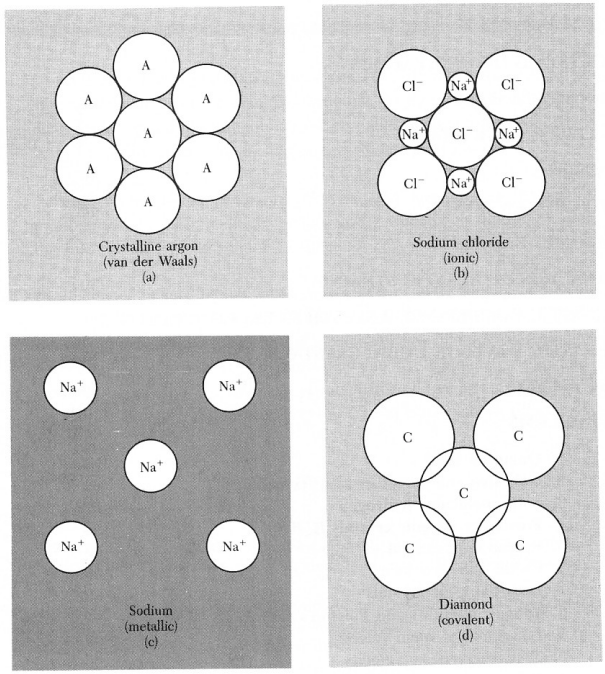
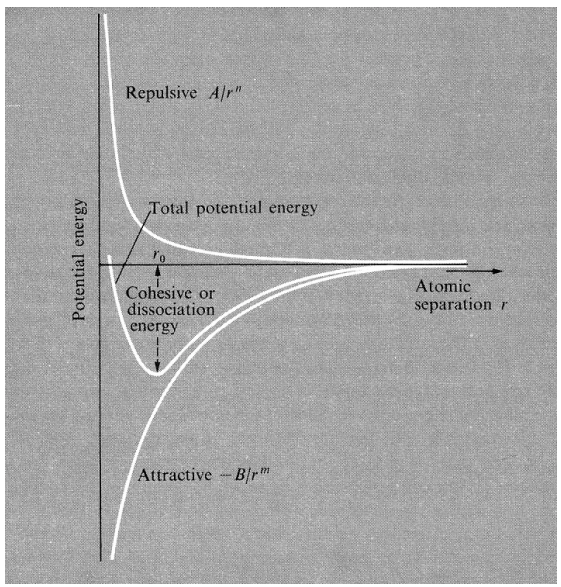
Enlaces :

-Van der Waals (Gases Nobles)
- Iónico (Interacción Coulomb)
- Covalente.(Mecánica Cuántica)
- Metálico (Teoría de Bandas).
- Puentes de hidrógeno.

Propiedades que dependen del enlace:

- Energía de Cohesión, temperaturas de fusión, constantes elásticas.





Características generales:

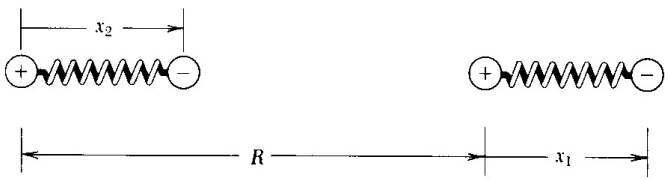
-Término atractivo (distancias largas).
-Término repulsivo (distancias cortas).

Enlace de Van der Waals:

-Es la interacción dominante entre átomos de gases nobles y moléculas neutras.
-Dos contribuciones: Atractiva entre dipolos inducidos.

Modelo sencillo:

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2}Cx_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}Cx_2^2$$



La interacción electrostática es

$$H_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_1 - x_2} - \frac{e^2}{R + x_1} - \frac{e^2}{R - x_2}$$

Tomando $|x_1|$ y $|x_2| << R$

$$H_1 = -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$

Tenemos dos osciladores acoplados

Para desacoplarlos tomamos: $$x_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), x_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$$

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_S + x_A), x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_S - x_A)$$

Sustituyendo en $H_0 + H_1$ encontramos:

$$H = \left[\frac{p_s^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(C - \frac{2e^2}{R^3}\right)x_s^2\right] + \left[\frac{p_A^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(C + \frac{2e^2}{R^3}\right)x_A^2\right]$$

Las dos frecuencias de los osciladores acoplados son:

$$\omega^{\pm} = \left[\left(C \pm \frac{2e^2}{R^3}\right)/m\right]^{1/2} \cong \omega_0\left[1 \pm \frac{1}{2}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right) - \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2 \pm \ldots\right]$$

donde $\omega_0 = (C/m)^{1/2}$ es la frecuencia de los osciladores desacoplados.

¿ Cual es el cambio de energía al acoplar los osciladores ?

Energía sin acoplar $E_0 = 2\ ½\ \hbar\omega_0$

Energía acoplados $E_1 = ½\ \hbar\ (\omega^+ + \omega^-) = \hbar\omega_0 + \Delta E$

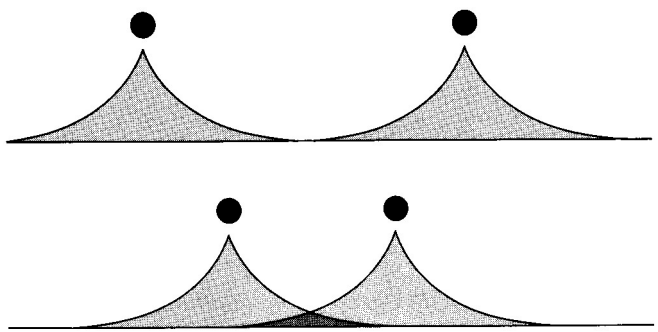
$$\Delta E = -\hbar\omega_0 \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2 = -\frac{A}{R^6}$$

Luego la energía disminuye con la interacción dipolo-dipolo y es proporcional a R^{-6} .

La energía repulsiva se puede escribir como

$\Delta E_{Rep} = B/R^{12}$ o $\Delta E_{Rep} = \lambda \exp(-R/\rho)$

Es una consecuencia del principio de exclusión de Pauli.



Potencial de Lennard-Jones:

$$E(R) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]$$

σ es una longitud y $-\varepsilon$ la energía del mínimo ($R/\sigma = 1.12$).

La energía de un cristal de partículas que interaccionan con un potencial LJ:

$$E_{Total} = \frac{1}{2}N(4\varepsilon)\left[\sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R}\right)^{6}\right]$$

Las sumas se pueden calcular numéricamente: p.e. (FCC) $\sum (p_{ij})^{-12} = 12.13188$;

$\sum (p_{ij})^{-6} = 14.45392$;

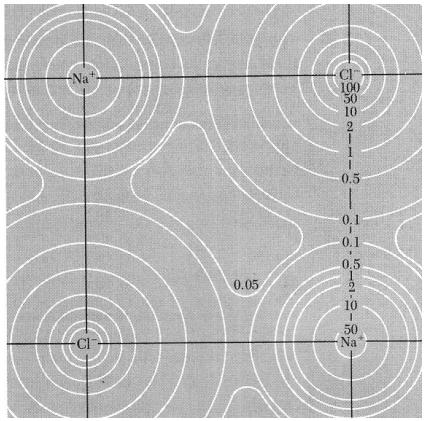
Minimizando respecto de R, $dE/dR = 0 \Rightarrow R/\sigma = 1.02$

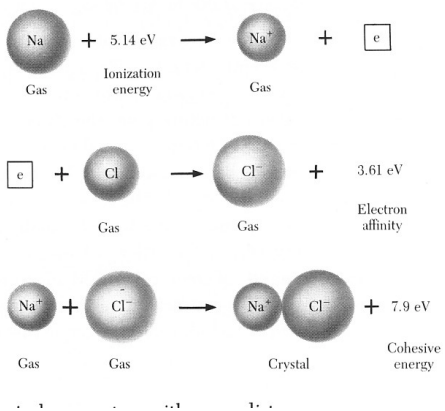
	Ne	Ar	Kr	Xe
R_0/σ	1.14	1.11	1.10	1.09

Enlaces en Cristales Iónicos.

Na: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$; Cl: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^5$

Na^+: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^0$; Cl^-: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$





La interacción de Coulomb (como la de VdW) es de largo alcance.

La energía total es $E_{total} = \sum_{ij} U_{ij}$, $U_{ij} = \lambda \exp(-R/\rho) - q^2/R$ si i y j son vecinos próximos

$= \pm q^2/(R\, p_{ij})$ si no lo son.

$$E_{total} = N\,[\, z\lambda \exp(-R/\rho) - \alpha\, q^2/R \,], \quad \alpha = \text{Constante de Madelung.}$$

La posición de equilibrio se determina de la ecuación: $d E_{total} / dR = 0$

$$R_0^2 \exp(-R_0/\rho) = \rho\, \alpha\, q^2 / z\, \lambda.$$

La energía total queda (para 2N iones)

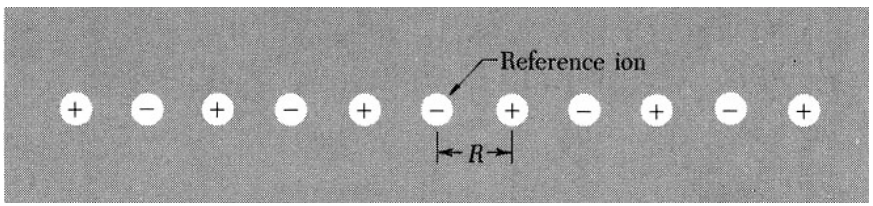
$$E_{Total} = -\frac{N\alpha q^2}{R_0}\left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

Constante de Madelung:

$$\boxed{\alpha = \sum_j \frac{(\pm)}{p_{ij}}}$$

O de forma equivalente

$$\boxed{\frac{\alpha}{R} = \sum_j \frac{(\pm)}{r_j}}$$



$$\frac{\alpha}{R} = 2\left[\frac{1}{R} - \frac{1}{2R} + \frac{1}{3R} - \frac{1}{4R} + \ldots\right]$$

Structure	α
Sodium chloride, NaCl	1.747565
Cesium chloride, CsCl	1.762675
Zinc blende, cubic ZnS	1.6381

$$\alpha = 2\left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \ldots\right] = 2\log 2$$

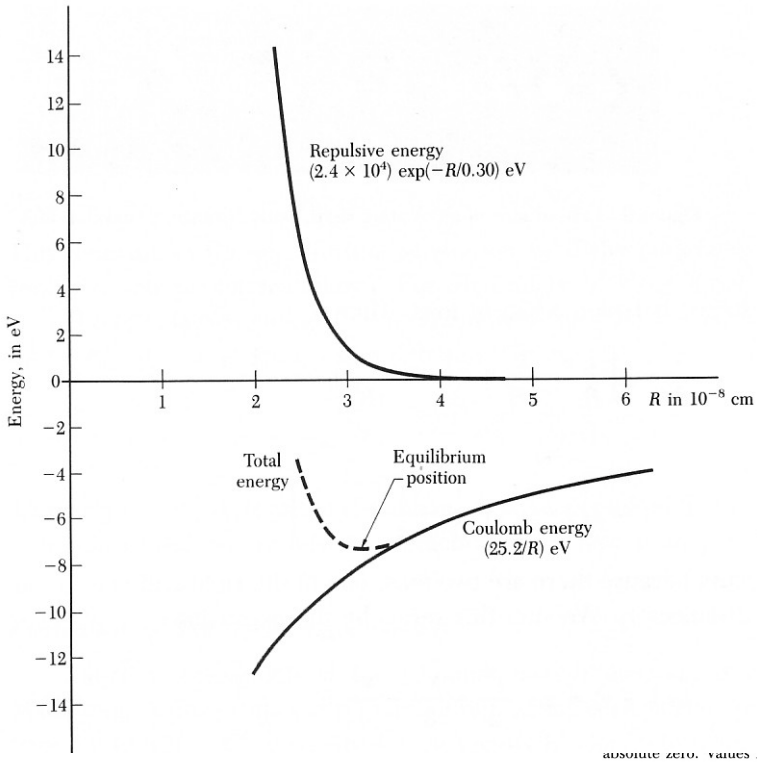


Table 7 Properties of alkali halide crystals with the NaCl structure

se in brackets) at room temperature and atmospheric pressure, with no correction for changes in R_0 and U from absolute zero. Values in brackets at absolute zero temperature and zero pressure, from private communication by L. Brewer.

	Nearest-neighbor separation R_0, in Å	Bulk modulus B, in 10^{11} dyn/cm^2 or 10^{10} N/m^2	Repulsive energy parameter $z\lambda$, in 10^{-8} erg	Repulsive range parameter ρ, in Å	Lattice energy compared to free ions, in kcal/mol	
					Experimental	Calculated
LiF	2.014	6.71	0.296	0.291	242.3[246.8]	242.2
LiCl	2.570	2.98	0.490	0.330	198.9[201.8]	192.9
LiBr	2.751	2.38	0.591	0.340	189.8	181.0
LiI	3.000	(1.71)	0.599	0.366	177.7	166.1
NaF	2.317	4.65	0.641	0.290	214.4[217.9]	215.2
NaCl	2.820	2.40	1.05	0.321	182.6[185.3]	178.6
NaBr	2.989	1.99	1.33	0.328	173.6[174.3]	169.2
NaI	3.237	1.51	1.58	0.345	163.2[162.3]	156.6
KF	2.674	3.05	1.31	0.298	189.8[194.5]	189.1
KCl	3.147	1.74	2.05	0.326	165.8[169.5]	161.6
KBr	3.298	1.48	2.30	0.336	158.5[159.3]	154.5
KI	3.533	1.17	2.85	0.348	149.9[151.1]	144.5
RbF	2.815	2.62	1.78	0.301	181.4	180.4
RbCl	3.291	1.56	3.19	0.323	159.3	155.4
RbBr	3.445	1.30	3.03	0.338	152.6	148.3
RbI	3.671	1.06	3.99	0.348	144.9	139.6

Data from various tables by M. P. Tosi, Solid state physics **16**, 1 (1964).

Enlace Covalente:

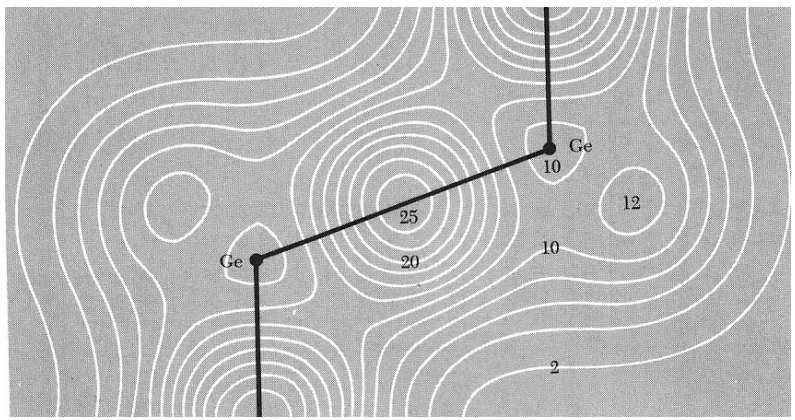
Molécula H_2: $H = -e^2/r_1 - e^2/r_2 + e^2/r_{12}$

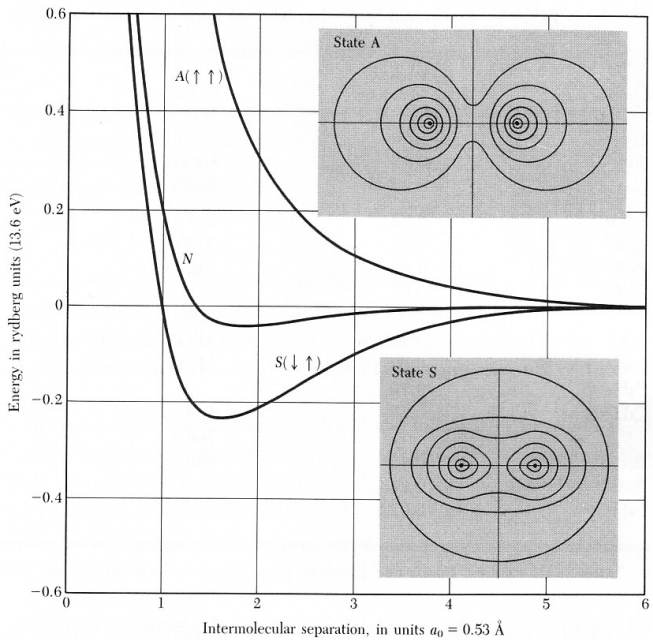
Hay que resolver la ecuación de Schrödinger para la función de onda de dos electrones.

$$\Psi_S(r_1,r_2) \propto [\ \phi_1(r_1)\phi_2(r_2) + \phi_2(r_1)\phi_1(r_2)\ ](\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)\ (S=0)$$

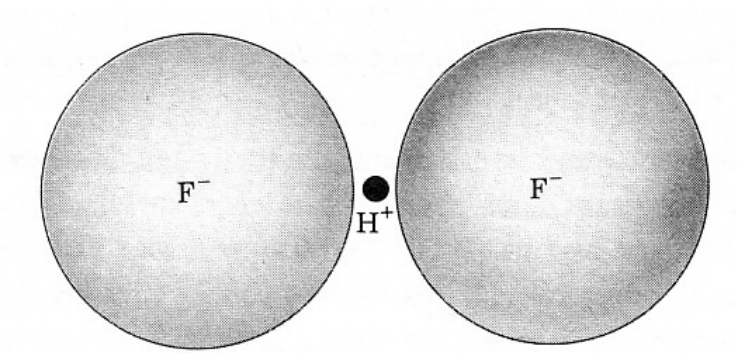
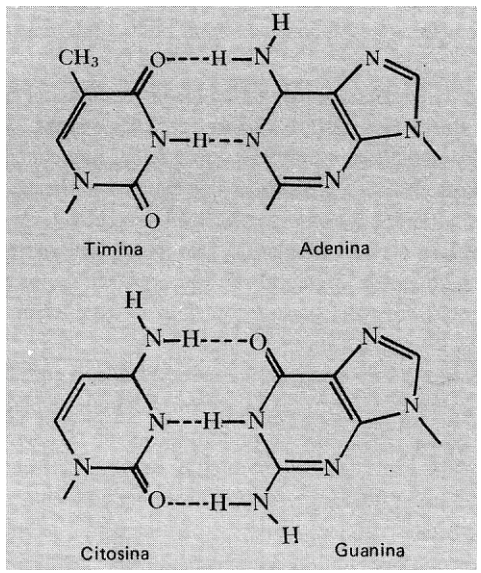
$$\Psi_A(r_1,r_2) \propto [\ \phi_1(r_1)\phi_2(r_2) - \phi_2(r_1)\phi_1(r_2)\ ](\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$$

$$(\uparrow\uparrow)\ \text{o}\ (\downarrow\downarrow) \qquad (S=1)$$





Enlace Metálico:

Los electrones están deslocalizados. Hay que resolver la ecuación de Schrödinger de un electrón en el potencial periódico creado por los núcleos de la estructura cristalina . BANDAS DE ENERGÍA. (Propiedades Eléctricas).

Enlace de puentes de Hidrógeno: El hidrógeno puede crear un enlace entre dos átomos electronegativos. Muy importante en moléculas biológicas y en el agua..