

ÍNDICE GENERAL

A. ESTRUCTURA ATÓMICA.....	1
<i>Capítulo 1. Modelos atómicos y fundamentos de la mecánica cuántica</i>	3
1.1. Introducción	5
1.2. Modelo atómico de Böhrr	6
1.3. El espectro de hidrógeno	10
1.4. La Mecánica Cuántica	13
1.4.1. Bases de la Mecánica Cuántica.....	13
1.4.2. La ecuación de ondas de Schrödinger independiente del tiempo.....	15
1.4.3. Interpretación física de la función de onda	17
<i>Capítulo 2. Tratamiento cuántico de átomos</i>	19
2.1. Introducción	21
2.2. Ecuación de Schrödinger para el hidrógeno.....	22
2.2.1. Solución radial: tamaño de los orbitales	26
2.2.2. Solución angular: forma de los orbitales.....	29
2.2.3. Solución energética: diagrama de energías	30
2.3. Soluciones hidrogenoides.....	31
2.4. Ecuación de Schrödinger en átomos polieletrónicos.....	32
2.4.1. Aproximación de electrones independientes y corrección de Slater	33
2.4.2. Spin electrónico y principio de Pauli	37

Capítulo 3. Configuraciones electrónicas y propiedades periódicas	39
3.1. Introducción.....	41
3.2. Configuraciones electrónicas y la tabla periódica.....	42
3.2.1. Principios para llenado de orbitales	42
3.2.2. Utilización de los diagramas de energías orbitales.....	43
3.2.3. Configuraciones electrónicas	44
3.2.4. Construcción de la tabla periódica	46
3.3. Propiedades periódicas.....	47
3.3.1. Potencial de ionización.....	48
3.3.2. Afinidad electrónica.....	49
3.3.3. Radio atómico	50
3.3.4. Carga nuclear efectiva	52
3.3.5. Electronegatividad.....	53
B. ESTRUCTURA MOLECULAR.....	57
Capítulo 4. Enlace Covalente.....	59
4.1. Introducción.....	61
4.2. Tratamiento clásico del enlace.....	61
4.2.1. Estructuras de Lewis.....	61
4.2.2. Resonancia molecular.....	65
4.2.3. Estereoquímica de las moléculas (TRPECV)	66
4.3. Tratamiento cuántico del enlace	70
4.3.1. Solapamiento de orbitales.....	70
4.3.2. La ecuación molecular de Schrödinger.....	71
4.3.3. Teoría de orbitales moleculares (TOM)	73
4.3.3.1. Bases de la teoría	73
4.3.3.2. Aplicación a moléculas sencillas: H ₂ , HF, NO	76
4.3.4. Teoría de enlace de valencia (TEV).....	81
4.3.5. Hibridación de orbitales.....	81
4.3.6. Enlaces múltiples y deslocalización electrónica π	84
4.4. Propiedades de los compuestos covalentes.....	87

<i>Capítulo 5. Enlaces iónico y metálico</i>	93
5.1. Enlace iónico.....	95
5.1.1. Introducción.....	95
5.1.2. Modelo electrostático de Kossel	96
5.1.3. Momento dipolar	98
5.1.4. Porcentaje de carácter iónico	99
5.1.5. Sólidos cristalinos	101
5.1.5.1. Sólidos iónicos.....	103
5.1.6. Energía reticular.....	105
5.1.6.1. Métodos teóricos de Born-Lande y Born-Mayer	105
5.1.6.2. Ciclo termodinámico de Born-Haber	108
5.1.7. Propiedades de los compuestos iónicos	109
5.2. Enlace metálico.....	110
5.2.1. Introducción.....	110
5.2.2. La teoría de bandas vía la TOM	113
5.2.3. Conductividad eléctrica	114
5.2.4. Sólidos metálicos	116
5.2.5. Propiedades de los metales.....	118
<i>Capítulo 6. Enlaces intermoleculares</i>	121
6.1. Introducción	123
6.2. Asociados de Van der Waals.....	124
6.2.1. Fuerzas de Van der Waals	124
6.2.2. Potenciales analíticos	124
6.2.3. Propiedades de los asociados de Van der Waals	126
6.3. El enlace por puente de hidrógeno.....	127
6.3.1. Energía de enlace de hidrógeno.....	128
6.3.2. Propiedades de los asociados por puente de hidrógeno	129
<i>BIBLIOGRAFÍA</i>	133