

Llicenciatura **Enginyeria de materials**

Assignatura **Química de l'estat sòlid**

Programa

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS
Antecedents històrics. Mecànica quàntica; ones i partícules, principi d'incertesa. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic; representació dels orbitals. Funció de spin.
2. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS.
Principi d'exclusió de Pauling. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Configuracions electròniques; Excepcions.
3. LA TAULA PERIÒDICA
Ordenació dels elements. Classificació dels elements; grups, períodes, blocs, caràcter metàl·lic. Propietats periòdiques dels elements; volum i radi atòmics, potencial d'ionització, afinitat electrònica. Propietats dels àtoms enllaçats; estat d'oxidació i electronegativitat.
4. GENERALITATS DEL ENLLAÇ QUÍMIC.
Tipus de substàncies. Models d'enllaç. Paràmetres energètics i estructurals
5. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES DISCRETES
Model de l'enllaç de valència; estructures de Lewis; teoria de la repulsió dels parells electrònics de la capa de valència. Teoria del enllaç de valència; hibridació. Model dels orbitals moleculars; concepte d'orbital molecular, energia i recobriment. Molècules diatòmiques; molècules H₂, molècules A₂ i AB del segon període.
6. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (I)
Els metalls; estructures i propietats. Model de bandes; metalls i semiconductors. Sòlids iònics; estructures i propietats. Enllaç iònic; consideracions termodinàmiques (Cicles de Born-Haber), energia reticular.
7. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (II)
Sòlids covalents; estructures i propietats. Sòlids moleculars; forces de Van der Waals, enllaç per pont d'hidrogen.
8. ELS ELEMENTS DELS GRUPS PRINCIPALS:
Elements; estructura, estats d'oxidació i energies d'enllaç.
9. COMPOSTOS BINARIS DELS ELEMENTS DELS GRUPS PRINCIPALS
Òxids, halurs i hidrurs dels elements dels grups principals; estructura propietats i reactivitat
10. REACTIVITAT QUÍMICA
Principis d'estequiometria. Reaccions àcid-base. Reaccions redox.

Llibres recomanats

- *Estructura atòmica i enllaç químic*. J. Casabó Ed. Reverté
- *Fonaments d'estructura atòmica i enllaç químic* F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida Publicacions UB, Baranova
- *Química. Estructura de la matèria* J. M. Costa, J. M. Lluch, J. J. Pérez. Biblioteca Universitaria. Encic. Cat.
- *Cálculos básicos en estructura atòmica i molecular* M. Paraira, J. J. Pèrez. Ed. Vicens-Vives. Tema 8
- *Essential Trends in Inorganic Chemistry*. D. M. P. Mingos Ed. Oxford University Press (pp. 46-58, 89-93 i 202-206) Temes 9 i 10:
- *Química*. J. B. Russell, A. Larena. Ed. McGraw-Hill (Capítols 24 a 27) General
- *Química. Curso Universitario*. H. Maham Addison Wesley, 4ª Edició (1990) General