



Universitat Autònoma de Barcelona

TITULACIÓ: Química

NOM DE L'ASSIGNATURA: 22960 Estructura atòmica i enllaç

CURS: 2002/2003

CRÈDITS: 6

TEMARI TEÒRIC

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.