

ESTRUCTURA ATÒMICA I ENLLAÇ

1. Estructura electrònica dels àtoms

Antecedents històrics. Ones i partícules. Principi d'incertesa. Mecànica quàntica. La equació de Schrödinger. Partícula en una caixa. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic. Representació dels orbitals. Funció de spin.

2. Àtoms polieletrònics

Aproximació dels electrons independents. Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Regles de Slater. Configuració electrònica. Excepcions a la regla de l'Aufbau.

3. La taula periòdica

Ordenació dels elements segons el nombre atòmic. Classificació dels elements: grups, períodes, blocs, metalls i no-metalls. Propietats periòdiques: variació de la càrrega nuclear efectiva i del radi atòmic. Potencial d'ionització i afinitat electrònica. Propietats periòdiques dels àtoms enllaçats: estat d'oxidació i electronegativitat.

4. Generalitats de l'enllaç químic

Diversitat de les propietats de les substàncies. Models d'enllaç. Paràmetres estructurals i energètics: determinació experimental. Concepte de radi: radi iònic, covalent i metàl·lic.

5. L'enllaç químic en les molècules i espècies discretes (I)

Estructures de Lewis. Teoria de repulsió dels parells electrònics: predicció de la geometria molecular. Teoria de l'enllaç de valència. Orbitals híbrids s i p.

6. L'enllaç químic en les molècules i espècies discretes (II)

El model dels orbitals moleculars. Aproximació CLOA. Energia i recobriment. La molècula d'hidrogen. Molècules AH. Polaritat de l'enllaç i moment dipolar. Molècules A₂ i molècules AB: el cas límit de l'enllaç iònic. Molècules AH₂ lineal i angular. Orbitals moleculars π en compostos inorgànics.

7. L'enllaç en els sòlids

Tipus de sòlids. Sòlids cristal·lins. Enllaç metàl·lic. Teoria de bandes. Metalls i semiconductors. Enllaç iònic. Cicle de Born-Haber. Energia reticular. Sòlids covalents. Sòlids moleculars. Enllaç d'hidrogen. Forces de Van der Waals.

Llibres recomanats:

- **R.H. Petrucci, W.S. Harwood, F.G. Herring:** Química general. Enlace químico i estructura de la materia (Vol. 1). Ed. Prentice Hall.
- **J.M.Costa, J.M.Lluch, J.J.Pérez:** Química. Estructura de la materia, Biblioteca Universitària. Encic.Catalana.
- **J.Casabó:** Estructura atómica y Enlace, Ed. Reverté.
- **F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida:** Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç Químic, Publicacions Universitat de Barcelona-Barcelona.
- **Y.Jean, F.Volatron:** Les orbitales moléculaires en chimie. Ed. McGraw Hill.
- **E. de Jesus:** <http://www2.uah.es/edejesus/resumenes/EQEM.htm>.

Professor teoria:

Luis Rodríguez
Despatx: c7/145
e-mail: luis@klingon.uab.es
web: <http://klingon.uab.es/luis/estructura>

Professors problemes:

Oriol Vendrell (Despatx: c7/157)
Maria Besora (Despatx: c7/153)