition éd., Wiley, 2011, p. 223.
- [144] M. Mansfield et C. O'Sullivan, *Understanding Physics*, ISBN 978-0-470-74637-0, comparata de la Amazon de Domokos Stefan din Buzau in data de 8 Junie 2012 cu factura nr. 103-5129980-1837858, Wiley, 2011.
- [145] G. F. dell'Antonio, «Introductory Article: Quantum Mechanics,» *Encyclopedia of Mathematical Physics*, p. 109, 2006.
- [146] L. Snyder, «Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants,» *J. Chem. Phys.*, vol. 55, p. 95, 1971.
- [147] S. Holzner, *Physics II for Dummies*, e-book, Wiley, 2010.
- [148] EngineeringandTechnologyHistoryWiki, «Milestones: Volta's Electrical Battery Invention, 1799».
- [149] Necunoscut_probabil_Delametherie, «Extrait des lettres de Vlta au professeur Gren (Annales de Chimie de Brugnatelli),» *Journal de physique, de chimie, d'histoire natureles et des arts*, vol. 48, p. 451, 1799.
- [150] C. de Wooliwich, «Experiences et observations sur l'electricite galvanique,» *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [151] C. de Wooliwich, «Experiences et observations sur l'electricite galvanique,» *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [152] I. CUCULESCU, I. M. POPESCU, F. CORNEA, O. STĂNĂȘILĂ, D. IORDACHE, I. BACIU, V. BRÂNZĂNESCU, C. CRISTESCU, C. PODINĂ et C. IONESCU-BUCUR, CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR MATEMATICĂ-FIZICĂ-CHIMIE, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, pp. 368-369.
- [153] H. D. Nathan et C. Henrickson, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 164.
- [154] J. T. Moore, *Chemistry for dummies*, 2nd Edition éd., Wiley, 2011, p. 338.
- [155] M. Mansfield et C. O'Sullivan, *Understanding Physics*, Wiley, 2011.

- [156] J. C. OErsted, «Expériences sur l'effect du conflict électrique sur l'aiguille aimantée,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 14, p. 417, 1820.
- [157] J.-C. La Metherie et H.-M. D. Blainville, «Descriptin du nouvel apareil ou galvanique de M. Alexandre Volta,» *Journal de physique, de chimie et d'histoire naturelle 1800*, vol. 51, p. 344, 1800, 344.
- [158] J.-C. Autor:Poggendorff, «Title: Méthode pour déterminer numériquement la force électromotrice d'une pile à effect non constant,» *Journal: Annales de chimie et de physique, Paris, published previously in Annales de Poggendorff*, vol. LIV, page 161, Vols. %1 sur %2series 3, volume 7, p. page 87, Year: 1843.
- [159] Clausius, *Annales de chimie et de physique*, vol. 39, p. 498, 1853.
- [160] C. Mantea et M. Garabet, Manual de fizica pentru clasa a 10 - a, Bucuresti: Editura BIC ALL, 2013.
- [161] H. D. Nathan, C. Henrickson et R. L. Ford, CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011, p. 13.
- [162] Abria, «Sur l'aimantation par les courants,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 1, p. 385, 1841.
- [163] Delametherie, «Extrait des lettres de Vlta au professeur Gren (Annales de Chimie de Brugnatelli),» *Journal de physique, de chimie, d'histoire natureles et des arts*, vol. 48, p. 451, 1799.
- [164] Peltier, «Définition des mots Quantité et Intensité électriques, tirée d'expériences directes,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 63, p. 245, 1836, 2.
- [165] J.-C. Autorul:Poggendorff, «Méthode pour déterminer numériquement la force électromotrice d'une pile à effect non constant,» *Revista: Annales de chimie et de physique Paris lucrare publicata anterior in Annales de Poggendorff*, vol. LIV, page 161, Vols. %1 sur %2seria 3, vol. 7, p. pag. 87, Anul: 1843.
- [166] C. Matteucci, «Sur la production de l'électricité voltaïque,» *Annales de chimie et de physique*, Vols. %1 sur %2seria 3, volumul 10, p. 78, 1844, 1.
- [167] standardSO2, «stadardSO2».
- [168] E. Maumené, «Sur l'action réciproque de métaux et de l'acid sulfuric concentre,» *Annales de chimie et de physique*, Vols. %1 sur %2seria 3, volumul 18, p. 311, 1846.
- [169] S. E. Domokos et S. Domokos, Chimie ISBN 978-973-0-27286-4, Buzau, 2018.

- [170] Avogadro, «Sur les volumes atomiques, et sur leur relation avec le rang que les corps occupent dans la série électro-chimique,» *Annales de chimie et de physique*, Vols. %1 sur %2seria 3, volumul 14, pp. 330-369, 1845.
- [171] Dumas, «Sur la conversion de l'hydrogen sulfure en acid sulfurique,» *Annales de chimie et de physique*, Vols. %1 sur %2seria 3, volumul 18, p. 502, 1846.
- [172] E. Wartmann, «Cinquieme memoire sur l'induction,» *Annales de chimie et de physique*, Vols. %1 sur %2seria 3, volumul 24, p. 213, 1848, v. 24, p. 213.
- [173] Bequerel, «Considérations générales sur la théorie électrochimique,» *Annales de chimie et de physique*, Vols. %1 sur %2seria 3, volumul 27, pp. 5-41, 1849.
- [174] Verdet, «Sur la propagation de l'electricite dans les electrolytes par Clausius,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 53, p. 252, 1858, v 53 p 252.
- [175] Peltier, *Annales de chimie et de physique*, vol. 67, p. 422, 1838.
- [176] K. E. Guthe, *Phys. Rev.*, vol. 19, p. 138, 1904.
- [177] Bequerel, *Annales de chimie et de physique*, vol. 41, p. 5, 1829.
- [178] E. Bequerel, *Annales de chimie et de physique*, vol. 5, p. 412, 1842.
- [179] H. Pellat, *Annales de chimie et de physique*, vol. 24, p. 5, 1881.
- [180] G. L. d. Tromelin, *Annales de chimie et de physique*, vol. 28, p. 217, 1883.
- [181] J. D. Bernal et R. H. Fowler, *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 515, 1933.
- [182] M. Jackson, ORGANIC CHEMISTRY REACTIONS Quick Study ACADEMIC, BarCharts, Inc., 2001.
- [183] X. Wang et et al., *Analytica Chimica Acta*, vol. 793, p. 79, 2013.
- [184] E. Kohn, CliffsQuickReview Geometry, Hoboken: Wiley, 2001.
- [185] S. A. Leduc, Cliffs Quick Review Differential Equations, ISBN 9780822053209, Wiley, 1995.

- [186] B. V. Zandy et J. J. White, CliffsQuickReview Calculus, ISBN 978-0-7645-6376-8 cumparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu ordinul nr. 105-6630974-6331466 din 16 August 2012 cu cartile Chemistry 2011 si Prealculus 2004 valoarea \$45.95, Hoboken: Wiley, 2001.
- [187] I. E. Alcamo et K. Schweitzer, CliffsQuickReview Biology, ISBN 978-0-7645-6375-1, Wiley, 2001.
- [188] I. E. Walters et M. Roner, Microbiology Quickstudy Academic, BarCharts, Inc., 2003.
- [189] R. Brooks, Biology Quickstudy Academic, BarCharts, Inc., 2009.
- [190] M. K. D. Rambo, *Analytica chimica acta*, vol. 775, p. 41, 2013.
- [191] D. J. Matthew, E. Tieu et M. D. Morse, «Determination of the bond dissociation energies of FeX and NiX (X=C, S, Se),» *J. Chem. Phys.*, vol. 146, p. 144310, 2017.
- [192] J. Stodart et Faraday, «Experiences sur les alliages de l'acier, faites dans la vue de le perfectionner,» *Annales de chimie et de physique*, vol. 15, pp. 127-144, 1820.
- [193] D. Kastler, «Théorie quantique de la molécule de HF,» *J. Chim. Phys.*, vol. 50, p. 556, 1953.
- [194] S. Weinbaum, „The Normal State of the Hydrogen Molecule,» *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 593, 1933.
- [195] E. Bauer, *Annales de chimie et de physique*, vol. 29, p. 5, 1913.
- [196] Schroedinger, *Annalen der physique*, vol. 385, p. 437, 1926.
- [197] S. C. Wang, «The Problem of Normal Hydrogen Molecule in the New Quantum Mechanics,» *Phy. Rev.*, vol. 31, p. 579, 1928.
- [198] C. Eckart, «Operator Calculus and the Solution of the Equations of Quantum Dynamics,» *Phys. Rev.*, vol. 28, p. 711, 1926.
- [199] R. C. Sahni, «Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH,» *J. Chem. Phys.*, vol. 25, p. 332, 1956.
- [200] L. C. Snyder, «Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants,» *J. Chem. Phys.*, vol. 55, p. 95, 1971.

- [201] J. Sizemore et J. P. Mueller, MATLAB FOR DUMMIES, ISBN 978-1-118-82010-0, Hoboken: Wiley, 2015.
- [202] S. S. Shaik et P. C. Hiberty, A chemist's guide to valence bond theory, Hoboken: Wiley, 2008.
- [203] R. Threlfall, «On the Conversion of Electric Energy in Dielectrics. II,» *Phys. Rev. (Series I)*, vol. 5, p. 21, 1 July 1897.
- [204] M. J. Berzelius, «Fin du Mémoire sur les proportions determines, dans laquelle se trouvent combine les éléments de nature inorganique,» *Annales de Chimie*, vol. 81, p. 5, 1812.
- [205] A. S. Coolidge, „A Quantum Mechanics Treatment of the Water Molecule,“ *Phys. Rev.*, vol. 42, p. 189, 1932.
- [206] SEDIMENTAR, «SEDIMENTAR,» WWW.DEX.RO. [En ligne]. [Accès le 28 12 2023].
- [207] CĂLIRE, «CĂLIRE,» WWW.DEX.RO, [En ligne]. Available: WWW.DEX.RO. [Accès le 29 12 2023].
- [208] Fontenelle_1669_pag_87, «Sur la coagulation,» *Histoire de l'Academie Royale des Scienecs Paris 1669*, vol. 1, pp. 87-94, 1733.
- [209] Fontenelle_1666_pag_21_Hamel, «Experiences de l'augmentation du poids de certain matieres par calcination,» *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces Paris 1666*, vol. 1, p. 21, 1733.
- [210] S. E. Domokos et S. Domokos, NOTIUNI GENERALE DE FIZICA ISBN 978-973-0-26942-0, Buzau, 2018.
- [211] G. S. Autorul:Ohm, Cartea: Die galvanische Kette mathematische bearbeitet, Berlin, Anul: 1827.
- [212] L. Huetinck et S. Adams, CliffsQuickReview Physics, Wiley, 2001, p. 184.
- [213] J. H. van Vleck, «On the Theory of the Structure of CH₄ and Related Molecules. Part I1,» *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 177, 1933.
- [214] G. King et A. Warshel, «A surface constrained all-atom solvent model for effective simulations of polar solutions,» *J. Chem. Phys.*, vol. 91, p. 3647, 1989.
- [215] Resistivty_Wikipedia, «Resitivity».

- [216] M. Mansfield et C. O'Sullivan, *Understanding Physics*, ISBN 978-0-470-74637-0, cumparata de la Amazon de Domokos Stefan din Buzau in data de 8 Junie 2012 cu factura nr. 103-5129980-1837858, Wiley, 2011.
- [217] D-TOYS.
- [218] S. E. Domokos et S. Domokos, *Fizică*, ISBN 978-973-0-27070-9, Buzău, 2018.
- [219] Z. Lin et et al., *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235701, 2017.
- [220] J. Faist et et al., *Science*, vol. 264, p. 553, 1994.
- [221] Unknown, *IMAGING OPTICS A Technical Resource for Imaging Solutions V173E*, Edmond Optics, 2017.
- [222] C. A. Cascio et J. A. Clark, «Real-time wave vector analys's with a charge coupled device,» *J. of the Acoustical Society of America*, vol. volumul 67, p. pagina S32, anul 1980.
- [223] D. M. Chapin, C. S. Fuller et G. L. Pearson, «A New Silicon p-n Junction Phtocell for Converting Solar Radiation into Electric Power,» *J. Appl. Phys.*, vol. 25, p. 676, 1954.
- [224] M. Volk et W. Stolz, «Determination of refractive index and direct bandgap of lattice matched BGaP and (BGa)(AsP) materials on exact oriented silicon Copyright Clearance Center License Number 4310170276408 License date Mar 15, 2018,» *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235702, 2017.
- [225] K. C. Collins, A. M. Armstrong, A. A. Allerman, G. Vizkelethy, S. B. Van Deusen, F. Leonard et A. A. Talin, «Proton irradiation effects on minority carrier diffusion length and defect introduction in homoepitaxial and heteroepitaxial n-GaN,» *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235705, 2017.

Stevens, R. M., Pitzer, R. M., and Lipscomb, W. N., Perturbed Hartree-Fock Calculations. I. Magnetic Susceptibility and Shielding in the LiH Molecule, J. Chem. Phys. 38, 550 (1963) a obtinut functia de unda perturbata de ordinul intai cu metoda Hartree-Fock cu un set baza limitat in prezenta unui termen de perturbatie. Ei aplica aceste rezultate la calculul polarizabilitatii electrice, susceptibilitatii magnetice, si ecranarii magnetice. Ei se limiteaza la un sistem de $2n$ electroni cu patura inchisa. Ei prezinta ca Hamiltonianul electronic total este

$$\mathcal{H} = \sum_{\mu=1}^{2n} H(\mu) + \frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu}^{2n} (r_{\mu\nu})^{-1}, \quad (1)$$

unde $H(\mu)$ este suma tuturor operatorilor monoelectronici pentru electronul μ . Ei prezinta ca orbitalii moleculari sunt

$$\phi_i = \sum_{p=1}^m \chi_p C_{pi}, \quad (2)$$

unde χ_p sunt functiile bazei de ordinul m si C_{pi} sunt coeficientii orbitalului molecular (OM). Ei prezinta ca vectorul compus din C_{pi} pentru toate valorile lui p este notat cu c_i . Ei prezinta ca indicii i si j sunt folositi pentru orbitalii moleculari, si p si q sunt folositi pentru functiile bazei. Ei prezinta ca Hamiltonianul efectiv monoelectronic este

$$F = H + G \quad (3)$$

unde

$$G(\mu) = \sum_{j=1}^n \left[2 \int dv \phi_j^*(v) \phi_j(v) (r_{\mu v})^{-1} \right]$$

$$-\phi_j(\mu) \int dv_v \phi_j^*(v) \frac{P_{\mu v}}{r_{\mu v}} \Big], \quad (4)$$

unde $P_{\mu v}$ este operatorul care permuta coordonatele electronilor μ si v . Ei prezinta ca ecuatiile satisfacuate de orbitalii moleculari sunt

$$F c_i = S c_i \epsilon_i \quad (5)$$

si

$$c_j^\dagger S c_i = \delta_{ji}, \quad (6)$$

Ei prezinta ca energia totala este data de

$$E = \sum_{i=1}^n (c_i^\dagger H c_i + \epsilon_i). \quad (7)$$

Ei prezinta ca ei calculeaza schimbarile in E si in ϕ_i datorita unei schimbari in H . Ei dezvoltata totul dupa cum urmeaza

$$H = H^{(0)} + H^{(1)} + H^{(2)} \dots, \quad (8)$$

$$C_{pi} = C_{pi}^{(0)} + C_{pi}^{(1)} + C_{pi}^{(2)} \dots, etc. \quad (9)$$

Ei prezinta ca, in absenta perturbatiilor, $\phi_i^{(0)}$ se pot alege intotdeauna reale. Ei prezinta ca este convenabila alegerea acestor functii ca setul de baza χ_p . Ei prezinta ca atunci S este o matrice unitate, $F^{(0)}$ este diagonala cu elementele ϵ_p si $C_{pi}^{(0)}$ este δ_{pi} .

Ei prezinta ca ecuatiile de ordinul intai sunt

$$(F^{(0)} - \epsilon_i^{(0)}) c_i^{(1)} = 0 \quad (10)$$

si

$$c_p^{(1)\dagger} c_i^{(0)} + c_p^{(0)\dagger} c_i^{(1)} = 0, \quad (11)$$

sau in termeni de elemente de matrice

$$(\epsilon_p^{(0)} - \epsilon_i^{(0)}) C_{pi}^{(1)} + F_{pi}^{(1)} - \epsilon_i^{(1)} \delta_{pi} = 0 \quad (12)$$

si

$$C_{pi}^{(1)*} + C_{pi}^{(1)} = 0. \quad (13)$$

Din ecuatia (9) pentru vectorul c_i obtinem

$$c_i = c_i^{(0)} + c_i^{(1)} \quad (14)$$

Inlocuind aproximatia de ordinul intai a ecuatiei (9) in ecuatia (2) obtinem

$$\phi_i = \sum_{p=1}^m \chi_p (C_{pi}^{(0)} + C_{pi}^{(1)}) \quad (15)$$

Daca scriem ca

$$\phi_i = \phi_i^{(0)} + \phi_i^{(1)} \quad (16)$$

luand in considerare cele prezentate mai sus pentru $\phi_i^{(0)}$ si $C_{pi}^{(0)}$ obtinem pentru $\phi_i^{(1)}$ ecuatia

$$\phi_i^{(1)} = \sum_{p=1}^m \chi_p C_{pi}^{(1)} \quad (17)$$

Aplicand cele de mai sus in ecuatia (3) obtinem

$$F^{(0)} = H^{(0)} + G^{(0)} \quad (18)$$

si din ecuatiile (5) si (6) obtinem

$$F^{(0)} c_i^{(0)} = S c_i^{(0)} \epsilon_i^{(0)} \quad (19)$$

si

$$c_j^{(0)\dagger} S c_i^{(0)} = \delta_{ij} \quad (20)$$

Deoarece, din ecuatia (20), rezulta ca S este o matrice unitate, din ecuatia (19) rezulta ca $F^{(0)}$ este diagonala si are elementele $\epsilon_i^{(0)}$.

Ei prezinta ca pentru cazul $p = i$ rezulta

$$\epsilon_i^{(1)} = F_{ii}^{(1)} \quad (21)$$

si

$$ReC_{ii}^{(1)} = 0 \quad (22)$$

Ei prezinta ca deoarece acceptand ca $ImC_{ii}^{(1)}$ sa fie diferit de zero este echivalent cu inmultirea lui $\phi_i^{(0)}$ cu un factor de faza infinitesimal, se poate impune conditia ca $ImC_{ii}^{(1)}$ sa fie zero.

Ei prezinta ca perturbatia, in general, mixeaza un orbital molecular dat cu orbitali moleculari neocupati si cu alti orbitali moleculari ocupati, dar mixarea orbitalilor moleculari cu ei insisi nu schimba functia de unda totala.

Ei prezinta ca potentialul scalar ϕ_F datorat unui camp extern uniform $\vec{F}_e$ este $-\vec{F}_e \cdot \vec{r}_F$, unde originea $\vec{r}_F$ este arbitrara; ei prezinta ca rezulta $H^{(1)} = \vec{F}_e \cdot \vec{r}_F$. Ei prezinta ca functia de unda de ordinul intai este reala, si cantitatea de interes este tensorul de polarizabilitate α dat de

$$-\frac{1}{2}\vec{F}_e \cdot \alpha \cdot \vec{F}_e = E^{(2)} \quad (23)$$

Conform lui Langhoff et al., J. Chem. Phys. 44, 505 (1966) ecuatia Fock mono-electronica este de forma

$$[h(1) + \lambda h^1(1) - \epsilon_i]\chi_i(1) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (24)$$

unde orbitalii spin χ_i sunt ortonormali; cea ce insemna

$$\langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, N \quad (25)$$

Conform lui Langhoff et al., J. Chem. Phys. 44, 505 (1966) in ecuatia (5), $h(1)$ este operatorul Fock mono-electronic (care se poate scrie pentru un singur atom cu sarcina Z)

$$h(1) = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \left(\frac{Z}{r_1}\right) + \sum_{j=1}^N \langle \chi_j | r_{12}^{-1} (1 - P_{12}) | \chi_j \rangle, \quad (26)$$

si $h^1(1)$ este operatorul de perturbatie mono-electronic de interes. Conform lui Langhoff et al., J. Chem. Phys. 44, 505 (1966) termenul $\langle \chi_j | r_{12}^{-1} (1 - P_{12}) | \chi_j \rangle$ folosit in ecuatia (7) insemna

$$\begin{aligned}
& \langle \chi_j | r_{12}^{-1} (1 - P_{12}) | \chi_j \rangle f(1) \\
& = f(1) \int \chi_j^*(2) r_{12}^{-1} \chi_j(2) d\tau_2 - \chi_j(1) \int \chi_j^*(2) r_{12}^{-1} f(2) d\tau_2 \quad (27)
\end{aligned}$$

unde $f(1)$ este o functie arbitrara de spin si coordonate spatiale ale Electronului 1.

Ei prezinta ca introduc o dezvoltare de perturbatie

$$\chi_i = \chi_i^0 + \lambda \chi_i^1 + \dots \quad (28)$$

$$\epsilon_i = \epsilon_i^0 + \lambda \epsilon_i^1 + \dots \quad (29)$$

si inlocuind in ecuatia (10) se obtin ecutiile de ordinul zero si unu, respectiv

$$\begin{aligned}
& [h^0(1) - \epsilon_i^0] \chi_i^0(1) = 0, \quad (30) \\
& [h^0(1) - \epsilon_i^0] \chi_i^1(1) + [h^1(1) - \epsilon_i^1] \chi_i^0(1) \\
& + \sum_{j=1}^N [\langle \chi_j^1 | r_{12}^{-1} (1 - P_{12}) | \chi_j^0 \rangle \\
& + \langle \chi_j^0 | r_{12}^{-1} (1 - P_{12}) | \chi_j^1 \rangle] \chi_i^0(1) = 0. \quad (31)
\end{aligned}$$

Ei prezinta ca aici, $h^0(1)$ este operatorul Fock de ordinul zero

$$h^0(1) = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \left(\frac{Z}{r_1} \right) + \sum_{j=1}^N \langle \chi_j^0 | r_{12}^{-1} (1 - P_{12}) | \chi_j^0 \rangle, \quad (32)$$

si ϵ_i^1 se obtine din ecutia (17), daca se cunoaste χ_i^1 , prin multiplicare la stanga cu $\chi_i^0(1)$ si integrare in functie de coordonatele Electronului 1.

Ei considera un sistem de $2N$ electroni cu N orbitali dublu ocupati ψ_i^0

$$\chi_i^0 = \psi_i^0 \alpha \quad (33)$$

$$\chi_{i+1}^0 = \psi_i^0 \beta \quad (34)$$

Ei obtin o ecuatie mai simpla decat alte ecuatii pentru calcularea functiilor de unda de ordinul intai si a energiilor de ordinul intai

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \left(\frac{Z}{r_1} \right) - \epsilon_{1s}^0 \right] \psi_{1s}^1(1) \\
& + \langle \psi_{1s}^0 | r_{12}^{-1} | \psi_{1s}^0 \rangle \psi_{1s}^1(1) \\
& + [h^1(1) - \epsilon_{1s}^1] \psi_{1s}^0(1) = 0 \quad (35)
\end{aligned}$$

Observam ca ecuatia (12) seamana cu ecuatia (4) cu diferenta ca in ecuatia (4) primul termen este inmultit cu 2, ecuatia (12) este aplicata unei functii f , si in termenul al doilea din ecuatia (4) apare operatorul de permutare $P_{\mu\nu}$, cea ce inseamna ca daca ecuatia (4) se aplica unei functii $f(\nu)$ atunci in primul termen o sa apara functia f aplicata electronului ν si in al doilea termen aplicata electronului μ , ca in ecuatia (12).

1.Revendicam metoda Hartree-Fock de calcul a functiilor de unda de ordinul intai caracterizata prin aceea ca functiile de unda ale bazei din ecuatia (2) se aleg functiile de unda ale unui atom cu sarcina ecranata de ceilalti electroni conform cu Snyder, Lawrence C., Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants, J. Chem. Phys. 55, 95 (1971), care sunt cunoscute conform lui Mansfield et al., Wiley, (2011) si in legaturile covalente aceste functii de unda ale celor doi electroni se inmultesc si se aduna cu cele pentru care coordonatele s-au permutat.

2.Revendicam atomul cu mai multi electroni caracterizat prin aceea ca functiile de unda de ordinul zero din ecuatia (30), χ_i^0 , sunt functiile de unda ale atomului cu mai multi electroni ecranat de electronii interiori conform cu Snyder, Lawrence C., Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants, J. Chem. Phys. 55, 95 (1971), si astfel sunt functiile de unda ale unui atom cu sarcina ecranata de ceilalti electroni, care sunt cunoscute conform lui Mansfield et al., Wiley, (2011).

REZUMATUL INVENTIEI

Am facut aproximatia ca functiile de unda de ordinul zero ale aproximatiei Hartree-Fock, χ_i^0 , sunt functiile de unda ale atomului cu mai multi electroni cu sarcina ecranata.

BIBLIOGRAFIE

Langhoff, P. W., Karplus, M., and Hurst, R. P., Approximation to Hartree-Fock Perturbation Theory, J. Chem. Phys. 44, 505 (1966).

Mansfield, M., O'Sullivan, C., Understanding physics, Wiley, 2011.

Snyder, Lawrence C., Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants, J. Chem. Phys. 55, 95 (1971).

Stevens, R. M., Pitzer, R. M., and Lipscomb, W. N., Perturbed Hartree-Fock Calculations. I. Magnetic Susceptibility and Shielding in the LiH Molecule, J. Chem. Phys. 38, 550 (1963).

Compozitia apei este 11.754 hidrogen si 88.246 oxigen [204].

Molecula de apa are formula chimica H_2O [205].

Din Tabelul Periodic al Elementelor [136] stim ca hidrogenul are masa 1.008 u.a. si oxigenul are masa 16 u.a.. Rezulta ca molecula de apa are masa 18.016 u.a.. Aplicam regula de trei simpla

$$18.016 \dots\dots\dots 100\%$$

$$2.016 \dots\dots\dots x$$

Obtinem pentru hidrogen concentratia masica in apa de 11.1900 %. In mod similar pentru oxigen obtinem 88.8099 %. Observam ca datele obtinute de [204] sunt in acord cu datele obtinute de noi.

[205] aplicand la molecula de apa metoda perturbatiilor Heitler-London fara functii de unda ionice a obtinut energia de legatura de 3.5 eV. Pezentam in continuare acest model. Distantele dintre atomul de O si cei doi atomi de H se considera egale cu $2a_H$. Se descrie molecula de H_2O considerand atomul de O in centrul unui sistem de axe rectangulare si cei doi atomi de H in directiile axelor X si Y, respectiv. Se noteaza cu r, s, t distantele radiale masurate respectiv de la nucleele de oxigen, hidrogen X, si hidrogen Y. Ei considera ca orbitalii 2s si 2p ai atomului de O sunt dati de functiile de unda Zener

$$r^{n^*-1}(1 - \alpha r^{-1})e^{-\delta r}S_0 \quad (1)$$

$$r^{n^*-1}e^{-\delta r}S_1 \quad (2)$$

unde S_0 si S_1 reprezinta armonicile de suprafata de ordinul 0 si 1. Se considera ca pentru oxigen cea mai buna valoare a lui n^* este 2, si a lui δ este 2.24, si α este neglijabil. Pentru electronii atomilor de H sunt se considera orbitalii atomici simplii normali. Functiile elementare normate alese pentru calcule sunt

$$\psi_o = (\delta^5/3\pi)^{1/2} r e^{-\delta r} \quad (3)$$

$$\psi_z = (\delta^5/\pi)^{1/2} z e^{-\delta r} \quad (4)$$

$$\psi_x = (\delta^5/\pi)^{1/2} x e^{-\delta r} \quad (5)$$

$$\psi_y = (\delta^5/\pi)^{1/2} y e^{-\delta r} \quad (6)$$

$$\psi_\xi = (1/\pi)^{1/2} e^{-s} \quad (7)$$

$$\psi_\eta = (1/\pi)^{1/2} e^{-t} \quad (8)$$

Se urmeaza metoda lui Slater, se selecteaza sase functii simple pentru toti electronii care au aceeasi energie neperturbata, si care nu se pot combina cu nici o alta functie de aceeasi energie cand unghiul molecular este numai 90° . La alte unghiuri contributiile devin rapid mici atunci cand unghiul se apropie de 90° , si sunt neglijate. Fiecare functie simpla este o suma de 8! termeni care se pot deduce prin permutarea sistematica a electronilor pentru un set definit de orbitali, si se pot reprezenta prin simboluri caracteristice acelor orbitali. Cei doi spini posibili se noteaza prin prezenta sau absenta liniei de deasupra. Cele sase functii simple sunt

$$\psi_1 = \bar{o}\bar{z}\bar{x}\bar{y}oz\xi\eta \quad (9)$$

$$\psi_2 = \bar{o}\bar{z}\bar{\xi}\bar{\eta}ozx\eta \quad (10)$$

$$\psi_3 = \bar{o}\bar{z}\bar{x}\bar{\xi}ozy\eta \quad (11)$$

$$\psi_4 = \bar{o}\bar{z}\bar{y}\bar{\eta}ozx\xi \quad (12)$$

$$\psi_5 = \bar{o}\bar{z}\bar{\xi}\bar{y}ozx\eta \quad (11)$$

$$\psi_6 = \bar{o}\bar{z}\bar{x}\bar{\eta}oz\xi y \quad (12)$$

Slater a aratat ca cea mai mica energie se obtine printr-o combinatie liniara a doua functii intermediare:

$$A = \frac{1}{2}[\psi_1 + \psi_2 + \psi_5 + \psi_6] \quad (13)$$

$$C = \frac{1}{2}[\psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \psi_4] \quad (14)$$

Aceste doua functii nu se combina cu nici una din celelalte patru combinatii linar independente. Ei prezinta ca functia finala este data de ecuatie

$$\psi_f = aA + cC \quad (15)$$

unde a si c trebuie sa satisfaca normarea si sa satisfaca simultan ecuatiile

$$a(H_{AA} - \lambda\Delta_{AA}) + c(H_{AC} - \lambda\Delta_{AC}) = 0, \quad (16)$$

$$a(H_{AC} - \lambda\Delta_{AC}) + c(H_{CC} - \lambda\Delta_{CC}) = 0, \quad (17)$$

Aici H_{AA}, Δ_{AA} , etc., sunt componentele de matrice ale operatorului energie si ale unitatii pentru functiile intermediare, si λ este cea mai mica solutie a ecuatiei seculare

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - \lambda\Delta_{AA} & H_{AC} - \lambda\Delta_{AC} \\ H_{AC} - \lambda\Delta_{AC} & H_{CC} - \lambda\Delta_{CC} \end{vmatrix} = 0 \quad (18)$$

BIBLIOGRAFIE

- [1] A. GRAFTON, "OF CHYMISTS AND KINGS," *ÎN: SCIENCE*, vol. 338, no. 6114, pp. 1540-1541, 21 12 2012.

- [2] L. SAAG and A. ET, "GENETIC ANCESTRY CHANGES IN STONE TO BRONZE AGE TRANSITION IN THE EAST EUROPEAN PLAIN," *ÎN: SCIENCE ADVANCES*, vol. 7, no. 4, 20 JAN 2021.
- [3] MUZEULBRAILEICAROLIARH, "ARHEOLOGIE PATRIMONIUL," MUZEUL BRAILEI CAROL I, [Online]. Available: <https://www.muzeulbrailei.ro/arheologie/patrimoniu/>. [Accessed 18 03 2024].
- [4] H. CORNWALL, "A SUMMARY OF IDEAS ON THE ORIGIN OF NATIVE COPPER DEPOSITS," *ÎN: ECONOMICAL GEOLOGY AND THE BULLETIN OF THE SOCIETY OF ECONOMIC GEOLOGISTS*, vol. 51, no. 7, p. 1, 1956.
- [5] D. GRIGORESCU, N. ANASTASIU, M. ȘECLĂMAN and P3, GEOLOGIE MANUAL PENTRU CLASA A XI - A, BUCUREȘTI: EDITURA DIDACTICĂ ȘI PEDAGOGICĂ, R.A., 1995, p. 3.
- [6] L. R. BURGER and B. R. GORDON, "EARLY CENTRAL ANDEAN METAL WORKING FROM MINA PERDIDA, PERU," *ÎN: SCIENCE*, vol. 282, no. 5391, p. 1108, 6 NOI 1998.
- [7] R. MONASTERSKY, "ANCIENT METAL MINES SULLIED GLOBAL SKIES," *ÎN: SCIENCE NEWS*, vol. 149, no. 15, 13 APR 1996.
- [8] UNKNOWNCUPPER, "USES OF CUPPER," [Online]. Available: <https://geology.com/usgs/uses-of-copper/>. [Accessed 29 12 2023].
- [9] A. GIBBONS, "THE ULTIMATE SACRIFICE," *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, no. 6083, pp. 834-837, 18 5 2012.
- [10] M. HAUSTEIN, C. GILLIS and E. PERNICKA, "TIN ISOTOPE - A NEW METHOD FOR SOLVING OLD QUESTIONS," *ÎN: ARCHAEOLOGY*, vol. 52, no. 5, p. 816, 16 AUG 2010.
- [11] V. VILLALBA-MOUCO and ET AL., "GENOMIC TRANSFORMATION AND SOCIAL ORGANIZATION DURING THE COPPER AGE-BRONZE AGE TRANSITION IN SOUTHERN IBERIA," *ÎN: SCIENCE ADVANCES*, vol. 7, no. 47, 17 NOE 2021.
- [12] E. HISTORY.COM, "BRONZE AGE," A & E TELEVISION NETWORKS, 24 8 2021. [Online]. Available: <https://www.history.com/topics/pre-history/bronze-age>. [Accessed 25 10 2022].
- [13] WWW.DEX.RO, "BRONZ," WWW.DEX.RO, 2023. [Online]. Available: <https://www.dex.ro/bronz>. [Accessed 25 10 2023].

- [14] MUZEULJUDEȚEANIALOMIȚAOLĂRIT1, "COLECȚIA DE ARHEOLOGIE," MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA SLOBOZIA JUD. IALOMIȚA ROMÂNIA, 13 09 2017. [Online]. Available: <https://mjalomita.ro/colectia-de-arheologie/>. [Accessed 18 03 2024].
- [15] UNKNOWNCUCOIN, "EARLY COPPER COINS," ÎN: LIBERTY COIN & CURRENCY, [Online]. Available: <https://libertycoinandcurrency.com/coins/early-copper-coins-2/>. [Accessed 23 10 2022].
- [16] A. CURRY, "SWORD-WIELDING SCIENTISTS SHOW HOW ANCIENT FIGHTING TECHNIQUES SPREAD ACROSS BRONZE AGE EUROPE," ÎN: *SCIENCE*, 17 4 2020.
- [17] B. BOWER, "ARCTIC HUNTER-GATHERS WERE ADVANCED IRON WORKERS MORE THAN 2000 YEARS AGO," ÎN: *SCIENCENEWS*, vol. 201, no. 2, 3 IAN 2022.
- [18] E. HISTORY.COM, A. ONION, M. SULLIVAN and M. MULLEN, "IRON AGE," A & E TELEVISION NETWORK, 27 8 2021. [Online]. Available: <https://www.history.com/topics/pre-history/iron-age>. [Accessed 25 10 2022].
- [19] V. KUMAR and A. ET, "BRONZE AND IRON AGE POPULATION MOVEMENTS UNDERLIE XINJIANG POPULATION HISTORY," ÎN: *SCIENCE*, vol. 376, no. 6588, pp. 62-69, 31 3 2022.
- [20] MUZEULJUDEȚEANIALOMIȚACERAMICĂV-IV, "EXPOZIȚIE PERMANENTĂ," MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA, 01 12 2003. [Online]. Available: <https://mjalomita.ro/expozitie-permanenta/>. [Accessed 25 10 2023].
- [21] E. HISTORY.COMIRON, "5 IRON AGE TOOLS AND INNOVATIONS," A & E TELEVISION NETWORKS, [Online]. Available: <https://www.history.com/news/iron-age-tools-innovations>. [Accessed 25 10 2022].
- [22] C. HOLDEN, "AFRICA'S IRON AGE HEALERS?," ÎN: *SCIENCE*, vol. 327, no. 5969, p. 1065, 26 2 2010.
- [23] I. STĂNUȚĂ and ET AL., DIALOGURILE FASCINANTEI GENEZE, BUZĂU: EDITGRAPH, 2023.
- [24] M. CARTWRIGHT, "SILVER IN ANTIQUITY," WORLD HISTORY ENCYCLOPEDIA, 19 SEP 2017. [Online]. Available: <https://www.worldhistory.org/Silver/>. [Accessed 1 JAN 2024].
- [25] M. B. ABBOTT and A. P. WOLFE, "INTENSIVE PRE-INCAN METALLURGY RECORDED BY LAKE SEDIMENTS FROM BOLIVIAN ANDES," ÎN: *SCIENCE*, vol. 301, no. 5641, p. 1893, 26 SEP 2003.
- [26] MUZEULJUDEȚEANIALOMITANUMISMATICA, "COLECȚIA DE NUMISMATICĂ," MUZEUL JUDEȚEAN IALOMITA,

2025. [Online]. [Accessed 07 07 2025].

- [27] S. ACHARIA, "LEAD BETWEEN THE LINES," *NATURECHEMISTRY*, vol. 5, p. 894, 2013.
- [28] B. P. LANPHEAR, "THE PARADOX OF LEAD POISONING PREVENTION," *ÎN: SCIENCE*, vol. 281, no. 5383, p. 1617, 11 SEP 1998.
- [29] F. MORRIS, "BEFORE IT WAS DANGEROUS, LEAD WAS THE MIRACLE METAL THAT WE LOVED," *ÎN: HEALT*, 6 APR 2016.
- [30] T. BELL, "A BRIEF HISTORY OF LEAD PROPERTIES, USES AND CHARACTERISTICS," *ÎN: THOUGHTCO., SCIENCE, TECH, MATH, SCIENCE*, 20 JAN 2020.
- [31] J. LEWIS, "LEAD POISONING: A HISTORICAL PERSPECTIVE," *ÎN: EPA JOURNAL*, MAI 1985.
- [32] R. MONASTERSKY, "FOULING THE AIR: NOT JUST A MODERN PROBLEM," *ÎN: SCIENCE NEWS*, vol. 145, no. 13, p. 198, 26 MARCH 1994.
- [33] A. EICHLER and ET AL., "PB POLLUTION FROM LEADED GASOLINE IN SOUTH AMERICA IN THE CONTEXT OF A 2000 YEARS METALLURGICAL HISTORY," *ÎN: SCIENCE ADVANCES*, vol. 1, no. 2, 6 3 2015.
- [34] C. ARMATAS, B. LOPEZ, A. TANDOC and B. L. MATERNA, "INDUSTRIES WITH THE HIGHEST OCCUPATIONAL BLOOD LEAD TEST RESULTS, CALIFORNIA OCCUPATIONAL BLOOD LEAD REGISTRY, 2020-2021," *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, 30 09 2022.
- [35] R. RABIN, "THE LEAD INDUSTRY AND LEAD WATER PIPES "A MODEST CAMPAIGNB"," *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, 10 10 2011.
- [36] Oldenburg_1665_vol_1_pag_10, "Of a peculiar lead-ore in Germany, and the use thereof," *Philosophical transactins of the Royale society of London*, vol. 1, no. 1, p. 10, 1665.
- [37] G. KUTNEY, *ÎN: SULFUR. HISTORY, TECHNOLOGY, APPLICATIONS & INDUSTRY*, 2 ed., TORONTO, ONTARIO: CHEMTECHPUBLISHING, 2012.
- [38] S. PAPPAS, "FACTS ABOUT SULFUR," *ÎN: LIVESCENCE PARTE A FUTURE US INC*, 29 9 2017.

- [39] M. C. BATTIGELLI and J. F. GAMBLE, "FROM SULFUR TO SULFATE: ANCIENT AND RECENT CONSIDERATIONS," *ÎN: JOURNAL OF OCCUPATIONAL MEDICINE*, vol. 18, no. 5, p. 334, 5 1976.
- [40] K. KLOCHKO, "ANTIMONY STATISTICS AND INFORMATION," USGS SCIENCE FOR A CHANGING WORLD U.S. DEPARTMENT OF THE INTERIOR, [Online]. Available: <https://www.usgs.gov/centers/national-minerals-information-center/antimony-statistics-and-information>. [Accessed 29 10 2022].
- [41] F. M. ENDLICH, "ON SOME INTERESTING DERIVATIONS OF MINERAL NAMES," *ÎN: THE AMERICAN NATURALIST*, vol. 22, no. 253, pp. 21-32, JAN 1888.
- [42] X. E. A. WU, "EARLY POTTERY AT 20000 YERS AGO IN XIANRENDONG CAVE, CHINA," *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, no. 6089, p. 1696, 29 IUN 2012.
- [43] G. SHELBAACH, "ON THE INVENTION OF POTTERY," *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, no. 6089, pp. 1644-1645, 29 IUN 2012.
- [44] E. STOKSTAD, "A TIME CAPSULE FROM BRONZE AGE BRITAIN," *ÎN: SCIENCE*, vol. 353, no. 6296, pp. 210-211, 15 IUL 2016.
- [45] ZINC, "ZINC, PERIODIC TABLE," ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY, 2024. [Online]. Available: <https://www.rsc.org/periodic-table/element/30/zinc>. [Accessed 5 JAN 2024].
- [46] UNKNOWNHISTORYZINC, "HISTORY_ZINC," BRITANICA, [Online]. Available: <https://www.britannica.com/science/zinc/History>. [Accessed 5 JAN 2024].
- [47] C. P. McCORD and A. FRIEDLANDER, "AN OCCUPATIONAL SINDROME AMONG WORKERS IN ZINC," *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, vol. 16, no. 3, p. 274, 3 1926.
- [48] H. C. LEWIS, "MINERALOGY," *ÎN: THE AMERICAN NATURALIST*, vol. 17, no. 11, pp. 1158-1163, 1883.
- [49] Oldenburg_1665_vol_1_pag_45, "Of the mineral of Liege, yelding both brimstone, and vitriol, and the way of extracting them out of it, used at Liege," *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, no. 3, p. 45, 1665.
- [50] R. Moray, "An account how adits and mines are wrought at Liege without air-shafts, comunicated by Robert Mray," *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, no. 5, p. 79, 1665.

- [51] MERCURY, "MERCURY," BERKELEY, [Online]. Available:
<https://nature.berkeley.edu/classes/eps2/wisc/hg.html>. [Accessed 3 JAN 2024].

- [52] MERCURY_BRITANICA, "MERCURY," BRITANICA, [Online]. Available:
<https://www.britannica.com/science/mercury-chemical-element>. [Accessed 3 JAN 2024].

- [53] Oldenburg_1665_vol_1_pag_21, "Extract of a letter written from Venice, concerning the mines of mercury in Friuly," *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, no. 2, p. 21, 1665.

- [54] H. C. King, *The History of the Telescope*, Mineola, New York: Dover Publications, Inc., 1955.

- [55] 2NECUNOSCU02, "GLASS," WIKIPEDIA, 31 03 2022. [Online]. Available:
<https://en.wikipedia.org/wiki/Glass#History>. [Accessed 06 04 2022].

- [56] 3NECUNOSCU, "OBSIDIAN," WIKIPEDIA, 20 03 2022. [Online]. Available:
<https://en.wikipedia.org/wiki/Obsidian>. [Accessed 06 04 2022].

- [57] M. CARTWRIGHT, "ALCHEMY," WORLD HISTORY ENCYCLOPEDIA, 24 AUG 2023. [Online]. Available:
https://www.worldhistory.org/Alchemy/#google_vignette. [Accessed 20 03 2024].

- [58] A. A. MAYNARD, "WINE," BRITANNICA, 08 03 2024. [Online]. Available:
<https://www.britannica.com/topic/wine>. [Accessed 20 03 2024].

- [59] M. M. P. MUIR, *HEROS OF SCIENCE: CHEMISTS, THE STORY OF ALCHEMY AND BEGINNINGS OF CHEMISTRY*, DIGICAT, 2022, pp. 1-20.

- [60] E. RYLOTT and N. BRUCE, "PLANTS TO MINE METALS AND REMEDIATE LAND," *ÎN: SCIENCE*, vol. 377, no. 6613, p. 1380, 22 9 2022.

- [61] Fontenelle_1666_1668_pag_18, "Physique preliminaires," *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces Paris*, vol. 1, p. 18, 1733.

- [62] M. E. Weeks, "Discovery of the elements," *J. Chem. Educ.*, vol. 9 (1), p. 4, 1932, v. 9 (1), p. 4.

- [63] Fontenelle_pag_20_Hamel, *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1666*, vol. 1, p. 20, 1733.

- [64] Fontenelle_1667_pag_47, "Observations sur la chaux," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1667 Paris*, vol. 1, p. 47, 1733.
- [65] Fontenelle_pag_23, "Experience d un sel doux," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 23, 1733.
- [66] C. 1. PERRAULT14, "Experiences de l'augmentation du poids de certain matieres par calcination," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666*, vol. 1, p. 14, 1729-1734.
- [67] Fontenelle_pag_24_1666, "Autres experience de chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1666*, vol. 1, p. 24, 1733.
- [68] C. V. PERRAULT27, "Analyse de plusieurs eaux minerales," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666*, vol. 1, p. 27, 1733.
- [69] J. T. Moore, *Chemistry for dummies*, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.
- [70] L. Huetinck and S. Adams, *CliffsQuickReview Physics*, Wiley, 2001, p. 184.
- [71] LAVOISIER, "MEMOIRE SUR LA COMBUSTION DU FER," *ÎN: ANNALES DE CHIMIE*, vol. 1, pp. 19-30, 1789.
- [72] C. PERRAULT87, "Sur la coagulation," *ÎN: Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1669*, vol. 1, pp. 87-94, 1733.
- [73] S. Holzner, *Physics I For Dummies*, Wiley, 2011.
- [74] PERRAULT50V1, "Experience pour dessaler l eau de la mer," *ÎN: Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 50, 1733.
- [75] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, ISBN 978-0-470-90543-2 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu ordinul nr. 105-6630974-6331466 din 16 August 2012 cu cartile Precalculus 2004 si Calculus 2001 valoarea \$45.95, Wiley, 2011, p. 13.
- [76] S. Holzner, *Physics I For Dummies*, Wiley, 2011.

- [77] Dodart_vol_4_121, "Memoire pour servir a l'Histoire des plantes," *Memoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666 - 1699*, vol. 4, p. 121, 1731.
- [78] Fontenelle_1675_p_198, "Experiences diverces," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1675*, vol. 1, p. 198, 1733.
- [79] Dex_Necunoscut, www.dex.ro.
- [80] H. D. Nathan and C. Henrickson, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 13.
- [81] Fontenelle_pag_79_1669 and Hamel, "Phisque Chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1669 Paris*, vol. 1, p. 79, 1733.
- [82] J. T. Moore, ÎN: Chemistry for dummies ISBN 978-1-118-00730-3 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea Physics I for Dummies 2011 valoarea \$37.62, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.
- [83] Fontenelle_1670_pag_123, "Eux minerales," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1670*, vol. 1, p. 123, 1733.
- [84] I. d. P. e. C. Vicat, "Extrait de l'ouvrage intitule: Recherches experimentales sur les chaux de construction, les betons et les mortiers ordinaires; etc," *Annales de chimie et de physique*, vol. 15, p. 365, 1820.
- [85] F. Kuhlmann, "Ciment," *Annales de chime et de physique*, vol. 21, p. 364, 1847.
- [86] Fontenelle_pag_161_1673, "Physique Botanoque et Chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1673 Paris*, vol. 1, p. 161, 1733.
- [87] Fontenelle_1678_p_250, "Experiences," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1678*, vol. 1, p. 250, 1733.
- [88] Fontenelle_1678_p_252, "Chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1678*, vol. 1, p. 252, 1733.
- [89] Fontenelle_and_Hamel_1679_pag_282, "Chimie et botanique," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences*, vol. 1, p. 282, 1733.

- [90] Fontenelle_1680_pag_307, "Botanique et chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1680*, vol. 1, p. 307, 1733.
- [91] Fontenelle_1681_pag_318, "ANÉE MDCLXXI," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1681*, vol. 1, p. 318, 1733.
- [92] Fontenelle_1679_p_270, "Sur la nature de l'air," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1679*, vol. 1, p. 270, 1733.
- [93] G. KUTNEY, ÎN: SULFUR. HISTORY, TECHNOLOGY, APPLICATIONS & INDUSTRY, 2 ed., TORONTO, ONTARIO: CHEMTECHPUBLISHING, 2012, p. 3.
- [94] L. Huetinck and S. Adams, CliffsQuickReview Physics ISBN 978-0-7645-6383-6 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon cu factura numarul 103-9554549-5951447 in data de 17 Ianuarie 2013 impreuna cu cartea Economics Cliffs Quick Review scrisa de John Duffy, Wiley, 2001, p. 184.
- [95] M. Mansfield and C. O'Sullivan, Understanding Physics, Wiley, 2011.
- [96] Fontenelle_1682__pag_342, "Sur la Phosphore," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1682*, vol. 1, p. 342, 1733.
- [97] Fontenelle_pag_50, "Experience pour dessaler l'eau de la mer," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 50, 1733.
- [98] ACADEMIAREGALĂDEȘTIINȚEAFRANȚEI_224, "EXPERIENCE CHIMIQUE," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES BIBLIOTECA NAȚIONALĂ A FRANȚEI*, vol. 1, p. 224, 1666-1699.
- [99] IDEM_P_238, "CHIMIE, EXAMEN DES EAUX DE VERSAILLES," 1683.
- [100] IDEM_P_240, 1683.
- [101] A. F. D. ȘTIINȚE238, "CHIMIE EXAMEN DES EAUX DE VERSAILLES," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTECA NAȚIONALĂ A FRANȚEI*, vol. 1, p. 238, 1683.
- [102] I. CUCULESCU, M. I. POPESCU, 182 and E. AL., CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, p. 182.

- [103] M. Navier, "EXPERIENCES SUR LA RESISTANCE DE DIVERSES SUBSTANCES A LA RUPTURE CAUSEE PAR UNE TENSION LONGITUDINALE," *ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE*, vol. 33, pp. 225-240, 1826.
- [104] A. Masson, "Sur l'elasticite du corps solides," *Annales de chimie et de physique*, Vols. S3, T3, pp. 451-462, 1841.
- [105] Dulong and Petit, "Recherches sur le lois de dilatation des solides, des liquides et des fluides elastiques, et sur le mesure exacte des temperatures," *Annales de chimie et de physique*, vol. 2, p. 240, 1816, v. 2, p. 240.
- [106] L. Foucault, "Sur la vitesses relatives de la lumiere dans l'air et dans l'eau," *Ann. chim. phys.*, vol. 41, pp. 129-164, 1854.
- [107] R. Ionescu-Andrei and et al., Fizică F1/F2 manual pentru clasa a XII-a, București: Grup Editorial Art, 2010.
- [108] ACADEMIA DE ȘTIINȚE A FRANȚEI, "NOTICE SUR LA FOUILLE DE LA CHRYSOPRASE," *ANNALES DE CHIMIE OU RECUEIL DE MEMOIRES CONCERNANT LA CHIMIE ET LES ARTS QUI DEPENDANT PARIS*, vol. 1, p. 142, 1789.
- [109] Fontenelle_pag_283, "Mathematique, Dioptrique, Sur la lumier," *Histoire Acad. R. Sci. Paris 1679*, vol. 1, p. 283, 1733 pag 283.
- [110] D. G. MAHAN, "CRYSTAL," *BRITANICA*, 06 06 2025. [Online]. Available: WWW.BRITANICA.COM/SCIENCE/CRYSTAL. [Accessed 08 07 2025].
- [111] A. CODARCEA, MINERALOGIE PARTEA I CRISTALOGRAFIA, BUCUREȘTI: EDITURA DE STAT DIDACTICĂ ȘI PEDAGOGICĂ, 1961.
- [112] ACADEMIA REGALĂ DE ȘTIINȚE A FRANȚEI, "PHYSIQUE GENERALE, SUR UN INSTRUMENT PROPRE A MESURER LA DENSITE DE L'AIR," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTHECA NATIONALA A FRANȚEI*, p. 1, 1780.
- [113] I. CUCULESCU, CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÎNTUL SUPERIOR, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, pp. 237, PROBLEMA: V.5.A, ECUATIA(1).
- [114] IDEM 178, p. 178.
- [115] ACADEMIA REGALĂ DE ȘTIINȚE A FRANȚEI, "SUR LA CHALEUR," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES*

PARIS BIBLIOTECA NATIONALA A FRANTEI, p. 3, 1780.

- [116] C. de Wooliwich, "Experiences et observations sur l'electricite galvanique," *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [117] J. J. Autorul_lucrării_știintifice:Berzelius, "Titlul articolului:TABLE des Poids atomistique des corps simples et de leurs oxides, d'après les analyses les plus exactes et les plus récentes," *Revista:Annales de chimie et de physique Orașul: Paris*, vol. volumul 38, p. pagina 426, anul 1828.
- [118] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 13.
- [119] Berthollet_pag_30, *Annales de chimie*, vol. 1, p. 30, 1789.
- [120] M. Chenevix, "Réflexions Sur quelques Méthodes minéralogiques," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 65 31 janvier, pp. 5-43, 1808.
- [121] NecunscutWikipedia1agate, "Agate," 2019. [Online]. Available: <https://en.wikipedia.org/wiki/Agate>.
- [122] M. L. Berzelius, "Sur les proportions déterminées dans lesquelles se trouvent réunis les élémens de la nature inorganique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 78 30 Avril, p. 5, 1811, 2.
- [123] Gay-Lussac, *Annales de chimie et de physique*, vol. 81, p. 98, 1812.
- [124] J. Dumas, "Mémoire sur quelques Point de la Théorie atomistique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 33, pp. 337-391, 1826.
- [125] Gay-Lussac and Dulong, "Rapport fait à L'Académie par MM. Gay-Lussac ey Dulong, sur un Mémoire de M. Dumas qui a pour objet plusieurs points de la théorie atomistique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 34, p. 326, 1827.
- [126] C. Matteucci, "Sur la Force électro-chimique de la pile," *Annales de chimie et de physique*, vol. 58, p. 75, 1835.
- [127] J. T. Moore, *Chemistry for dummies* ISBN 978-1-118-00730-3 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea *Physics I for Dummies* 2011 valoarea \$37.62, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.

- [128] J. Persoz, "Mémoire sur l'Etat moléculaire des Corps composés, et Exposition d'une nouvelle Théorie moléculaire servant d'introduction à des recherches expérimentales sur plusieurs composés chimiques," *Annales de chimie et de physique*, vol. 60, p. 113, 1835.
- [129] F. de la Provostaye, "Action de l'acide sulfureux sur l'acide hypoazotique; cristaux des chambres de plomb; théorie de la fabrication de l'acide sulfurique," *Annales de chimie et de physique*, vol. 73, p. 362, 1840.
- [130] W. Henry, *Ann. of Philos.* 1826, May 1826.
- [131] E. Millon, *Annales de chimie et de physique*, Vols. S3, T6, p. 73, 1842.
- [132] M. L. Berzelius, "Mémoire Sur les proportions déterminées dans lesquelles se trouvent réunis les élémens de la nature inorganique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 78 30 Avril, 1811,3.
- [133] S. Domokos, Tabelul Periodic al Elementelor, D. E. S. PFA, Ed., 2016, p. 1.
- [134] S. Holzner, Physics I For Dummies ISBN 978-0-470-90324-7 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea Chemistry for Dummies 2011 valoarea \$37.62, Wiley, 2011.
- [135] M. J. Berzelius, "Fin du Mémoire sur les proportions determinées, dans laquelle se trouvent combinées les élémens de nature inorganique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 81 31 janvier, p. 5, 1812.
- [136] J. Lindon and et al., "Periodic Tabel of Elements," *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry*, p. 2528, 2000.
- [137] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011, p. 13.
- [138] H. Kopp, *Annales de chimie et de physique*, vol. 75, p. 406, 1840.
- [139] E. R. Scerri, *Studies in History and Philosophy of Science Part A*, vol. 37, p. 308, 2006.
- [140] N. D. Epitakis and D. K. Henze, "Periodic Table (Chemistry)," *Encyclopedia of Physical Sciences and Technology (Third Edition)*, p. 671, 2001.

- [141] many authors, *Histoire the l'Academie Royale des Scieneces Paris*, 1666-1780.
- [142] L. Huetinck and S. Adams, *CliffsQuickReview Physics*, Wiley, 2001, p. 184.
- [143] J. T. Moore, *Chemistry for dummies*, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.
- [144] M. Mansfield and C. O'Sullivan, *Understanding Physics*, ISBN 978-0-470-74637-0, cumparata de la Amazon de Domokos Stefan din Buzau in data de 8 Junie 2012 cu factura nr. 103-5129980-1837858, Wiley, 2011.
- [145] G. F. dell'Antonio, "Introductory Article: Quantum Mechanics," *Encyclopedia of Mathematical Physics*, p. 109, 2006.
- [146] L. Snyder, "Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants," *J. Chem. Phys.*, vol. 55, p. 95, 1971.
- [147] S. Holzner, *Physics II for Dummies*, e-book, Wiley, 2010.
- [148] EngineeringandTechnologyHistoryWiki, "Milestones: Volta's Electrical Battery Invention, 1799".
- [149] Necunoscut_probabil_Delametherie, "Extrait des lettres de Vltta au professeur Gren (Annales de Chimie de Brugnatelli)," *Journal de physique, de chimie, d'histoire natureles et des arts*, vol. 48, p. 451, 1799.
- [150] C. de Wooliwich, "Experiences et observations sur l'electricite galvanique," *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [151] C. de Wooliwich, "Experiences et observations sur l'electricite galvanique," *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [152] I. CUCULESCU, I. M. POPESCU, F. CORNEA, O. STĂNĂȘILĂ, D. IORDACHE, I. BACIU, V. BRÂNZĂNESCU, C. CRISTESCU, C. PODINĂ and C. IONESCU-BUCUR, CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR MATEMATICĂ-FIZICĂ-CHIMIE, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, pp. 368-369.
- [153] H. D. Nathan and C. Henrickson, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 164.

- [154] J. T. Moore, Chemistry for dummies, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 338.
- [155] M. Mansfield and C. O'Sullivan, Understanding Physics, Wiley, 2011.
- [156] J. C. OErsted, "Expériences sur l'effet du conflit électrique sur l'aiguille aimantée," *Annales de chimie et de physique*, vol. 14, p. 417, 1820.
- [157] J.-C. La Metherie and H.-M. D. Blainville, "Descriptin du nouvel apareil ou galvanique de M. Alexandre Volta," *Journal de physique, de chimie et d'histoire naturelle 1800*, vol. 51, p. 344, 1800, 344.
- [158] J.-C. Autor:Poggendorff, "Title: Méthode pour déterminer numériquement la force électromotrice d'une pile à effect non constant," *Journal: Annales de chimie et de physique, Paris, published previously in Annales de Poggendorff*, vol. LIV, page 161, Vols. series 3, volume 7, p. page 87, Year: 1843.
- [159] Clausius, *Annales de chimie et de physique*, vol. 39, p. 498, 1853.
- [160] C. Mantea and M. Garabet, Manual de fizica pentru clasa a 10 - a, Bucuresti: Editura BIC ALL, 2013.
- [161] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011, p. 13.
- [162] Abria, "Sur l'aimantation par les courants," *Annales de chimie et de physique*, vol. 1, p. 385, 1841.
- [163] Delametherie, "Extrait des lettres de Vlta au professeur Gren (Annales de Chimie de Brugnatelli)," *Journal de physique, de chimie, d'histoire natureles et des arts*, vol. 48, p. 451, 1799.
- [164] Peltier, "Définition des mots Quantité et Intensité électriques, tirée d'expériences directes," *Annales de chimie et de physique*, vol. 63, p. 245, 1836, 2.
- [165] J.-C. Autorul:Poggendorff, "Méthode pour déterminer numériquement la force électromotrice d'une pile à effect non constant," *Revista: Annales de chimie et de physique Paris lucrare publicata anterior in Annales de Poggendorff*, vol. LIV, page 161, Vols. seria 3, vol. 7, p. pag. 87, Anul: 1843.
- [166] C. Matteucci, "Sur la production de l'électricité voltaïque," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 10, p. 78, 1844, 1.

[167] standardSO₂, "stadardSO₂".

[168] E. Maumené, "Sur l'action réciproque de métaux et de l'acid sulfuric concentre," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 18, p. 311, 1846.

[169] S. E. Domokos and S. Domokos, Chimie ISBN 978-973-0-27286-4, Buzau, 2018.

[170] Avogadro, "Sur les volumes atomiques, et sur leur relation avec le rang que les corps occupent dans la série électro-chimique," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 14, pp. 330-369, 1845.

[171] Dumas, "Sur la conversion de l'hydrogen sulfure en acid sulfurique," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 18, p. 502, 1846.

[172] E. Wartmann, "Cinquieme memoire sur l'induction;," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 24, p. 213, 1848, v. 24, p. 213.

[173] Bequerel, "Considérations générales sur la théorie électrochimique," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 27, pp. 5-41, 1849.

[174] Verdet, "Sur la propagation de l'electricite dans les electrolytes par Clausius," *Annales de chimie et de physique*, vol. 53, p. 252, 1858, v 53 p 252.

[175] Peltier, *Annales de chimie et de physique*, vol. 67, p. 422, 1838.

[176] K. E. Guthe, *Phys. Rev.*, vol. 19, p. 138, 1904.

[177] Bequerel, *Annales de chimie et de physique*, vol. 41, p. 5, 1829.

[178] E. Bequerel, *Annales de chimie et de physique*, vol. 5, p. 412, 1842.

[179] H. Pellat, *Annales de chimie et de physique*, vol. 24, p. 5, 1881.

[180] G. L. d. Tromelin, *Annales de chimie et de physique*, vol. 28, p. 217, 1883.

- [181] J. D. Bernal and R. H. Fowler, *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 515, 1933.
- [182] M. Jackson, ORGANIC CHEMISTRY REACTIONS Quick Study ACADEMIC, BarCharts, Inc., 2001.
- [183] X. Wang and et al., *Analytica Chimica Acta*, vol. 793, p. 79, 2013.
- [184] E. Kohn, CliffsQuickReview Geometry, Hoboken: Wiley, 2001.
- [185] S. A. Leduc, Cliffs Quick Review Differential Equations, ISBN 9780822053209, Wiley, 1995.
- [186] B. V. Zandy and J. J. White, CliffsQuickReview Calculus, ISBN 978-0-7645-6376-8 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu ordinul nr. 105-6630974-6331466 din 16 August 2012 cu cartile Chemistry 2011 si Prealculus 2004 valoarea \$45.95, Hoboken: Wiley, 2001.
- [187] I. E. Alcamo and K. Schweitzer, CliffsQuickReview Biology, ISBN 978-0-7645-6375-1, Wiley, 2001.
- [188] I. E. Walters and M. Roner, Microbiology Quickstudy Academic, BarCharts, Inc., 2003.
- [189] R. Brooks, Biology Quickstudy Academic, BarCharts, Inc., 2009.
- [190] M. K. D. Rambo, *Analytica chimica acta*, vol. 775, p. 41, 2013.
- [191] D. J. Matthew, E. Tieu and M. D. Morse, "Determination of the bond dissociation energies of FeX and NiX (X=C, S, Se)," *J. Chem. Phys.*, vol. 146, p. 144310, 2017.
- [192] J. Stodart and Faraday, "Experiences sur les alliages de l'acier, faites dans la vue de le perfectionner," *Annales de chimie et de physique*, vol. 15, pp. 127-144, 1820.
- [193] D. Kastler, "Théorie quantique de la molécule de HF," *J. Chim. Phys.*, vol. 50, p. 556, 1953.
- [194] S. Weinbaum, „The Normal State of the Hydrogen Molecule,” *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 593, 1933.
- [195] E. Bauer, *Annales de chimie et de physique*, vol. 29, p. 5, 1913.

- [196] Schroedinger, *Annalen der physique*, vol. 385, p. 437, 1926.
- [197] S. C. Wang, "The Problem of Normal Hydrogen Molecule in the New Quantum Mechanics," *Phy. Rev.*, vol. 31, p. 579, 1928.
- [198] C. Eckart, "Operator Calculus and the Solution of the Equations of Quantum Dynamics," *Phys. Rev.*, vol. 28, p. 711, 1926.
- [199] R. C. Sahni, "Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH," *J. Chem. Phys.*, vol. 25, p. 332, 1956.
- [200] L. C. Snyder, "Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants," *J. Chem. Phys.*, vol. 55, p. 95, 1971.
- [201] J. Sizemore and J. P. Mueller, *MATLAB FOR DUMMIES*, ISBN 978-1-118-82010-0, Hoboken: Wiley, 2015.
- [202] S. S. Shaik and P. C. Hiberty, *A chemist's guide to valence bond theory*, Hoboken: Wiley, 2008.
- [203] R. Threlfall, "On the Conversion of Electric Energy in Dielectrics. II," *Phys. Rev. (Series I)*, vol. 5, p. 21, 1 July 1897.
- [204] M. J. Berzelius, "Fin du Mémoire sur les proportions determines, dans laquelle se trouvent combine les éléments de nature inorganique," *Annales de Chimie*, vol. 81, p. 5, 1812.
- [205] A. S. Coolidge, „A Quantum Mechanics Treatment of the Water Molecule,” *Phys. Rev.*, vol. 42, p. 189, 1932.
- [206] SEDIMENTAR, "SEDIMENTAR," WWW.DEX.RO. [Online]. [Accessed 28 12 2023].
- [207] CĂLIRE, "CĂLIRE," WWW.DEX.RO, [Online]. Available: WWW.DEX.RO. [Accessed 29 12 2023].
- [208] Fontenelle_1669_pag_87, "Sur la coagulation," *Histoire de l'Academie Royale des Scienecs Paris 1669*, vol. 1, pp. 87-94, 1733.
- [209] Fontenelle_1666_pag_21_Hamel, "Experiences de l'augmentation du poids de certain matieres par calcination," *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces Paris 1666*, vol. 1, p. 21, 1733.

- [210] S. E. Domokos and S. Domokos, NOTIUNI GENERALE DE FIZICA ISBN 978-973-0-26942-0, Buzau, 2018.
- [211] G. S. Autorul: Ohm, Cartea: Die galvanische Kette mathematische bearbeitet, Berlin, Anul: 1827.
- [212] L. Huetinck and S. Adams, CliffsQuickReview Physics, Wiley, 2001, p. 184.
- [213] J. H. van Vleck, "On the Theory of the Structure of CH₄ and Related Molecules. Part I," *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 177, 1933.
- [214] G. King and A. Warshel, "A surface constrained all-atom solvent model for effective simulations of polar solutions," *J. Chem. Phys.*, vol. 91, p. 3647, 1989.
- [215] Resistivity_Wikipedia, "Resitivity".
- [216] M. Mansfield and C. O'Sullivan, Understanding Physics, ISBN 978-0-470-74637-0, cumparata de la Amazon de Domokos Stefan din Buzau in data de 8 Iunie 2012 cu factura nr. 103-5129980-1837858, Wiley, 2011.
- [217] D-TOYS.
- [218] S. E. Domokos and S. Domokos, Fizică, ISBN 978-973-0-27070-9, Buzău, 2018.
- [219] Z. Lin and et al., *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235701, 2017.
- [220] J. Faist and et al., *Science*, vol. 264, p. 553, 1994.
- [221] Unknown, IMAGING OPTICS A Technical Resource for Imaging Solutions V173E, Edmond Optics, 2017.
- [222] C. A. Cascio and J. A. Clark, "Real-time wave vector analysis with a charge coupled device," *J. of the Acoustical Society of America*, vol. volumul 67, p. pagina S32, anul 1980.
- [223] D. M. Chapin, C. S. Fuller and G. L. Pearson, "A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electric Power," *J. Appl. Phys.*, vol. 25, p. 676, 1954.
- [224] M. Volk and W. Stolz, "Determination of refractive index and direct bandgap of lattice matched BGaP and (BGa)(AsP) materials on exact oriented silicon Copyright Clearance Center License Number 4310170276408

License date Mar 15, 2018," *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235702, 2017.

- [225] K. C. Collins, A. M. Armstrong, A. A. Allerman, G. Vizkelethy, S. B. Van Deusen, F. Leonard and A. A. Talin, "Proton irradiation effects on minority carrier diffusion length and defect introduction in homoepitaxial and heteroepitaxial n-GaN," *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235705, 2017.

BIBLIOGRAFIE

Coolidge, A. S., A Quantum Mechanics Treatment of the Water Molecule, *Phys. Rev.* 42, 189 (1932).

Kiss, Péter T., and Baranyai, András, Anomalous properties of water predicted by the BK3 model, *J. Chem. Phys.* 140, 154505 (2014).

Magnasco, Valerio, *Methods of molecular quantum mechanics An Introduction to Electronic Molecular Structure*, Wiley, 2009, pag. 162.

Mansfield, Michael, and O'Sullivan, Colm, *Understanding Physics*, Wiley, 2011.

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., *A chemist's guide to valence bond theory*, Wiley, 2008.

Slater, J. C., Atomic Shielding Constants, *Phys. Rev.* 36, 57 (1930).

Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bnds, *Phys. Rev.* 38, 1109 (1931).

Snyder, Lawrence C., Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants, *J. Chem. Phys.* 55, 95 (1971).

Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933).

V.MOLECULA DE H_2SO_4

14.REZULTATELE EXPERIMENTALE SI TEORETICE DESPRE STRUCTURA H_2SO_4 SI A SO_4^{2-} ÎN H_2O

Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH_4 and Related Molecules. Part II, J. Chem Phys. 1, 177 (1933) si Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH_4 and Related Molecules: Part II, J. Chem Phys. 1, 219 (1933) prezinta structura tetraedrica a moleculei de metan si legaturile $C - H$ din metan. Molecula de metan, CH_4 , are o structura tetraedrica, în care cei 4 atomi de hidrogen sunt plasati în colturile unui tetraedru regulat, atomul de carbon este plasat în centrul tetraedrului, si legaturile $C - H$ formeaza unghiurile unui tetraedru regulat de 109.5° . Legaturile $C - H$ din metan sunt legaturi covalente.

Cartwright, C. Hawley, Absorbing and Reflecting Powers of H_2SO_4 Solutions în Far Infrared, J. Chem. Phys. 4, 413 (1936) prezinta ca molecula SO_4 se numeste radical sulfat si a obtinut ca ionul SO_4^{2-} se formeaza în amestecul apei cu H_2SO_4 în solutii sub 5% si peste 5% apa. în articolul amintit anterior este prezentat ca H_2SO_4 are o structura tetraedrica cu un atom de S în centrul tetraedrului si cei 4 atomi de O în cele patru colturi ale tetraedrului, în care sunt doua posibilitati: atomul de S este legat cu cate o legatura covalenta cu cei 4 atomi de O, si doi atomi de O sunt legati prin cate o legatura covalenta cu cate un atom de H, structura pe care o notam cu A si care este reprezentata în Figura 1, sau atomul de S este legat cu cate doua legaturi covalente cu doi atomi de O si cu cate o legatura covalenta cu alti doi atomi de O care sunt legati cu cate o legatura covalenta cu cate un atom de H, structura pe care o notam cu B. în același articol este prezentat ca probabil ca în solutia de H_2SO_4 cu apa la molecula de H_2SO_4 sa se lege de una sau mai multe molecule de apa. în același articol este prezentat ca o posibilitate în aceasta solutie este structura în care atomul de S sa fie legat cu cate o legatura covalenta cu cei 4 atomi de O, doi atomi de O sa fie legati cu cate o legatura covalenta de doi atomi de H, si ceilalti doi atomi de O sa fie legati fiecare de cate un atom de H din molecula de H_2O , care se noteaza cu $H_2SO_4 \cdot H_2O$, si notam aceasta structura cu A'. în același articol este prezentat ca evidenta structurilor A si A' este demonstrata de curbele punct de inghet si de vascositate în funcție de concentratia solutiei

de H_2SO_4 în apa, deoarece în graficul punctului de îngheț în funcție de concentrația de H_2SO_4 în apa apare un maxim la $H_2SO_4 + 1H_2O$, și ca aceste curbe demonstrează stabilitatea structurii $H_2SO_4 \cdot H_2O$. În același articol este prezentat că în același grafic se poate observa că punctul de îngheț are un maxim și la concentrația egală $H_2SO_4 + 2H_2O$ și în același articol este prezentat că acest maxim demonstrează că mulți ioni sunt mai mult de o dată hidratați. În același articol este prezentat că deoarece în același grafic apare un maxim al punctului de îngheț și la concentrația $H_2SO_4 + 4H_2O$ rezultă că este posibil ca patru molecule de apă să se unească cu H_2SO_4 . În același articol este prezentat că SO_4^{--} și OH_4^{++} pot să aibă o structură tetraedrică și că forțele intermoleculare produc ca acești radicali să formeze o structură quasicristalină în lichid. În același articol este prezentat că este posibil că în această soluție să apară ionul SO_4^{2-} în care atomul de S are sarcină $2+$, este legat cu câte o legătură covalentă de cei patru atomi de O, și doi atomi de O au fiecare sarcinile $1-$. În același articol este prezentat că din Figura 1 prezentată în același articol, în care este prezentat graficul conductivității electrice în funcție de concentrația de H_2SO_4 , și în care observăm creșterea conductivității electrice cu creșterea concentrației de H_2SO_4 și atingerea unui maxim la concentrația de $H_2SO_4 + 1H_2O$, se poate trage concluzia prezentei ionilor formați din H_2SO_4 de tipul celor prezentate mai sus.

În articolul lor, Wood, Brandon C., and Marzari, Nicola, Hydrogen Dynamics în Superprotonic CsHSO₄, Phys. Rev. B 76, 134301 (2007), prezintă că SO_4 are o structură tetraedrică. O structură tetraedrică a unei molecule sau ion presupune 4 atomi identici în colțurile tetraedrului și un atom, care poate fi diferit, în centrul tetraedrului. Noi în invenție presupunem că molecula de SO_4 și ionul SO_4^{2-} au patru atomi de oxigen în cele patru colțuri ale tetraedrului și un atom de sulf în centrul tetraedrului.

Wrinch, Dorothy, and Harker, David, Lengths and Strengths of Atomic Bonds, J. Chem. Phys. 8, 502 (1940) prezintă că lungimea legăturii dintre doi atomi din moleculă este funcție de taria legăturii. Ei prezintă că această dependență este descrisă de o funcție care este o curbă continuă și a cărei derivată crește continuu pentru cazurile studiate de ei.

Conform celor prezentate de Wood, Robert H., Madelung Constant for K_2SO_4 (III), J. Chem. Phys. 32, 1690 (1960) în molecula de K_2SO_4 sarcina pe atomul de S este $+2$ și pe trei atomi de O este -1 pe fiecare.

Conform lui Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008, în teoria legaturii de valenta, pentru molecula de metan, considerand fiecare legatura ca o legatura covalenta din doi electroni, functia de unda se poate scrie ca

$$\Psi(CH_4) = |(2s\overline{\varphi}_s - \overline{\varphi}_s2s)(2p_x\overline{\varphi}_x - \overline{\varphi}_x2p_x)(2p_y\overline{\varphi}_y - \overline{\varphi}_y2p_y)(2p_z\overline{\varphi}_z - \overline{\varphi}_z2p_z)| \quad (14.1)$$

În ecuația (1) orbitalii $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ ai carbonului și orbitalii $1s$ ai atomilor de hidrogen se pot scrie în coordonate sferice și sunt date de Mansfield and O'Sullivan, Understanding Physics, Wiley, 2011. Rosen, N., Calculation of interaction between atoms with s-electrons, Phys. Rev. 38, 255 (1931) prezintă ca fiecare sarcină nucleară trebuie considerată ca funcție de coordonatele electronului în sensul în care, pentru molecula biatomică, are două valori: una pentru cazul în care electronul este în același atom (când ecranarea de electronii interiori este incompletă), a doua când electronul este pe al doilea atom (când ecranarea de electronii interiori este practic completă). Rosen, N., Calculation of interaction between atoms with s-electrons, Phys. Rev. 38, 255 (1931) prezintă ca Slater, J. C., Atomic Shielding Constants, Phys. Rev. 36, 57 (1930) prezintă ca în funcția de unda prezentată de el apare o sarcină ecranată dată de ecuația

$$\frac{Z - s}{n} \quad (14.2)$$

unde Z este numărul atomic, n este numărul cuantic efectiv și s este o constantă de ecranare, și ambele se determină de reguli prezentate de el. Rosen, N., Calculation of interaction between atoms with s-electrons, Phys. Rev. 38, 255 (1931) prezintă ca în cazul unei molecule stabile, de exemplu pentru o pereche de atomi într-o stare atractivă, se pot folosi funcțiile de unda date de Slater dacă este îndeplinită condiția ca n să fie întreg. Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH_4 and Related Molecules: Part II, J. Chem Phys. 1, 219 (1933) prezintă ca electronul carbonului care participă la legatura covalentă cu hidrogenul în metan vede o sarcină a nucleului de carbon ecranată de ceilalți electroni ai carbonului.

Rosen, N., Calculation of interaction between atoms with s-electrons, Phys. Rev. 38, 255 (1931) prezintă ca în calculele lui interacțiunile paturilor interioare au fost neglijate. Prin aceste interacțiuni el se referă la efectul interacțiunilor electronului exterior al fiecărui atom cu patura

interioara a celui alt atom, si considera ca interactiunea dintre cele doua paturi interioare este foarte mica.

Potentialul de interactiune Coulombiana a moleculei de metan este

$$\begin{aligned}
 V = & -\frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 r_H} - \frac{Z_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2s}} - \frac{Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2\sigma}} - \frac{Z_3 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2\pi+}} - \frac{Z_4 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2\pi-}} - \frac{4Z_5 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{HC}} - \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{CH}} \\
 & + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2sH}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2\sigma H}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2\pi+H}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2\pi-H}} + \frac{4Z_6 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{HC}} \\
 & + \frac{6e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{HH}} \quad (14.3)
 \end{aligned}$$

unde primul termen este interactiunea electronului hidrogenului cu nucleul hidrogenului, urmasorii 4 termeni sunt interactiunile electronilor carbonului, care participa la legaturile cu atomii de hidrogen, cu nucleul carbonului cu sarcina ecranata, urmasorul termen este interactiunea electronilor atomilor de hidrogen cu nucleul atomului de carbon, urmasorul termen este interactiunea electronilor carbonului cu nucleele atomilor de hidrogen, urmasorii 4 termeni sunt interactiunile dintre electronii carbonului cu electronii atomilor de hidrogen, urmasorul termen este interactiunea dintre nucleul carbonului si nucleele hidrogenului, si ultimul termen este interactiunea dintre nucleele atomilor de hidrogen. în ecuația (3) sarcinile vazute de electronii 2s, 2p σ , 2p π +, si 2p π – sunt date de ecuația (2).

Pentru cazul în care în ionul de SO_4^{2-} , conform celor prezentate mai sus, sulfurul formeaza 4 legaturi covalente, cate una cu fiecare atom de oxigen, si sulfurul are sarcina 2+, functia de unda a acestuia este asemanatoare cu aceea a metanului, data de ecuația (1), în care orbitalii carbonului se inlocuiesc cu orbitalii 3s, 3 σ , 3 π +, si 3 π – ai sulfurului, si orbitalul 1s al hidrogenului se inlocuieste cu un orbital 2p al oxigenului, fara sa stim dacă este orbital 2 σ , 2 π +, sau 2 π –, si potentialul acestui ion este asemanator cu potentialul metanului dat de ecuația (3). ecuația functiei de unda a ionului de SO_4^{2-} conform celor prezentate mai sus, folosind faptul ca este asemanatoare cu ecuația de unda a metanului data de ecuația (1), este

$$\Psi(SO_4^{2-}) = |(3s\bar{\varphi}_s - \bar{\varphi}_s 3s)(3p_x\bar{\varphi}_x - \bar{\varphi}_x 3p_x)(3p_y\bar{\varphi}_y - \bar{\varphi}_y 3p_y)(3p_z\bar{\varphi}_z - \bar{\varphi}_z 3p_z)| \quad (14.4)$$

unde φ_s , φ_x , φ_y , si φ_z sunt orbitalii 2p σ sau 2p π ai celor patru atomi de O.

de B  thune, Andr  , and Kimball, George E., Hydrogen Overvoltage   n Concentrated Sulfuric and Phosphoric Acid Solutions, J. Chem. Phys. 13, 53 (1945) din masuratorile de supratensiune pentru descarcarea hidrogenului pe un catod de mercur la 25  C   n solutii de acid sulfuric   n domeniul de concentratii de 0.125 la 9.65 molar au obtinut ca   n solutii diluate supratensiunea este independenta de concentratia acidului, reactia de catod fiind descarcarea protonului din apa, si pentru concentratii peste 2.83 molar supratensiunea descreste aproximativ liniar   n func  ie de concentratia masica a acidului si acidul este o sursa mai buna de protoni decat apa, cea ce se explica prin eliberarea de protoni de acid si cresterea descarcarii.

  n acela  s articol este prezentat ca semnul potentialului electric V dintre stratul de ioni adsorbiti si imaginea lui electrica   n electrod este definita de ecua  ia

$$V = V(\text{metal}) - V(\text{solutie}) \quad (14.5)$$

  n acela  s articol este prezentat ca supratensiunea η este definita ca

$$V = V_{eq} - \eta \quad (14.6)$$

unde V_{eq} este potentialul stratului dublu la un electrod   n echilibru intr-o solutie data cu privire la o reactie de electrod data.

Bell, Raymond M., and Jeppesen, Myron A., Raman Spectra of Sulfuric Acid Solutions, J. Chem. Phys. 2, 711 (1934) au facut un studiu al spectrului Raman al acidului sulfuric prin variatia concentratiei, si au verificat deplasarea frecventei cu descresterea concentratiei. Au prezentat intr-un tabel frecventele masurate,   n cm^{-1} , la diferite concentratii.

Bell, Raymond M., and Jeppesen, Myron A., The Raman Spectrum of Sulfuric Acid, J. Chem. Phys. 3, 245 (1935) prezinta ca, din analiza spectrului Raman a acidului sulfuric la concentratii volumice de la 100 la 5 procente, au gasit 8 linii a caror frecventa, largime si intensitate variază gradual cu schimbarea concentratiei. Domeniile acestor frecvente, tot   n cm^{-1} ca si   n lucrarea Bell, Raymond M., and Jeppesen, Myron A., Raman Spectra of Sulfuric Acid Solutions, J. Chem. Phys. 2, 711 (1934), sunt 408-432, 561-596, 913-895, 970-973, 980-983, 1031-1051, 1142-1174, 1216-1236, 1352-1332.   n acela  s articol este prezentat ca   n aceasta substanta sunt prezente molecule si doua tipuri de ioni.   n acela  s articol este prezentat ca

intensitatea liniei a 4-a, care apare la 55 procente, creste cu dilutia. Deoarece frecventa acesteia corespunde cu cea mai puternica linie observata în solutiile de sulfat, $KHSO_4$ si Na_2SO_4 , aceasta a fost atribuita ionului SO_4^{2-} , si indica prezenta unui mare numar de ioni de SO_4^{2-} de la 35 la 5 procente. în același articol linia a 5-a a fost atribuita ionului HSO_4^- si demonstreaza marea abundenta a acestui ion de la 45 la 5 procente.

Cuddeback, R. B., Koeller, R. C., and Drickamer, H. G., The Effect of Pressure on Diffusion în Water and în Sulfate Solutions, J. Chem. Phys. 21, 589 (1953) prezinta coeficientii de difuzie în funcție de presiune pana la 10000 de atmosfere în apa si în solutii sulfat. în lucrarea amintita anterior rezultatele sunt interpretate în termeni de volum de activare si structura coordonata tetraedric a apei.

În lucrarea amintita anterior este prezentat ca din studii spectroscopice, dielectrice, si de difracție de raze X, imaginea apei este ca retine structura coordonata tetraedric a ghetii pana la un grad care descreste cu temperatura.

Folosind ecuatiile date de Snyder, Lawrence C., Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants, J. Chem. Phys. 55, 95 (1971) pentru energia totala a unui atom în unitati de 13.6 eV

$$E = - \sum_n \left(\frac{N_n}{n^2} \right) (Z - s_n)^2 \quad (14.7)$$

unde N_n este numarul de electroni în orbitali cu numar cunatic principal n cu constanta de ecranare s_n într-un atom cu sarcina nucleara Z , si pentru constantele de ecranare atomice

$$s_1 = (N_1 - 1)(0.30) \quad (14.8)$$

$$s_2 = (N_1)(0.85) + (N_2 - 1)(0.35) \quad (14.9)$$

$$s_3 = (N_1)(1.0) + (N_2)(0.85) + (N_3 - 1)(0.35) \quad (14.10)$$

unde N_n este ocuparea paturii, putem sa calculam sarcinile $Z - s_n$ care apar în functiile de unda de tip Slater ale atomilor de oxigen si sulf cu care acesti atomi formeaza legaturile covalente din molecula de H_2SO_4 . dacă presupunem ca în H_2SO_4 ionul de S cu sarcina $2+$ formeaza cate o

legatura cu electronii sai $3s$, $3p\sigma$, $3p\pi +$, si $3p\pi -$ cu cate un atom de O cu electronul $2p\sigma$ al acestuia cu orbitalul orientat catre atomul de sulf si folosim si pentru functiile de unda ale sulfului corespunzatoare acestor electroni, si pentru functia de unda a oxigenului corespunzatoare electronului respectiv, orbitali de atom cu un electron cu sarcina $Z - s_n$ calculata pentru fiecare electron cu ecuatiile (8)-(10), atunci functia de unda a electronului oxigenului este

$$\psi_{O2\sigma} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} r e^{-\frac{Z_1 r}{2a_0}} \cos \theta \quad (14.11)$$

functia de unda a electronului $3s$ a sulfului este

$$\psi_{S3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right)^2 e^{-\frac{Z_2 r}{3a_0}} \quad (14.12)$$

si atunci observam ca integrala de acoperire

$$\langle \psi_{O2\sigma}(1) \psi_{S3s}(2) | \psi_{S3s}(1) \psi_{O2\sigma}(2) \rangle \quad (14.13)$$

este foarte complicata, si celelalte integrale sunt foarte complicate, si este mult mai avantajos sa se foloseasca orbitali de tip Slater prezentati în lucrarea anterior, care pentru $\psi_{O2\sigma}$ are o forma similara, dar pentru ceilalti orbitali are o forma mai simpla

$$r^{n-1} \exp[-(Z - s_n)r/n] \quad (14.14)$$

Astfel, pentru electronul $3s$ al sulfului functia de unda de tip Slater are forma

$$r^2 e^{-\frac{Z_2 r}{3}} \quad (14.15)$$

BIBLIOGRAFIE

Cuddeback, R. B., Koeller, R. C., and Drickamer, H. G., The Effect of Pressure on Diffusion în Water and în Sulfate Solutions, J. Chem. Phys. 21, 589 (1953).

Bell, Raymond M., and Jeppesen, Myron A., Raman Spectra of Sulfuric Acid Solutions, J. Chem. Phys. 2, 711 (1934).

Bell, Raymond M., and Jeppesen, Myron A., The Raman Spectrum of Sulfuric Acid, J. Chem. Phys. 3, 245 (1935).

Cartwright, C. Hawley, Absorbing and Reflecting Powers of H_2SO_4 Solutions in Far Infrared, J. Chem. Phys. 4, 413 (1936).

de Béthune, André, and Kimball, George E., Hydrogen Overvoltage in Concentrated Sulfuric and Phosphoric Acid Solutions, J. Chem. Phys. 13, 53 (1945).

Magnasco, Valerio, Methods of molecular quantum mechanics An Introduction to Electronic Molecular Structure, Wiley, 2009.

Mansfield, Michael, and O'Sullivan, Colm, Understanding Physics, Wiley, 2011.

Moore, John T., Chemistry For Dummies, 2nd Edition, Wiley, 2011.

Nathan, Harold D., and Henrickson, Charles, CliffsNotes Chemistry Quick Review, 2nd Edition, Wiley, 2011.

Periodic table basic, Quick Study Academic, BarCharts, 2002.

Rosen, N., Calculation of interaction between atoms with s-electrons, Phys. Rev. 38, 255 (1931).

Snyder, Lawrence C., Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants, J. Chem. Phys. 55, 95 (1971).

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008.

Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH_4 and Related Molecules. Part II, J. Chem Phys. 1, 177 (1933).

Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH_4 and Related Molecules: Part II, J. Chem Phys. 1, 219 (1933).

Wood, Brandon C., and Marzari, Nicola, Hydrogen Dynamics in Superprotonic $CsHSO_4$, Phys. Rev. B 76, 134301 (2007).

Wood, Robert H., Madelung Constant for K_2SO_4 (III), J. Chem. Phys. 32, 1690 (1960).

Wrinch, Dorothy, and Harker, David, Lengths and Strengths of Atomic Bonds, J. Chem. Phys. 8, 502 (1940).

IX.APLICAREA TEORIEI LEGATURII DE VALENTA LA DIAMANT

Am calculat minimul energiei moleculei de hidrogen, procentul funcției de unda Heitler-London în funcția de unda cu stări ionice, și exponentul orbital cu metoda Slater-Pauling, cu funcțiile de unda set de baza și de ordinul întâi și metoda dată de Weinbaum, S., The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933). Aceasta funcție de unda set de baza este

$$\begin{aligned}\psi &= c[a(1)b(2) + b(1)a(2)] + a(1)a(2) + b(1)b(2) \\ &= c(ab + ba) + aa + bb\end{aligned}\quad (1)$$

unde a și b sunt funcțiile de unda 1s ale celor doi atomi de hidrogen, 1 și 2 reprezintă atomul 1 și 2, și c este un parametru. Pentru funcția de unda atomică am folosit un orbital atomic pentru atomul de hidrogen cu constanta de ecranare de forma dată de Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) și care corespunde funcției de unda 1s al atomului cu un electron cu sarcina nucleului egală cu Z dată de Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011

$$a(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-Z \frac{r}{a_0}} \quad (2)$$

unde Z este constanta de ecranare.

În Figura 1 am reprezentat energia moleculei de hidrogen în funcție de distanța internucleară p , în unități atomice, și de parametrul c din ecuația (1). În această figură se observă că minimul energiei apare la distanța internucleară de 1.46 unități atomice și valoarea lui c de

2.8698. Se observa ca pentru minimul energiei valoarea lui c scade cu cresterea distantei internucleare.

A fost efectuata o aplicare a metodei legăturii de valenta pentru exprimarea energiei electronilor π în termeni de doi parametri: integrala Coulomb Q si integrala de schimb singulara α si a fost aplicata benzenului în lucrarea Van Dranen, J., and Ketelaar, J. A. A., J. Chem. Phys. 18, 1125 (1950).

A fost realizata o discutie a calculului energiei de coeziune a diamantului prin aplicarea teoriei legaturii de valenta cu o funcție de unda de tipul ecuatiei (1)

$$\psi = a(1)b(2) + b(1)a(2) + c'[a(1)a(2) + b(1)b(2)] \quad (3)$$

pentru fiecare legatura a atomului de carbon central cu atomii de carbon vecini în lucrarea Schmid, L. A., Valence Bond Calculations, Am. J. Phys. 22, 255 (1954). în aceeași lucrare este prezentat ca în diamant un atom de carbon este legat de patru atomi de carbon prin legaturi care sunt orientate tetraedric fata de atomul de carbon care se afla în centrul tetraedrului. Noi în inventie consideram cate o funcție de unda de tipul ecuatiei (1) pentru fiecare legatura din cele patru legaturi tetraedrice ale carbonului central cu cei patru atomi de carbon vecini, si în fiecare funcție de unda orbitalul a este unul din orbitalii $2s$, $2p\sigma$, $2p\pi^+$, sau $2p\pi^-$ ai carbonului central si orbitalul b este cate un orbital din aceeași patru orbitali ai cate unui atom de carbon vecin. Astfel orbitalul $2s$ al carbonului central se poate lega de un orbital $2s$, $2p\sigma$, $2p\pi^+$, sau $2p\pi^-$ al unui alt atom de carbon. Celelalte legaturi se descriu în mod asemanator cu orbitalii ramasi ai carbonului central.

Pentru molecula de H_2SO_2 Stefan, Thorsten, and Janoschek, Rudolf, How relevant are $S = O$ and $P = O$ Double Bonds for the Description of the Acid Molecules H_2SO_3 , H_2SO_4 , and H_3PO_4 respectively, J. Mol. Model. 6, 282 (2000) au obtinut ca structura Lewis optima este prin sarcina electronica maxima în orbitali Lewis, sulful se supune regulii octetului în structuri Lewis zwitterionice optime, si nu formeaza legaturi duble $S = O$. Inseamna ca, pentru ca sa se formeze octetul pentru atomul de S, se formeaza legaturi covalente $S - O$. Atunci, folosind ca sulful are 6 electroni pe ultimul strat, si folosind regula octetului, obtinem ca sulful formeaza 4 legaturi covalente cu cei 4 electroni ai sai în starile $3s$, $3p\sigma$, $3p\pi_+$, si $3p\pi_-$ cu cei patru atomi de O .

În articolul lor, Wood, Brandon C., and Marzari, Nicola, Hydrogen Dynamics în Superprotonic CsHSO₄, Phys. Rev. B 76, 134301 (2007), prezintă ca SO₄ are o structură tetraedrică. Noi în invenție considerăm ca, la fel ca la diamant, pentru ionul de SO₄²⁻, care are o structură tetraedrică, se poate aplica teoria legăturii de valență prin câte o funcție de undă de tipul ecuației (1) pentru fiecare legătură a sulfului cu câte un atom de oxigen, și în fiecare funcție de undă orbitalul *a* este unul din orbitalii 3s, 3pσ, 3pπ⁺, sau 3pπ⁻ ai sulfului și orbitalul *b* este unul din orbitalii 2s, 2pσ, 2pπ⁺, sau 2pπ⁻ ai oxigenului astfel încât energia acestui ion să fie minimă. Noi în invenție aplicăm metoda lui Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) pentru atomul cu un electron p celor patru atomi de O și obținem ca legăturile S – O din ionul de SO₄²⁻ se formează între unul din orbitalii 3s, 3pσ, 3pπ⁺, sau 3pπ⁻ ai sulfului și câte unul din orbitalii 2pσ, 2pπ⁺, sau 2pπ⁻ ai câte unui atom de O.

Un calcul aproximativ a barierei spre rotația internă în etan, folosind un set de structuri covalente de legături de valență implicând numai orbitali s și p, a fost realizat în lucrarea Harris, Gilda Maki, and Harris, Frank E., J. Chem. Phys. 31, 1450 (1959).

În lucrarea Hurley, A. C., Improved Molecular Orbitals and the Valence Bond Theory, J. Chem. Phys. 33, 301 (1960) este prezentat că în lucrările Huzinaga, S., Progr. Theoret. Phys. 20, 15 (1958) și Phillipson, P. E., and Mulliken, R. S., J. Chem. Phys. 28, 1248 (1958) au fost efectuate calcule ale energiei unei stări a moleculei de hidrogen.

Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH₄ and Related Molecules. Part I, J. Chem Phys. 1, 177 (1933) și Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH₄ and Related Molecules: Part II, J. Chem Phys. 1, 219 (1933) prezintă ca molecula de metan, CH₄, are o structură tetraedrică și ca fiecare atom de hidrogen din această moleculă este legat de atomul de carbon printr-o legătură covalentă C – H cu unul din electronii 2s, 2pσ, 2pπ⁺, și 2pπ⁻ ai atomului de carbon. Noi în invenție considerăm ca, în mod asemănător cu diamantul, fiecare legătură C – H din molecula de metan se poate descrie în modelul legăturii de valență cu o funcție de undă de forma ecuației (3) în care câte un atom de hidrogen este legat de câte unul din electronii 2s, 2pσ, 2pπ⁺, și 2pπ⁻ ai atomului de carbon printr-o legătură covalentă.

Conform cu Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008, pag. 33-39 pentru molecula de FH se aplică teoria VBSCF/STO-3G. Noi în

inventie, dacă notam cu a funcția de unda a hidrogenului și cu b funcția de unda a unui electron $2p$ al atomului de F, care poate fi un electron $2p\sigma$, $2p\pi^-$, sau $2p\pi^+$, considerăm funcția de unda a legăturii celor doi electroni de forma

$$\psi = c_1[a(1)b(2) + b(1)a(2)] + c_2[a(1)a(2)] + b(1)b(2) \quad (4)$$

și noi în inventie considerăm ca fiecare legătură $C-H$ din molecula de metan se poate descrie în modelul legăturii de valență cu o funcție de unda de forma ecuației (4) în care câte un atom de hidrogen este legat de câte unul din electronii $2s$, $2p\sigma$, $2p\pi^+$, și $2p\pi^-$ ai atomului de carbon printr-o legătură covalentă, astfel apar caracterele polare ale legăturilor $C-H$, și parametrii c_1 și c_2 se calculează pentru fiecare legătură $C-H$ prin minimizarea energiei.

Pentru molecula de FH din lucrarea Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008, pag. 33-39 observăm că sarcina negativă este mai mare pe atomul de F, astfel dacă a este orbitalul $2p\sigma$ al atomului de F și b este orbitalul $1s$ al atomului de H atunci în ecuația (4) modulul parametrului c_2 este mai mare decât 1. Această observație este utilă deoarece calculul celor doi parametri, c_1 și c_2 se poate efectua prin următoarea metodă: pentru valori date ale parametrului c_2 de 1.1, 1.2, ... se calculează valoarea parametrului c_1 din ecuația de gradul doi care rezultă din condiția de minim al energiei, se calculează energia moleculei și valoarea parametrului c_2 se obține din condiția de minim a energiei în funcție de valorile acestui parametru. În funcție de cazul în care sarcina negativă este mai mică sau mai mare pe atomul de H decât pe celălalt atom modulul parametrului c_2 poate fi mai mare sau mai mic decât 1.

1.Revendicăm molecula de hidrogen caracterizată prin aceea că din calculul minimului energiei moleculei efectuată de noi calculată cu metoda legăturii de valență din Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933) rezultă că parametrul procentului stării Heitler-London scade cu creșterea distanței internucleare.

2.Revendicăm structura tetraedrică a diamantului caracterizată prin aceea că noi în inventie considerăm câte o funcție de unda de tipul ecuației (1) pentru fiecare legătură din cele patru legături tetraedrice ale carbonului cu cei patru atomi de carbon, și în fiecare funcție de unda orbitalul $a(1)$ este unul din orbitalii $2s$, $2p\sigma$, $2p\pi^+$, sau $2p\pi^-$ ai carbonului central și orbitalul

$b(2)$ este cate un orbital din aceeasi patru orbitali ai cate unui atom de carbon. Astfel orbitalul al carbonului central $2s$ se poate lega de un orbital $2s$, $2p\sigma$, $2p\pi^+$, sau $2p\pi^-$ al unui alt atom de carbon. Celelalte legaturi se descriu în mod asemanator cu orbitalii ramasi ai carbonului central.

3.Revendicam molecula de metan caracterizata prin aceea ca are o structura tetraedrica si fiecare legatura $C - H$ din molecula de metan se poate descrie în modelul legaturii de valenta cu o funcție de unda de forma ecuatiei (3), asemanator ca la diamant, în care cate un atom de hidrogen este legat de cate unul din electronii $2s$, $2p\sigma$, $2p\pi^+$, si $2p\pi^-$ ai atomului de carbon printr-o legatura covalenta, unghiurile dintre legaturile $C - H$ fiind tetraedrice.

4.Revendicam molecula de metan caracterizata prin aceea ca are o structura teraedrica si noi în inventie consideram ca fiecare legatura $C - H$ din molecula de metan se poate descrie în modelul legaturii de valenta cu o funcție de unda de forma ecuatiei (4) în care cate un atom de hidrogen este legat de cate unul din electronii $2s$, $2p\sigma$, $2p\pi^+$, si $2p\pi^-$ ai atomului de carbon printr-o legatura covalenta, astfel apar caracterele polare ale legaturilor $C - H$, si parametrii c_1 si c_2 se calculeaza pentru fiecare legatura $C - H$ prin minimizarea energiei.

5.Revendicam metoda legaturii de valenta data de ecuația (4) caracterizata prin acea ca realizarea calculului celor doi parametrii, c_1 si c_2 se poate efectua prin urmatorea metoda: pentru valori date ale parametrului c_2 de 1.1, 1.2, ... se calculeaza valoarea parametrului c_1 din ecuația de gradul doi care rezulta din conditia de minim al energiei, se calculeaza energia moleculei si valoarea parametrului c_2 se obtine din conditia de minim a energiei în funcție de valorile acestui parametru.

6.Revendicam ionul de SO_4^{2-} caracterizat prin aceea ca în inventie aplicam metoda lui Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931) pentru atomul cu un electron p celor patru atomi de O si obtinem ca legaturile $S - O$ din ionul de SO_4^{2-} se formeaza intre unul din orbitalii $3s$, $3p\sigma$, $3p\pi^+$, sau $3p\pi^-$ ai sulfului si cate unul din orbitalii $2p\sigma$, $2p\pi^+$, sau $2p\pi^-$ ai cate unui atom de O.

DESENE EXPLICATIVE

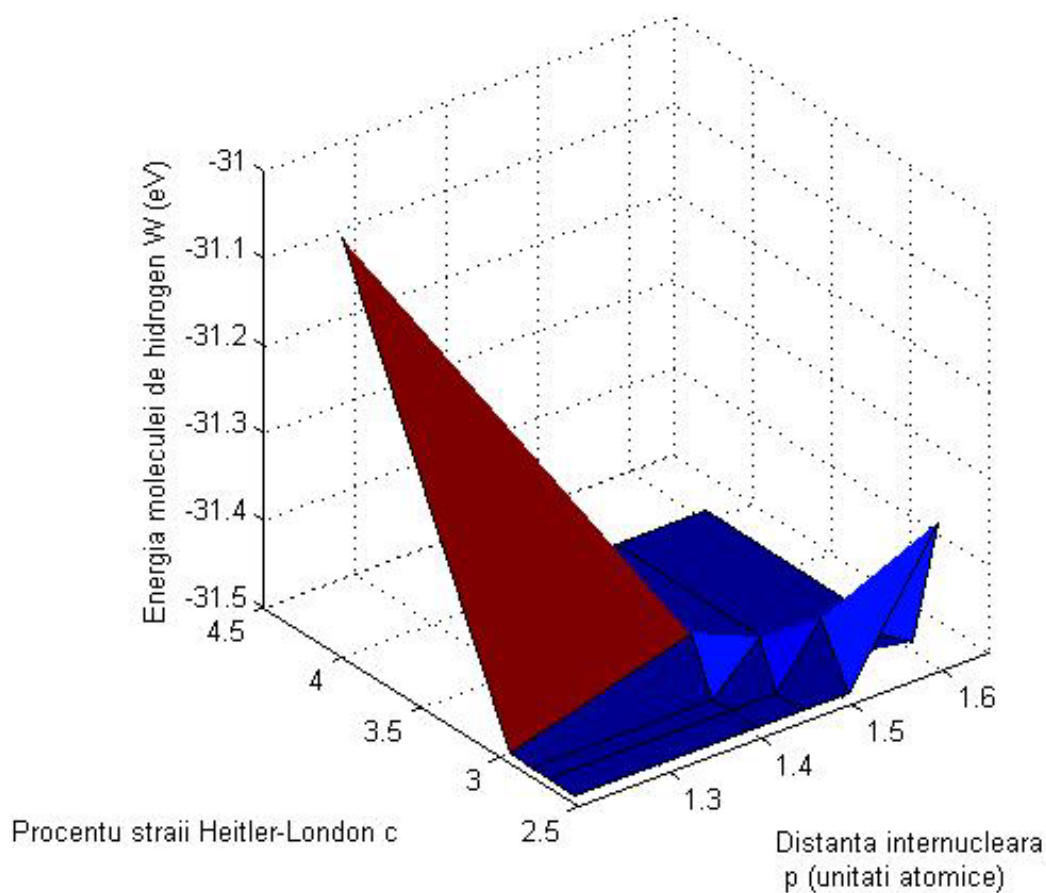


Fig. 1.

BIBLIOGRAFIE

Harris, Gilda Maki, and Harris, Frank E., Valence Bond Calculation of the Barrier to Internal Rotation în Molecules, J. Chem. Phys. 31, 1450 (1959).

Hurley, A. C., Improved Molecular Orbitals and the Valence Bond Theory, J. Chem. Phys. 33, 301 (1960).

Huzinaga, S., Progr. Theoret. Phys. 20, 15 (1958).

Mansfield, M., and O'Sullivan, C., Understanding Physics, Wiley, 2011.

Magnasco, V., Orbital exponent optimizatin în elementary VB calculations of the chemical bond în the ground state of simple molecular systems, J. Chem. Edu. 85, 1686-1691 (2008).

Magnasco, Valerio, Methods of Molecular Quantum Mechanics An Introduction to Electronic Molecular Structure, Wiley, 2009.

Moore, John T., Chemistry for dummies, 2nd Edition, Wiley, 2011, pag. 138, 230-233.

Pauling, Linus, The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules, Journ. Am. Chem. Soc. 53, 1367 (1931).

Phillipson, P. E., and Mulliken, R. S., J. Chem. Phys. 28, 1248 (1958).

Schmid, L. A., Valence Bond Calculations, Am. J. Phys. 22, 255 (1954).

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008.

Shaik, Sason, and Hiberty, Philippe C., A chemist's guide to valence bond theory, Wiley, 2008, pag. 33-39.

Slater, J. C., Molecular energy levels and valence bonds, Phys. Rev. 38, 1109 (1931).

Stefan, Thorsten, and Janoschek, Rudolf, How relevant are $S = O$ and $P = O$ Double Bonds for the Description of the Acid Molecules H_2SO_3 , H_2SO_4 , and H_3PO_4 respectively, J. Mol. Model. 6, 282 (2000).

Van Dranen, J., and Ketelaar, J. A. A., Theoretical Calculation of Valence-Bond Parameters, J. Chem. Phys. 18, 1125 (1950).

Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH_4 and Related Molecules. Part II, J. Chem Phys. 1, 177 (1933).

Van Vleck, J. H., On the Theory of the Structure of CH_4 and Related Molecules: Part II, J. Chem Phys. 1, 219 (1933).

Wang, S. C., The Problem of Normal Hydrogen Molecule în the New Quantum Mechanics, Phys. Rev. 31, 579 (1928).

Weinbaum, Sidney, The Normal State of the Hydrogen Molecule, J. Chem. Phys. 1, 593 (1933).

Wood, Brandon C., and Marzari, Nicola, Hydrogen Dynamics în Superprotonic CsHSO₄, Phys. Rev. B 76, 134301 (2007).

Cerere de brevet de inventie inregistrata la OSIM Bucuresti www.osim.ro cu nr. A/00029 din 17.01.2014

În cartea A Damokosok a lui Jókai Mór [10] este prezentat ca pe timpul anului 1657 comandantul szecuilor de pe vremea aceea, Tamás Damokos, avea bani de aur și argint, care umpleau o ladită, jumate aur și jumate argint. Rezultă că aurul și argintul erau folosite și cunoscute în acea perioadă de timp. Subordonatul lui avea pușca, ceea ce demonstrează că praful de pușca era cunoscut și folosit pe vremea aceea [10].

Aurul și argintul sunt elemente din tabelul periodic al elementelor [3]. Aurul și argintul sunt solide [3].

Într-o moleculă, într-o legătură covalentă, cei doi atomi pun în comun câte un electron [2].

În moleculă de hidrogen, H_2 , cei doi atomi de hidrogen sunt legați printr-o legătură covalentă în care pun în comun câte un electron [2,3].

Metanul are formula chimică CH_4 , și în această moleculă între atomul de carbon și fiecare din cei patru atomi de hidrogen se formează câte o legătură covalentă, astfel încât sunt formate patru legături covalente [2,3].

Dupa cum este prezentat în Figura 2 din articolul [4] si în demonstratia din articolul [4], structura moleculei de CH_4 este o piramida triunghiulara, care are atomii de H în varfurile piramidei, are muchiile de la atomul de H din varf la ceilalti trei atomi de H egale, si atomul de C în centrul piramidei, iar aceasta structura se numeste tetraedrica [6].

Slater a formulat o metoda pentru constructia formulei functii proprii aproximative pentru molecule si pentru construirea ecuatiei seculare corespunzatoare [12]. Prin rezolvarea ecuatiei seculare se obtine energia starii fundamentale a moleculei data de energiile starii fundamentale ale electronilor de valenta din legaturile dintre atomii din molecula [12]. Aceasta metoda a fost aplicata cu succes de un numar de investigatori în discutia teoriei generale a valentei si a structurii unor molecule individuale simple, aplicarea acestuia la molecule mai complexe fiind retardata în parte de natura laborioasa a calculelor coeficientilor variatelor integrale de schimb din elementele de matrice [12]. în continuare în [12] se arata ca acesti coeficienti pot fi usor calculati printr-o procedura simpla care implica folosirea diagramelor plane similare cu cele introduse de Rumer în discutia lui recenta a independentei liniare a structurilor electronice [12].

În continuare se prezinta stari de singlet cu degenerare numai de spin [12]. Pentru un sistem care implica N electroni, Slater a construit functia [12]

$$\psi = \frac{1}{(N!)^{\frac{1}{2}}} \sum_P (-1)^P P A(1) B(2) \dots E(N) \quad (1),$$

care este complet antisimetrica în electroni (satisfacand principiul lui Pauli) [12]. Aici A, B ... E sunt functii spin-orbita uni-electronice, si simbolul P'' reprezinta N! Permutari ale functiilor A...E în funcție de electroni, coeficientii fiind - 1 pentru permutari impare si + 1 pentru permutari pare [12]. Pentru o molecula biatomica, de exemplu H_2 , cu o legatura covalenta între cei doi atomi, pentru cei doi electroni din legatura covalenta functia de mai sus este

$$\psi = \frac{1}{2^{\frac{1}{2}}} (A(1)B(2) - A(2)B(1)) \quad (2)$$

Pentru doua astfel de functii ψ si ψ' elementul de matrice corespunzator unei cantitati dinamice F este [12]

$$(1/N!) \int \{ \sum_P (-1)^P P A(1) B(2) \dots E(N) \} F \{ \sum_{P'} (-1)^{P'} P' A'(1) B'(2) \dots E'(N) \} dv \quad (3),$$

care se reduce la [12]

$$\int A(1) \dots E(N) F \{ \sum_P (-1)^P P A'(1) B'(2) \dots E'(N) \} dv \quad (4),$$

cu $P' = P''P$, în cazul în care F este complet simetric în electroni [12]. Aceasta se poate scrie ca [12]

$$\sum_P (-1)^P (A \dots E | F | P A' \dots E') \quad (5)$$

în care fiecare paranteza $(A \dots E | F | P A' \dots E')$ reprezintă o integrală în suma de mai sus [12]. dacă F nu implică interacții de spin, integrala $(A \dots E | F | P A' \dots E')$ se anulează în afara de cazul în care spinul lui A este același ca al lui A' , al lui B ca al lui B' , și așa mai departe, caz în care aceasta se reduce la $(ab \dots e | F | a' b' \dots e')$ cu $a \dots e'$ partile orbitale ale lui $A \dots E'$ [12].

De exemplu pentru patru electroni numai cu degenerare de spin (numărul de orbite ocupate egal cu numărul de electroni), Slater a dat funcția $\frac{1}{2}(\psi_I - \psi_{II} - \psi_{III} + \psi_{IV})$ ca să reprezinte structura în care orbitele a și b sunt legate împreună, și de asemenea c și d [12]. Aici $\psi_I \dots \psi_{IV}$ sunt funcții de tipul celor date mai sus cu următoarea distribuție a spinilor de a lungul orbitelor [12]

	a	b	c	d
I	-	+	-	+
II	+	-	-	+
III	-	+	+	-
IV	+	-	+	-

Subiectul valenței direcționale sau orbitale în moleculele poliatomice a fost abordat în prin două metode [7]. Una dintre metode a fost dezvoltată de Slater și de Pauling [7]. Modelul lor este bazat pe ceea ce Hund numește localizarea legăturilor prin care funcții de undă particulare

sunt considerate ca se suprapun peste atomi particolari [7]. Pentru a explica compusii tetraedrici ai carbonului, sunt introdusi valentele si functiile de unda numite sp^3 [7]. Anume, Pauling si Slater arata ca considerand combinatii liniare ale functiilor de unda uzuale $2s$ si $2p$ este posibil sa se construiasca patru functii de unda ortogonale care se proiecteaza în spatiu ca cele patru colturi ale unui tetraedru [7]. Modelul Slater-Pauling isi insuseste în mod particular calculele folosind mijloacele metodei Heitler-London, într-o forma generalizata data de Slater si de Born [7].

Cealalta abordare este datorata lui Hund si Mulliken, si este o generalizare a teoriei lor a configuratiei diatomice [7]. în modelul recent al lui Mulliken, un electron nu este atribuit unei valente particulare ci se poate misca într-un camp de aceasi simetrie ca a moleculei care se studieaza, de exemplu un camp de simetrie tetraedrica în CH_4 [7]. Marea simplitate consta în faptul ca în acest model dinamicile sunt aceslea ale unui sistem de un electron, de exemplu problema cu doua centre în molecula diatomica, cea cu cinci centre în CH_4 [7]. Numai un electron este legat de molecula la un moment dat, si conform principiului lui Pauli numai doi dintre ei pot apartine aceleiasi stari orbitale [7]. Repulsia inter-electronica poate fi inclusa, în principiu, în extinderea în care ei pot fi reprezentati de un camp self-consistent Hartree de o simetrie data [7]. dacă molecula este simetrica, mai multe solutii ale ecuatiei de unda mono-electronice pot avea aceasi energie [7]. Gradul de degenerare se poate determina din articolul faimos a lui Bethe în care diferitele reprezentari al grupului de rotatie sunt rezolvate în portiunile lor ireductibile în grupuri cristalografice variate [7]. în particular în modelele tetraedrice cele doua nivele cuantice se despică în același mod ca si pentru un camp central, adica într-un termen izolat (functia de unda $2s$) si un termen triplu degenerat (trei combinatii liniare ortogonale arbitrare ale functiilor de unda uzuale $2p$) [7]. Trebuie notat în particular ca modelul tetraedric al lui Mulliken nu pretinde sau chiar permite hibridizarea, adica inglobarea functiilor de unda $2s$ si $2p$ în combinatii liniare [7]. Metoda de calcul cu modelul lui Mulliken este în esenta o generalizare al unuia creat de Hund pentru un caz simplu, si este cel puțin superficial foarte diferit de metoda Heitler-London [7].

Ambele scheme ale lui Slater-Pauling si Hund-Mulliken prezic un model de unghi drept pentru H_2O dacă neglijam (a) fortele între cei doi atomi de H , (b) separarea finita a termenilor

1S , 3P , 1D care rezulta din configuratia p^4 a atomului de O , si (c) puterea de legatura a celor doi electroni $2s$ ai atomului de O [7].

Intr-o lucrare precedenta, care este amintita în [4], a fost prezentata o comparatie generala a teoriilor lui Hund-Mulliken si ale lui Slater-Pauling a valentei în compusii carbonului [4]. Astfel, în lucrarea amintita în [4], a fost aratat ca procedeul H-M are ca rezultat acumularea excesiva a electronilor pe un atom, pe cand punctul de vedere S-P pierde prea mult din proprietatile de simetrie caracteristice unui electron individual în campuri de simetrie teraedrica [4]. Aceste remarci nu au intentia sa fie critici defaimatoare, pentru dificultati matematice de neinvins care impiedica orice solutie cu adevarat precisa, si ambele metode trebuie sa fie admirate pentru progresele facute în intelegerea valentelor carbonului [4]. Oricum, deoarece nici unul din procedee nu este strict corect, apare de dorit ca unul dintre scopurile articolului [4] sa fie demonstratia, cu atat de multe metode cate sunt posibile, ca modelul tetraedric al moleculei CH_4 este cel mai stabil, mai degraba decat sa se accepte un astfel de model exclusiv din cauza geometriei tetraedrice a functiilor de unda sp^3 ale lui Pauling si Slater [4]. Daca, asa cum se demonstreaza, ca invariabilitatea configuratiei tetraedrice are energia minima în cazuri fezabile limitatoare variate reprezentate în diferitele teorii, este sigur ca aceasta configuratie este de asemenea cea mai buna în cazul intermediar de nerezolvat realizat în mod actual [4].

Urmandu-l pe Hund, vom presupune ca functiile de unda moleculare ale moleculei CH_4 pot fi exprimate cu suficienta aproximatie prin combinatii liniare a opt functii de unda [4]

$$\left. \begin{array}{l} \psi(1s; H_i), (i = a, b, c, d), \\ \psi(2s; C) \\ \psi(2p\sigma_x; C) \\ \psi(2p\sigma_y; C) \\ \psi(2p\sigma_z; C) \end{array} \right\} \quad (6)$$

Aici $\psi(2p\sigma_x; C)$ inseamna o stare $2p$ a carbonului care are $m_l = 0$ cand este vazuta de a lungul axei x [4]. Functiile (1) trebuie sa fie solutii ale ecuatiilor [4]

$$[\nabla^2 + (8\pi^2 m/h^2)(W_k^C - V_C)]\psi(2k; C) = 0 \quad (k = s \text{ sau } p), \quad (7)$$

$$[\nabla^2 + (8\pi^2 m/h^2)(W^H - V_{H_i})]\psi(1s; H_i) = 0,$$

unde V_H si V_C sunt energiile potentiale ale unui electron în campul unui atom de H sau de C, respectiv. Aceste energii potentiale nu trebuie considerate cele produse de un nucleu gol de H si de C inconjurat de $-6e$, dar mai curand aceste nuclee sunt considerate inconjurate de un nor de densitate electronica centro-simetrica ales în mod corespunzator, astfel încat $\psi(1s; H_i)$ nu este în mod general o funcție de unda de hidrogen ordinara [4]. Norul de ecranare a nucleului de C va fi mai mare decat $-6e$ dacă atrage mai multa sarcina de la atomii de H, facand molecula apreciabil polara [4].

Ecuatia corecta, care suntem convinsi ca este cunoscuta, a electronului din legatura covalenta H - C este [5]

$$[\nabla^2 + (8\pi^2 m/h^2)(W^{H-C} - \sum_{i=1}^4 V'_{H_i} - V'_C)]\psi^{(H-C)} = 0 \quad (8)$$

unde se pot neglija efectele celorlalti atomi de H deoarece sunt la distanta mare, dar aceasta ecuație nu se poate rezolva analitic deoarece potentialele nu au expresii analitice deoarece depind de distributia de sarcina a atomilor de H si a atomului de C si aceste distributii de sarcina nu sunt cunoscute cu exactitate, si nu este o ecuație centro-simetrica. Pentru ecuatiile de mai sus se pot gasi solutii aproximative si sunt mai utile pentru problema studiata.

Pentru a permite efectuarea calculelor, norul de ecranare trebuie sa fie considerat independent de aranjamentul spatial al atomilor de H [4]. Se demonstreaza în [4] ca pentru orice tip de nor minimul de energie este dat de modelul tetraedric [4]. Inglobarea repulsiei electronilor printr-o densitate de sarcina statistica sau nor este în esenta metoda Hartree a campului self-consistent, cu exceptia faptului ca metoda din [4] nu reprezinta metoda Hartree în toata generalitatea ei [4]. Hartree foloseste nori diferiti pentru a obtine solutii diferite corespunzatoare variatelor clase a orbitelor electronilor, pe cand în [4] trebuie sa se foloseasca același nor de ecranare pentru toate cele opt solutii pentru problema seculara [4].

Integralele care intra în constructia determinantului secular sunt notate în modul urmator [4]

$$B = \iiint \psi(1s; H_i)^2 V_C dv$$

$$\begin{aligned}
C_k &= - \iiint \psi(k_i; C)^2 V_{H_i} dv \\
D &= - \iiint \psi(2s; C) \psi(2\sigma_i; C) V_{H_i} dv \\
Q_k &= - \iiint \psi(1s; H_i) \psi(2k_i; C) V_{H_i} dv \quad (9) \\
R_k &= - \iiint \psi(1s; H_i) \psi(2k_i; C) V_C dv \\
T_k &= \iiint \psi(1s; H_i) \psi(2k_i; C) dv
\end{aligned}$$

unde $k = \pi, \sigma$, sau s [4]. Notam ca $Q_\pi = R_\pi = T_\pi = 0$ [4]. Notatia π_i, σ_i se refera la cuantificarea spatiala care este relativa la axa $C - H_i$, si indicii $p\pi, p\sigma$ sunt notate cu π si σ [4]. O stare π are $m_l^2 = 1$; o stare σ are $m_l = 0$ [4]. Q_π si R_π se anuleaza deoarece V_{H_i} si V_C au simetrie axiala cand se integreaza în funcție de coordonata azimutala φ care este implicata în $dv = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ [4]. Integralele sunt independente de i deoarece toti cei patru atomi de H sunt echidistanti fata de C [4]. dacă integrala nu depinde de θ si φ atunci ramane integrarea dupa r si apare coeficientul 4π dupa integrarea dupa unghiuri [5].

Expresiile lui C, D, Q si T pot fi considerate toate pozitive [4]. Aici, si în alta parte, nu se folosesc subscripturi cand remarcile se aplica în mod colectiv la tipurile π, σ si s [4]. $\psi(1s; H_i)$ este fara noduri si rezulta ca se poate lua peste tot pozitiva, pe cand $\psi(2s; C)$ si $\psi(2\sigma_i; C)$ se pot lua pozitive unde se suprapun peste atomul H_i , care va fi cu mult sub nodul $\psi(2\sigma_i; C)$ [4]. Energia potentiala V_{H_i} este, desigur, peste tot negativa deoarece sarcina care ecraneaza nucleul de H este cu siguranta mai mica decat ce a protonului [4]. Semnele lui B si R nu au importanta în articolul [4].

Nu se presupune ca modelul este tetraedric [4]. în loc de aceasta, se presupune ca o axa $C - H_i$ ($i = a, b, c, d$) are cosinusuri cu directii arbitrare l_i, m_i, n_i [4]. Atunci ecuația seculara este [4]

$$\begin{vmatrix} E & s_l & s_m & s_n & q & q & q & q \\ s_l & F_l & r_{lm} & r_{ln} & a_l & b_l & c_l & d_l \\ s_m & r_{lm} & F_m & r_{mn} & a_m & b_m & c_m & d_m \\ s_n & r_{ln} & r_{mn} & F_n & a_n & b_n & c_n & d_n \\ q & a_l & a_m & a_n & G & 0 & 0 & 0 \\ q & b_l & b_m & b_n & 0 & G & 0 & 0 \\ q & c_l & c_m & c_n & 0 & 0 & G & 0 \\ q & d_l & d_m & d_n & 0 & 0 & 0 & G \end{vmatrix} = 0 \quad (10)$$

cu notatiile [4]

$$\left. \begin{aligned} a_l &= l_a [-Q_\sigma + (W_p^C - W)T_\sigma], & q &= -Q_s + (W_s^C - W)T_s, \\ E &= W_s^C - 4C_s - W, & F_l &= W_p^C - 4C_\pi + (C_\pi - C_\sigma) \sum_i l_i^2 - W, \\ G &= W^H + B - W, & r_{lm} &= -(C_\sigma - C_\pi) \sum l_i m_i, & s_l &= -D \sum l_i \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

În ecuația seculară de mai sus $b_m, \dots, d_n$ notează expresii similare ca în ecuațiile de mai sus pentru a_l cu excepția faptului că $m_b, \dots, n_d$ înlocuiesc l_i [4]. Remarci analoge se aplică restului notațiilor din ecuația de mai sus [4].

Faptul că direcțiile cosinusurilor intră în forma respectivă în ecuația seculară rezultă din faptul că $\psi(2s; C)$ este centro-simetric, și din faptul că funcțiile de undă $\psi(2\sigma_x; C), \psi(2\sigma_y; C), \psi(2\sigma_z; C)$ sunt de forma $xf(r), yf(r), zf(r)$, și astfel se transformă de la un sistem de coordonate la altul așa cum se transformă componentele unui vector [4]. De exemplu [4]

$$\psi(2\sigma_x; C) = l_i \psi(2\sigma_i; C) + (1 - l_i^2)^{\frac{1}{2}} \psi(2\pi_i; C) \quad (12)$$

Ecuația de mai sus arată că termeni de tipul $-WT_s, -WT_\sigma$ care implică W nu apar pe diagonală ecuației seculare [4]. Astfel de termeni au apărut pentru că funcțiile de undă C și H nu sunt ortogonale [4]. Proprietatea operatorului Hamiltonian H de a fi auto-adjunct da posibilitatea ca în locul formulei lui q de mai sus să putem să folosim formula $q = -R_s + (W_i^H - W)T_s$ [4]

$$W_s^C T_s - Q_s = \iiint \psi(1s; H_i) H \psi(2s; C) dv = \iiint \psi(2s; C) H \psi(1s; H_i) dv = W^H T_s - R_s \quad (13)$$

Remarci analoage se aplica definitiilor lui a, b, c, d [4]. în [4] se folosesc numai functii reale, care nu implica pierderea generalitatii în absebtia fortelor magnetice [4]. Elementele zero din ecuația seculara rezulta din conditia folosita în [4] de a neglija fortele $H - H$ [4].

Energia moleculei CH_4 este de doua ori suma celor mai mici radacini ale ecuatiei seculare [4]. Suma este dublata deoarece principiul Pauli permite doi electroni pentru fiecare solutie a ecuatiei de unda orbitale, astfel incat în total numai patru radacini sunt necesare pentru ca sa absoarba opt electroni disponibili de la atomii de H si de la patura L a atomului de C [4].

Ecuatia seculara este inca prea complicata pentru a fi rezolvata cu exceptia unor conditii simplificatoare [4].

În continuare se analizeaza cazul aproape ionic în care este impusa conditia $W^H - W^C \gg Q$ [4]. Acest caz s-ar realiza dacă CH_4 ar avea o structura aproape ionica $C^{4-}(H_4)^{4+}$, si aceasta conditie ar pretinde ca diferenta între afinitatile electronice ale centrelor de atractie ale C si H (ecranate corespunzator) sa fie mare în comparatie cu variatele integrale de mai sus, mai exact cu termenii de rezonanta Q, R care sunt cauza principala a legaturii moleculare [4]. în continuare se pretinde ca $W^H - W^C \gg Q$ astfel incat electronii în medie sunt atrasi de la H la C si nu invers [4]. în realitate acest caz va fi o aproximatie saraca a CH_4 , deoarece potentialele de ionizare ale C si H sunt aproape egale, si afinitatile lor electronice sunt mici [4]. Cu toate acestea este instructiv sa se faca un calcul pentru acest caz, deoarece este de dorit sa se rezolve determinantul secular pentru atat de multe cazuri limita cate sunt posibile, si în mod special pentru ca aici demonstreaza posibilitatea obtinerii unor formule simple si relevante pentru energie cu aranjament arbitrar al atomilor de H [4].

Simplitatea matematica a cazului prezent consta în abilitatea de a folosi o dezvoltare în serie a raporturilor integralelor de mai sus la $W^H - W^C$ [4]. Este convenabil sa se introduca un parametru λ în ecuația seculara urmand schema urmatoare: multiplicarea fiecarui termen Q sau T din ecuatiile de mai sus cu λ , si fiecare termen C sau D cu λ^2 [4]. Atunci se poate considera ca dezvoltarea în serie este o serie de puteri în λ [4]. Convergenta dezvoltarii este, desigur, datorata faptului ca integralele de mai sus au valori mici mai degraba decat lui λ , deoarece în final trebuie sa punem $\lambda = 1$ [4]. De acea rolul lui λ este numai formal, si este în principal acela de a descie gradul de aprximare care are în primul rand rezultatul modelului tetraedric [4]. Calculul va

furniza urmatorul rezultat interesant: energia moleculei este o serie de puterile pare ale lui λ si este independenta de modul în care sunt aranjati atomii de H dacă dezvoltarea este facuta numai pana la termeni λ^2 inclusiv, dar este un minim pentru modelul tetraedric cand sunt inclusi termeni de ordinul λ^4 [4]. Acesti termeni λ^4 sunt de doua tipuri [4]. Un tip rezulta din puterea la a patra a lui Q si T [4]; al doilea tip implica produsul la puterea intaia a lui C si D si un termen la a puterea doua a lui Q si T [4]. (Termenii la puterea a doua în C, D se dovedesc a fi absenti [4]). Nu ambele tipuri sunt de o importanta vitala, dar din fericire ambele furnizeaza aceasi dependenta a energiei de aranjamentul unghiular, favorizand tetraedrul [4]. Apare imposibil de stabilit care tip este mai important, si ca un raspuns la aceasta intrebare este necesara cunoasterea marimii lui C, D în comparatie cu Q [4]. Stim cu siguranta ca Q este mare în comparatie cu C, D, dar aceasta este insuficient [4].

Se continua cu dezvoltarea calculelor [4]. Primul pas este aplicarea unei transformari care pentru scopul nostru va reduce determinantul secular de ordinul opt la unul de ordinul patru [4]. Transformarea corespunzatoare este [4]

$$S(ij) = -S(ji) = -\frac{K(ij)}{hv(ij)}, \quad S(ii') = \delta_{ii'}, \quad S(jj') = \delta_{jj'}, \quad (14)$$

unde δ este simbolul uzual Kronecker si $K(mn)$ sunt definiti prin scrierea elementelor matricii seculare ca $K(mn) - W\delta_n^m$ [4]. Notam ca din cauza termenilor T din ecuatiile de mai sus $K(mn)$ implica W [4]. Indicii i, i' se refera la oricare din nivelele lui C si j, j' la oricare din cele ale lui H (starile fundamentale ale oricaruia din cei patru atomi de H) [4]. Se poate verifica ca în matricea de transformare $S^{-1}KS$ elementele ij (care inlocuiesc a, b, c, d, q în ecuația seculara) sunt de ordinul λ^3 si astfel afecteaza cele patru radacini cu cele mai mici valori ale ecuatiei seculare ale carbonului perturbat în aproximatia λ^6 [4]. Deoarece calculele care se fac în [4] se opresc la λ^4 , în aceasta matrice transformata este necesar sa se retina numai bucata (ii') care inglobeaza cele patru radacini C [4]. Calculand aceasta piesa cu ajutorul ecuatiilor de mai sus se gaseste ca aceasta da ecuația seculara [4]

$$|L(ii') - \delta_{ii'}W| = 0 \quad (15)$$

cu

$$L(ii') = K(ii') + \sum_j \frac{K(ij)^2}{hv(ij)} - \left\{ \sum_{i',j} \frac{K(ij)K(ji')K(ii')}{hv(ij)hv(i'j)} + \sum_{j,i',j'} \frac{K(ij)K(ji')K(i'j')K(j'i)}{hv(ij)hv(i'j)hv(i'j')} \right\} \quad (16)$$

$$L(ii') = K(ii') + \sum_i \frac{K(ij)K(ji')}{hv(i'j)} \quad (17)$$

Termenii în acolade sunt de ordinul λ^4 ; ceilalti termeni sunt de ordinul λ^2 sau de ordin mai mic [4]. S-au dezvoltat suficient de mult expresiile L-urilor pentru a da dezvoltarea determinantului secular de mai sus în λ^4 [4]. Aceasta inseamna ca este necesar numai calculul elementelor nedigonale de mai sus pana la aproximatia în λ^2 [4]. dacă eram interesati de radacinile individuale ale ecuatiei seculare de mai sus, în loc de suma, era necesara efectuarea calculelor acestor elemente pana la aproximatia în λ^4 , deoarece pentru determinarea radacinilor individuale ale ecuatiei seculare pana în λ^4 trebuie sa se cunoasca coeficientii W^2, W, W^0 pana la $\lambda^8, \lambda^{12}, \lambda^{16}$, respectiv, pe cata vreme suntem interesati pur si simplu numai de coeficientii lui W^3, W^4 [4]. în virtutea ecuatiilor de mai sus în aproximatia prezenta forma explicita a ecuatiei seculare de mai sus este [4]

$$\begin{vmatrix} H_s + I_s \sum_i \sum_j (\vec{i} \cdot \vec{j}) W & M_s \sum l_i & M_s \sum m_i & M_s \sum n_i \\ M_p \sum l_i & f(l) - W & J \sum l_i m_i & J \sum l_i n_i \\ M_p \sum m_i & J \sum l_i m_i & f(m) - W & J \sum m_i n_i \\ M_p \sum n_i & J \sum l_i n_i & J \sum m_i n_i & f(n) - W \end{vmatrix} = 0 \quad (18)$$

unde

$$\left. \begin{aligned} f(q) &= W_p^C - 4\lambda^2 C_\pi + J \sum_i q_i^2 + \sum_i \sum_j q_i q_j [I_p + N(\vec{i} \cdot \vec{j})] \\ H_s &= W_s^C - 4\lambda^2 C_s - 4\lambda^2 \tau_s Q_s'^2 + 4\lambda^4 \tau_s^3 Q_s'^4, \quad J = \lambda^2 (C_\pi - C_\sigma) - \lambda^2 \tau_p Q_p'^2 \\ I_k &= \lambda^4 \tau_s \tau_p D Q_s' Q_\sigma', \quad M_k = -\lambda^2 D - \lambda^2 \tau_k Q_s' Q_\sigma' \\ N &= \lambda^4 \tau_p^2 Q_\sigma'^2 (C_\sigma - C_\pi) + \lambda^4 \tau_p^3 Q_\sigma'^4 \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

unde sumele dupa i si j cuprind a, b, c, d si unde [4]

$$\frac{1}{\tau_k} = W^H + B - W_k^C > 0, \quad (k = s \text{ sau } p); \quad Q'_k = Q_k + T_k(W_k^C - W), \quad (k = s \text{ sau } \sigma) \quad (20)$$

$$(\vec{i} \cdot \vec{j}) = l_i l_j + m_i m_j + n_i n_j = \cos(C - H_i, C - H_j), \quad (i, j = a, b, c, d). \quad (21)$$

Aici B în definiția lui τ_k sau $1/h\nu(ij)$ au fost tratate ca o parte a energiei neperturbate a atomilor de H [4]. Aceasta evita necesitatea tratării termenilor B ca perturbatii [4]. De aceea rolul termenilor B este unul trivial, fără influența apreciabilă asupra proprietăților valenței direcționale [4]. Când neglijăm termenii peste λ^4 dezvoltarea în serie a determinantului secular este [4]

$$(W - W_p^C)^3(W - W_s^C) + \lambda^2(a_5W^5 + a_4W^4 + \dots + a_0) + \lambda^4(b_7W^7 + \dots + b_0) = 0 \quad (22)$$

Este ușor de văzut că coeficienții a ai termenilor λ^2 sunt independenți de aranjamentul molecular deoarece suma patratelor cosinusurilor celor trei direcții este egală cu unitatea [4]. Termenii proporționali cu W^5, W^6, W^7 există deoarece relațiile lui Q'_k de mai sus au ca rezultat neliniaritatea în W a elementele determinantului secular definite mai sus [4]. Faptul că ecuația de mai sus este o expresie de gradul șapte în W da aparență superficială a unei probleme seculare de gradul șapte, dar aceasta este numai o iluzie, și pentru aceasta este legitimată considerarea numai a celor patru rădăcini care se reduc la nivelele C la separare C – H infinită [4]. Celelalte trei rădăcini sunt lipsite de orice semnificație, deoarece apropierea de nivelele C a fost presupusă prin reducerea determinantului la ordinul al patrulea [4]. Apariția puterilor mai mari de W^4 în ecuația de mai sus poate fi evitată prin înlăturarea puterilor mai mari ale lui W prin relația aproximativă [4]

$$W^4 = 6w^2W^2 - 8w^3W + 3w^4 + \lambda^2[(6a_5w^2 + a_3)W^3 + (-8a_5w^3 + 6a_4w^2 + a_2)W^2 + \dots] \quad (23)$$

obținută rezolvând ecuația de mai sus mai întâi cu $\lambda = 0$ și apoi corectând pentru λ^2 inclusiv [4]. Pentru simplitate aici originea pentru energie a fost aleasă astfel încât rădăcina medie este zero când $\lambda = 0$, adică astfel încât $W_s^C = -3w$, $W_p^C = w$ unde $4w$ este separarea s – p a carbonului [4]. Într-adevăr, calculând separarea s – p a carbonului obținem $W_p^C - W_s^C = w + 3w = 4w$. Prin această presupunere nu se pierde generalitatea și simplifică substanțial calculele [4]. Astfel ecuația seculară de mai sus se transformă într-o ecuație de gradul patru $AW^4 + BW^3 + \dots = 0$ [4]. Astfel suma X a celor patru rădăcini relevante este [4]

$$X = -\frac{B}{A} = -$$

$$\frac{\lambda^2[6a_5w^2 + a_3] + \lambda^4[b_3 + a_3a_4 + a_2a_5 + w^2(6b_5 + 12a_4a_5) - 8w^3(b_6 + a_5^2) + 39b_7w^4] + \dots}{1 + \lambda^2a_4 + \dots} \quad (24)$$

Se poate nota ca absenta ortogonalitatii are ca o consecinta faptul ca procedeul este mult mai complicat decat ar fi în cazul opus [4]. dacă se presupune ortogonalitatea perfecta si se considera $T = 0$ nu vor fi termeni mai mari de W^4 în ecuația seculara de ordinul patru de mai sus si în ecuația dezvoltarii în serie a determinantului secular în care am neglijat termenii cu puteri mai mari de λ^4 si se poate folosi relatia uzuala $X = -\sum L(ii)$ care în prezent este invalidata de ne-ortogonalitate [4]. Este clar ca problema este aceea a ecuatiei seculare cu determinantul de ordinul patru amintita mai sus si a ecuatiei obtinuta prin dezvoltarea în serie a determinantului secular si neglijarea termenilor cu puteri mai mari de λ^4 , deoarece suntem interesati numai de suma jumatatii radacinilor [4]. Aproximatia de a presupune ortogonalitatea nu apare legitima deoarece din ecuatiile de mai sus rezulta ca T este de același ordin de marime ca $Q/h\nu(C; H)$, în afara de cazul în care intamplator Q si R sunt foarte aproape egale [4]. Desi ne-ortogonalitatea invalideaza relatia ordinara, este înca mult mai usor sa se calculeze suma decat radacinile individuale, deoarece ultima varianta pretinde rezolvarea unei ecuatii de ordinul patru, care a fost evitata în [4].

Cand se calculeaza explicit coeficientii ecuatiei dezvoltarii în serie a determinantului secular în care am neglijat termenii cu puteri mai mari de λ^4 cu ajutorul ecuatiilor de mai sus, pentru X rezulta ecuația [4]

$$X = \alpha + \beta \vec{p}^2 + \gamma \sum_i \sum_j (\vec{i} \cdot \vec{j})^2 \quad (25)$$

în care α, β, γ sunt independenti de aranjamentul atomilor de H, $(\vec{i} \cdot \vec{j})$ este definit ca mai sus si este cosinusul unghiului dintre legaturile celor doi atomi de H i si j cu atomul de C, si $\vec{p}$ este un vector cu componentele $\sum l_i, \sum m_i, \sum n_i$ [4]. Acest vector este în mod clar proportional cu momentul electric al moleculei [4]. în particular este demn de mentionat ca gradul nostru de aproximare λ^4 are ca rezultat o dependenta lui X de aranjamentul molecular, adica de

$l_1, l_2, \dots, n_4$, numai prin cele doua combinatii $\sum_i \sum_j (\vec{l} \cdot \vec{j})^2$ si $\vec{p}^2$ [4]. Coeficientii din ecuația de mai sus în termenii integralelor au ecuațiile [4]

$$\frac{\gamma}{\lambda^4} = \frac{1}{2} \tau_p^2 (C_\sigma - C_\pi) Q_\sigma^2 + \frac{1}{2} \tau_p^3 Q_\sigma^4 + 2\tau_p (C_\sigma - C_\pi) T_\sigma Q_\sigma + 2\tau_p^2 Q_\sigma^3 T_\sigma \quad (26)$$

Problema importanta acum este aceea a semnelor lui β si γ [4]. Ambele sunt pozitive din cauza urmatoarelor consideratii [4]. Am mentionat deja mai sus ca C, D, Q, T se pot considera pozitive, si τ este pozitiv conform ecuatiei de mai sus [4]. în continuare $C_\sigma - C_\pi$ este pozitiva deoarece functia de unda σ_i se suprapune, acopera, peste atomul de hidrogen H_i mult mai mult decat functiile π_i [4]. Prin urmare fiecare termen din ecuația lui γ este pozitiv [4]. ecuația lui β contine doi termeni negativi, dar acestia au o importanta inferioara din urmatoarele motive [4]. în primul rand, separarea $s - p$ a carbonului $4w$ poate sa fie mica comparativ cu separarea τ dintre nivelele H si C [4]. în cazul acesta Tw va fi mic în comparatie cu Q, deoarece ecuațiile de mai sus arata ca T este de ordinul de marime al lui Q/τ deoarece Q si R sunt de obicei de același ordin de marime [4].

Deoarece molecula de HCl este o molecula ionica [2,5], aceasta este un caz în care se poate aplica aceasta metoda simplificatoare. Se considera $a_0 = 5.29 \times 10^{-11} m$ [5,23].

Starea 1s a atomului cu un electron fara ecranare are functia de unda [5]

$$\psi(1s; Z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (27)$$

Starea 2s a atomului cu un electron fara ecranare are functia de unda [5]

$$\psi(2s; Z) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \quad (28)$$

Pentru atomul cu un electron o stare $2p\sigma$ are $m_l = 0$ si are functia de unda [5]

$$\psi(2p\sigma; Z) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos \theta \quad (29)$$

Pentru atomul cu un electron o stare $2p\pi$ are $m_l = \pm 1$ si are functia de unda [5]

$$\psi(2p\pi; Z) = \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (30)$$

Se poate face aproximatia ca în cazul moleculei de CH_4 conform metodei Hund [4] prezentata mai sus functiile de unda prezentate mai sus se calculeaza cu sarcinile corespunzatoare ale atomilor de H si C care rezulta prin ecranare.

Van Velck si Sherman au discutat multe argumente pentru care teoria moleculara a lui Heitler, London, Slater si Pauling, nu ar fi precise, în mod special în forma simplificata în care este aplicata în mod uzual [13]. Insa, asa cum au subliniat si ei, tocmai aceasta forma simplificata s-a bucurat de cel mai mare succes [13]. Lucrarea [13] constituie o continuare a evidentelor eficientei acestuia, într-un grup de molecule neincercate inca, în mod concret în hidrati de tipul XH , unde X reprezinta un element din primul rand al tabelului periodic: B, C, N, O sau F [13]. Lucrarea [13] este de asemenea utila în calcularea anumitor molecule mai complicate, ca de exemplu CH_4 si H_2O [13]. Teoria simplificata HLSP calculeaza energia unei molecule poliatomice în termenii parametrilor energiei caracteristic perechilor de atomi din molecula, si parametrii energiei pentru perechi XH se gasesc desigur aici [13].

Prin alegerea corespunzatoare a orbitalilor atomici, se pot calcula valori ale acestor parametri [13]. Dar o metoda de evaluare mai putin laborioasa (si, pentru scopul lucrarii [13], mai precisa) este cea empirica [13]. Parametrii sunt astfel alesi incat sa aiba ca rezultat ca expresiile teoretice ale energiei sa reprezinte cat mai precis nivelele de energie cunoscute ale moleculelor XH [13].

În continuare se prezinta expresiile teoretice ale energiei [13]. Se considera XH ca fiind format din atomul X în configuratia ei normala $1s^2 2s^2 2p^n$ plus atomul de H în configuratia $1s$ [5,13,14]. Orbitalele $2p$ ale atomului X pentru $\lambda = 0, 1, si -1$, si orbita $1s$ a atomului de H sunt notate, respectiv, cu σ, π_+, π_- , si σ_H [13]. Pentru orbitalele $1s$ si $2s$ ale lui X nu sunt date simboluri speciale, deoarece pentru aproximatia din [13] contributiile la energie ale acestor orbite sunt identice pentru variatele stari ale unei molecule date si din aceasta cauza se pot combina cu termenii de tip Coulombian [13]. O configuratie moleculara tipica este atunci $\sigma^2 \pi_+ H$, care reprezinta o stare Π a NH [5,13,14].

În continuare în articolul [13] se presupune ca

(1) Toate configuratiile, diferite de cele de tipurile descrise mai sus, se pot neglija [13]. Din aceasta cauza nu luam în considerare efectele perturbatoare ale configuratiilor ionice, ca cele date de configuratia $1s^2 2s^2 2p^{n+1}$, în care toti electronii sunt atasati efectiv de nucleul X [13]. Nu luam în considerare nici configuratii în care unul din electronii lui X este excitat, de exemplu $1s^2 2s 2p^{n+1} H$ [13]. În plus, neglijam interactiile între configuratiile pe care le-am considerat (de exemplu în NH, $\sigma^2 \pi_+ H$ si $\pi_+^2 \pi_- H$ [13]) [13].

(2) Toti orbitalii sunt ortogonali unul pe celalalt [13].

(3) Marimea unei integrale de schimb (definita mai jos) este aproximativ proportionala cu valoarea suprapunerii orbitelor considerate în acest schimb [13]. De aceea $|J_{\sigma H}| \gg |J_{\pi H}|$ [13].

(4) Termenii Coulomb nu sunt directionali [13]; adica $K_{\sigma H} = K_{\pi H}$ [13].

(5) Starile unei molecule date au aceasi separatie de echilibru, r_e , astfel încat parametrii (integralele Coulomb si de schimb) au valori identice pentru toate starile unei molecule date [13]. Calculele pentru starile de repulsie se refera numai pentru aceasta separatie identica, desigur similar cu aplicatiile parametrilor la molecule poliatomice [13]. Din fericire, moleculele considerate în [13] se conformeaza cu suficienta precizie la aceasta presupunere [13]. Notam ca valorile lui r_e pentru molecule diferite nu trebuie sa fie egale [13].

Aceste presupuneri sunt aproximativ analoage cu cele facute de Eyring si colegii lui în calculele lor ale energiei de activare [13]. Cu toate acestea, în [13] se iau în considerare proprietatile directionale ale orbitalilor, precum si energia interna a atomului X, si de aceea ar trebui sa se obtina rezultate mai precise [13].

Modelul vector al lui Dirac, asa cum a fost folosit de Van Vleck si Serber, ofera poate cea mai eleganta metoda pentru calculul expresiilor energiei [13]. Pe baza presupunerilor (1) si (2) de mai sus, este nevoie doar de formula fundamentala a matricii Hamiltoniene [13]:

$$\mathcal{H} = \sum_{\text{toate perechile}} K_{ij} - \sum_{i,\mu} J_{i\mu} - 2 \sum_{\mu > \nu} J_{\mu\nu} - \sum_{i > j} \frac{1}{2} (1 + 4 \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) J_{ij} \quad (31)$$

unde K_{ij} si J_{ij} sunt, respectiv, integralele Coulomb si de schimb între orbitele i si j [13]

$$K_{ij} \equiv \iint \psi_i^*(1)\psi_j^*(2)\mathcal{H}\psi_i(1)\psi_j(2)d\tau_1d\tau_2,$$

$$J_{ij} \equiv \iint \psi_j^*(1)\psi_i^*(2)\mathcal{H}\psi_i(1)\psi_j(2)d\tau_1d\tau_2. \quad (32)$$

Subscripturile Roman si Grec ale J-urilor se refera, respectiv, la orbitali liberi si ocupati, de exemplu la acei orbitali care apar odata si la acei orbitali care apar de doua ori în configuratie [13].

Pentru a determina valorile caracteristice ale lui $\mathcal{H}$, este nevoie de cele ale lui $\sum \left[\frac{1}{2} (1 + 4\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) J_{ij} \right]$ [13]. Acestea, pentru cazul articolului [13], si pentru valori variate ale spinului total S, sunt [13]

2 electroni liberi:

$$S = 1: -J_{12}$$

$$S = 0: +J_{12}$$

3 electroni liberi:

$$S = \frac{3}{2}: -J_{12} - J_{13} - J_{23}$$

$$S = \frac{1}{2}: \pm 2^{-\frac{1}{2}} [(J_{12} - J_{13})^2 + (J_{12} - J_{23})^2 + (J_{13} - J_{23})^2]^{\frac{1}{2}}$$

4 electroni liberi, cu $J_{13} = J_{23}, J_{14} = J_{24}$:

$$S = 2, S_{12} = 1: -J_{12} - J_{34} - 2J_{13} - 2J_{14}$$

$$S = 1, S_{12} = 1: -J_{12} - \frac{1}{2}J_{13} - \frac{1}{2}J_{14} \pm \left[\left(J_{34} - \frac{1}{2}J_{13} - \frac{1}{2}J_{14} \right)^2 + 2(J_{13} - J_{14})^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$S = 1, S_{12} = 0: +J_{12} - J_{34} - J_{13} - J_{14}$$

$$S = 0, S_{12} = 1: -J_{12} - J_{34} + J_{13} + J_{14}$$

$$S = 0, S_{12} = 0: +J_{12} + J_{34} - J_{13} - J_{14} \quad (33)$$

Formulele pentru cazurile cu 2 si 3 electroni liberi sunt bine cunoscute [13]. Cele pentru cazul cu 4 electroni, pe baza presupunerii facute mai sus ca doua perechi de J-uri sunt egale, se pot calcula printr-o varianta a metodei de inspectie a lui Goudsmit, deoarece aceasta presupunere reduce problema la acea a trei vectori, $\vec{s}_3, \vec{s}_4$ si $\vec{S}_{12} \equiv (\vec{s}_1 + \vec{s}_2)$ [13]. Obținerea acestor rezultate este de asemenea posibila din lucrarea lui Johnson, Schlapp, sau în mod special Merrill despre problema mai generala a 4 vectori [13]. O alta cale de calcul a acestor formule este cea a matricilor explicate a permutarilor data de Serber [13].

Singura problema cu 4 electroni considerata în [13] este acea a configuratiei $\pi_+\pi_-\sigma H$ a NH [13]. Din consideratii de simetrie evidente, $J_{\sigma\pi_+} = J_{\sigma\pi_-}$, si $J_{H\pi_+} = J_{H\pi_-}$; si aceasta este cauza pentru care valorile caracteristice au fost tabelate în [13] numai pentru problema restrictionata, constransa, a celor patru electroni [13]. în continuare în aceasta problema, ca în oricare alta care implica o pereche de electroni liberi $\pi_+\pi_-$, starile sunt Σ^+ sau Σ^- care corespund valorilor 0 sau 1 ale lui $S_{\pi_+\pi_-}$, respectiv [13].

J-urile si K-urile atomice se pot evalua în termenii parametrilor F_0 si F_2 ale lui Slater-Cordon-Shortley [13]

$$J_{\pi\sigma} = 3F_2$$

$$J_{\pi_+\pi_-} = 6F_2$$

$$K_{\sigma\sigma} = F_0 + 4F_2$$

$$K_{\pi\sigma} = F_0 - 2F_2$$

$$K_{\pi_+\pi_-} = F_0 + F_2 \quad (34)$$

Este convenabil sa se includa în energiile starilor moleculare energiile starilor atomice în care disocieaza ele; astfel termenii F_0 sunt eliminati [13]. Aceasta este realizata de formulele Slater pentru energiile configuratiilor p^n [13]. De exemplu, starile atomului de N au energiile [13]: $^2P = 3F_0$, $^2D = 3F_0 - 6F_2$, $^4S = 3F_0 - 15F_2$ [13].

J-urile si K-urile moleculare se vor abrevia prin omiterea subscriptului $_H$ [13]; astfel $J_\sigma \equiv J_{\sigma H}$, etc. [13]. în Tabelele I-IV, s-a folosit faptul ca $|J_\sigma|$ este mai mare decat alta J-uri

(presupunerea 3) pentru a dezvolta toate radacinile patratice în expresii liniare în J -uri [13]. Aceasta este efectiv aproximatia imperecherii electronilor [13]. Aceasta este o aproximatie buna în [13] (eroarea maxima rezultata este 0.05 volti) si este datorata în parte egalitatii aproximative a lui $J_{\pi H}$ si $J_{\pi \sigma}$ [13].

În continuare se prezinta determinarea parametrilor [13]. Desi exista cinci parametrii în mod explicit în expresiile energiilor, spectrul atomic fixeaza valoarea uneia din ele, F_2 [13].

Teoria avlentei a lui Heitler-London-Pauling-Slater a fost aplicata la un numar de probleme care apar pentru compusii carbonului, si s-a dovedit corecta în explicarea unor proprietati observate [14]. Van Velck, si Penney au examinat efecte directionale; Serber a calculat energiile hidrocarburilor, si s-au realizat multe alte aplicatii, în general, cu rezultate bune [14]. Pentru ca aceste rezultate sa pastreze validitatea, trebuie aratat ca metodele de calcul nu sunt supuse unor modificari serioase [14]. Teoria obisnuita presupune ca o valenta din cele patru ale atomului central de carbon este într-o configuratie cu patru orbite diferite; aceasta inseamna ca este într-o stare excitata [14]. În nici unul dintre cazuri nu s-a luat în calcul efectul posibil al altor configuratii, ca de exemplu s^2p^2 , care poate sa rezoneze cu starea excitata si astfel sa permita ca atomul de carbon sa formeze legaturi mai stabile [14]. De aceea este important de a stabili dacă astfel de configuratii de energie joasa altereaza apreciabil proprietatile teoretice ale valentei ale carbonului (sau proprietatile valentei teoretice) [14]. În [14] este dat un calcul conceput sa raspunda la aceasta intrebare [14]. Trebuie notat ca în orice caz metoda H-L-P-S este departe de a fi perfecta; dar în afara de a oferi o descriere simpla a fenomenului valentei, are semnificatie calitativa si este importanta pentru gradul valentei (numarul valentei) [14].

În continuare se prezinta configuratiile considerate [14]. Pentru conveniente calculul este bazat pe cele patru functii de unda tetraedrice hibridizate sp^3 : $t_i = \frac{1}{2}\psi(2s) + (3/4)^{\frac{1}{2}}\psi(2p\sigma_i)$, unde $i = a, b, c$ sau d este una din cele patru directii tetraedrice, si $\psi(2p\sigma_i)$ inseamna o functie de unda a carbonului $2p\sigma$ referitoare la directia i [14]. Aceasta nu implica pierderea generalitatii, deoarece patru astfel de functii ortogonale sunt la fel de bune ca sistem de referinta ca starile uzuale s si p [14]. În [14] sunt considerate trei tipuri de configuratii: **A** acela în care fiecare din cele patru orbite este ocupat de un electron, $t_a t_b t_c t_d$; **B** acela cu o orbita ocupata de doi electroni, sau plina, $t_a^2 t_b t_c$, etc.; si **C** acelea cu doua orbite pline, $t_a^2 t_b^2$, etc. [14]. **A** este

configuratia folosita în mod uzual pentru carbonul cuadrivalent [14]. Dupa cum se arata în [14], includerea lui **B** si **C** este echivalenta cu considerarea configuratiilor carbonului s^2p^2 , sp^3 si p^4 [14].

Cel mai simplu compus cuadrivalent al carbonului este metanul, si aceasta este molecula tratata în [14]. în continuare **A**, **B** si **C** vor semnifica configuratia moleculei complete, incluzand cele patru orbite de hidrogen [14].

În continuare se prezinta matricea energiei a metanului [14]. Simetria tetraedrica a CH_4 (grupul punctual T_d) cauzeaza o considerabila rupere a matricii energiei [14]. De interes principal este segmentul de energie minima, acela implicand stările de singlet simetrice [14]. Numarul acestor stări se poate determina prin metode generale a teoriei grupurilor [14]. Pentru o configuratie **A**, cu opt orbite neidentice, degenerarea produsa de permutari conduce la 14 stări de singlet, dupa cum se poate deja vedea din diagrama de ramificare [14]. Eyring, Frost si Turkevich, si Seitz si Sherman, au rezolvat problema metanului pentru aceasta configuratie, si au aratat ca numai 3 din cele 14 stări se transforma conform reprezentarii ireductibile simetrice A_1 a lui T_d si prin urmare contribuie la segmentul cu valoarea minima a matricii energiei [14]. Acesti autori au dat de asemenea metode, bazate pe functii proprii, pentru gasirea stărilor simetrice [14]. Poate ca cea mai buna cale pentru determinarea numarului de stări de orice simetrie este folosirea caracterelor grupului permutatiilor, asa cum a fost formulata de Serber [14]. Aceasta conduce pentru CH_4 la rezultatele prezentate în Tabelul I din [14], din care se vede ca simetria reduce o problema de gradul 86 la una de gradul 7 [14]. Pentru a deslusi tabelul, trebuie remarcat ca sunt 12 configuratii de tipul **B**, si fiecare dintre ele are 6 orbite neidentice, si astfel aceasta are ca rezultat obtinerea a 5 stări de singlet [14]. Din totalul de 60 de stări se pot forma numai trei stări simetrice independente (reprezentarea A_1), dupa cum deja a fost aratat în metodele teoretice ale grupurilor [14]. în mod similar, cele 6 configuratii de tipul **C**, cu patru orbite neidentice, au doi singleti fiecare, si se poate arata ca numai o stare simetrica rezulta din cele 12 stări care au rezultat [14]. Rezulta ca segmentul cu energia cea mai mica din matricea energiei pentru configuratiile **A**, **B** si **C** implica sapte stări [14].

În continuare prezentam construirea stărilor de simetrie [14]. O metoda de a afla stările simetrice este de a folosi matricile de transformare reprezentand permutarilor care corespund

operatiilor grupului punctual care se aplica [14]. Aceste matrici pentru opt sau mai putin electroni au fost date de Serber [14]. Starile simetrice se pot gasi si printr-o alta metode mai iluminante ale modelului vector fara a recurge la matrici [14]. Desigur toate variantele modelului vector sunt strans legate; ca metode de atac a problemei degenerarii permutatiilor ele poseda multe avantaje [14].

Starile de singlet variate pentru un sistem de opt electroni se obtin prin considerarea tuturor aranjamentelor posibile în urmatoarea schema [14]: Spinii perechilor de electroni 1 si 2, 3 si 4, 5 si 6, si 7 si 8 sunt cuplati la 0 sau 1 [14]. Vectorii spin $\frac{1}{2}$ ai electronilor se aduna [5]. dacă vectorii spin ai electronilor 1 si 2 au sensuri opuse atunci rezultanta lor este 0, dacă au același sens atunci rezultanta lor este 1. Rezultantele primei si celei de a doua perechi, si celei de a trei si a patra, sunt astfel cuplate la 2, 1, sau 0; si în final cei doi vectori ramasi sunt combinate sa dea rezultanta 0 [14]. Cele 14 stari formate în acest mod sunt aceleasi cu cele folosite de Serber ca baza a matricilor care reprezinta permutarile, si sunt indicate schematic în Figura 1 din [14]. Pentru configuratiile **B** si **C** se pot folosi aceleasi stari, dar sunt permise numai acelea care au spinii electronilor în orite în orbite pline cuplate la 0 [14]. în toate cazurile, notatia orbitelor si a electronilor de pe ele sunt la fel [14].

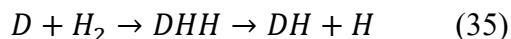
Cu stari construite cum este prezentat mai sus, regula simpla în care starile sunt antisimetrice pentru permutarea a doua orbite cand spinii sunt cuplati la 1, si sunt simetrice cand sunt cuplate la 0, impreuna cu numerotarea judicioasa a electronilor în aria moleculei, este suficienta sa se determine numai una din cele sapte stari simetrice pentru cele trei tipuri de configuratii [14]. Ca exemplu este prezentata constructia celor trei stari pentru configuratia **A** [14]. Sa notam orbitalele carbonului cu 1, 3, 5, 7 si orbitalele hidrogenului legate de ele cu 2, 4, 6, 8, respectiv [14]. Sa consideram schema de cuplaj ca mai sus, si sa consideram starea în care 1 si 2, si celelalte trei perechi asociate cu legaturile tetraedrice, sunt cuplate la 0 [14].

Cand doi atomi formeaza un singur sistem energia starii fundamentale se desparte în doua [5]. Pe un nivel de energie se pot afla doi electroni cu spini opusi [5]. Aceasta proprietate se aplica si la orbite moleculare dupa cum este prezentat în continuare. în [16] este aratat ca starea

fundamentala stabila a moleculei este cea în care pe cea mai înalta orbita moleculara ocupata (HOMO), formata din doua orbite, se afla doi electroni cu spini paraleli, cate un electron pe fiecare orbita, si ca starea în care pe o orbita din aceste doua orbite se afla doi electroni cu spini opusi este mai putin stabila.

În acest context prezentat mai sus pentru molecula CH_4 rezulta ca starea stabila corespunzatoare electronilor 1 si 2 este cea în care acestia sunt cuplati la 1. Aplicand acest rezultat pentru toate cele patru perechi de electroni rezulta ca pentru starea stabila acestia sunt cuplati astfel incat fiecare pereche este cuplata la 1.

Cele mai simple sisteme triatomice sunt cele formate din trei nuclee de hidrogen [15]. Molecula triatomica neutra este de interes particular deoarece este intermediarul în reactii de tipul [15]



si de asemenea în coversia orto-para a hidrogenului [15].

Au fost considerate variate aproximatii pentru energia H_3 [15]. London a propus sa se foloseasca orbitali atomici de hidrogen si sa se neglijeze toate în afara de integralele biatomice Coulomb si de schimb [15]. Aceasta a condus la valori prea mari pentru H_3 dupa cum se stie prin comparatie cu experimentele si anumiti termeni neglijati sunt de același ordin de marime ca acea care sunt pastrati [15]. Coolidge si James au calculat energia pentru o singura configuratie pentru molecula H_3 liniara si simetrica folosind orbitali atomici de hidrogen pentru a forma cea mai joasa stare homopolara [15]. Configuratia lor particulara da o energie cu mai mult de jumatate de volt mai mare decat cea pe care ei ar fi obtinut-o pentru o distanta interatomica mai mare [15]. În [15] este mentionat ca o discutie critica despre metoda semi-empirica de calcul a energiilor de activare a lui James si Coolidge va fi data într-o alta lucrare [15].

În lucrarea [15] se deduce o metoda variationala pentru energie pentru toate configuratiile liniare simetrice folosind orbitali atomici de tip hidrogen (de tipul $1s$) pentru a forma urmatoarele patru functii proprii [15]

(a) cea mai buna funcție homopolara.

(b) cea mai buna combinatie liniara de functii polare si homopolare.

(c) functia proprie a lui (a) cu sarcina efectiva variata sa dea cea mai mica energie.

(d) functia proprie de tipul din (b) obtinuta prin variatia simultana a constantei de ecranare si a compozitiei polare-homopolare.

În continuare în [15] se calculeaza energia moleculei triatomice de hidrogen [15]. Toate integralele folosite în [15] pentru calcularea energiei moleculei de hidrogen triatomice sunt definite si discutate în appendixul lucrării [15]. Operatorul Hamiltonian pentru energia electronica este [15]

$$H = H_A + H_B + H_C + H_D \quad (36)$$

unde [15]

$$H_A = -(\hbar^2/8\pi^2m)[\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2] \quad (37)$$

= energia cinetica a electronilor,

$$H_B = e^2[r_{ab}^{-1} + r_{ac}^{-1} + r_{bc}^{-1}] \quad (38)$$

= energia mutuala de repulsie a nucleelor,

$$H_C = -e^2 \sum_{i=1}^3 [r_{ai}^{-1} + r_{bi}^{-1} + r_{ci}^{-1}] \quad (39)$$

= energia de atractie a electronilor de nuclee,

$$H_D = e^2[r_{12}^{-1} + r_{13}^{-1} + r_{23}^{-1}] \quad (40)$$

= energia mutuala de repulsie a electronilor.

Aici a, b si c sunt atomi aranjati în configuratia liniara simetrica cu b atomul central [15]. Distanța dintre atomii vecini este Ra_0 ($a_0 = 0.528 \text{ \AA}$, adica raza primei orbite Bohr a atomului de hidrogen) [15]. Electronii sunt notati cu 1, 2, si 3 [15]. r_{ij} este distanta dintre particula i si j [15]. Energia calculata pentru molecula este data de [15]

$$E = \iiint \psi^* H \psi d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 / \iiint \psi^* \psi d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 \quad (41)$$

Datorita principiului variational E este energia actuala a moleculei cand ψ este cu adevarat o funcție proprie a lui H , si E este mai mare decat cea mai mica energie a moleculei cand ψ este numai o funcție proprie aproximativa [15]. în aceasta tratare în [15] se obtine energia folosind tipuri variate de functii proprii aproximative construiti din orbitali atomici 1s de hidrogen [15]

$$\left. \begin{aligned} a(1) &= (z^3/\pi)^{\frac{1}{2}} e^{-zr_{a1}} \\ b(1) &= (z^3/\pi)^{\frac{1}{2}} e^{-zr_{b1}} \\ c(1) &= (z^3/\pi)^{\frac{1}{2}} e^{-zr_{c1}} \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

unde z este sarcina efectiva nucleara [15]. Aceste functii proprii trebuie sa fie antisimetrice la o schimbare reciproca a oricaror doi electroni din cauza principiului de excluziune a lui Pauli [15]. Fara pierderea generalitatii acestea sunt luate ca functii proprii pentru S^2 si S_z , componenta patratica si componenta z a spinului total, respectiv; cea mai mica energie corespunde de obicei la cea mai mica valoare permisa a lui S^2 [15]. Faptul ca H este simetrica la o schimbare reciproca a atomilor a si c , permite ca functiile proprii sa fie separate în functii simetrice si antisimetrice la aceasta schimbare reciproca, si cele doua tipuri de functii nu se combina [15]. în aproximatia London, adica în care integralele de schimb si de suprapunere sunt neglijate, este usor de aratat ca functiile proprii antisimetrice corespund la starile cu cea mai mica energie [15]. Acesta este si cazul pentru calculele din [15].

În continuare se prezinta aproximatia Heitler-London [15]. Cea mai simpla funcție proprie care se poate lua pentru molecula de hidrogen triatomica corespunde la o stare homopolara pura cu $z = 1$ [15]. Aceasta funcție proprie este analogul tri-atomic al celui folosit de Heitler si London (H.L.) molecula normala diatomica de hidrogen, si este de asteptat ca energia obtinuta în aceasta maniera pentru molecula tri-atomica sa fie de același ordin de precizie [15]. Se pot forma doua functii proprii de acest tip: ψ_5 care este simetrica la schimbarea reciproca a atomilor a si c si corespunde la legatura $a - c$; ψ_1 este antisimetrica la aceasta schimbare reciproca si corespunde la o legatura între a si b care alterneaza cu o legatura între b si c [15]. Cu notatia [15]

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \alpha \end{pmatrix} = (3!)^{-\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} a(1)\alpha(1) & b(1)\beta(1) & c(1)\alpha(1) \\ a(2)\alpha(2) & b(2)\beta(2) & c(2)\alpha(2) \\ a(3)\alpha(3) & b(3)\beta(3) & c(3)\alpha(3) \end{vmatrix} \quad (43)$$

unde $\alpha(1)$ si $\beta(1)$ sunt functii de spin ale electronului 1 care sunt functii proprii, respectiv, pentru $S_{z1} = \frac{1}{2}h/2\pi, -\frac{1}{2}h/2\pi$ [15].

$$\begin{aligned}\psi_1 &= 2 \begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \alpha \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a & b & c \\ \beta & \alpha & \alpha \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \alpha & \beta \end{pmatrix} \\ \psi_5 &= \begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \alpha & \beta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a & b & c \\ \beta & \alpha & \alpha \end{pmatrix} \quad (44)\end{aligned}$$

A fost studiată absorbția unui esanțion de acetona absolută Baker în regiunea de la 1μ la 6.5μ [18]. S-au observat benzi intense la 3.3μ și 5.8μ , și benzi mai slabe la 1.4μ , 2.1μ , 2.7μ , și 4.7μ [18]. În mixtura cu apă s-au observat și benzile apei la 4.7μ și 6.2μ [18].

În articolul [19] este discutată o critică a calculelor energiei de activare ale lui Coolidge and James [19]. Este subliniat că critica lor a propunerii originale a lui London nu se aplică la metoda semi-empirică care în forma ei de la momentul articolului [19] are puțin mai mult decât o asemanare formală cu schema originală [19]. Până la furnizarea unei deduceri satisfăcătoare de mecanica cuantică a metodei semi-empirice, trebuia acceptată utilitatea lui și faptul că este o formulă de interpolare rezonabilă pentru calcularea energiilor moleculelor poliatomice din cele biatomice [19].

În articolul [19] sunt calculate teoretic ratele absolute ale tuturor reacțiilor care implică hidrogen și deuteriu folosind suprafața de energie potențială cea mai potrivită disponibilă [19]. Rezultatele din [19] sunt comparate în [19] cu valorile experimentale [19].

Rata de reacție specifică, k' , adică rata la care are loc o reacție când concentrațiile substantelor care reactionează sunt egale cu unitatea, este de obicei exprimată în forma [19]

$$k' = cZe^{-E/kT} \quad (45)$$

unde Z este numărul de ciocniri ale moleculelor în unitatea de timp și E este energia de activare a reacției [19]. c este eficiența ciocnirii sau raportul numărului de reacții chimice la numărul de ciocniri dintre moleculele în cauză care au o energie cinetică relativ la centrul de masă al acestuia mai mare decât energia E [19].

Intr-o lucrare precedenta, au fost obtinute energiile H_3 si H_3^+ prin metoda variationala pentru configuratii liniare [20]. în lucrarea [20] sunt evaluate integralele dificile pentru trei centre pentru configuratii neliniare cu ajutorul analizorului diferential si se calculeaza energia H_3 si H_3^+ în funcție de unghiul dintre nuclee [20].

Ionul de hidrogen triatomic, H_3^+ , este format în cantitati mari cand gaz de hidrogen este ionizat [20]; molecula de hidrogen triatomica neutra este complexul metastabil format cand atomul de hidrogen se ciocneste cu o molecula de hidrogen [20].

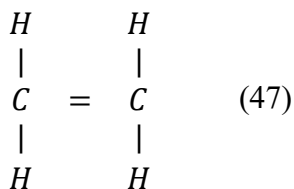
Cateva din dificilele integrale necesare pentru calculele cu metoda variationala a energiei moleculei triatomice de hidrogen si a ionului pozitiv au fost evaluate cu ajutorul analizorului differntial în [21]. în [21] este tabelata integrala

$$\int_0^\pi \exp\left(-B(1 - A \cos \theta)^{\frac{1}{2}}\right) d\theta \quad (46)$$

pentru un domeniu complet de valori ale parametrilor A si B [21].

Succesul metodei de calcul variational depinde de abilitatea de a evalua integralele definite care apar [21].

Etilena are structura [2]



Au fost efectuate mai multe investigatii ale spectrului de infra-roosu si Raman a etilenei, C_2H_4 , cu scopul de a determina dimensiunile moleculare si frecventele fundamentale ale acestei molecule [22]. Nici una din aceste scopuri n-a fost complet atinsa [22]. Din masuratorile fotografice de infra-roosu a fost posibil sa se obtina constantele de rotatie ale C_2H_4 [22]. Acestea nu furnizeaza suficiente informatii sa permita calculul distantelor intermoleculare fara a recurge la o estimare a cel putin uneia dintre dimensiuni [22]. în mod similar, nu este posibila o atribuire unica a frecventelor fundamentale cu datele disponibile [22].

Prin investigarea spectrului de infra-roșu a C_2D_4 și re-examinarea anumitor părți ale spectrului C_2H_4 , s-au obținut date noi care furnizează valori pentru toate dimensiunile moleculare, și de asemenea da o atribuire definitivă ale frecvențelor fundamentale [22].

A fost rezolvată structura fină a anumitor benzi de absorbție în infra-roșu ale C_2H_4 și C_2D_2 [22]. Din constantele rotationale obținute astfel, au fost calculate distanțele C – C și C – H în aceste molecule și s-au găsit valorile 1.353 1.071 Å, și s-a obținut pentru unghiul H – C – H valoarea $119^\circ 55'$ [22].

În [22] C_2D_4 a fost obținut prin reacția dibrom etilenei, $C_2D_4Br_2$ cu zinc într-o soluție de alcool metilic [22].

În calculele despre structura moleculară ori în metoda benzii de valență (valence band VB) sau în metoda orbitalului molecular (molecular orbital MO) în aproximația combinațiilor liniare ale orbitalilor atomici (linear combinations of atomic orbitals LCAO), funcțiile de undă moleculare sunt construite din orbitali atomici (atomic orbitals AO's) [23]. Calculul energiilor, momentelor de tranziție, energiile legăturilor, și ale altor cantități fizice și chimice în final se reduc la evaluarea unui mare număr de integrale peste acești orbitali atomici [23]. Dacă se folosesc orbitali atomici de tipul Slater, atunci toate integralele care implică numai două centre se pot obține în formă analitică apropiată (cu excepția uneia, care este prezentată într-o altă lucrare) [23].

S-au obținut formule convenabile pentru integralele de suprapunere [23]

$$\int \chi_a \chi_b dv \quad (48)$$

integrale de energie cinetică [23]

$$-\frac{1}{2} \int \chi_a \Delta \chi_b dv \quad (49)$$

pentru integralele de atracție nucleară [23]

$$Z \int \chi_a (1/r_a) \chi_b dv, \quad (50)$$

și [23]

$$Z \int \chi_b(1/r_a) \chi'_b dv, \quad (51)$$

si integralele de repulsie Coulomb [23]

$$\iint \chi_a(1) \chi_b(2) (1/r_{12}) \chi'_a(1) \chi'_b(2) dv_1 dv_2 \quad (52)$$

unde $\chi_a, \chi'_a, \chi_b, \chi'_b$ sunt orbitali atomici de tpul Slater pe centrele a si b [23].

Daca abordam problemele de mecanica cuantica ale structurii moleculare printr-o dezvoltare a functiilor de unda în termeni de orbitali atomici (atomic orbitals AO's), atunci ecuatiile diferentiale sunt reduse la ecuatii de matrici si dificultatile se concentreaza în evaluarea integralelor în termeni în care sunt definite elementele de matrice [24].

În [24] este rezolvata problema integralelor de schimb cu doua centre în cel mai general mod pentru orbitali atomici de tip Slater cu numere cuantice efective întregi [24]. În [24] nu se impun alte restrictii în afara de numere cuantice efective si sarcini nucleare efective [24]. Integralele sunt exprimate liniar în termeni de anumite functii auxiliare [24]. Este data o regula de gasire a coeficientilor [24]. Coeficientii sunt calculati explicit pentru toate cazurile care implica orbitali cu numerele cuantice 1, 2, si 3 [24].

Cele mai grele integrale sunt integralele de interactiune electron-electron [24]

$$\left. \begin{aligned} I &= \int dV_1 \int dV_2 (1/r_{12}) \Omega(1) \bar{\Omega}(2) = [\Omega | \bar{\Omega}], \\ \Omega(1) &= \chi_a(1) \chi_b(1), \quad \bar{\Omega}(2) = \chi_c(2) \chi_d(2), \\ (i) &= (X_i Y_i Z_i), \quad dV_i = dX_i dY_i dZ_i, \\ r_{12} &= [(X_1 - X_2)^2 + (Y_1 - Y_2)^2 + (Z_1 - Z_2)^2]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \right\} \quad (53)$$

unde integrarea se efectueaza dupa coordonatele de pozitie ale celor doi electroni, si functiile $\chi_a, \chi_b, \chi_c, \chi_d$ reprezinta orice orbitali atomici ai atomilor a, b, c, d , respectiv [24]. În [24] se folosesc unitati atomice [24]: raza Bohr $a_H = 0.529 \text{ \AA}$ este unitatea de lungime, unitatea de sarcina este sarcina electronului e , unitatea de energie este de doua ori potentialul de ionizare pentru atomul de hidrogen (e^2/a_H) = 27.2 eV [24].

În [26] a fost observat spectrul de absorptie de rezonanta paramagnetica de solitii de trifenilmetil si de dimesitilmetil în benzen. Se presupune în [26] ca structura acestor spectre este

hiperfina, fiind cauzata de interatia dipol-dipol dintre momentele magnetice ale nucleelor de hidrogen si electronul neinperecheat [26].

Metoda numita semi-empirica creata de Eyring et al. a fost larg folosita pentru a interpreta reactii chimice [25]. În [25] este prezentata o noua metoda si este aplicata la un sistem simplu care consta din trei atomi de hidrogen A, B , si C [25].

Daca atomul C este mentinut la distanta infinita, energia potentiala a sistemului este egala cu energia data de doi atomi A si B , care se aproximeaza prin ecuația urmatoare dedusa din metoda Heitler-London, care pentru o stare legata este [25]

$$E_{leg} = \frac{(Q_{AB} + \alpha_{AB})}{(1 + S_{AB}^2)} = \frac{(Q_{AB} + \alpha_{AB})}{(1 + k)} \quad (54)$$

si pentru o stare de antilegatura este [25]

$$E_{ant} = \frac{(Q_{AB} - \alpha_{AB})}{(1 - S_{AB}^2)} = \frac{(Q_{AB} - \alpha_{AB})}{(1 - k)} \quad (55)$$

Energia E_{leg} este data de binecunoscuta funcție Morse [25]

$$E_{leg} = D_e [e^{-2\beta(r-r_e)} - 2e^{-\beta(r-r_e)}] \quad (56)$$

dar E_{ant} nu are o funcție aproximativa [25]. Pentru ultima în [25] este propusa ecuatia

$$E_{leg} = \frac{D_e}{2} [e^{-2\beta(r-r_e)} + 2e^{-\beta(r-r_e)}] \quad (57)$$

care este în buna concordanta cu datele calculate pentru starea $^3\Sigma_u$ a moleculei de hidrogen, unde D_e, β si r_e sunt constante care apar în functia Morse [25]. Considerand k ca o constanta a sistemului considerat, Q_{AB} si α_{AB} se obtin ca functii de r_{AB} inlocuind ultimele doua ecuatii în primele doua [25]. în același mod se pot obtine Q_{BC}, α_{BC} , si Q_{CA}, α_{CA} ca functii de r_{BC} si r_{CA} [25].

Pentru energia potentiala a sistemului cu trei atomi London a dedus o ecuație care a fost folosita de Eyring et al. [25]. Efectuand presupuneri puțin diferite în [25] este dedusa ecuatia

$$E = \frac{1}{1+k} \left\{ Q_{AB} + Q_{BC} + Q_{CA} - \left\{ \frac{1}{2} [(\alpha_{AB} - \alpha_{BC})^2 + (\alpha_{BC} - \alpha_{CA})^2 + (\alpha_{CA} - \alpha_{AB})^2] \right\}^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (58)$$

Ecuatia lui Londn nu contine termenul k [25]. Aceasta corespunde patratului integralei de suprapunere si poate fi atat de mic comparata cu unitatea în domeniul de valori luate în considerare ale lui r incat formula de mai sus nu difera prea mult de formula lui London [25]. Atunci putem obtine energia potentiala a sistemului în funcție de r_{AB} , r_{BC} si r_{CA} [25].

A fost examinat mecanismul despicarii hiperfine observata în spectrul de rezonanta paramagnetica a anumitor radicali aromatici liberi care contin protoni adiacent inelului aromatic [27]. S-a aratat ca marimea interactiei dintre electronul neinperechiat pe un orbital π si un atom de hidrogen care vibreaza este insuficienta pentru a explica despicarea observata [27].

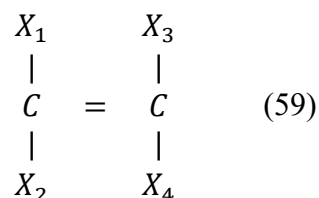
Studii recente a spectrului de rezonanta paramagnetica a solutiilor radicalilor aromatici liberi au aratat existenta unei structuri fine mici dar complexe [27]. A existat o tentativa de a emite concluzia ca aceasta structura este cauzata de interactii intramoleculare hiperfine între protoni si electronul neimperecheat, si confirmarea acestei ipoteze a fost furnizata prin efectuarea analizelor complete al spectrului de metil-substituit si nesubstituit a ionului de p-benzosemiquinone [27]. O caracteristica interesanta al spectrului considerat în [27] este existenta unei despicari de ordinul a doi gausi, atribuita protonilor de pe inelul aromatic [27].

În mod clar, deoarece un electron neimperecheat într-un sistem conjugat este într-o stare π , si deoarece despicarile masurate în solutie sunt cauzate de o densitate de electroni pe protonul considerat, un proton în planul inelului aromatic, care este planul nodal al orbitalului π , nu ar trebui sa produca nici o interactie [27]. Weissman si colaboratorii au sugerat ca aceasta despicare poate sa rezulte din vibratiile de punct zero ale protonilor, si Jarrett si Sloan au propus un cuplaj indirect între momentele electronului si protonului prin intermediul legaturii chimice, de tip similar cu cuplajul între momentele nucleare observate în spectrul de rezonanta magnetica nucleara [27].

Mecanismul care implica vibratia atomilor de hidrogen este incompatibil cu observatiile experimentale [27].

În [34] este prezentat un raport preliminar al rezultatelor studiului cuplajului spi-spin nuclear într-un numar de olefini halogenati lichizi [34]. Spectrele au fost obtinute cu un spectrometru RMN Varian V-4300 de rezolutie mare cu campuri magnetice de 9396 si 9983

gausi, respectiv pentru rezonantele H si F [34]. Olefinii se pot reprezenta în formula generala [34]



Spectrele de RMN obtinute pentru moleculele de mai sus în [34] au fost analizate folosind metode teoretice generale descrise într-o alta lucrare [34]. Cu exceptia $CH_2 = CF_2$, $CH_2 = CFCl$, si al compusilor perfluoro metil, teoria simpla a perturbatiilor de ordinul intai a interactiunii spin-spin explica toti multiplietii observati si intensitatile lor relative [34].

În [28] este aratat ca o polarizare de spin a electronului asociata cu un electron impar pe un orbital molecular π într-un radical aromatic liber poate, printr-un mecanism de cuplaj de schimb atomic, sa produca un rezultat de polarizare de spin de electron apreciabil în orbitali atomici s pe protonii aromatici [28]. Aceasta polarizare de spin rezultanta produce interactii hiperfine cu protoni aromatici care sunt de același ordin de marime ca cele observate în spectrul de rezonanta paramagnetica a radicalilor aromatici liberi [28]. În [28] este dedusa o ecuație care realizeaza legatura constantelor de cuplaj hiperfin (spin-proton)-(spin-electron) cu distributia π a electronului impar în radicali aromatici liberi [28].

Mai multi investigatori au observat interactiile hiperfine ale protonului în spectrul paramagnetic a variatelor tipuri de radicali aromatici liberi [28]. Exemplele includ ionul negativ de naftalina, saruri Wurster, trifenilmetil si dimesitilmetil, semiquinones [28]. Aceste spectre de rezonanta paramagnetica au fost obtinute în solutii lichide [28]. Un alt exemplu legat de aceasta problema este investigarea facuta de B. Venkataraman et al. [27] si prezentata mai sus. Cuplajele hiperfine observate includ cuplaje între protoni aromatici în plan si electronii impari, care se presupune ca sunt confinati pe orbitali moleculari π [28]. Astfel de interactii hiperfine, dacă pot fi folosite pentru a masura densitati de electroni impari pe pozitia variatilor atomi de carbon în sisteme aromatice, ar fi de mare valoare pentru teoreticienii de structura moleculara [28].

În încercarea de a formula o teorie a relației dintre densitățile de electron impar pe atomi de carbon în sisteme aromatice și interacții hiperfine ale protonilor apare un paradox aparent [28]. În primul rând toate interacțiile hiperfine dipolare au media zero din cauza scaderii rapide moleculare în starea lichida [28]. Acestei caderi poate să-i supraviețuiască numai interacțiunea hiperfină de contact (Fermi) [28]. Cu toate acestea, dacă electronul impar într-un radical aromatic liber este confinat pe un orbital molecular π , atunci densitatea de electron impar pe protonii aromatici în plan este zero și interacția hiperfină de contact este zero [28] așa cum s-a aratat în [27] și a fost prezentat mai sus.

A fost aratat că structura hiperfină a protonului într-o serie de ioni semiquinon metilsubstituiți rezulta într-un sens general din interacții de configurație [29]. Un calcul crud al structurii hiperfine (hiperfine structure hfs) al protonului care este așteptată într-o soluție ipotetică a ionilor de $C_2H_4^+$ indică interacția $\sigma - \pi$ responsabilă pentru structura hiperfină a protonilor atașați direct de un inel aromatic [29], concluzie care a fost prezentată și în [27] considerând că electronul neimperecheat este în parte în starea σ și în parte în starea π , și că interacțiunea dintre electronul neimperecheat și protonul din inel care este datorată interacțiunii de configurație dintre stările σ și π .

Printr-o procedură similară cu cea folosită de Abragam, Horowitz, și Pryce în studiile lor ale structurii hiperfine în ioni și atomi paramagnetici, este aratat că interacțiunea configuratională poate să contribuie la interacțiunea izotropă hiperfină în radicali liberi [30].

Portiunea de operator Hamiltonian, H_η , care reprezintă interacțiunea hiperfină izotropă între momentele magnetice de spin ale nucleului și electronului este [30]

$$H_\eta = \frac{8\pi}{3} \vec{\mu}_\eta \cdot \sum_k \vec{\mu}_k \delta(\vec{r}_k - \vec{r}_\eta) \quad (60)$$

în care $\vec{\mu}_\eta$ și $\vec{\mu}_k$ sunt operatorii momentelor magnetice de spin al nucleului și al electronului de ordinul k [30]. Suma se face pe toți electronii [30].

Corespunzător stării cu valoarea proprie $S_z = \frac{1}{2}$, funcția de undă a configurației $(\sigma_B)^2(\pi)$ se notează cu Φ [30].

O alta funcție de unda care este funcție proprie a lui S^2 corespunzător valorii $\frac{3}{4}$ se notează cu Ψ [30].

Dacă se consideră că mixarea configurațională care descrie o stare a sistemului este [30]

$$\chi = \Phi + \lambda\Psi, \quad \lambda^2 \ll 1 \quad (61)$$

atunci se găsește că valoarea așteptată a lui H_η este [30]

$$\langle \chi | H_\eta | \chi \rangle = \frac{32\pi}{3\sqrt{6}} \lambda \mu_\eta \mu_e \sigma_B(\vec{r}_\eta) \sigma_A(\vec{r}_\eta) \quad (62)$$

Spectrul de absorbție de rezonanță paramagnetică de structură izotropă hiperfină (hfs) a protonilor a radicalilor aromatici organici liberi au ca rezultat ordinul de mărime calculat de McConnell și Bersohn care rezultă din interacția de configurație [31].

În vederea interesului recent în factorii care afectează mărimea cuplajului nuclear spin-spin cum s-a observat în spectrul de rezonanță magnetică al protonului al compusilor organici, în [32] sunt prezentate rezultatele unor măsurători a separării de structură fină de ordinul întâi într-o serie de derivați ai etilului și izopropilului [32].

Morine et al. Au propus o metodă de estimare a valorii pătratice medii a amplitudinii din frecvențele modurilor normale de vibrație și au discutat metode aproximative [33]. Această metodă este laborioasă pentru molecule fără simetrie [33]. În [33] s-a calculat valoarea pătratică medie a amplitudinii a legăturii C – O în alcool metilic, $CH_3 - OH$, prin aproximarea acesteia cu o moleculă diatomică [33].

Deși complexul liniar H_3 a primit mare atenție în literatura de specialitate, nu au apărut cele mai bune funcții posibile LCAO-MO construite din funcții Slater 1s, introducând interacții de configurație (CI), variații ale sarcinii nucleare efective și valori exacte ale integralelor pentru variații mici ale distanței internucleare [35]. Astfel de calcule (notate cu I) au fost efectuate pe SEAC [35]. Rezultatele acestor calcule sunt prezentate în [35]. Rezultatele sunt de interes în faptul că sunt disponibile efectele interacțiunii configuraționale de a lungul întregului interval de distanțe internucleare împreună cu efectul variației lui z , a sarcinii, în regiunea de legătură [35].

Includerea corelatiei electronice imbunatateste situatia [35]; este în progres un al doilea calcul (notat cu II), care introduce anumite corelatii prin construirea unor orbitali moleculari diferiti pentru fiecare electron [35].

În primul calcul, pentru $z = 1$ s-a obtinut o energie de legatura de 39.3 kcal pentru $R = 1.95 \text{ au}$ [35]. Pentru a masura lungimi la scara atomica se foloseste des a_0 , raza Bohr [5]. Variatia lui z a deplasat minimul de la $R = 1.95$ la $R = 2.0 \text{ au}$ pentru $z = 0.95$, si a crescut energia de legatura cu 1.8 kcal [35].

În calculele de al doilea tip s-a obtinut energia de legatura imbunatatita de 47.5 kcal pentru $R = 1.0$ la 3.0 în trepte de 0.5 [35].

Relatia dintre lungimea legaturilor carbon-carbon, ordinul legaturii, si natura legaturilor adiacente au primit la data articolului [37] o mare atentie, ca de asemenea corelatia dintre hibridizare si unghiul de legatura [37]. Etilena este în general considerata ca prototipul unei molecule cu o legatura dubla pura si hibridizare sp^2 [37]. Cel mai larg folositi parametrii de structura pentru etilena sunt acea obtinuti din studiul de infrarosu de rezolutie mare de Gallaway si Barker, care au raportat valorile 1.07 Å, 1.353 Å, si 119.9° pentru legatura C – H, legatura C = C, si unghiul H – C – H [37]. Valori mai exacte ai acestor parametrii au fost prezentati în [37].

O valoare mai exacta a lungimii legaturii C – H, notata cu $r_m(1)$, data în termenii pozitiei maximului curbei de distributie radiala, $P(r)/r$, este $1.074 \pm 0.005 \text{ Å}$ [37].

Daca ar fi avut un program de calcul ca Microsoft Mathematics 4.0, oamenii de stiinta, de exemplu autorii articolelor [4,7,13], cu siguranta ca ar fi calculat teoriile complexe pe care le-au elaborat. Dupa cum se poate vedea în articolul [21] au fost calculate multe integrale folosite în energiile moleculelor poliatomice folosind analizorul diferential. Dar Microsoft Matematics 4.0 permite calculul integralelor definite cu rapiditate, a determinantilor si a ecuatiilor.

În articolul [1], se continua dezvoltarea teoriei legaturii de valenta a termenilor spinului electronului de contact în constantele de cuplaj ale perechilor momentelor magnetice nucleare. Formularea imperecherii imperfecte, care a fost propusa anterior pentru interactii proton-proton, si a fost aplicata pentru calculul detaliat a constantei de cuplaj în metan, este extins în articolul [1] la sisteme mult mai complexe [1]. Este aratat ca, în multe cazuri, cuplajul de interes se poate

obține prin includerea numai a unei fracțiuni a numărului total de electroni și a câtorva structuri în setul canonic [1]. Cu aceste simplificări, au fost calculate constantele de cuplaj proton-proton, proton-fluor, și fluor-fluor, pentru nuclee atașate atomilor de carbon învecinate în compusi etanici și etilenici și valorile obținute sunt comparate cu datele experimentale [1].

Constanta de cuplaj $A_{NN'}$ (în unități cps) pentru o pereche de nuclee N și N' este definită de expresia [1]

$$\Delta E_{NN'} = h A_{NN'} \vec{I}_N \cdot \vec{I}_{N'} \quad (63)$$

unde $\Delta E_{NN'}$ este energia de interacțiune dintre cele două nuclee cu spinii $\vec{I}_N$ și $\vec{I}_{N'}$ (în unități $\hbar$), respectiv. Pentru o moleculă $^1\Sigma$ a cărei funcții de undă a stării fundamentale ψ_0 este dată de ecuația [1]

$$\psi_0 = \sum_j c_j \psi_j \quad (64)$$

unde ψ_j sunt structuri canonice neionice de legatură de valență și c_j sunt coeficienți constanți, în [1] este demonstrată o ecuație pentru contribuția de spin a electronului de contact $A_{NN'}$. În această ecuație, pentru contribuția de spin a electronului de contact, apar densitățile electronului în poziția nucleului $N(N')$ [1]

$$\phi_N(0)[\phi_{N'}(0)] \quad (65)$$

În calculul ecuației contribuției de spin a electronului de contact s-a presupus că orbitalii mono-electronici sunt ortogonali și pentru contribuția la densitatea electronului la nucleul N rezultată din orbitalii centrați pe celălalt nucleu s-a presupus că este neglijabilă [1].

Cu ecuația contribuției de spin a electronului de contact, problema principală în calculul lui $A_{NN'}$ (de contact) este aceea de a obține valori rezonabil de precise pentru coeficienții c_j care apar în funcția de undă a stării fundamentale ψ_0 [1]. Deoarece acest lucru trebuie efectuat, în general, prin calcul variațional, munca cerută pentru un sistem de mulți electroni devine neobisnuit de mare dacă trebuie incluși toți electronii și toate structurile canonice de legatură de valență [1]. În multe sisteme, inclusiv în cele discutate în articolul [1], numai câteva din

structurile posibile produc o contributie semnificativa la constantele de cuplaj [1]. Pentru a discuta acest punct, functia de unda ψ_0 se scrie în forma [1]

$$\Psi_0 = c_0\psi_0 + \sum_{j=1}^n c_j\psi_j + \sum_{k>n} c_k\psi_k \quad (66)$$

unde ψ_0 este structura de imperechere perfecta cu legaturi de valenta între perechi de atomi legati chimic si fara legatura de valenta între N si N' , ψ_i sunt structuri de imperechere imperfecta cu o legatura de valenta NN' , si ψ_k sunt structuri de imperechere imperfecta fara legatura de valenta NN' [1]. dacă este satisfacuta conditia $c_0 \gg c_j, c_k$, trebuie inclusi în calcule numai termenii diagonali între ψ_0 si ψ_j , termenii cu ψ_0 si ψ_k nu aduc contributii la cuplaj si contributia tuturor celorlalti termeni fiind mica [1].

Pentru evaluarea coeficientilor din ecuatiile functiilor de unda din [1] este necesara cunoasterea elementelor matricii energiei $\mathcal{H}_{ij}, \mathcal{H}_{ij} = \int \psi_i \mathcal{H} \psi_j d\tau$, unde $\mathcal{H}$ este operatorul Hamiltonian, si a elementelor matricii suprapunerii $S_{ij}, S_{ij} = \int \psi_i \psi_j d\tau$ [1]. Cu ajutorul metodei standard a diagramei legaturii de valenta, aceste elemente de matrice se pot exprima în termeni de integrale Coulomb si de schimb [1].

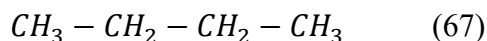
Compusii cu aceasi formula dar structuri diferite se numesc izomeri [8].

Fotoizomerizarea moleculelor a fost îndelung studiata experimental si interpretata teoretic [9]. O descriere completa a procesului de izomerizare pretinde cunoasterea suprafetelor de potential implicate, a interactiunilor dintre aceste suprafete si a dinamicii rezultate a sistemului incluzand trecerea de la o suprafata de potential la alta [9]. în [9] se studieaza izomerizarea *cis-trans* în hidrocarburi nesaturate (de exemplu butene – 2) si se prezinta rezultatele calculelor traectoriilor semiclassical care includ efecte non-adiabatice si trateaza miscarea în spatiul cartezian multidimensional complet al moleculei care este supusa reactiei de izomerizare.

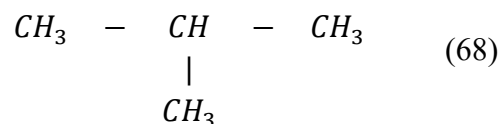
Aproximatii semiclassical pentru procese electronice neadiabatice au fost dezvoltate mai întâi în perioada timpurie a mecanicii clasice de Landau, Zener, si Stückelberg care au considerat tranzitiilor electronice în ciocniri atom-atom, în care s-a condiderat numai în grad de libertate clasic (translatia relativa a nucleelor) [9].

Recent, s-au formulat tratari semiclasice pentru problema multidimensionala care implica tranzitii non-adiabatice [9]. Lucrarea lui Nikitin reprezinta un rod direct a abordarii Landau-Zener- Stückelberg, pe cand cea a altora este bazata pe mai generala si foarte naturala limita semiclasica a formularii drumului integralelor a lui Feynman [9]. Singurele aplicatii publicate ale problemelor multidimensionale sunt calculele în cadrul Landau-Zener- Stückelberg efectuate de Nikitin a dezactivarii nonadiabatice vibrationale în atom, ciocnirea moleculelor diatomice si de Tully si Preston a hoppingului de suprafata în ciocnirile reactive non-adiabatice a $H^+ + D_2$, si de asemenea folosirea abordarii drumului de integrare a lui Feynman intr-un tratament colinear a aceleias reactii realizata de Lyn et al. [9]. Desi extinderea formala ale metodelor semiclasice disponibile la reactii fotochimice de izomerizare cis-trans în etilena si hidrocarburi mai complicate este în principiu simpla, este mai curand dificila în practica [9].

Butanul si izobutanul sunt exemple de izomeri [2]. Ambele au formula moleculara C_4H_{10} [2]. Dar structura butanului este [2]



in care atomii de carbon din capete sunt legati de cate trei atomi de H si de cate u atom de C, iar cei doi atomi de C din interior sunt legati în plus intre iei si de cate doi atomi de H fiecare. Structura izobutanului este [2]



in care atomul de carbon din mijloc este legat de ceilalti trei atomi de carbon.

Pentru indicarea naturii abordarii care se poate folosi si a tipului de rezultate care se pot obtine, în [9] este examinata problema relativ simpla a izomerizarii pentru molecule initial excitate pe starea de triplet $\pi\pi^*$ [9].

În [9] se presupune ca se studieaza numai doua stari electronice, starea excitata de triplet $(\phi_1(\vec{x}, \vec{r}))$, si starea fundamentala de singlet $(\phi_2(\vec{x}, \vec{r}))$, si ca în absenta cuplajului spin-orbita aceste stari satisfac ecuația Schrödinger independenta de timp

$$H(\vec{x}, \vec{r})\phi_i(\vec{x}, \vec{r}) = \epsilon_i(\vec{r})\phi_i(\vec{x}, \vec{r}), \quad i = 1, 2 \quad (69)$$

unde H este hamiltonianul electronic, $\vec{x}$ este vectorul de coordonate electronic si $\vec{r}$ este vectorul de coordonate nuclear, care apar parametric în ecuație. Pentru a fi aplicat aici în teoria semiclasica se presupune ca miscarea nucleara se poate trata clasic, astfel incat $\vec{r} = \vec{r}(t)$ unde t este timpul [9]. Introducerea elementelor de matrice de cuplaj spin-orbita, $\sigma(\vec{r})$, între cele doua stari inseamna ca ele nu mai satisfac exact ecuația de mai sus si ca tranzitia de la una la alta este posibila [9]. dacă scriem functia de unda dependenta de timp sub forma [9]

$$\psi(t) = \sum_{i=1}^2 a_i(t)\phi_i(\vec{x}, \vec{r}) = \sum_{i=1}^2 b_i(t)\phi_i(\vec{x}, \vec{r})\exp\left[-(i/\hbar) \int^t \epsilon_i dt'\right] \quad (70)$$

prin inlocuirea acesteia în ecuația Schrödinger dependenta de timp se obtine [9]

$$\dot{b}_1 = -(i/\hbar)\sigma(r)b_2\exp\left[-(i/\hbar) \int^t \Delta\epsilon dt'\right]$$

$$\dot{b}_2 = -(i/\hbar)\sigma(r)b_1\exp\left[-(i/\hbar) \int^t \Delta\epsilon dt'\right]$$

in care $\Delta\epsilon = \epsilon_1 - \epsilon_2$ [9]. Dand conditiile initiale $|b_2(-\infty)|^2 = 0$, $|b_1(-\infty)|^2 = 1$ (cea ce inseamna ca sistemul este initial excitat pe starea de triplet) , este posibila determinarea probabilitatii finale $|a_i|^2 = |b_i|^2$ de a fi în starea i pentru orice drum $r(t)$ prin integrarea ecuatiilor de mai sus în lungul aceluia drum [9].

In articolul [36] rolul rotatiilor interne contrazicerea aproximatiei Born-Oppenheimer [36].

Determinarea liniilor spectrale de emisie sau absorbtie ale CH_4 pot fi efectuate cu spectrometrul cu prisma din sticla descris în [5,11] si folosirea unei lentile puternice pentru vizionarea spectrului [5,11] sau a unui spectrofotometru cu retea de difracție [17].

In atricolul [35] se obtin valorile distantei interatomice în H_3 corespunzatoare minimului energiei la $R = 2 \text{ ua}$, si $R = 1 \div 3 \text{ ua}$ în trepte de 0.5 ua .

Conform [13] si celor prezentate mai sus electronul aflat pe orbita cea mai exterioara pe starea fundamentala, care este electronul de valenta, al atomului de B se poate afla pe starea,

orbita, σ , π^+ , sau π^- . Confor celor prezentate mai sus rezulta ca în legatura B – H electronul de pe starea 1s al atomului de H poate sa interactioneze cu electronul de valenta al atomului de B care se afla pe una din cele trei stari prezentate mai sus. Atunci configuratiile moleculare tipice ale legaturii B – H pot fi σ_H , π^+_H , si π^-_H .

Prezentam considerentele care conduc la concluzia ca în anumite molecule nu poate sa existe o interactiune configurationala. Presupunem ca o interactiune configurationala exista si în legaturi de tipul C – H, si aceasta interactiune un electron se poate afla în parte într-o stare σ si în parte într-o stare π , si aceasta interactiune este o interactiune între starea σ si starea π ca în [27,29]. Dar în CH_4 toate stările sunt ocupate, si ramane posibilitatea unei astfel de interactiuni configurationale în ioni de tipul CH_4^+ . În astfel de ioni electronul poate apartine mai mult atomului de C si atunci legatura este mai mult ionica, sau poate sa apartina mai mult atomului de H. În primul caz functia de unda a electronului este legata de functia de unda atomica a carbonului, si în al doilea caz este legata de functia de unda atomica a atomului de H. Verificarea unei astfel de interactiuni configurationale se face prin masurarea interactiunii hiperfina ca în [30]. Deoarece stările sunt ocupate si în cazul acesta, ionul în care se poate produce o interactiune configurationala si în care electronul liber poate fi în parte într-o stare σ si în parte într-o stare π poate fi CH_2^+ , în care un electron este liber si lipsesc doi atomi de H din CH_4 , astfel încat o legatura lipseste din lipsa unui atom de H si rezulta un electron liber, si un alt electron liber din lipsa celui de al doilea atom de H este cedat prin ionizare, astfel electronul liber poate sa se afle în parte într-o stare σ si în parte într-o stare π , si cele doua stari pot sa interactioneze. Insa este posibil ca ionii de tipul prezentat anterior sa reactioneze rapid între ei si atunci masuratorile de despicare hiper fina nu se pot efectua.

Observand ca probabilitatea radiala pentru stările de tip hidrogen este semnificativa pentru avlor între $0.01a_0$ si $15a_0$ [5], si de asemenea deoarece starea 1s a hidrogenului nu are o contributie semnificativa atunci cand integrarea acesteia se face cu limita maxima mai mica cu $2a_0$, vom efectua integrala între aceste valori. Pentru alte cazuri se poate efectua o integrare cu o limita cu $2a_0$ mai mare. Pentru stările 2p se poate aplica aceasi limita de integrare de $15a_0$. Pentru stările 3s, 3p, si 3d se poate aplica limita de integrare de $25a_0$, la care se poate aduna

distanța dintre nuclee din aceleași motive. Coordonatele sferice au valori între $0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$ [5]. În calculul integralei de mai jos se folosesc coordonatele sferice [5]

$$x = r \sin \theta \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

Se considera poziția nucleului de carbon în centrul sistemului de coordonate și poziția nucleului de hidrogen, notată cu r' , deplasată pe axa x cu distanța internucleară [5]. Atunci funcția de undă a stării 1s a atomului de H este funcție de coordonata $\vec{r}'' = \vec{r} - \vec{r}'$ [5]. Observăm că se modifică numai coordonata x de care depinde funcția de undă a atomului H.

Pentru calculele integralelor (9) folosind orbitalii atomici (27) – (30) se pot considera sarcinile ecranate ale atomilor de hidrogen $\alpha_i, i = 1 - 4$, și sarcina atomului de carbon $Z + \sum_{i=1}^4 \alpha_i$. Pentru simplificarea calculelor se poate considera că α_i sunt egale și dacă se verifică rezultatele experimentale prin calculele nivelelor de energie din ecuația seculară atunci se poate adapta această aproximație. Această simplificare are utilitate didactică și în cercetare. De asemenea se poate considera că structura moleculei de CH_4 este tetraedrică și că muchiile din vârful piramidei triunghiulare în care se află un atom de H la ceilalți trei atomi de H sunt egale. Atunci sarcina atomului de C este $Z + 4\alpha$.

Pentru $k = s$ integrala T_s este

$$T_s = (1 - \alpha)^{\frac{3}{2}}(6 + 4\alpha)^{\frac{3}{2}} \iiint \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(1-\alpha)r''}{a_0}} \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{(6 + 4\alpha)r}{a_0}\right) e^{-\frac{(6+4\alpha)r}{2a_0}} dv$$

Valoarea lui α se poate modifica din aproape în aproape pentru obținerea rezultatului corespunzător, dacă acesta este cunoscut. În scop didactic, demonstrativ considerăm $\alpha = 0.2$. Considerăm $a_0 = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$, $dr = dx dy dz$. În coordonate sferice $dv = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$. Integrarea se face pentru $0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Considerăm ipotetic, fără a cunoaște cu precizie, că distanța dintre nuclee, ca $x' = 2a_0$. Rezultă integrala

$$T_s = 0.8^{\frac{3}{2}}(6.8)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \iiint e^{-\frac{0.8\sqrt{(r \sin \theta \cos \varphi - 2a_0)^2 + (r \sin \theta \sin \varphi)^2 + (r \cos \theta)^2}}{a_0}} \left(2 - \frac{6.8r}{a_0} \right) e^{-\frac{6.8r}{2a_0}} r^2 \sin \theta \, dr d\theta d\varphi$$

$$r = xa_0, 0.01 \leq x \leq 15$$

$$T_s = (5.44)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \iiint e^{-\frac{0.8\sqrt{(x \sin \theta \cos \varphi - 2)^2 + (x \sin \theta \sin \varphi)^2 + (x \cos \theta)^2}}{1}} (2 - 6.8x) e^{-\frac{6.8x}{2}} x^2 \sin \theta \, dx d\theta d\varphi$$

$$T_s = 0.714 \iiint e^{-\frac{0.8\sqrt{(x \sin \theta \cos \varphi - 2)^2 + (x \sin \theta \sin \varphi)^2 + (x \cos \theta)^2}}{1}} (2 - 6.8x) e^{-\frac{6.8x}{2}} x^2 \sin \theta \, dx d\theta d\varphi$$

Cu Microsoft Mathematics 4 nu se poate efectua integrala definita decat pentru functii care au primitiva analitica, iar aceasta integrala nu are primitiva analitica. Aceasta integrala se poate rezolva numeric pentru trepte mici în x , θ si φ si rezultatele se aduna conform ecuatiei

$$\sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N f(x_i, \theta_j, \varphi_k) \Delta x_i \Delta \theta_j \Delta \varphi_k$$

Acesta metoda de calcul al integrali se poate realiza cu Microsoft Mathematics 4.

Dintre integralele din ecuatiile (9) si folosind ecuatiile (27)-(30) integrala R_s , cu $V_C = \frac{(4\alpha+6)e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$, este

$$R_s = -(1-\alpha)^{\frac{3}{2}}(6+4\alpha)^{\frac{3}{2}} \frac{(4\alpha+6)e}{4\pi\epsilon_0} \iiint \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(1-\alpha)r''}{a_0}} \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{(6+4\alpha)r}{a_0} \right) e^{-\frac{(6+4\alpha)r}{2a_0}} \frac{1}{r} dv$$

$$R_s = -0.8^{\frac{3}{2}}(6.8)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \frac{6.8e}{4\pi\epsilon_0} \iiint e^{-\frac{0.8\sqrt{(r\sin\theta\cos\varphi-2a_0)^2+(r\sin\theta\sin\varphi)^2+(r\cos\theta)^2}}{a_0}} \left(2 - \frac{6.8r}{a_0} \right) e^{-\frac{6.8r}{2a_0}} r \sin\theta \, dr d\theta d\varphi$$

Integrala Q_s din ecuațiile (9) și (27)-(30) este

$$Q_s = -(1-\alpha)^{\frac{3}{2}}(6+4\alpha)^{\frac{3}{2}} \frac{(1-\alpha)e}{4\pi\epsilon_0} \iiint \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(1-\alpha)r''}{a_0}} \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{(6+4\alpha)r}{a_0} \right) e^{-\frac{(6+4\alpha)r}{2a_0}} \frac{1}{r''} dv$$

$$Q_s = -0.8^{\frac{3}{2}}(6.8)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \frac{0.8e}{4\pi\epsilon_0} \iiint e^{-\frac{0.8\sqrt{(r\sin\theta\cos\varphi-2a_0)^2+(r\sin\theta\sin\varphi)^2+(r\cos\theta)^2}}{a_0}} \left(2 - \frac{6.8r}{a_0} \right) e^{-\frac{6.8r}{2a_0}} r^2 \frac{1}{\sqrt{(r\sin\theta\cos\varphi-2a_0)^2+(r\sin\theta\sin\varphi)^2+(r\cos\theta)^2}} \sin\theta \, dr d\theta d\varphi$$

Integrala T_σ conform integralelor (9) și ecuațiilor (27)-(30) este

$$T_\sigma = (1-\alpha)^{\frac{3}{2}}(6+4\alpha)^{\frac{3}{2}} \iiint \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(1-\alpha)r''}{a_0}} \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{(6+4\alpha)r}{a_0} e^{-\frac{(6+4\alpha)r}{2a_0}} \cos\theta \, dv$$

Deoarece [5]

$$e^{\pm i\phi} = \cos\phi \pm i\sin\phi$$

și pentru ca se păstrează numai partea reală a funcțiilor de undă atomice în această aproximație pentru calculul energiilor moleculei conform integralelor (9) și ecuațiilor (27)-(30) obținem

$$T_\pi = (1-\alpha)^{\frac{3}{2}}(6+4\alpha)^{\frac{3}{2}} \iiint \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(1-\alpha)r''}{a_0}} \frac{1}{8\sqrt{2}\pi} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{(6+4\alpha)r}{a_0} e^{-\frac{(6+4\alpha)r}{2a_0}} \sin\theta \cos\phi \, dv$$

$$\begin{aligned}
R_{\sigma} &= -(1 - \alpha)^{\frac{3}{2}} (6 \\
&+ 4\alpha)^{\frac{3}{2}} \frac{(4\alpha + 6)e}{4\pi\epsilon_0} \iiint \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(1-\alpha)r''}{a_0}} \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{(6 + 4\alpha)r}{a_0} e^{-\frac{(6+4\alpha)r}{2a_0}} \frac{1}{r} \cos \theta \, dv
\end{aligned}$$

În integralele în care apar termeni de tipul $\frac{1}{r}$ și $\frac{1}{r''}$ integrarea este dificil de realizat deoarece când r și r'' tind către zero aceste rapoarte tind către infinit. De aceea trebuie să se impună o condiție prin care să se elimine acest comportament. De exemplu în R_s acest termen se simplifică după cum este prezentat mai sus. În cazul în care în integrală apare V_H , integrala trebuie scrisă din nou cu centrul de integrare în nucleul de H, și din formula lui dv în coordonate sferice r'' se simplifică.

Pentru ilustrarea legăturilor moleculare conform teoriilor prezentate mai sus în am reprezentat Figura 1 energia de legatură dată de ecuația (56) care prezintă un minim, și și energia de antilegatură dată de ecuația (57) cu valorile $D_e = 8, \beta = 2, r_e = 2$.

REVENDICARI

1. În acest brevet de invenție revendicăm o metodă și un dispozitiv de verificare a liniilor moleculelor de H_2 , O_2 , H_2O , și CH_4 , prin care se verifică energiile acestor molecule obținute din ecuația seculară folosind integralele prezentate în capitolul descrierea invenției, prin care folosim un tuburi sau lampi de hidrogen, de oxigen, de H_2O , și de CH_4 , și un spectrofotometru SV 1100 Economic Visible – 4 nm AZZOTA care costă \$990. După calculul energiei fundamentale și a unui număr de nivele excitate a moleculelor, se calculează liniile spectrale corespunzătoare și se compară cu rezultatele experimentale.

DESENE EXPLICATIVE

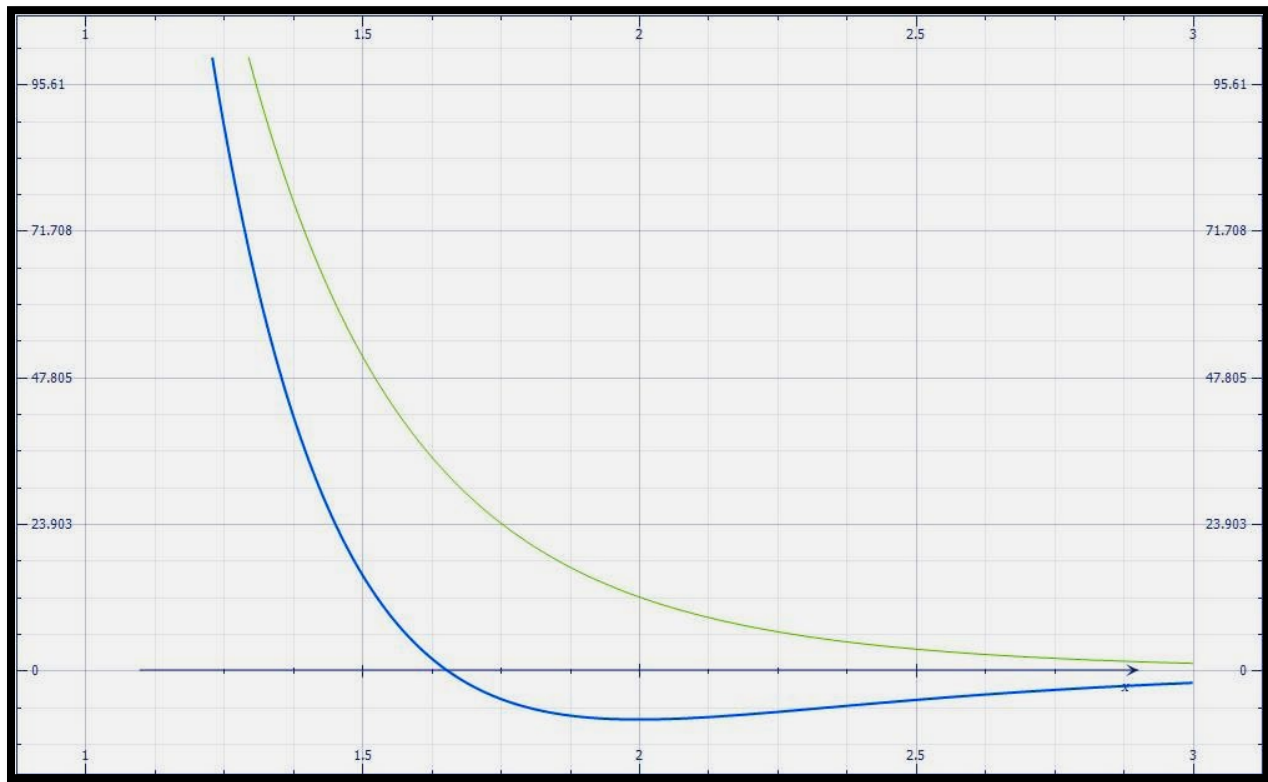


Figura 1.

REZUMATUL INVENTIEI

Metoda si dispozitiv de verificare a liniilor moleculelor de H_2 , O_2 , H_2O , si CH_4 obtinute cu integralele din determinantul secular cu metoda prezentata prin care se foloseste un spectrofotometru.

BIBLIOGRAFIE

[1] Martin Karplus, J. Chem. Phys. 30, 11 (1959).

- [2] H. D. Nathan et al., CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011.
- [3] Periodic Table Basic, Quick Study Academic, BarCharts, 2002.
- [4] J. H. Van Vleck, J. Chem. Phys. 1, 219 (1933).
- [5] M. Mansfield et al., Understanding physics, Wiley, 2011.
- [6] Ed Kohn, CliffQuickReview Geometry, Wiley, 2001.
- [7] J. H. Van Velck, J. Chem. Phys. 1, 177 (1933).
- [8] H. D. Nathan and Charles Henrickson, CliffsNotes Chemistry Quick Review, 2011.
- [9] A. Warshel and M. Karplus, Chem. Phys. Lett. 589 (2013) 68.
- [10] Jókai Mór, A Damokosok, BIBLIOLIFE, San Bernardino, CA, USA, 11 February 2013.
- [11] Samuel Wesley Stratton and Robert A. Millikan, A college course of laboratory experiments in general physics, Reprints from the collection of the University of Michigan Library, Prepared for publishing by hp, Lexington, KY, 10 January 2013 pag 62.
- [12] L. Pauling, J. Chem. Phys. 1, 280 (1933).
- [13] J. R. Stehn, J. Chem. Phys. 5, 186 (1937).
- [14] H. H. Voge, J. Chem. Phys. 4, 581 (1936).
- [15] J. O. Hirschfelder et al., J. Chem. Phys. 4, 121 (1936).
- [16] M. Jackson, Organic chemistry fundamentals QuickStudy Academic, BarCharts, 2001.
- [17] Eisco premium spectroscope instruction manual.
- [18] D. Williams et al., J. Chem. Phys. 4, 154 (1936).
- [19] J. O. Hirschfelder et al., J. Chem. Phys. 4, 170 (1936).
- [20] J. O. Hirschfelder, J. Chem. Phys. 6, 795 (1938).
- [21] J. O. Hirschfelder and C. N. Weygandt, J. Chem. Phys. 6, 806 (1938).

- [22] W. S. Gallaway et al., J. Chem. Phys. 10, 88 (1942).
- [23] C. C. J. Roothan, J. Chem. Phys. 19, 1445 (1951).
- [24] K. Rüdénberg, J. Chem. Phys. 19, 1459 (1951).
- [25] S. Sato, J. Chem. Phys. 23, 592 (1955).
- [26] H. S. Jarrett et al., J. Chem. Phys. 22, 1783 (1954).
- [27] B. Venkataraman et al., J. Chem. Phys. 24, 737 (1956).
- [28] H. M. McConnell, J. Chem. Phys. 24, 764 (1956).
- [29] R. Bersohn, J. Chem. Phys. 24, 1066 (1956).
- [30] S. I. Weissman, J. Chem. Phys. 25, 890 (1956).
- [31] H. S. Jarrett, J. Chem. Phys. 25, 1289 (1956).
- [32] R. E. Glick et al., J. Chem. Phys. 25, 362 (1956).
- [33] K. Kimura et al., J. Chem. Phys. 25, 362 (1956).
- [34] H. M. McConnell et al., J. Chem. Phys. 24, 479 (1956).
- [35] B. J. Ransil, J. Chem. Phys. 26, 971 (1957).
- [36] W. M. Gelbart et al., J. Chem. Phys. 52, 2460 (1970).
- [37] L. S. Bartell et al., J. Chem. Phys. 27, 1414 (1957).

39. INDEX

A

ACIZI

PROPRIETĂȚI ALE ACIZILOR · 155

ARGINT

ARGINT · 22

BRĂȚĂRI DIN ARGINT · 22

INELE DE ARGINT · 22

MONEZI DIN ARGINT · 22

B

BAROMETRU

BAROMETRU · 103

MASA COLOANEI DE AER DIN ATMOSFERA · 103

BATERIE ALCALINĂ

ALAMĂ · 168

HIDROXID DE POTASIU · 168

BAZE

PROPRIETĂȚI ALE BAZELOR · 156

BRONZ

CERCEI · 18

COMPOZIȚIE · 18

OBIECTE DIN BRONZ · 18

PIESE DE PORT · 18

SECERI · 18

VÂRFURI DE LANCE · 18

C

Caracteristicile atomului

Configurația electronică · 136

Numărul atomic · 135

Numărul de masă · 135

CINABRU

CINABRU · 27

Configurația electronică

Configurația electronică · 138

CRISTALE

SAREA COMUNĂ · 58

CURRENT ELECTRIC

FLUID · 159

LEGEA LUI KIRCHHOF PENTRU OCHIUL DE REȚEA · 165

NU ESTE TRANSMISĂ PRIN RADIAȚIE · 178

D

DENSITATEA

DENSITATEA AERULUI CREȘTE CÂND ACESTA ESTE PRESAT · 103

DESCOMPUNEREA APEI

ELECTROLIZĂ · 108

DESCOMPUNEREA APEI

DOUĂ PĂRȚI ATOMICE HIDROGEN · 108

GAZ DE HIDROGEN · 108

GAZ DE OXIGEN · 108

O PARTE ATOMICĂ OXIGEN · 108

DISTRUGEREA SUBSTANȚELOR

PLUMB · 40

E

ELECTROCHIMIE

Baterie · 156

Celulă electrochimică · 156

Electrochimie · 156

ELECTROD ANOD · 157

ELECTROD CATOD · 157

ELECTROD DE CUPRU · 157

ELECTROD DE ZINC · 157

Reacția de oxidare · 157

Reacția de reducere · 157

Reacții de oxido-reducere · 156

ELECTROLIT

COMPONENTA ELECTRONEGATIVĂ · 180

COMPONENTA ELECTROPOZITIVĂ · 180

DESCOMPUNEREA MOLECULELOR · 180

ELECTROLIZA

METAL · 174

ELECTROLIZĂ

DESCOMPUNEREA APEI · 108

ELEMENTE CHIMICE

ANTIMONIU · 28

FIER · 19

FOSFORUL · 92

MERCUR · 43

PLUMB · 23
STANIU · 16
SULF · 25
ZINC · 31
ELEMENTELE CHIMICE
ELEMENTE CHIMICE · 13, 43
EPOCA DE PIATRĂ
DATARE · 14
SILEX · 37
EPOCA METALELOR
EPOCA METALELOR · 37

F

FIER
FURNAL · 20
FIER
EPOCA FIERULUI · 21
FORȚA EXPANSIVĂ
FORȚA EXPANSIVĂ A AERULUI CREȘTE CÂND ESTE PRESAT · 103

G

GEOLOGIE
GEOLOGIE · 37

L

LEGĂTURA COVALENTĂ
PUNEREA ÎN COMUN A ELECTRONILOR · 143
LEGĂTURA IONICĂ
ION NEGATIV · 147
ION POZITIV · 147
LEGĂTURA POLARĂ
DISTRIBUȚIE INEGALĂ A PERECHII DE ELECTRONI DE LEGĂTURĂ · 150
MOLECULA DE HF · 150
SARCINI ELECTRICE FRAȚIONARE · 150
Legături chimice
Legături chimice · 142
LEGĂTURI CHIMICE
LEGĂTURA COVALENTĂ · 143
LEGĂTURA IONICĂ · 147
LEGĂTURA POLARĂ · 150
LEGEA LUI OHM
ELECTROCUTARE · 163
LENTILA
PRELUCRAREA STICLEI ÎN EGIPT · 35
STICLĂ · 35, 36
STICLA ÎNAINTE DE EPOCA FIERULUI · 36

M

MASELE RELATIVA ALE ATOMILOR

MASELE RELATIVE ALE ATOMILOR · 126

MASELE RELATIVE ALE COMPUȘILOR

MASELE RELATIVE ALE COMPUȘILOR · 126

Mecanică cuantică

Teorema cuantificării energiei luminii a lui Planck · 137

MERCUR

CINABRU · 34

MERCUR · 27

MINERALE

DEFINIȚIA MINERALELOR · 100

Modelul atomului

Modelul atomului al lui Bohr · 137

Modelul atomului

Modelul atomului al lui Rutherford · 135

MOJAR

MOJAR · 27

MOJAR DIN CUPRU · 27

MOLECULE

ACID SULFURIC · 55

PRINCIPII · 43

N

NEOLITIC

MACHETĂ DE LOCUINȚĂ · 14

O

OLĂRIT

ARGILA · 37

FĂRĂ ROATA OLARULUI · 29

LUT · 29

OȚET

OȚET · 27

P

PILA VOLTAICĂ

ELECTRIZI DE CUPRU ȘI ZINC, ELECTROLIT ACID SULFURIC ÎN AMESTEC CU APĂ · 166

ELECTROLIT PENTRU ACUMULATOR DE MAȘINĂ CU CONȚINUT DE ACID SULFURIC ȘI APĂ DISTILATĂ · 167

PILĂ VOLTAICĂ

ACID SLAB · 159

ARGINT · 160

CUPRU · 159

DESCOMPUNEREA APEI · 160

DEVIAȚIA ACULUI MAGNETIC · 167

DOUĂ CAPSULE · 190
 ELECTROD DE CUI DE FIER · 171
 GALVANI · 159
 GAZ TOXIC · 167
 ÎNMUIATĂ · 159
 LEGEA LUI JOULE A CĂLDURII · 164
 LEGEA LUI OHM · 162
 LEGEA LUI OHM PE ÎNTREG CIRCUITUL · 163
 METAL · 159
 PÂNZĂ · 159
 PRIMA PILĂ · 159
 SCÂNTEI · 160
 VOLTA · 159
 ZINC · 159
 PILĂ VOLTAICĂ CU ELECTROLIT PENTRU ACUMULATORI DE AUTOMOBIL
 BOBINĂ · 167
 PRESIUNEA
 MASA COLOANEI DE AER DIN ATMOSFERA · 103
 PRESIUNEA AERULUI
 FORȚA LUI EXPANSIVĂ · 103
 GREUTATEA AERULUI · 103
 PROPORȚIILE ÎN CARE POT INTRA CORPURILE ÎN COMBINAȚII
 PROPORȚII PROGRESIVE · 121
 PROPORȚIILE ÎN CARE SE COMBINĂ CORPURILE
 BERZELIUS · 125
 MULTIPLICARE SIMPLĂ · 122
 PROPORȚIA ESTE UN NUMĂR MULTIPLICAT SAU DIVIZAT PRIN UNA DIN PRIMII TREI TERMENI AI
 SERIEI NUMERELOR ÎNTREGI · 125
 STĂRI DE OXIDARE · 123
 PROPRȚIILE ÎN CARE SE COMBINĂ CORPURILE
 O SINGURĂ PROPORȚIE INVARIABILĂ ÎNTRE ELEMENTE · 121

R

REACȚIE CHIMICĂ
 FRECARÉ · 27
 REACȚII CHIMICE
 ENDOTERME · 133
 REACȚII CHIMICE ENDOTERME
 CALCINAREA ANTIMONIULUI · 50
 REACȚIILE CHIMICE
 CONSERVAREA NUMĂRULUI DE ELEMENTE · 133
 REGULI GENERALE ALE COMBINAȚIILOR
 REGULI GENERALE ALE COMBINAȚIILOR · 122
 REGULI GENERALE ALE COMBINAȚIILOR
 EXPERIMENTE · 122
 REZISTENȚA ELECTRICĂ
 REZISTENȚA ÎN FUNCȚIE DE TEMPERATURĂ · 164
 ROCI SEDIMENTARE
 ROCI SEDIMENTARE · 38

S

SEDIMENTE

SEDIMENTOLOGIA · 37

STICLA

EGIPTUL ANTIC · 35

STICLĂ

FABRICAREA STICLEI ÎN MESOPOTAMIA · 36

FABRICAREA STICLEI ÎN VALEA INDUSULUI · 36

MĂRGELE DIN STICLĂ · 36

SULF

CULOARE GALBENĂ · 25

LOADSTONE · 27

PIGMENT · 27

T

Tabelul 1 · 384

TIPURI DE COMPUȘI

ACIZI · 155

BAZE · 156

TRANSFORMĂRI DE FAZĂ

DISTILAREA · 58, 62

EVAPORAREA · 58

SOLIDIFICAREA · 52

U

UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI

UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI · 37

UNIVERSITATEA DIN IAȘI

UNIVERSITATEA DIN IAȘI · 37

V

VUNUL

ISTORIA VITICULTURII · 39

Z

ZINC

REDUCERE · 31

ZINC

APARIȚIE · 30

CULOARE · 30

CUNOAȘTEREA ÎN ISTORIE · 30

FURNALE · 31

METAL · 30

OBTINERE · 30

PUNCT DE FIERBERE · 31

40. BIBLIOGRAFIE

- [1] A. GRAFTON, "OF CHYMISTS AND KINGS," ÎN: *SCIENCE*, vol. 338, no. 6114, pp. 1540-1541, 21 12 2012.
- [2] L. SAAG and A. ET, "GENETIC ANCESTRY CHANGES IN STONE TO BRONZE AGE TRANSITION IN THE EAST EUROPEAN PLAIN," ÎN: *SCIENCE ADVANCES*, vol. 7, no. 4, 20 JAN 2021.
- [3] MUZEULBRAILEICAROLIARH, "ARHEOLOGIE PATRIMONIUL," MUZEUL BRAILEI CAROL I, [Online]. Available: <https://www.muzeulbrailei.ro/arheologie/patrimoniu/>. [Accessed 18 03 2024].
- [4] H. CORNWALL, "A SUMMARY OF IDEAS ON THE ORIGIN OF NATIVE COPPER DEPOSITS," ÎN: *ECONOMICAL GEOLOGY AND THE BULLETIN OF THE SOCIETY OF ECONOMIC GEOLOGISTS*, vol. 51, no. 7, p. 1, 1956.
- [5] D. GRIGORESCU, N. ANASTASIU, M. ȘECLĂMAN and P3, *GEOLOGIE MANUAL PENTRU CLASA A XI - A*, BUCUREȘTI: EDITURA DIDACTICĂ ȘI PEDAGOGICĂ, R.A., 1995, p. 3.
- [6] L. R. BURGER and B. R. GORDON, "EARLY CENTRAL ANDEAN METAL WORKING FROM MINA PERDIDA, PERU," ÎN: *SCIENCE*, vol. 282, no. 5391, p. 1108, 6 NOI 1998.
- [7] R. MONASTERSKY, "ANCIENT METAL MINES SULLIED GLOBAL SKIES," ÎN: *SCIENCE NEWS*, vol. 149, no. 15, 13 APR 1996.
- [8] UNKNOWNCUPPER, "USES OF CUPPER," [Online]. Available: <https://geology.com/usgs/uses-of-copper/>. [Accessed 29 12 2023].

- [9] A. GIBBONS, "THE ULTIMATE SACRIFICE," *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, no. 6083, pp. 834-837, 18 5 2012.
- [10] M. HAUSTEIN, C. GILLIS and E. PERNICKA, "TIN ISOTOPY - A NEW METHOD FOR SOLVING OLD QUESTIONS," *ÎN: ARCHAEOLOGY*, vol. 52, no. 5, p. 816, 16 AUG 2010.
- [11] V. VILLALBA-MOUCO and ET AL., "GENOMIC TRANSFORMATION AND SOCIAL ORGANIZATION DURING THE COPPER AGE-BRONZE AGE TRANSITION IN SOUTHERN IBERIA," *ÎN: SCIENCE ADVANCES*, vol. 7, no. 47, 17 NOE 2021.
- [12] E. HISTORY.COM, "BRONZE AGE," A & E TELEVISION NETWORKS, 24 8 2021. [Online]. Available: <https://www.history.com/topics/pre-history/bronze-age>. [Accessed 25 10 2022].
- [13] WWW.DEX.RO, "BRONZ," WWW.DEX.RO, 2023. [Online]. Available: <https://www.dex.ro/bronz>. [Accessed 25 10 2023].
- [14] MUZEULJUDEȚEANIALOMIȚAOLĂRIT1, "COLECȚIA DE ARHEOLOGIE," MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA SLOBOZIA JUD. IALOMIȚA ROMÂNIA, 13 09 2017. [Online]. Available: <https://mjalomita.ro/colectia-de-arheologie/>. [Accessed 18 03 2024].
- [15] UNKNOWNCU COIN, "EARLY COPPER COINS," *ÎN: LIBERTY COIN & CURRENCY*, [Online]. Available: <https://libertycoinandcurrency.com/coins/early-copper-coins-2/>. [Accessed 23 10 2022].
- [16] A. CURRY, "SWORD-WIELDING SCIENTISTS SHOW HOW ANCIENT FIGHTING TECHNIQUES SPREAD ACROSS BRONZE AGE EUROPE," *ÎN: SCIENCE*, 17 4 2020.
- [17] B. BOWER, "ARCTIC HUNTER-GATHERERS WERE ADVANCED IRON WORKERS MORE THAN 2000 YEARS AGO," *ÎN: SCIENCE NEWS*, vol. 201, no. 2, 3 IAN 2022.
- [18] E. HISTORY.COM, A. ONION, M. SULLIVAN and M. MULLEN, "IRON AGE," A & E TELEVISION NETWORK, 27 8 2021. [Online]. Available: <https://www.history.com/topics/pre-history/iron-age>. [Accessed 25 10 2022].
- [19] V. KUMAR and A. ET, "BRONZE AND IRON AGE POPULATION MOVEMENTS UNDERLIE XINJIANG POPULATION HISTORY," *ÎN: SCIENCE*, vol. 376, no. 6588, pp. 62-69, 31 3 2022.
- [20] MUZEULJUDEȚEANIALOMIȚACERAMICĂV-IV, "EXPOZIȚIE PERMANENTĂ," MUZEUL JUDEȚEAN IALOMIȚA, 01 12 2003. [Online]. Available: <https://mjalomita.ro/expozitie-permanenta/>. [Accessed 25 10 2023].
- [21] E. HISTORY.COMIRON, "5 IRON AGE TOOLS AND INNOVATIONS," A & E TELEVISION NETWORKS, [Online].

Available: <https://www.history.com/news/iron-age-tools-innovations>. [Accessed 25 10 2022].

- [22] C. HOLDEN, "AFRICA'S IRON AGE HEALERS?," *ÎN: SCIENCE*, vol. 327, no. 5969, p. 1065, 26 2 2010.
- [23] I. STĂNUȚĂ and ET AL., *DIALOGURILE FASCINANTEI GENEZE*, BUZĂU: EDITGRAPH, 2023.
- [24] M. CARTWRIGHT, "SILVER IN ANTIQUITY," *WORLD HISTORY ENCYCLOPEDIA*, 19 SEP 2017. [Online]. Available: <https://www.worldhistory.org/Silver/>. [Accessed 1 JAN 2024].
- [25] M. B. ABBOTT and A. P. WOLFE, "INTENSIVE PRE-INCAN METALLURGY RECORDED BY LAKE SEDIMENTS FROM BOLIVIAN ANDES," *ÎN: SCIENCE*, vol. 301, no. 5641, p. 1893, 26 SEP 2003.
- [26] MUZEUL JUDETEAN IALOMITANUMISMATICA, "COLECTIA DE NUMISMATICĂ," MUZEUL JUDETEAN IALOMITA, 2025. [Online]. [Accessed 07 07 2025].
- [27] S. ACHARIA, "LEAD BETWEEN THE LINES," *NATURECHEMISTRY*, vol. 5, p. 894, 2013.
- [28] B. P. LANPHEAR, "THE PARADOX OF LEAD POISONING PREVENTION," *ÎN: SCIENCE*, vol. 281, no. 5383, p. 1617, 11 SEP 1998.
- [29] F. MORRIS, "BEFORE IT WAS DANGEROUS, LEAD WAS THE MIRACLE METAL THAT WE LOVED," *ÎN: HEALTH*, 6 APR 2016.
- [30] T. BELL, "A BRIEF HISTORY OF LEAD PROPERTIES, USES AND CHARACTERISTICS," *ÎN: THOUGHTCO., SCIENCE, TECH, MATH, SCIENCE*, 20 JAN 2020.
- [31] J. LEWIS, "LEAD POISONING: A HISTORICAL PERSPECTIVE," *ÎN: EPA JOURNAL*, MAI 1985.
- [32] R. MONASTERSKY, "FOULING THE AIR: NOT JUST A MODERN PROBLEM," *ÎN: SCIENCE NEWS*, vol. 145, no. 13, p. 198, 26 MARCH 1994.
- [33] A. EICHLER and ET AL., "PB POLLUTION FROM LEADED GASOLINE IN SOUTH AMERICA IN THE CONTEXT OF A 2000 YEARS METALLURGICAL HISTORY," *ÎN: SCIENCE ADVANCES*, vol. 1, no. 2, 6 3 2015.
- [34] C. ARMATAS, B. LOPEZ, A. TANDOC and B. L. MATERNA, "INDUSTRIES WITH THE HIGHEST OCCUPATIONAL BLOOD LEAD TEST RESULTS, CALIFORNIA OCCUPATIONAL BLOOD LEAD REGISTRY, 2020-2021," *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, 30 09 2022.
- [35] R. RABIN, "THE LEAD INDUSTRY AND LEAD WATER PIPES "A MODEST CAMPAIGN", " *ÎN: AMERICAN*

JOURNAL OF PUBLIC HEALTH, 10 10 2011.

- [36] Oldenburg_1665_vol_1_pag_10, "Of a peculiar lead-ore in Germany, and the use thereof," *Philosophical transactins of the Royale society of London*, vol. 1, no. 1, p. 10, 1665.
- [37] G. KUTNEY, *ÎN: SULFUR. HISTORY, TECHNOLOGY, APPLICATIONS & INDUSTRY*, 2 ed., TORONTO, ONTARIO: CHEMTECHPUBLISHING, 2012.
- [38] S. PAPPAS, "FACTS ABOUT SULFUR," *ÎN: LIVESCENCE PARTE A FUTURE US INC*, 29 9 2017.
- [39] M. C. BATTIGELLI and J. F. GAMBLE, "FROM SULFUR TO SULFATE: ANCIENT AND RECENT CONSIDERATIONS," *ÎN: JOURNAL OF OCCUPATIONAL MEDICINE*, vol. 18, no. 5, p. 334, 5 1976.
- [40] K. KLOCHKO, "ANTIMONY STATISTICS AND INFORMATION," USGS SCIENCE FOR A CHANGING WORD U.S. DEPARTMENT OF THE INTERIOR, [Online]. Available: <https://www.usgs.gov/centers/national-minerals-information-center/antimony-statistics-and-information>. [Accessed 29 10 2022].
- [41] F. M. ENDLICH, "ON SOME INTERESTING DERIVATIONS OF MINERAL NAMES," *ÎN: THE AMERICAN NATURALIST*, vol. 22, no. 253, pp. 21-32, JAN 1888.
- [42] X. E. A. WU, "EARLY POTTERY AT 20000 YERS AGO IN XIANRENDONG CAVE, CHINA," *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, no. 6089, p. 1696, 29 IUN 2012.
- [43] G. SHELBAACH, "ON THE INVENTION OF POTTERY," *ÎN: SCIENCE*, vol. 336, no. 6089, pp. 1644-1645, 29 IUN 2012.
- [44] E. STOKSTAD, "A TIME CAPSULE FROM BRONZE AGE BRITAIN," *ÎN: SCIENCE*, vol. 353, no. 6296, pp. 210-211, 15 IUL 2016.
- [45] ZINC, "ZINC, PERIODIC TABLE," ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY, 2024. [Online]. Available: <https://www.rsc.org/periodic-table/element/30/zinc>. [Accessed 5 JAN 2024].
- [46] UNKNOWNHISTORYZINC, "HISTORY_ZINC," BRITANICA, [Online]. Available: <https://www.britannica.com/science/zinc/History>. [Accessed 5 JAN 2024].
- [47] C. P. McCORD and A. FRIEDLANDER, "AN OCCUPATIONAL SINDROME AMONG WORKERS IN ZINC," *ÎN: AMERICAN JOURNAL OF PUBLIC HEALTH*, vol. 16, no. 3, p. 274, 3 1926.
- [48] H. C. LEWIS, "MINERALOGY," *ÎN: THE AMERICAN NATURALIST*, vol. 17, no. 11, pp. 1158-1163, 1883.

- [49] Oldenburg_1665_vol_1_pag_45, "Of the mineral of Liege, yielding both brimstone, and vitriol, and the way of extracting them out of it, used at Liege," *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, no. 3, p. 45, 1665.
- [50] R. Moray, "An account how adits and mines are wrought at Liege without air-shafts, comunicated by Robert Mray," *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, no. 5, p. 79, 1665.
- [51] MERCURY, "MERCURY," BERKELEY, [Online]. Available: <https://nature.berkeley.edu/classes/eps2/wisc/hg.html>. [Accessed 3 JAN 2024].
- [52] MERCURY_BRITANICA, "MERCURY," BRITANICA, [Online]. Available: <https://www.britannica.com/science/mercury-chemical-element>. [Accessed 3 JAN 2024].
- [53] Oldenburg_1665_vol_1_pag_21, "Extract of a letter written from Venice, concerning the mines of mercury in Friuly," *Philosophical Transactions of the Royale Society of London*, vol. 1, no. 2, p. 21, 1665.
- [54] H. C. King, *The History of the Telescope*, Mineola, New York: Dover Publications, Inc., 1955.
- [55] 2NECUNOSCU02, "GLASS," WIKIPEDIA, 31 03 2022. [Online]. Available: <https://en.wikipedia.org/wiki/Glass#History>. [Accessed 06 04 2022].
- [56] 3NECUNOSCU, "OBSIDIAN," WIKIPEDIA, 20 03 2022. [Online]. Available: <https://en.wikipedia.org/wiki/Obsidian>. [Accessed 06 04 2022].
- [57] M. CARTWRIGHT, "ALCHEMY," WORLD HISTORY ENCYCLOPEDIA, 24 AUG 2023. [Online]. Available: https://www.worldhistory.org/Alchemy/#google_vignette. [Accessed 20 03 2024].
- [58] A. A. MAYNARD, "WINE," BRITANNICA, 08 03 2024. [Online]. Available: <https://www.britannica.com/topic/wine>. [Accessed 20 03 2024].
- [59] M. M. P. MUIR, *HEROS OF SCIENCE: CHEMISTS, THE STORY OF ALCHEMY AND BEGINNINGS OF CHEMISTRY*, DIGICAT, 2022, pp. 1-20.
- [60] E. RYLOTT and N. BRUCE, "PLANTS TO MINE METALS AND REMEDIATE LAND," *ÎN: SCIENCE*, vol. 377, no. 6613, p. 1380, 22 9 2022.
- [61] Fontenelle_1666_1668_pag_18, "Physique preliminaires," *Histoire de l'Academie Royale des Scieneces Paris*, vol. 1, p. 18, 1733.

- [62] M. E. Weeks, "Discovery of the elements," *J. Chem. Educ.*, vol. 9 (1), p. 4, 1932, v. 9 (1), p. 4.
- [63] Fontenelle_pag_20_Hamel, *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1666*, vol. 1, p. 20, 1733.
- [64] Fontenelle_1667_pag_47, "Observations sur la chaux," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1667 Paris*, vol. 1, p. 47, 1733.
- [65] Fontenelle_pag_23, "Experience d'un sel doux," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 23, 1733.
- [66] C. 1. PERRAULT¹⁴, "Experiences de l'augmentation du poids de certaines matieres par calcination," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666*, vol. 1, p. 14, 1729-1734.
- [67] Fontenelle_pag_24_1666, "Autres experiences de chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1666*, vol. 1, p. 24, 1733.
- [68] C. V. PERRAULT²⁷, "Analyse de plusieurs eaux minerales," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666*, vol. 1, p. 27, 1733.
- [69] J. T. Moore, *Chemistry for dummies*, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.
- [70] L. Huetinck and S. Adams, *CliffsQuickReview Physics*, Wiley, 2001, p. 184.
- [71] LAVOISIER, "MEMOIRE SUR LA COMBUSTION DU FER," *ÎN: ANNALES DE CHIMIE*, vol. 1, pp. 19-30, 1789.
- [72] C. PERRAULT⁸⁷, "Sur la coagulation," *ÎN: Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1669*, vol. 1, pp. 87-94, 1733.
- [73] S. Holzner, *Physics I For Dummies*, Wiley, 2011.
- [74] PERRAULT^{50V1}, "Experience pour dessaler l'eau de la mer," *ÎN: Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 50, 1733.
- [75] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, ISBN 978-0-470-90543-2 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu ordinul nr. 105-6630974-6331466 din 16 August 2012 cu cartile Precalculus 2004 si Calculus 2001 valoarea \$45.95, Wiley, 2011, p. 13.

- [76] S. Holzner, *Physics I For Dummies*, Wiley, 2011.
- [77] Dodart_vol_4_121, "Memoire pour servir a l'Histoire des plantes," *Memoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666 - 1699*, vol. 4, p. 121, 1731.
- [78] Fontenelle_1675_p_198, "Experiences diverces," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1675*, vol. 1, p. 198, 1733.
- [79] Dex_Necunoscut, www.dex.ro.
- [80] H. D. Nathan and C. Henrickson, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 13.
- [81] Fontenelle_pag_79_1669 and Hamel, "Phisique Chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1669 Paris*, vol. 1, p. 79, 1733.
- [82] J. T. Moore, ÎN: Chemistry for dummies ISBN 978-1-118-00730-3 cumparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea Physics I for Dummies 2011 valoarea \$37.62, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.
- [83] Fontenelle_1670_pag_123, "Eux minerales," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1670*, vol. 1, p. 123, 1733.
- [84] I. d. P. e. C. Vicat, "Extrait de l'ouvrage intitule: Recherches experimentales sur les chaux de construction, les betons et les mortiers ordinaires; etc," *Annales de chimie et de physique*, vol. 15, p. 365, 1820.
- [85] F. Kuhlmann, "Ciment," *Annales de chime et de physique*, vol. 21, p. 364, 1847.
- [86] Fontenelle_pag_161_1673, "Physique Botanoque et Chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1673 Paris*, vol. 1, p. 161, 1733.
- [87] Fontenelle_1678_p_250, "Experiences," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1678*, vol. 1, p. 250, 1733.
- [88] Fontenelle_1678_p_252, "Chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1678*, vol. 1, p. 252, 1733.
- [89] Fontenelle_and_Hamel_1679_pag_282, "Chimie et botanique," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences*, vol. 1, p. 282, 1733.

- [90] Fontenelle_1680_pag_307, "Botanique et chimie," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1680*, vol. 1, p. 307, 1733.
- [91] Fontenelle_1681_pag_318, "ANÉE MDCLXXI," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1681*, vol. 1, p. 318, 1733.
- [92] Fontenelle_1679_p_270, "Sur la nature de l'air," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences 1679*, vol. 1, p. 270, 1733.
- [93] G. KUTNEY, ÎN: SULFUR. HISTORY, TECHNOLOGY, APPLICATIONS & INDUSTRY, 2 ed., TORONTO, ONTARIO: CHEMTECHPUBLISHING, 2012, p. 3.
- [94] L. Huetinck and S. Adams, CliffsQuickReview Physics ISBN 978-0-7645-6383-6 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon cu factura numarul 103-9554549-5951447 in data de 17 Ianuarie 2013 impreuna cu cartea Economics Cliffs Quick Review scrisa de John Duffy, Wiley, 2001, p. 184.
- [95] M. Mansfield and C. O'Sullivan, Understanding Physics, Wiley, 2011.
- [96] Fontenelle_1682__pag_342, "Sur la Phosphore," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1682*, vol. 1, p. 342, 1733.
- [97] Fontenelle_pag_50, "Experience pour dessaler l'eau de la mer," *Histoire de l'Academie Royale des Sciences Paris 1666-1668*, vol. 1, p. 50, 1733.
- [98] ACADEMIAREGALĂDEȘTIINȚEAFRANȚEI_224, "EXPERIENCE CHIMIQUE," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES BIBLIOTECA NAȚIONALĂ A FRANȚEI*, vol. 1, p. 224, 1666-1699.
- [99] IDEM_P_238, "CHIMIE, EXAMEN DES EAUX DE VERSAILLES," 1683.
- [100] IDEM_P_240, 1683.
- [101] A. F. D. ȘTIINȚE238, "CHIMIE EXAMEN DES EAUX DE VERSAILLES," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTECA NAȚIONALĂ A FRANȚEI*, vol. 1, p. 238, 1683.
- [102] I. CUCULESCU, M. I. POPESCU, 182 and E. AL., CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, p. 182.
- [103] M. Navier, "EXPERIENCES SUR LA RESISTANCE DE DIVERSES SUBSTANCES A LA RUPTURE CAUSEE PAR UNE TENSION LONGITUDINALE," *ANNALES DE CHIMIE ET DE PHYSIQUE*, vol. 33, pp. 225-240, 1826.

- [104] A. Masson, "Sur l'elasticite du corps solides," *Annales de chimie et de physique*, Vols. S3, T3, pp. 451-462, 1841.
- [105] Dulong and Petit, "Recherches sur le lois de dilatation des solides, des liquides et des fluides elastiques, et sur le mesure exacte des temperatures," *Annales de chimie et de physique*, vol. 2, p. 240, 1816, v. 2, p. 240.
- [106] L. Foucault, "Sur la vitesses relatives de la lumiere dans l'air et dans l'eau," *Ann. chim. phys.*, vol. 41, pp. 129-164, 1854.
- [107] R. Ionescu-Andrei and et al., Fizică F1/F2 manual pentru clasa a XII-a, București: Grup Editorial Art, 2010.
- [108] ACADEMIA DE ȘTIINȚE A FRANȚEI, "NOTICE SUR LA FOUILLE DE LA CHRYSOPRASE," *ANNALES DE CHIMIE OU RECUEIL DE MEMOIRES CONCERNANT LA CHIMIE ET LES ARTS QUI DEPENDANT PARIS*, vol. 1, p. 142, 1789.
- [109] Fontenelle_pag_283, "Mathematique, Dioptrique, Sur la lumier," *Histoire Acad. R. Sci. Paris 1679*, vol. 1, p. 283, 1733 pag 283.
- [110] D. G. MAHAN, "CRYSTAL," *BRITANICA*, 06 06 2025. [Online]. Available: WWW.BRITANICA.COM/SCIENCE/CRYSTAL. [Accessed 08 07 2025].
- [111] A. CODARCEA, MINERALOGIE PARTEA I CRISTALOGRAFIA, BUCUREȘTI: EDITURA DE STAT DIDACTICĂ ȘI PEDAGOGICĂ, 1961.
- [112] ACADEMIA REGALĂ DE ȘTIINȚE A FRANȚEI, "PHYSIQUE GENERALE, SUR UN INSTRUMENT PROPRE A MESURER LA DENSITE DE L'AIR," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTECA NATIONALA A FRANȚEI*, p. 1, 1780.
- [113] I. CUCULESCU, CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, pp. 237, PROBLEMA: V.5.A, ECUATIA (1).
- [114] IDEM 178, p. 178.
- [115] ACADEMIA REGALĂ DE ȘTIINȚE A FRANȚEI, "SUR LA CHALEUR," *HISTOIRE DE L'ACADEMIE ROYALE DES SCIENCES PARIS BIBLIOTECA NATIONALA A FRANȚEI*, p. 3, 1780.
- [116] C. de Wooliwich, "Experiences et observations sur l'electricite galvanique," *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.

- [117] J. J. Autorul_lucrării_știintifice: Berzelius, "Titlul articolului: TABLE des Poids atomistique des corps simples et de leurs oxides, d'après les analyses les plus exactes et les plus récentes," *Revista: Annales de chimie et de physique Orașul: Paris*, vol. volumul 38, p. pagina 426, anul 1828.
- [118] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 13.
- [119] Berthollet_pag_30, *Annales de chimie*, vol. 1, p. 30, 1789.
- [120] M. Chenevix, "Réflexions Sur quelques Méthodes minéralogiques," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 65 31 janvier, pp. 5-43, 1808.
- [121] NecunscutWikipedia1agate, "Agate," 2019. [Online]. Available: <https://en.wikipedia.org/wiki/Agate>.
- [122] M. L. Berzelius, "Sur les proportions déterminées dans lesquelles se trouvent réunis les élémens de la nature inorganique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 78 30 Avril, p. 5, 1811, 2.
- [123] Gay-Lussac, *Annales de chimie et de physique*, vol. 81, p. 98, 1812.
- [124] J. Dumas, "Mémoire sur quelques Point de la Théorie atomistique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 33, pp. 337-391, 1826.
- [125] Gay-Lussac and Dulong, "Rapport fait à L'Académie par MM. Gay-Lussac ey Dulong, sur un Mémoire de M. Dumas qui a pour objet plusieurs points de la théorie atomistique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 34, p. 326, 1827.
- [126] C. Matteucci, "Sur la Force électro-chimique de la pile," *Annales de chimie et de physique*, vol. 58, p. 75, 1835.
- [127] J. T. Moore, *Chemistry for dummies* ISBN 978-1-118-00730-3 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea *Physics I for Dummies* 2011 valoarea \$37.62, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.
- [128] J. Persoz, "Mémoire sur l'Etat moléculaire des Corps composés, et Exposition d'une nouvelle Théorie moléculaire servant d'introduction à des recherches expérimentales sur plusieurs composés chimiques," *Annales de chimie et de physique*, vol. 60, p. 113, 1835.
- [129] F. de la Provostaye, "Action de l'acide sulfureux sur l'acide hypoazotique; cristaux des chambres de plomb; théorie de la fabrication de l'acide sulfurique," *Annales de chimie et de physique*, vol. 73, p. 362, 1840.

- [130] W. Henry, *Ann. of Philos.* 1826, May 1826.
- [131] E. Millon, *Annales de chimie et de physique*, Vols. S3, T6, p. 73, 1842.
- [132] M. L. Berzelius, "Mémoire Sur les proportions déterminées dans lesquelles se trouvent réunis les élémens de la nature inorganique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 78 30 Avril, 1811,3.
- [133] S. Domokos, *Tabelul Periodic al Elementelor*, D. E. S. PFA, Ed., 2016, p. 1.
- [134] S. Holzner, *Physics I For Dummies* ISBN 978-0-470-90324-7 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu comanda nr. 103-2694378-1121852 din 18 Decembrie 2012 cu cartea *Chemistry for Dummies* 2011 valoarea \$37.62, Wiley, 2011.
- [135] M. J. Berzelius, "Fin du Mémoire sur les proportions determines, dans laquelle se trouvent combine les élémens de nature inorganique," *Annales de Chimie et de Physique*, vol. 81 31 janvier, p. 5, 1812.
- [136] J. Lindon and et al., "Periodic Tabel of Elements," *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry*, p. 2528, 2000.
- [137] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 13.
- [138] H. Kopp, *Annales de chimie et de physique*, vol. 75, p. 406, 1840.
- [139] E. R. Scerri, *Studies in History and Physosopphy of Science Part A*, vol. 37, p. 308, 2006.
- [140] N. D. Epiotis and D. K. Henze, "Periodic Table (Chemistry)," *Encyclopedia of Physical Scienecs and Technology (Third Edition)*, p. 671, 2001.
- [141] many authors, *Histoire the l'Academie Royale des Scieneces Paris*, 1666-1780.
- [142] L. Huetinck and S. Adams, *CliffsQuickReview Physics*, Wiley, 2001, p. 184.
- [143] J. T. Moore, *Chemistry for dummies*, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 223.
- [144] M. Mansfield and C. O'Sullivan, *Understanding Physics*, ISBN 978-0-470-74637-0, comparata de la Amazon de Domokos Stefan din Buzau in data de 8 Junie 2012 cu factura nr. 103-5129980-1837858, Wiley, 2011.

- [145] G. F. dell'Antonio, "Introductory Article: Quantum Mechanics," *Encyclopedia of Mathematical Physics*, p. 109, 2006.
- [146] L. Snyder, "Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants," *J. Chem. Phys.*, vol. 55, p. 95, 1971.
- [147] S. Holzner, *Physics II for Dummies*, e-book, Wiley, 2010.
- [148] EngineeringandTechnologyHistoryWiki, "Milestones: Volta's Electrical Battery Invention, 1799".
- [149] Necunoscut_probabil_Delametherie, "Extrait des lettres de Vltta au professeur Gren (Annales de Chimie de Brugnatelli)," *Journal de physique, de chimie, d'histoire natureles et des arts*, vol. 48, p. 451, 1799.
- [150] C. de Wooliwich, "Experiences et observations sur l'electricite galvanique," *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [151] C. de Wooliwich, "Experiences et observations sur l'electricite galvanique," *Journal de physique, de chime, d'histoire naturelle et des arts*, vol. 51, p. 164, 1800.
- [152] I. CUCULESCU, I. M. POPESCU, F. CORNEA, O. STĂNĂȘILĂ, D. IORDACHE, I. BACIU, V. BRÂNZĂNESCU, C. CRISTESCU, C. PODINĂ and C. IONESCU-BUCUR, CULEGERE DE PROBLEME REZOLVATE PENTRU ADMITEREA ÎN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR MATEMATICĂ-FIZICĂ-CHIMIE, BUCUREȘTI: EDITURA ȘTIINȚIFICĂ ȘI ENCICLOPEDICĂ, 1984, pp. 368-369.
- [153] H. D. Nathan and C. Henrickson, *CliffsNotes Chemistry Quick Review*, Wiley, 2011, p. 164.
- [154] J. T. Moore, *Chemistry for dummies*, 2nd Edition ed., Wiley, 2011, p. 338.
- [155] M. Mansfield and C. O'Sullivan, *Understanding Physics*, Wiley, 2011.
- [156] J. C. OErsted, "Expériences sur l'effect du conflict électrique sur l'aiguille aimantée," *Annales de chimie et de physique*, vol. 14, p. 417, 1820.
- [157] J.-C. La Metherie and H.-M. D. Blainville, "Descriptin du nouvel apareil ou galvanique de M. Alexandre Volta," *Journal de physique, de chimie et d'histoire naturelle 1800*, vol. 51, p. 344, 1800, 344.
- [158] J.-C. Autor:Poggendorff, "Title: Méthode pour déterminer numériquement la force électromotrice d'une pile à effect non constant," *Journal: Annales de chimie et de physique, Paris, published previously in Annales de Poggendorff*, vol. LIV, page 161, Vols. series 3, volume 7, p. page 87, Year: 1843.

- [159] Clausius, *Annales de chimie et de physique*, vol. 39, p. 498, 1853.
- [160] C. Mantea and M. Garabet, Manual de fizica pentru clasa a 10 - a, Bucuresti: Editura BIC ALL, 2013.
- [161] H. D. Nathan, C. Henrickson and R. L. Ford, CliffsNotes Chemistry Quick Review, Wiley, 2011, p. 13.
- [162] Abria, "Sur l'aimantation par les courants," *Annales de chimie et de physique*, vol. 1, p. 385, 1841.
- [163] Delametherie, "Extrait des lettres de VIta au professeur Gren (Annales de Chimie de Brugnatelli)," *Journal de physique, de chimie, d'histoire natureles et des arts*, vol. 48, p. 451, 1799.
- [164] Peltier, "Définition des mots Quantité et Intensité électriques, tirée d'expériences directes," *Annales de chimie et de physique*, vol. 63, p. 245, 1836, 2.
- [165] J.-C. Autorul:Poggendorff, "Méthode pour déterminer numériquement la force électromotrice d'une pile à effect non constant," *Revista: Annales de chimie et de physique Paris lucrare publicata anterior in Annales de Poggendorff*, vol. LIV, page 161, Vols. seria 3, vol. 7, p. pag. 87, Anul: 1843.
- [166] C. Matteucci, "Sur la production de l'électricité voltaïque," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 10, p. 78, 1844, 1.
- [167] standardSO2, "stadardSO2".
- [168] E. Maumené, "Sur l'action réciproque de métaux et de l'acid sulfuric concentre," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 18, p. 311, 1846.
- [169] S. E. Domokos and S. Domokos, Chimie ISBN 978-973-0-27286-4, Buzau, 2018.
- [170] Avogadro, "Sur les volumes atomiques, et sur leur relation avec le rang que les corps occupent dans la série électro-chimique," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 14, pp. 330-369, 1845.
- [171] Dumas, "Sur la conversion de l'hydrogen sulfure en acid sulfurique," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 18, p. 502, 1846.
- [172] E. Wartmann, "Cinquieme memoire sur l'induction;," *Annales de chimie et de physique*, Vols. seria 3, volumul 24, p. 213, 1848, v. 24, p. 213.
- [173] Bequerel, "Considérations générales sur la théorie électrochimique," *Annales de chimie et de physique*,

Vols. seria 3, volumul 27, pp. 5-41, 1849.

- [174] Verdet, "Sur la propagation de l'electricite dans les electrolytes par Clausius," *Annales de chimie et de physique*, vol. 53, p. 252, 1858, v 53 p 252.
- [175] Peltier, *Annales de chimie et de physique*, vol. 67, p. 422, 1838.
- [176] K. E. Guthe, *Phys. Rev.*, vol. 19, p. 138, 1904.
- [177] Bequerel, *Annales de chimie et de physique*, vol. 41, p. 5, 1829.
- [178] E. Bequerel, *Annales de chimie et de physique*, vol. 5, p. 412, 1842.
- [179] H. Pellat, *Annales de chimie et de physique*, vol. 24, p. 5, 1881.
- [180] G. L. d. Tromelin, *Annales de chimie et de physique*, vol. 28, p. 217, 1883.
- [181] J. D. Bernal and R. H. Fowler, *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 515, 1933.
- [182] M. Jackson, ORGANIC CHEMISTRY REACTIONS Quick Study ACADEMIC, BarCharts, Inc., 2001.
- [183] X. Wang and et al., *Analytica Chimica Acta*, vol. 793, p. 79, 2013.
- [184] E. Kohn, CliffsQuickReview Geometry, Hoboken: Wiley, 2001.
- [185] S. A. Leduc, Cliffs Quick Review Differential Equations, ISBN 9780822053209, Wiley, 1995.
- [186] B. V. Zandy and J. J. White, CliffsQuickReview Calculus, ISBN 978-0-7645-6376-8 comparata de Domokos Stefan din Buzau de la Amazon din resurse financiare proprii cu ordinul nr. 105-6630974-6331466 din 16 August 2012 cu cartile Chemistry 2011 si Prealculus 2004 valoarea \$45.95, Hoboken: Wiley, 2001.
- [187] I. E. Alcamo and K. Schweitzer, CliffsQuickReview Biology, ISBN 978-0-7645-6375-1, Wiley, 2001.
- [188] I. E. Walters and M. Roner, Microbiology Quickstudy Academic, BarCharts, Inc., 2003.
- [189] R. Brooks, Biology Quickstudy Academic, BarCharts, Inc., 2009.

- [190] M. K. D. Rambo, *Analytica chimica acta*, vol. 775, p. 41, 2013.
- [191] D. J. Matthew, E. Tieu and M. D. Morse, "Determination of the bond dissociation energies of FeX and NiX (X=C, S, Se)," *J. Chem. Phys.*, vol. 146, p. 144310, 2017.
- [192] J. Stodart and Faraday, "Experiences sur les alliages de l'acier, faites dans la vue de le perfectionner," *Annales de chimie et de physique*, vol. 15, pp. 127-144, 1820.
- [193] D. Kastler, "Théorie quantique de la molécule de HF," *J. Chim. Phys.*, vol. 50, p. 556, 1953.
- [194] S. Weinbaum, „The Normal State of the Hydrogen Molecule," *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 593, 1933.
- [195] E. Bauer, *Annales de chimie et de physique*, vol. 29, p. 5, 1913.
- [196] Schroedinger, *Annalen der physique*, vol. 385, p. 437, 1926.
- [197] S. C. Wang, "The Problem of Normal Hydrogen Molecule in the New Quantum Mechanics," *Phy. Rev.*, vol. 31, p. 579, 1928.
- [198] C. Eckart, "Operator Calculus and the Solution of the Equations of Quantum Dynamics," *Phys. Rev.*, vol. 28, p. 711, 1926.
- [199] R. C. Sahni, "Electronic States of Molecules. I. Electronic Structure of BH," *J. Chem. Phys.*, vol. 25, p. 332, 1956.
- [200] L. C. Snyder, "Core-Electron Binding Energies and Slater Atomic Shielding Constants," *J. Chem. Phys.*, vol. 55, p. 95, 1971.
- [201] J. Sizemore and J. P. Mueller, *MATLAB FOR DUMMIES*, ISBN 978-1-118-82010-0, Hoboken: Wiley, 2015.
- [202] S. S. Shaik and P. C. Hiberty, *A chemist's guide to valence bond theory*, Hoboken: Wiley, 2008.
- [203] R. Threlfall, "On the Conversion of Electric Energy in Dielectrics. II," *Phys. Rev. (Series I)*, vol. 5, p. 21, 1 July 1897.
- [204] M. J. Berzelius, "Fin du Mémoire sur les proportions determines, dans laquelle se trouvent combine les élémens de nature inorganique," *Annales de Chimie*, vol. 81, p. 5, 1812.

- [205] A. S. Coolidge, „A Quantum Mechanics Treatment of the Water Molecule,” *Phys. Rev.*, vol. 42, p. 189, 1932.
- [206] SEDIMENTAR, "SEDIMENTAR," WWW.DEX.RO. [Online]. [Accessed 28 12 2023].
- [207] CĂLIRE, "CĂLIRE," WWW.DEX.RO, [Online]. Available: WWW.DEX.RO. [Accessed 29 12 2023].
- [208] Fontenelle_1669_pag_87, "Sur la coagulation," *Histoire de l'Academie Royale des Scienecs Paris 1669*, vol. 1, pp. 87-94, 1733.
- [209] Fontenelle_1666_pag_21_Hamel, "Experiences de l'augmentation du poids de certain matieres par calcination," *Histoire de l'Academie Royale des Scienecs Paris 1666*, vol. 1, p. 21, 1733.
- [210] S. E. Domokos and S. Domokos, NOTIUNI GENERALE DE FIZICA ISBN 978-973-0-26942-0, Buzau, 2018.
- [211] G. S. Autorul:Ohm, Cartea: Die galvanische Kette mathematische bearbeitet, Berlin, Anul: 1827.
- [212] L. Huetinck and S. Adams, CliffsQuickReview Physics, Wiley, 2001, p. 184.
- [213] J. H. van Vleck, "On the Theory of the Structure of CH₄ and Related Molecules. Part I1," *J. Chem. Phys.*, vol. 1, p. 177, 1933.
- [214] G. King and A. Warshel, "A surface constrained all-atom solvent model for effective simulations of polar solutions," *J. Chem. Phys.*, vol. 91, p. 3647, 1989.
- [215] Resistivty_Wikipedia, "Resitivity".
- [216] M. Mansfield and C. O'Sullivan, Understanding Physics, ISBN 978-0-470-74637-0, cumparata de la Amazon de Domokos Stefan din Buzau in data de 8 Junie 2012 cu factura nr. 103-5129980-1837858, Wiley, 2011.
- [217] D-TOYS.
- [218] S. E. Domokos and S. Domokos, Fizică, ISBN 978-973-0-27070-9, Buzău, 2018.
- [219] Z. Lin and et al., *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235701, 2017.

- [220] J. Faist and et al., *Science*, vol. 264, p. 553, 1994.
- [221] Unknown, IMAGING OPTICS A Technical Resource for Imaging Solutions V173E, Edmond Optics, 2017.
- [222] C. A. Cascio and J. A. Clark, "Real-time wave vector analysis with a charge coupled device," *J. of the Acoustical Society of America*, vol. volumul 67, p. pagina S32, anul 1980.
- [223] D. M. Chapin, C. S. Fuller and G. L. Pearson, "A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electric Power," *J. Appl. Phys.*, vol. 25, p. 676, 1954.
- [224] M. Volk and W. Stolz, "Determination of refractive index and direct bandgap of lattice matched BGaP and (BGa)(AsP) materials on exact oriented silicon Copyright Clearance Center License Number 4310170276408 License date Mar 15, 2018," *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235702, 2017.
- [225] K. C. Collins, A. M. Armstrong, A. A. Allerman, G. Vizkelethy, S. B. Van Deusen, F. Leonard and A. A. Talin, "Proton irradiation effects on minority carrier diffusion length and defect introduction in homoepitaxial and heteroepitaxial n-GaN," *J. Appl. Phys.*, vol. 122, p. 235705, 2017.

A

18. 03. 2024

Domokos Stefan

Substanțele, atomul și molecula

Editura SCIENTIFIC TECHNOLOGY

Editie electronică CD-ROM

ISBN 978-606-9647-80-6

Bucură

2024

Editie electronică ONLINE

ISBN 978-606-9647-81-3

Obiecte de la Muzeul Județean Iași:

Aceste obiecte sunt: neceri, vârfuri de
 lance deosebite, lancea are o parte din
 lemn care a putrezit, toporare,
 obiecte de podaribă, de harmanamoni
 folosite la călărie și pentru muncile
 cu cai (1)

St. Domokos

18. 03. 2024

2

La Muzeul Brăilei Carol I sunt
 expuse: ulcioz, sec. IV î.e.m.,
 ulcioz, sec. II-III î.e.m., Skyphos
 elenistic-olii Pergam, sec. II î.e.m.,
 din jud. Brăila (2).

H. Hrabaru

3

19. 03. 2024

Tot la Muzeul Braila Carol I la
Galeria Foto se pot vedea:

- Castrom ^{din lut} dintr-o asezare geto-dacica
din sec. II î.e.n., din jud. Braila,
- Rășnita de tip clasic - roman
dintr-o asezare geto-dacica din
sec. II î.e.n. din jud. Braila,
(mola și catilhus),
- Piere de port, de podolă și moneda
geto-dacica din sec. II - I î.e.n.
din jud. Braila, care dintre care
unele sunt galbene asemănătoare
cu cuprul, ^{bronzul} ~~aurul~~, altele
sunt roșii asemănătoare cu
cuprul, ^{și bronzul} și albele gri ca fierul.
- moneda geto-dacica din
sec. II - I î.e.n. dintr-o asezare
geto-dacica din jud. Braila,
roșii ca cuprul;

X. Ximulea

19. 03. 2024

4

- cercei și verigi din bronz dintr-o
 aperezare geto-dacică din sec. II-I
 î.e.n. din jind. Brăila;

St. Jurel

5 19.03.2024

- Măgele din sticlă, de culoare maro, netrușorată, dintr-o apărare geto-dacică din sec. I î.e.n. din jud. Brașov.
- Macheta de lăcuire în marmură din epoca neolitică ^{din perioada} 4400-4000 î.e.n. din jud. Brașov.

H. Dumitru

19. 03. 2024

6

Cuprul matier conține cupru pur, și este mult răspândit în crusta Pământului, în lavă vulcanice solidificate și în roci sedimentare (3).

Rocile sedimentare se formează prin depunerea materialelor din apă (4).

În urmă cu 3100 ani, în Peru, cuprul matier a fost prelucrat cu ciocanul în folii subțiri, din care s-au confecționat unelte, (și) și a fost călit, și s-a prelucrat și aur (5).

și
Prelucrarea cu ciocanul a cuprului a precedat prelucrarea lui prin topire (5)

St. Hemelev

7 20.03.2024

Tot la Muzeul Brăilei Carol I se pot
vedea (2):

- Fibule din bronz dintre-o aşezare
geto-dacăică din jud. Brăila
din sec. II - I î.e.n. (2).
- Instrumente din fier dintre-o aşezare
geto-dacăică din jud. Brăila din
sec. II - I î.e.n. (2).

St. Simulea

20. 03. 2024

8

- Creuzetă dintr-o operare geto-dacică
din jud. Brăila din sec. I î. e. n

(2)

- Vas din lut din jud. Brăila din
epoca medievală, cca. 4700 - 4500

î. e. n (2).

H. Simileu

9 20.03.2024

- cană din lut cu toartă ~~de~~ dintr-o
as - asezare gelo-clasică din jud.
Brăila, din sec I î.e.m. (2)
- borcan din lut dintr-o asezare
gelo-clasică de la Grădina
din jud. Buzău, din sec I î.e.m. (2).

St. Stancu

20.03.2024

10

- corif attic din bronz din mormintele
aristocratice getice de la Gărzani
din jud. Botoșani din anul
350-300 î.e.n. (2)

Un material transformativ folosit
de alchimisti a fost numit piatră
filozof - filozofilor (6).

Alchimistii au crezut că aurul, argintul,
și pietrele prețioase se pot crea
prin metode transformatoare (6).

11 20.03.2024

Alte scopuri ale alchimistilor au fost creșterea puterii medicinale, să găsească elixirul care prelungeste viața, și salvarea sufletului (6).

Viticultura ~~ea~~ a fost practică cu 4000 ani î.e.n. în Orientul Mijlociu (7)

Vinul a fost produs de Egypțeni cu

2500 ani î.e.n., de Grecii Antici

și Romanii Antici (7). Efectul vinului de a produce bună dispoziție și

bucurie pentru munca zilei

îndeplinite, ^{ale zilei} ~~tră~~ dus cu siguranță

pe medici și alchimisti să caute și să

găsească și alte substanțe

care au aceste efecte.

Dr. Simușcu

20. 03. 2024

12

21. 03. 2024

Chimistii antici au descoperit fabricarea
otidii, au curatat pielea, au reparat
hainele, au extras metalele din
minereurile lor, si au produs
aliaje din metale (8)

St. Kemeleer

13

21. 03. 2024

Un alchimist din secolele IV-V a putut să formuleze următoarele concluzii din experimentele lui (8):

1. * Prin încălzirea apei într-un vas închis, apa a dispărut încet și în vas a rămas o cantitate de substanță solidă altă asemănătoare cu pământul, (8). Atunci alchimistul a putut să spună că apa a fost schimbată în pământ și aer (8).

2. Atunci

2.

St. Ximbleu

21.03.2024

14

2. Prin scufundarea în apă a unei bucăți de fier încălzit la culoarea roșie, sub un vas de sticlă de forma unui clopot, o parte din apă s-a schimbat în aer, și atunci când o lumânare a fost introdusă sub clopot, aerul a luat foc, și atunci alchimistul a formulat concluzia că apa a fost schimbată în foc (8)

St. Krumke

15 21.03.2024

O practică a alchimistilor a fost analogă,
și ca această metodă adăugând
substanțe diferite la condiții
experimentale identice (8).

St. Grigorescu

21. 03. 2024

16

Gânditori din culturile antice au pus
 întrebări ale filozofiei naturii ca (7):
 cum ^{se poate obține} ~~se pot obține~~ ~~anote lucrarea la~~
~~viața~~? Din ce sunt făcute
 obiectele? Dacă se pot transforma
 unele în altele în albe albe?

X. Krumm

17

21. 03. 2024

Grândirea alchimistilor a constat din
 faptul că dacă găseai răspunsul la
 primele două întrebări, atunci
 cauta să descopere rețete și
 aparate să producă substanțe
 pretioase (F)

H. Hemeleu

21. 03. 2024

18

Doi mari realizări de chimie ale alchimistilor au fost (7):

1. Au crezut că pot să extragă impuritățile dintr-o substanță (7), și exemple de amestecuri de substanțe sunt bronzul, oțelul, și anumite substanțe naturale în care se găsește sulf în combinație cu alte substanțe pe care le-am prezentat mai înainte în această carte.

2. Au amestecat substanțe și au crezut noi substanțe cu proprietăți ~~cu totul~~ diferite (7).

H. Hensel

19 21.03.2024

Un text despre alchimia din Grecia
antică și Imperiul Roman antic
este din secolele II sau IV î. e. m.
și este format din două părți:

Papirus X din Leiden și
Papyrusul din Stockholm (7)

H. Hunslee

21. 03. 2023

20

Un autor citat frecvent este filosoful
Democritus (460 - 370 î. e. n.) (7).

Obținerea bronzului se face prin
amestecarea unor substanțe, așa
cum am prezentat mai înainte
în această carte, și bronzul a
fost fabricat de geto-daci (2),
ceea ce înseamnă că și ei realizau
amestecarea unor substanțe ca
alchimistii.

Dr. Kuculea

21 03. 2024

21

-B

- clopotii, zăbala, ~~ser~~ psaltii, ind și mărgelile
 din mormântul aristocratic getic
 din Gura, jud. Brăila, 350-300
 î.e.n. (2)

mărgelile împodobite cu pietre alluatre,
 galbene și maro, colorate la fel și
 în exterior și în interior, dintr-un
 mormânt aristocratic getic, din
 jud. Brăila, 350-300 î.e.n. (2),
 ceea ce poate să însemne că sunt
 din Olcița.

H. Simileu

21.03.2024

22

- oemochoe sau ulcioz din lut din
 Histria din 500 î.e.n., din
 Mormântul de incineratie getică
 din jud. Brăila 350-270
 î.e.n. (2), cu o dungă
 simplă și două perechi de dungi
 de jar împrejur, și un model
 ondulat de jar împrejur, colorate
 în maro.

H. Stancu

24

18.03.2024

Bibliografie

(1) Muzeul Județean Ialomița Clădit 1,
Colecția de arheologie, Muzeul Județean
Ialomița Slobzia Județ Ialomița
România, 2

<https://mjialomita.ro/colectia-de-arheologie/>

(2) Muzeul Brăilei Carol I, Arheologie,
Patrimoniul,

<https://www.muzeulbraila.ro/arheologie/patrimoniul/>

(3) Cornwall, Henry, A summary of ideas on the origin of native copper deposits, In: Economical geology and the Bulletin of the society of economic geologists, vol 51, 1956, p. 1, 1956.

(4) Grigorescu,

X. Xxxxxxx

19.03.2024 25

(5) Burger, L., et al., Early central
andean metal working from
Mima Perdida Peru,

Science, vol 282, p. 1108,

Issue 5391, 1998.

(6) Cartwright, Mark, Alchemy,

World History Encyclopedia, 24

Aug 2023

(7) Maynard, A. Amerine, wine,

Britannica, 8.03.2024,

www.britannica.com/topic/wine

(8) Muir, M. M. Pattison, ^{Heroes of science: chemists} The Story of
Alchemy and Beginnings of
Chemistry, Digicart, aug 2022.

St. Mueller

1

07.07.2025

Domokos Stefan
Substanțele, atomul și molecula
'ediția a 2'-a

Editura SCIENTIFIC TECHNOLOGY
Ediție electronică CD-ROM

Buzău

2025

ISBN 978-630-6695-17-1

St. Simion

07.07.2025

2

Domokos Stefan, Substantele,
atomul și molecula, Editura
SCIENTIFIC TECHNOLOGY,
Buzău, 2025.

Domokos Stefan este directorul
și singurul angajat al
editurii.

Adresa editurii: Str. Pietrariile,
nr. 6, bl. d3, sc. c, ap. 6, et. 2, Buzău,
cod postal 120049, jud. Buzău
Tel: 0040725243907
Email: sgdomokos@yahoo.com

St. Domokos

6

07.07.2025

1. Recunoasterea mineralelor

Bibliografia acestui capitol este lucrarea (1).

În scoarta terestră se găsește solidă se găsesc minerale și roci. Rocile sunt asociații ale mineralelor.

Toate substanțele continuate în Terra sunt studiate de mineralogie.

Toate substanțele care se formează în scoarta solidă a Pământului, fac parte din ea, sunt omogene din punct de vedere

fizico-chimic, anorganice, solide și lichide, se numesc minerale.

în regulul al X^{III}-lea
Până, ~~la~~ (erul mediu) au fost descoperite următoarele minerale:
cupru (2), fier (3), argint (4)(5), plumb (-5)(6)
sulf (6)(7), mercur (8), ~~conținut~~ (9). Numit

7

07.07.2025

La Muzeul Județean Iași, în Colecția de numismatică, se pot vedea piese republicane și imperiale din ~~ia~~ bronz și argint din Imperiul Roman, Imperiul Bizantin, Bulgaria, Austro-Ungaria și România.

08.07.2025

Cuprul a fost prelucrat cu cioranul în urmă cu 3100 ani, din el s-au confectionat unelte, folii subțiri, s-a prelucrat și aur cu care s-a acoperit cuprul, și ulterior cuprul a fost prelucrat prin topire (6)

Prelucrarea cuprului (6):

- S-a prelucrat în urmă cu 3100 de ani în Peru cu cioranul;

S. Simileu

8

08.07.2025

- din ^{cupru} ~~acela~~ s-au confectionat
unelte și folii subțiri;
- a fost cōlit;
- s-a prelucrat aur;
- obiectele de cupru au fost
acoperite cu folii de aur;
- ulterior cuprul a fost
prelucrat prin topire.

Cărbunele a fost extras din
mine în Anglia (9).

Plumbul a fost descoperit în
Amichitate (10).

Mercurul și apa sunt lichide
omogene, și sunt singurele lichide
care se consideră minerale.

Mineralele solide au forme
geometrice determinate de mai
multe plane cu orientări
caracteristice fiecărui mineral.

J. Kusch

9

08.07.2025

Cristalele sunt
 Corpurile solide ale căror (formă)
 suprafețe reflectă simetria în
 care intermă în care sunt
 aranjați atomi component. (11)

Unele Minerale apar sub forma
 unor cristale. Sarea apare
 sub forma unor cristale cubice.

Alte minerale cristaline
 sunt aurul, cuarțul și pirita.

~~Corpuri gelati~~

Dacă substanțele nu au o
 compoziție chimică omogenă,
 care variază și în timp și
 în loc, ele nu sunt minerale.

Alfel de corpuri sunt gelatinose,
 coloidale, lichide și gazoase.
 Alfel de corpuri sunt unele
 opaluri gelatinose, sticlele naturale
 vulcanice, lăvele, apele subterane
 și apele minerale. H. Xunlur

10

09. 07. 2025

Materia solidă are ^{și} o stare de agregare numită cristalină, care se poate forma și în natură și în laborator ^{și} uzine.

Corpurile amorfe au toate proprietățile fizice identice în orice punct în toate direcțiile, și se spune că sunt izotrope pentru aceste proprietăți fizice.

De obicei, ^{unele} proprietățile fizice ale cristalelor, nu sunt identice în toate direcțiile.

~~Pz~~ Toate proprietățile fizice sunt identice în toate direcțiile ~~la~~ e în corpurile amorfe.

St. Kundu

11 10.07.2025

Se numesc

Dacă Corpurile solide ^{care} au
~~toate p~~ aceleasi toate proprietatile
 fizice în toate directiile se
 numesc izotrope.

Corpurile solide care nu au
 aceleasi toate proprietatile
 fizice în toate directiile se
 numesc anizotrope.

Sunt și minerale care se
 găsesc în stare amorfă.

Exemple sunt: opalul, sticla
 vulcanică, limonitul.

Pentru etalonarea unui
 termometru cu mercur s-a
 folosit proprietatea că
 mercurul se dilată liniar cu
 temperatura (12).

St. Gunchu

10-12 10.07.2025

Legea dilatării liniare a solidelor
este (13):

$$\Delta l = \alpha \cdot \Delta t \cdot l_0,$$

unde Δl este alungirea datorită
dilatării termice, α este coeficientul
de dilatare termică a
solidului caracteristică a
substanței, și l_0 este lungimea
inițială a solidului, unde

$$\Delta l = l - l_0,$$

unde l este lungimea finală
a solidului.

Ca aceste cunoștințe despre
dilatarea liniară a solidelor
analizăm dilatarea unei
sfere din sticlă, care este amorf, și
a unei sfere din cuarț, care este cristalin.

St. Nuneș

13

10. 07. 2025

Sfera ~~de~~ ^{din} sticlă după dilatare
 rămâne tot sferică, și sfera
~~de~~ ^{din} cuarț după dilatare devine
 elipsoidală. Aceasta înseamnă
 că la dilatare ^{termică} sticlă este
 izotropă, are același coeficient
 de dilatare ^{termică} în toate direcțiile,
 și cuarțul este anizotrop, nu
 are același coeficient de
 dilatare ^{termică} în toate direcțiile.

Pentru unele proprietăți,
^{unele} ~~acelasi~~ cristale pot fi izotrope,
 și pentru alte proprietăți
 anizotrope. De exemplu, pentru
 cristalul de sare, care are
 forma de cub a cristalului,
 viteza luminii este aceeași în
 orice direcție. St. Ionescu

14

10. 07. 2025

Cristalul de sare este izotrop din
 punct de vedere optic. Forma
 cubică a cristalului de sare
 înseamnă că atomii sunt
 dispuși în cea mai mică
 celulă în vârfurile unui
 cub. Se confecționează trei
 esantioane ^{identice} paralelipiped
 dreptunghiic din sare, una
 cu înălțimea paralelă cu
 una din ^{laturile} fețele cubului, una
 cu înălțimea paralelă cu
 o diagonală a unei fețe a
 cubului, și una cu înălțimea
 paralelă cu diagonală mare
 a cubului.

St. Fundu

15

10. 07. 2025

Cu această lege a alungiri liniare la tracțiune,
 ✓ La același efort de tracțiune,
 alungirea cubului variază în
 funcție de direcția forței
 aplicate în cub.

Efortul unitar, numit uneori
 tensiune, este definit prin (14)

$$\sigma = \frac{F}{S}$$

unde F este forța și S este aria suprafeței
 Legea alungirii ^{liniare la tracțiune} elastice
 unor solide este (15)

$$\sigma = E \frac{\Delta l}{l_0}$$

unde E este modulul lui
 Young de elasticitate, Δl
 este alungirea, l_0 este lungimea
 inițială, și σ este efortul
 unitar.

H. Hunsler

16

10. 07. 2025

Și superea se produce la eforturi diferite pentru cele trei direcții.

Formele rotunjite, sferoidale, reniforme,

11. 07. 2025

Formele coloforme, care sunt forme rotunjite, sferoidale, reniforme, stalactitice, sunt formele în care apar de obicei mineralele amorfe.

Formațiunile coloidale și gelurile prin întărire produc minerale amorfe.

Materia omogenă are două categorii de proprietăți:
1. Proprietățile scalare se definesc printr-o valoare numerică.

St. Iunuliu

17

11.07.2025

În toate punctele și în toate direcțiile ele au aceeași valoare într-un corp omogen. Numai variațiile de temperatură și de presiune influențează aceste proprietăți.

Densitatea și căldura specifică sunt astfel de proprietăți. Pirită de exemplu are aceeași densitate ~~proprietăți~~ în toate părțile mineralului.

2* Proprietățile vectoriale au valori diferite în direcții diferite.

* Teoria aranjamentului ordonat de particule elipsoidale din care este construit cristallul a fost elaborată de Huyghens în 1690.

St. Kumbur

18

11. 07. 2025

Cu această teorie el a explicat proprietățile optice ale calcitului.

Așezarea ordonată și compactă a unor particule sferice care constituie cristalele este teoria introdusă de Lomonosov, în prima jumătate a secolului al XVIII-lea, pentru a explica formele regulate ale cristalelor de sare și de salpetru.

Viteza luminii a fost determinată aproximativ (16), și este determinată cu mare precizie (17). Această viteză se folosește în studiul proprietăților cristalelor.

H. Hurel

19

11. 07. 2025

Pentru caracterizarea mineralelor se folosesc proprietățile lor fizice și chimice. Unele din aceste proprietăți se studiază în acest capitol.

Căldura specifică este căldura pe unitatea de masă extrasă din corp pentru a produce variații determinate de temperatură (1°), și variația de temperatură poate fi ~~care poate fi~~ 1° grad, $^\circ\text{C}$.

$$c = \frac{Q}{m \cdot \Delta t}$$

unde Q este ~~masa cor~~ căldura extrasă, m este masa corpului, Δt este variația de temperatură, și c este căldura specifică. Căldura specifică este folosită pentru caracterizarea (mineralelor) solidelelor, lichidelelor, și gazelelor, și c est

St. Kuvulu

20

11. 07. 2025

Câteva proprietăți care variază cu direcția sunt: viteza luminii, conductivitatea termică, viteza de creștere a cristalelor, coeziunea, etc.

În toate direcțiile paralele, proprietățile vectoriale au aceeași valoare în toate ~~direc~~ corpurile omogene.

În cristale, suprafețele sunt orientate pe direcțiile aranjării atomilor componente (ii).

Prin folosirea divizului cristalelor, care astfel se pot diviza în părți cât mai mici, ceea mai mică particulă indivizibilă care se obține are formă paralelipipedică, R. I. Haüy, în 1781 a emis teoria că cristalele sunt formate din aceste particule indivizibile. St. Xumbeu

21

11. 07. 2025

Teoria lui Huyghens a refracției spune că viteza luminii este diferită în cele două medii, ~~aceea~~ ~~medi~~ aceea din care vine lumina și aceea în care intră lumina, și raportul dintre vitezele luminii în primul mediu și al doilea mediu este egal cu indicele de refracție, și cu raportul sinusurilor unghiului de incidență și al celui de refracție (19). O rază care cade pe cristallul de Islanda se desface în două raze: una care se refractă după legea refracției, și a doua care nu respectă legea refracției (19).

H. Huidu

22

11. 07. 2025

Se cunoșteau următoarele ~~substanțe~~
 și materiale: calcaroase,
 (steatit, calcedonie, argilă colorată,
 argiloase, silicioase, etc.,
 cuarț, opal (20). Acestea
 apar în natură.

12. 07. 2025

Se cunoșteau de asemenea nisip
 granitic, agat opal, pietre
 colorate în verde, argilă,
 silica amestecat cu alumina
 de sare, colorată de oxidul
 de nikel.

Cristalele de
 sare se găsesc în orele
 de sare (1).

Forma mineralilor din natură
 este de cele mai multe ori
 a unor granule care nu au
 contururi regulate (1) Sf. Kunkin

23 12.07.2025

Ele apar ca părțile componente ale
reacțiilor și minereurilor (1).

30,

30.1. Reactanți și produse

30.2. Teoria cîrmurilor

30.3. Reacții exoterme

30.4. Reacții endoterme

30.5. Tipuri de reacții

30.5.1. Reacții de combinare

30.5.2. Reacții de descompunere

31. Acizi și baze

32. Electrochimie

32.1. Electroliza

32.2. Celula electrochimică

32.3. Reacția de oxidare din
celula electrochimică32.4. Reacția de reducere din
celula electrochimică

32.5. Efectele pilei voltaice

32.6. Legea lui Ohm cu pila
voltaică prin electrocutare

B. Xumbar

24

13. 07. 2025

O serie de substanțe nu sunt omogene din punct de vedere al compoziției lor chimice, și această compoziție variază în timp și loc. Astfel de substanțe sunt substanțele gelatinoase, coloidale, lichide și gazoase, ca de exemplu unele opaluri gelatinoase, sticlele naturale vulcanice, lavele, apele subterane și minerale care curg și în drumul lor dădă o multitudine de elemente chimice și astfel compoziția lor ^{chimică} se modifică în timp ce înaintază în drumul lor, și produc și depuneri de substanțe.

H. J. J. J.

25

13. 07. 2025

Altfel de substanțe pot fi și solide.

Altfel de substanțe sunt unele gaze naturale, de exemplu:

helium, dioxid de carbon,

hidrogen sulfurat, vaporii de apă, etc. Amestecarea

acelor gaze cu aerul duce

la modificarea în timp și spațiu a concentrației lor.

Acele substanțe formează o clasă mai largă numită substanțe minerale.

Supunerea corpurilor solide la întindere și compresie produce depărtarea sau apropierea moleculelor lor (15).

H. Ximuliu

26

13.07.2025

În funcție de mărimea forței de tracțiune, moleculele corpurilor solide abandonează brusc pozițiile lor de echilibru și ajung într-o altă stare de echilibru (15) după un anumit timp (15).

Corpurile solide nu se alungesc continuu ci printr-un salt brusc sub acțiunea unei forțe de tracțiune (15).

Dacă mărim forța în timpul acestei mișcări, moleculele ajung după un timp într-o altă poziție de echilibru (15).

Efortul unitar la rupere este o caracteristică a solidelor, și este definit prin (14).

St. Kunka

27

13.07.2025

Alungirea sub acțiunea unei forte este tot o caracteristică a corpurilor solide. (15).

Viteza luminii este o caracteristică a solidelor (105). (16)

Pentru construirea maximilor și maximilor anelle se folosesc fierul extras din minereuri oxidice și carbonatate care sunt: magnetit, hematit, limonit, și siderit (1).

32.8. Dispozitiv ~

32.9. Producerea ~

32.10. Procedeu pentru studiul ~

32.11. Procedeu pentru demonstrarea ~

32.12. Propagarea ~

32.13 Oxidarea ~

St. Xumku

28

14.07.2025

32.14. Măsurarea ✓
 32.15. Pila ✓
 32.16. Pila cu sulfat de cupru ✓
 33. En
 33. Opt ✓
 34.5 Opt. ✓
 38.6 Parte ✓
 37. Minusul ✓

St. Iacob

29

07.07.2025

Bibliografie

- (1) Codarcea, Al., Mineralogie
Partea I Cristalografia,
Editura de stat didactică
și pedagogică, București,
1961.
- (2) (14)
- (3) (20)
- (4) (2) Muzeul Județean Ialomița,
Colecția de numismatică,
www.mjialomita.ro
- (5) (26) Muzeul Carol I Brăila
~~(29) Bell, Terence~~
- (6) ~~(5)~~ (30) Lewis, Jack
- (7) Kutney, Gerald,
- (8) Mercurul (52) 10 pag 45
- (9) Cărbunele ~~(45)~~ 0-45
- (10) Le Acharia, Somobrata, Lead
between the lines, Nature Chemistry,
5, p. 894 (2013)

St. Juncu

30

08.07.2025

(11) Britannica, Science & Tech,
crystal, physics,

Gerald D. Mahan,

6.06.2025

www.britanica.com/science/crystal

(12) Stinte 238, Academie Française de,

Chimie examen des eaux de

Versailles, Histoire de l'Academie

Royale des Sciences Paris

Biblioteca Natională a Franței

1683, vol 1, p 238

(13) Cuculescu, I., Culegere de probleme
rezolvate pentru admiterea în
învățământul superior, Editura
Științifică și Enciclopedică,
București, 1984, p. 182.

St. Kukulcu

31

10. 07. 2025

(14) Navier, M., Annales de Chimie et de physique, vol 33, p 225-240

1826. ^{Expériences sur la Résistance de} diverses substances à la rupture causée par une tension longitudinale

(15) Mamon, A., Sur l'élasticité du corps solides, Annales de chimie et de physique, vol 53 T3, p 451-462 1841.

(16) Foucault, Léon, Sur la vitesse de la lumière dans l'air et dans l'eau, Ann. chim. phys. vol. 41, pp. 129-164, 1854.

(17) Jonescu - Andrei, R., et al., Fizică F1/F2 manual pentru clasa a XII-a, Grup Editorial Art, Bucuresti, 2010.

(18) Dulong; Petit, Recherches sur le lois de dilatation des solides, des liquides et des fluides élastiques, et sur la mesure exacte des températures, Ann. chim. phys., vol. 2, pag. 240, 1816. ^{L. Jussieu}

32

11.07.2025

(19) Font Academie de Stiinta a Francei,
 Matematica, Dioptrique, Sur la
 lumiere, Histoire de l'Academie
 Royale des Sciences Paris 1679,
 vol. 1, pag. 283,

(20) Academiade Stiinta a Francei
 Annales de chimie ou recueil
 de memoires concernant la
 chimie et les arts qui en dependent,
 vol. 1, pag. 142, 1789, Paris.

Notice sur la fouille de la
 chrysoprase

H. Gmelin

Dictionnaire français-roumain

33 - 1-22 11.07.2025

chrysoprase - crisopraz

amas -

calcaires - calcaros, calcar, piatră de var

argilleuses - argilos

siliceuses - silicios

magnésiennes -

terres bolaires - —

- " - ~~ore~~ otreuses - caouul,moëlle de pierre - ^omădură, esență

stéatites - pierre ollaires - steatit

talc - talc

quartz - quartz

pétrosilex - —

opale - opal

calcédonie - calcedonie

ore - argilă colorată

sable - nisip

alumine de chaux -

alumine - alumina chimie

E. Humber

D F-R

34- 2

13.07.2025

accroissement - creptere, mairice

J. Lumbin