

Llicenciatura
Assignatura
Curs

QUÍMICA
ESTRUCTURA ATÒMICA I ENLLAÇ
2005-2006

1. Programa i Objectius Educatius

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS

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

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Adquirir consciència de la necessitat de l'evidència experimental en el món de la química. Adquirir nocions generals sobre la història del descobriment de l'àtom i els seus components i sobre les propietats d'aquests. Entendre els diferents models atòmics proposats al llarg de la història i el perquè de l'aparició de la mecànica quàntica. Entendre i saber aplicar correctament el model atòmic de Bohr en la interpretació dels espectres atòmics. Entendre les conseqüències de l'aparició de la mecànica quàntica a l'hora d'interpretar el comportament de les partícules microscòpiques: entendre els conceptes *funció d'ona*, *probabilitat*, *quantització de l'energia* i *estats degenerats*. Entendre el concepte d'orbital atòmic i conèixer la seva representació en l'espai en funció dels valors dels nombres quàntics n , l i m_l en el cas de l'àtom d'hidrogen. Saber emprar les coordenades polars a l'hora d'interpretar la forma de qualsevol orbital atòmic s , p o d i saber representar gràficament qualsevol d'aquests orbitals. Entendre la diferència entre els conceptes *densitat de probabilitat radial* i *funció de distribució de probabilitat radial* i saber trobar-ne els màxims per a qualsevol orbital atòmic hidrogenoide. Saber deduir sense fer càlculs el nombre de nodes i màxims de la funció de distribució de probabilitat radial per a qualsevol orbital atòmic. Saber trobar les direccions de màxima probabilitat i els plans nodals de la part angular de qualsevol orbital atòmic hidrogenoide de tipus s , p o d . Saber diferenciar el significat dels conceptes *difusió* i *penetració* per a cadascun dels diversos orbitals atòmics. Entendre el concepte quàntic d'estat de spin.

2. ÀTOMS 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. Regla d'Aufbau i excepcions.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Entendre l'efecte apantallant dels electrons en els àtoms polieletrònics i com aquest fet afecta l'energia de cadascun dels electrons del sistema. Saber aplicar les regles de Slater per a qualsevol electró de qualsevol àtom. Comprendre el principi d'Aufbau a partir dels diagrames d'energia dels electrons en els àtoms polieletrònics. Saber deduir la configuració electrònica de qualsevol àtom a partir de l'assimilació dels principis d'Aufbau i d'exclusió de Pauli i la regla de Hund. Conèixer els casos més destacats d'excepcions de configuració electrònica (Cr, Mo, Cu, Ag, Au, Pd, Pt, Rh). Entendre el concepte de capa de valència en els elements dels grups principals i de transició i saber quins seran en cada cas els electrons més fàcilment arrencables.

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.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Saber deduir per a un element qualsevol a quin grup, període i bloc pertany. Saber quin és l'estat físic dels elements en condicions normals. Entendre quins són els factors que determinen la variació de les propietats periòdiques (radi, P.I., A.E., electronegativitat, caràcter metàl·lic). Saber quines són les anomalies en el P.I. i l'A.E. dels elements dels grups principals i per què tenen lloc. Entendre el concepte de P.I. successius i ésser capaç de preveure qualitativament com augmentaran per a un element qualsevol del bloc s o p . Entendre les diferents maneres de quantificar l'electronegativitat. Entendre la relació entre caràcter metàl·lic i caràcter àcid-base dels òxids respectius d'un element. Tenir una noció general de la variació dels E.O. al llarg de la T.P. Saber relacionar la variació de totes les propietats periòdiques, i.e., entendre com de lligades estan les unes amb les altres.

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.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Saber les diferències principals entre les propietats físiques dels compostos iònics, covalents i metàl·lics. Entendre el concepte de radi en cadascun dels tres tipus model de compostos. Entendre el paper que juga l'electronegativitat dels elements que es combinen a l'hora de definir el tipus de compostos que formaran. Tenir nocions dels valors més usuals de distàncies i energies d'enllaç dels compostos covalents. Entendre el concepte termodinàmic d'energia d'enllaç i saber aplicar conceptes bàsics termodinàmics per tal de poder determinar valors d'energies d'enllaç.

5. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES DISCRETES (I)

L'enllaç per parells d'electrons: estructures de Lewis-Langmuir. Teoria de repulsió dels parells electrònics de la capa de valència (TRPECV): predicció de la geometria molecular. Teoria de l'enllaç de valència (TEV). Polaritat de les molècules. Model dels orbitals híbrids (O.H.).

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Saber comptar els electrons de valència de qualsevol molècula covalent i saber representar-ne les estructures de Lewis-Langmuir més representatives. Entendre i saber aplicar la regla de l'octet i els conceptes *valència*, *ordre d'enllaç* i *càrrega formal*. Entendre els conceptes *estat excitat de valència*, *compost hipovalent*, *compost hipervalent* i *enllaç covalent coordinat*. Entendre i saber aplicar el concepte de ressonància. Entendre i saber aplicar la TRPECV, fins i tot podent preveure lleugeres diferències d'angles d'enllaç en base a diferències en la intensitat de les repulsions interelectròniques. Assimilar la utilitat del concepte de *molècules isoelectròniques*. Ésser capaç de deduir per a molècules covalents senzilles la presència o absència d'un moment dipolar elèctric. Entendre la diferència conceptual entre la Teoria de l'enllaç de valència i la Teoria dels O.M. Entendre la descripció de la molècula d'hidrogen segons ambdós models. Entendre la diferència entre els recobriments σ i els recobriments π . Entendre el concepte d'hibridació i la seva utilitat i pertinença. Saber generar matemàticament orbitals híbrids a partir de l'aplicació dels principis de normalització, ortogonalitat i equivalència. Saber trobar l'angle entre dos O.H. qualssevol i saber trobar les direccions dels màxims de probabilitat de qualsevol O.H. Saber veure quines molècules es poden descriure a partir de la hibridació sp , sp^2 o sp^3 de l'àtom central. Conèixer l'existència d'altres tipus d'hibridació (dsp^3 , d^2sp^3). Entendre el concepte de rotació impedida en el cas de les molècules amb enllaços dobles. Entendre els conceptes *àcid de Lewis* i *base de Lewis*.

6. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES DISCRETES (II)

El model dels orbitals moleculars (TOM): aproximació CLOA. Energia i recobriment. La molècula d'hidrogen. Molècules AH , A_2 i AB . El cas límit de l'enllaç iònic. Molècules AH_2 lineals. Orbitals moleculars π en compostos inorgànics i orgànics.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Entendre per què s'empren les aproximacions successives en el mètode CLOA. Entendre el concepte de recobriment. Entendre l'origen de les diferències energètiques i de simetria dels diferents O.M. σ i π que es poden generar en molècules diatòmiques i saber fer-ne un dibuix aproximat. Entendre des del punt de vista de la TOM per què certes molècules no poden existir en estat fonamental. Entendre com afecta el grau de recobriment i la diferència d'energia dels orbitals atòmics de partida en l'energia dels orbitals moleculars que se'n generen. Saber calcular l'ordre d'enllaç per a qualsevol molècula de la qual tingueu el seu diagrama d'O.M. Saber generar el diagrama d'O.M. per a qualsevol molècula AH , A_2 i AB i poder dibuixar de manera aproximada la forma de cadascun dels O.M. Saber escriure una expressió matemàtica aproximada per a qualsevol O.M. d'aquestes molècules. Entendre els conceptes *HOMO* i *LUMO* i la seva utilitat per a preveure la reactivitat de les molècules diatòmiques. Entendre la dificultat d'establir una frontera entre el model covalent i l'iònic en certes molècules AB . Entendre l'origen i l'efecte de les interaccions creuades σ s-p en els diagrames d'O.M. de les molècules A_2 i AB . Poder deduir si una molècula serà paramagnètica o diamagnètica en base al seu diagrama d'O.M. Predir com variarà l'energia i la distància d'enllaç en una sèrie de molècules AH^x , A_2^x o AB^x amb diferent càrrega x . Entendre el diagrama d'O.M. del BeH_2 i saber com s'empra el mètode dels fragments moleculars. Veure les diferències i similituds entre el model de la TEV i la TOM a l'hora de descriure el sistema π deslocalitzat del benzè. Veure la utilitat de la TOM per a descriure sistemes π deslocalitzats tant en molècules inorgàniques com orgàniques.

7. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (I)

Elements metàl·lics: estructures i energia d'enllaç. Teoria de bandes. Metalls, semiconductors i aïllants.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Entendre els conceptes *sòlid cristal·lí*, *cel·la unitat*, *nombre i geometria de coordinació* i *fracció de volum ocupat*. Saber distingir els diferents tipus d'empaquetaments d'esferes (cúbic senzill, cúbic centrat en el cos, cúbic compacte i hexagonal compacte). Entendre els conceptes *forat cúbic*, *forat tetraèdric* i *forat octaèdric*. Saber calcular la fracció de volum ocupat en els empaquetaments cúbic senzill, cúbic centrat en el cos i cúbic compacte, i saber calcular paràmetres diversos en aquests casos (p.ex. saber calcular la densitat del metall a partir del valor del radi metàl·lic i el Pa, etc.). Conèixer l'existència del fenomen del polimorfisme en els metalls. Entendre el model de bandes de l'enllaç metàl·lic i les diferències entre els metalls (conductors), semimetalls i semiconductors i els no metalls (aïllants).

8. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (II)

Enllaç iònic. Tipus d'estructures. Cicles de Born-Haber. Energia reticular. Propietats físiques depenents de l'energia reticular.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Conèixer i entendre les relacions estructurals entre els metalls i els compostos iònics i les propietats físiques dels darrers. Ésser capaços de calcular la relació de radis ideal entre el catió i l'anió en el cas d'una estructura tipus CsCl, NaCl i blenda de zinc. Entendre la potencialitat que presenta el coneixement de la relació de radis catió/anió per a la predicció del tipus d'estructura que presentaran els compostos iònics. Saber calcular paràmetres diversos dels sòlids iònics a partir del coneixement d'altres que hi estan relacionats (p.ex. saber calcular la densitat d'un sòlid iònic a partir del coneixement de la seva estructura, dels radis iònics i dels Pa, o p.ex. saber calcular-ne la fracció de volum ocupat a partir de la seva estructura i dels radis iònics, etc.). Tenir present el fenomen de la polarització dels anions i cations en els sòlids iònics (distorsió de la geometria ideal). Entendre des d'un punt de vista termodinàmic per què existeixen i són estables els compostos iònics. Conèixer la definició d'energia reticular (U_{ret}) i ésser capaç de generar un cicle termodinàmic de Born-Haber que permeti calcular-la per a un sòlid iònic qualsevol. En base al punt anterior poder fer prediccions sobre l'existència o no de compostos iònics hipotètics. Conèixer la relació entre la U_{ret} i les diverses propietats físiques dels sòlids iònics. Entendre com es duu a terme el càlcul teòric de la U_{ret} i quin és el significat físic de la constant de Madelung (A). Saber de quins paràmetres depèn la U_{ret} i de quina manera. Saber aplicar els models de Born-Landé, Born-Mayer i Kapustinskii per al càlcul teòric de la U_{ret} dels diferents compostos iònics.

9. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (III)

Sòlids covalents: estructures mono, bi i tridimensionals. Sòlids moleculars. Enllaç d'hidrogen. Forces de van der Waals.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Entendre la diferència conceptual i de propietats físiques entre els sòlids covalents i els moleculars. Conèixer l'existència del fenomen del polimorfisme en els sòlids covalents. Tenir presents les relacions estructurals entre els sòlids covalents, iònics i moleculars. Saber els diferents tipus de forces de curt abast que poden actuar en els sòlids moleculars i conèixer-ne la seva naturalesa i la seva intensitat relativa. Poder ordenar en base al punt anterior els p_{fus} o p_{eb} de diferents compostos moleculars. Conèixer l'origen i la naturalesa del pont d'hidrogen i tenir present la seva gran importància en el món de la bioquímica i de la vida. Tenir nocions generals de les estructures que poden presentar els elements dels grups principals en estat elemental i l'existència del fenomen del polimorfisme. Tenir una visió general de la variabilitat de les estructures i propietats dels derivats dels elements dels grups principals en funció de l'electronegativitat dels mateixos.

2.- Hores aprox. que ha de dedicar l'alumne per tal de superar l'assignatura.

ACTIVITATS PRESENCIALS	Classes de teoria	35
	Classes de problemes	13
	Classes de pràctiques	
	Classes de pràctiques de camp	
	Activitats tutoritzades	5
	Realització de proves parcials	
	Realització d'exàmens finals	7
ACTIVITATS NO PRESENCIALS	Estudi/Preparació de teoria	35
	Realització/Preparació de problemes	25
	Recerca Bibliogràfica	5
	Preparació de pràctiques (tot tipus)	
	Preparació/Correcció de treballs	
	Preparació/Correcció d'exàmens	10
	TOTAL	135

3.- Principal capacitat o destresa a adquirir.

Aprendre a relacionar entre si les observacions que es poden fer en el món macroscòpic (temperatura d'ebullició, solubilitat, conductivitat, reactivitat, etc.) a partir dels coneixements que es tenen del comportament de la matèria a nivell microscòpic (estructura electrònica, propietats atòmiques i tipus d'enllaç químic).

4.- Requisits previs.

Preferiblement haver cursat matemàtiques, física i química durant el Batxillerat. Conèixer la nomenclatura bàsica dels compostos inorgànics (àcids, bases i sals).

5.- Metodologia.

Els alumnes disposaran d'apunts per a les sessions de teoria. Es faran 5 sessions tutoritzades d'una hora en les quals es proposarà als alumnes de resoldre problemes en grup i també se'ls proposarà de plantejar-se possibles preguntes d'examen, les quals hauran de resoldre els seus companys i que seran també comentades entre tots a la següent classe. Hi haurà també un llistat de problemes amb les solucions respectives.

També es farà ús del campus virtual, on s'hi penjaran preguntes d'autoavaluació amb les respostes corresponents i petits programes informàtics que ajudaran a entendre els conceptes exposats a classe. També es proporcionaran als alumnes adreces web útils i complementàries per al seu aprenentatge.

6.- Avaluació.

L'avaluació de l'alumne es basarà en un examen final, que versarà bàsicament sobre qüestions pràctiques de l'assignatura (exercicis i problemes), si bé no es descarta alguna pregunta curta de teoria.

7.- Bibliografia.

- *Estructura atòmica y enlace químico*. J. Casabó; Ed. Reverté (1996)
Aquest llibre conté tota la informació bàsica sobre les propietats de l'àtom, dels elements químics, de l'enllaç químic i dels sòlids. Conté exemples i dibuixos molt aclaridors.
- *Fonaments d'estructura atòmica i enllaç químic*. F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida; Barcanova, Edicions de la UB (1992)
Aquest llibre permet aprofundir més des d'un punt de vista físic en les propietats de l'àtom i l'estat sòlid. Especialment útil per als Temes 1, 2 i 7-9.
- *Les orbitales molèculaires en chimie*. Y.Jean, F.Volatron; McGraw Hill, 1991.
Especialment útil per al Tema 6.
- *Química. Estructura de la matèria*. J.M.Costa, J.M.Lluch, J.J.Pérez; Biblioteca Universitària. Enciclopèdia Catalana.
- *Introducció a la nomenclatura química inorgànica i orgànica (5a edició)* J. Sales, J. Vilarrassa; Ed. Reverté (2003)
Aquest llibre és aconsellable per repassar les normes bàsiques de formulació en Q.I. i Q.O.
- *Cálculos básicos en estructura atómica y molecular*. M. Paraira, J. J. Pérez; Ed. Vicens-Vives (1988)
- *Química. Curso Universitario*. H. Mahan; Addison Wesley, 4^a Edició (1990)