

Química inorgànica avançada

Curs 2001/2002

Codi 20606

2n semestre

Requisits: Química inorgànica I (aprovada), Química inorgànica II (aprovada)

- 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 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.
- 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.
- 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 AH i AS altes: explosius.
- 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.
- 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 SO₂. Interconversió d'hidrocarburs aromàtics per zeolites. Electrocatàlisi.
- 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.