

TITULACIÓ DE QUÍMICA

22960 Estructura atòmica i enllaç

CURS 2001/2002

1er semestre

- 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.
- Àtoms polieletrònics.
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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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 p en compostos orgànics: etilè, anió al·lil, butadiè i benzè.
- 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.
- L'enllaç en els sòlids (II).
Sòlids covalents: estructures mono, bi i tridimensionals. Sòlids moleculars. Enllaç d'hidrogen. Forces de Van der Waals.
- L'enllaç en els sòlids (III).
Elements metàl·lics : estructures i energia d'enllaç. Teoria de bandes. Metalls i semiconductors.