
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.

Curso de capacitación: Enlace Químico

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 polielectrónicos: 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

Ejemplos de conceptos importantes de enlace aplicados a casos de interés

Relaciones estructura/reactividad/propiedades moleculares en compuestos orgánicos e inorgánicos: acidez, basicidad, nucleofilicidad, electrofilicidad. Impedimento estérico.

Estructuras moleculares de silicatos y boranos. Nociones básicas de enlace en sólidos extendidos no iónicos. Enlace en compuestos de coordinación de metales de transición. Compuestos con enlace metal-metal.

Uso de ciclos termodinámicos aplicados a la racionalización de tendencias periódicas en propiedades moleculares (acidez comparativa de los hidrácidos de los halógenos, potenciales de reducción de los dihalógenos). Interpretación de las tendencias en base a fuerzas de enlace.

MODALIDAD DEL CURSO:

El enfoque del curso es predominantemente práctico. Para cada tema se dará una introducción teórica y a continuación se trabajará en la resolución de ejemplos ilustrativos con una modalidad de tipo taller de resolución de problemas. Finalmente, se discutirán los resultados en el pizarrón.

Se trata de un curso de actualización de contenidos. No se incluyen aspectos relacionados con la didáctica de la enseñanza de la Química.