

I) L'ATOM

1. L'àtom d'hidrogen

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

2. Àtoms polieletrònics

Mètodes aproximats. Els orbitals de Slater. Aplicacions. Nivells d'energia dels àtoms polieletrònics. Principi d'exclusió de Pauli. Aplicacions.

3. 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? Com es troben els elements a la natura? Similituds i discrepàncies en les propietats físiques i químiques dels elements.

II) L'ENLLAC

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. Cicle de Born-Landé. Propietats dels compostos iònics dependents de l'energia reticular. Compostos inexistents i compostos hipotètics. Factors termodinàmics que afecten 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 ressonància. 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:  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ ,  $sd^3$ ,  $dsp^2$ ,  $dsp^3$ ,  $d^2sp^3$ . Energia i angles d'enllaç.

9.- Teoria dels orbitals moleculars. El mètode CLAO. 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. La seva naturalesa. Enllaç d'hidrogen i estructura cristal·lina. Enllaç metàl·lic. Conductors, aïllants i semiconductors. Estructura dels elements metàl·lics.

### III) INTRODUCCIO A L'ESTUDI DELS ELEMENTS QUIMICS

11.- Comportament químic dels elements segons la seva posició a la taula periòdica. Els elements del primer període curt. Els elements del segon període curt. Revisió global de les característiques de cada grup. Estudi general de les propietats dels elements dels blocs d i f.

12.- L'hidrogen. Propietats generals. Isòtops. Hidrogen molecular. Reaccions químiques. Hidrurs. Hidrurs iònics. Hidrurs covalents. Hidrurs metàl·lics. Aplicacions de l'hidrogen

13.- El grup 1: Li, Na, K, Rb, Cs. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Propietats químiques. Solubilitat de les sals. Solubilitat en amoníac líquid. Compostos organometàl·lics. Compostos de coordinació. Diferències entre el Li i els altres elements del grup. i similituds amb el Mg. Aplicacions.

*En aquest apartat s'estudia les propietats dels elements químics, en funció de la seva posició a la taula periòdica.*

14. El grup 2: Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Comportament diferenciatiu del beril·li. Propietats químiques. Solubilitat de les sals. Compostos organometàl·lics. Compostos de coordinació. Similituds del Be and l'Al. Aplicacions.
15. El grup 13: B, Al, Ga, In, Tl. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. El bor. Propietats químiques. Borats. Hidrurs de bor. Compostos deficientes en electrons. Borans. Halurs de Bor.
16. El grup 13: Al, Ga, In, Tl. Òxids i hidròxids. Hidrurs. Halurs. Compostos organometàl·lics. Catalitzador de Ziegler. Compostos de coordinació. Aplicacions. Àcids i bases durs i tous.
17. El grup 14: 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.
18. 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.
19. Òxids de Ge, Sn i Pb. Hidrurs. Halurs. Carbur. Cianur. Compostos Organometàl·lics. Silicones. Compostos de Coordinació. Aplicacions.
20. El grup 15: N, P, As, Sb, Bi. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Òxids i oxoàcids del nitrogen. Òxids i oxoàcids de P, As, Sb.
21. Sulfurs de Fòsfor. Fosfazens. Hidrurs. Hidrurs de nitrogen, NH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> i NH<sub>2</sub>OH. Hidrurs de fòsfor. L'amoníac líquid com a solvent. Àcids. Halurs. Adòs. La fixació de N. Aplicacions.
22. El grup 16: O, S, Se, Te, Po. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Formes al·lotròpiques. Ozó. Hidrurs. Halurs.
23. Òxids dels elements de la taula periòdica. Formes de classificació. Classificació segons el comportament àcid-base. Classificació segons la seva estructura.
24. 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 cicle del S. Aplicacions.
25. El grup 17: F, Cl, Br, I, At. Característiques generals del grup. Propietats dels elements. Reactivitats. Halurs d'hidrogen. Halurs. Òxids. Oxoàcids. Compostos Interhalogenats. Polihalurs. Pseudo-halogen. Aplicacions
26. 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.

27. Compostos de coordinació. Els treballs de Werner. Definicions. Quelats. Geometria Molecular i Isòmers. Estabilitat i Labilitat. Aplicacions. Els complexos a la natura.
28. L'enllaç en els compostos de coordinació. Teoria de l'enllaç de valència. Teoria del camp cristal·lí. Color, estabilitat i sèrie espectroquímica. La teoria d'orbitals moleculars.
29. Compostos organometàl·lics. La regla dels 18 electrons. Tipus de lligands. L'enllaç de l'etilè en la sal de Zeise. El ferrocè.
30. Generalitats dels elements de transició. Característiques dels elements de transició. Periodicitat. Estats d'oxidació. Propietats relacionades amb l'estat d'oxidació. La primera sèrie de transició. Les configuracions d<sup>n</sup> (n = 0-10). La segona i tercera sèries de transició.

BIBLIOGRAFIA - LLIBRES DE TEXTE -

1. Química Inorgànica  
E. Gutiérrez Ríos  
Ed. Reverté, 1978
2. Química Inorgànica Moderna  
J.J. Lagowski  
Ed. Reverté, 1975-76
3. Introd. a la Química Inorgànica Moderna  
K.M. Mackay y R.A. Mackay  
Ed. Reverté, 2a ed., 1974-75
4. Química Inorgànica Descriptiva  
E.G. Rochow  
Ed. Reverté, 1981
5. Química  
J.C. Bailar, Jr; T. Moeller; C.O. Guss;  
J. Kleinberg, M.E. Castellion and C. Metz  
Vicens-Vives, Barcelona-1983

.../...

- LLIBRES DE CONSULTA -

- 6.- Química Inorgánica Avanzada, 2ª Edición  
F.A. Cotton y G. Wilkinson  
Ed. Limusa-Wiley, 1969
- 7.- Inorganic Chemistry: Principles, Structure and Reactivity, 3ª Edició  
J.E. Huheey  
Harper and Row, 1983  
Traducció castellana de la 2ª edició: Editorial Harla
- 8.- Inorganic Chemistry: A Unified Approach  
W.W. Portefield  
Addison-Wesley, 1984
- 9.- Chemistry of the Elements  
N.N. Greenwood and A. Earnshaw  
Pergamon Press, 1984
- 10.- A New Concise Inorganic Chemistry  
J.D. Lee  
Van Nostrand Reinhold, 3rd ed., 1977
- 11.- Inorganic Chemistry  
A.G. Sharpe  
Longman, 1981 (Existeix una edició posterior)
- 12.- Química Inorgánica  
G. Demitras, Ch. Russ, J. Salmon, J. Weher y G. Weis  
Ed. Prentice-Hall International 1973
- 13.- Estructura atómica y molecular  
J. Barret  
Ed. AC 1978
- 14.- Introducció a la Nomenclatura Química (Inorg. i Orgànica)  
J. Sales i J. Vilarrassa  
Eunibar, 1984.