

Enllaç i Estructures químiques

Curs 2007/2008

A. Estructura i propietats atòmiques.

A. 1. *Introducció*

Antecedents històrics. Dualitat ona/partícula. Principi d'incertesa. Idees bàsiques de la mecànica quàntica. Funció d'ona. Operadors. L'equació de Schrödinger

A. 2. *Àtoms monoelectrònics*

Àtoms monoelectrònics. Concepte d'orbital hidrogenoide. Representació dels orbitals. Spin electrònic.

A. 3. *Àtoms polielectrònics*

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.

A. 4. *La taula periòdica*

Introducció. Radi atòmic i radi iònic. Potencial d'ionització. Afinitat electrònica. Electronegativitat. Estat d'oxidació. Caràcter metàl·lic.

B. Introducció general a l'enllaç i estructures químiques

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

C. Enllaç en molècules discretes

C. 1. *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).

C. 2. *Teoria de l'enllaç de valència*

La molècula d'hidrogen. Altres molècules binuclears. Orbitals híbrids. Molècules polinuclears.

C. 3. *Teoria dels orbitals moleculars*

Aproximació CLOA.- Molècules diatòmiques homonuclears i heteronuclears.- Molècules triatòmiques. Diagrames de Walsh.

D. Enllaç en sòlids

Tipus de sòlids. El sòlid cristal·lí. La cel·la unitat. Concepte d'empaquetament

D. 1. *Sòlids metàl·lics*

Propietats dels sòlids metàl·lics. Estructures dels sòlids metàl·lics. Enllaç en sòlids metàl·lics.

D. 2. *Sòlids iònics*

Propietats dels sòlids iònics. Estructures dels sòlids iònics. Enllaç en sòlids iònics. Energia reticular.

D. 3. *Sòlids covalents*

Propietats dels sòlids covalents. Estructures dels sòlids covalents.

D. 4. *Sòlids moleculars*

Avaluació

- Exercicis individuals entregats durant el curs (20 %)
(4, referents als capítols A2, A4, C2-C3 i D1)
- Exposicions orals en grup (20%)
- Examen final (60%)

Cada part s'avalua per separat. Cal tenir un mínim de 3/10 en cadascuna de les parts i un 5/10 global per superar l'assignatura.

Bibliografia recomanada:

- **J.Casabò:** *Estructura atómica 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*, 3^a edició, Ed. Panamericana, 2006.
- **R. Chang:** *Principios esenciales de Química General*, 4^a edició, Ed. McGraw-Hill, 2006.

Professors

Teoria: Xavier Solans Monfort (xavi@klignon.uab.es) C7-018

Problemes: Juan Manuel Ortiz (juanma@klignon.uab.es) C7-157