

Auspicia y financiancia:



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

---

## Curso de capacitación: Enlace Químico

Dictado por primera vez en el año 2016, en conmemoración del Centenario de la publicación fundacional de Gilbert N. Lewis: "The atom and the molecule", *The Journal of the American Chemical Society*, 1916, 38, 762–785.

### Temario

#### *Modelo de enlace de Lewis*

Regla del octeto. Método sistemático para construir estructuras de Lewis. Expansión del octeto: cuándo es factible que ocurra. Resonancia: criterios para determinar las contribuciones relativas de cada estructura al híbrido. Carga formal.

#### *Estructura atómica y propiedades de átomos*

Nociones básicas de mecánica cuántica: ecuación de Schrödinger y funciones de onda. Orbitales atómicos de átomos hidrogenoides: función densidad de probabilidad y "forma" de los orbitales atómicos. Propiedades de los orbitales atómicos relevantes al enlace químico: energía, simetría, tamaño y distribución espacial. Diferencias con átomos polieletrónicos: apantallamiento y carga nuclear efectiva. Espectros de absorción y de emisión de átomos. Definición y concepto de: radio atómico, radio iónico, energía de ionización, afinidad electrónica, energía de hidratación, electronegatividad.

#### *Modelos de enlace basados en la mecánica cuántica*

Método de Enlace-Valencia: descripción del enlace en moléculas diatómicas y poliatómicas. Hibridización: cuándo es necesario postularla. Método de orbitales moleculares: descripción del enlace en moléculas diatómicas y nociones básicas sobre moléculas poliatómicas. Concepto de solapamiento de orbitales y variables que lo afectan. Propiedades moleculares: energías y distancias de enlace. Interpretación cualitativa de espectros de absorción de moléculas en base a diagramas de orbitales moleculares.

#### *Estructura molecular*

Teoría de repulsión de los pares electrónicos de valencia. Momento dipolar: moléculas polares y no polares. Racionalización de geometrías moleculares en términos de direccionalidad de orbitales. Comparación de estructuras moleculares predichas en base a los modelos con estructuras determinadas experimentalmente.

#### *Interacciones intermoleculares*

Características moleculares que determinan la naturaleza de las interacciones: carga, momento dipolar, polarizabilidad. Energía potencial de interacción entre dos moléculas: contribuciones atractiva y repulsiva. Clasificación de sólidos en base a las interacciones entre las entidades que los constituyen. Estructura y modelo de enlace para sólidos iónicos cristalinos