

ESTRUCTURA ATÒMICA I ENLLAÇ (curs 2004/05)

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS

Antecedents històrics. Mecànica quàntica. Ones i partícules. Principi d'incertesa. La equació de Schrödinger. Partícula en una caixa. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic. Representació dels orbitals. Funció de spin.

2. ATOMS POLIELECTRÒNICS.

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.

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 càrrega 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. Orbitals moleculars π en compostos inorgànics.

7. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (I).

Enllaç iònic. Tipus d'estructures. Cicle de Born-Haber. Energia reticular. Propietats físiques dependent 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 bandes. Metalls i semiconductors.

Llibres recomanats:

Química. Curso Universitario.

Mahan

Addison Wesley, 40 Edición, 1990

Química. Estructura de la materia.

J.M.Costa, J.M.Lluch, J.J.Pérez.

Biblioteca Universitària. Encic.Catalana.

Estructura atómica y Enlace.

J.Casabó

Ed. Reverté

Les orbitales moléculaires en chimie.

Y.Jean, F.Volatron

McGraw Hill, 1991

Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç Químic

Publicacions Universitat de Barcelona,
Barcanova.

<http://www2.alcala.es/edejesus/resumenes/inicio/htm>