

Llicenciatura de Geologia

ESTRUCTURA ATÒMICA I ENLLAÇ

Professor: Dr. Agustí Lledós (C7-103)

1. **L'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 spin.
2. **ÀTOMS POLIELECTRÒNICS**
Aproximació dels electrons independents. Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i carrega 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 carrega 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 metàl·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 entre el model d'enllaç de valència i el d'orbitals moleculars. Orbitals moleculars II en compostos orgànics: etilè, anió al·lil, butadiè i benzé.
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 banders. Metalls i semiconductors.

BIBLIOGRAFIA

- CASABÓ, J. : *Estructura atòmica y enlace químico*, Ed. Reverté, 1997
 CENTELLES, F.; BRILLAS, E.; DOMÈNECH, X.; BASTIDA, R.M. *Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic*. Publicacions de la Universitat de Barcelona-Baranova.
 COSTA, J.M.; LLUCH, J.M.; PÉREZ, J.J. *Química. Estructura de la materia*. Enciclopèdia Catalana. Biblioteca Universitària.
 GILLESPIE; HUMPHREYS; BAIRD; ROBINSON. *Química*. 2 vol. Reverté.
 JEAN, Y; VOLATRON, F. *Atomistique et Liaison Chimique* , Ed. Science International, 1995
 MAHAN. *Química*. Curso universitario. 4a ed. Addison Wesley, 1990.
 PARAIRA, M.; PÉREZ GONZÁLEZ, J.J. *Cálculos básicos en estructura atòmica molecular*, Ed. Vicens -Vives