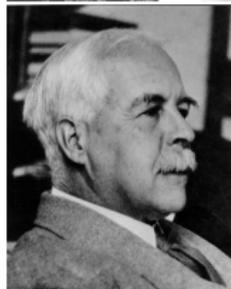


Tema 1: Enlace

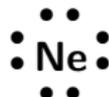
- Teoría de Lewis.
- Enlace iónico y enlace covalente.
- Estructuras de Lewis.
- Electronegatividad.
- Enlaces covalentes polares.
- Resonancia.
- Geometría de las moléculas.
- Modelo de repulsión de pares electrónicos.
- Método del enlace de valencia.
- Hibridación de orbitales atómicos.
- Enlaces covalentes múltiples.
- Método de orbitales moleculares.
- Enlace metálico: teoría de bandas.



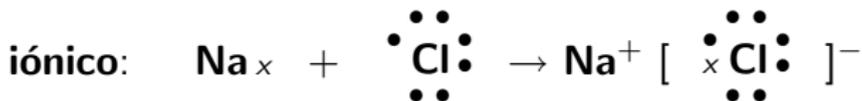
- Edward Frankland en 1852 propuso la primera teoría de la valencia: *los átomos de cada sustancia elemental tienen una capacidad de saturación determinada, de manera que sólo pueden combinar con un cierto número limitado de los átomos de otros elementos.*
- Kekulé, Van't Hoff, Lebel, Werner y otros: los átomos en las moléculas son *trozos de materia distribuidos espacialmente en conformaciones casi rígidas debidas a la existencia de fuerzas de valencia de naturaleza desconocida.*
- Entre 1916 y 1919, Gilbert Newton Lewis, Irving Langmuir y Walther Kossel propusieron que los elementos se combinan para dar compuestos tratando de alcanzar la configuración electrónica de los gases nobles (regla del octeto).

Símbolos de Lewis

- Ideados por Lewis para aplicar su teoría.
- Consisten en el símbolo químico, que representa el núcleo y los electrones internos, junto con puntos situados alrededor del símbolo, que representan los electrones de valencia. Ejemplos:



- Una *estructura de Lewis* es una combinación de símbolos de Lewis que representan la transferencia (*enlace iónico*) o compartición (*enlace covalente*) de electrones en el enlace químico.
- Ejemplos:

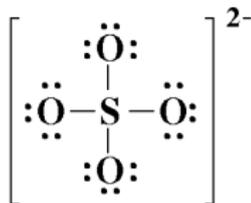


Estructuras de Lewis

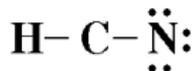
- Determinar el número total de electrones de valencia de la estructura.
- Identificar el átomo o átomos centrales. Suele ser el átomo de electronegatividad menor. El hidrógeno **nunca** es un átomo central.
- Escribir el esqueleto de la estructura y unir los átomos mediante enlaces covalente simples.
- Por cada enlace simple, descontar dos electrones de valencia.
- Con los electrones de valencia restantes, completar los octetos de los átomos terminales.
- Completar en la medida de lo posible los octetos de los átomos centrales.
- Si a algún átomo central le falla un octeto, formar enlaces covalentes múltiples transformando electrones de pares solitarios de los átomos terminales en electrones de pares enlazantes.

Estructuras de Lewis

- Consideremos la estructura del ion SO_4^{2-}
- El número de electrones de valencia es: 4×6 (átomos de O) + 6 (átomo de S) + 2 (cargas negativas) = 32
- El átomo menos electronegativo es el S (átomo central)



- Consideremos la estructura de la molécula HCN
- El número de electrones de valencia es: 1 (átomo de H) + 4 (átomo de C) + 5 (átomo de N) = 10
- El átomo menos electronegativo (descontando el hidrógeno) es el C (átomo central)

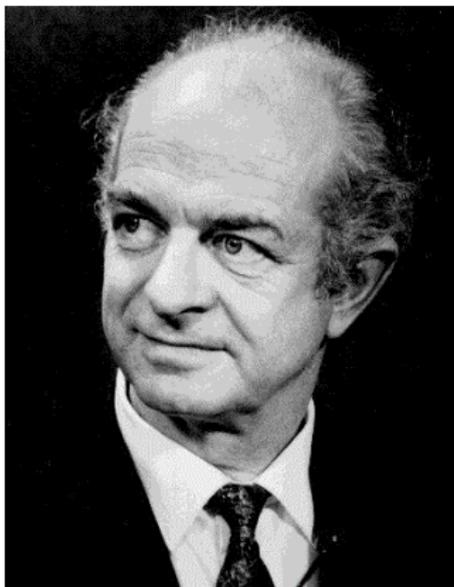


Órdenes de enlace

- Atendiendo al número de pares electrónicos compartidos, los enlaces se clasifican en *simples*, *dobles*, *triples*.
- En general, para pares de átomos dados, cuanto mayor es el orden de enlace, menor es la longitud del mismo.
- Ejemplo: $R_{CC}(HC \equiv CH) < R_{CC}(H_2C = CH_2) < R_{CC}(H_3C - CH_3)$

Excepciones a la regla del octeto

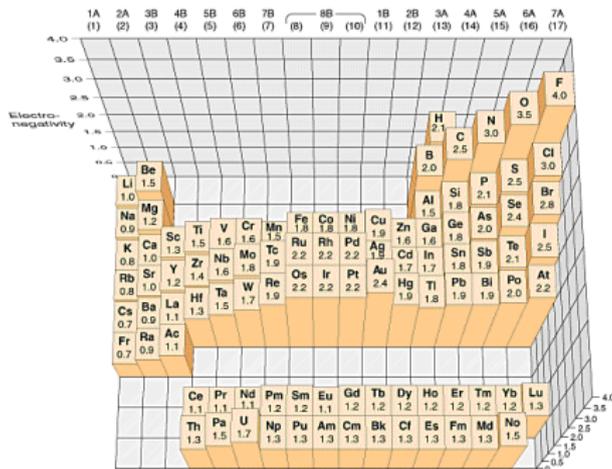
- Moléculas con un número impar de electrones. Por ejemplo el NO (se pueden explicar mediante enlaces covalentes coordinados, muy comunes en compuestos de Nitrógeno con elementos muy electronegativos).
- Moléculas con átomos de Be o B. P. ej. BeH_2 y BF_3 .
- Octetos expandidos: los átomos a partir del tercer período pueden tener hasta 6 pares de electrones a su alrededor. P. ej. PCl_5 , SF_6 .



- Linus Pauling introdujo el concepto en su obra *The Nature of the Chemical Bond*.
- Definió cualitativamente la **electronegatividad** como la capacidad de un átomo en una molécula para atraer los electrones hacia sí mismo.

Escala de Pauling de electronegatividades

- Pauling dio dos definiciones cuantitativas basadas en el ajuste de los valores de las *entalpías de formación* de los enlaces.
- Definición 1: $\Delta H_{AB} = \frac{1}{2} [\Delta H_{AA} + \Delta H_{BB}] + 23 (\chi_A - \chi_B)^2$
- Definición 2: $\Delta H_{AB} = [\Delta H_{AA} \cdot \Delta H_{BB}]^{1/2} + 23 (\chi_A - \chi_B)^2$



Escala de Mulliken de electronegatividades

- Robert Mulliken, en 1934, dio una definición alternativa basada en la afinidad electrónica y el potencial de ionización:

$$\chi_M = \frac{AE + PI}{2}$$

- Habitualmente se suele reescribir con un cambio de escala que asemeja los valores a los de la escala de Pauling:

$$\chi'_M = 1.97 \cdot 10^{-3} \frac{AE + PI}{2} \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} + 0.19$$

Enlaces covalentes polares

- Cuando la diferencia de electronegatividades de dos átomos es muy grande es probable que se forme un enlace iónico.
- Ejemplo: $\text{Na (EN = 0.9) + Cl (EN = 3) \rightarrow Na}^+\text{Cl}^-$ (cristal iónico).
- En los enlaces covalentes entre átomos distintos, la nube de carga tiende a desplazarse desde el átomo menos electronegativo al más electronegativo (*polarización del enlace o enlace covalente polar*).
- Ejemplo: $\text{H (EN = 2.1) + Cl (EN = 3) \longrightarrow H}\delta^+\text{Cl}\delta^-$ (enlace polar)

Polaridad de las moléculas

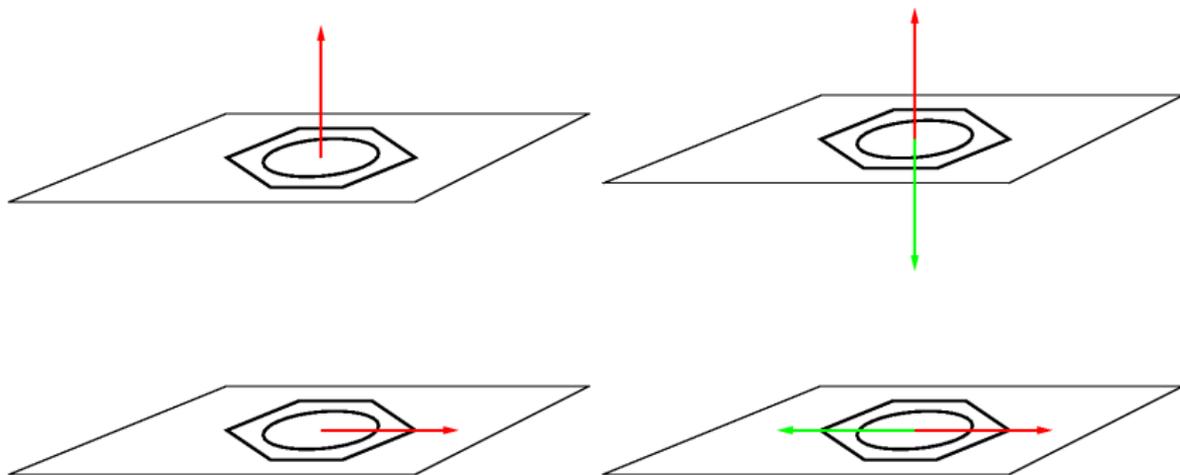
- La polaridad de los enlaces aumenta con la diferencia entre las electronegatividades de los átomos que los forman.
- La polaridad de una molécula viene dada en términos de su *momento dipolar*.
- Si el momento dipolar de una molécula es nulo se dice que es *apolar*, en caso contrario se dice que es *polar*.
- En las moléculas diatómicas, el momento dipolar de la molécula se puede identificar con el momento dipolar de enlace.
- En moléculas poliatómicas no hay una relación directa entre el momento dipolar de la molécula y los de sus enlaces.

Polaridad de las moléculas

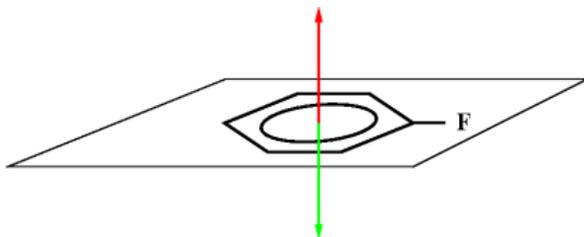
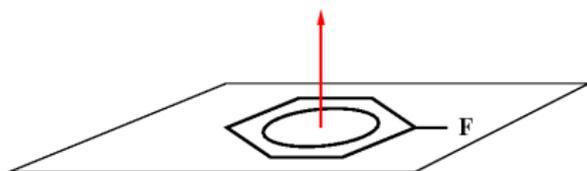
Molécula	$\Delta(EN)$	Momento dipolar (d)*
HF	1.9	1.91 D
HCl	0.9	1.03 D
HBr	0.7	0.79 D
HI	0.4	0.38 D
H ₂	0	0

* Las dimensiones del momento dipolar son *carga* \times *distancia*. Los momentos dipolares de las moléculas habitualmente se expresan en Debyes (1 Debye = $3.33564 \cdot 10^{-30}$ C \cdot m).

Polaridad de las moléculas y simetría



Polaridad de las moléculas y simetría



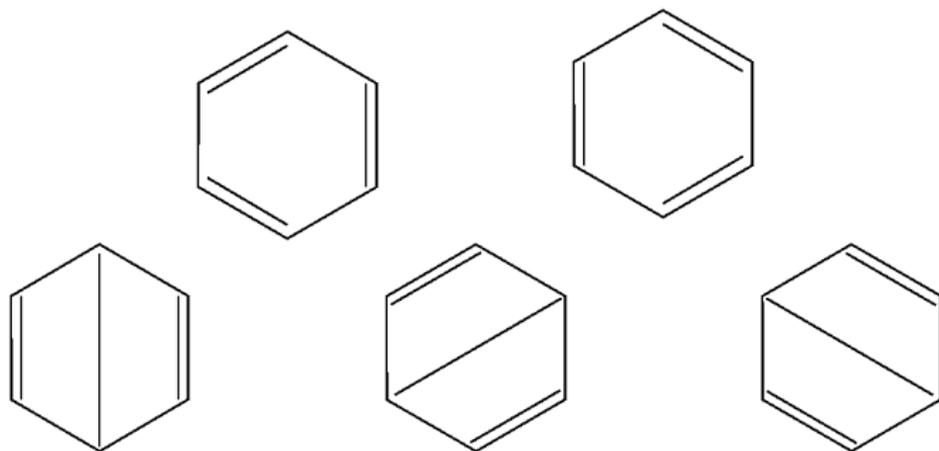
- En ocasiones, se puede escribir más de una estructura de Lewis asociada a un compuesto. En ese caso se habla de **estructuras resonantes**.
- Ejemplo: consideremos el caso de la molécula de ozono O_3 : tiene $3 \cdot 6 = 18$ electrones de valencia
las siguientes estructuras son adecuadas:



- Se dice que el orden del enlace OO en el ozono está entre uno y dos (entre simple y doble).
- Experimentalmente se encuentra que:
 $R_{OO}(O_2) = 1.207\text{\AA} < R_{OO}(O_3) = 1.278\text{\AA} < R_{OO}(H_2O_2) = 1.48\text{\AA}$

Resonancia del benceno

- Un caso especialmente interesante de resonancia es el de la molécula de benceno, C_6H_6 (estructuras de Kekulé):



- Experimentalmente se encuentra que:

$$R_{CC}(C_2H_4) = 1.33\text{\AA} < R_{CC}(C_6H_6) = 1.397\text{\AA} < R_{CC}(C_2H_6) = 1.536\text{\AA}$$

Cargas formales

- A veces, aun existiendo varias estructuras plausibles para una molécula, algunas tienen más peso que otras.
- Las cargas formales permiten estimar cuál o cuáles serán predominantes.
- La **carga formal** de un átomo en una estructura de Lewis es la diferencia entre el número de electrones de valencia del átomo y el número de electrones que se le asignan contando: un electron por cada enlace que forme el átomo y todos los electrones no enlazantes del átomo (electrones solitarios).
- Ejemplo: sea la molécula CO_2 . Tres posibles estructuras son:
 $\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$ $\ominus : \ddot{\text{O}}-\text{C}\equiv\text{O}:\oplus$ $\oplus : \text{O}\equiv\text{C}-\ddot{\text{O}}:\ominus$
- Dentro de las estructuras plausibles, tienen mayor peso las que implican menores cargas formales. En el caso anterior, la estructura 1 da cargas formales nulas, por lo que esa será fuertemente dominante.

Geometría de las moléculas

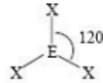
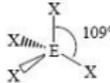
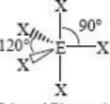
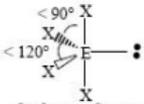
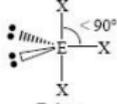
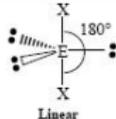
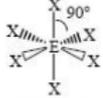
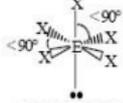
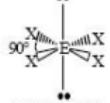
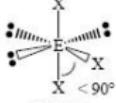
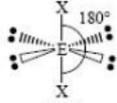
- Una de las propiedades más importantes de las moléculas es su geometría que determina muchas de sus propiedades físicas y químicas.
- La geometría viene determinada por las posiciones que adoptan en el espacio los núcleos de los átomos que forman la molécula.
- La forma de la nube electrónica que rodea los núcleos depende de las posiciones de éstos.
- Frecuentemente, la geometría se especifica en forma de distancias entre núcleos de átomos enlazados (**distancias de enlace**) y ángulos entre enlaces (**ángulos de enlace**).

Modelo de repulsión de pares electrónicos

- El modelo de Lewis fue usado por Ronald J. Gillespie y Ronald Sydney Nyholm para predecir geometrías de moléculas. Suponen que *el mejor acomodo de un número dado de pares de electrones en torno a un átomo es el que minimiza las repulsiones entre ellos.*
- El modelo así desarrollado recibe el nombre de VSEPR (Valence shell electron pair repulsion). (En español, TRPEV).
- Para aplicar el modelo, cada par solitario cuenta como un par de electrones de valencia y cada enlace *con independencia de su orden* cuenta también como un par.
- En las moléculas con más de un átomo central, el método se aplica a cada uno de los átomos no terminales.

Modelo de repulsión de pares electrónicos

Geometrías en el método VSEPR

VSEPR Geometries					
Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 <p>Linear</p>				
3	 <p>Trigonal Planar</p>	 <p>Bent or Angular</p>			
4	 <p>Tetrahedral</p>	 <p>Trigonal Pyramid</p>	 <p>Bent or Angular</p>		
5	 <p>Trigonal Bipyramid</p>	 <p>Sawhorse or Seesaw</p>	 <p>T-shape</p>	 <p>Linear</p>	
6	 <p>Octahedral</p>	 <p>Square Pyramid</p>	 <p>Square Planar</p>	 <p>T-shape</p>	 <p>Linear</p>

Inconvenientes del modelo de Lewis y el método VSEPR

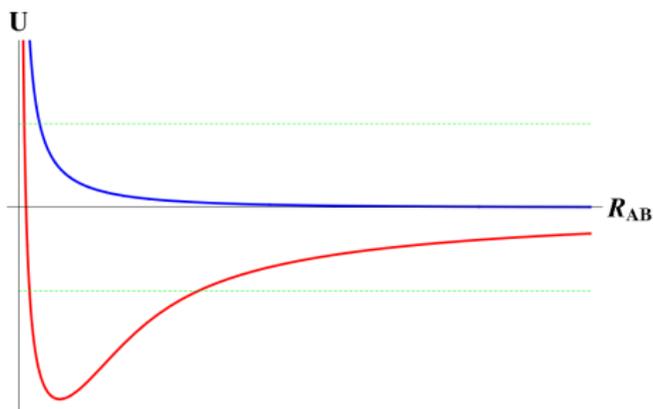
- El modelo de Lewis no es un modelo *físico* de las moléculas.
- No se puede atribuir entidad física a las reglas ni a las estructuras.
- No justifica la existencia de moléculas con número impar de electrones.
- El método VSEPR no permite hacer predicciones o explicaciones cuantitativas.
- En ocasiones falla en su predicción: p.ej. para la molécula de SH_2 predice una geometría angular con un ángulo próximo al del tetraedro (109.5°) cuando en realidad es casi recto (92°).
- Ambos dan una idea de la molécula como un ente *estático*.

La molécula de acuerdo con la mecánica cuántica

- La mecánica cuántica permite hacerse una imagen de la molécula como un conjunto de cargas puntuales positivas rodeados de una nube de carga negativa.
- Los núcleos no permanecen quietos sino que vibran en torno a ciertas posiciones *de equilibrio*.
- El movimiento de los electrones es mucho más rápido que el de los núcleos, de manera que éstos se mueven bajo la acción del potencial que genera la repulsión nuclear y la energía electrónica.
- Para una determinada molécula, existen distintas formas de distribuir la nube de carga electrónica en el espacio *estado electrónico*.
- No todos los estados electrónicos conducen a la formación de la molécula. En algunos, la molécula tiende a *disociarse*.
- Los estados en los que hay formación de la molécula se caracterizan porque la energía potencial asociada al movimiento de los núcleos tiene uno (o varios) mínimos locales.

Un ejemplo simple: la molécula diatómica

- Los estados en los que existen esos mínimos se llaman *estados enlazantes*.
- Los estados en que no hay mínimo se llaman *estados antienlazantes*.

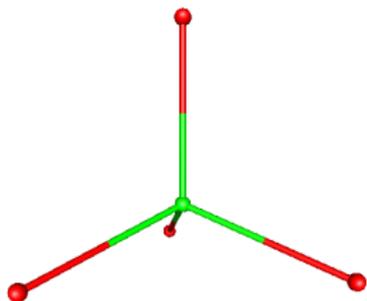


Método del enlace de valencia

- En la formación de las moléculas, la parte más interna de la nube electrónica permanece básicamente igual que en los átomos separados, mientras que la más externa cambia de manera significativa.
- En la descripción de la nube interna (core), se mantienen los orbitales atómicos sin cambios.
- La descripción de la nube externa (valencia) se sigue haciendo en términos de orbitales atómicos pero ahora muy diferentes de los correspondientes a los átomos separados.
- Para los orbitales de la valencia, en lugar de los del átomo aislado, se toman combinaciones lineales de éstos que se adaptan a la simetría definida por los enlaces del átomo: *orbitales híbridos*.
- Los enlaces se interpretan en términos de *solapamiento de orbitales atómicos*.

La nube electrónica en la molécula de metano

Cotas: 20, 1, 0.2, 0.04

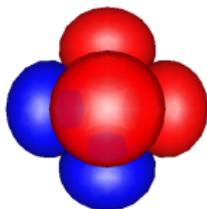
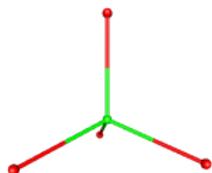


Geometría de equilibrio



Densidad electrónica

Hibridación de orbitales atómicos



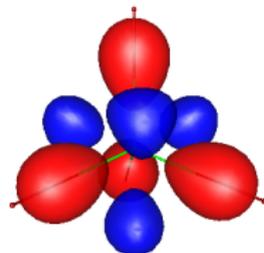
- La molécula de metano tiene forma tetraédrica: el núcleo del átomo de carbono ocupa el centro del tetraedro y los de los átomos de hidrógeno se encuentran en los vértices.
- Los orbitales atómicos más externos ($2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$) del carbono son poco apropiados para describir los enlaces en el metano.

Los orbitales híbridos en la molécula de metano

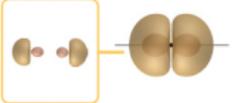
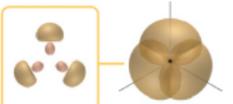
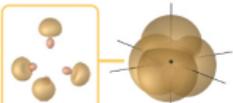
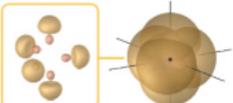
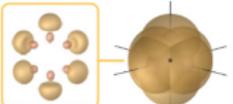
- Se pueden construir orbitales mejor adaptados a la descripción de los enlaces tomando combinaciones lineales independientes de los orbitales $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$:

$$\phi_i^{sp^3}(\vec{r}) = c_{2s,i} \phi_{2s}(\vec{r}) + c_{2p_x,i} \phi_{2p_x}(\vec{r}) + c_{2p_y,i} \phi_{2p_y}(\vec{r}) + c_{2p_z,i} \phi_{2p_z}(\vec{r})$$

- Los orbitales atómicos así obtenidos están mejor adaptados para describir los enlaces en el CH_4 .
- Esos orbitales reciben el nombre de híbridos sp^3 .

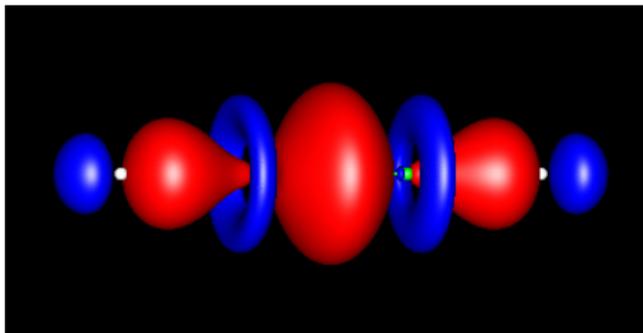


Esquemas de hibridación

Arrangement of Hybrid Orbitals	Geometric figure	Example
Two electron pairs sp		 Linear BeCl_2
Three electron pairs sp^2		 Trigonal-planar BF_3
Four electron pairs sp^3		 Tetrahedral CH_4
Five electron pairs sp^3d		 Trigonal-bipyramidal PF_5
Six electron pairs sp^3d^2		 Octahedral SF_6

Enlaces covalentes múltiples

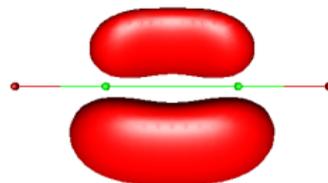
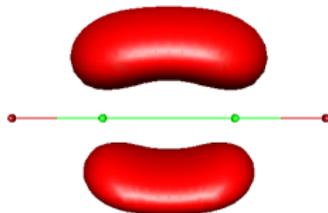
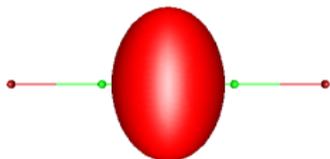
El papel de los orbitales no hibridados: enlaces múltiples



Enlace σ

Enlace π

Enlace π'



Método de Orbitales Moleculares

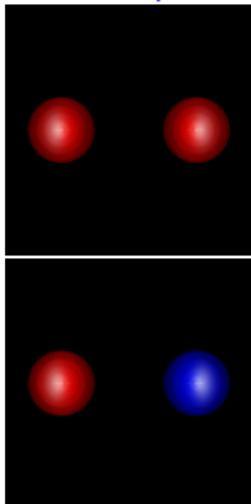
- Es un tratamiento propuesto por Robert Mulliken, paralelo al dado a los átomos, reemplazando los orbitales atómicos por orbitales moleculares.
- Los orbitales moleculares se construyen como combinaciones lineales de orbitales atómicos.

$$\phi_i^{OM}(\vec{r}) = \sum_j c_{ji} \phi_j^{at}(\vec{r})$$

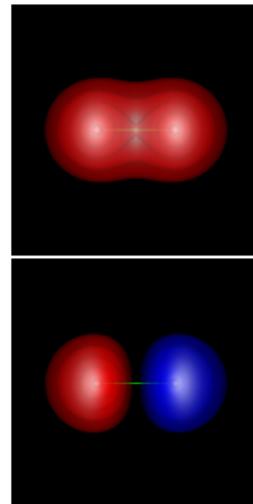
- El resultado es que, a diferencia de los orbitales del método E.V., los del O.M. se extienden sobre regiones amplias de la molécula.
- Los orbitales moleculares son más apropiados para el cálculo por lo que, en la práctica, el método O.M. es más usado que el E.V.
- A medida que se introducen mejoras en las función de onda (más de un determinante de Slater), los dos métodos tienden a los mismos resultados.

moléculas diatómicas homonucleares: $1\sigma(1s^A \pm 1s^B)$

Átomos separados

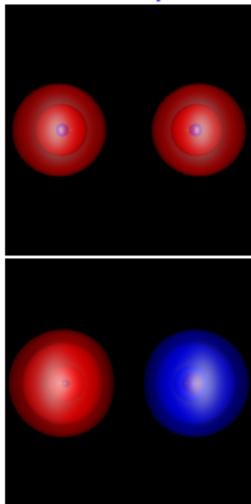


Molécula

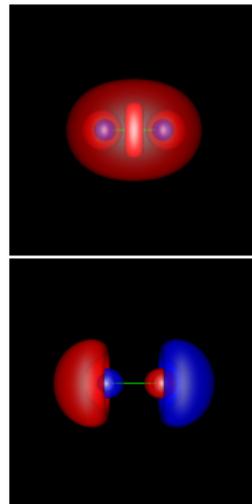


moléculas diatómicas homonucleares: $2\sigma(2s^A \pm 2s^B)$

Átomos separados

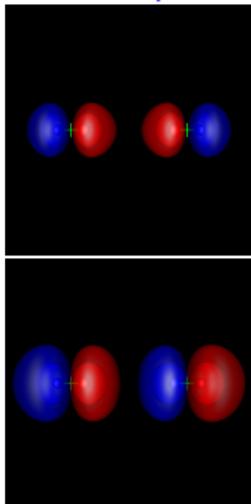


Molécula

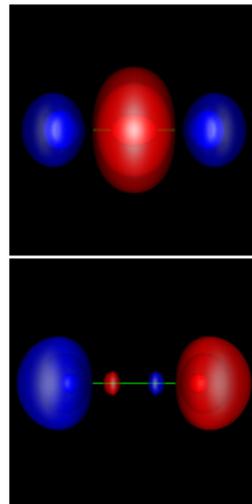


moléculas diatómicas homonucleares: $3\sigma(2p_z^A \mp 2p_z^B)$

Átomos separados

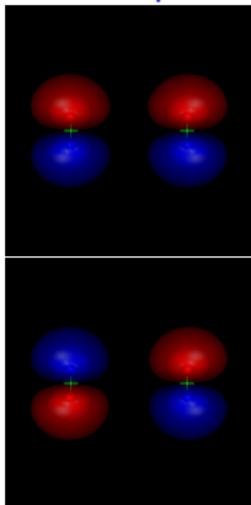


Molécula

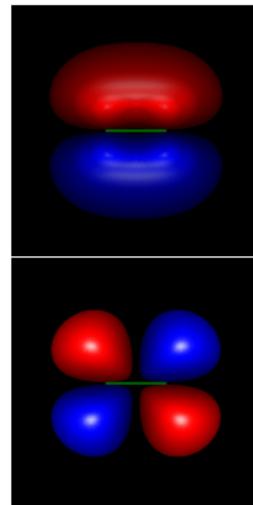


moléculas diatómicas homonucleares: $\pi(2p_x^A \pm 2p_x^B; 2p_y^A \pm 2p_y^B)$

Átomos separados



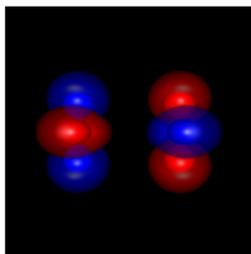
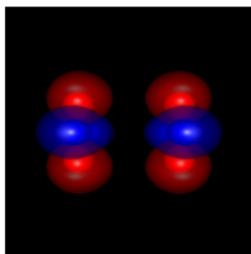
Molécula



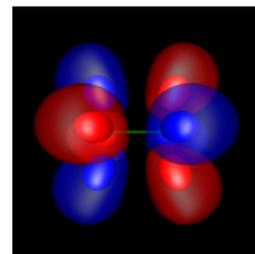
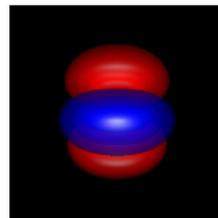
Método de Orbitales Moleculares

moléculas diatómicas homonucleares: $1\delta(3d_{x^2-y^2}^A \pm 3d_{x^2-y^2}^B; 3d_{xy}^A \pm 3d_{xy}^B)$

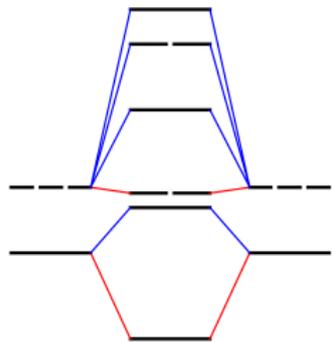
Átomos separados



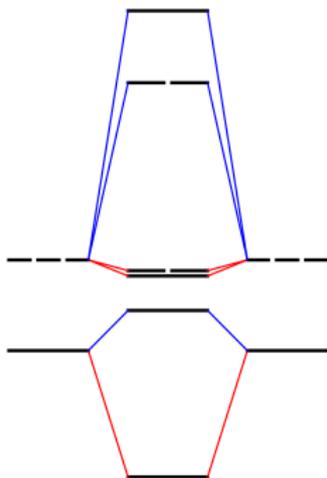
Molécula



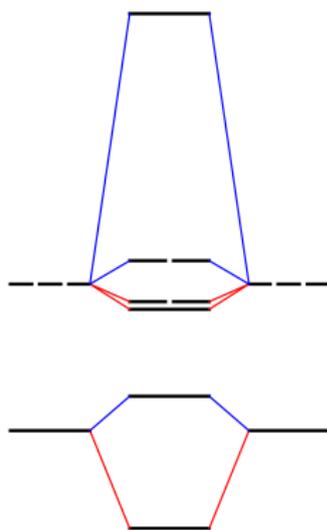
Desdoblamiento energético en las capas 2s y 2p



Molécula de C_2



Molécula de N_2



Molécula de O_2

Configuraciones electrónicas en moléculas diatómicas homonucleares

- Se generan como en el caso de átomos: se ordenan los O.M. según energías crecientes y se aplican las reglas de llenado.
- El orden de energías no siempre es fácil de predecir.
- En general, los O.M. que provienen de O.A. con menor (n, ℓ) tienen energías más bajas.
- El orden de energías de los O.M. que provienen de O.A. con los mismos (n, ℓ) depende del propio llenado.

Método de Orbitales Moleculares

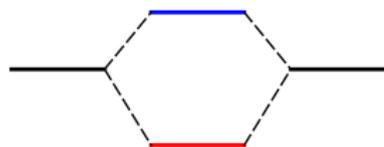
Configuraciones electrónicas en moléculas diatómicas homonucleares

	configuración de energía más baja	
H_2^+	$1\sigma_g$	σ_{1s}
H_2	$1\sigma_g^2$	σ_{1s}^2
He_2^+	$1\sigma_g^2 1\sigma_u$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^*$
He_2	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2}$
Li_2^+	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}$
Li_2	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2$
Be_2	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2}$
B_2	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 1\pi_u^2$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p_x, 2p_y}^2$
C_2	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 1\pi_u^4$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p_x, 2p_y}^4$
N_2	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 1\pi_u^4$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p_z}^2 \pi_{2p_x, 2p_y}^4$
O_2	$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 1\pi_u^4 1\pi_g^2$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p_z}^2 \pi_{2p_x, 2p_y}^4 \pi_{2p_x, 2p_y}^{*2}$

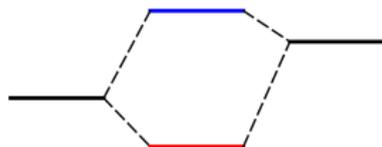
Orbitales moleculares en moléculas diatómicas heteronucleares

- Los O.A. que se combinan son aquéllos que tienen energías más parecidas entre sí y que pertenezcan a la misma simetría.
- Eso no siempre sucede para O.A. de A y B con los mismos valores de (n, ℓ) . Depende de los alejados que estén los átomos en el sistema periódico.
- En la notación desaparece el subíndice g ó u ya que en este caso carece de sentido.

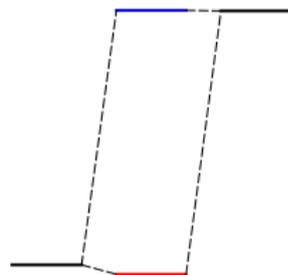
Desdoblamiento energético en moléculas heteronucleares



$$E_A = E_B$$



$$E_A < E_B$$



$$E_A \ll E_B$$

Configuraciones electrónicas y órdenes de enlace

- La configuración electrónica permite obtener órdenes de enlace en moléculas diatómicas como: $\frac{1}{2}n^{enlaz} - \frac{1}{2}n^{antienlaz}$.
- Para moléculas de átomos del mismo período, cuanto mayor es el orden así obtenido, más estable cabe esperar que sea la molécula.
- La configuración también permite predecir el comportamiento magnético de la molécula:
si todas las capas están completas: la molécula es *diamagnética*
si hay alguna capa incompleta: la molécula es *paramagnética*

Orbitales moleculares en moléculas poliatómicas con simetría

- El problema es más complicado que en moléculas diatómicas.
- En moléculas con simetría es posible obtener *orbitales adaptados a la simetría* y tras ordenarlos en energías, proceder a su llenado.
- La nomenclatura de los orbitales en las moléculas con simetría se toma de la teoría de grupos.
- Ejemplos:

molécula	simetría	tipos de orbitales
H ₂ O	C _{2v}	a ₁ , a ₂ , b ₁ , b ₂
NH ₃	C _{3v}	a ₁ , a ₂ , e
C ₆ H ₆	D _{6h}	a _{1g} , a _{2g} , b _{1g} , b _{2g} , e _{1g} , e _{2g} , a _{1u} , a _{2u} , b _{1u} , b _{2u} , e _{1u} , e _{2u}
CH ₄	T _d	a ₁ , a ₂ , e, t ₁ , t ₂
SF ₆	O _h	a _{1g} , a _{2g} , e _g , t _{1g} , t _{2g} , a _{1u} , a _{2u} , e _u , t _{1u} , t _{2u}

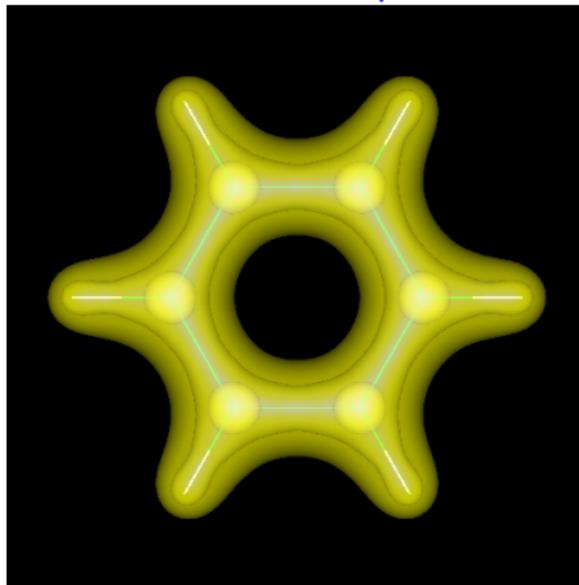
Orbitales moleculares en moléculas poliatómicas sin simetría

- En el caso de moléculas sin simetría, la única posibilidad (que es hoy en día la utilizada en todos los casos) pasa por el cálculo dentro del modelo Hartree-Fock.
- El cálculo da directamente O.M. con la simetría apropiada y ordenados en energía, así cómo el número de electrones en cada uno de ellos.
- Los cálculos se hacen con programas de ordenador.

Método de Orbitales Moleculares

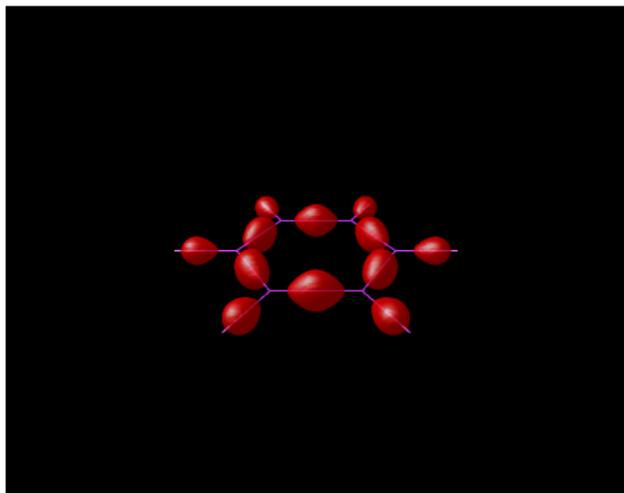
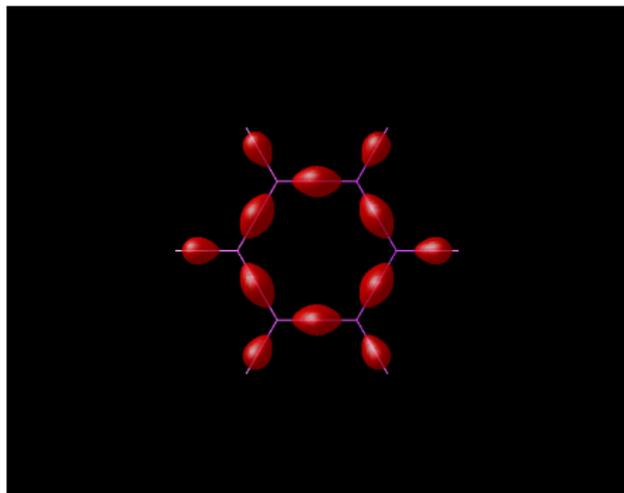
- Uno de los éxitos del método de O.M. fue la explicación de la deslocalización de parte de la nube electrónica en las moléculas aromáticas.
- Densidad electrónica del benceno:

Densidad completa



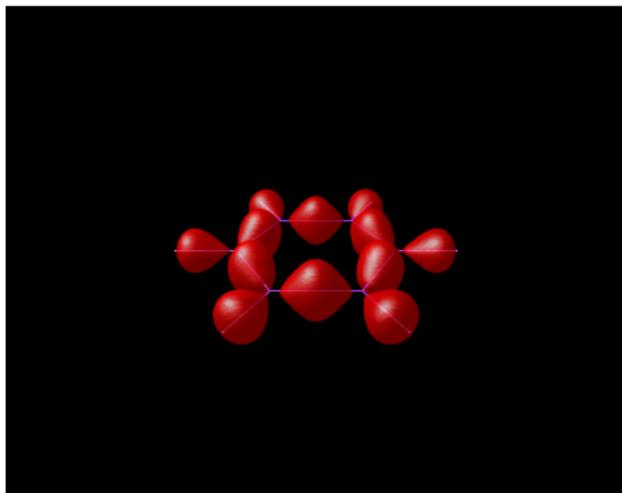
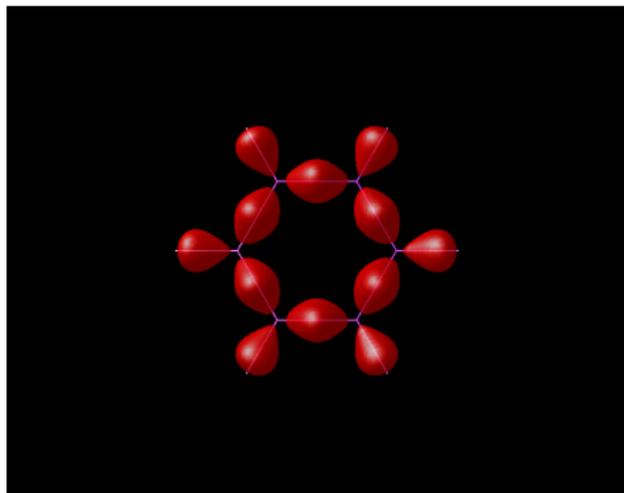
La deformación de la densidad electrónica en la molécula de benceno

Cota: 0.0500



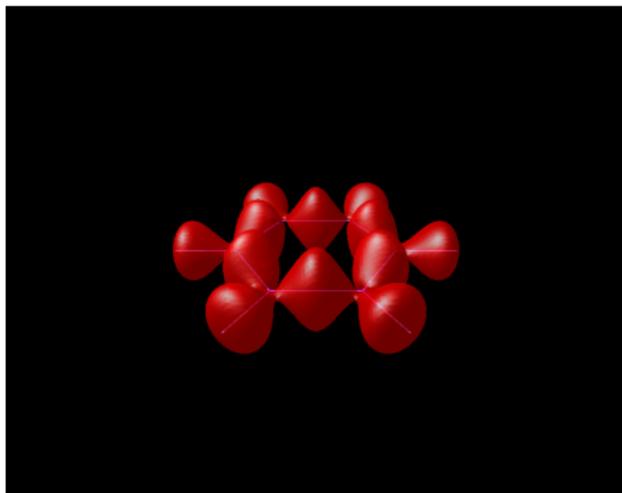
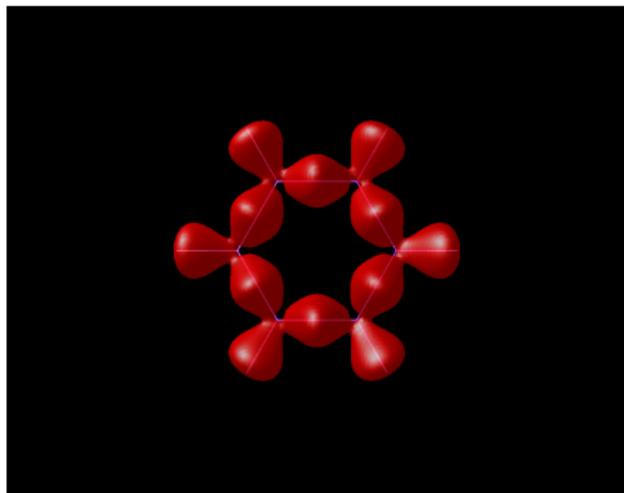
La deformación de la densidad electrónica en la molécula de benceno

Cota: 0.0250



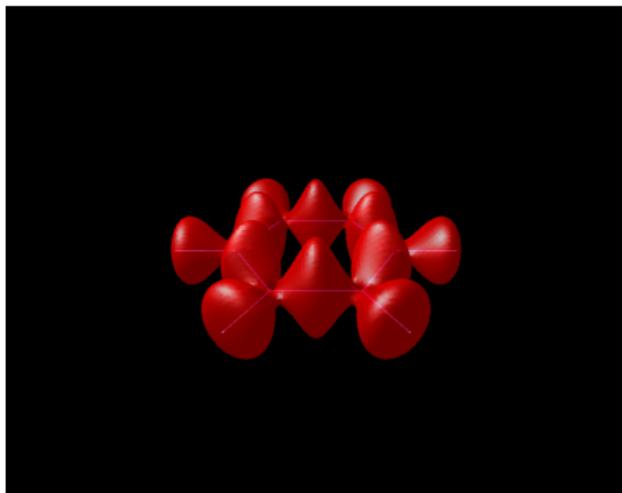
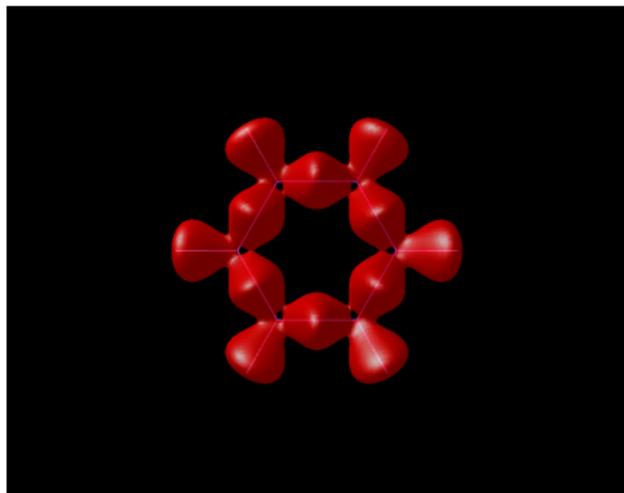
La deformación de la densidad electrónica en la molécula de benceno

Cota: 0.0100



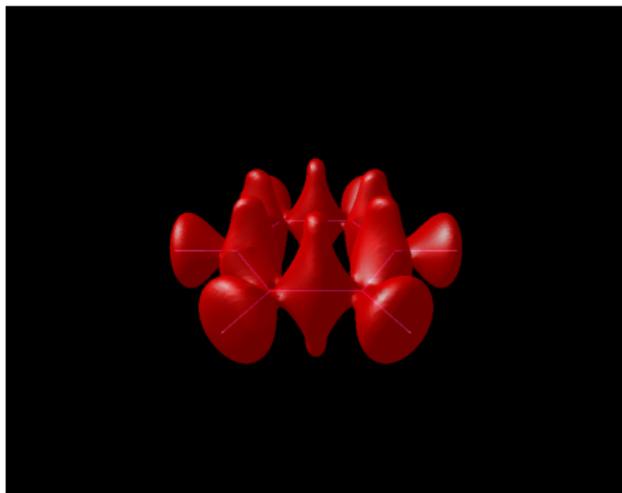
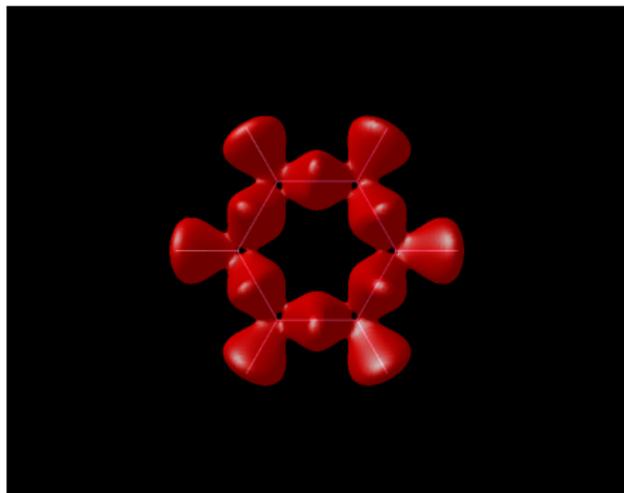
La deformación de la densidad electrónica en la molécula de benceno

Cota: 0.0050



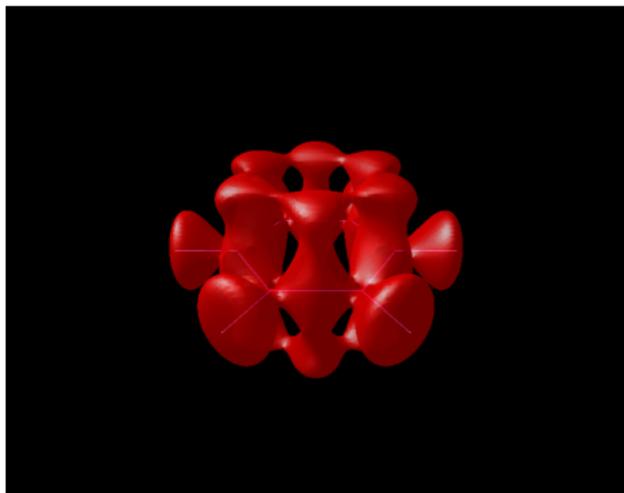
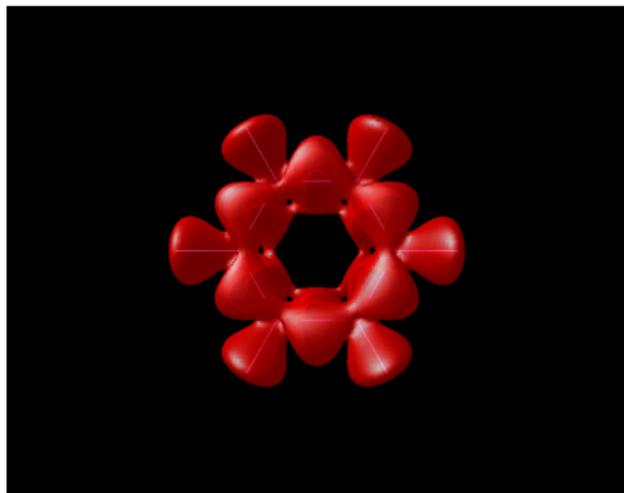
La deformación de la densidad electrónica en la molécula de benceno

Cota: 0.0025



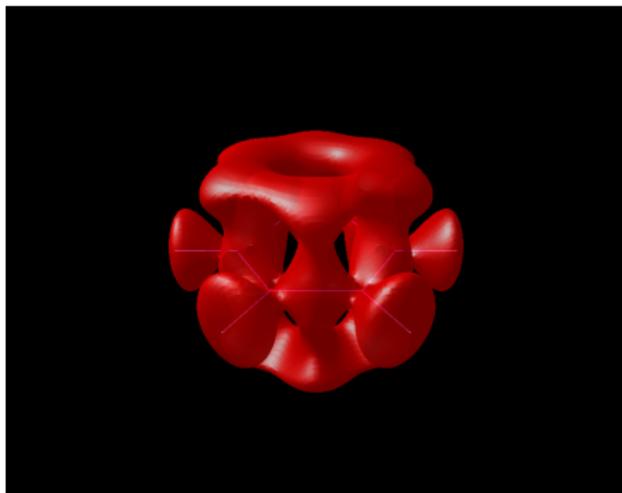
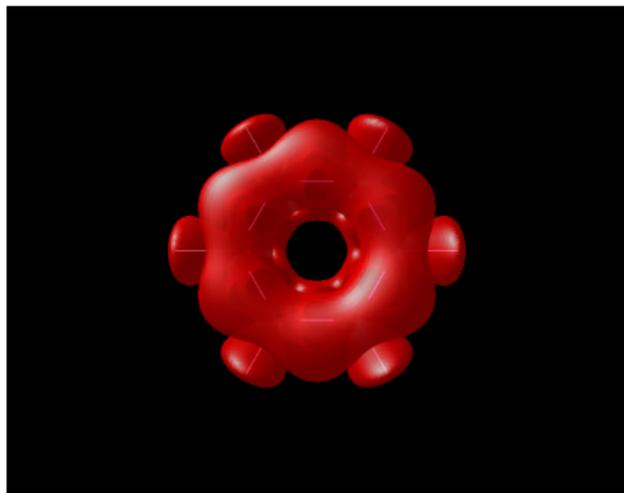
La deformación de la densidad electrónica en la molécula de benceno

Cota: 0.0015

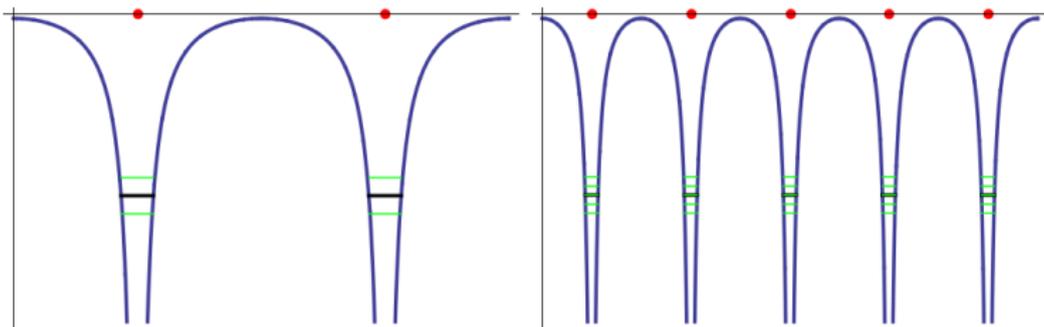


La deformación de la densidad electrónica en la molécula de benceno

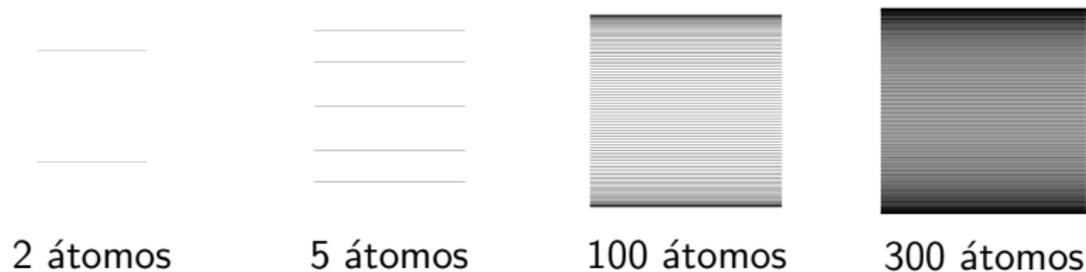
Cota: 0.0010



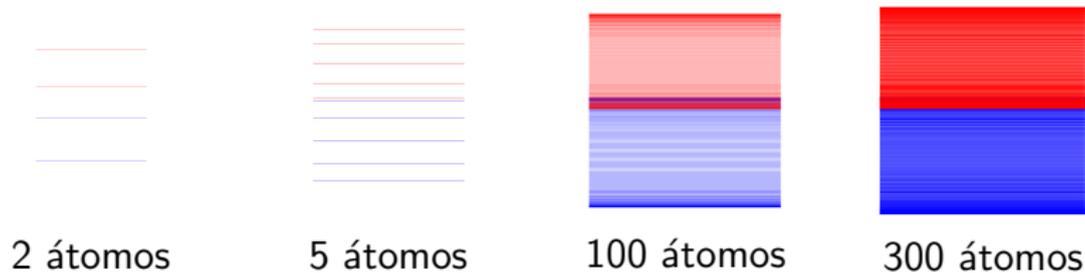
Enlace metálico: teoría de bandas



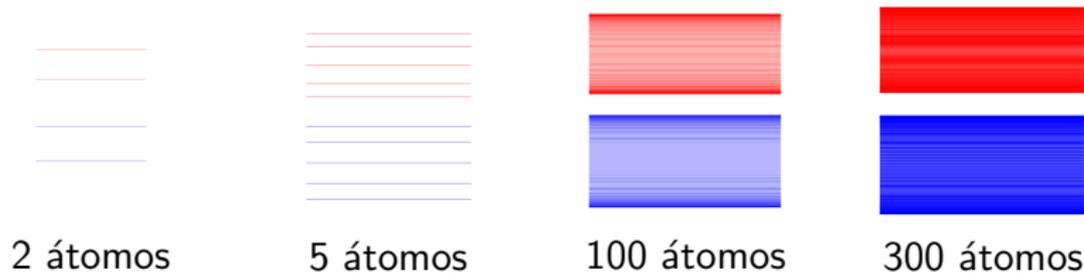
Enlace metálico: teoría de bandas



Bandas de metales alcalinotérreos



Bandas de semiconductores intrínsecos



Bandas de aislantes



2 átomos



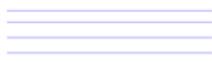
5 átomos



100 átomos



300 átomos



Bandas de semiconductores extrínsecos

Semiconductor de tipo n



Semiconductor de tipo p

