

Llicenciatura de Química

Química Inorgànica Avançada

1. **L'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 deficientes 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. Sals foses com a 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 l'entropia en el control de les reaccions. Processos amb 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. Metàtesi 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'amoniac. Oxidació de SO_2 . Interconversió d'hidrocarburs aromàtics per zeolites. Electrocatàlisi.
Capítol 17 (pàgines 730-744) de SHRIVER; ATKINS; LANGFORD. Inorganic chemistry. 2^a ed. 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 l'energia solar. Fotografia.
Capítol 17.

Bibliografia

PORTERFIELD, W.H. *Inorganic chemistry*. 2^a ed. Academic Press, 1993.

Tutories

Joan Carles Bayón Despatx: C7-341 Horari: Dilluns de 15'00 a 17'00 h.