

ENLLAÇ I ESTRUCTURES QUÍMIQUES (Termodinàmica i cinètica químiques)

CURS 2004/05

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.

2.- L'Enllaç Covalent

Què és l'enllaç? Estructures de Lewis. Teoria RPECV: predicció de la geometria molecular. Ressonància. Polaritat i moment dipolar. Teories 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. Forces Intermoleculares. Forces de van der Waals. Enllaç d'hidrogen.

4. Termodinàmica Química

Primer principi de la termodinàmica. Termoquímica: Entalpies d'enllaç, cicle de Born-Haber. Segon i tercer principis de la termodinàmica. Interpretació molecular de l'entropia. Energia lliure. Funcions termodinàmiques normals de reacció. Condicions d'equilibri químic. Equilibri electroquímic. Química de superfícies.

5. Cinètica Química

Velocitat de les reaccions químiques. Ordre de reacció. Constant de velocitat. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Mecanismes de reacció. Molecularitat. Determinació experimental de l'ordre d'una reacció. Estudi de mecanismes de reacció. Reaccions en cadena. Catàlisi homogènia. Reaccions en superfícies: catàlisi heterogènia. Dinàmica de les reaccions químiques.

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* np1027, Harcourt Brace Jovanovich np1027 Publishers, 1989. (Edició Espanyola de Vicens-Vives, 1983).
- Casabó, J., *Estructura Atòmica y Enlace Químico*, Ed. Reverté, 1997.
- Centellas, T.; Brillas, E.; Domènech, X.; Bastida, R.M., *Fonaments d'Estructura Atòmica i de l'Enllaç Químic*, Barcanova, 1992.
- Costa, J.M.; Lluch, J.M.; Pérez, J.J. *027 Química. Estructura de la Matèria*. Enciclopedia Catalana. Biblioteca Universitària
- Mahan, B.H.; Myers, R.J., *Química, Curso Universitario*, 4^a ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990.
- Levine, I.N., *Fisicoquímica* np1027 (2 volumens), 5^a ed., McGraw-Hill, 2002

Professor:

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

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