

### 1. TEORIA DE GRUPS

Definició de simetria. Diferències entre simetria puntual i espacial. Elements de simetria. Identitat. Eix de rotació. Pla de simetria. Eix de rotació-inflexió. Operacions de simetria. Grups puntuals. Classificació de les molècules d'acord amb la seva simetria. Productes o combinacions de les operacions de simetria. Elements de simetria equivalents i àtoms equivalents. Activitat òptica. Moments dipolars. Propietats que defineixen un grup matemàtic. Tipus de grups. Taules de multiplicació de grups. Subgrups. Classes. Transformació de similitud. Vectors. Matrius. Propietats de les matrius. Representacions (transformacions geomètriques). Representacions irreduïbles. Taules de caràcters. Representacions no diagonals. Representacions degenerades. La fórmula de descomposició. Producte directe.

### 2. APLICACIONS

Simetria en la mecànica quàntica. La projecció d'orbitals moleculars. Orbitals  $\pi$  pel grup ciclopropenil. Orbitals  $\pi$  de l'ió nitrit. Orbitals moleculars per la molècula d'amoniac. Esquemes d'hibridació per orbitals  $\sigma$ .

### 3. EL CONCEPTE DONADOR-ACCEPTOR

Variació històrica del concepte àcid-base. Àcids i bases dels no metalls. Bor i alumini. Carboni, Silici i Estany. Complexos de transferència de càrrega. Metalls orgànics. Orbitals moleculars de la molècula  $\text{Cr}(\text{CO})_6$ . El concepte del "back-bonding" (retrodonació). Nitrogen, fosfor i antimoni. Oxigen i sofre. Complexes de transport d'oxigen. Halogens. Xenon. Metalls.

### 4. COMPOSTOS INORGÀNICS CÍCLICS

Anells heterocíclics. La borazina i els seus derivats. Compostos fosfonitrílics. El tetranitrur de tetrasofre. Anells homocíclics.

### 5. COMPOSTOS INORGÀNICS DELS ELEMENTS DELS GRUPS PRINCIPALS EN FORMA DE GÀBIA. CLUSTERS.

Gàbies formades pels elements del grup cinquè. Derivats del fosfor i de l'antimoni. Els borans (introducció). Geometries que adquireixen els borans i carbonans. Tractament d'enllaços localitzats. Significat del número de parells electrònics presents a l'esquelet del borà. Heteroborans. El sistema  $\text{o-carborà}$ . Reaccions de l' $\text{o-carborà}$  i derivats.

6. ELS METALLS DE TRANSICIÓ

Introducció als elements de transició. Els elements de transició de la primera sèrie. Propietats generals. El Titani. El Vanadi. El Crom. El Manganès. El Ferro. El Cobalt. El Níquel. El Coure. Els elements de la segona i tercera sèries de transició. Propietats generals. Zircon i Hafni: Niobi i Tantal. Molibdè i Tungstè. Tecneci i Reni. Ruteni i Osmi. Rodi i Iridi. Palladi i Platí. Plata i Or. El grup del Zinc.

7. QUÍMICA ORGANOMETÀL·LICA

Introducció. Organització de la Química Organometàl·lica. Donadors via carboni dels tipus  $\sigma$ . Síntesi d'alquils i arils metàl·lics. Reaccions d'agents alquilants amb halurs metàl·lics o òxids. Reaccions de metal·lació. Intercanvi metall-hidrogen. Reaccions d'addició oxidativa. Reaccions d'anions que contenen metall amb halurs orgànics. Addició 1-2 de complexos metàl·lics a substrats insaturats. Reactius de Grignard. Carbonils metàl·lics. Propietats i estructures. Complexos metall-carbè i metall-carbí. Donadors via carboni del tipus  $\pi$ . Síntesi de complexos d'olefina, acetilè i  $\pi$ -alil. Estructura i enllaç en aquests complexos. Complexos amb donadors  $\pi$  cíclics. Síntesi i propietats. Estructura i enllaç.

Professor: JAUME CASABU

curs : 40

Vist i plau,



Signat:

Cap de Departament

Data: 28-1-78

