

ENLLAÇ QUÍMIC I ESTRUCTURA

Enginyeria Química

Obligatòria: 6 crèdits (4,5+1,5)

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS

Antecedents històrics. Mecànica quàntica. Ones i partícules. Principi d'incertesa. L'equació de Schrödinger. Partícula en una caixa. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic. Representacions dels orbitals. Funció 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. 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: potencial d'ionització, afinitat electrònica i radis atòmics. Electronegativitat.

4. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES I ESPÈCIES DISCRETES (I). TEORIA DE LEWIS

Generalitats de l'enllaç químic. Força i energia d'enllaç. 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*.

5. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES I ESPÈCIES DISCRETES (II). TEORIA OM

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. Comparació entre el mètode d'enllaç de valència i el d'orbitals moleculars. Molècules poliatòmiques. Enllaços deslocalitzats.

6. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS

Estats d'agregació. Tipus de sòlids. Estructures compactes. Teoria de bandes. Enllaç covalent i enllaç metàl·lic. Conductors, semiconductors i aïllants. L'enllaç iònic. Estructures cristal·lines. Energia reticular. Forces intermoleculars. L'enllaç d'hidrogen. Sòlids moleculars.

BIBLIOGRAFIA

CASABÓ, J. : *Estructura atòmica y enlace químico*, Ed. Reverté.

CENTELLES, F.; BRILLAS, E.; DOMÈNECH, X.; BASTIDA, R.M. *Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic*. Publicacions de la Universitat de Barcelona-Barcelona.

COSTA, J.M.; LLUCH, J.M.; PÉREZ, J.J. *Química. Estructura de la matèria.* Enciclopèdia Catalana. Biblioteca Universitària.

COX, P.A. *Introduction to quantum theory and atomic structure,* Oxford chemistry primers.

GRAY, H.B. *Chemical bonds: an introduction to atomic and molecular structure,* University Science Books

JEAN, Y; VOLATRON, F. *Atomistique et liaison chimique ,* Ed. Science International.

MAHAN, B. *Química.* Curso universitario. Ed. Addison Wesley.

PARAIRA, M.; PÉREZ GONZÁLEZ, J.J. *Cálculos básicos en estructura atómica y molecular.* Ed. Vicens -Vives

WINTER, M.J. *Chemical Bonding,* Oxford chemistry primers.