

Programa**1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS**

Antecedents històrics. Mecànica quàntica; ones i partícules, principi d'incertesa, l'equació de Schrödinger. Partícula en una caixa. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic; representació dels orbitals. Funció de spin.

2. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS.

Aproximació dels electrons independents. Principi d'exclusió de Pauling. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Regles de Slater. Configuracions electròniques; Excepcions.

3. LA TAULA PERIÒDICA

Ordenació dels elements. Classificació dels elements; grups, períodes, blocs, caràcter metàl·lic. Propietats periòdiques dels elements; volum i radi atòmics, potencial d'ionització, afinitat electrònica. Propietats dels àtoms enllaçats; estat d'oxidació i electronegativitat.

4. GENERALITATS DEL ENLLAÇ QUÍMIC.

Tipus de substàncies. Models d'enllaç. Paràmetres energètics i estructurals; determinació experimental. Concepte i tipus de radi.

5. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES (I)

Model de l'enllaç de valència; estructures de Lewis; teoria de la repulsió dels parells electrònics de la capa de valència. Teoria del enllaç de valència; hibridació.

6. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES (II)

Model dels orbitals moleculars; concepte d'orbital molecular, energia i recobriment. Molècules diatòmiques; molècules H_2 i AH, molècules A_2 i AB. Enllaços múltiples en compostos orgànics.

7. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (II)

Els metalls; estructures i propietats. Model de bandes; metalls i semiconductors. Sòlids iònics; estructures i propietats. Enllaç iònic; consideracions termodinàmiques, energia reticular.

8. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (II)

Sòlids covalents; estructures i propietats, estructures mono i bidimensionals. Sòlids moleculars; forces de Van der Waals, enllaç per pont d'hidrogen.

9. QUÍMICA DEL CARBONI (I)

Particularitat del Carboni. Hidrocarburs alifàtics; nomenclatura i representació. Hidrocarburs aromàtics. Isomeria. Reactivitat.

10. QUÍMICA DEL CARBONI (II)

Alcohols, èters i tiols. El grup carbonil; cetones i aldehids. El grup carboxil; àcids i derivats.

Llibres recomanats

Estructura atòmica i enlace químico. J. Casabó Ed. Reverté

Fonaments d'estructura atòmica i enllaç químic F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida
Publicacions UB, Barcanova

Química. Curso Universitario. H. Maham Addison Wesley, 4ª Edició (1990)

Química. Estructura de la materia J. M. Costa, J. M. Lluch, J. J Pérez. Biblioteca Universitaria. Encic. Cat.

Cálculos básicos en estructura atòmica i molecular M. Paraira, J. J. Pèrez. Ed. Vicens-Vives.

Professor de teoria: L. Escriche, (Torre de Química, 3ª planta, despatx C7-319)

Professors de problemes: O. Palacios, R. Bofill (Torre de Química, 3ª planta, despatx C7-339)