

ESTRUCTURA ATÓMICA Y ENLACE

1. Estructura electrónica de los átomos

Antecedentes históricos. Ondas y partículas. Principio de incertidumbre. Mecánica cuántica. La ecuación de Schrödinger. Partícula en una caja. El átomo de hidrógeno. Concepto de orbital atómico. Representación de los orbitales. Función de spin.

2. Átomos polielectrónicos

Aproximación de los electrones independientes. Principio de exclusión de Pauli. Regla de Hund. Orbitales y niveles de energía. Apantallamiento de los electrones y carga nuclear efectiva. Reglas de Slater. Configuración electrónica. Excepciones a la regla de Aufbau.

3. La tabla periódica

Ordenación de los elementos según el número atómico. Clasificación de los elementos: grupos, periodos, bloques, metales y no metales. Propiedades periódicas: variación de la carga nuclear efectiva y del radio atómico. Potencial de ionización y afinidad electrónica. Propiedades periódicas de los átomos enlazados: estado de oxidación y electronegatividad.

4. Generalidades del enlace químico

Diversidad de las propiedades de las sustancias. Modelos de enlace. Parámetros estructurales y energéticos: determinación experimental. Concepto de radio: radio iónico, radio covalente y radio metálico.

5. El enlace químico en las moléculas y especies discretas (I)

Estructuras de Lewis. Teoría de repulsión de los pares electrónicos: predicción de la geometría molecular. Teoría del enlace de valencia. Orbitales híbridos s y p .

6. El enlace químico en las moléculas y especies discretas (II)

El modelo de los orbitales moleculares. Aproximación CLOA. Energía y recubrimiento. La molécula de hidrógeno. Moléculas AH. Polaridad del enlace y momento dipolar. Moléculas A_2 y moléculas AB: el caso límite del enlace iónico. Moléculas AH_2 lineal y angular. Orbitales moleculares π en compuestos inorgánicos.

7. El enlace en los sólidos

Tipos de sólidos. Sólidos cristalinos. Enlace metálico. Teoría de bandas. Metales y semiconductores. Enlace iónico. Ciclo de Born-Haber. Energía reticular. Sólidos covalentes. Sólidos moleculares. Enlace de hidrógeno. Fuerzas de Van der Waals.

Libros recomendados:

- R.H. Petrucci, W.S. Harwood, F.G. Herring. *Química general. Enlace químico y estructura de la materia* (Vol. 1) Ed. Prentice Hall.
- J.M. Costa, J.M. Lluch, J.J. Pérez. *Química. Estructura de la materia*. Biblioteca Universitaria. Encic. Catalana.
- J. Casabó. *Estructura atómica y Enlace*. Ed. Reverté.
- F. Centelles, E. Brillias, X. Domènech, R. M. Bastida. *Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic*. Publicacions Universitat de Barcelona-Barcelona.
- Y. Jean, F. Volatron. *Les orbitales moléculaires en chimie*. Ed. McGraw Hill.
- E. de Jesús. <http://www2.uah.es/dejesus/resumenes/EOEM.htm>.