

Programa QUÍMICA INORGÁNICA 2^{on} cursI.- L'àtom.

1. Estructura electrònica de l'àtom.

Antecedents històrics de la Mecànica Quàntica. Equació de Schrödinger. Significat físic i requisits matemàtics de la funció d'ona. Principi d'Indeterminació de Heisenberg. Aplicació de l'equació de Schrödinger: : partícula en un pou de potencial.

2. L'àtom d'hidrogen.

Solucions de l'equació de Schrödinger per l'àtom d'hidrogen. Significació dels nombres quàntics. Forma i representació dels orbitals dels àtoms hidrogenoids. Funció de distribució radial. La funció de spin.

3. Àtoms plurielèctrics.

Mètodes aproximats. Orbitals de Slater. Nivells d'energia dels àtoms plurielèctrics. Principi d'Exclusió de Pauli. La Taula Periòdica. Classificació dels elements segons llur posició en la mateixa. Quants elements existeixen i per què? Quant hi ha de cada element i per què? Relacions entre els elements.

II.- L'enllaç.

4. L'enllaç iònic. Propietats físiques característiques d'aquest tipus d'enllaç. Estructures cristal·lines més freqüents. Radis iònics: definició, factors que influeixen i mètodes de càlcul. Relació de radis i tipus d'estructura. Explicació d'aquestes mitjançant l'empaquetament compacte.

5. Energia reticular. Equació de Born-Landé. Propietats dels compostos iònics dependents de l'energia reticular. Compostos inexistents i compostos hipotètics. Factors termodinàmics que afecten a la solubilitat d'un compost iònic. Defectes reticulars més freqüents. Polarització i polaritzabilitat: : regles de Fajans.

6. L'enllaç covalent. Propietats físiques característiques de molècules discretes. Geometria molecular: Teoria de la repulsió dels parells electrònics de la capa de valència. Estructura i propietats de les substàncies amb enllaç covalent.

7. Teoria de l'enllaç de valència. Molècula d'hidrogen. L'aparellament dels electrons. La resonància. El recobriment dels orbitals i la força d'enllaç.
8. Hibridació. Bases teòriques per formar orbitals híbrids. Estudi comparatiu dels orbitals híbrids formats per orbitals s, p i d: sp , sp^2 , sp^3 , sd^3 , dsp^2 , dsp^3 , d^2sp^3 . Energies i angles d'enllaç.
9. Teoria dels orbitals moleculars. El mètode CLOA. Molècules diatòmiques. Molècules poliatòmiques senzilles. Aspectes complementaris de la teoria de l'enllaç de valència amb la dels orbitals moleculars. Moment dipolar d'una molècula diatòmica. Caràcter iònic parcial de l'enllaç covalent. Moment dipolar total i geometria molecular. Electronegativitat. Escales de Pauling, de Mulliken i de Allred i Rochow.
10. Forces cohesives no de valència. Evidència de les forces de Van der Waals. Naturalesa de les mateixes. Cristalls atòmics i moleculars. Evidència de l'enllaç d'hidrogen. Naturalesa del mateix. Enllaç d'hidrogen i estructura cristal·lina. Enllaç metàl·lic. Conductors, aïllants i semiconductors. Estructura dels elements metàl·lics.

III.- Introducció a l'estudi dels elements químics.

11. Aplicacions dels potencials d'elèctrode a la Química Inorgànica. Factors que afecten el potencial de l'elèctrode: pH del medi, complexació, precipitació. Reaccions red-ox amb l'aigua en funció del pH. Diagrames tipus Latimer. Causes d'inestabilitat d'espècies químiques en medi acuós. Diagrames de Frost. Aplicacions a reaccions químiques.
12. Comportament dels elements segons la seva posició en la Taula Periòdica. Els elements del primer període curt. Els elements del segon període curt. Revisió global de les característiques en cada grup. Estudi general de les propietats dels elements dels blocs d i f.
13. Propietats generals de l'hidrogen. L'hidrogen a la naturalesa. Isòtops. Hidrogen molecular. Ions de l'hidrogen. Preparació i propietats químiques de l'hidrogen. Aplicacions.
14. Classificació dels hidrurs. Hidrurs iònics. Estructura, propietats físiques i químiques. Hidrurs metàl·lics. Propietats i naturalesa de l'enllaç.
15. Hidrurs covalents. Propietats físiques. Mètodes d'obtenció. Aspectes químics generals dels hidrurs volàtils: estabilitat tèrmica, propietats àcid-base, propietats redox. Ions MH_4^- (M = B, Al, Ga) i BeH_4^{2-} .

16. Hidrurs deficients electrònicament. Els borans. Classificació segons riquesa d'hidrogen i propietats físiques. El diborà. Estructura del tetraborà (10) i del pentaborà(9). Aspectes químics generals dels borans: estabilitat tèrmica, reaccionabilitat amb l'oxigen, amb l'aigua, comportament com a àcids i com a bases de Lewis, propietats bàsiques de Brønsted. Altres hidrurs deficients electrònicament (Be, Al, Ga, ...).
17. Hidroborats iònics i covalents. Propietats físiques. Estructures d'ambdós. Comportament químics dels hidroborats iònics i covalents. Diverses obtencions del diborà. Tetrahidroaluminats.
18. Combinacions binàries amb l'oxigen. Classificació dels òxids dels elements de la taula periòdica d'acord amb el seu comportament àcid-base. Òxids bàsics, òxids àcids, òxids neutres, òxids anfòters. Classificació dels òxids dels elements dels grups principals segons la seva estructura: òxids moleculars, òxids iònics, òxids gegants.

IV.- La Química dels elements dels grups principals.

19. El grup I: Li, Na, K, Rb, Cs.

Variació de les propietats físiques i dades termodinàmiques a mesura que augmenta el nombre atòmic. Abundància dels elements, estat natural i obtenció dels més freqüents. Solucions dels elements en NH_3 liq. Propietats químiques i compostos dels mateixos. Comportament diferenci³at del Li. Estructura i caràcter bàsic dels òxids. Obtenció de sals i solubilitat de les mateixes.

20. El grup II: Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra.

Propietats físiques i dades termodinàmiques dels elements del grup. Relació d'aquestes amb el comportament químic; variació sistemàtica de propietats en el grup Ca, Sr, Ba i Ra. Abundància dels elements, estat natural i obtenció dels més freqüents. Solubilitat dels elements en NH_3 líquid. Reaccionabilitat dels elements. Òxids i hidròxids: comportament ³ àcid-base. Obtenció de sals i solubilitat de les mateixes. Comportament diferenci³ant del berili.

21. Bloc s. Relacions en diagonal.

Compostos dels elements s amb el carboni. Complexos dels elements s. Característiques comuns de comportament químic del Li i del Mg. Característiques comuns de comportament químic del Be i del Al. Aplicacions dels elements s.

22. El grup VII: F, Cl, Br, I, At.

Propietats físiques i dades termodinàmiques dels elements del grup. Característiques generals del mateix. Estat natural i obtenció dels elements.

Reaccions característiques dels halògens. Els halurs. Halurs iònics: obten-
cions i estructures dels mateixos. Halurs covalents. Propietats dels halurs
d'hidrogen.

23. Compostos dels halògens.

Oxids dels halògens i fluorurs d'oxigen. Química dels halògens en solució
aquosa. Diagrames de fem. Oxoàcids dels halògens i sals corresponents. Pre-
paració, estabilitat, força àcida i caracter oxidant dels mateixos. Compos-
tos interhalogenats. Ions polihalur. Pseudohalogenes. Aplicacions més impor-
tants.

24. El grup VI: O, S, Se, Te, Po.

Propietats físiques i dades termodinàmiques dels elements del grup. Caracte-
rístiques generals del mateix. Al·lòtrops de S, Se, i Te. Estat natural i
obtenció dels elements.

25. Compostos del grup VI.

Halurs, oxohalurs i halo-complexos. Oxids. Oxoàcids i oxosals. Diagrames de
fem del S, Se i Te. Aplicacions més importants.

26. El grup V: N, P, As, Sb, Bi.

Propietats físiques i dades termodinàmiques dels elements del grup. Carac-
terístiques generals del mateix. Al·lòtrops del P. Estat natural i obtenció
dels elements. Hidrurs.

27. Compostos del grup V.

Nitrurs, fosfurs i arseniurs. Halurs, oxohalurs i halo-complexos. Oxids de N.
Oxoàcids de N. Oxids de P, As, Sb i Bi. Oxoàcids de P, As, Sb i Bi. Diagrames
de fem dels elements del grup V. Aplicacions més importants.

28. El grup IV: C, Si, Ge, Sn, Pb.

Propietats físiques i dades termodinàmiques dels elements del grup. Caracte-
rístiques generals del mateix. Al·lòtrops del C. Estat natural i obtenció
dels elements. Hidrurs.

29. Compostos del grup IV.

Carburs i siliciurs. Halurs i halo-complexos. Oxids i oxoàcids de carboni.
Oxids, oxoàcids i hidròxids de Si, Ge, Sn i Pb. Silicats. Silicones. Diagra-
mes de fem de Sn i Pb. Compostos organometàl·lics. Aplicacions més importants.

30. El grup III: B, Al, Ga, In, Tl.

Propietats físiques i dades termodinàmiques dels elements del grup. Característiques generals del mateix. Estat natural i obtenció dels elements.

31. Compostos del grup III.

Borurs metàl·lics. Halurs i halo-complexos de B, Al, Ga, In i Tl. Oxids, oxoàcids, oxoanions i hidròxids. Sals de Al, Ga, In i Tl de diversos oxoàcids. Química en solució aquosa dels elements esmentats. Aplicacions més importants.

32. Metalls de transició.

Característiques generals. Compostos de coordinació.

BIBLIOGRAFIA

1. Química Inorgánica.
E. Gutiérrez Rios
E. Reverté. 1978.
2. Química Inorgánica Moderna.
J.J.Lagowski
Ed. Reverté. 1975/6.
3. Introd. a la Química Inorgánica Moderna.
K.M.Mackay y R.A.Mackay
Ed. Reverté, 2ª ed. 1974/5.
4. Química Inorgánica Descriptiva.
E.G.Rochow
Ed. Reverté. 1981.
5. Química Inorgánica Básica.
F.A.Cotton y G.Wilkinson
Ed. Limusa. Mexico, 1978.
6. Química Inorgánica Avanzada.
F.A.Cotton y G.Wilkinson
Ed. Limusa. Mexico, 1969.
7. Conceptos y Modelos de Química Inorgánica.
Bodie E.Douglas y Darl H.McDaniel
Ed. Reverté. 1970.
8. Química Inorgánica.
G.Demitras, Ch.Russ, J.Salmon, J.Weber y G.Weis.
Ed. Prentice-Hall International. 1973.
9. Un esquema moderno de la Química Inorgánica.
C.F.Bell y K.A.Lott
Ed. Alhambra, S.A.
10. Química Inorgánica.
A.K.Barnard
Ed. Urmo.
11. Principios de Química Inorgánica.
W.L.Jolly
McGraw-Hill Latinoamericana, S.A.
12. Estructura atómica y molecular.
J.Barrett
Edit. AC. 1978.