

ESTRUCTURA ATÒMICA I ENLLAÇ

Codi: 22960

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

Curs 2008-2009

1. Introducció a la mecànica quàntica

Antecedents històrics.- Ones i partícules.- Principi d'incertesa.- Mecànica quàntica. L'equació de Schrödinger.- Partícula en una caixa.

2. Àtom d'hidrogen

L'àtom d'hidrogen.- Concepte d'orbital hidrogenoide.- Representació dels orbitals.- Spin electrònic.

3. Àtoms polieletrònics

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

4. La taula periòdica

Introducció històrica.- Ordenació dels elements segons el nombre atòmic.- Classificació dels elements en grups, períodes i blocs.- Propietats periòdiques dels àtoms.- Radi atòmic i radi iònic.- Potencial d'ionització.- Afinitat electrònica.- Electronegativitat.- Altres propietats: estat d'oxidació, basicitat, caràcter metàl·lic.

5. Introducció a l'enllaç químic

Estats d'agregació i molècules discretes.- Tipus d'enllaç.- Paràmetres estructurals i energètics: determinació experimental.- Polaritat de l'enllaç i moment dipolar.

6. Estructura i geometria de les molècules discretes

Estructures de Lewis.- Conceptes de ressonància, ordre d'enllaç, càrrega formal i estat d'oxidació.- Geometria molecular: teoria de la repulsió de parells electrònics (VSEPR).

7. Teories de l'enllaç químic en les molècules discretes

La molècula d'hidrogen.- Aproximació de Born-Oppenheimer.- Teoria de l'enllaç de valència. Orbitals híbrids.- Teoria dels orbitals moleculars. Aproximació CLOA.- Molècules diatòmiques homonuclears i heteronuclears.- Molècules poliatòmiques.

8. L'enllaç en els sòlids

Tipus de sòlids.- Estructures cristal·lines.- Enllaç metàl·lic. Teoria de bandes. Metalls, semiconductors i aïllants.- Sòlids iònics. Energia reticular. Cicle de Born-Haber.- Sòlids covalents.- Sòlids moleculars. Forces intermoleculars: enllaç d'hidrogen, forces de van der Waals.

Bibliografia recomanada:

- J.Casabò: *Estructura atòmica y enlace*, Ed. Reverté, 1996.
- J.M.Costa, J.M.Lluch, J.J.Pérez: *Química. Estructura de la materia*, Biblioteca Universitària. Enciclopèdia Catalana, 1993.
- F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida: *Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic*, Publicacions Universitat de Barcelona-Barcanova, 1992.
- R.H. Petrucci, W.S. Harwood, F.G. Herring: *Química general. Enlace químico y estructura de la materia*, Vol. 1, Ed. Prentice Hall, 2003.
- American Chemical Society, *Química, un proyecto de la American Chemical Society*. Ed. Reverté, 2005.
- M.D. Reboiras: *Química, la ciencia básica*, Ed. Thomson, 2006.
- P. Atkins, L. Jones: *Principios de Química*, 3ª edició, Ed. Panamericana, 2006.
- R. Chang: *Principios esenciales de Química General*, 4ª edició, Ed. McGraw-Hill, 2006.

Normes d'avaluació

1. La nota final de l'assignatura s'obtindrà de la mitjana ponderada de les notes de dues proves d'avaluació parcials i de l'examen final o bé només de la nota de l'examen final.
2. La primera prova parcial tindrà lloc el dia 3 de novembre de 15:00 a 17:00.
3. La segona prova parcial tindrà lloc el dia 12 de desembre de 15:00 a 17:00.
4. La realització d'alguna de les proves parcials implica que la qualificació final de l'assignatura no podrà ser de 'no presentat' encara que no es faci la prova final.
5. Per poder fer mitjana de les proves parcials amb l'examen final s'hauran de fer els dos exàmens parcials.
6. En cas de realitzar-se les proves parcials, cadascuna d'aquestes constituirà un 20% de la nota final mentre que l'examen final en constituirà un 60%. Si el resultat final d'aquesta mitjana ponderada és inferior a la nota de l'examen final, la nota de l'assignatura serà la nota d'aquesta prova final.
7. La nota mínima de l'examen final per a poder fer mitjana amb les notes de les proves parcials és de 3.5.
8. Si s'ha suspès l'assignatura a la primera convocatòria però la mitjana dels dos parcials és superior a 5, aquesta mitjana ponderarà en la nota de la segona convocatòria en els mateixos termes establerts en el punt 6 per a la primera convocatòria.
9. En cas de no realitzar-se les dues proves parcials la nota de l'assignatura serà la de l'examen final.