

Enllaç químic i estructura

Codi	Tipus	Curs/Semestre	Crèdits
23353	obligatòria semestral	2007 / 2008-1	6

Objectius

Competències específiques

Coneixements

Estructura electrònica dels àtoms. propietats dels àtoms en relació a la seva posició en la taula periòdica. Enllaç covalent: estructures de Lewis de sistemes complexos. Diagrames moleculars de molècules diatòmiques. Tipus d'enllaç en els sòlids. Estructures cristal·lines.

Habilitats

Escriure l'estructura electrònica de qualsevol àtom. Dissenyar estructures de Lewis vàlides de molècules. Escriure diagrames d'orbitals moleculars de molècules diatòmiques. Càlcul de propietats de sòlids (densitat, energia reticular)

Competències genèriques

Comprensió de les lleis que governen el món microscòpic i la seva relació amb les propietats macroscòpiques.

Capacitats prèvies

Formulació bàsica. Geometria espacial. Integrals i derivades de funcions senzilles

Continguts

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS	
<p>Antecedents històrics. Mecànica quàntica. Ones i partícules. Principi d'incertesa. L'equació de Schrödinger. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic. Representacions dels orbitals. Funció de spin.</p>	
2. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS	
<p>Aproximació dels electrons independents. Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Orbitals i</p>	

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.

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 A_2 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.

Metodologia docent

Classes d'aula amb l'ús de mitjans audiovisuals.

Avaluació

1a convocatòria (febrer/juny)

2a convocatòria
(juliol/setembre)

Avaluació en grups	Avaluació individual	
No n'hi ha	Examen escrit al final del curs	Examen escrit

Bibliografia bàsica

CASABÓ, J. : *Estructura atómica 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-Barcanova.

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.

Bibliografia complementària

Enllaços

[Pàgina web amb informació de la signatura](#)

<http://klingon.uab.es/mmf/estructura>