

QUIMICA DE MATERIALES

UNIDAD 1: ESTRUCTURA ATOMICA Y ELECTRONICA

1.1 Componentes fundamentales de los Atomos

Algunos modelos atómicos

- | | |
|-------------|------------|
| • 1808-1810 | Dalton |
| • 1898-1904 | Thomson |
| • 1911 | Rutherford |
| • 1920 | Bohr |

Modelo de DALTON

- La materia esta formada por partículas muy pequeñas e indivisibles (átomos).
- Los átomos de un mismo elemento son idénticos entre sí.
- Los átomos permanecen sin división, incluso cuando se combinan en las reacciones químicas.
- Los átomos pueden combinarse para formar compuestos, según una relación sencilla de números enteros.
- Los átomos de elementos diferentes combinar en proporciones distintas y formar compuestos ("Ley de las Proporciones Múltiples")

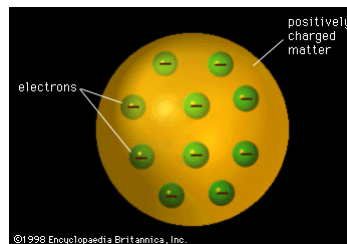


Modelo de Thomson

Hecho:

- La materia es eléctricamente neutra
- Existen partículas negativas

⇒ Atomo: Esfera uniforme de materia cargada positivamente, en la que se hallan incrustados los electrones ("budín de pasas")



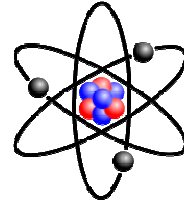
Modelo de Rutherford

Hecho:

Al bombardear con partículas α una lámina delgada de oro, la mayoría atraviesan la lámina, y unas pocas son dispersadas ángulos grandes (rebotadas)

⇒ La carga positiva ocupa un pequeño espacio en el centro del átomo: NUCLEO

⇒ Los electrones se mueven alrededor del núcleo como planetas alrededor del Sol



Resumiendo, Rutherford ⇒

- La carga positiva y la mayor parte de la masa del átomo está en el núcleo
- Tamaño del núcleo $\approx 1/100.000$ tamaño átomo
- La corteza contiene a los electrones, y posee pequeña masa
- Los electrones se mueven en torno al núcleo a gran velocidad

Plank:

- Los átomos pueden emitir o absorber sólo cantidades discretas de energía (energía cuantizada)

$$E = nh\nu$$

Hechos:

- Una partícula cargada, cuando posee aceleración, emite radiación electromagnética
- Un electrón en trayectoria circular emitiría radiación continuamente, perdiendo energía y chocando contra el núcleo

Modelo de Bohr

Postulados:

- 1º: el movimiento del electrón alrededor del núcleo está restringido a un número discreto de órbitas circulares
- 2º: Los estados permitidos son aquellos en los que el momento angular del electrón (mvr) es un múltiplo de $h/2\pi$
- 3º: El electrón absorbe o desprende energía cuando pasa de un estado o nivel permitido a otro.

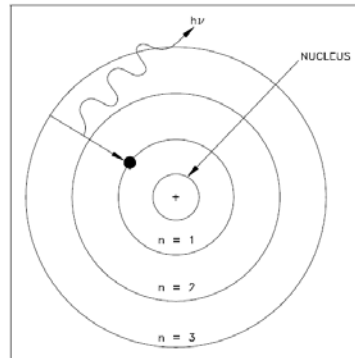


Figure 1 Bohr's Model of the Hydrogen Atom

Hechos:

El átomo contiene

- protones (+) masa = $1,67 \times 10^{-27}$ kg
- electrones (-) masa = $9,11 \times 10^{-31}$ kg
- Neutrones () masa = $1,67482 \times 10^{-27}$ kg (Chadwick, 1932)

Principio de Incertidumbre (Heisenberg)

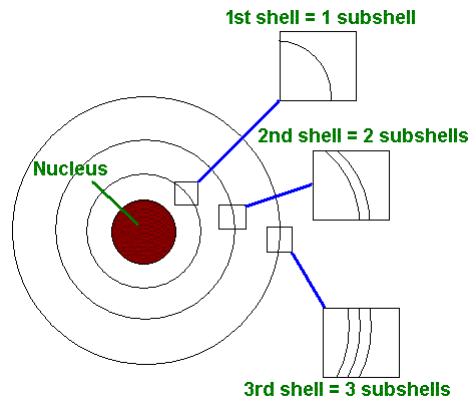
No es posible determinar simultáneamente, de manera precisa, la posición (x) y la cantidad de movimiento ($p = mv$) de una partícula

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

$h = 6,6256 \times 10^{-27}$ erg s (cte. De Planck)

⇒ Posición y movimiento de una partícula se pueden expresar sólo como probabilidades
(válido sólo para partículas pequeñas)

Modelo atómico probabilístico



Ecuación de onda de Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

ψ : función de onda del electrón

E: energía total del electrón

V: energía potencial del electrón

m: masa del electrón ($m = 9,109 \times 10^{-31}$ kg)

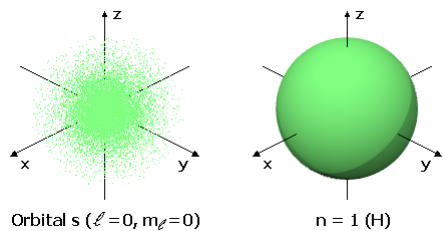
h: constante de Planck ($h = 6,6256 \times 10^{-27}$ erg s)

Números cuánticos

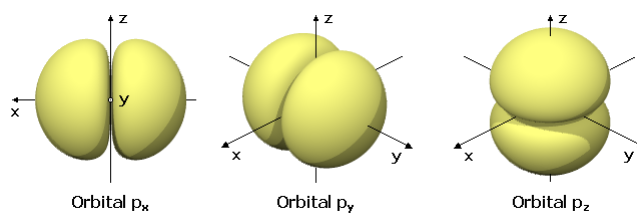
- n : número cuántico principal
 $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$
- l : número cuántico azimutal
 $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
- m_l : número cuántico magnético
 $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$
- m_s : número cuántico de spin
 $m_s = -1/2, +1/2$

l	Orbital	Nº máximo electrones	
0	s	2	sharp (nítida)
1	p	6	principal
2	d	10	difusa
3	f	14	fundamental
4	g	18	

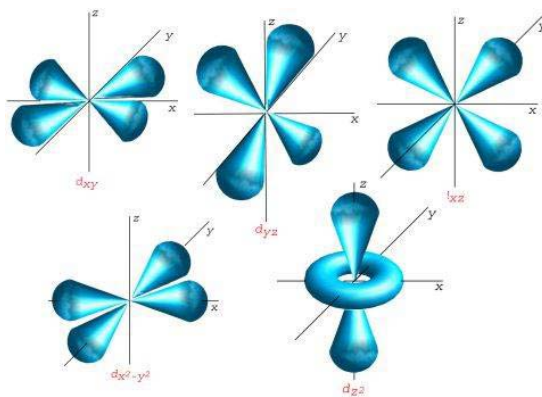
Orbital s



Orbitales p

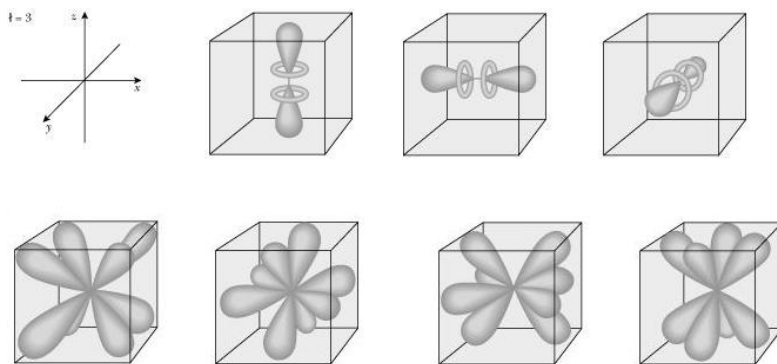


Orbitales d



(<http://www.guiller3.blogspot.com/>)

Orbitales f



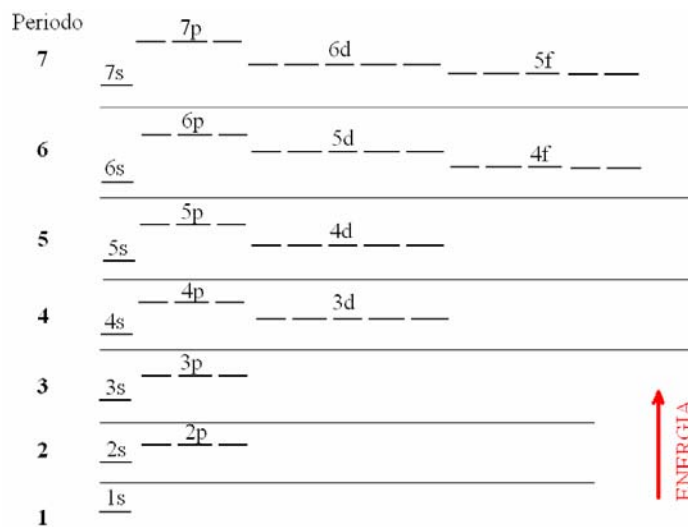
Principio de exclusión de Pauli

n	l	ml	
1	0	0	1s
2	0	0	2s
	1	-1, 0, 1	2p
3	0	0	3s
	1	-1, 0, 1	3p
	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d
4	0	0	4s
	1	-1, 0, 1	4p
	2	-2, -1, 0, 1, 2	4d
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f

n	l	ml	ms
1	0	0	+1/2
1	0	0	-1/2

n	l	ml	ms
2	0	0	+1/2
2	0	0	-1/2
2	1	-1	+1/2
2	1	-1	-1/2
2	1	0	+1/2
2	1	0	-1/2
2	1	+1	+1/2
2	1	+1	-1/2

Energías de los orbitales atómicos



Atomo polieletrónico Orden de llenado de los Orbitales

	Nº electrones en el nivel	
1	1s ²	2
2	2s ² 2p ⁶	8
3	3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰	18
4	4s ² 4p ⁶ 4d ¹⁰ 4f ¹⁴	32
5	5s ² 5p ⁶ 5d ¹⁰ 5f ¹⁴	32
6	6s ² 6p ⁶ 6d ¹⁰ 6f ¹⁴	32
7	7s ² 7p ⁶ 7d ¹⁰ 7f ¹⁴	32

Configuración electrónica en el estado fundamental

Z	Símbolo	Configuración electrónica
1	H	1s ¹
2	He	1s ²
3	Li	1s ² 2s ¹
4	Be	1s ² 2s ²
5	B	1s ² 2s ² 2p ¹
6	C	1s ² 2s ² 2p ²
7	N	1s ² 2s ² 2p ³
8	O	1s ² 2s ² 2p ⁴
9	F	1s ² 2s ² 2p ⁵
10	Ne	1s ² 2s ² 2p ⁶
11	Na	[Ne] 3s ¹
12	Mg	[Ne] 3s ²
13	Al	[Ne] 3s ² 3p ¹
14	Si	[Ne] 3s ² 3p ²
15	P	[Ne] 3s ² 3p ³
16	S	[Ne] 3s ² 3p ⁴
17	Cl	[Ne] 3s ² 3p ⁵
18	Ar	[Ne] 3s ² 3p ⁶

Z	Símbolo	Configuración electrónica
19	K	[Ar] 4s ¹
20	Ca	[Ar] 4s ²
21	Sc	[Ar] 4s ² 3d ¹
22	Ti	[Ar] 4s ² 3d ²
23	V	[Ar] 4s ² 3d ³
24	Cr	[Ar] 4s ¹ 3d ⁵
25	Mn	[Ar] 4s ² 3d ⁵
26	Fe	[Ar] 4s ² 3d ⁶
27	Co	[Ar] 4s ² 3d ⁷
28	Ni	[Ar] 4s ² 3d ⁸
29	Cu	[Ar] 4s ¹ 3d ¹⁰
30	Zn	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰
31	Ga	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ¹
32	Ge	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ²
33	As	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ³
34	Se	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴
35	Br	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵
36	Kr	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶

Un conjunto de orbitales degenerados (d) lleno es muy estable; un conjunto de orbitales medio lleno, también.

Z	Símbolo	Configuración electrónica	Z	Símbolo	Configuración electrónica
37	Rb	[Kr] 5s ¹	71	Lu	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²
38	Sr	[Kr] 5s ²	72	Hf	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ² 6s ²
39	Y	[Kr] 4d ¹ 5s ²	73	Ta	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²
40	Zr	[Kr] 4d ² 5s ²	74	W	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²
41	Nb	[Kr] 4d ³ 5s ¹	75	Re	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
42	Mo	[Kr] 4d ⁵ 5s ¹	76	Os	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
43	Tc	[Kr] 4d ⁵ 5s ²	77	Ir	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
44	Ru	[Kr] 4d ⁷ 5s ¹	78	Pt	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹
45	Rh	[Kr] 4d ⁸ 5s ¹	79	Au	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹
46	Pd	[Kr] 4d ¹⁰	80	Hg	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
47	Ag	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ¹	81	Tl	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹
48	Cd	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ²	82	Pb	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
49	In	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹	83	Bi	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
50	Sn	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	84	Po	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
51	Sb	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	85	At	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
52	Te	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	86	Rn	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
53	I	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	87	Fr	[Rn] 7s ¹
54	Xe	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	88	Ra	[Rn] 7s ²
55	Cs	[Xe] 6s ¹	89	Ac	[Rn] 6d ¹ 7s ²
56	Ba	[Xe] 6s ²	90	Th	[Rn] 6d ² 7s ²
57	La	[Xe] 5d ¹ 6s ²	91	Pa	[Rn] 5f ² 6d ¹ 7s ²
58	Ce	[Xe] 4f ² 6s ²	92	U	[Rn] 5f ³ 6d ¹ 7s ²
59	Pr	[Xe] 4f ³ 6s ²	93	Np	[Rn] 5f ⁴ 7s ²
60	Nd	[Xe] 4f ⁴ 6s ²	94	Pu	[Rn] 5f ⁶ 7s ²
61	Pm	[Xe] 4f ⁵ 6s ²	95	Am	[Rn] 5f ⁷ 7s ²
62	Sm	[Xe] 4f ⁶ 6s ²	96	Cm	[Rn] 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²
63	Eu	[Xe] 4f ⁷ 6s ²	97	Bk	[Rn] 5f ⁸ 6d ¹ 7s ²
64	Gd	[Xe] 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	98	Cf	[Rn] 5f ¹⁰ 7s ²
65	Tb	[Xe] 4f ⁹ 6s ²	99	Es	[Rn] 5f ¹¹ 7s ²
66	Dy	[Xe] 4f ¹⁰ 6s ²	100	Fm	[Rn] 5f ¹² 7s ²
67	Ho	[Xe] 4f ¹¹ 6s ²	101	Md	[Rn] 5f ¹³ 7s ²
68	Er	[Xe] 4f ¹² 6s ²	102	No	[Rn] 5f ¹⁴ 7s ²
69	Tm	[Xe] 4f ¹³ 6s ²	103	Lr	[Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²
70	Yb	[Xe] 4f ¹⁴ 6s ²			