

CAPÍTULO 3
EL ÁTOMO MECANO-CUÁNTICO
Y SISTEMA PERIÓDICO



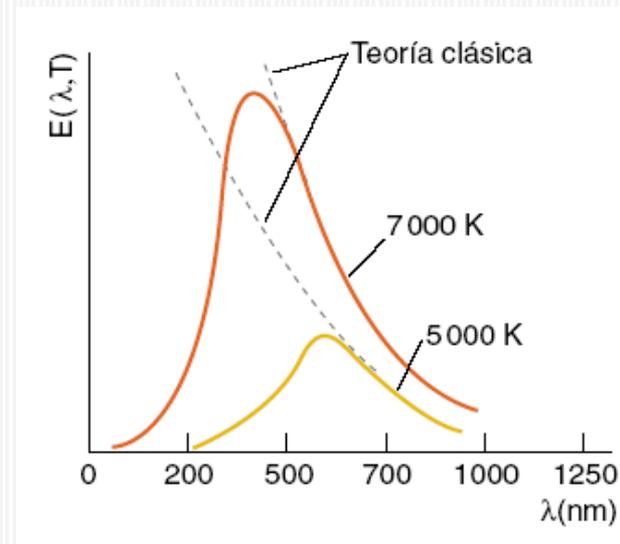
ORÍGENES DE LA TEORÍA CUÁNTICA

LOS CUANTOS DE PLANCK

Max Planck en 1900, propuso que la energía sólo puede ser liberada (o absorbida) por los átomos en "paquetes" de cierto tamaño mínimo.

$$E_{\text{cuanto}} = h \cdot \nu$$

Planck obtuvo la ecuación correcta de la distribución de energía por parte de objetos calientes.



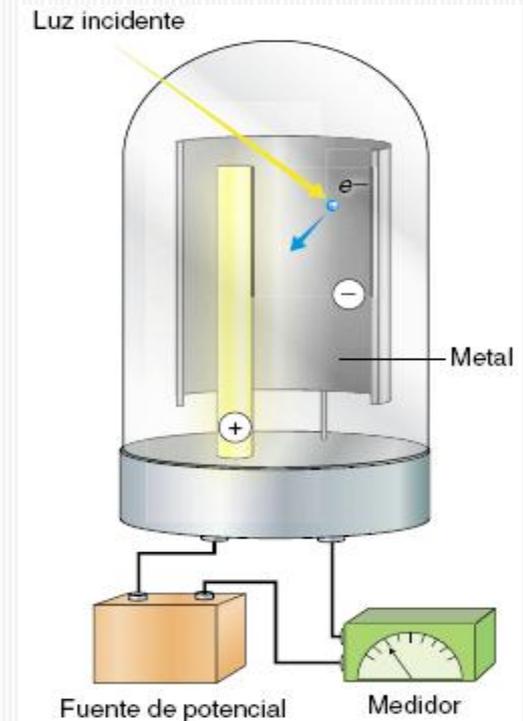
h , llamada constante de Planck ($6,63 \cdot 10^{-34}$ J-s)

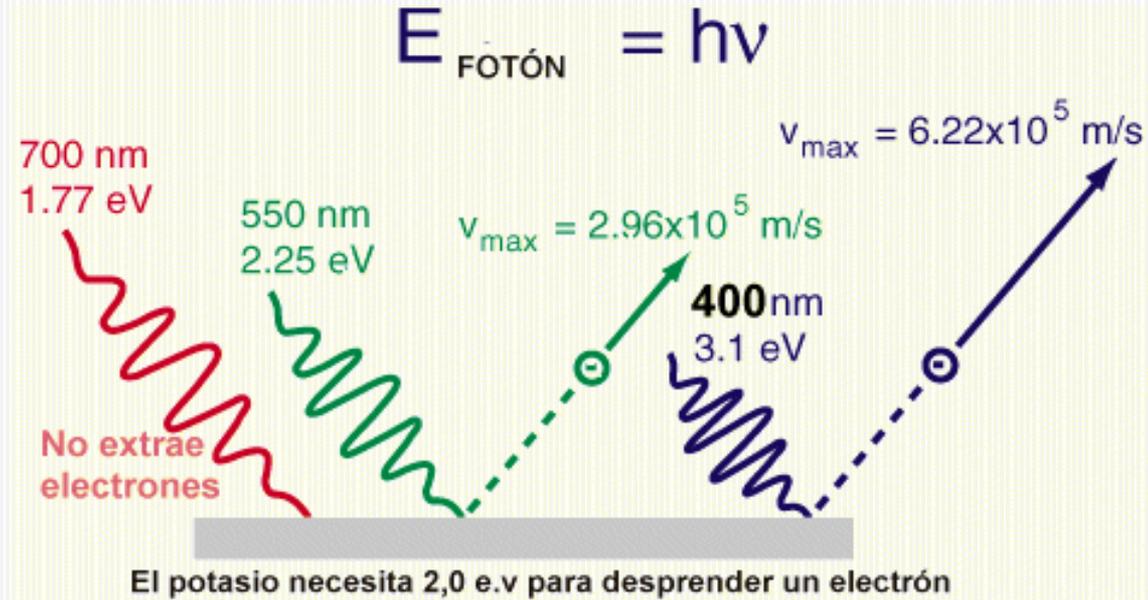
EL EFECTO FOTOELÉCTRICO

En 1905, Albert Einstein usó la teoría cuántica de Planck para explicar el efecto fotoeléctrico.

Supuso que la energía radiante que incide sobre la superficie del metal se comporta como un conjunto de paquetes fundamentales de energía.

Cada paquete, que es como una “partícula” de energía, se denomina fotón.





El valor de la energía para estos electrones será: $E = h\nu$

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2}mv^2$$

\swarrow \downarrow \searrow
 Energía del electrón emitido = Energía umbral + El exceso (aparece como energía cinética del electrón emitido)

DUALIDAD ONDA - PARTÍCULA

Louis de Broglie pensó que, al igual que la luz, pese a ser de naturaleza ondulatoria, presentaba muchas veces una componente corpuscular, podía ser que la materia normal, tratada siempre como partícula, tuviese también una naturaleza ondulatoria.

RELACIÓN DE DE BROGLIE

De Broglie en 1924 predijo que “Toda materia al igual que la energía, presenta un carácter dualístico de onda-partícula”

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG

Werner Heisenberg (1926): “ Es imposible conocer con exactitud y al mismo tiempo, el momento y la posición del electrón”.

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{h}{4\pi}$$

Δp = incertidumbre o error en la medida del momento
 Δx = incertidumbre o error en la medida de la posición

ECUACIÓN DE SCHRODINGER

Erwin Schrodinger (1926) propuso una ecuación, ahora conocida como **ecuación de onda** de Schrodinger, la cual describe el comportamiento de un electrón dotándole de la naturaleza ondulatoria y corpuscular simultáneamente.

Su trabajo representó un nuevo enfoque para tratar con las partículas subatómicas, conocido como ***mecánica cuántica o mecánica ondulatoria.***

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

(Ecuación diferencial de segundo orden)

Donde:

Ψ (psi) : función de onda del electrón

m : masa del electrón

E : energía total de un electrón

V : energía potencial de un electrón

Ψ^2 : probabilidad de encontrar al electrón en cierta región.

La solución de esta ecuación da lugar a una serie de funciones matemáticas llamadas **funciones de onda** que describen la onda de materia del electrón.

$$\Psi = f(n, \ell, m_\ell)$$

Dirac - Jordan completaron la ecuación de Schrodinger, incorporando la teoría general de la relatividad de Einstein a la mecánica cuántica y es precisamente donde aparece un cuarto parámetro cuántico denominado “spin” (m_s).

$$\Psi = f(n, \ell, m_\ell, m_s)$$

EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

La solución de la ecuación de Schrodinger para el átomo de hidrógeno produce un conjunto de funciones de onda con sus correspondientes energías. Estas funciones de onda se denominan orbitales.

NÚMEROS CUÁNTICOS

Describen los estados energéticos del electrón y también proporcionan tres características fundamentales del orbital.

Un electrón queda definido por los cuatro números cuánticos:

n , ℓ , m_ℓ y m_s

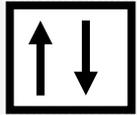
NOMBRE	SIGNIFICADO	CARACTERÍSTICA FÍSICA	VALORES PERMITIDOS
PRINCIPAL (n)	NIVEL	TAMAÑO	CUALQUIER VALOR ENTERO
DE MOMENTO ANGULAR O SECUNDARIO O AZIMUTAL (l)	SUBNIVEL	FORMA	CUALQUIER VALOR ENTERO ENTRE 0 y $(n-1)$
MAGNÉTICO (m_l)	ORBITAL	ORIENTACIÓN	CUALQUIER VALOR ENTERO ENTRE $-l$ y $+l$
SPIN (m_s)	ELECTRÓN	GIRO DEL ELECTRÓN	SOLAMENTE DOS VALORES $(+1/2, -1/2)$

ORBITALES ATÓMICOS

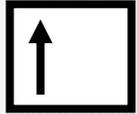
Se llama **ORBITAL** a la representación completa de la probabilidad de hallar un electrón en diversos puntos de un espacio delimitado

l	NOMBRE DEL ORBITAL	FORMA
0	s	ESFÉRICA
1	p	2 LÓBULOS
2	d	4 LÓBULOS
3	f	FORMAS DIFÍCILES
3	g	DE REPRESENTAR
5	h	.
.	.	.
.	.	.
.	.	.

ORBITAL



APAREADO O LLENO O SATURADO



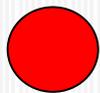
DESAPAREADO O SEMILLENO



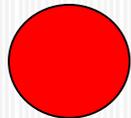
VACÍO

REPRESENTACIÓN DE ORBITALES

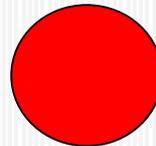
ORBITAL s ($l = 0$)



1s



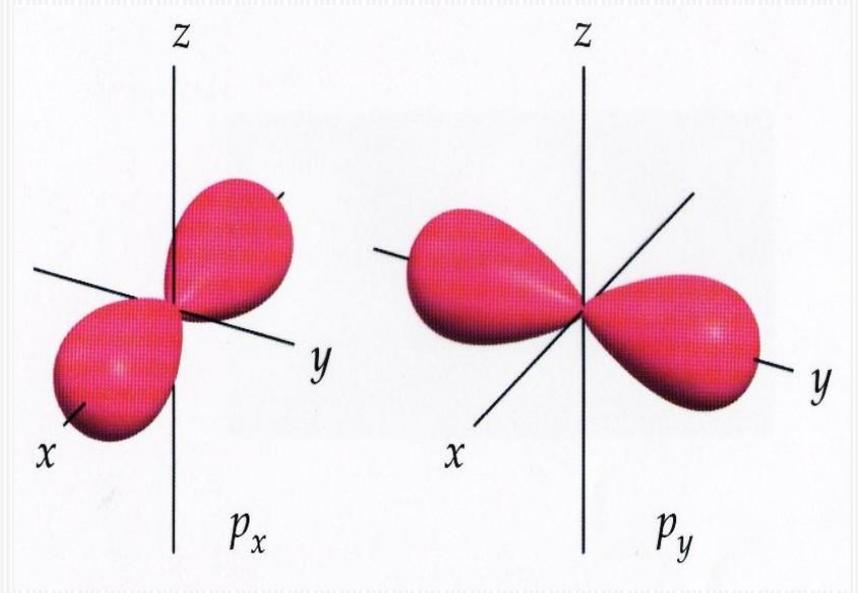
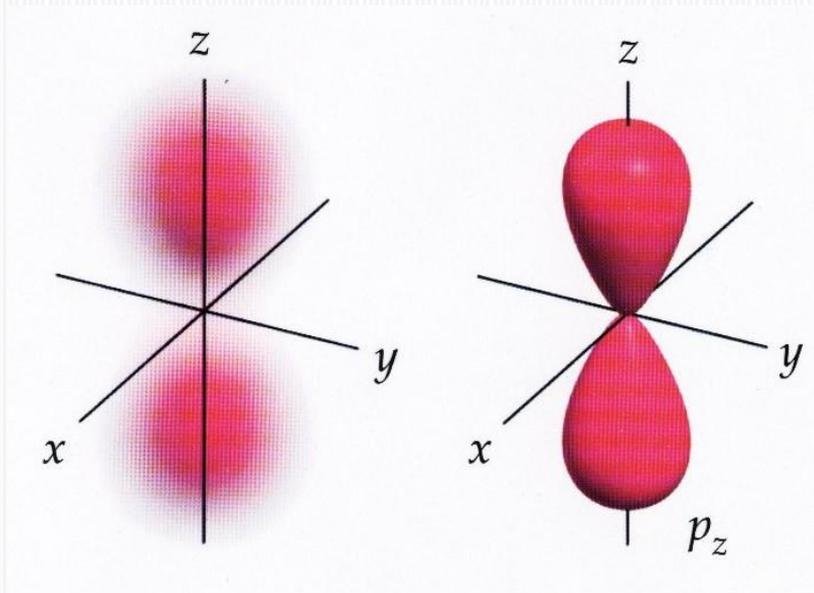
2s



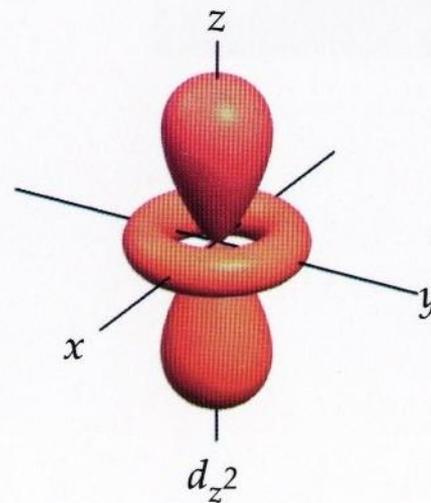
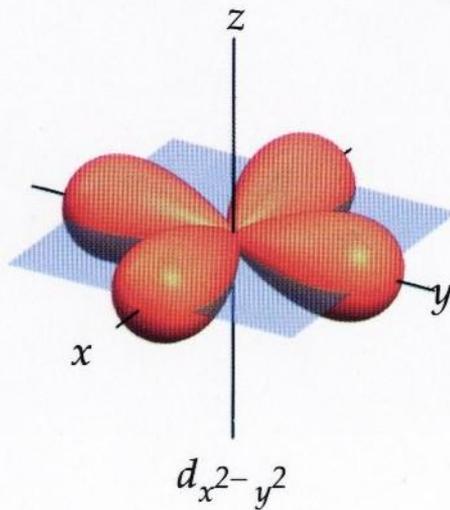
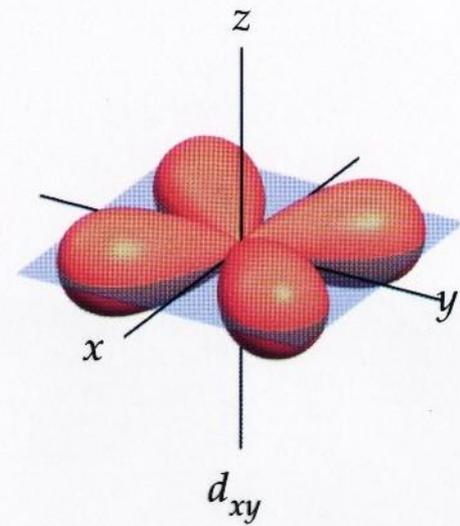
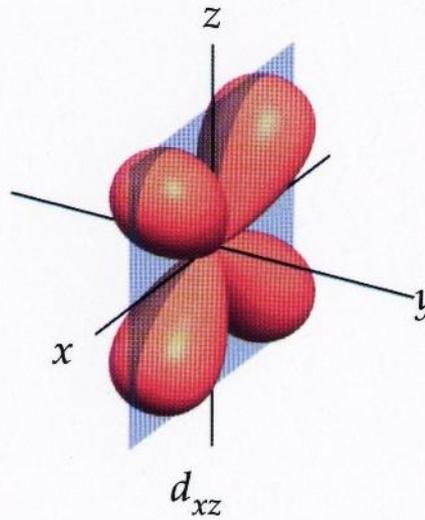
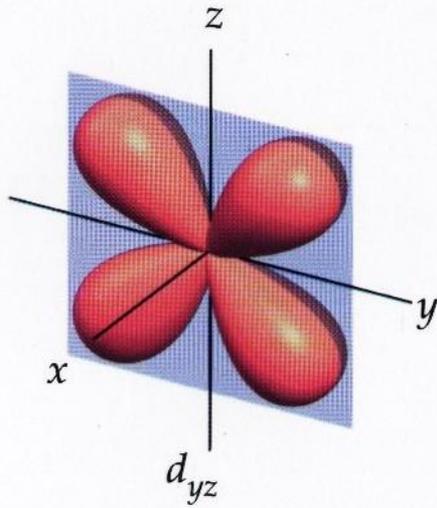
3s

...

ORBITAL p ($\ell = 1$)



ORBITAL d ($\ell = 2$)



ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS

El modelo de la mecánica cuántica no sería muy útil si no pudiéramos extender a otros átomos. Los orbitales atómicos de un átomo con muchos electrones son parecidos a los del átomo de hidrógeno.

En un átomo polielectrónico, para un valor dado de n , la energía de un orbital aumenta cuando se incrementa el valor de l .

Todos los orbitales de una subcapa dada (como los cinco orbitales 3d, por ejemplo) tienen la misma energía.

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS

CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

La estructura electrónica de un átomo se indica mediante su configuración electrónica.

La configuración electrónica es la forma en que los electrones se distribuyen entre los diferentes orbitales de un átomo.

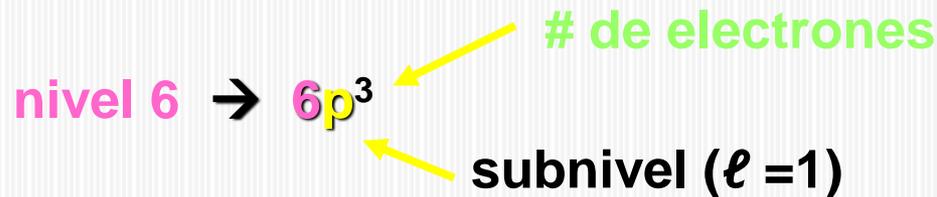
Se siguen los siguientes principios:

- Principio de mínima energía (aufbau)
- Principio de máxima multiplicidad (regla de Hund)
- Principio de exclusión de Pauli.

PRINCIPIO DE MÍNIMA ENERGÍA (AUFBAU)

“**Aufbau**” palabra alemana que significa construcción.

“Los electrones se distribuyen en orden creciente de la energía relativa (E_R) de los subniveles “.



PRINCIPIO DE MÁXIMA MULTIPLICIDAD (REGLA DE HUND)

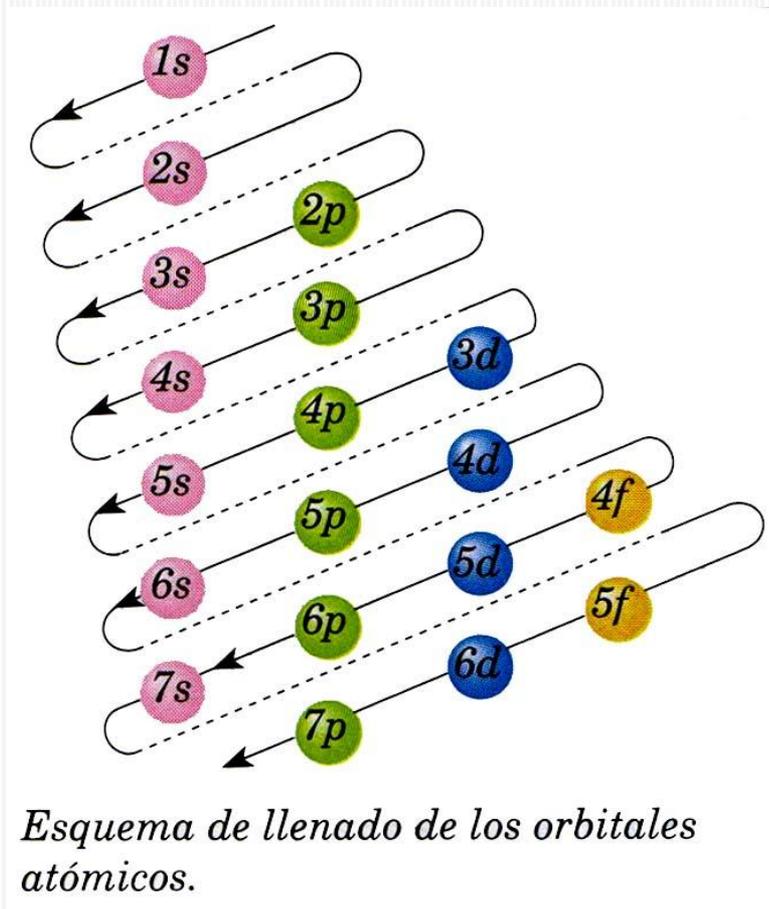
“El orden de llenado en un subnivel es aquel en el que hay el máximo número de orbitales semillenos. Los elementos de estos orbitales tienen los spines paralelos”

PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI

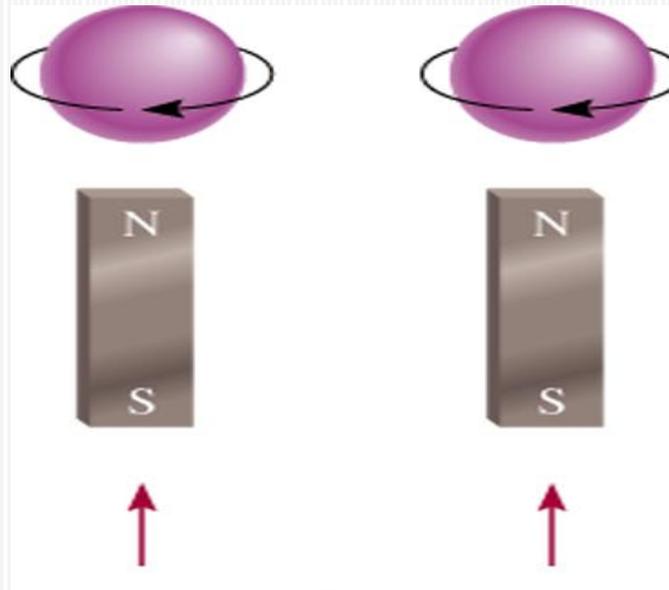
Wolfgang Pauli (1926)

“En un átomo no puede haber dos electrones que tengan iguales los cuatro números cuánticos”.

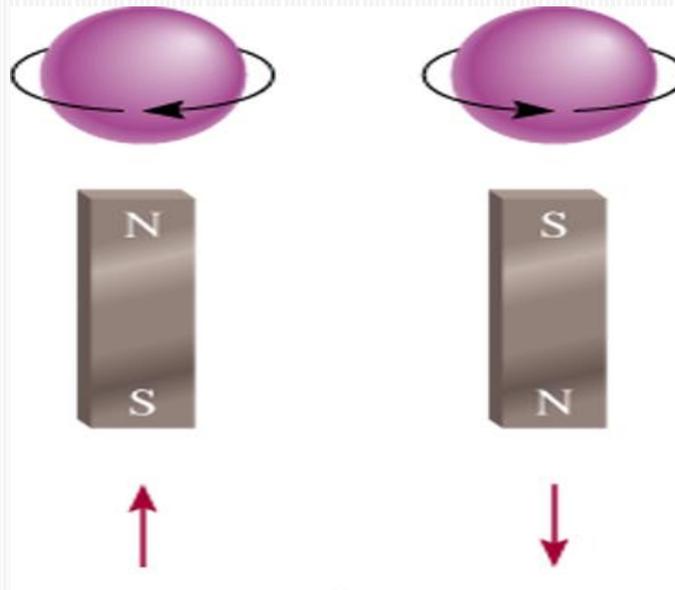
REALIZACIÓN DE UNA CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA



SUSTANCIA PARAMAGNÉTICA .- Es aquella que es atraída por un imán y se les reconoce porque tienen electrones desapareados.



SUSTANCIA DIAMAGNÉTICA .- Es aquella que es débilmente repelida o no son atraídas por un imán, en este caso no tiene electrones desapareados.



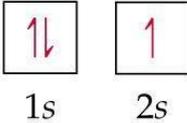
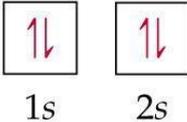
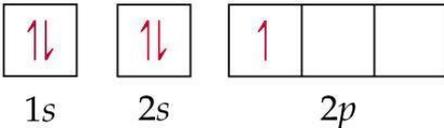
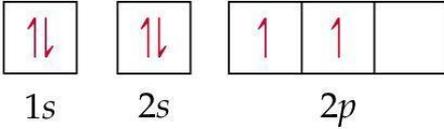
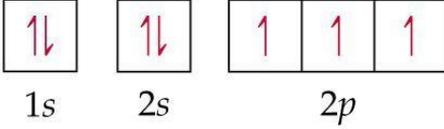
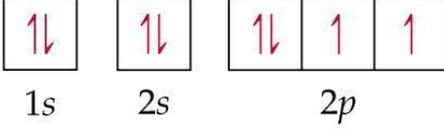
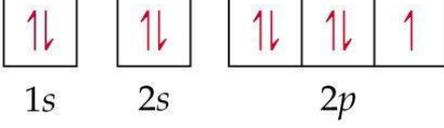
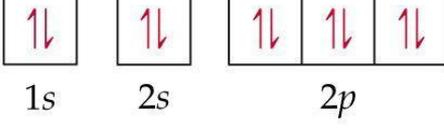
MOMENTO MAGNÉTICO (μ)

Es la fuerza con que es atraída una sustancia paramagnética por un campo magnético externo.

La susceptibilidad paramagnética de una sustancia se mide en términos de un momento magnético (μ), que se relaciona con el número de electrones no apareados (i).

$$\mu = \sqrt{i(i+2)}$$

i = número de electrones desapareados

Símbolo (nº e)	Configuración electrónica	Diagrama de orbitales
Li (3)	$1s^2 2s^1$	 $1s$ $2s$
Be (4)	$1s^2 2s^2$	 $1s$ $2s$
B (5)	$1s^2 2s^2 2p^1$	 $1s$ $2s$ $2p$
C (6)	$1s^2 2s^2 2p^2$	 $1s$ $2s$ $2p$
N (7)	$1s^2 2s^2 2p^3$	 $1s$ $2s$ $2p$
O (8)	$1s^2 2s^2 2p^4$	 $1s$ $2s$ $2p$
F (9)	$1s^2 2s^2 2p^5$	 $1s$ $2s$ $2p$
Ne (10)	$1s^2 2s^2 2p^6$	 $1s$ $2s$ $2p$

CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA ESTABLE

Sucede cuando un átomo completa ocho electrones en su última capa.

CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA KERNEL (Simplificada)

“Kernel” palabra alemana que significa corazón.

Se puede realizar la distribución electrónica simplificada haciendo uso de la configuración electrónica de un gas noble, más cercano al elemento.

Ejemplo: ${}_{13}\text{Al} : [\text{Ne}] 3s^2 3p^1$

donde: **[Ne]** representa el Kernel de neón.
(centro de gas noble)

CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA Y TABLA PERIÓDICA

Las configuraciones electrónicas de los elementos están relacionadas con su posición en la tabla periódica, la cual está estructurada de modo que los elementos que tienen un mismo patrón de configuración de los electrones de la capa externa (de valencia) estén dispuestos en columnas.

ANTECEDENTES

Los químicos siempre han sentido la necesidad de clasificar los elementos para facilitar su estudio. Se intentaron varias clasificaciones, casi todas con defectos.

LEY PERIÓDICA DE MENDELEEV

Dimitri Mendeleev 1869: “Las propiedades de los elementos químicos están en función periódica de sus pesos atómicos”

LOTHAR MEYER: Clasifica a los elementos por sus propiedades físicas.

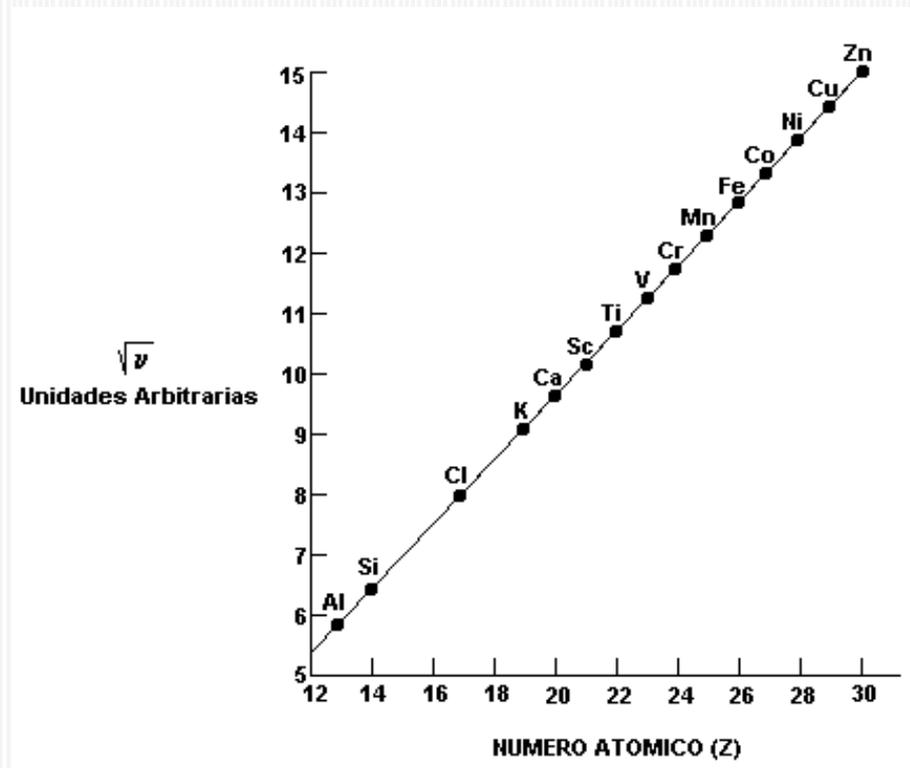
D. MENDELEEV : Clasifica a los elementos por sus propiedades químicas.

LEY PERIÓDICA MODERNA

Henry Moseley (1913): Basándose en experimentos con rayos X determinó los números atómicos de los elementos.

$$\sqrt{\frac{1}{\lambda}}$$

$\sqrt{\nu}$
Unidades Arbitrarias



Ley Periódica: “ Las propiedades físicas y químicas de los elementos son función periódica de sus números atómicos ”.

$$\sqrt{\frac{1}{\lambda}} = a (Z - b)$$

o

$$\frac{1}{\lambda} = mZ^2 + b$$

donde: λ : longitud de onda de rayos X
a y b (m y b) : constantes que dependen del elemento químico

TABLA PERIÓDICA MODERNA (FORMA LARGA)

Fue propuesta por A. Werner (1895), es una modificación de la Tabla de Mendeleev, en donde se utiliza los conceptos actuales cuánticos de los niveles de energía y los subniveles energéticos.

La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada, **IUPAC**, ha establecido una simbología para los elementos químicos, creando un lenguaje universal.

DISPOSICIÓN DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS

Los elementos están ordenados en función creciente de sus números atómicos y se hallan distribuidos:

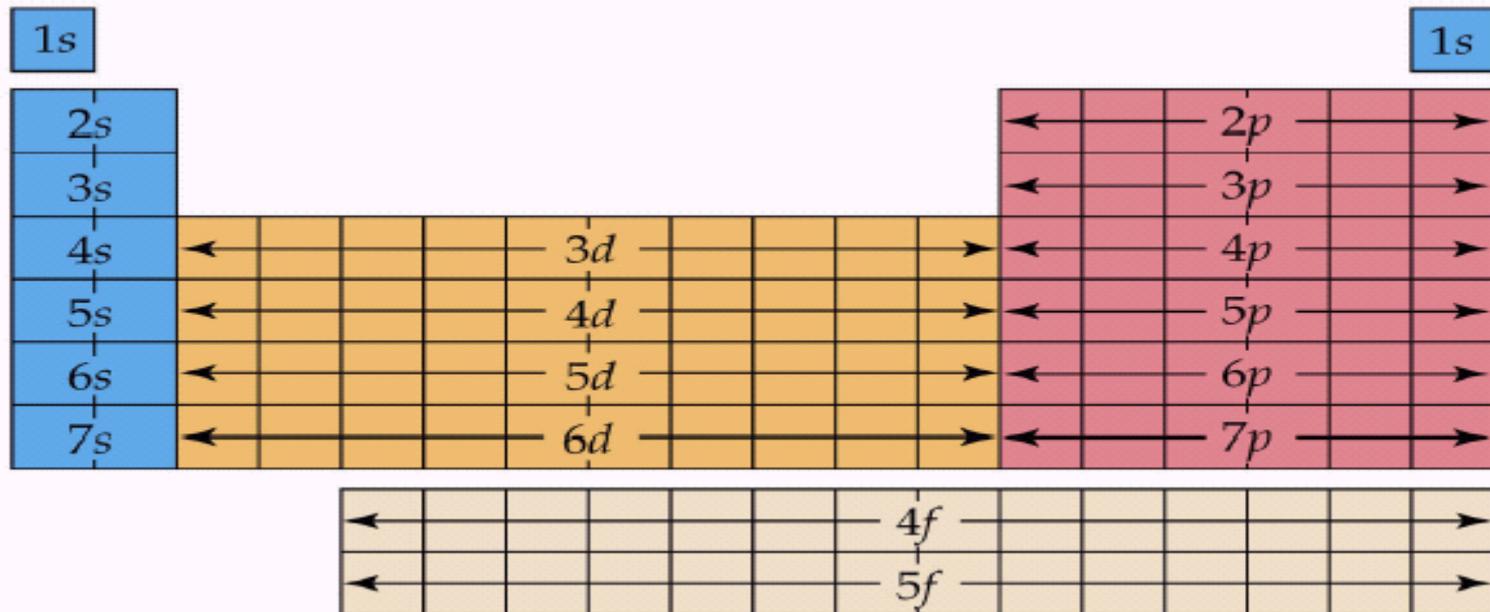
-En 7 filas denominados **PERÍODOS**.

-En 18 columnas o familias, los cuales se ordenan en **GRUPOS**, 8 grupos **A** y 8 grupos **B**.

CLASIFICACIÓN DE LOS ELEMENTOS

-POR SU ESTRUCTURA ATÓMICA

Los átomos de los elementos de un grupo del sistema periódico tienen todos la misma configuración electrónica en la capa más externa.



-POR SUS NOMBRES TÍPICOS

Metales alcalinos, metales alcalinos térreos, boroides o térreos, carbonoides, etc.

Bloque	Grupo	Nombres	Config. Electrón.
s	IA IIA	Alcalinos Alcalino-térreos	$n s^1$ $n s^2$
p	IIIA IVA VA VIA VIIA VIIIA	Térreos Carbonoideos Nitrogenoideos Anfígenos (o calcógenos) Halógenos Gases nobles	$n s^2 n p^1$ $n s^2 n p^2$ $n s^2 n p^3$ $n s^2 n p^4$ $n s^2 n p^5$ $n s^2 n p^6$
d		Elementos de transición	$n s^2(n-1) d^{1-10}$
f		El. de transición Interna (lantánidos y actínidos)	$n s^2 (n-1)d^1(n-2)f^{1-14}$

UBICACIÓN DE UN ELEMENTO EN LA TABLA PERIÓDICA

La configuración electrónica externa de un elemento permite ubicar su posición en la tabla periódica, es decir el **grupo** y **período** al cual pertenece.

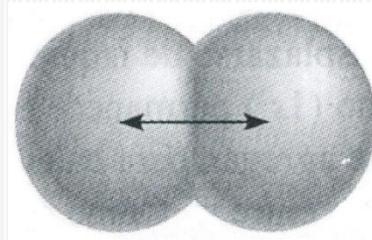
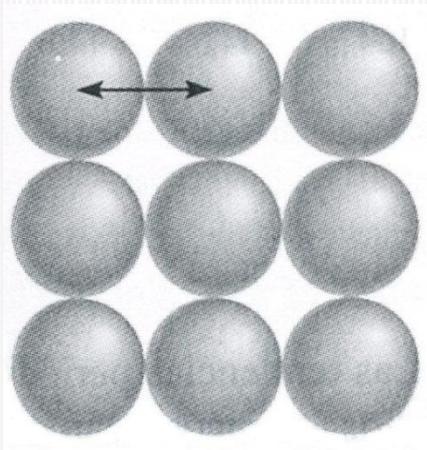
PROPIEDADES PERIÓDICAS

Son propiedades que presentan los elementos químicos y que se repiten secuencialmente en la Tabla Periódica. Por su posición en la misma, podemos deducir qué valores presentan dichas propiedades, así como su comportamiento químico.

VARIACIÓN DE LAS PROPIEDADES PERIÓDICAS

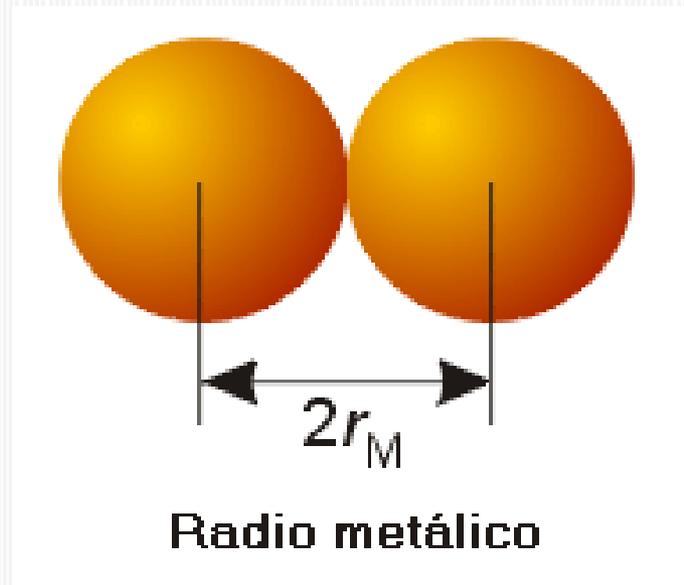
-TAMAÑOS ATÓMICOS

El tamaño atómico es algo difícil de definir, pero cuando se tiene que ser más específico se define en términos de su radio atómico (R_A).

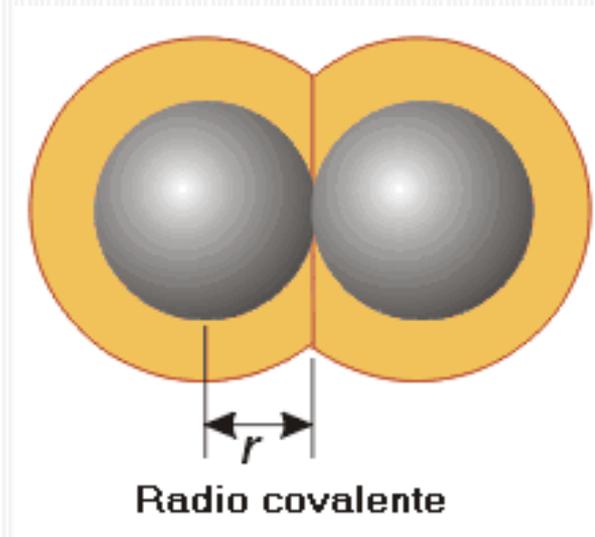


$$R_A = \frac{d}{2}$$

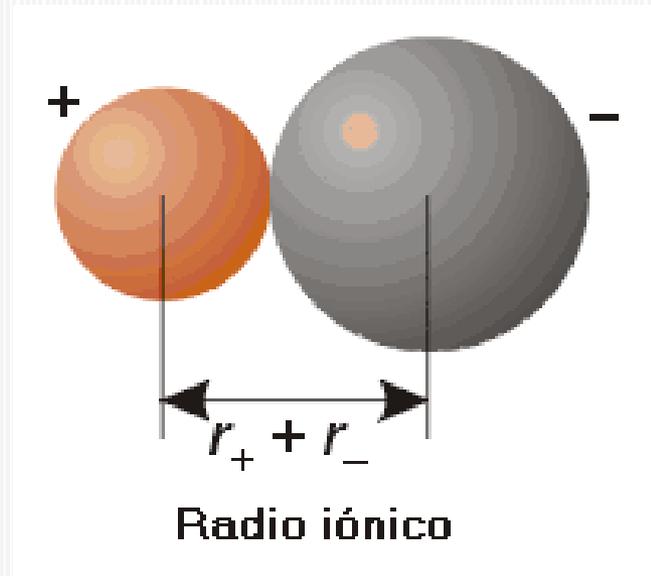
El **radio metálico** de un elemento metálico se define como la mitad de la distancia, determinada experimentalmente, entre los núcleos de átomos vecinos del sólido.



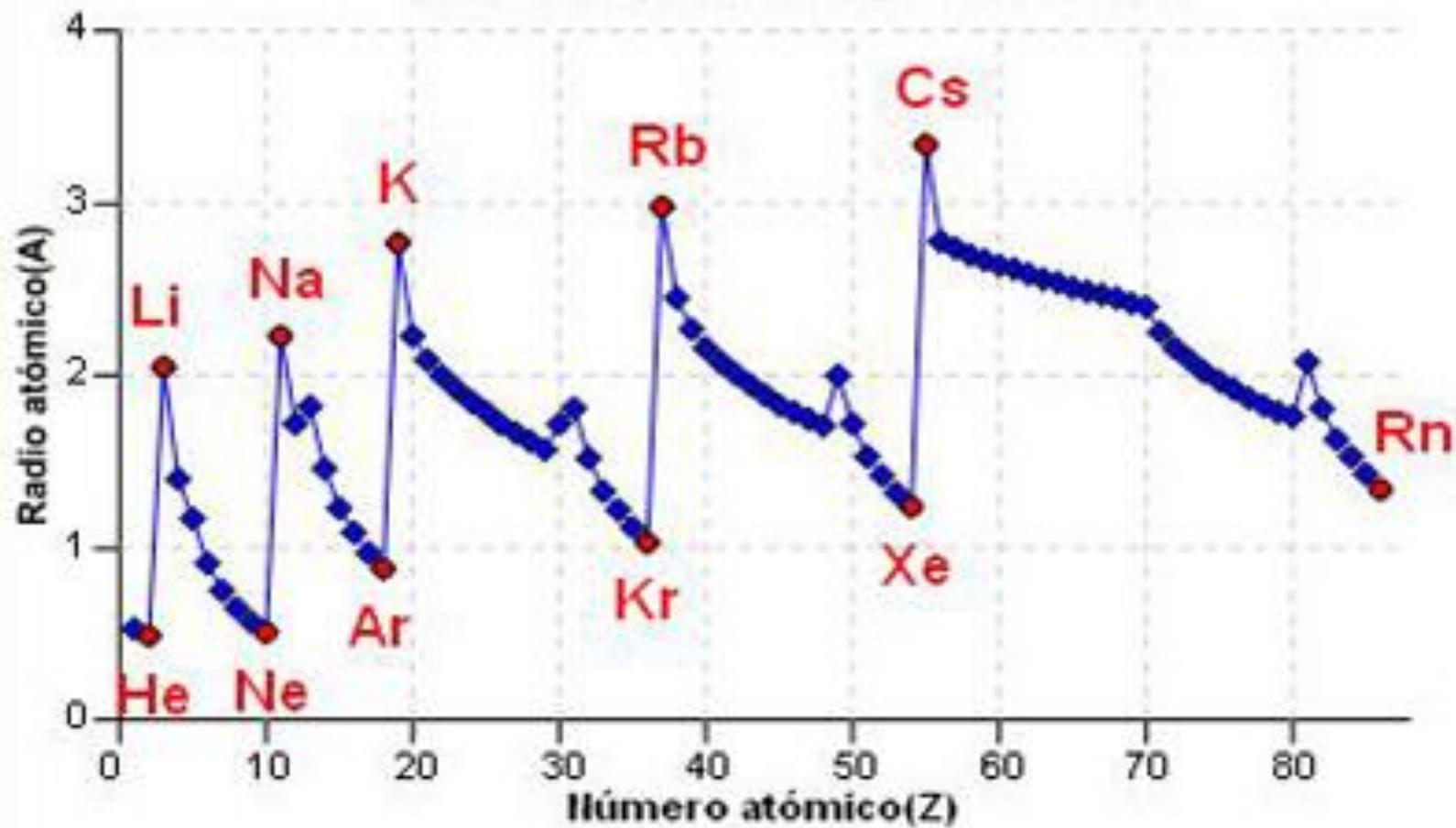
El **radio covalente** de un elemento no metálico se define, de forma similar, como la mitad de la separación internuclear de átomos vecinos del mismo elemento en la molécula.



El **radio iónico** está relacionado con la distancia entre los núcleos de los cationes y aniones vecinos.



VARIACIÓN DEL RADIO ATÓMICO

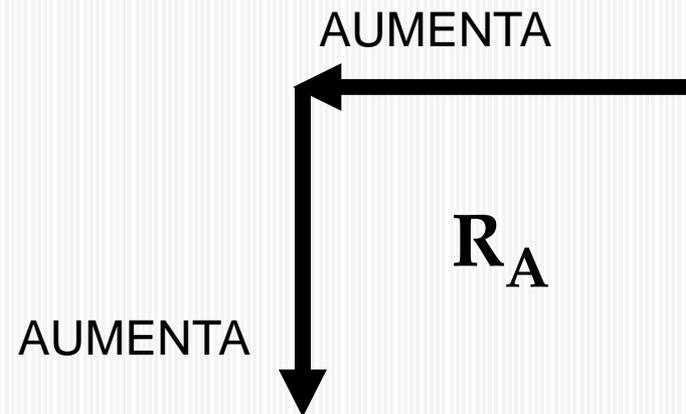


RADIO IÓNICO

El radio iónico es el radio de un catión o de un anión.

Radio de un catión es siempre menor que el radio del átomo del cual procede.

Radio de un anión es siempre mayor que el radio del átomo del cual procede.



CASOS:

1. Para **especies isoelectrónicas** el radio del ión disminuye con el aumento de su carga nuclear (**Z**).

Ejm.



2. Para **cationes** de un mismo elemento el radio disminuye con el aumento de la carga iónica.

Ejm.



3. Para **aniones** de un mismo elemento el radio aumenta con el aumento de la carga iónica.

Ejm.



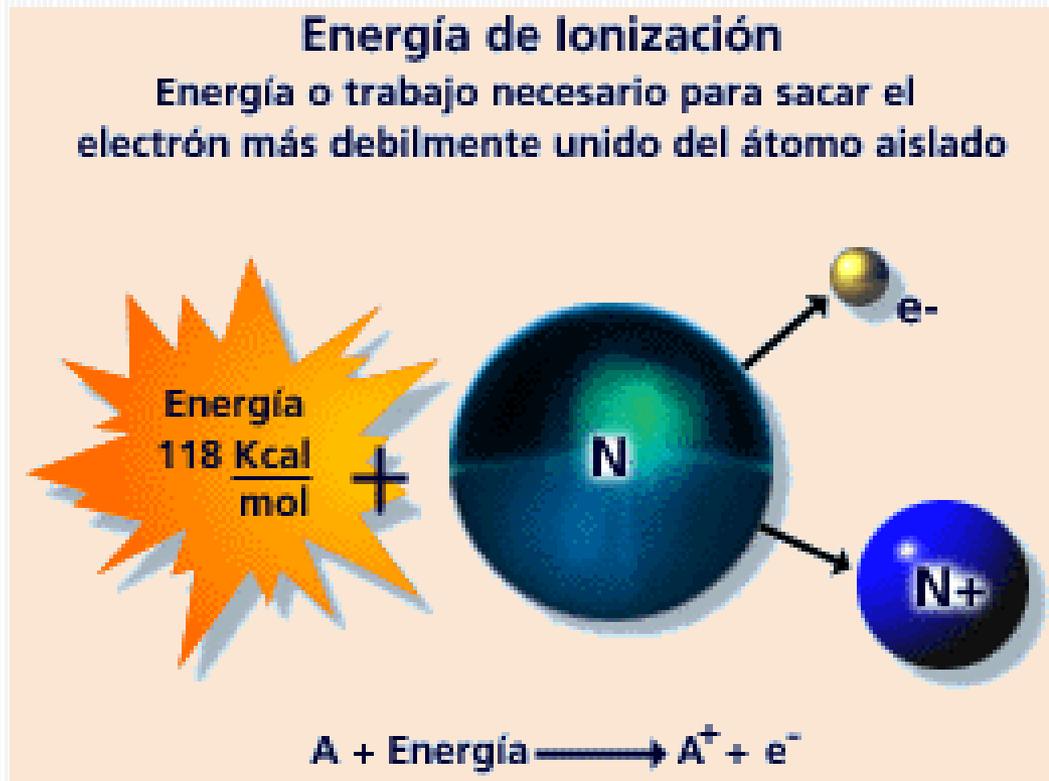
4. Para **elementos que pertenecen a un mismo grupo**, si sus iones tienen la misma carga iónica, el radio del ión aumenta con el aumento de la carga nuclear (Z).

Ejm.



-ENERGÍA DE IONIZACIÓN (E.I.)

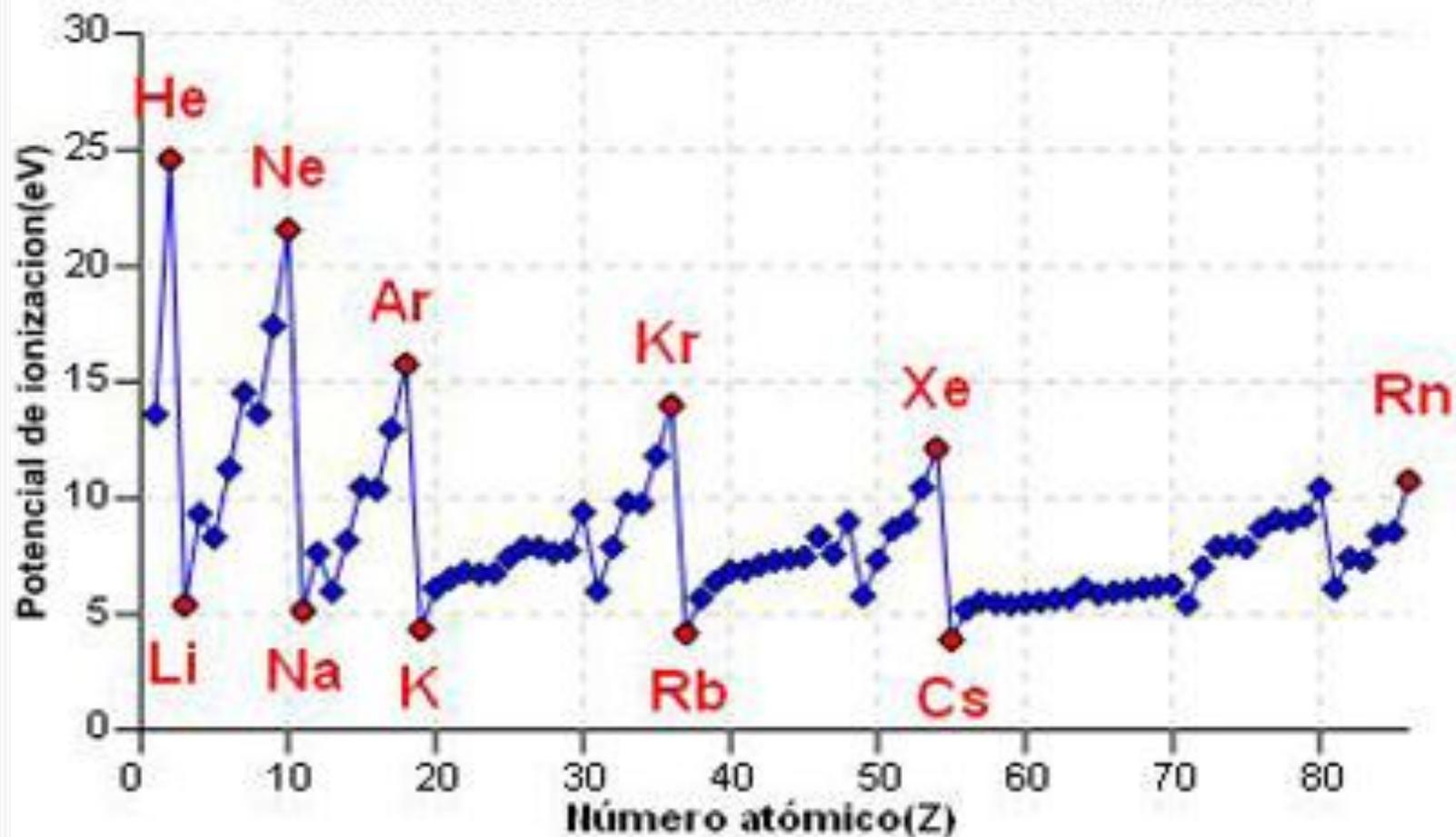
Es la mínima energía que debemos dar a un átomo gaseoso para arrancarle un electrón y así formar un ión gaseoso.



$$E.I._1 < E.I._2 < E.I._3 < \dots$$

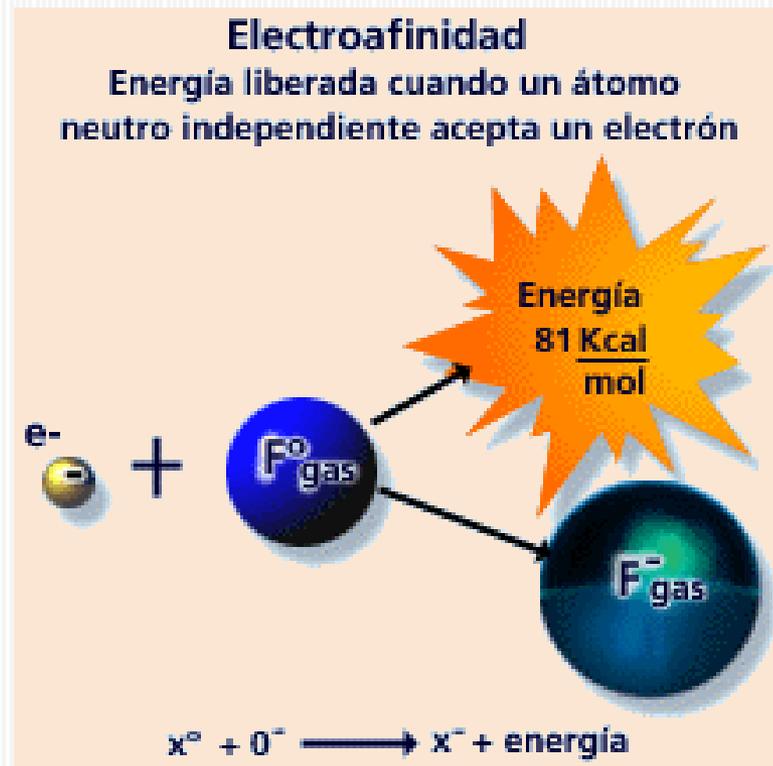


VARIACIÓN DEL POTENCIAL DE IONIZACIÓN



-AFINIDAD ELECTRÓNICA (A.E.)

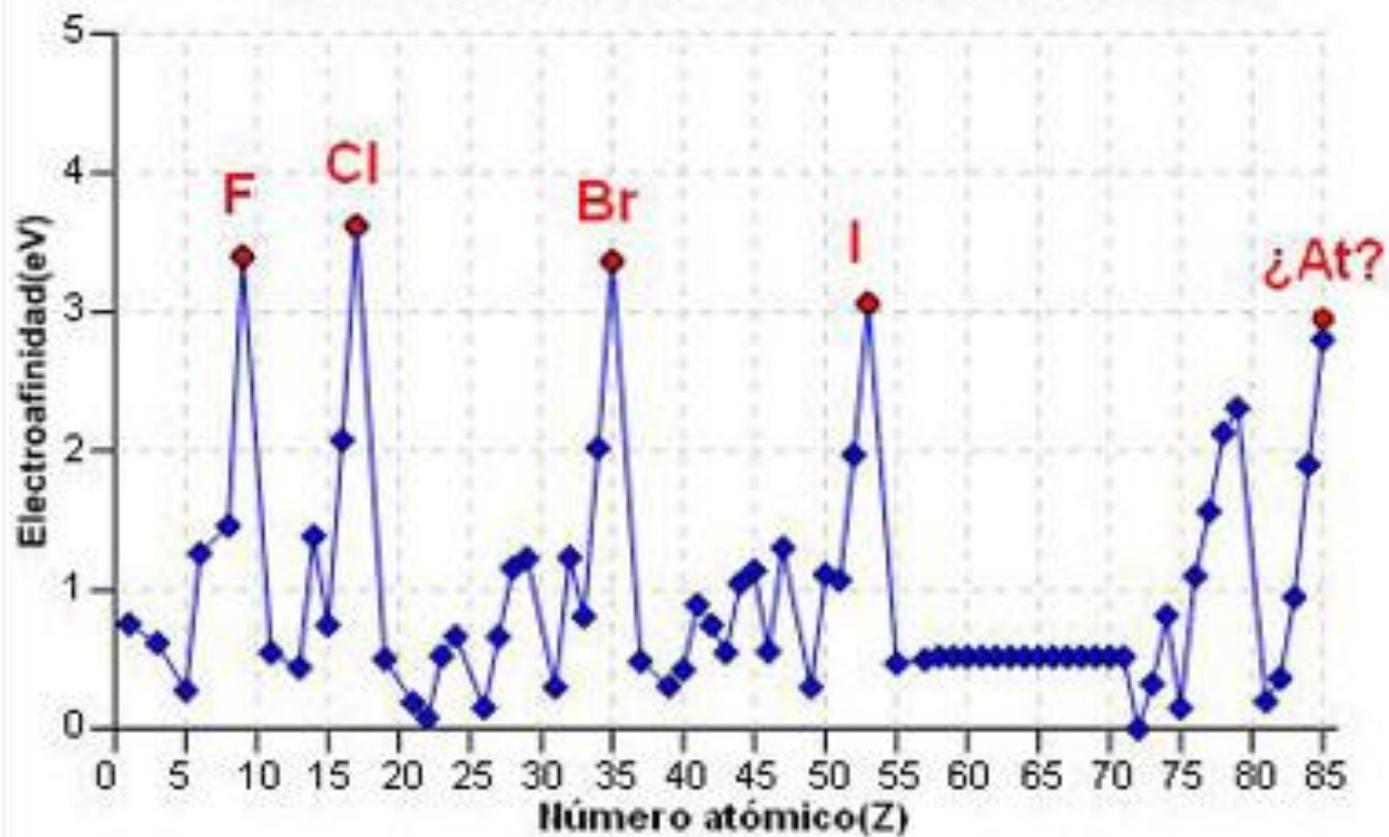
Es el **cambio de energía** que experimenta un átomo cuando se le añade un electrón, en el estado gaseoso. Generalmente es energía emitida.



Las **primeras electroafinidades** son **energías negativas** y los demás son **positivas**.

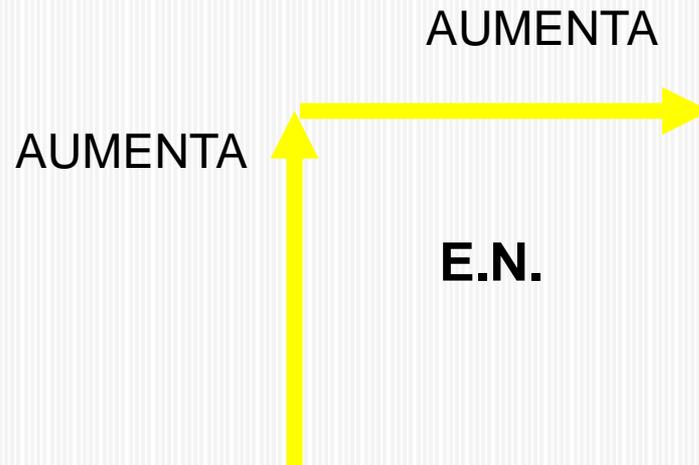


VARIACIÓN DE LA ELECTROAFINIDAD CON Z

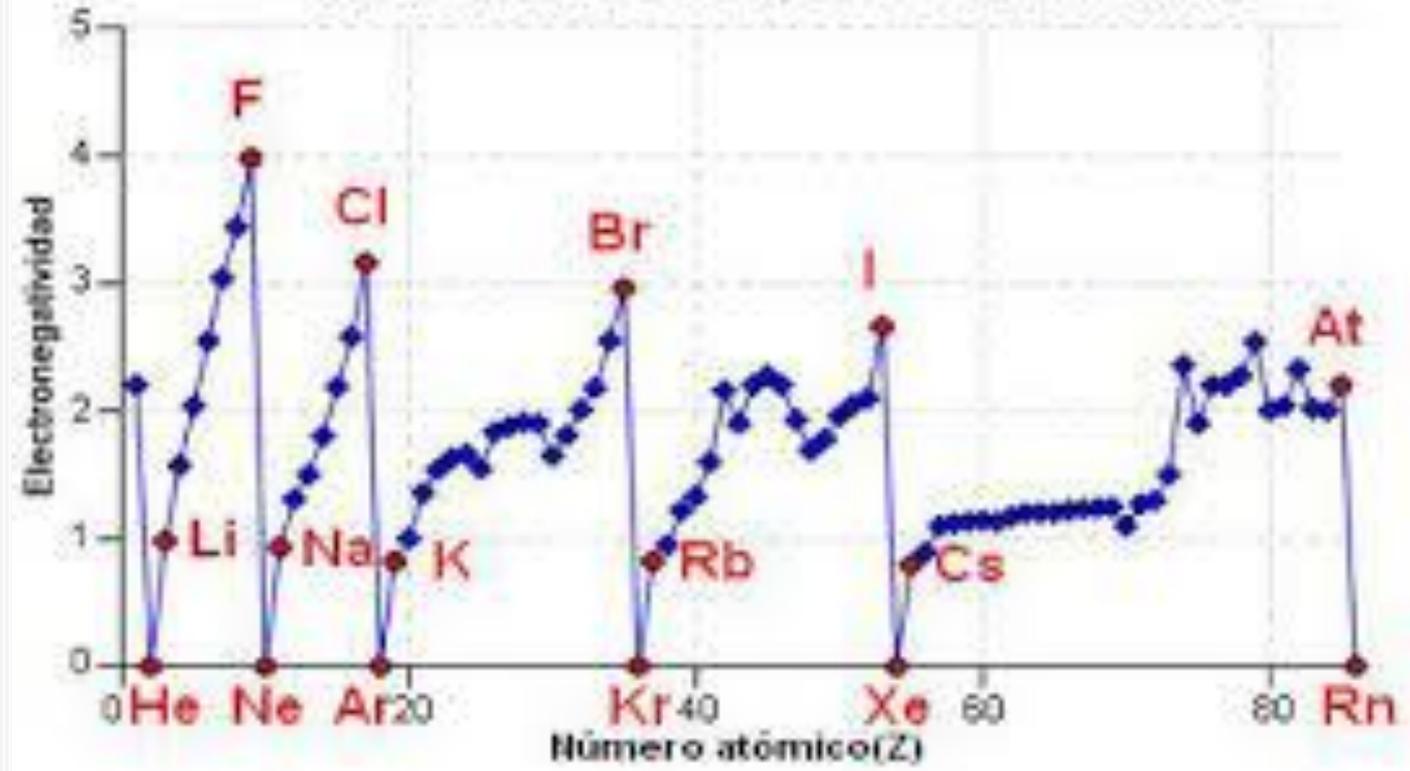


-ELECTRONEGATIVIDAD (E.N.)

Es la capacidad que tiene un átomo para ganar electrones de otro átomo.



VARIACIÓN DE LA ELECTRONEGATIVIDAD



-CARÁCTER METÁLICO (C.M)

Tendencia a perder electrones.

-CARÁCTER NO METÁLICO (C.N.M.)

Tendencia a ganar electrones.



PREDICCIÓN DE PROPIEDADES PERIÓDICAS

MÉTODO DE MENDELEIEV O MEDIA ARITMÉTICA

Se puede hallar propiedades desconocidas de un elemento como la media aritmética de las propiedades de los elementos que lo rodean.

Deben pertenecer a un **grupo** característico **A o B** los 5 elementos involucrados.

Ejm. $\rho_{Al} = a$, $\rho_C = b$, $\rho_P = c$,

$\rho_{Al} = \mathbf{a}$, $\rho_C = \mathbf{b}$, $\rho_P = \mathbf{c}$,

$\rho_{Ge} = \mathbf{d}$, $\rho_{Si} = ?$

III A	IVA	VA
B	C	N
Al	Si	P
Ga	Ge	As

$\rho_B = e$, $\rho_N = f$

$\rho_{Ga} = g$, $\rho_{As} = h$

$\rho_{Si} = \frac{\mathbf{a + b + c + d}}{\mathbf{4}}$

MÉTODO DE CÁLCULO COMPARATIVO

Se puede hallar propiedades de un elemento mediante la comparación de magnitudes conocidas.