

QUÍMICA INORGÀNICA AVANÇADA

Departament de Química
U.A.B

1. Enllaç en molècules covalents i clústers.

Orbitals moleculars en molècules poliatòmiques: regla de Walsh. Polaritat de l'enllaç. Enllaç d'hidrogen. Orbitals moleculars en molècules riques en electrons. Orbitals moleculars en molècules deficientes en electrons. Enllaç en clústers dels elements dels grups principals: regla de Wade. Enllaç en clústers de carbonils dels elements de transició: fragments isolobulars. Enllaç metall-metall i clústers en elements en estat d'oxidació alt. *Porterfield, Capítols 4 i 13 (pàgines 677-697).*

2. Reaccions controlades per la variació d'entalpia.

Solvatació i donació d'electrons. Força dels àcids i bases protics en aigua. Força dels àcids i bases protics en dissolvents no-aquosos. Superàcids. Reaccions àcid-base sense protons: ions metal·lics i compostos no-metal·lics. Compostos de transferència de càrrega. Termodinàmica de les reaccions àcid-base no-protiques: model de Drago i model de la basicitat òptica. Reaccions redox en sistemes aquosos: reactius oxidants i reductors. Reaccions redox en sistemes no-aquosos. Dissolvents oxidants. Dissolvents reductors: l'electró solvatat. Dissolvents orgànics inerts. Salts foses com dissolvents. Reaccions redox en fase gas i en l'atmosfera. *Porterfield, Capítols 6, 7 i 8.*

3. Reaccions controlades per la variació d'entropia.

El paper de l'entropia en el control de les reaccions. Processos amb variació d'entalpia baixa. Processos a temperatura alta. La variació d'entropia en la química dels gasos nobles. Reaccions amb ΔH i ΔS altes: explosius. *Porterfield: Capítol 9*

4. Reaccions dels lligands coordinats i processos catalítics industrials.

Modificació de la reactivitat per coordinació dels lligands. Hidrogenació i isomerització. Polimerització d'olefines. Metàtesis i isomerització d'olefines. Carbonilació del metanol i hidrocarbonilació d'olefines. *Porterfield: Capítol 15; Shriver, Atkins i Langford, Capítol 17.*

5. Reaccions químiques sobre superfícies: catàlisi heterogènia.

La naturalesa dels catalitzadors heterogenis. Superfície i porositat. Llocs àcids i bàsics. Llocs en superfícies metal·liques. Etapes catalítiques: quimisorció, desorció i migració. Hidrogenació d'alquens. Síntesi d'amoniac. Oxidació de SO_2 . Interconversió d'hidrocarburs aromàtics per zeolites. Electrocatalisi. *Shriver, Atkins i Langford, Capítol 17.*

6. Reaccions fotoquímiques dels metalls de transició.

Fonaments del procés fotoquímic. Reaccions de fotosubstitució. Reaccions redox fotoquímiques. Reaccions fotoquímiques sobre e's lligands. Fotosíntesi i aprofitament de l'energia solar. Fotografia. *Porterfield, Capítol 17.*

Bibliografia: W.H. Porterfield. *Inorganic Chemistry* (2a edició). Academic Press (1993). Shriver, Atkins i Langford, *Química Inorgànica*, vol. 2. Reverté (1998).

Atenció a l'alumne: a convenir (despatx: C7-335).