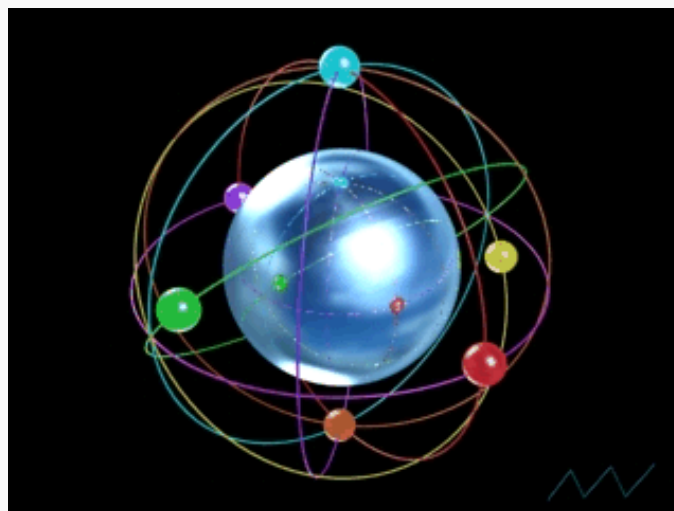


ESTRUCTURA ATÓMICA



QUÍMICA GENERAL
QUÍMICA GENERAL E INORGÁNICA

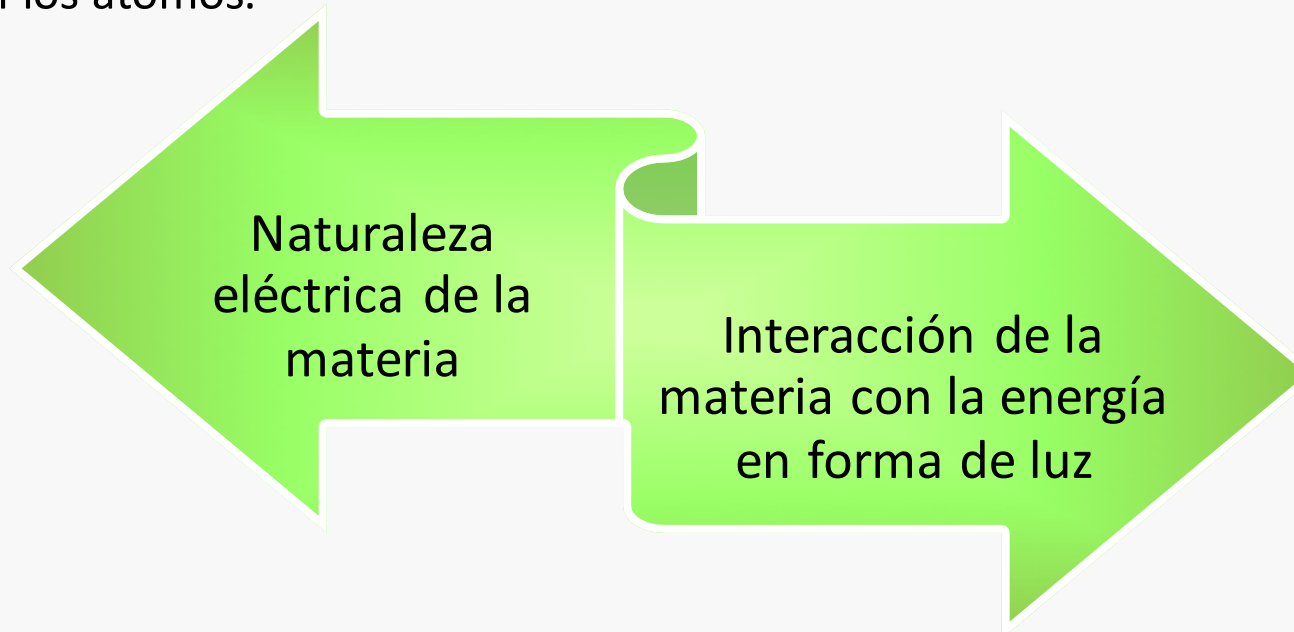
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CUYO

<https://youtu.be/iDyWEjTI5xM>

Dra. Graciela N. Valente
Dra. M. Cecilia Medaura
Dra. Susana R. Valdez

Los primeros descubrimientos químicos y la teoría atómica

Estos estudios indican que los átomos se componen de partículas fundamentales y ayudan a describir la distribución de esas partículas en los átomos.



Esta investigación comprende el estudio de los colores de la luz que absorben o emiten las sustancias. Condujeron a conocer con más detalle la distribución de las partículas en los átomos.

La distribución de las partículas determina las propiedades químicas y físicas de cada elemento.

Partículas subatómicas

Un **átomo** es la unidad constituyente más pequeña de la materia que tiene las propiedades de un elemento químico y que puede intervenir en una combinación química.

Los átomos y, por lo tanto, toda la materia, se componen principalmente de tres partículas fundamentales: **electrones**, **protones** y **neutrones**. Es esencial conocer la naturaleza y funciones de estas partículas para comprender las relaciones químicas.

Partícula	Masa (uma)	Carga (escala relativa)
Electrón (e ⁻)	0,00054858	1-
Protón (p o p ⁺)	1,0073	1+
Neutrón	1,0087	Sin carga

El número de protones en un átomo recibe el nombre de **número atómico (Z)**. En un átomo, que debe ser eléctricamente neutro, el número de electrones es igual al número de protones. Todos los átomos de un determinado elemento tienen el mismo número atómico.

El número total de protones y neutrones de un átomo se llama **número másico (A)**. Este número es diferente para los isótopos de un mismo elemento.

Todos los átomos que tienen igual número atómico (Z) pero distinto número másico (A) se denominan **isótopos**.

Cada elemento químico se representa a través de su **símbolo químico**.



Ejemplo

Símbolo	Número atómico	Número másico	Cantidad de protones	Cantidad de neutrones	Cantidad de electrones	Isótopo
$^{35}_{17}\text{Cl}$	17	35	17	18	17	$^{36}_{17}\text{Cl}$
$^{64}_{29}\text{Cu}$				$A-Z = n^0$		

TABLA PERIÓDICA

En 1869, Dimitri Mendeleev y Lothar Meyer publicaron en forma independiente , ordenamientos de los elementos que se asemejan a la Tabla Periódica actual.

Mendeleev

- **Propiedades químicas**
Incremento de la masa atómica

Meyer

- **Propiedades físicas**

Ordenamiento de la Tabla Periódica
Según el **número creciente** de los
Números Atómicos



PERIODICIDAD



Ordenamiento de la Tabla Periódica
Columnas: **Grupos o familias**
Líneas horizontales: **Períodos**

Las propiedades de los elementos son funciones periódicas de sus números atómicos (Z).

TABLA PERIÓDICA

METALES, NO METALES Y METALOIDES O SEMI-METALES

A
Representativos

A
Representativos

1	B Transición																18																														
1 H																	2 He																														
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne																														
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar																														
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr																														
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe																														
55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn																														
87 Fr	88 Ra	89-103	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo																														
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; text-align: center;"> <tr> <td style="background-color: #d9ead3;">57 La</td> <td style="background-color: #d9ead3;">58 Ce</td> <td style="background-color: #d9ead3;">59 Pr</td> <td style="background-color: #d9ead3;">60 Nd</td> <td style="background-color: #d9ead3;">61 Pm</td> <td style="background-color: #d9ead3;">62 Sm</td> <td style="background-color: #d9ead3;">63 Eu</td> <td style="background-color: #d9ead3;">64 Gd</td> <td style="background-color: #d9ead3;">65 Tb</td> <td style="background-color: #d9ead3;">66 Dy</td> <td style="background-color: #d9ead3;">67 Ho</td> <td style="background-color: #d9ead3;">68 Er</td> <td style="background-color: #d9ead3;">69 Tm</td> <td style="background-color: #d9ead3;">70 Yb</td> <td style="background-color: #d9ead3;">71 Lu</td> </tr> <tr> <td style="background-color: #d9ead3;">89 Ac</td> <td style="background-color: #d9ead3;">90 Th</td> <td style="background-color: #d9ead3;">91 Pa</td> <td style="background-color: #d9ead3;">92 U</td> <td style="background-color: #d9ead3;">93 Np</td> <td style="background-color: #d9ead3;">94 Pu</td> <td style="background-color: #d9ead3;">95 Am</td> <td style="background-color: #d9ead3;">96 Cm</td> <td style="background-color: #d9ead3;">97 Bk</td> <td style="background-color: #d9ead3;">98 Cf</td> <td style="background-color: #d9ead3;">99 Es</td> <td style="background-color: #d9ead3;">100 Fm</td> <td style="background-color: #d9ead3;">101 Md</td> <td style="background-color: #d9ead3;">102 No</td> <td style="background-color: #d9ead3;">103 Lr</td> </tr> </table>																		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr
57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu																																	
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr																																	

Los elementos de un grupo tienen propiedades químicas y físicas semejantes y las propiedades de los elementos de un período cambian de manera progresiva al recorrer la Tabla.

TABLA PERIÓDICA

Metales

- Las capas externas tienen pocos electrones, por lo general 3 o menos.
- Forman cationes (iones positivos) por pérdida de electrones.
- Forman compuestos iónicos con los no metales.
- Estado sólido caracterizado por enlace metálico.

No metales

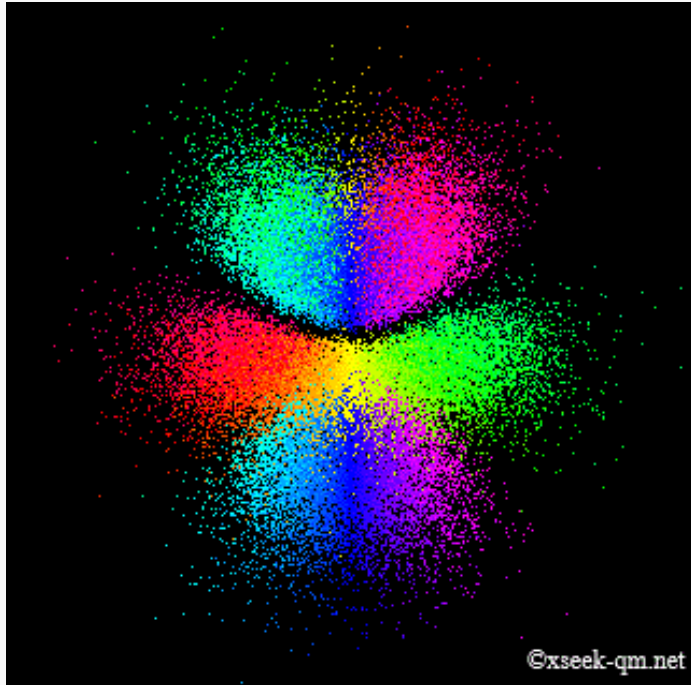
- Las capas externas tienen 4 o más electrones (excepto H y He).
- Forman aniones (iones negativos) por ganancia de electrones (excepto los gases nobles).
- Forman compuestos iónicos con los metales y compuestos moleculares (covalentes) con otros no metales.
- Se unen a través de enlaces covalentes para formar moléculas mientras que los gases nobles son monoatómicos.

Metaloides

- Exhiben algunas propiedades que son características tanto de metales como de no metales.
- Actúan como semiconductores, importantes en los circuitos electrónicos.

Para estudiar las propiedades periódicas de los elementos es importante conocer la distribución de los electrones dentro de los átomos. La estructura electrónica permite explicar, además de las propiedades de los elementos, los enlaces químicos.

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS



Cuando se observa un objeto cotidiano o la muestra de una sustancia química es preciso imaginar los átomos que los componen.

Para comprender la materia que nos rodea es preciso descubrir cómo son los átomos que la forman, lo que se logra comprendiendo la estructura electrónica de los átomos, esto es, la descripción de cómo se disponen los electrones alrededor de su núcleo.

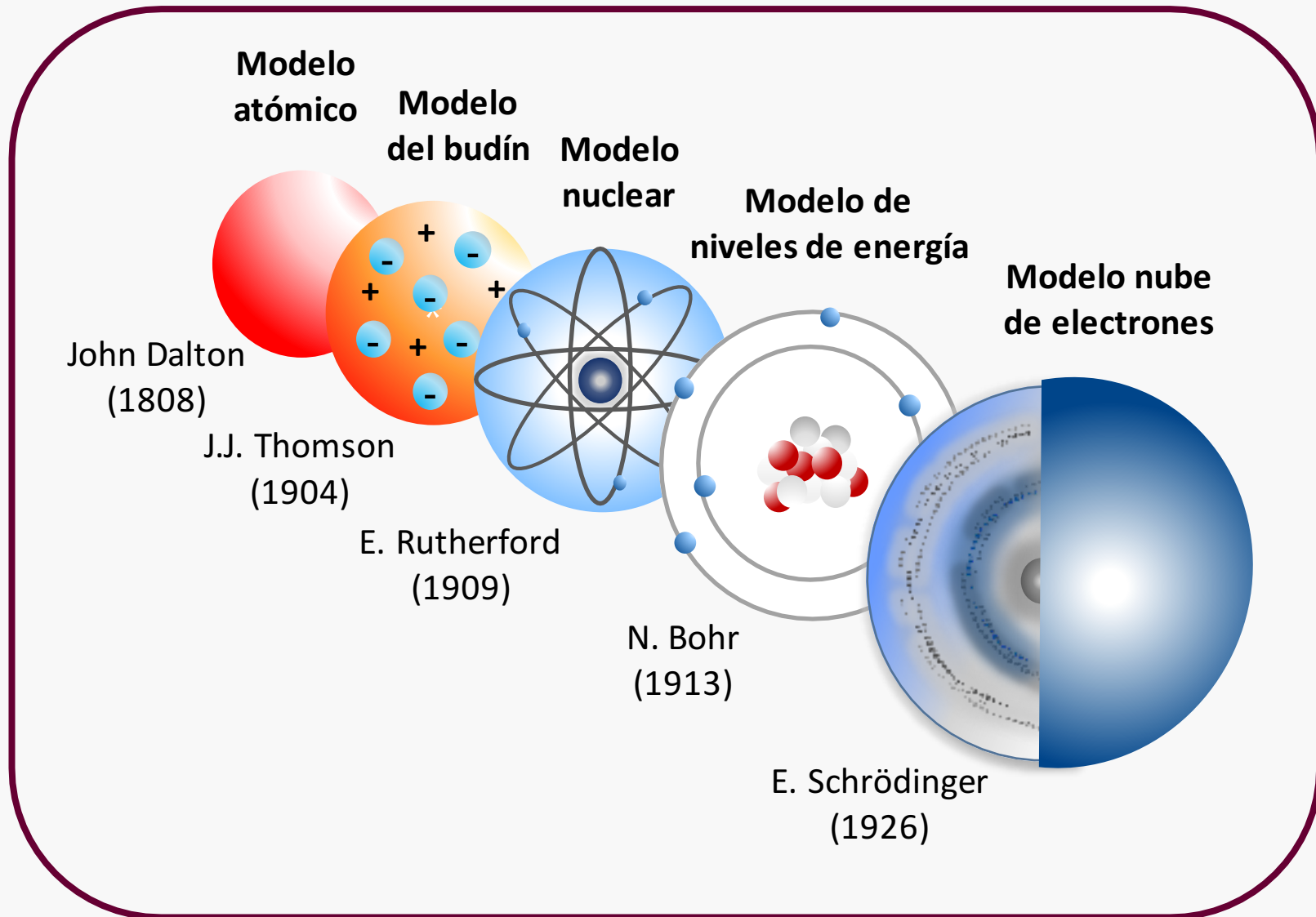
Cuando se inicia la travesía al interior del átomo, se descubre un escenario fascinante, que la Física Clásica no puede explicar.

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS

El abordaje del estudio del interior de los átomos se construye desde cuatro aspectos:

1. Revisión de los experimentos que condujeron al modelo nuclear actual del átomo y de la implicancia de la espectroscopia (interacción entre la radiación y la materia) para brindar información acerca de la disposición de los electrones alrededor del núcleo.
2. Descripción de los experimentos que llevaron a la sustitución de la mecánica clásica por la mecánica cuántica, incorporando algunas características centrales.
3. Aplicación de los conceptos analizados para el átomo de Hidrógeno.
4. Extensión a todos los elementos y el análisis de las bases de la Tabla Periódica.

EVOLUCIÓN DEL MODELO ATÓMICO



VISIÓN DEL ÁTOMO A TRAVÉS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Gracias a los aportes de investigadores como Planck, Einstein, De Broglie, Davisson y Germer, entre otros, resulta más eficaz tratar a los electrones en los átomos como ondas y no como partículas compactas viajando en órbitas definidas.

Los objetos grandes (macroscópicos) como una pelota de golf, obedecen a las leyes de la física clásica (Leyes de Newton) pero esto no sucede con las partículas pequeñas, como los átomos (microscópicos).

Para estudiar estos “sistemas microscópicos” aparece una mecánica diferente, la física cuántica, que se basa en las propiedades ondulatorias de la materia. La cuantización de la energía es una consecuencia de este comportamiento.

Uno de los principios fundamentales de la mecánica cuántica es que no puede determinarse con precisión la trayectoria que siguen los electrones cuando se están moviendo alrededor del núcleo atómico.

Principio de incertidumbre de Heisenberg

Es imposible determinar con exactitud el momento y la posición de un electrón (o de cualquier otra partícula muy pequeña) en forma simultánea.

PROBABILIDAD

MECÁNICA CUÁNTICA

IDEAS BÁSICAS

Los átomos y las moléculas solo pueden existir en ciertos estados de energía. En cada estado posee una energía definida. Para cambiar de estado deber absorber o emitir energía suficiente para alcanzar otro estado.

Cuando los átomos o moléculas emiten o absorben radiación (luz), modifican su energía. Este cambio de energía está relacionado con la frecuencia o con la longitud de onda de la luz que emite o absorbe. La energía que gana o pierde un átomo al cambiar de estado es igual a la energía del fotón emitido o absorbido durante la transición.

Los estados permitidos de los átomos o moléculas pueden describirse mediante una serie de números llamados **números cuánticos**.

El enfoque matemático de la mecánica cuántica implica el tratamiento del electrón en un átomo como una onda estacionaria.

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

El tratamiento mecánico cuántico de átomos y moléculas es en esencia matemático, a través de una ecuación de onda propuesta en 1926 por Erwin Schrödinger.

Cada solución de la ecuación de onda describe un estado de energía posible para los electrones de un átomo. **Permiten conocer la probabilidad de encontrar a un electrón a diferentes distancias desde el núcleo.**

Cada solución se describe utilizando una serie de tres números cuánticos.

En 1928 Paul Dirac volvió a formular la mecánica electrónica a fin de tomar en cuenta los efectos de la relatividad, dando origen a un cuarto número cuántico.

NÚMEROS CUÁNTICOS

Las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger y Dirac para átomos de hidrógeno dieron **funciones de onda**, ψ , que describen los estados del electrón del átomo de hidrógeno.

Posteriormente estos **números cuánticos** se aplicarán para designar la distribución electrónica de todos los átomos, las llamadas **configuraciones electrónicas**.

Estos números cuánticos definen los niveles de energía de los electrones y las formas de los **orbitales** que describen la distribución de los electrones en el espacio.

Un orbital atómico es una región del espacio alrededor del núcleo en la que existe la mayor probabilidad de encontrar un electrón.

NÚMEROS CUÁNTICOS

NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL

- Describe el nivel principal de energía o capa que ocupa un electrón y el tamaño del orbital.
- Se representa con **n** y puede tomar valores enteros y positivos: 1, 2, 3, 4, ...

NÚMERO CUÁNTICO DEL MOMENTO ANGULAR (secundario o azumutal)

- Designa un subnivel y la una forma específica del orbital atómico que puede ocupar un electrón.
- Se representa con la letra **l** y puede tomar valores enteros que van desde 0 hasta (n-1). Ej. s, p,d, etc.

NÚMERO CUÁNTICO MAGNÉTICO

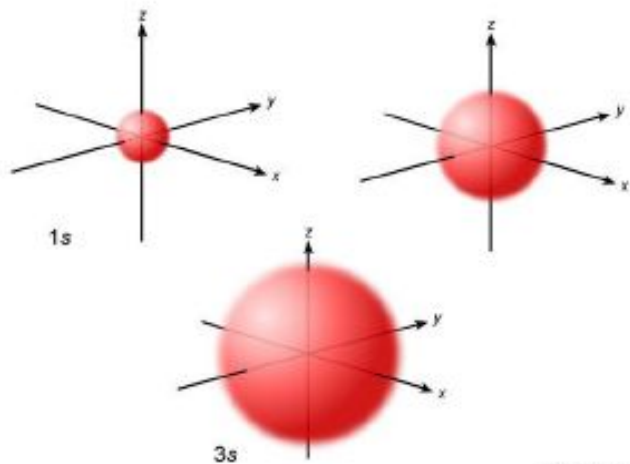
- Designa a un orbital específico en un subnivel y su orientación en el espacio.
- Se representa con la letra **m** y puede tomar valores que van desde $-l$, pasando por 0, hasta $+l$. Ej. P_x , P_y , P_z .

NÚMERO CUÁNTICO DEL ESPÍN

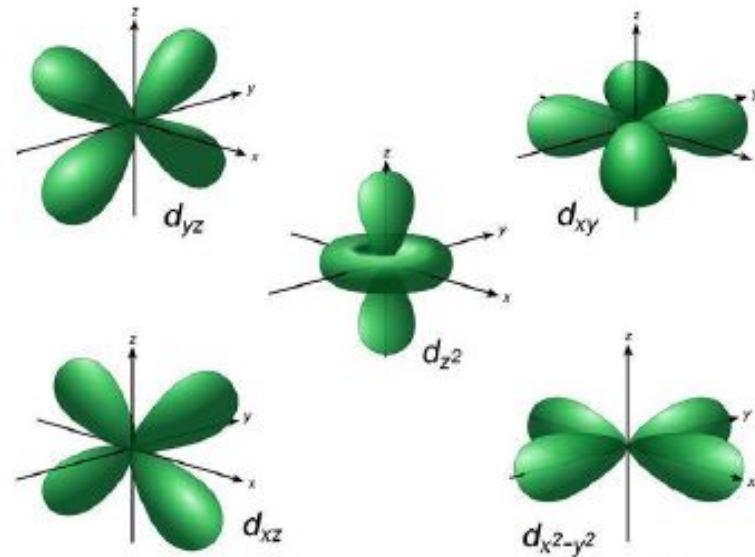
- Se refiere al giro del electrón y a la orientación del campo magnético que genera este giro.
- Puede tomar valores de $+1/2$ y $-1/2$.

n	L (0 hasta (n-1))	M (-l, pasando por 0, hasta +l)	s	Electrones por subnivel	Electrones por nivel (2.n²)
1	0 (1s)	0	+1/2, -1/2	2	2
2	0 (2s) 1 (2p)	0 -1, 0, +1	+1/2, -1/2 +1/2, -1/2 Por cada valor de m	2 6	8
3	0 (3s) 1 (3p) 2 (3d)	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0 +1, +2	+1/2, -1/2 +1/2, -1/2 +1/2, -1/2 Por cada valor de m	2 6 10	18
4	0 (4s) 1 (4p) 2 (4d) 3 (4f)	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0 +1, +2 -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	+1/2, -1/2 +1/2, -1/2 +1/2, -1/2 +1/2, -1/2	2 6 10 14	32

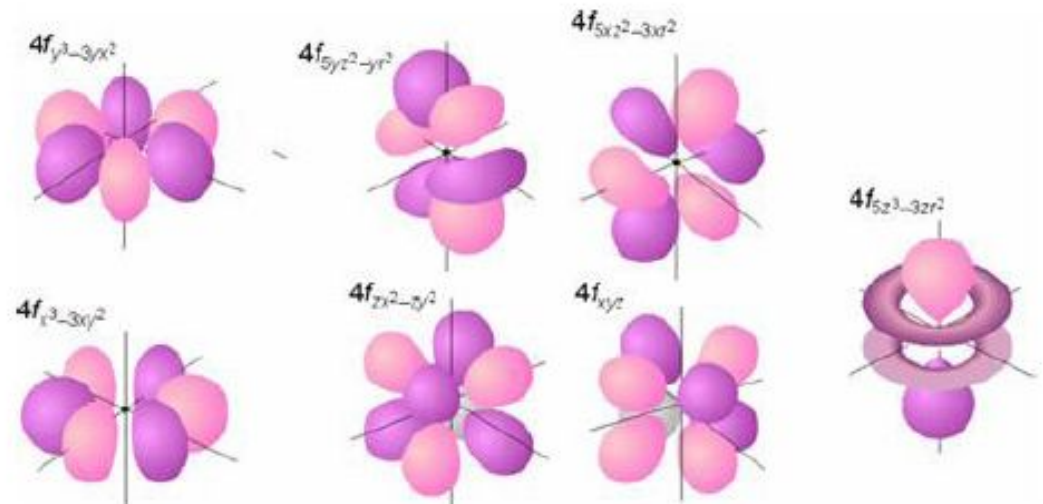
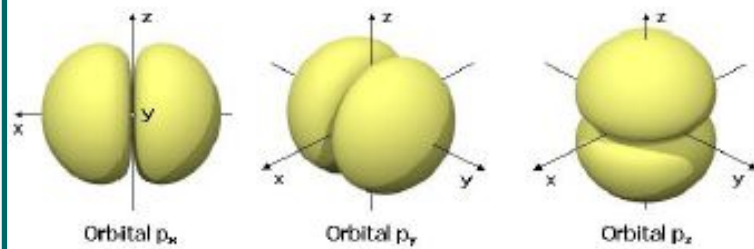
FORMA DE LOS ORBITALES ATÓMICOS (s, p, d y f)



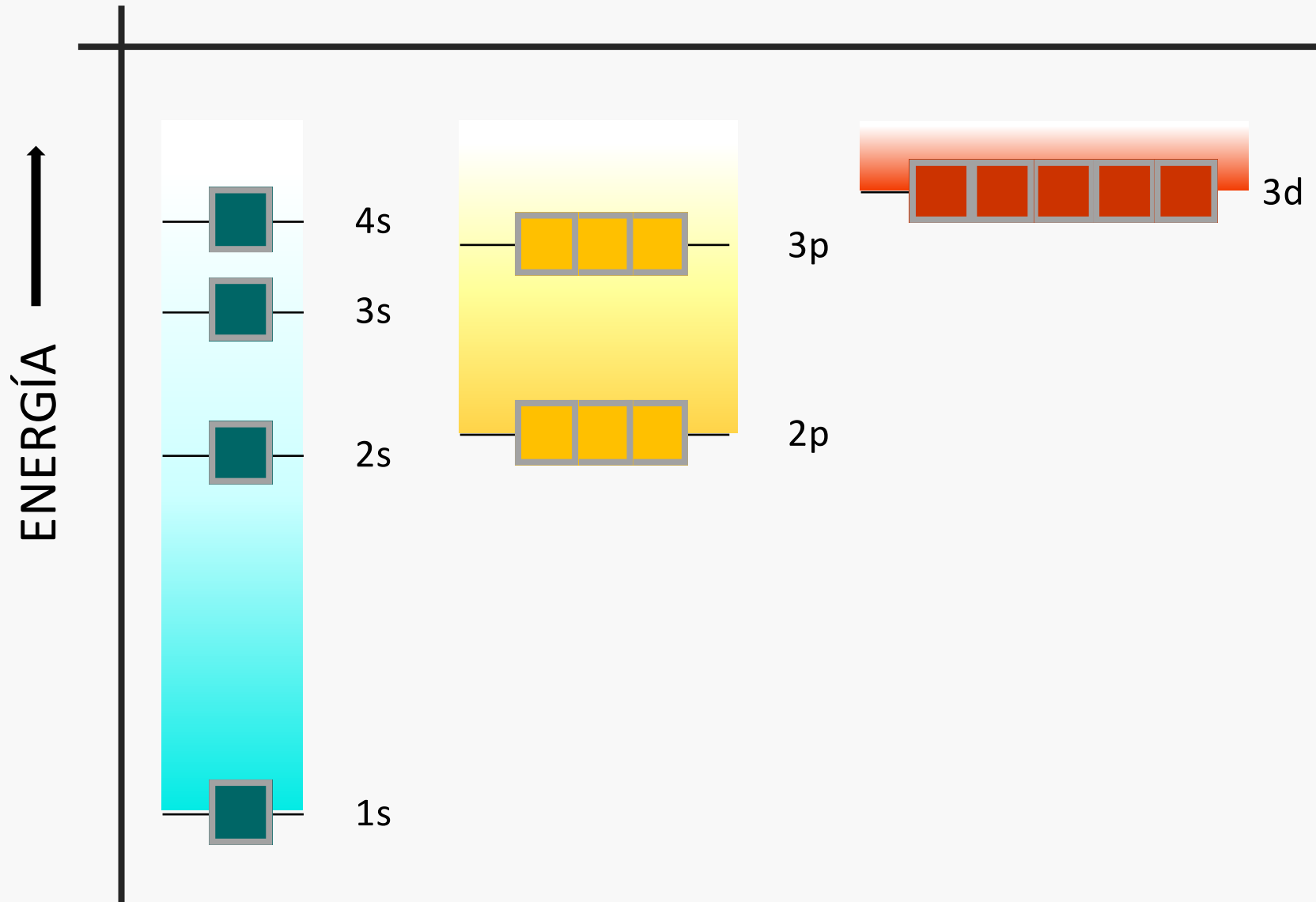
©NCSSM 2003



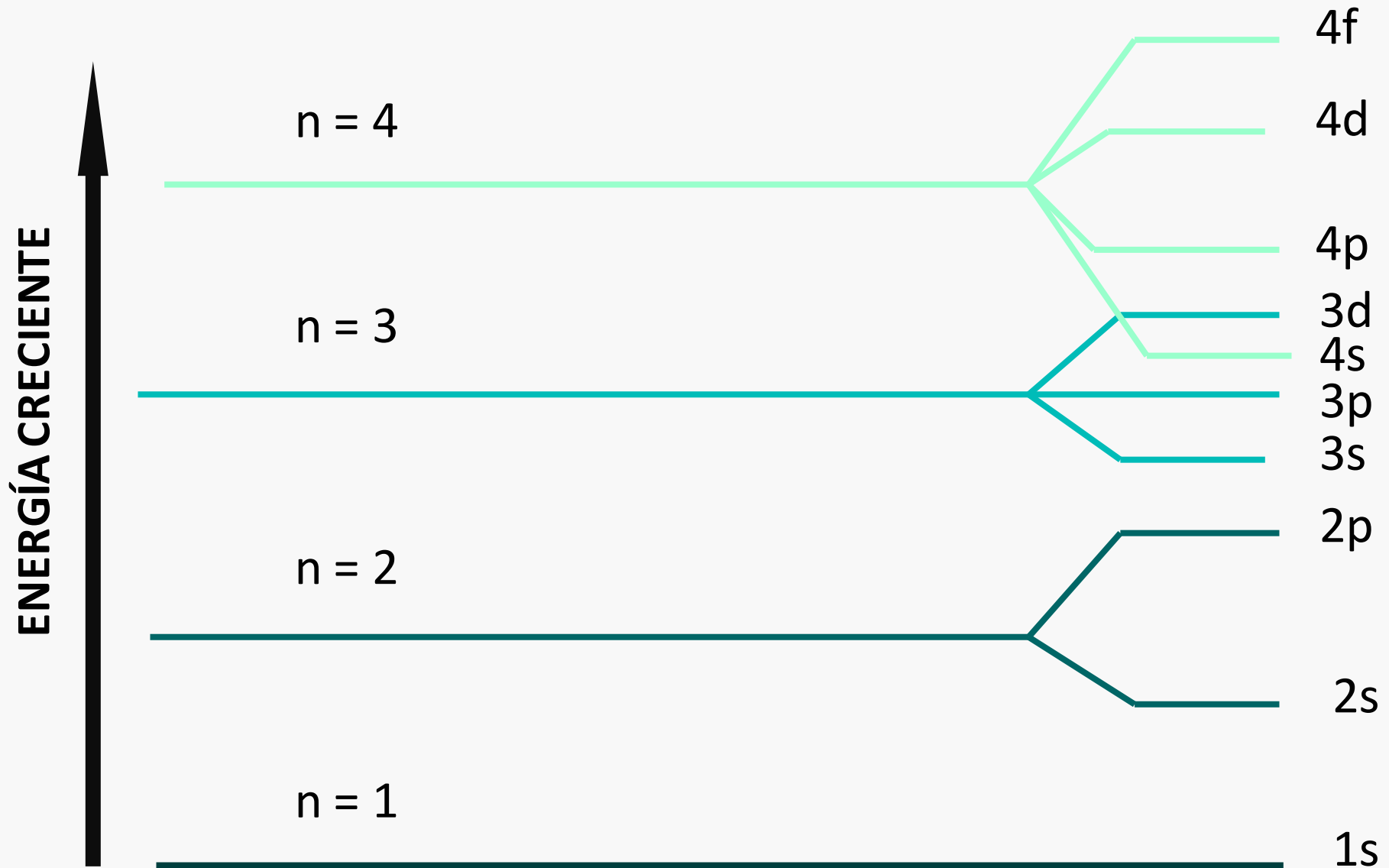
©NCSSM 2003



ENERGÍAS RELATIVAS DE LOS NIVELES, SUBNIVELES Y ORBITALES



Desdoblamiento de los niveles de Energía (Átomos multielectrónicos)



CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

La configuración electrónica indica la manera en la cual los electrones se estructuran, distribuyen u organizan en un átomo de acuerdo con el modelo de la mecánica cuántica. Permite llenar casilleros en los diagramas de niveles y subniveles.

Para el llenado de los orbitales se deben cumplir ciertas reglas:

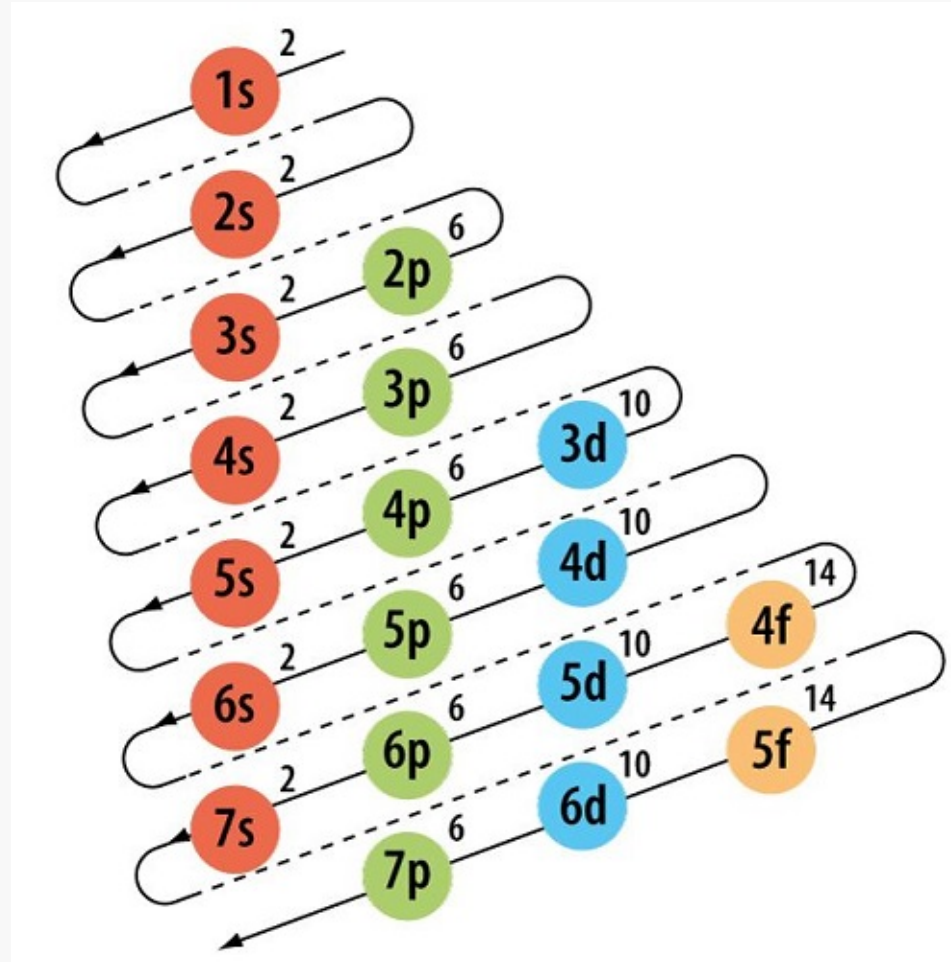
1-Principio de exclusión de Pauli: “Dos electrones en un átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales.”

2-Regla de Hund de Máxima multiplicidad:

“Todos los orbitales de un subnivel dado primero se ocupan con un solo electrón antes de comenzar el apareamiento. Estos electrones desapareados tienen espines paralelos.”

3- En la descripción de la configuración electrónica del estado fundamental, la idea conductora es que la energía total del átomo es la más baja posible. Para determinar estas configuraciones se utiliza el **Principio de Construcción de Aufbau.**

ORDEN DE LLENADO



Máxima cantidad de electrones por orbital

- *Orbital s* $\rightarrow 2 e^-$
- *Orbital p* $\rightarrow 6 e^-$
- *Orbital d* $\rightarrow 10 e^-$
- *Orbital f* $\rightarrow 14 e^-$

Configuración electrónica de iones

Para escribir la configuración de un catión se resta al número atómico (número de electrones del elemento neutro), la carga positiva que tiene el catión.

Ejemplo:

Elemento ${}_3\text{Li}$

Configuración: es $1s^2 2s^1$

Catión Li^{+1}

Configuración: es $1s^2$

Para escribir la configuración de un anión se suma al número atómico (número de electrones del elemento neutro), la carga negativa que tiene el anión.

Ejemplo:

Elemento ${}_8\text{O}$

Configuración: es $1s^2 2s^2 2p^4$

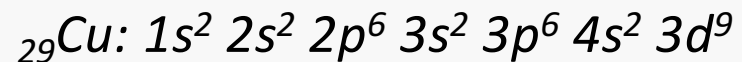
Anión O^{-2}

Configuración: es $1s^2 2s^2 2p^6$

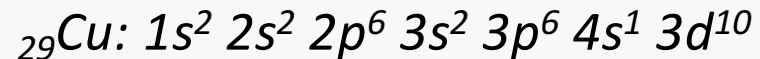
Estabilidad adicional

Configuración Electrónica del Cu.

- ***Teórica:***



- ***Real***



Niveles completos o semicompletos confieren estabilidad adicional.

Ejercitación

- Realice la distribución electrónica de las siguientes especies químicas:

Hierro

Catión ferroso

Catión férrico

Azufre

Anión sulfuro

Cromo

- Escribir un conjunto aceptable de cuatro números cuánticos que describan al último electrón de un átomo de cloro.

TABLA PERIÓDICA Y CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

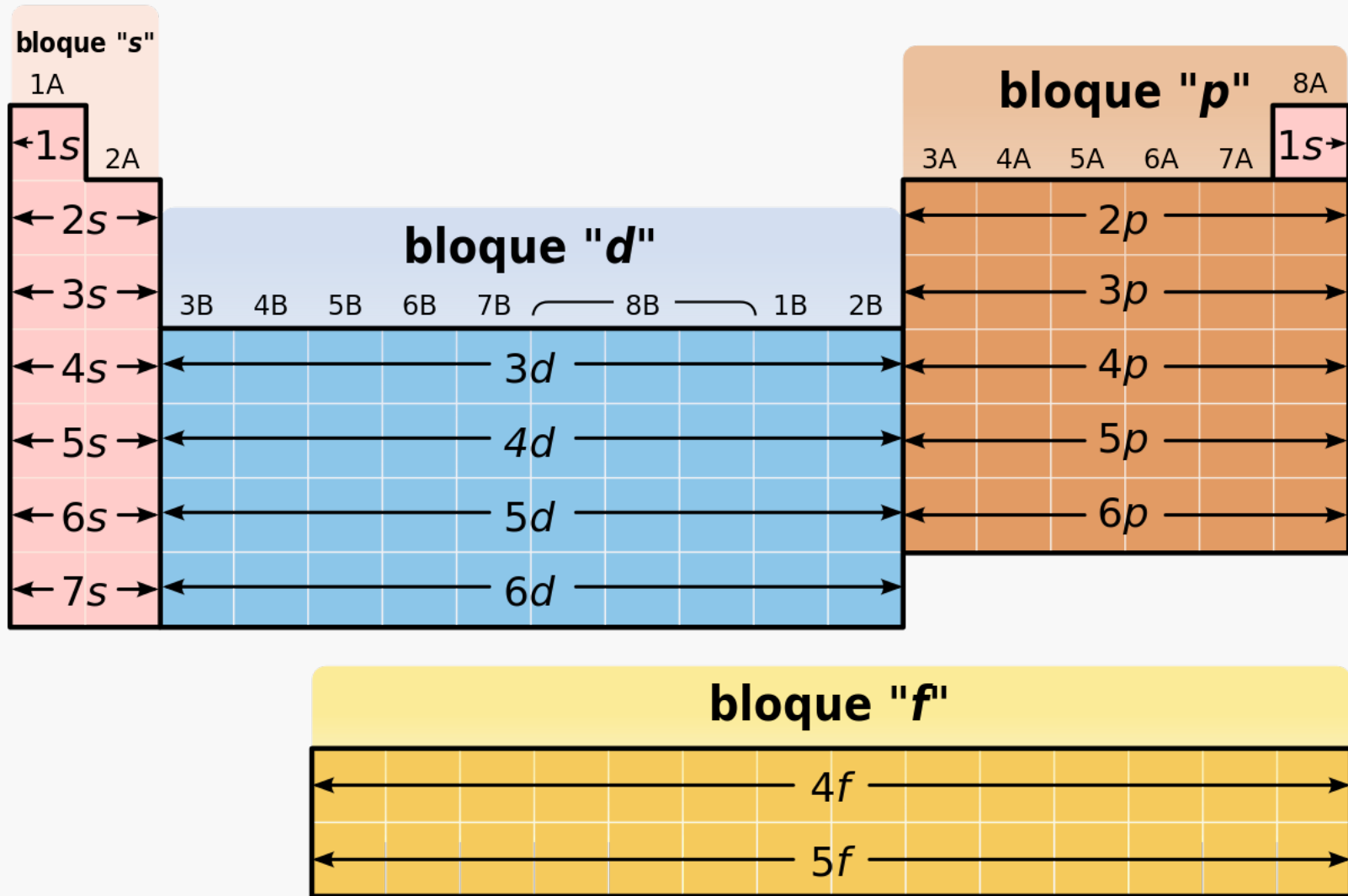
La Tabla Periódica puede analizarse desde una perspectiva más útil como una representación sistemática de las configuraciones electrónicas.

En la Tabla Periódica, los elementos se distribuyen en bloques en base a los tipos de orbitales atómicos que se están llenando.

Se clasifican en elementos A y B. Los del grupo A son aquellos que están llenando orbitales s y p. En el grupo B se incluyen los metales de transición en los cuales hay uno o dos electrones en los orbitales s de la capa ocupada más externa y orbitales d de una capa anterior.

Los períodos se numeran según el número cuántico principal de la capa de valencia.

TABLA PERIÓDICA Y BLOQUES



Elementos Representativos	$ns^a np^b$	$a = 1, 2$ $b = 1, \dots, 6$
Elementos de Transición	$(n-1)d^c$	$c = 1, \dots, 9, 10$
Elementos Transición Interna	$(n-2)f^d$	$d = 1, \dots, 14$

PROPIEDADES PERIÓDICAS

Las propiedades de los elementos son funciones periódicas de su número atómico.

Conocer la periodicidad en las propiedades de los elementos es muy valioso para predecir el comportamiento químico ya que los cambios en estas propiedades dependen de las configuraciones electrónicas. Permite además comprender los enlaces entre los átomos.

Las propiedades periódicas más importantes son:

- Radio atómico
- Energía de ionización
- Afinidad electrónica
- Electronegatividad

PROPIEDADES PERIÓDICAS

RADIO ATÓMICO

- Se define como la mitad de la distancia entre los núcleos de átomos vecinos

ENERGÍA DE IONIZACIÓN

- Cantidad mínima de energía necesaria para separar al electrón menos fuertemente unido de un átomo gaseoso aislado para formar un catión.

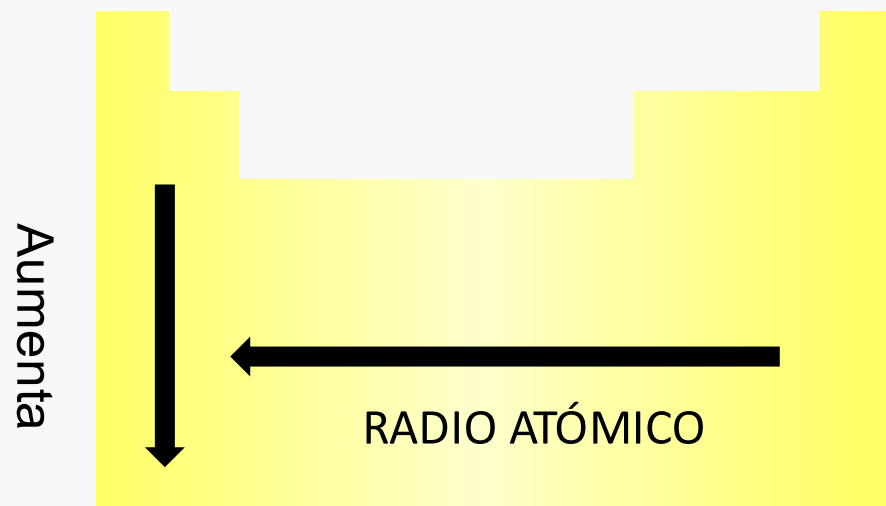
AFINIDAD ELECTRÓNICA

- Cantidad de energía puesta en juego cuando se añade un electrón a un átomo gaseoso aislado para formar un anión.

ELECTRONEGATIVIDAD

- Es una medida de la tendencia relativa de un átomo a atraer electrones hacia sí mismo cuando está combinado químicamente con otro átomo.

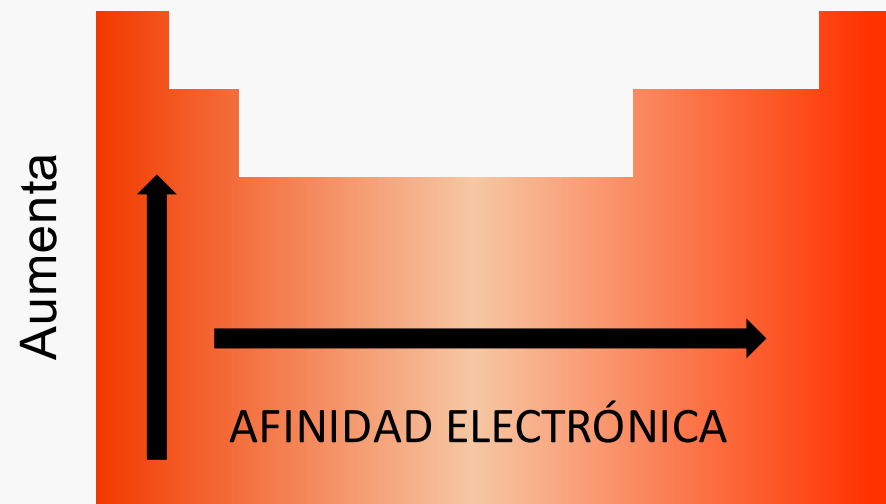
TENDENCIAS DE LAS PROPIEDADES PERIÓDICAS



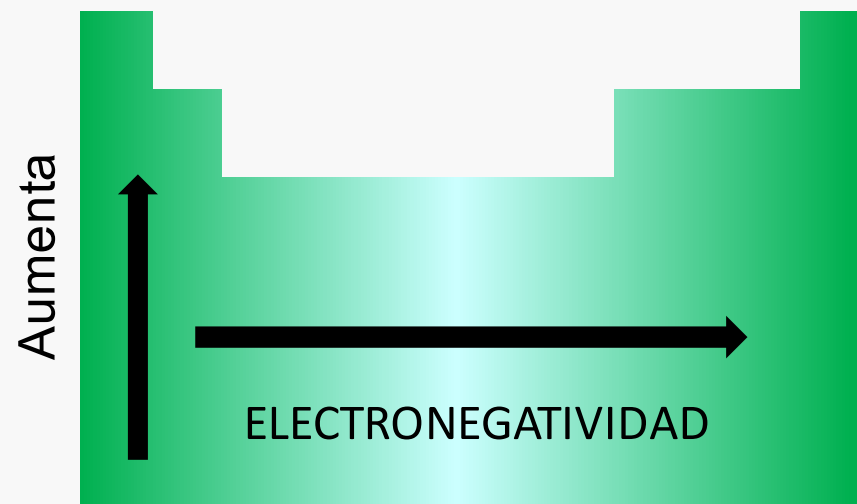
Aumenta



Aumenta



Aumenta



Aumenta

BIBLIOGRAFÍA

- Atkins, P. Jones, L. 2012. Principios de Química. Quinta edición. Ed. Panamericana.
- Brown, LeMay y Bursten. 1998. Química: La Ciencia Central. Séptima edición. Ed. Prentice Hall
- Chang, R. 1998. Química General. Sexta edición. Ed. Mc Graw Hill.
- Kotz, J. Treichel, M. 2003. Química y reactividad química. Quinta edición. Ed. Thomson.
- Petrucci, R. Harwood, W. Herring F. 2002. Química General. Vol. I y II. Octava edición. Ed. Prentice Hall.
- Whiten, Davis y Peck. 2015. Química General. Octava edición. Ed. Mc Graw Hill.