

## Desde Estructura Atómica a Enlaces, y Relación Enlace-Propiedades

Plan de Trabajo:

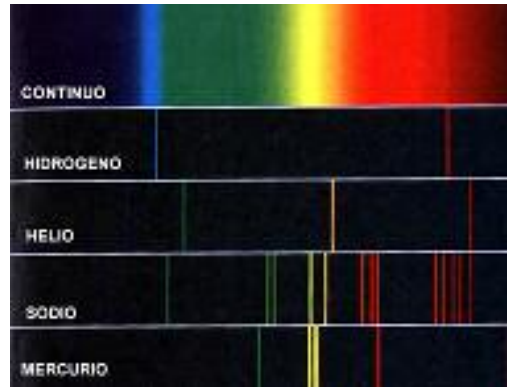
- Modelos de estructura electrónica del átomo
- Estructura de los átomos al estado fundamental
- Tabla periódica
- Electronegatividad
- Enlaces: primarios, secundarios y mixtos.
- Propiedades de materiales con esos enlaces

## Modelo de Bohr

- Modelo planetario, de órbitas planas.
- Órbitas estacionarias. Un hecho experimental. Un postulado de la teoría.
- Geometría inicialmente supuesta: circular
- Equilibrio de fuerza centrífuga y fuerza electrostática
  - Electrón: carga  $e$  negativa y masa  $m$ .
  - Núcleo: carga  $e$  positiva
  - Variables: radio de la órbita y velocidad del electrón.
- La energía total del electrón se escribe como la suma de la energía cinética y de la energía electrostática.

## Evidencia experimental

- Ya se sabía de ondas electromagnéticas y del efecto fotoeléctrico:  $E=h\nu$
- Se conocían muchos datos de espectros electromagnéticos de emisión de varios elementos.



## Una idea

- Para explicar los espectros, Bohr debió postular la cuantificación del momento angular.  
$$mvr = n \hbar$$
- Esto en un ambiente en que ya se había establecido la cuantificación de la energía en situaciones conocidas (fotones)

## Ecuación de la energía electrónica de Bohr, para el H (Z=1)

$$E = -\frac{2\pi^2 me^4}{n^2 h^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

$$(n=1, 2, 3, 4, 5, \dots)$$

donde:

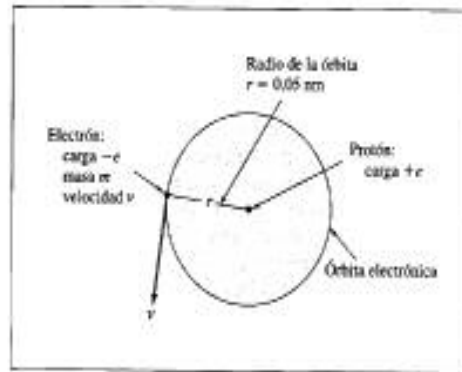
$e$  = Carga del electrón.

$m$  = Masa del electrón.

$n$  = Un número entero denominado el *número cuántico principal*.

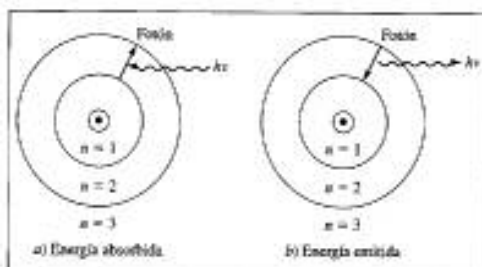
<sup>1</sup> Max Ernst Planck (1858-1947). Físico alemán que recibió el Premio Nobel en Física en 1918 por su teoría cuántica.

<sup>2</sup> Niels Henrik Bohr (1885-1962). Físico danés que fue uno de los fundadores de la física moderna. En 1922 recibió el Premio Nobel de Física por su teoría del átomo de hidrógeno.



**FIGURA 2.3.** Átomo de hidrógeno de Bohr. En el átomo de hidrógeno, un electrón gira en una órbita circular de 0,05 nm de radio alrededor de un protón central.

## Explicación de los espectros de emisión, debida a Bohr



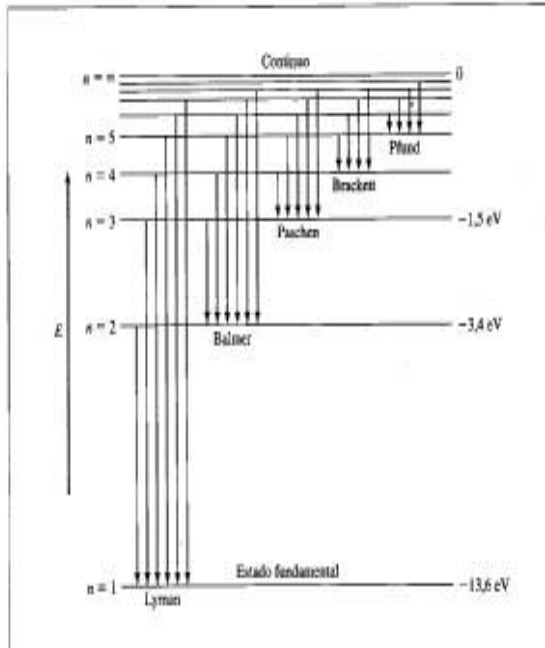
**FIGURA 2.2.** a) Un electrón del hidrógeno es excitado a una órbita de mayor energía, y b) un electrón cae a una órbita de menor energía y emite un fotón de energía  $h\nu$ .

$$\Delta E = h\nu \quad (2.1)$$

donde  $h$  = constante de Planck =  $6,63 \times 10^{-34}$  julios-segundo (Js). Puesto que para la radiación electromagnética,  $c = \lambda \nu$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz igual a  $3,00 \times 10^8$  metros/segundo (m/s) y  $\lambda$  (lambda) su longitud de onda, el cambio de energía  $\Delta E$  asociado con un fotón puede ser expresado como:

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.2)$$

$E(n)$  para el H



## Complementando el modelo de Bohr

- Ya se tenía el primer número cuántico,  $n$ .
- Pero fue necesario explicar el desdoblamiento de ciertos máximos en los espectros experimentales, ante la aplicación de un campo magnético.
- Aparecen entonces subniveles de energía cuantificada, por lo que se tiene otros números cuánticos.

## Varios términos de energía cuantificada

- $E_{\text{total}} = E(n) + E(l) + E(m) + E(s)$
- Los tres primeros números cuánticos son números enteros propios del orbital, en tanto que el número  $s$  es propio del electrón mismo.
- Así, los tres números  $n$ ,  $l$  y  $m$  caracterizan completamente un orbital.
- El primer sumando del segundo miembro es el mayor de todos.

## Geometrías y número $l$

- En el modelo de Bohr mejorado (Sommerfeld, etc.) las órbitas son elipses con diferente excentricidad.
- Al tenerse distintas geometrías de órbitas electrónicas, se tienen distintos dipolos magnéticos asociados a la órbita.
- A lo anterior se asocian distintos términos complementarios de energía magnética, al interactuar las órbitas con un campo magnético externo.
- Energías cuantificadas: Número  $l$ .

## Orientación magnética y $m$

- Además, la orientación de esos dipolos en el campo también es no clásico.
- Así aparece el tercer número cuántico,  $m$ , relacionado con la orientación relativa en el espacio de las órbitas de un mismo tipo ( $n, l$ ).
- Puede haber más de una orientación posible, a diferencia de, por ejemplo, el caso clásico de una brújula en el campo magnético terrestre.

## Multiplicidad de los números.

- Aquí nos interesa más la multiplicidad de cada nuevo número cuántico que el valor de la energía asociada.
- |   |       |                           |             |
|---|-------|---------------------------|-------------|
| • | $n$   | $1, 2, 3, \dots$          | Principal   |
| • | $l$ : | $0, 1, \dots, +(n-1)$     | Secundario. |
| • | $m$ : | $-l, \dots, 0, \dots, +l$ | Magnético.  |
- $s$ .  $+1/2, -1/2$  Spin (fermiones)

## Resultados de Bohr y paso al Modelo Moderno

- Este modelo, con mejoras en que participaron otros autores, explicó bien las **frecuencias** del espectro del H, incluyendo desdoblamientos de máximos. Introdujo los números cuánticos orbitales  $n$ ,  $l$  y  $m$ .
- PERO, por ser un modelo semi-clásico semi-moderno, el modelo de Bohr tiene inconsistencias internas que limitan su aplicación.
- NO explica las intensidades del H.
- NO explica espectros para  $Z$  mayor que 1.

## En el Modelo Moderno

- Así es como el Modelo Moderno (MM) reemplazó al de Bohr. En el MM:
  - reaparecen los números cuánticos  $n$ ,  $l$  y  $m$ , de valores e interpretación similares a los de Bohr.
  - y surge el concepto de orbitales (nubes de probabilidad espaciales), reemplazando al concepto de órbitas (líneas 2D).

## Ideas básicas del Modelo Moderno (1)

- Los electrones se tratan como ondas. Postulado por *de Broglie*, por analogía con los fotones.  
(Los electrones, como los fotones, tienen un carácter doble: corpuscular y ondulatorio). Poco después esto se demostró experimentalmente.
- Como los estados electrónicos son estables, es un problema de ondas electrónicas estacionarias.
- Schrödinger planteó la ecuación de onda estacionaria a resolver.
- Condiciones de borde: dependen del elemento.

## Ideas básicas del Modelo Moderno (2)

- Para los electrones se aplica el Principio de Incertidumbre de Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p \geq h/2\pi, \text{ donde:}$$

$\Delta x$ : error en la posición

$\Delta p$ : error en la cantidad de movimiento

$h$ : constante de Plank

En consecuencia, el problema se resuelve en términos probabilísticos.



## Modelo Moderno

- La búsqueda matemática de soluciones es compleja y no es parte de este curso. Veremos directamente los resultados.
- Hay que resolver las ecuaciones de onda estacionaria 3D, en términos de:
  - longitud de onda,  $\lambda$ , relacionada con la energía.
  - amplitud,  $\Psi$ . Esto requirió una interpretación especial.

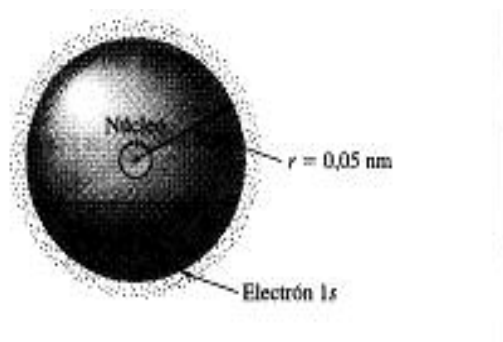
## Interpretación de la Amplitud, $\Psi$ . Modelo Moderno

- Supongamos que ya se tiene determinada la función  $\Psi(x,y,z)$  en el punto  $(x,y,z)$  del espacio.
- Por analogía con los fotones, Born propuso:  
  
 $\Psi^2(x,y,z)dV$ : Probabilidad de encontrar al electrón en un volumen  $dV$  ubicado en  $(x,y,z)$ . Esto corresponde, para cada trío de números cuánticos  $(n,l,m)$  u orbital, a una nube de probabilidad 3D.

## Análisis de Born

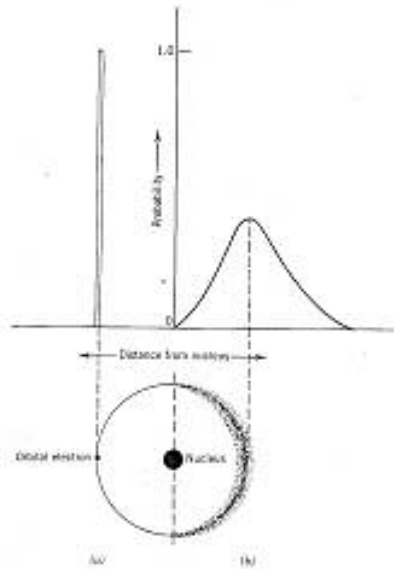
- General  $I \propto A^2$
- Luz  $I \propto (\text{número fotones/ área})$   
(2D)
- Nomenclatura  
 $A \sim \psi(x,y,z)$
- -----
- Por analogía, electrones  
 $I \propto (\text{número electrones/ volumen})$   
(3D)
- O sea:  $A \sim \psi^2(x,y,z) dV$   
Probabilidad de encontrar al electrón en  
el volumen  $dV$  ubicado en  $(x,y,x)$

## Orbital tipo s en el Modelo Moderno (nube de probabilidad de simetría esférica para s)



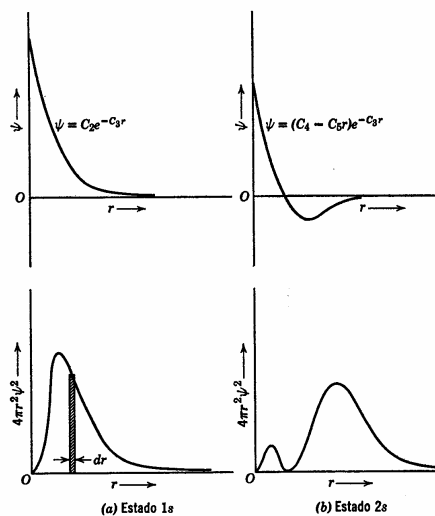
**FIGURA 2.5.** Nube de carga electrónica (esquemática) alrededor del núcleo de un átomo de hidrógeno en su estado fundamental. El círculo exterior de radio  $r = 0,05 \text{ nm}$  corresponde al radio de la primera órbita de Bohr (es decir, para  $n = 1$ ) e indica la región más probable de encontrar al electrón.

## Orbital tipo s ( $l=0$ )

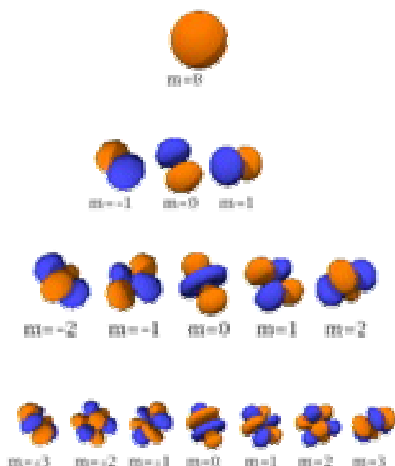


- Representación de un orbital tipo s, según: a) el Modelo de Bohr (2D), y b) el Modelo Moderno (3D).
- En el Modelo Moderno los orbitales corresponden a nubes de probabilidad. Para el caso del orbital s, la probabilidad de encontrar un electrón en un punto del espacio ( $\psi^2 dV$ ) depende sólo de  $r$  (posición radial); es decir, tiene simetría esférica.

## Orbitales 1s y 2s, con simetría esférica. (Modelo Moderno)



## Orbitales s, p, d y f. (Modelo Moderno)



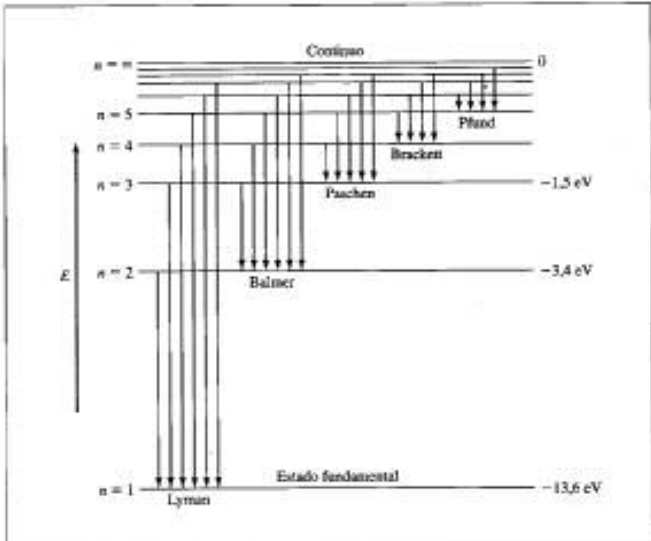
- Un orbital queda definido por los números cuánticos  $l$ ,  $m$  y  $n$ . Representa la distribución de probabilidad de ubicación de un electrón en el espacio.
- El único tipo de orbital que individualmente tiene simetría esférica es un orbital tipo s.

## Orbitales completos y simetría electrónica esférica



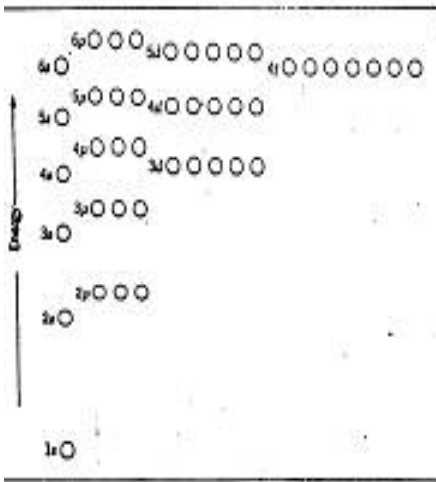
- Considere los orbitales tipo p ( $l=1$ ) de una “capa”  $n>1$ .
- ¿Cuántos electrones (e) completan ese conjunto?  
Respuesta: 6 e. ¿Por qué?
- Para los orbitales  $p$ , con desde 1 a 5 e, no se tiene simetría electrónica esférica.
- Un conjunto de orbitales completo, de cualquier tipo ( $p$ ,  $d$ ,  $f$ , ...) sí tiene simetría electrónica esférica. Es decir, son esféricos los  $p$  con 6 e, los  $d$  con 10 e, etc.

## Diagrama de niveles de energía para el Hidrógeno, por n.



## Estructura de Cajas

(Tabla maestra referencial y aproximada)



- Estructura genérica de cajas, para representar los niveles energéticos (orbitales en función de la energía) de un elemento cualquiera.
- Nótese la cercanía de los niveles de energía 3d y 4s: la posición relativa de estos niveles es fuerte función del elemento, hay que analizar caso a caso.

## Estructura electrónica de los elementos al estado fundamental

Ejemplos:

H°	(Z= 1)	= 1s <sup>1</sup>
He°	(Z= 2)	= 1s <sup>2</sup>
Li°	(Z= 3)	= 1s <sup>2</sup> 2s <sup>1</sup>
Be°	(Z= 4)	= 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>
C°	(Z= 6)	= 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>
Na°	(Z= 11)	= 1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 2s <sup>1</sup>

## Principios Incertidumbre de Pauli y principio de Hund

- Un orbital queda plenamente definidos por el trío (n,l,m). En ese orbital puede haber un electrón o hasta dos; esto último ,a condición de que esos electrones tengan spins opuestos. (Consecuencia del principio de exclusión de Pauli).
- En un conjunto de orbitales (n, l y m= .l, ..., +l), los electrones presentar spines paralelos. (Principio de Hund; de esta manera, se tiene una ligera disminución de energía).
- Ejemplo: fórmula electrónica desarrollada del Nitrógeno:  

$$\text{N}^\circ(\text{Z}=7)=1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1 = \text{He}^\circ 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$$

## Comportamiento de los gases inertes o nobles

- Los gases nobles o inertes son: gases monoatómicos a temperatura y presión normales, y muy poco reactivos.

Su escasa reactividad es indicación de que son muy estables al estado fundamental. Esto es, su estructura electrónica es muy estable.

## Estructura electrónica de los gases inertes

El primer gas noble es el  $\text{He}^\circ (Z=2) = 1s^2 2s^2$

Fórmula externa de los otros ( $\text{Ar}^\circ, \text{Ne}^\circ, \text{Kr}^\circ, \text{Xe}^\circ$  y  $\text{Rn}^\circ$ ):  **$ns^2 2p^6$** , donde n es el número cuántico principal mayor (más externo) del respectivo átomo.

Ejemplo:

$\text{Kr}^\circ (Z=36) = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} \mathbf{4s^2 4p^6}$

Estos átomos presentan una estructura electrónica muy estable, con simetría esférica. Es la explicación de su comportamiento químico.

## Los gases inertes como referencia de estabilidad

- Los gases inertes presentan estructuras estables.
- Los otros átomos inicialmente al estado fundamental, al ser excitados, tenderán a adoptar, muchas veces, la estructura electrónica externa del gas inerte más próximo.
- Así, los otros átomos tenderán a captar o a ceder electrones, según corresponda. (Electronegatividad).

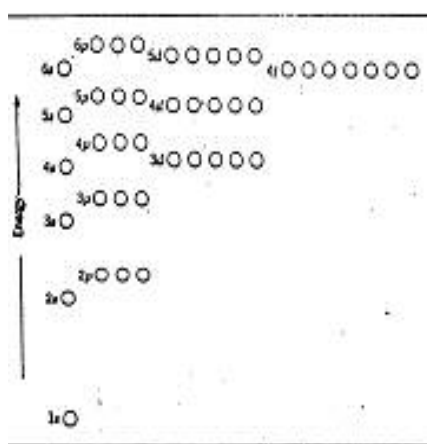
## Estructuras Electrónicas de Algunos Elementos al Estado Fundamental

Configuraciones electrónicas de los elementos

Z	Elemento	Configuración electrónica			
1	H	1s	18	Ar	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>
2	He	1s <sup>2</sup>	19	K	[Ar]4s
3	Li	[He]2s	20	Ca	[Ar]4s <sup>2</sup>
4	Be	[He]2s <sup>2</sup>	21	Sc	[Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>
5	B	[He]2s <sup>2</sup> 2p	22	Ti	[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>
6	C	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	23	V	[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>
7	N	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	24	Cr	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s
8	O	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	25	Mn	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s
9	F	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	26	Fe	[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>
10	Ne	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	27	Co	[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>
11	Na	[Ne]3s	28	Ni	[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>
12	Mg	[Ne]3s <sup>2</sup>	29	Cu	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s
13	Al	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p	30	Zn	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>
14	Si	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	31	Ga	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p
15	P	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	32	Ge	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>
16	S	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	33	As	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>
17	Cl	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	34	Se	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>
18	Ar	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	35	Br	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>
19	K	[Ar]4s	36	Kr	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>
			37	Rb	[Kr]5s
			38	Sr	[Kr]5s <sup>2</sup>
			39	Y	[Kr]4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>
			40	Zr	[Kr]4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>
			41	Nb	[Kr]4d <sup>4</sup> 5s
			42	Mo	[Kr]4d <sup>5</sup> 5s
			43	Tc	[Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>
			44	Ru	[Kr]4d <sup>7</sup> 5s
			45	Rh	[Kr]4d <sup>8</sup> 5s
			46	Pd	[Kr]4d <sup>10</sup>
			47	Ag	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s
			48	Cd	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>
			49	In	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p
			50	Sn	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>
			51	Sb	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>
			52	Te	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>



## Sobre el gráfico referencial de Cajas



Se observa que al crecer n:

- la diferencia de energía entre dos niveles sucesivos disminuye
- y el número de subniveles también crece.

Así, por ejemplo, el nivel 4s tiene una energía comparable al del 3d. Aquí se requiere experimentos y cálculos muy finos, para saber cual está por arriba y cual por debajo.

Número atómico	Elemento	Número de electrones en cada grupo									
		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f
1	H	1									
2	He	2									
3	Li		1								
4	Be		2								
5	B			1							
6	C			2							
7	N			3							
8	O			4							
9	F			5							
10	Ne			6							
11	Na		1								
12	Mg		2								
13	Al			1							
14	Si			2							
15	P			3							
16	S			4							
17	Cl			5							
18	Ar			6							
19	K							1			
20	Ca							2			
21	Sc						1				
22	Ti						2				
23	V						3				
24	Cr						4				
25	Mn						5				
26	Fe						6				
27	Co						7				
28	Ni						8				
29	Cu						9				
30	Zn						10				
31	Ga							1			
32	Ge							2			
33	As							3			
34	Se							4			
35	Br							5			
36	Kr							6			

La citada cercanía energética de los niveles 3d y 4s, se manifiesta en la Primera Serie de Metales de Transición (desde el K al Zn).

A tal cercanía se asocia un fuerte efecto sobre las propiedades de estos metales (Fe, Cu, etc.)

Para Z mayores, existen otras series de metales de transición.

## Criterios para la Tabla Periódica de los Elementos

- Desde el SXIX se procuró clasificar a los elementos conocidos en conjuntos de elementos con propiedades similares.
- En seguida se trató de relacionar esto con la estructura; por ejemplo, con el peso atómico y luego con el número atómico.
- Conocida la estructura electrónica externa (eee) de los elementos, estos se clasificaron por Z creciente y por eee similar. Tal es el criterio de clasificación de una Tabla Periódica moderna, en períodos (filas) y grupos (columnas).

## Tabla Periódica

1

H

1.0079

2

He

4.0026

3

Li

6.941

4

Be

9.0122

5

B

10.811

6

C

12.01115

7

N

14.0067

8

O

15.9994

9

F

18.9984

10

Ne

20.179

11

Na

22.9898

12

Mg

24.305

13

Al

26.9815

14

Si

28.086

15

P

30.9738

16

S

32.064

17

Cl

35.453

18

Ar

39.948

19

K

39.098

20

Ca

40.08

21

Sc

44.956

22

Ti

47.88

23

V

50.942

24

Cr

51.996

25

Mn

54.938

26

Fe

55.847

27

Co

58.933

28

Ni

58.69

29

Cu

63.54

30

Zn

65.38

31

Ga

69.72

32

Ge

72.59

33

As

74.9216

34

Se

78.96

35

Br

79.904

36

Kr

83.80

37

Rb

85.47

38

Sr

87.62

39

Y

88.906

40

Zr

91.22

41

Nb

92.906

42

Mo

95.94

43

Tc

(98)

44

Ru

101.07

45

Rh

102.905

46

Pd

106.4

47

Ag

107.87

48

Cd

112.40

49

In

114.82

50

Sn

118.69

51

Sb

121.75

52

Te

127.60

53

I

126.905

54

Xe

131.29

55

Cs

132.905

56

Ba

137.33

57

La

138.905

58

Ce

140.12

59

Pr

140.908

60

Nd

144.24

61

Pm

(145)

62

Sm

150.36

63

Eu

151.96

64

Gd

157.25

65

Tb

158.925

66

Dy

162.50

67

Ho

164.930

68

Er

167.26

69

Tm

168.934

70

Yb

173.04

87

Fr

(223)

88

Ra

226

89

Ac

(227)

90

Th

(232)

91

Pa

(231)

92

U

238.03

93

Np

(237)

94

Pu

(244)

95

Am

(243)

96

Cm

(247)

97

Bk

(247)

98

Cf

(251)

99

Es

(252)

100

Fm

(257)

101

Md

(258)

102

No

(259)

1

H

1.0079

2

He

4.0026

3

Li

6.941

4

Be

9.0122

5

B

10.811

6

C

12.01115

7

N

14.0067

8

O

15.9994

9

F

18.9984

10

Ne

20.179

11

Na

22.9898

12

Mg

24.305

13

Al

26.9815

14

Si

28.086

15

P

30.9738

16

S

32.064

17

Cl

35.453

18

Ar

39.948

19

K

39.098

20

Ca

40.08

21

Sc

44.956

22

Ti

47.88

23

V

50.942

24

Cr

51.996

25

Mn

54.938

26

Fe

55.847

27

Co

58.933

28

Ni

58.69

29

Cu

63.54

30

Zn

65.38

31

Ga

69.72

32

Ge

72.59

33

As

74.9216

34

Se

78.96

35

Br

79.904

36

Kr

83.80

37

Rb

85.47

38

Sr

87.62

39

Y

88.906

40

Zr

91.22

41

Nb

92.906

42

Mo

95.94

43

Tc

(98)

44

Ru

101.07

45

Rh

102.905

46

Pd

106.4

47

Ag

107.87

48

Cd

112.40

49

In

114.82

50

Sn

118.69

51

Sb

121.75

52

Te

127.60

53

I

126.905

54

Xe

131.29

55

Cs

132.905

56

Ba

137.33

57

La

138.905

58

Ce

140.12

59

Pr

140.908

60

Nd

144.24

61

Pm

(145)

62

Sm

150.36

63

Eu

151.96

64

Gd

157.25

65

Tb

158.925

66

Dy

162.50

67

Ho

164.930

68

Er

167.26

69

Tm

168.934

70

Yb

173.04

87

Fr

(223)

88

Ra

226

89

Ac

(227)

90

Th

(232)

91

Pa

(231)

92

U

238.03

93

Np

(237)

94

Pu

(244)

95

Am

(243)

96

Cm

(247)

97

Bk

(247)

98

Cf

(251)

99

Es

(252)

100

Fm

(257)

101

Md

(258)

102

No

(259)

1

H

1.0079

2

He

4.0026

3

Li

6.941

4

Be

9.0122

5

B

10.811

6

C

12.01115

7

N

14.0067

8

O

15.9994

9

F

18.9984

10

Ne

20.179

11

Na

22.9898

12

Mg

24.305

13

Al

26.9815

14

Si

28.086

15

P

30.9738

16

S

32.064

17

Cl

35.453

18

Ar

39.948

19

K

39.098

20

Ca

40.08

21

Sc

44.956

22

Ti

47.88

23

V

50.942

24

Cr

51.996

25

Mn

54.938

26

Fe

55.847

27

Co

58.933

28

Ni

58.69

29

Cu

63.54

30

Zn

65.38

31

Ga

69.72

32

Ge

72.59

33

As

74.9216

34

Se

78.96

35

Br

79.904

36

Kr

83.80

37

Rb

85.47

38

Sr

87.62

39

Y

88.906

40

Zr

91.22

41

Nb

92.906

42

Mo

95.94

43

Tc

(98)

44

Ru

101.07

45

Rh

102.905

46

Pd

106.4

47

Ag

107.87

48

Cd

112.40

49

In

114.82

50

Sn

118.69

51

Sb

121.75

52

Te

127.60

53

I

126.905

54

Xe

131.29

55

Cs

132.905

56

Ba

137.33

57

La

138.905

58

Ce

140.12

59

Pr

140.908

60

Nd

144.24

61

Pm

(145)

62

Sm

150.36

63

Eu

151.96

64

Gd

157.25

65

Tb

158.925

66

Dy

162.50

67

Ho

164.930

68

Er

167.26

69

Tm

168.934

70

Yb

173.04

87

Fr

(223)

88

Ra

226

89

Ac

(227)

90

Th

(232)

91

Pa

(231)

92

U

238.03

93

Np

(237)

94

Pu

(244)

95

Am

(243)

96

Cm

(247)

97

Bk

(247)

98

Cf

(251)

99

Es

(252)

100

Fm

(257)

101

Md

(258)

102

No

(259)

1

H

1.0079

2

He

4.0026

3

Li

6.941

4

Be

9.0122

5

B

10.811

6

C

12.01115

7

N

14.0067

8

O

15.9994

9

F

18.9984

10

Ne

20.179

11

Na

22.9898

12

Mg

24.305

13

Al

26.9815

14

Si

28.086

15

P

30.9738

16

S

32.064

17

Cl

35.453

18

Ar

39.948

19

K

39.098

20

Ca

40.08

21

Sc

44.956

22

Ti

47.88

23

V

50.942

24

Cr

51.996

25

Mn

54.938

26

Fe

55.847

27

Co

58.933

28

Ni

58.69

29

Cu

63.54

30

Zn

65.38

31

Ga

69.72

32

Ge

72.59

33

As

74.9216

34

Se

78.96

35

Br

79.904

36

Kr

83.80

37

Rb

85.47

38

Sr

87.62

39

Y

88.906

40

Zr

91.22

41

Nb

92.906

42

Mo

95.94

43

Tc

(98)

44

Ru

101.07

45

Rh

102.905

46

Pd

106.4

47

Ag

107.87

48

Cd

112.40

49

In

114.82

50

Sn

118.69

51

Sb

121.75

52

Te

127.60

53

I

126.905

54

Xe

131.29

55

Cs

132.905

56

Ba

137.33

57

La

138.905

58

Ce

140.12

59

Pr

140.908

60

Nd

144.24

61

Pm

(145)

62

Sm

150.36

63

Eu

151.96

64

Gd

157.25

65

Tb

158.925

66

Dy

162.50

67

Ho

164.930

68

Er

167.26

69

Tm

168.934

70

Yb

173.04

87

Fr

(223)

88

Ra

226

89

Ac

(227)

90

Th

(232)

91

Pa

(231)

92

U

238.03

93

Np

(237)

94

Pu

(244)

95

Am

(243)

96

Cm

(247)

97

Bk

(247)

98

Cf

(251)

99

Es

(252)

100

Fm

(257)

101

Md

(258)

102

No

(259)

1

H

1.0079

2

He

4.0026

3

Li

6.941

4

Be

9.0122

5

B

10.811

6

C

12.01115

7

N

14.0067

8

O

15.9994

9

F

18.9984

10

Ne

20.179

11

Na

22.9898

12

Mg

24.305

13

Al

26.9815

14

Si

28.086

15

P

30.9738

16

S

32.064

17

Cl

35.453

18

Ar

39.948

19

K

39.098

20

Ca

40.08

21

Sc

44.956

22

Ti

47.88

23

V

50.942

24

Cr

51.996

25

Mn

Figura 2.1. Tabla periódica de los elementos. (Según F. M. Miller, «Chemistry: Structure and Dynamics», McGraw-Hill, 1964, pág. 170.)

## Casos especiales

- El H y el He, átomos muy pequeños, se deben tratar como casos especiales en la Tabla Periódica.
- Algunos argumentos de justificación:
  - el H es el único átomo que, al ionizarse positivamente ( $H^+$ ), queda como un protón desnudo, sin apantallamiento electrónico. También puede pasar a  $H^-$ .
  - el He es un gas noble muy pequeño, con  $Z=2$  y fórmula  $1s^2$ . Todos los otros gases inertes tienen, como vimos, una estructura electrónica  $ns^22p^6$ .

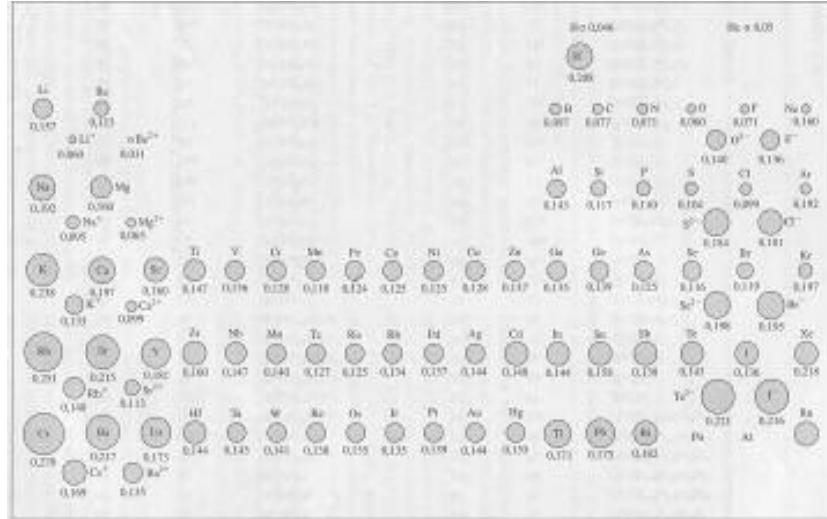
### Metales de la Primera Serie de Transición (Estructura electrónica al estado fundamental)

	3d					4s
K	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>
Ca	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Sc	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Ti	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
V	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Cr	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>
Mn	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Fe	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Co	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Ni	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Cu	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>
Zn	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>

- En este caso los niveles 3d y 4s están muy próximos.
- Por el principio de Hund, en niveles energéticamente próximos, los electrones no apareados presentan spines paralelos.
- Para todos los elementos, a excepción del Cr y del Cu, el nivel 4s se llena antes que el 3d. Esto es, para los primeros, 4s es más estable (menor energía) que 3d.
- En el Cr, los niveles 4s y 3d tienen energías muy similares, y se aplica Hund.
- En el Cu, 3d se llena antes que 4d.
- Finalmente, el Zn tiene suficientes electrones para completar sus orbitales 3d y 4s.

## Tamaños de algunos átomos e iones, en nm.

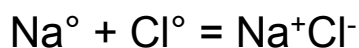
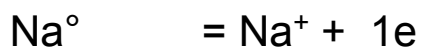
La única regla sencilla es que al bajar por un grupo (n crece) el tamaño crece. Muchos de los elementos más pequeños tienen bajo Z: Segundo Período(n=2) y no-metales del 3er Período(n=3).



## Metales y No Metales

Ejemplos de electro- y electro+:

N O F	<b>Ne</b>	Na Mg Al
P S Cl	<b>Ar</b>	K Cs Sc



crystal iónico de sal común (gema)

# Electronegatividad y Electropositividad

Número Elemento	Elemento	Número de electrones en cada grupo									
		1a	2a	3a	4a	5a	6a	7a	8a	9a	10a
1	H	1									
2	He		2								
3	Li	1									
4	Be		2								
5	B	1	2								
6	C		2	2							
7	N	1	2	2							
8	O		2	2	2						
9	F	1	2	2	2						
10	Ne		2	2	2	2					
11	Na	1									
12	Mg		2								
13	Al	1	2	1							
14	Si		2	2	1						
15	P	1	2	2	1						
16	S		2	2	2	1					
17	Cl	1	2	2	2	2					
18	Ar		2	2	2	2	2				
19	K	1									
20	Ca		2								
21	Sc			1							
22	Ti			2	1						
23	V			2	2						
24	Cr			2	1	1					
25	Mn			2	2	2	1				
26	Fe			2	2	2	2				
27	Co			2	2	2	2				
28	Ni			2	2	2	2				
29	Cu			2	1	1	1				
30	Zn			2							
31	Ga			2	2	1					
32	Ge			2	2	2	1				
33	As			2	2	2	2				
34	Se			2	2	2	2				
35	Br			2	2	2	2	1			
36	Kr			2	2	2	2	2			

Respecto de un gas inerte, para aumentar la estabilidad pareciéndose a ese elemento:

-antes, hay elementos que captan electrones:  
electronegativos o no metálicos.

-después, hay elementos que ceden electrones: electropositivos o metálicos.

-también hay elementos en posiciones intermedias y de comportamiento intermedio a los anteriores; metaloides (B, Si, Ge, etc.).

Ejemplos de electro- y electro+:

NOF

Ne

Na Mg Al

P S Cl

**Ar**

K Cs Sc

# Tabla de Electronegatividades de los Elementos

																H 2,1		
Li 1,0		Be 1,5												B 2,0	C 2,5	N 3,1	O 3,5	F 4,1
Na 1,0		Mg 1,3												Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,4	Cl 2,9
K 0,9	Ca 1,1	Sc 1,2	Ti 1,3	V 1,5	Cr 1,6	Mn 1,6	Fe 1,7	Co 1,7	Ni 1,8	Cu 1,8	Zn 1,7	Ga 1,8	Ge 2,0	As 2,2	Se 2,5	Br 2,8		
Rb 0,9	Sr 1,0	Y 1,1	Zr 1,2	Nb 1,3	Mo 1,3	Tc 1,4	Ru 1,4	Rh 1,5	Pd 1,4	Ag 1,4	Cd 1,5	In 1,5	Sn 1,7	Sb 1,8	Te 2,0	I 2,2		
Cs 0,9	Ba 0,9	La 1,1	Hf 1,2	Ta 1,4	W 1,4	Re 1,5	Os 1,5	Ir 1,6	Pt 1,5	Au 1,4	Hg 1,5	Tl 1,5	Pb 1,6	Bi 1,7	Po 1,8	At 2,0		
Fr 0,9	Ra 0,9	Ac 1,0	Lantánidos: Actínidos:		1,0-1,2 1,0-1,2													

**Tabla periódica de los elementos**

**ELEMENTOS DE LOS GRUPOS PRINCIPALES**

IA (1)
I H (1.008)
IIA (2)
Li (6.941)
Be (9.012)
B (10.81)
C (12.01)
N (14.01)
O (16.00)
F (18.99)
Ne (20.18)

■ Metales (grupos principales)  
■ Metales (transición)  
■ Metales (transición interna)  
■ Metaloides  
■ No metales

**ELEMENTOS DE LOS GRUPOS PRINCIPALES**

IIIA (13)	IVA (14)	VA (15)	VIA (16)	VIIA (17)	VIIIA (18)
B (10.81)	C (12.01)	N (14.01)	O (16.00)	F (18.99)	Ne (20.18)
Al (26.98)	Si (28.09)	P (30.97)	S (32.06)	Cl (35.45)	Ar (39.95)
Ga (69.72)	Ge (72.64)	As (74.92)	Se (78.96)	Br (79.90)	Kr (83.80)
In (114.8)	Sn (118.7)	Sb (121.8)	Te (127.6)	I (126.9)	Xe (131.3)
Tl (204.4)	Pb (207.2)	Bi (209.0)	Po (209)	At (210)	Rn (222)

**ELEMENTOS DE TRANSICIÓN**

Periodo	IIIB (3)	IVB (4)	VB (5)	VIB (6)	VIB (7)	VIB (8)	VIB (9)	VIB (10)	VIB (11)	VIB (12)
4	Sc (44.96)	Ti (47.88)	V (50.94)	Cr (52.00)	Mn (54.94)	Fe (55.85)	Co (58.93)	Ni (58.69)	Cu (63.55)	Zn (65.38)
5	Y (88.91)	Zr (91.22)	Nb (92.91)	Mo (95.94)	Tc (98.91)	Ru (101.07)	Rh (102.91)	Pd (106.42)	Ag (107.87)	Cd (112.41)
6	La (138.91)	Hf (178.49)	Ta (180.95)	W (183.84)	Re (186.21)	Os (190.23)	Ir (192.22)	Pt (195.08)	Au (196.97)	Hg (200.59)
7	Ac (227.03)	Rf (261.10)	Hf (260.11)	Ta (260.11)	W (261.10)	Re (261.10)	Os (261.10)	Ir (261.10)	Pt (261.10)	Au (261.10)

**ELEMENTOS DE TRANSICIÓN INTERNA**

Periodo	Lantánidos	Actínidos
6	La (138.91)	Ac (227.03)
7	Ce (140.12)	Th (232.04)
8	Pr (140.91)	Pa (231.04)
9	Nd (144.24)	U (238.03)
10	Pm (144.91)	Np (237.05)
11	Sm (150.36)	Pu (244.06)
12	Eu (151.96)	Am (243.06)
13	Gd (157.25)	Cm (247.07)
14	Tb (158.93)	Bk (247.07)
15	Dy (162.50)	Cf (251.08)
16	Ho (164.93)	Es (252.08)
17	Er (167.26)	Fm (257.10)
18	Tm (168.93)	Mn (258.10)
19	Yb (173.05)	Lr (260.11)
20	Lu (174.97)	

## Resumen: estructura y propiedades químicas de metales y no metales

Metales	No metales
1. Tienen algunos electrones en niveles externos, normalmente tres o menos	1. Tienen cuatro o más electrones en niveles externos
2. Forman cationes por pérdida de electrones	2. Forman aniones por ganancia de electrones
3. Tienen bajas electronegatividades	3. Tienen elevadas electronegatividades

Otra Tabla de electronegatividad, más antigua (Linus Pauling, 1939.

[illegible]

## Evolución de la electronegatividad en un período.

- Inmediatamente después de un gas noble (izquierda de la tabla) se tiene los elementos más metálicos.
- Inmediatamente antes de un gas noble (derecha de la tabla, sin considerar la columna de gases nobles) se tiene los elementos más electronegativos.
- De esta manera, en un período (fila) de la tabla periódica, la electronegatividad crece de izquierda a derecha,

## Evolución de la electronegatividad en un grupo.

- En un grupo, los elementos tienen similar tipo de estructura electrónica externa. Por ejemplo, los elementos del Grupo II, tienen fórmula externa  $ns^2$ , donde  $n$  es el número cuántico del nivel más externo del elemento respectivo
- En un grupo al ir desde arriba hacia abajo, el  $n$  crece, y se sabe que a mayor  $n$  la función  $E(n)$  crece. Así, mientras mayor es  $n$ , más grande es el átomo y es más fácil extraer los electrones más externos.
- Por todo lo anterior, en un grupo, al ir desde abajo hacia arriba, la electronegatividad crece.

## Periodicidad

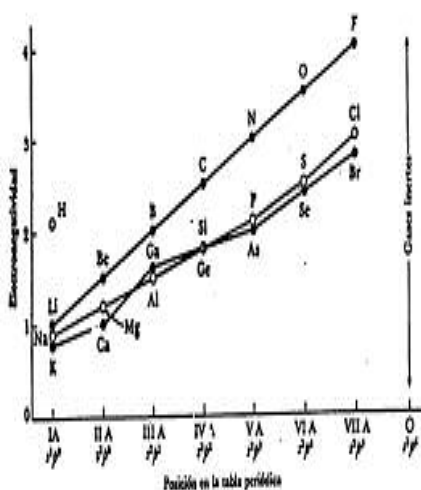


FIG. 2-3 Electronegatividad de algunos elementos en función de su posición en la tabla periódica.

En la Tabla Periódica, en primera aproximación:

- Al recorrer una fila hacia la derecha, la electronegatividad crece.
- Al recorrer una columna hacia arriba, la electronegatividad crece.

(Los metales de transición, son algo más complicados).



# Enlaces

## 2.4.1. Enlaces atómicos primarios

Los enlaces atómicos primarios, en los cuales intervienen grandes fuerzas interatómicas, pueden subdividirse en las tres clases siguientes:

1. **Enlaces iónicos.** En este tipo de enlace se ponen en juego fuerzas interatómicas relativamente grandes debidas a la transferencia de un electrón de un átomo a otro, produciéndose iones que se mantienen unidos por fuerzas coulombianas (atracción de iones cargados positiva y negativamente). El enlace iónico es un enlace no direccional y relativamente fuerte.
2. **Enlaces covalentes.** Corresponden a fuerzas interatómicas relativamente grandes creadas por la compartición de electrones para formar un enlace con una dirección localizada.
3. **Enlaces metálicos.** Involucran fuerzas interatómicas relativamente grandes creadas mediante la compartición de electrones deslocalizados para formar un enlace fuerte no direccional entre los átomos.

## 2.4.2. Enlaces atómicos secundarios y moleculares

1. **Enlaces de dipolo permanente.** Corresponden a enlaces intermoleculares relativamente débiles que se forman entre moléculas que poseen dipolos permanentes. Un dipolo en una molécula existe debido a la asimetría en la distribución de su densidad electrónica.
2. **Enlaces de dipolo instantáneo.** Átomos con distribución asimétrica de densidades electrónicas en torno a sus núcleos, son susceptibles de formar entre ellos enlace de dipolo eléctrico muy débil. Este tipo de enlace se llama instantáneo debido a que la densidad electrónica está continuamente cambiando con el tiempo.