

QUÍMICA

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS.
Antecedents històrics. Mecànica quàntica. Ones i partícules. Principi d'incertesa. La equació de Schrödinger. Partícula en una caixa. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic. Representació dels orbitals. Funció de spin.
2. ATOMS POLIELECTRÒNICS.
Aproximació dels electrons independents. Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Regles de Slater. Configuració electrònica. Excepcions a la regla de l'Aufbau.
3. LA TAULA PERIÒDICA.
Ordenació dels elements segons el nombre atòmic. Classificació dels elements: grups, períodes, blocs, metalls i no-metalls. Propietats periòdiques: variació de la càrrega nuclear efectiva i del radi atòmic. Potencial d'ionització i afinitat electrònica. Propietats periòdiques dels àtoms enllaçats: estat d'oxidació i electronegativitat.
4. GENERALITATS DE L'ENLLAÇ QUÍMIC.
Diversitat de les propietats de les substàncies. Models d'enllaç. Paràmetres estructurals i energètics: determinació experimental. Concepte de radi: radi iònic, covalent i metal·lic.
5. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES I ESPÈCIES DISCRETES (I).
Estructures de Lewis. Teoria de repulsió dels parells electrònics: predicció de la geometria molecular. Teoria de l'enllaç de valència. Orbitals híbrids *s* i *p*.
6. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES I ESPÈCIES DISCRETES (II).
El model dels orbitals moleculars. Aproximació CLOA. Energia i recobriment. La molècula d'hidrogen. Molècules AH. Polaritat de l'enllaç i moment dipolar. Molècules A₂ i molècules AB: el cas límit de l'enllaç iònic. Molècules AH₂ lineal i angular. Comparació del model d'enllaç de valència i el d'orbitals moleculars. Orbitals moleculars π en compostos orgànics: etilè, anió al·lil, butadiè i benzè.
7. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (I).
Enllaç iònic. Tipus d'estructures: AX i AX₂. Cicle de Born-Haber. Energia reticular. Propietats físiques dependents de l'energia reticular.
8. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (II).
Sòlids covalents: estructures mono, bi i tridimensionals. Sòlids moleculars. Enllaç d'Hidrogen. Forces de van der Waals.
9. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (III).
Elements metàl·lics: estructures i energia d'enllaç. Teoria de bandes. Metalls i semiconductors.
10. QUÍMICA DEL CARBONI (I).
Particularitat del carboni. Representació estructural de les molècules orgàniques. Hidrocarburs alifàtics. Hidrocarburs alicíclics. Hidrocarburs aromàtics. Isomeria. Reactivitat.
11. QUÍMICA DEL CARBONI (II).
Alcohols. Eters, tiols i amines. El grup carbonil: cetones i àldehydes. El grup carboxil: àcids carboxílics i derivats.

Llibres recomenats:

Química. Curso universitario.
Mahan.
Addison Wesley, 4^a Edición, 1990

Química. Estructura de la materia.
J.M.Costa, J.M.Lluch, J.J.Pérez
Biblioteca Universitària, Encic. Catalana

Química.
Gillespie, Humphreys, Baird, Robinson
Ed.Reverté, 2 Vols.

Les orbitales moléculaires en chimie.
Y.Jean, F.Volatron
McGraw Hill, 1991

Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic *Introducción a la química orgánica y*
F.Centelles, E.Brillas, X.Domènech, R.M.Bastida
Publicacions Universitat de Barcelona, BARCANOVA

Biológica.
Wilbraham, Matta.
Addison Wesley Iberoamericana, 1989.