

QUÍMICA INORGÀNICA AVANÇADA

Departament de Química
U.A.B

Curs 1995-96
J.C. Bayón

1. Enllaç en molècules covalents i clusters.

Orbitals moleculars en molècules poliatòmiques: regla de Walsh. Polaritat de l'enllaç. Enllaç hidrogen. Orbitals moleculars en molècules riques en electrons. Orbitals moleculars en molècules deficients en electrons. Enllaç en clusters dels elements dels grups principals: regla de Wade. Enllaç en clusters de carbonils dels elements de transició: fragments isolobulars. Enllaç metall-metall i clusters en elements en estat d'oxidació alt.

Capítols 4 i 13 (pàgines 677-697)

2. Reaccions controlades per la variació d'entalpia.

Solvatació i donació d'electrons. Força dels àcids i bases pròtics en aigua. Força dels àcids i bases pròtics en dissolvents no-aquosos. Superàcids. Reaccions àcid-base sense protons: ions metàl·lics i compostos no-metàl·lics. Compostos de transferència de càrrega. Termodinàmica de les reaccions àcid-base no-pròtiques: model de Drago i model de la basicitat òptica.

Reaccions redox en sistemes aquosos: reactius oxidants i reductors. Reaccions redox en sistemes no-aquosos. Dissolvents oxidants. Dissolvents reductors: l'electró solvatat. Dissolvents orgànics inerts. Salts fosses com dissolvents. Reaccions redox en fase gas i en l'atmosfera.

Capítols 6, 7 i 8

3. Reaccions controlades per la variació d'entropia

El paper de la entropia en el control de les reaccions. Processos de variació d'entalpia baixa. Processos a alta temperatura. La variació d'entropia en la química dels gasos nobles. Reaccions amb ΔH i ΔS altes: explosius.

Capítol 9

4. Reaccions dels lligands coordinats i processos catalítics industrials

Modificació de la reactivitat per coordinació dels lligands. La reacció de "water-gas shift". Polimerització d'olefines. Metàtesis i isomerització d'olefines. Carbonilació de metanol i hidrocarbonilació d'olefines.

Capítol 15

5. Reaccions químiques sobre superfícies: catàlisi heterogènia

La naturalesa dels catalitzadors heterogenis. Superfície i porositat. Llocs àcids i bàsics. Llocs en superfícies metàl·liques. Etapes catalítiques: quimisorció, desorció i migració. Hidrogenació d'alquens. Síntesi d'amoníac. Oxidació de SO_2 . Interconversió d'hidrocarburs aromàtics per zeolites. Electrocatàlisi.

Capítol 17 (pàgines 730-744) de Inorganic Chemistry (2a edició). Shriver, Atkins i Langford. Oxford University Press (1994)

6. Reaccions fotoquímiques dels metalls de transició

Fonaments del procés fotoquímic. Reaccions de fotosubstitució. Reaccions redox fotoquímiques. Reaccions fotoquímiques sobre els lligands. Fotosíntesi i aprofitament de la energia solar. Fotografia.

Capítol 17

Bibliografia: Inorganic Chemistry (2ª edició). W.H. Porterfield. Academic Press (1993).

Horari d'atenció alumnes: Dimarts de 15.30 a 17.30 (3ª planta, Torre Química, C7-341)