

# Química inorgànica

## I. Sistema periòdic dels elements

- Organització de la taula periòdica
- Propietats periòdiques. Energia d'ionització, Afinitat electrònica, radi, electronegativitat.
- Periodicitat i propietats físiques i estructurals.
- Relacions estructura-propietats
- Periodicitat dels grups principals i compostos química: Halurs
- Periodicitat dels grups principals i compostos química: Òxids
- Relacions diagonals.

## II. L'enllaç covalent

- Estructures de Lewis. Ressonància. Regla del octet.
- Hibridació i geometria molecular. Model RPECV.
- Orbitals moleculars. Mètode CLOA. Molècules diatòmiques homonuclears. Molècules diatòmiques heteronuclears.
- Polaritat dels enllaços. Electronegativitat. Escala de Pauling. Càlcul del percentatge de caràcter iònic d'un enllaç.
- Energies d'enllaç, distàncies i angles d'enllaç
- Interaccions intermoleculars. Forces de van der Waals. Enllaç d'hidrogen. Conseqüències en les propietats físiques.

## III. L'enllaç metàl·lic

- Teoria de l'electró lliure.
- Model de bandes. Conductivitat dels metalls. Semiconductors intrínsecs i extrínsecs.
- Estructures metàl·liques compactes: BCC, FCC i HCP. Sistemes cristal·lins i cel·les unitat. Índex de coordinació. Punts reticulars i motius. Densitat cristal·lina i factor d'empaquetament. Polimorfisme.
- Aliatges. Regles de Hume Rothery. Exemples.

## IV. L'enllaç iònic

- Aspectes energètics de la formació de compostos iònics. Cicle de Born-Haber. Energia reticular. Dissolució i solvatació.
- Relacions de Pauling. Índex de coordinació.
- Cristalls iònics. Fórmula de Born i Landé.
- Dissolucions sòlides de compostos iònics.

## V. Cinètica i termodinàmica de les reaccions químiques

- Classificació de les reaccions químiques.
- Velocitat de reacció. Equació de velocitat. Mètodes per a determinar la equació de velocitat.
- Factors que afecten a la velocitat de reacció.
- Mecanisme de les reaccions químiques.
- Termoquímica. Espontaneïtat de les reaccions. Energia lliure de Gibbs.
- Principi de Le Chatelier. Variació de la constant d'equilibri amb la temperatura.

## VI. Oxidació i reducció

- Introducció. Oxidants i reductors. Ajust de reaccions redox.
- Cel·les electroquímiques. Potencials estàndard.
- Equació de Nernst. Aplicacions.
- Diagrames de Latimer
- Diagrames de Frost
- Corrosió electroquímica. Diagrames de Pourbaix.
- Cel·les electrolítiques. Aplicacions a processos industrials.

## VII. Àcids i bases

- Introducció. Conceptes generals. Força dels àcids.
- Càlculs amb equilibris àcid-base. Balanços de matèria i càrrega.
- Diagrames log c-pH
- Neutralització. Caràcter amfipròtic.
- Dissolucions amortidores. Equació de Henderson.
- Àcids i bases de Lewis
- Aplicacions mediambientals. Pluja àcida

### Qualificació:

Examen parcial (EP), examen final (EF) i participació a classe de problemes (P).

La qualificació final es calcula com:  $\max \{ EF, 0.65 \cdot EF + 0.30 \cdot EP + 0.05 \cdot P \}$

### Bibliografia recomanada:

- Estructura atòmica y enlace químico. J. Casabó. Ed. Reverté, 1996.
- Principios de Química. Atkins & Jones. Ed. Médica Panamericana. 2005.
- The periodic table of the elements. R.J. Puddephatt, P.K. Monaghan. Oxford University Press, 2a edició 1986.
- R.H. Petrucci, F.G. Herring, J.D. Madura y C. Bissonette. Química general. Principios y aplicaciones modernas. Pearson Educación 2011.