

## ENLLAÇ I ESTRUCTURES QUÍMIQUES

(Codi 25482)

Llicenciatura en Física

Curs 2006-2007

### 1. Estructura electrònica dels àtoms

Introducció.- L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital. - Representació dels orbitals.- Spin electrònic.- Àtom d'heli. Mètodes aproximats.- Àtoms polieletrònics.- Principi d'exclusió de Pauli. – Configuració electrònica. Regla de l'Aufbau.- Termes espectrals. Regla de Hund.- Apantallament i càrrega nuclear efectiva. Regles de Slater.

### 2. La taula periòdica

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

### 3. Introducció a l'enllaç químic

Estats d'agregació i molècules discretes.- Tipus d'enllaç.- Paràmetres estructurals i energètics.- Estructures de Lewis. Ressonància.- Geometria molecular: teoria de la repulsió de parells electrònics de valència (VSEPR).

### 4. La molècula d'hidrogen

Aproximació de Born-Oppenheimer.- La molècula  $H_2^+$ . Orbitals moleculars- Teoria dels Orbitals Moleculars (OM). Aproximació CLOA.- Teoria de l'Enllaç de València (EV).- Comparació dels dos mètodes.

### 5. Molècules diatòmiques i poliatòmiques

Molècules diatòmiques homonuclears i heteronuclears.- Polaritat i moment dipolar.- Molècules poliatòmiques.- Teoria EV: hibridació, ressonància.- Teoria OM: regles de Walsh, deslocalització, aromaticitat, orbitals frontera.- Química computacional.

### 6. L'enllaç en els sòlids

Tipus de sòlids.- Estructures cristal·lines.- Enllaç metàl·lic. Teoria de bandes. Aliatges - Sòlids iònics. Energia reticular. Cicle de Born-Haber.- Sòlids covalents.- Sòlids moleculars. Forces intermoleculars.

## BIBLIOGRAFIA

- **American Chemical Society**, *Química, un proyecto de la American Chemical Society*. Ed. Reverté, 2005.
- **P.W. Atkins, J. De Paula**: *Physical Chemistry*, 7ª edició, Ed. Oxford University Press, 2002. (Traducció espanyola de la 6ª edició: Ed. Omega, 1999).
- **J.Casabó**: *Estructura atòmica y enlace*, Ed. Reverté, 1996.
- **F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida**: *Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic*, Publicacions Universitat de Barcelona-Barcelona, 1992.
- **J.M.Costa, J.M.Lluch, J.J.Pérez**: *Química. Estructura de la materia*, Biblioteca Universitària. Enciclopèdia Catalana, 1993.
- **I. N. Levine**: *Fisicoquímica*, 5a edició, Vol. 2, Ed. McGraw-Hill, 2004.
- **R.H. Petrucci, W.S. Harwood, F.G. Herring**: *Química general. Enlace químico y estructura de la materia*, Vol. 1, Ed. Prentice Hall, 2003.

## PROFESSORS

Teoria: Mireia Garcia Viloca  
Despatx IBF/-116  
[mireia.garcia@uab.es](mailto:mireia.garcia@uab.es)

Problemes: Xavier Bagán  
Despatx C7-151  
[xavierb@klinton.uab.es](mailto:xavierb@klinton.uab.es)