

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

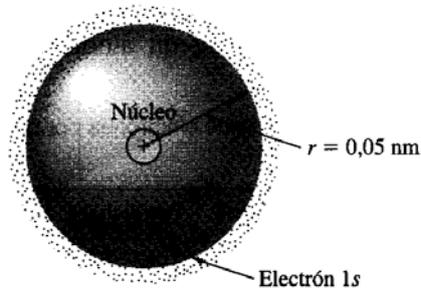
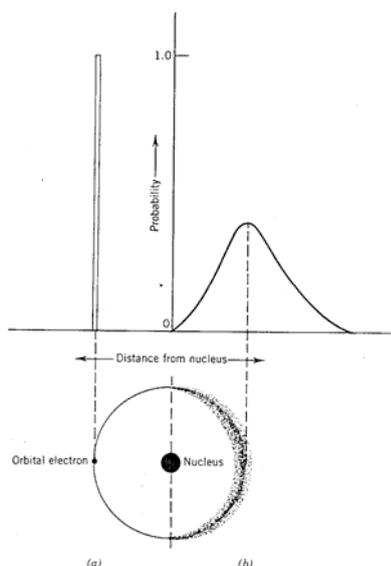


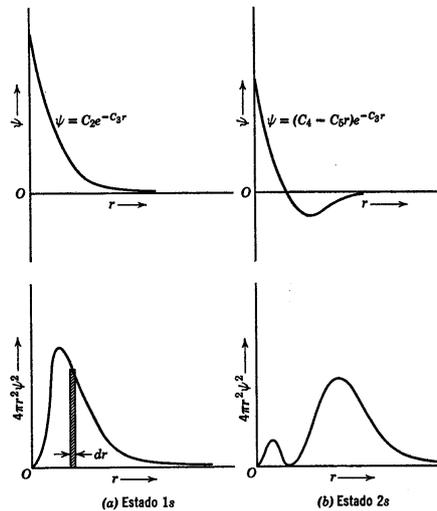
FIGURA 2.5. Nube de carga electrónica (esquemática) alrededor del núcleo de un átomo de hidrógeno en su estado fundamental. El círculo exterior de radio $r = 0,05$ nm corresponde al radio de la primera órbita de Bohr (es decir, para $n = 1$) e indica la región más probable de encontrar al electrón.

Orbital tipo s ($l = 0$)

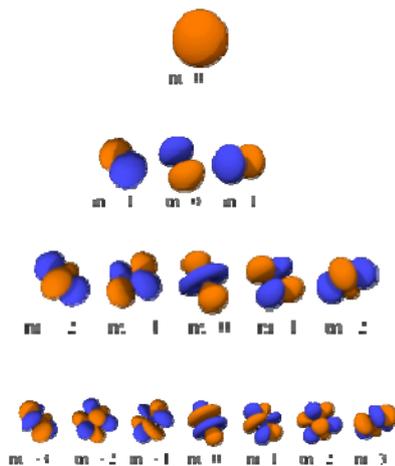


- Representación de un orbital tipo s, según: a) el Modelo de Bohr (2D), y b) el Modelo Moderno (3D).
- En el Modelo Moderno los orbitales corresponden a nubes de probabilidad. Para el caso del orbital s, la probabilidad de encontrar un electrón en un punto del espacio ($\psi^2 dV$) depende sólo de r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

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

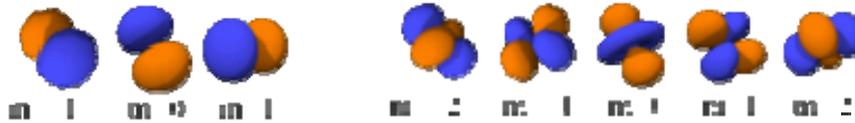


Orbitales s, p, d y f. (Modelo Moderno)



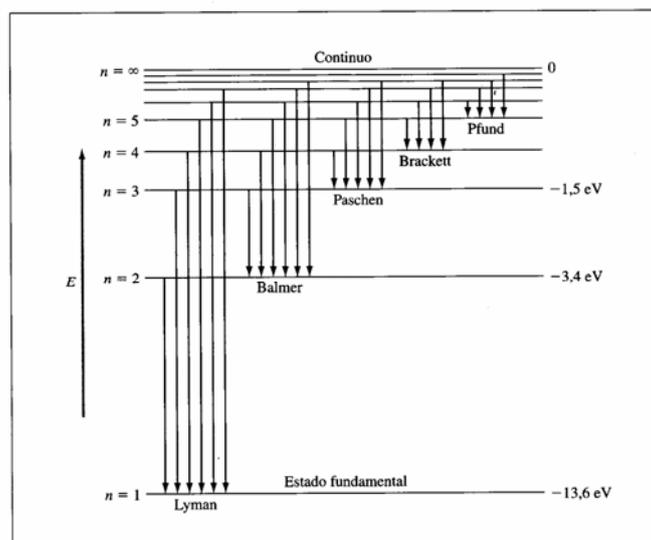
- Un orbital queda definido por los números cuánticos l , m y n . Representa la distribución de probabilidad de ubicación de un electrón en el espacio.
- El único tipo de orbital que individualmente tiene simetría esférica es un orbital tipo s.

Orbitales completos y simetría electrónica esférica

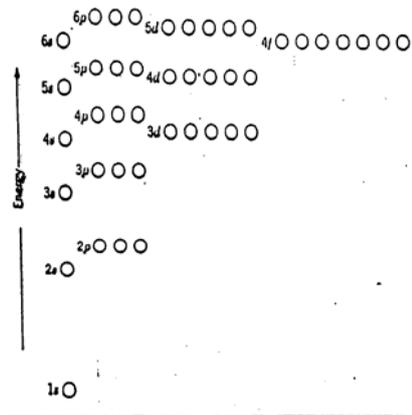


- Considere los orbitales tipo p ($l = 1$) de una “capa” $n > 1$.
- ¿Cuántos electrones (e) completan ese conjunto?
Respuesta: 6 e . ¿Por qué? (Referirse al Principio de Exclusión de Pauli)
- Para los orbitales p , con desde 1 a 5 e , no se tiene simetría electrónica esférica.
- Un conjunto de orbitales 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)



- Estructura genérica de cajas, para representar los niveles energéticos de un elemento cualquiera, aproximadamente.
- 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.

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 spines opuestos. (Consecuencia del Principio de Exclusión de Pauli)
- En un conjunto de orbitales $(n, l$ y $m = -l, \dots, +l)$, los electrones presentar spines paralelos. (Hund). (De esta manera se tiene una ligera disminución de energía).
- Ejemplo: fórmula electrónica desarrollada del Nitrógeno:

Estructura electrónica de algunos elementos al estado fundamental

Ejemplos:

H°	(Z= 1)	= 1s ¹
He°	(Z= 2)	= 1s ²
Li°	(Z= 3)	= 1s ² 2s ¹
Be°	(Z= 4)	= 1s ² 2s ²
C°	(Z= 6)	= 1s ² 2s ² 2p _x ¹ 2p _y ¹ 2p _z ⁰
N°	(Z= 7)	= 1s ² 2s ² 2p _x ¹ 2p _y ¹ 2p _z ¹
Ne°	(Z= 10)	= 1s ² 2s ² 2p ⁶
Na°	(Z= 11)	= 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s 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.

Es decir, son muy estables al estado fundamental; no tienden a ceder ni a captar electrones.

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 Rn°):
 $ns^2 2p^6$, donde n es el número cuántico principal mayor (más externo) del respectivo átomo.

Ejemplo:

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

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)
- Los anteriores fundamentos justifican la siguiente fórmula abreviada:

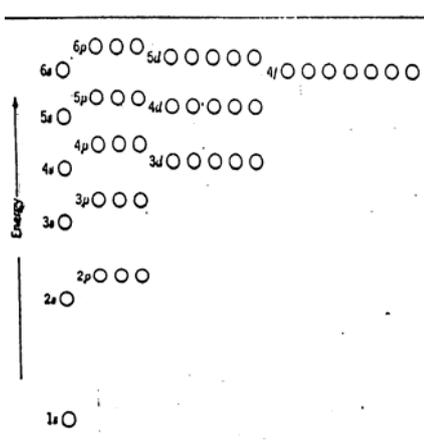
$\text{Na}^\circ (Z=11) = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 = \text{Ne}^\circ 3s^1$

Estructuras Electrónicas de Algunos Elementos al Estado Fundamental

Configuraciones electrónicas de los elementos

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

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	2	1								
4	Be	2	2								
5	B	2	2	1							
6	C	2	2	2							
7	N	2	2	3							
8	O	2	2	4							
9	F	2	2	5							
10	Ne	2	2	6							
11	Na	2	2		1						
12	Mg	2	2		2						
13	Al	2	2		2	1					
14	Si	2	2		2	2					
15	P	2	2		2	3					
16	S	2	2		2	4					
17	Cl	2	2		2	5					
18	Ar	2	2		2	6					
19	K						1				
20	Ca						2				
21	Sc					1	2				
22	Ti					2	2				
23	V					3	2				
24	Cr					5	1				
25	Mn					5	2				
26	Fe					6	2				
27	Co					7	2				
28	Ni					8	2				
29	Cu					10	1				
30	Zn						2				
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).

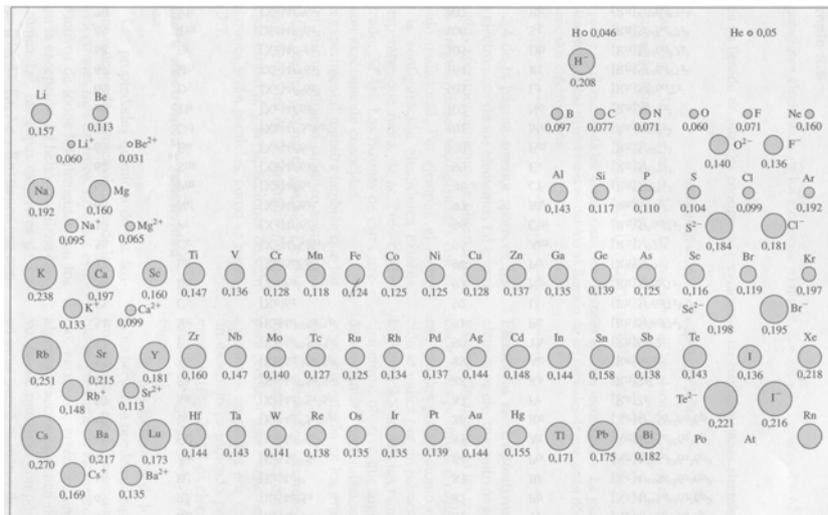
Metales de la Primera Serie de Transición (Estructura electrónica al estado fundamental)

	3d					4s
K	□	□	□	□	□	↑
Ca	□	□	□	□	□	↑↓
Sc	↑	□	□	□	□	↑↓
Ti	↑	↑	□	□	□	↑↓
V	↑	↑	↑	□	□	↑↓
Cr	↑	↑	↑	↑	↑	↑
Mn	↑	↑	↑	↑	↑	↑↓
Fe	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑↓
Co	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑↓
Ni	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑↓
Cu	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑
Zn	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓

- 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).

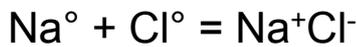
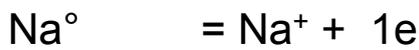


Metales y No Metales

Ejemplos de electro- y electro+:

N O F **Ne** Na Mg Al

P S Cl **Ar** K Cs Sc



crystal iónico de sal común (gema)

Electronegatividad y Electropositividad

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+:

N O F **Ne** Na Mg Al

P S Cl **Ar** K Cs Sc

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

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: 1,0-1,2 Actínidos: 1,0-1,2																																		

Tabla periódica de los elementos

ELEMENTOS DE LOS GRUPOS PRINCIPALES

IA (1)
H (1,008)

IIA (2)
Li (6,941) Be (9,012)

ELEMENTOS DE TRANSICIÓN

IIIB (3) IVB (4) VB (5) VIB (6) VIIB (7) VIIIB (8) VIIIB (9) VIIIB (10) IB (11) IIB (12)

ELEMENTOS DE LOS GRUPOS PRINCIPALES

VIIIA (18)
He (4,003)

VIA (16)
O (16,00)

VIA (17)
F (19,00)

Legenda:

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

Periodo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H (1,008)	He (4,003)																
2	Li (6,941)	Be (9,012)	B (10,81)	C (12,01)	N (14,01)	O (16,00)	F (19,00)	Ne (20,18)										
3	Na (22,99)	Mg (24,31)	Al (26,98)	Si (28,09)	P (30,97)	S (32,07)	Cl (35,45)	Ar (39,95)										
4	K (39,10)	Ca (40,08)	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 (65,39)	Ga (69,72)	Ge (72,61)	As (74,92)	Se (78,96)	Br (79,90)	Kr (83,80)
5	Rb (85,47)	Sr (87,62)	Y (88,91)	Zr (91,22)	Nb (92,91)	Mo (95,94)	Tc (98)	Ru (101,1)	Rh (102,9)	Pd (106,4)	Ag (107,9)	Cd (112,4)	In (114,8)	Sn (118,7)	Sb (121,8)	Te (127,6)	I (126,9)	Xe (131,3)
6	Cs (132,9)	Ba (137,3)	La (138,9)	Hf (178,5)	Ta (180,9)	W (183,9)	Re (186,2)	Os (196,2)	Ir (192,2)	Pt (195,1)	Au (197,0)	Hg (200,6)	Tl (204,4)	Pb (207,2)	Bi (209,0)	Po (209)	At (210)	Rn (222)
7	Fr (223)	Ra (226)	Ac (227)	Rf (261)	Db (262)	Sg (266)	Bh (262)	Hs (265)	Mt (266)	Uun (272)	Uub (277)	Uuq (285)	Uuh (289)	Uuo (289)	Uuh (289)	Uuo (289)	Uuh (289)	Uuo (289)
ELEMENTOS DE TRANSICIÓN INTERNA																		
6	Lantánidos		58 Ce (140,1)	59 Pr (140,9)	60 Nd (144,2)	61 Pm (145)	62 Sm (150,4)	63 Eu (152,0)	64 Gd (157,3)	65 Tb (158,9)	66 Dy (162,5)	67 Ho (164,9)	68 Er (167,3)	69 Tm (168,9)	70 Yb (173,0)	71 Lu (175,0)		
7	Actínidos		90 Th (232,0)	91 Pa (231)	92 U (238,0)	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)		

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).

IA																	0				
1 H 2.1																	2 He -				
3 Li 1.0	4 Be 1.5															5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2			13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -												
		III B	IV B	V B	VIB	VIII			IB	II B											
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.5	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -				
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -				
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -				
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7																			

Periodicidad

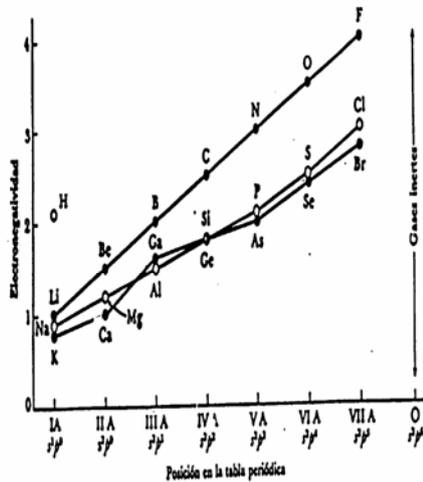


FIG. 2-3 Electronegatividad de algunos elementos en función de su posición en la tabla periódica.

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, en particular, son 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.