ENLACE COVALENTE

LEUCIPO
430aC
enredo de átomos

EPICURO
Sólidos: átomos interpenetrados
Líquidos:átomos entrelazados

LODGE
1902
electrones se transfieren
en las combinaciones químicas

THOMSON
1903
Interacción debida
a que un átomo da
electrones a otro

DRUDE
1904
Valencia+=nºe que pierde
Valencia-=nºe que gana

STARK
1903
2 átomos se
reparten 1 electrón
en la molécula

ABEGG
1904
Regla del 8

LEWIS
1902-1916
Aplicación de la
regla del 8

LANGMUIR
1918
Regla del
octete

ampliación a
elementos >3s

ÁTOMO
DE
BOHR
SOMMERFELD

TEORÍA
ORBITAL

PAR
COMPARTIDO

H
X
N
H
H
par no compartido
pares compartidos

DISPOSICIÓN
DE PARES LO
MAS SEPARADOS
POSIBLES

KIMBALL
nube de
carga

MOLÉCULA
PIRAMIDAL

GEOMETRÍA MOLECULAR

Ec.Schrödinger

$H\psi = E\psi$

$$E = \frac{\int \psi H \psi \, dV}{\int \psi^2 \, dV}$$

E
longitud
de enlace
r
E.de
enlace

FUNCIÓN
DE ONDA
MOLECULAR
ψ

CÁLCULO
DE ψ

ejemplos
CO_2
SO_2
N_2O

reglas
de
HALFERICH

Difracción
electrónica

ÁCIDOS

MOLÉCULAS
RESONANTES

CARATERÍSTICAS
DIFERENCIANTES:
Comportamiento químico
Longitud de enlace
Energía de enlace

ENERGÍA DE
RESONANCIA

RESONANCIA
Pauling,1933

T.O.M
HUND
MULLIKEN
1928

T.E.V.
HEITLER
LONDON
1927

$\psi_M = a\psi_{m1} + b\psi_{m2}$

BECENO
BUTADIENO

E
distancia
de enlace
r
$a\psi_{m1}$
Ede
enlace
Ede Resonancia
ψ_M

$\psi_M = a\psi_{at1} \pm b\psi_{at2}$

SUPERPOSICIÓN
DE O.A.

espines opuestos
simetría adecuada(+,+)(-,-)
energía parecida

+ -
ENLAZANTE
ANTIENLAZANTE

λ	OM	OA	l
0	σ	s	0
1	π	p	1
2	δ	d	2

DESLOCALIZACIÓN
ELECTRÓNICA

DOBLE ENLACE
TRIPLE ENLACE

T.O.M
DESLOCALIZADOS

T.O.H
(VALENCIA
DIRIGIDA)
PAULING
SLATER
1932

ENLACE
BANANA
τ

MOLÉCULAS
DIATÓMICAS

DESCRIPCIÓN
DE UN O.M.

ENERGÍA
por nivel
>p

ENERGÍA
por nivel
<p

σ_p^{ae}
π_p^{ae}
π_p
σ_p
σ_s^{ae}
σ_s

HOMONUCLEARES
O_2,N_2 etc

HETERONUCLEARES
CO,NO,

MOLÉCULAS
IONIZADAS
CN^-,O_2^-,N_2^+ etc

ORBITALES
HÍBRIDOS

	GEOMETRÍA	ÁNGULOS
sp^3	TETRAEDRO	109º
sp^2	TRIÁNGULO EQUILÁTERO	120º
sp	LINEAL	180
sp^3d^2	OCTAEDRO	90 180
sp^3d	BIPIRÁMIDE TRIGONAL	120 180

MOMENTO
DIPOLAR

diferencia
de EN
Geometría
adecuada

POLARIDAD EN
EL ENLACE
COVALENTE

MODIFICACIÓN
DE ÁNGULOS

TEORÍA VSEPR
Sidwick, Powell.1940
Gillespie,Nyholm.1957

T.OM
LOCALIZADOS

C.L.O.A.
sólo del
par compartido

ESTABILIDAD
SOLUBILIDAD
INTERACCIONES
INTERMOLECULARES