QUIMICA INORGANICA I

1.- NOCIONES BASICAS DE TERMODINAMICA QUIMICA. Principales funciones de estado. Potencial químico y estados "standard". Constante de equilibrio.

2.- NOCIONES BASICAS DE ESPECTROSCOPIA. Emisión y absorción de radiación. Mecanismos de excitación y de relajación. Espectros y niveles de energía. Espectros atómicos. Espectros moleculares.

3.- NOCIONES BASICAS DE MECANICA CUANTICA. Ecuación de De Boglie. Ecuación de Shrodinger. Postulados de la Mecánica Cuántica. Función de onda y probabilidad. Principio de indeterminación. Movimiento de una partícula en una caja unidimensional.

4.- EL ATOMO DE HIDROGENO.- Cálculo del operador hamiltoniano. Ecuación de Scrodinger para el átomo de hidrógeno. Números cuánticos. Orbitales. Simetría de los orbitales Spin del electrón.

5.- LOS ATOMOS PLURIELECTRONICOS Y LA TABLA PERIODICA DE LOS ELEMENTOS. Principio de exclusión de Pauli. Soluciones aproximadas de la ecuación de Schrodinger. Métodos de las perturbaciones y de las variaciones. Aproximación hidrogenoide. Principio del Aufbau y Primera Regla de Hund. Correlación entre la Tabla Periódica y la configuración electrónica. Clasificación de los elementos.

6.- MODELO VECTORIAL DEL ATOMO Y ESTADOS ESPECTROSCOPICOS. Acoplamiento de los momentos cinético, orbital y de spin. Estados, subestados y microestados. Símbolos. Reglas de Hund. Potenciales de ionización y afinidades electrónicas.

7.- GENERALIDADES SOBRE EL ENLACE. Modelos y tipos principales de enlaces. Condición energética de la formación de un enlace. Teorema del virial. Enlace y distancia interatómica.

8.- EL ENLACE IONICO. Energía reticular. Constante de Madelung. Ciclo de Born-Haber. Radios iónicos.Números de coordinación y relación de radios. Principales estructuras cristalinas.

9.- EL ENLACE COVALENTE. Teoría del enlace de valencia. Aplicación a la molécula de hidrógeno. Resonancia. Hibridación de orbitales. Teoría de los orbitales moleculares. Aplicación al ion-molécula H_2^+. Orbitales enlazantes y antienlazantes. Diagramas de correlación. Orden de enlace.

10.- EL ENLACE METALICO. Propiedades características de los metales. Teoría de los electrones libres. Espectros de rayos X blandos. Bandas de niveles de energía. Superficie de Fermi. Funciones de Bloch y zonas de Brillouin. Radios metálicos. Conductores, aislantes y semiconductores. Tipos de semiconductores.

11.- LAS FUERZAS INTERMOLECULARES. Fuerzas de Van der Waals. Energías de London, de Keeson y de Debye. Fuerzas de Van der Waals y propiedades físicas. Radios de Van der Waals .

12.- PROPIEDADES RELACIONADAS CON EL ENLACE, I. Energía de enlace en moléculas diatómicas. Energía de enlace termoquímica media. Sistema de valores de energías de enlace. Electronegatividad. Definición y cálculo según Pauling. Variación en la Tabla Periódica. Electronegatividades de Mulliken y de Allred y Rochow.

13.- PROPIEDADES RELACIONADAS CON EL ENLACE, II. Longitud del enlace covalente. Variación con el orden de enlace. Radios covalentes. Longitud de enlace y electronegatividad. Constante de fuerza de un enlace: su relación con la banda fundamental del espectro de vibración.

QUIMICA

14.- CARACTER IONICO DEL ENLACE COVALENTE Y CARACTER PARCIAL DEL ENLACE IONICO. Polaridad del enlace covalente heteronuclear. Métodos de cálculo del porcentaje de carácter iónico. Porcentaje de carácter iónico y electronegatividad. Polarizabilidad de los iones. Reglas de Fajans.

BIBLIOGRAFIA

BELL Y LOTT Un esquema moderno de la Química Inorgánica Ed. Alhambra 1968.

COTTON Y WILKINSON Química Inorgánica Avanzada. Limusa-Wiley. México 1969

DOUGLAS Y MCDANIEL Conceptos y modelos de Química Inorgánica. Ed. Reverté 1970.