

ESTRUCTURA ATÒMICA I ENLLAÇ

Codi: 20548

Curs 2006-2007

Universitat Autònoma de Barcelona

1. Introducció a la mecànica quàntica

Antecedents històrics.- Ones i partícules.- Principi d'incertesa.- Mecànica quàntica. L'equació de Schrödinger.- Partícula en una caixa.

2. Àtom d'hidrogen

L'àtom d'hidrogen.- Concepte d'orbital hidrogenoide.- Representació dels orbitals.- Spin electrònic

3. Àtoms polieletrònics

Aproximació dels electrons independents.- Orbitals atòmics i nivells d'energia.- Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva.- Principi d'exclusió de Pauli.- Configuració electrònica. Excepcions a la regla de l'Aufbau.- Regla de Hund.- Regles de Slater.

4. La taula periòdica

Introducció històrica.- Ordenació dels elements segons el nombre atòmic.- Classificació dels elements en grups, períodes i blocs.- Propietats periòdiques dels àtoms.- Radi atòmic i radi iònic.- Potencial d'ionització.- Afinitat electrònica.- Electronegativitat.- Altres propietats: estat d'oxidació, basicitat, caràcter metàl·lic.

5. Introducció a l'enllaç químic

Estats d'agregació i molècules discretes.- Tipus d'enllaç.- Paràmetres estructurals i energètics: determinació experimental.- Polaritat de l'enllaç i moment dipolar.

6. Estructura i geometria de les molècules discretes

Estructures de Lewis.- Conceptes de ressonància, ordre d'enllaç, càrrega formal i estat d'oxidació.- Geometria molecular: teoria de la repulsió de parells electrònics (VSEPR).

7. Teories de l'enllaç químic en les molècules discretes

La molècula d'hidrogen.- Aproximació de Born-Oppenheimer.- Teoria de l'enllaç de valència. Orbitals híbrids.- Teoria dels orbitals moleculars. Aproximació CLOA.- Molècules diatòmiques homonuclears i heteronuclears.- Molècules poliatòmiques.

8. L'enllaç en els sòlids

Tipus de sòlids.- Estructures cristal·lines.- Enllaç metàl·lic. Teoria de bandes. Metalls, semiconductors i aïllants.- Sòlids iònics. Energia reticular. Cicle de Born-Haber.- Sòlids covalents.- Sòlids moleculars. Forces intermoleculars: enllaç d'hidrogen, forces de van der Waals.

Bibliografia recomanada:

- **J.Casabò:** *Estructura atòmica y enlace*, Ed. Reverté, 1996.
- **J.M.Costa, J.M.Lluch, J.J.Pérez:** *Química. Estructura de la materia*, Biblioteca Universitària. Enciclopèdia Catalana, 1993.
- **F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida:** *Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic*, Publicacions Universitat de Barcelona-Barcanova, 1992.
- **R.H. Petrucci, W.S. Harwood, F.G. Herring:** *Química general. Enlace químico y estructura de la materia*, Vol. 1, Ed. Prentice Hall, 2003.
- **American Chemical Society,** *Química, un proyecto de la American Chemical Society*. Ed. Reverté, 2005.
- **M.D. Reboiras:** *Química, la ciencia básica*, Ed. Thomson, 2006.
- **P. Atkins, L. Jones:** *Principios de Química*, 3ª edició, Ed. Panamericana, 2006.
- **R. Chang:** *Principios esenciales de Química General*, 4ª edició, Ed. McGraw-Hill, 2006.