

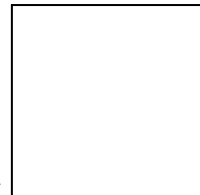
**LISTA DE ÎNTREBĂRI PENTRU EVALUARE CURS**

Specializarea: **CHIMIE & CHIMIE MEDICALĂ (Licență-An. 1)**

Disciplina: **STRUCT. PROPR. MOLEC.**

Cadru Didactic Titular: **Mihai V. PUTZ (Prof. univ. dr. dr.-habil.)**

1. Legătura cuantică dintre Univers și Evoluție este cel mai bine redată prin...
2. Probabilitatea din evoluția cuantică apare cu necesitate deoarece...
3. Coerență, divergență, interferență – sunt toate atribute ale...
4. Experimentul cu două fante este paradigmatic pentru lumea cuantică pentru că...
5. Universul cuantic are următoarele atribute:...
6. Variabilele ascunse din Teoria cuantică lui David Bohm pot fi considerate...
7. Originea mecanicii cuantice rezidă în înțelegerea rolului funcției de undă ( $\Psi$ ) ca...
8. Legătura principală dintre molecula cuantică și *experimentul cu două fante* rezidă în...
9. Care sunt formele cuantice ale legăturii chimice?...
10. Care este legătura dintre formele cuantice ale legăturii chimice și interferență?...
11. Formulați o întrebare fundamentală (universală) despre lume și viață și dați un răspuns fundamentat cuantic:  
A:   
Q:
12. Interpretați din perspectivă cuantică, pe scurt (în max. 25 de cuvinte), poezia “*Ce am înțeles trăind*” [“*Viața.....Trece*”], a lui Mircea Cărtărescu.
13. Care este diferența dintre atomul cuantic și atomul observat?
14. Cum se poate integra conceptul de *coerență cuantică* în conul spațio-temporal relativist?



15. Cum arată un spectru de energii cuantice de structură? Desenați aici:
16. Care este legătura dintre conceptul de *ergodicitate* și cel de *împrăștiere* cuantică?...
17. Unde se manifestă conceptul de “amestecare cuantică” (*entanglement*) într-un potențial de tip molecular? ...
18. Prin ce generaliză conceptul de punct-cuantic (*quantum-dot*) structura atomului cuantic?...
19. Cum poate fi considerat efectul Doppler în evoluția cuantică? ...
20. Formulați și explicați (în max. 25 de cuvinte) un enunț cu sens cuantic prin combinarea următoarelor elemente ale realității [*Rece, Puls, Impuls, Conexiune*]


21. Formulați și explicați (în max. 25 de cuvinte) un enunț cu sens cuantic prin combinarea următoarelor elemente ale realității: [Nu ating, Foton, Rece, Puls]


22. Formulați și explicați (în max. 25 de cuvinte) un enunț cu sens cuantic prin combinarea următoarelor elemente ale realității: [Cutie, Vid, Viu, Pisică]


23. Formulați și explicați (în max. 25 de cuvinte) un enunț cu sens cuantic prin combinarea următoarelor elemente ale realității: [Atom, Întuneric, Împrăștiere, Vânt]


24. Formulați și explicați (în max. 25 de cuvinte) un enunț cu sens cuantic prin combinarea următoarelor elemente ale realității: [Viu, Superpoziție, Mort, Lumină]


25. Formulați și explicați (în max. 25 de cuvinte) un enunț cu sens cuantic prin combinarea următoarelor elemente ale realității: [Big Bang/"Primordial Scream", Inflație/"Nisip", Expansiune/"Vânt", Big Crush/"Colaps"]


26. În care din regiunile 1-2-3-4 ale unui spectru al densității de energie în funcție de frecvența absorbită/emisă se manifestă "undele staționare", și de ce?

27. Cuantificarea de tip Planck ( $\hbar\omega$ ) este universală pentru *structura* sistemelor naturale deoarece...

28. Cuantificarea de tip Bohr ( $h\nu$ ) este universală pentru *proprietățile* sistemelor naturale deoarece...

29. Ce efect au fluctuațiile cuantice asupra nivelelor cuantice în structura atomilor și moleculelor?

30. Cuantificarea de tip de Broglie ( $p \otimes \lambda = h$ ) este universală la nivelul *substanței* deoarece...

31. Cuantificarea de tip de Broglie ( $\Delta p \otimes \Delta x = h$ ) este universală la nivelul materiei deoarece...

32. Care este temperatura  $T$  a unui sistem cuantic vibrațional cu pulsația  $\omega$  ?

33. Care este pulsația vibrațională  $\omega$  a unui sistem cuantic în mișcare cu viteza  $v$ ?

34. Orice mărime clasică (macroscopică) are un corespondent cuantic, deoarece...

35. Orice mărime care se conservă este Q-cuantificabilă, adică...

36. Completați cu câte un concept sau atribut cuantic pentru fiecare din nivelurile de reprezentare a cunoașterii lumii, în ordinea universurilor FIZIC → CHIMIC →

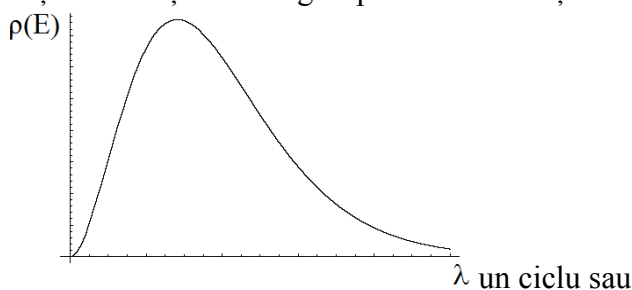
MATEMATIC → METAFIZIC → ETIC → POETIC → MISTIC:   
 →  →  →  →  →  
 →

37. Problema observabilității cuantice se referă la...
38. Diferența dintre *observat/măsurat* și *observabilitate/observabil* constă în...
39. Structura și proprietățile unui sistem cuantic (și molecular) sunt caracterizate cuantic, direct sau prin combinația, de OBSERVABILELE fundamentale ...
40. Explicați prin max. 25 cuvinte sau prin sinonime și alocuțiuni cu semnificație cuantică sintagma “Universul Ierarhic și Integrat!”


41. Indicați și explicați (în max. 25 de cuvinte sau schematic printr-o figură) corespondența adecvată între dualitatea (*undă-corpusul*) și binomul (*entropie-informație*).

--

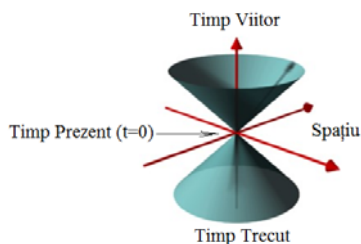
42. Indicați (desenați) pe curba dependenței densității de energie spectrală în funcție de



lungimea de undă absorbită/emisă  
 un mecanism de tunelare a informației cuantice între 2 stări ( $\rho, \lambda$ ) arbitrare.

43. Ce se înțelege prin “*Universul dual cuantic*”?
44. Ce rol are constanta lui Planck în cuantificarea structurii proprietății sistemelor (moleculare)?...
45. Care este legătura dintre funcția de undă  $\Psi$  și probabilitatea de observare  $\wp$  a acesteia?
46. Completați spațiile goale din funcția de undă sub forma
- $$\Psi = A \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} ( \_\_ \otimes t - \_\_ \otimes x ) \right]$$
47. Dacă funcția de undă se poate considera generic de forma conceptuală  $\Psi \sim UNDA \otimes CORPUSCUL$  cum arată  $\Psi^2 = \Psi \otimes \Psi \sim ? \dots$
48. Într-o *tranziție cuantică* a unui sistem, *non-conservabilitatea* fazei asociate echivalează cu o relație relativistă la nivelul vitezei de mișcare de tipul...
49. Într-o *tunelare cuantică* a unui sistem, *conservabilitatea* fazei asociate echivalează cu o relație relativistă la nivelul vitezei de mișcare de tipul...

50. Care este rolul funcției de undă complex conjugate  $\Psi^*$  în observabilitatea unui sistem cuantic caracterizat de funcția de undă  $\Psi$ ?
51. Legătura dintre conceptul cuantic de *stare proprie* (*eigen-state*) și cel clasic de *sistem de referință ne-inerțial* (SRNI) se realizează pentru coordonata temporală a prezentului staționar, cu valoarea...
52. Dacă funcția de undă spațială  $\Psi(x)$  este legată de funcția de undă în impuls  $\Psi(p)$  prin relația integrală  $\Psi(x) = \int \Psi(p)e^{\frac{i}{\hbar}x \otimes p} dp$ , cum arată legătura integrală inversă?...
53. Ce relație cuantică fundamentală rezultă din legătura integrală  $1 = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint dx dp$ ?
54. Ce efect cuantic au “unde staționare” pentru funcția de undă  $\Psi$  a unui sistem natural observat?
55. Pentru electronul de pe orbita “*n*” din atomul Bohr, eroarea de determinare a *locației* sale pe orbită,  $\Delta x$ , este de forma...
56. Pentru electronul de pe orbita “*n*” din atomul Bohr, eroarea de determinare a *impulsului* său pe orbită,  $\Delta p$ , este de forma...
57. Pentru electronul de pe orbita “*n*” din atomul Bohr, nedeterminare coordonată-impuls de tip cuplare Heisenberg,  $\Delta x \Delta p$ , este de forma...
58. Forma energiei totale clasice a electronului orbital în atomul Bohr este de tipul...
59. Operatorul cuantic de tip *impuls* are forma...
60. Operatorul cuantic de tip *energie* are forma...
61. Din aplicarea operatorului energie totală asupra unei funcții de undă proprii a unui sistem cuantic,  $\hat{E} \cdot \Psi$ , rezultă...
62. Ecuația Schrödinger *temporală* are forma...
63. Ecuația Schrödinger *staționară* are forma...
64. Ecuația de funcții și valori proprii a unui sistem cuantic are forma...
65. Hamiltonianul unui sistem cuantic are forma generală...
66. Existența spinului electronic (fermionic) semi-întreg apare cu necesitate din ecuația Schrödinger, deoarece...
67. Dacă spinul electronic ( $s = 1/2$ ) apare corelat cu *evoluția temporală* în ecuația Schrödinger, atunci, din corelarea cu *axa temporală* din reprezentarea relativistă a



conului spațio-temporal , spinul electronic apare cuantificat cu valorile: ...

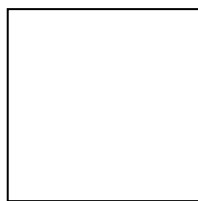
68. Valoarea limitei pe spațiului asimptotic al funcției de undă  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t)$  din principiul de continuitate al funcției de undă este:...
69. Valoarea limitei temporale “*Big Bang*” a funcției de undă  $\lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi(x, t)$  din principiul de continuitate al funcției de undă este:...

70. Valoarea limitei temporale “*Big Crush*” a funcției de undă  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi(x,t)$  din principiul de continuitate al funcției de undă este:...
71. Principiul de continuitate în puncte finite al spațiului de existență al unui sistem cuantic se exprimă prin relația limită a funcției de undă cu forma:
72. Principiul de continuitate în puncte finite al spațiului de existență al unui sistem cuantic se exprimă prin relația limită a *derivatelor* funcției de undă cu forma:
73. Necunoscutele unei ecuații de valori proprii  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  pentru un sistem cuantic sunt...
74. Care este relația dintre Hamiltonianul ( $\hat{H}$ ) și energiile proprii ( $E$ ) ale unui sistem cuantic?
75. De ce ecuația de valori proprii  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  nu se poate simplifica la egalitatea  $\hat{H} = E$  pentru un sistem cuantic?...
76. Care din marimile implicate într-o ecuație de valori proprii  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  sunt observabile/măsurabile?...
77. Care este rezultatul integralei  $\int_{\Gamma} \Psi^* \Psi d\Gamma = ? \dots$
78. Care este rezultatul integralei  $\int_{\Gamma \rightarrow \infty} \Psi^* \Psi d\Gamma = ? \dots$
79. Care este rezultatul integralei  $\int_{\Gamma} \Psi^* \hat{H}\Psi d\Gamma = ? \dots$
80. Produsul  $\Psi^* \Psi$  reprezintă...
81. Condiția de energie optimă pentru un sistem cuantic are forma...
82. Forma energiei totale proprii a unui sistem cuantic pe un domeniu de existență *parțial* ( $\Gamma$ ) este...
83. Forma energiei totale proprii a unui sistem cuantic pe *întregul* său domeniu de existență ( $\Gamma \rightarrow \infty$ ) este...
84. Superpozabilitatea funcțiilor de undă cuantice se referă la...
85. Dacă pentru un sistem cuantic avem  $\hat{H}\Psi_{12} = E\Psi_{12}$  și  $\Psi_{12} = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ , atunci  $\Psi_1, \Psi_2$  au proprietățile:...
86. Hamiltonianul pentru vibrația cuantică are forma generală:...
87. Funcția de undă pentru vibrația cuantică are forma generală:...
88. Energia proprie fundamentală pentru vibrația cuantică are forma generală:...
89. Găsiți o metaforă, sau o o serie de metafore, în max. 25 cuvinte, pentru șirul de mărimi cuantice și relativiste  $\{ \hbar\omega/2, mc^2, \hbar v, \hbar k \}$
- |  |
|--|
|  |
|  |
|  |
90. Găsiți o metaforă, sau o o serie de metafore, în max. 25 cuvinte, pentru șirul de ecuații  $\{ \Delta x \otimes \Delta p = \hbar, s = 1/2, \hat{H}\Psi = E\Psi, \hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \}$


91. Distincția conceptuală dintre produsul  $\Psi_{12} = \Psi_1 \otimes \Psi_2$  și suma  $\Psi_{12} = \Psi_1 \oplus \Psi_2$  funcțiilor de undă proprii unui sistem cuantic se exprimă cel mai bine prin...
92. Dați o semnificație funcțiilor de undă  $\Psi_1, \Psi_2$  care generează rezultatul din relația integrală  $\int_{\Gamma} \Psi_1^* \Psi_2 d\Gamma = \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0 : \dots$
93. Dacă pentru o funcție de undă cuantică  $\Psi_1$ , integrala  $\int_{\Gamma} \Psi_1^* \Psi_1 d\Gamma = \wp(1)$  reprezintă probabilitatea de existență pe domeniul dat ( $\Gamma$ ), atunci, pentru două funcții de undă  $\Psi_1, \Psi_2$ , integrala  $\int_{\Gamma} \Psi_1^* \Psi_2 d\Gamma = A(1,2)$  reprezintă:...
94. Pentru legătura chimică formată din 2 electroni, cu funcțiile reale de undă  $\varphi_A, \varphi_B$ , respective, integrala de acoperire ( $S_{AB}$ ) are expresia:...
95. Pentru legătura chimică formată din 2 electroni, cu funcțiile reale de undă  $\varphi_A, \varphi_B$ , respectiv, într-un sistem molecular cu Hamiltonianul  $\hat{H}$  integrala de schimb ( $K_{AB}$ ) are expresia:...
96. Pentru legătura chimică formată din 2 electroni, cu funcțiile reale de undă  $\varphi_A, \varphi_B$  aparținând atomilor A și B, respectiv, într-un sistem molecular biatomic cu Hamiltonianul  $\hat{H}$  se poate considera invarianța integralelor de schimb  $\int_{\Gamma} \varphi_A^* \hat{H} \varphi_B d\Gamma \cong \int_{\Gamma} \varphi_B^* \hat{H} \varphi_A d\Gamma$ , deoarece:...
97. Pentru un electronii (indiscernabili) reprezentați de funcțiile de undă  $\varphi$  aflați într-un sistem cuantic (atom sau moleculă) cu Hamiltonianul  $\hat{H}$ , interacția de tip Coulombian între aceștia se calculează cu integrala ( $J$ ) de forma:...
98. Pentru legătura chimică formată din 2 electroni, cu funcțiile reale de undă  $\varphi_A, \varphi_B$  aparținând atomilor A și B, respectiv, într-un sistem molecular biatomic cu Hamiltonianul  $\hat{H}$  se poate considera invarianța integralelor Coulombiene  $\int_{\Gamma} \varphi_A^* \hat{H} \varphi_A d\Gamma \cong \int_{\Gamma} \varphi_B^* \hat{H} \varphi_B d\Gamma$ , deoarece:...
99. Pentru legătura chimică formată din 2 electroni, cu funcțiile de undă  $\varphi_A, \varphi_B$  aparținând atomilor A și B, respectiv, într-un sistem molecular biatomic cu Hamiltonianul  $\hat{H}$  se poate considera integrala de acoperire cu valoare nulă  $S_{AB} = \int_{\Gamma} \varphi_A \varphi_B d\Gamma \cong 0$ , deoarece:...
100. Pentru legătura chimică a unei molecule biatomice, *energia de legătură* în termenii energiei de schimb ( $K$ ) și Coulombiene ( $J$ ) este de forma:...
101. Pentru legătura chimică a unei molecule biatomice, *energia de antilegătură* în termenii energiei de schimb ( $K$ ) și Coulombiene ( $J$ ) este de forma:...

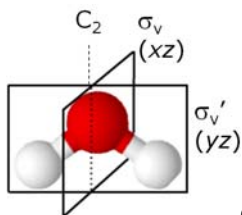
102. Pentru legătura chimică formată din 2 electroni, cu funcțiile de undă  $\varphi_A, \varphi_B$  aparținând atomilor A și B într-un sistem molecular biatomic, respective, funcția de undă moleculară *de legătură* are forma:...
103. Pentru legătura chimică formată din 2 electroni, cu funcțiile de undă  $\varphi_A, \varphi_B$  aparținând atomilor A și B într-un sistem molecular biatomic, respectiv, funcția de undă moleculară *de antilegătură* are forma:...
104. Principiul lui Pauli pentru funcțiile de undă globale de tipul  $|\Psi\rangle = |\Psi_{SPATIAL}\rangle \otimes |\Psi_{SPIN}\rangle$  asociate unei sistem cuantic, spune în esență că:...
105. Forme cuantice ale legăturii covalente de tipul  $\sigma$  sunt cele provenite din combinații electronice în configurațiile...
106. Forme cuantice ale legăturii covalente de tipul  $\pi$  sunt cele provenite din combinații electronice în configurațiile...
107. Aproximația adiabatică aplicată la sistemul de electronic și nuclee ale unei molecule cuantice se referă la:...
108. Pentru potențialul unei molecule biatomice, distanța de echilibru stabil corespunzătoare legăturii chimice este aceea pentru care:...
109. Diferența dintre spectrul atomic și cel molecular, rezidă în aceea că:...
110. Pentru un sistem molecular biatomic energia electronică de echilibru este de forma:...
111. Pentru un sistem molecular biatomic cu distanța de echilibru de ordinul  $10^{-10}[m]$ , *energia electronică* de echilibru este de ordinul...
112. Pentru un sistem molecular biatomic cu distanța de echilibru de ordinul  $10^{-10}[m]$ , *energia vibrațională* într-o stare electronică este de ordinul...
113. Pentru un sistem molecular biatomic cu distanța de echilibru de ordinul  $10^{-10}[m]$ , *energia de rotație* într-o stare electronică este de ordinul...
114. Pentru un sistem molecular biatomic Hamiltonianul cuantic este de forma...
115. Pentru un sistem molecular biatomic potențialul total al sistemului de electronic și nuclee este de forma...
116. Pentru un sistem molecular biatomic cuantic ecuația de valori proprii pentru sistemul cuplat de electroni și nuclee este de forma...
117. Pentru un sistem molecular biatomic cuantic forma funcțiilor de undă proprii pentru sistemul cuplat de electroni și nuclee în *aproximația adiabatică* este de forma...
118. Pentru un sistem molecular cu Hamiltonianul  $\hat{H}$ , operatorul de simetrie  $\hat{R}$  satisface proprietatea relațională:...
119. Pentru un sistem molecular cu funcția de undă asociată  $\Psi$ , operatorul de simetrie  $\hat{R}$  satisface ecuația de valori proprii de forma:...
120. Elementul de simetrie axa de rotație (gira)  $C_n$  este asociată operației de simetrie specifice, și anume:
121. Pentru o moleculă, existența grupului de simetrie  $\{C_{nv}\}$  indică prezența următoarelor elemente și operații de simetrie:

122. Dați exemplul de o moleculă cu grupul de simetrie  $C_5$  (nume și desen structural



aici): ...

123. Stabilirea grupului de simetrie molecular presupune, în esență, parcurgerea a 3 etape succesive, și anume:...



124. Grupul de simetrie al moleculei este:...

125. Matricea  $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$  reprezintă operatorul pentru operația de simetrie: ...

126. Matricea  $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$  reprezintă operatorul pentru operația de simetrie: ...

127. Matricea  $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$  reprezintă operatorul pentru operația de simetrie: ...

128. Matricea  $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$  reprezintă operatorul pentru operația de simetrie: ...

129. Matricea  $\begin{pmatrix} \cos \pi & \sin \pi & 0 \\ -\sin \pi & \cos \pi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$  reprezintă operatorul pentru operația de simetrie: ...

130. Pentru grupul de simetrie  $C_{2v}$ , matricile  $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

generează matricea carteziană ireductibilă, cu forma desfășurată, de completat:

$$\begin{pmatrix} \Gamma_x \\ \Gamma_y \\ \Gamma_z \\ \Gamma_{R_z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} - & - & - & - \\ - & - & - & - \\ - & - & - & - \\ - & - & - & - \end{pmatrix}$$

131. Pentru tabla de caractere a grupului de simetrie  $C_{2v}$ , completați spațiile lipsă din coloana informațiilor de dipol și de rotație:

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_{v(xz)}$	$\sigma_{v(yz)}$	Dipol	Polariz
$A_1$	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>1</b>	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>-1</b>	<b>-1</b>	_____	$xy$
$B_1$	<b>1</b>	<b>-1</b>	<b>1</b>	<b>-1</b>	_____	$xz$
$B_2$	<b>1</b>	<b>-1</b>	<b>-1</b>	<b>1</b>	_____	$yz$



132. Pentru tabla de caractere a grupului de simetrie  $C_{2v}$ , completați spațiile lipsă din coloana informațiilor de polarizare:

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_{v(xz)}$	$\sigma_{v(yz)}$	Dipol	Polariz
$A_1$	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>1</b>	$z$	_____
$A_2$	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>-1</b>	<b>-1</b>	$R_z$	_____
$B_1$	<b>1</b>	<b>-1</b>	<b>1</b>	<b>-1</b>	$x, R_y$	_____
$B_2$	<b>1</b>	<b>-1</b>	<b>-1</b>	<b>1</b>	$y, R_x$	_____

133. Pentru reprezentarea grupului de simetrie  $C_{2v}$  în baza de coordonate  $\{x, y, z\}$  a moleculei de apă completați tabla reprezentării carteziene totale reducibile:

	$E$	$C_2$	$\sigma_{v(xz)}$	$\sigma_{v(yz)}$
$\Gamma_{xyz}$	_____	_____	_____	_____
$\Gamma_{ATOMI-NEMISCATI}$	_____	_____	_____	_____
$\Gamma_{TOTAL}$	<b>9</b>	<b>-1</b>	<b>1</b>	<b>3</b>

134. Pentru reprezentarea carteziană ireductibilă  $\Gamma_{TOTAL} = 3A_1 + A_2 + 2B_1 + 3B_2$  în baza de coordonate  $\{x, y, z\}$  a moleculei de apă a grupului de simetrie  $C_{2v}$ ,

$C_{2v}$	Dipol	Polariz
$A_1$	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	$R_z$	$xy$
$B_1$	$x, R_y$	$xz$
$B_2$	$y, R_x$	$yz$

numărul gradelor de libertate de vibrație și tipul acestora sunt:...

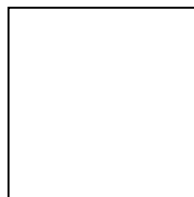
135. Folosind reprezentarea grupului de simetrie  $C_{2v}$  în baza de coordonate  $\{x, y, z\}$  a moleculei de apă, cu tabla reprezentărilor carteziene ireductibile:

$C_{2v}$	Dipol	Polariz
$A_1$	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	$R_z$	$xy$
$B_1$	$x, R_y$	$xz$
$B_2$	$y, R_x$	$yz$

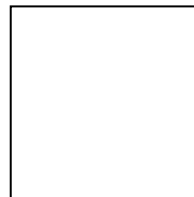
reprezentarea ireductibilă de vibrație  $\Gamma_{VIBR} = 2A_1 + B_2$  conține vibrațiile de tip Infra-Roșu (IR) și cele de tip Raman după cum urmează:...

136. Pentru moleculele de apă, cu grupul de simetrie  $C_{2v}$ , indicați și desenați în baza legăturilor chimice ( $S_1, S_2$ ) și a unghiului dihedral al legăturii chimice ( $\Delta\theta$ ), tipul

vibrației simetrice de legătură (stretching):



137. Pentru molecula de apă, cu grupul de simetrie  $C_{2v}$ , indicați și desenați în baza legăturilor chimice ( $S_1, S_2$ ) și a unghiului dihedral al legăturii chimice ( $\Delta\theta$ ), tipul



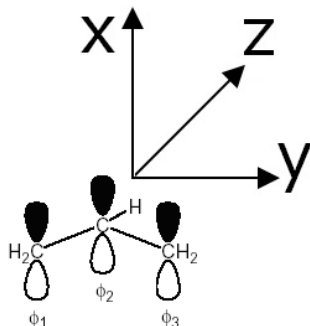
vibrației *anti-simetrice de legătură (anti-stretching)*:

138. Pentru molecula de apă, cu grupul de simetrie  $C_{2v}$ , indicați și desenați în baza legăturilor chimice ( $S_1, S_2$ ) și a unghiului dihedral al legăturii chimice ( $\Delta\theta$ ), tipul



vibrației de simetrice de *ne-legătură (bending)*:

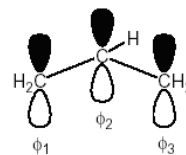
139. Pentru reprezentarea grupului de simetrie  $C_{2v}$  în baza de orbitalilor atomici a



moleculii de alil total reductibile:

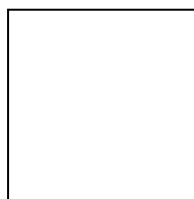
, completați tabla reprezentării orbitale

	$E$	$C_2$	$\sigma_{v(xz)}$	$\sigma_{v(yz)}$
$\Gamma_{FAZA}$	1	-1	1	-1
$\Gamma_{ORBITALI-NEMISCATI}$	_____	1	_____	_____
$\Gamma_{\phi-TOTAL}$	_____	_____	_____	_____

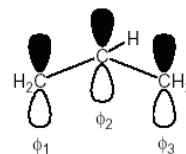


140. Pentru molecula de alil în baza de orbitalilor atomici

reprezentarea *orbitalului molecular de legătură*  $\Psi_{legatura} = \frac{1}{2}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3$  are

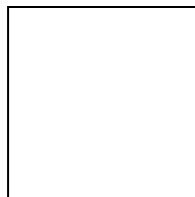


forma orbitală respectivă (desenați aici):

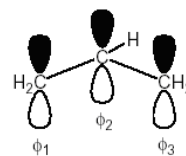


141. Pentru molecula de alil în baza de orbitalilor atomici

reprezentarea *orbitalului molecular de ne-legătură*  $\Psi_{ne-legatura} = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_3$  are



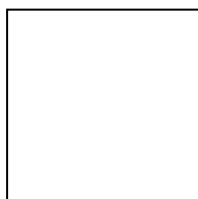
forma orbitală respectivă (desenați aici):



142. Pentru molecula de alil în baza de orbitalilor atomici

reprezentarea *orbitalului molecular de anti-legătură*

$\Psi_{anti-legatura} = \frac{1}{2}\phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3$  are forma orbitală respectivă (desenați aici):



143. Protagonisții principali ai fenomenului marcant al secolului XX științific - numit “Hotel Copenhaga” sunt:...

144. Răspundeți în max. 25 cuvinte la întrebarea: “Are dreptul moral un cercetător să-și facă cunoscute rezultatele (și eventual să le și aplice) cu riscul că ele pot cauza consecințe incontrolabile asupra umanității? De ce DA? De ce NU?”...

145. Operatorul cuantic responsabil de “crearea spațiului” este:...

146. Operatorul cuantic responsabil de “crearea timpului” este:...