

ENLLAÇ I ESTRUCTURES QUÍMIQUES

CURS 2003/04

PROGRAMA

1.- Estructura Atòmica i Taula Periòdica

Àtoms hidrogenoids. Concepte d'orbital atòmic. Representació d'orbitals. Àtoms polieletrònics. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament i càrrega nuclear efectiva. Regla d'Aufbau. Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Taula periòdica i configuracions electròniques. Propietats atòmiques periòdiques: radi atòmic, energia d'ionització, afinitat electrònica, electronegativitat.

2.- L'Enllaç Covalent

Què és l'enllaç? Energies d'enllaç. Estructures de Lewis. Teoria RPECV: predicció de la geometria molecular. Ressonància. Polaritat i moment dipolar. Teorïes mecano-quàntiques: CLOA i EV. Molecules diatòmiques. Molècules poliatòmiques. Diagrames de Walsh. Comparació de mètodes. Química quàntica computacional.

3. L'Enllaç en els Sòlids.

Estats d'agregació. Tipus de sòlids. Sòlids covalents. Enllaç metàl·lic. Enllaç iònic. Estructures cristal·lines compactes i no compactes. Energia reticular. Cicle de Born-Haber. Forces Intermoleculars. Forces de van der Waals i enllaç d'hidrogen.

4.- Química Inorgànica

Propietats característiques generals dels elements de la Taula Periòdica. Principals compostos. Compostos de coordinació.

5.- Química Orgànica

Hidrocarburs saturats i no saturats. Grups funcionals: alcohols, èters, aldehids, cetones, àcids carboxílics, èsters i amines. Reactivitat i síntesi.

6.- Química Biològica

La química dels éssers vius. Aminoàcids i proteïnes. Enzims. Hidrats de carboni. Lípids. Àcids nucleics.

BIBLIOGRAFIA

- Atkins, P.W., *Química General*, Ed. Omega, 1989
- Bailar, J.C.; Moeller, T.; Kleinberg, J.; Guss, C.O.; Castellion, M.E.; Metz, C., *Chemistry*, Harcourt Brace Jovanovich Publishers, 1989. (Edició Espanyola de Vicens-Vives, 1983).
- Casabó, J., *Estructura Atòmica y Enlace Químico*, Ed. Reverté, 1997.
- Centellas, T.; Brillas, E.; Doménech, X.; Bastida, R.M., *Fundamentos d'Estructura Atòmica i de l'Enllaç Químic*, Barcanova, 1992.
- Costa, J.M.; Lluch, J.M.; Pérez, J.J. *Química. Estructura de la Matèria*. Enciclopedia Catalana. Biblioteca Universitària
- Mahan, B.H.; Myers, R.J., *Química, Curso Universitario*, 4ª ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990.
- Mo, O.; Yñez, M., *Enlace Químico y Estructura Molecular*, J.M. Bosch Editor.

Professors:

Miquel Moreno Ferrer. Despatx: C7/137. E-mail: mmf@klingon.uab.es

Nicole Doelker. Despatx: C7/153 . E-mail: nicole@klingon.uab.es

Adreça web: <http://www.qf.uab.es/mmf/estructura>