

Enllaç químic i estructura

Codi	Tipus	Curs/Semestre	Crèdits
23353	Obligatòria Semestral	1er / 1er	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. Tema 1: Estructura electrònica dels àtoms

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.

2. Tema 2: Àtoms polieletrònics	
Aproximació dels electrons independents. Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Configuració electrònica. Excepcions a la regla de l'aufbau.	
3. Tema 3: La taula periòdica	
Ordenació dels elements segons el nombre atòmic. Classificació dels elements: grups, períodes, blocs, metalls i no-metalls. Propietats periòdiques.	
4. Tema 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. Tema 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. Tema 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 hi ha avaluació en grups.	- No hi ha avaluació continuada. - S'avalua en referència a l'examen final del curs; cal aprovar tota l'assignatura. - Hi ha un examen final obligatori per a tothom. - No-presentat: no realitzar l'examen.	- Examen obert a tothom. - 100%. - No-presentat: no realitzar l'examen.

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

[Informació de l'assignatura](#)

<http://klignon.uab.es/mmef/estructura>