

I. 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 plurielèctrònics

Mètodes aproximats. Orbitals de Slater. Nivells d'energia dels àtoms plurielèctrònics. 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. L'hidrogen. Propietats generals. Isòtops. Hidrogen molecular. Reaccions químiques. Hidrurs. Hidrurs iònics. Hidrurs covalents. Hidrurs metàl·lics. Aplicacions de l'hidrogen.
14. El grup I: Li, Na, K, Rb, Cs. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Propietats químiques. Solubilitat de les sals. Solubilitat en  $NH_3$  líquid. Compostos organometàl·lics. Compostos de coordinació. Diferències entre el Li i els altres elements del grup i similituds amb el Mg. Aplicacions.
15. El grup II: Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Comportament diferenciat del Beril·li. Propietats químiques. Solubilitat de les sals. Compostos organometàl·lics. Compostos de coordinació. Similituds del Be amb l'Al. Aplicacions.

16. El grup III: B, Al, Ga, In, Tl. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. El Bor. Propietats químiques. Borats. Hidrurs de Bor. Compostos deficients en electrons. Borans. Halurs de Bor.
17. El grup III: Al, Ga, In, Tl. Òxids e hidròxids. Hidrurs. Halurs. Compostos organometàl·lics. Catalitzador de Ziegler. Compostos de Coordinació. Aplicacions. Àcids i Bases durs i tous.
18. El grup IV: C, Si, Ge, Sn, Pb. Característiques generals del grup. El carboni. Formes al·lotròpiques. Propietats. Compostos interlaminars de grafit. Formes al·lotròpiques de Si, Ge, Sn, Pb. Propietats.
19. El carboni. Combinacions amb l'oxigen, CO i CO<sub>2</sub>. Òxids de Silici. Silicats. Ortosilicats. Piroxilicats. Silicats cíclics. Silicats en cadenes. Silicats en capes. Silicats tridimensionals. Vidres i Ceràmiques. Aplicacions.
20. Òxids de Ge, Sn i Pb. Hidrurs. Halurs. Carburs. Cianurs. Compostos Organometàl·lics. Silicones. Compostos de Coordinació. Aplicacions.
21. El grup V: N, P, As, Sb, Bi. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Òxids i Oxoàcids del nitrogen. Òxids i oxoàcids de P, As, Sb.
22. Sulfurs de Fosfor. Fosfazens. Hidrurs. Hidrurs de nitrogen, NH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>H<sub>2</sub> i NH<sub>2</sub>OH. Hidrurs de fosfor. L'amoníac líquid com a solvent. Àcids. Halurs. Adobs. La fixació de N. Aplicacions.
23. El grup VI: O, S, Se, Te, Po. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Formes al·lotròpiques. Ozon. Hidrurs. Halurs.
24. Òxids dels elements de la Taula Periòdica. Formes de classificació. Classificació segons el comportament àcid-base. Classificació segons la seva estructura.
25. Òxids de S, Se, Te. Oxoàcids del sofre. Oxoàcids de Se i Te. Oxihalurs. Derivats orgànics. Complexos de l'oxigen. Hemoglobina. La pol·lució, el el cicle del S. Aplicacions.
26. El grup VII: F, Cl, Br, I, At. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Reactivitat. Halurs d'hidrogen. Halurs. Òxids. Oxoàcids. Compostos Interhalogenats. Polihalurs. Pseudohalogenes. Aplicacions.
27. Gasos Nobles: He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Compostos dels gasos Nobles. Clatrats. Química del Xenó. Estructura i enllaç dels compostos del Xenó.

28. Compostos de Coordinació. Els treballs de Werner. Definicions. Quelats. Isòmers. Estabilitat. Organometàl·lics. La Regla dels 18 electrons. Aplicacions. Els complexos a la natura.
29. L'enllaç en els compostos de coordinació. Teoria de l'enllaç de valència. Teoria del camp cristal·lí. Color, estabilitat i serie espectroquímica. La teoria d'orbitals moleculars.
30. Generalitats dels elements de transició. Característiques dels elements de transició. Periodicitat. Estats d'oxidació. Propietats relacionades amb l'estat d'oxidació. La primera serie de transició. Les configuracions  $d^n$  ( $n = 0-10$ ). La segona i tercera series de transició.

### BIBLIOGRAFIA

1. Química Inorgánica  
E.Gutiérrez Ríos  
Ed.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, 2na ed., 1974-5
4. A) Química Inorgánica Descriptiva  
E.G.Rochow  
Ed.Reverté, 1981
- B) Química  
J.C.Bailar, Jr.; T.Moeller, C.O.Guss,  
J.Kleinberg, M.E.Castellion and C.Metz.  
Vicens-Vives, Barcelona-1983
5. Química Inorgánica Básica  
F.A.Cotton y G.Wilkinson  
Ed.Limusa, México-1978/1985
6. Química Inorgánica Avanzada  
F.A.Cotton y G.Wilkinson  
Ed.Limusa, México-1969/1985
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.Weher 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  
Ed. AC 1978
13. Introducció a la Nomenclatura Química (Inorg. i Orgànica)  
J.Sales i J.Vilarrassa, Eunibar-1984