

Capítulo 2.

Átomo y propiedades periódicas.

- 2.1. Modelos atómicos.
- 2.2. Los números cuánticos.
- 2.3. Orbitales atómicos.
- 2.4. Llenado de orbitales.
- 2.5. Configuración electrónica.
- 2.6. Tabla periódica de los elementos.
- 2.7. Propiedades periódicas.
- 2.8. Energía de ionización y afinidad electrónica.

2.1. Modelos atómicos.

- El **concepto de átomo** surge ya en la época griega. Los filósofos de la escuela atomista, para poder explicar el carácter universal e indivisible de la materia, postulan la existencia de unidades indivisibles a las que denominaron átomos. En resumen, la idea de átomo no nace para ellos del empirismo, sino del razonamiento lógico, pues **la materia no podía dividirse indefinidamente**.

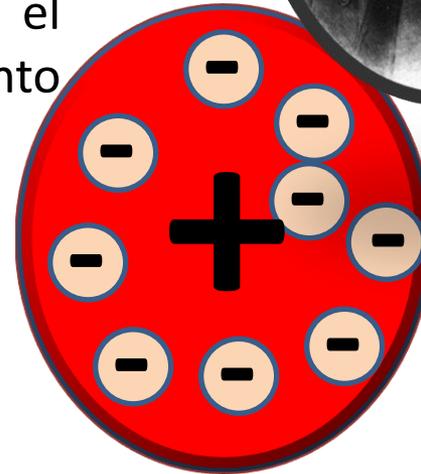
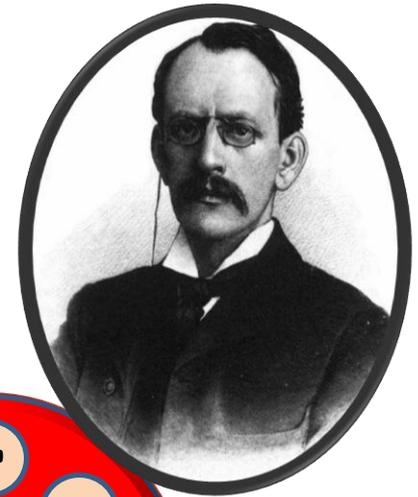


Demócrito. Filósofo presocrático (460 AC-370 AC). Fundador de la escuela atomista.

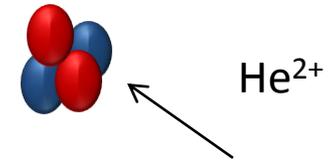
Mucho más tarde **Dalton** elabora los siguientes postulados (siglo XVIII).

1. La materia está compuesta por unas partículas muy pequeñas e indivisibles llamadas **átomos**.
2. Los átomos no son creados ni destruidos durante las reacciones químicas.
3. Todos los átomos de un mismo elemento son idénticos.
4. Los compuestos se forman cuando se combinan átomos de uno o más elementos.

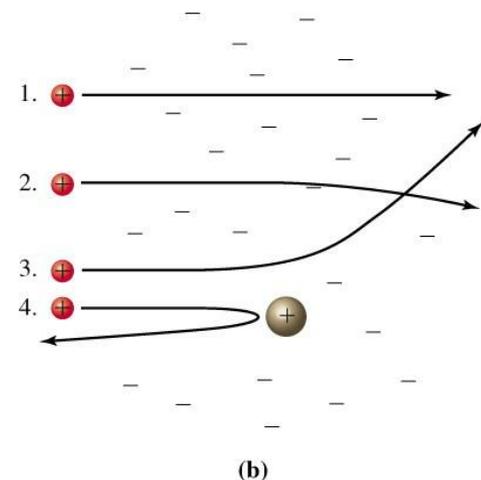
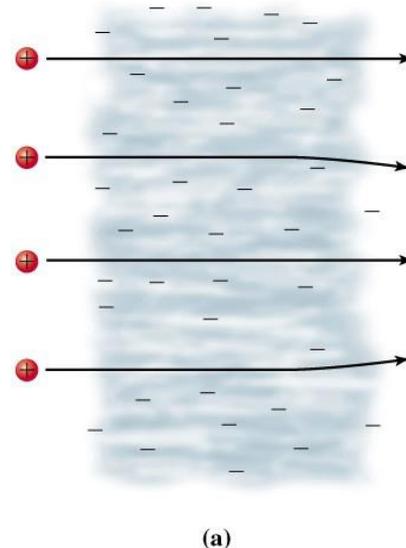
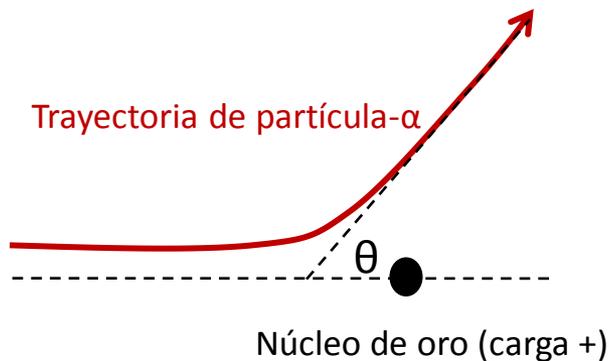
Joseph John **Thompson**, descubre el electrón y lo describe formando parte de un sistema atómico. Construye así un modelo atómico sencillo que constaría de partículas negativamente cargadas (electrones) inmersas en un átomo con densidad de carga positiva. Este modelo es bastante poco aproximado a la realidad pero fue una contribución novedosa porque se basaba en la conjunción de partículas menores que el átomo (subatómicas) con cargas opuestas. En 1906, se le concedió el premio Nobel por su contribución al conocimiento del átomo.



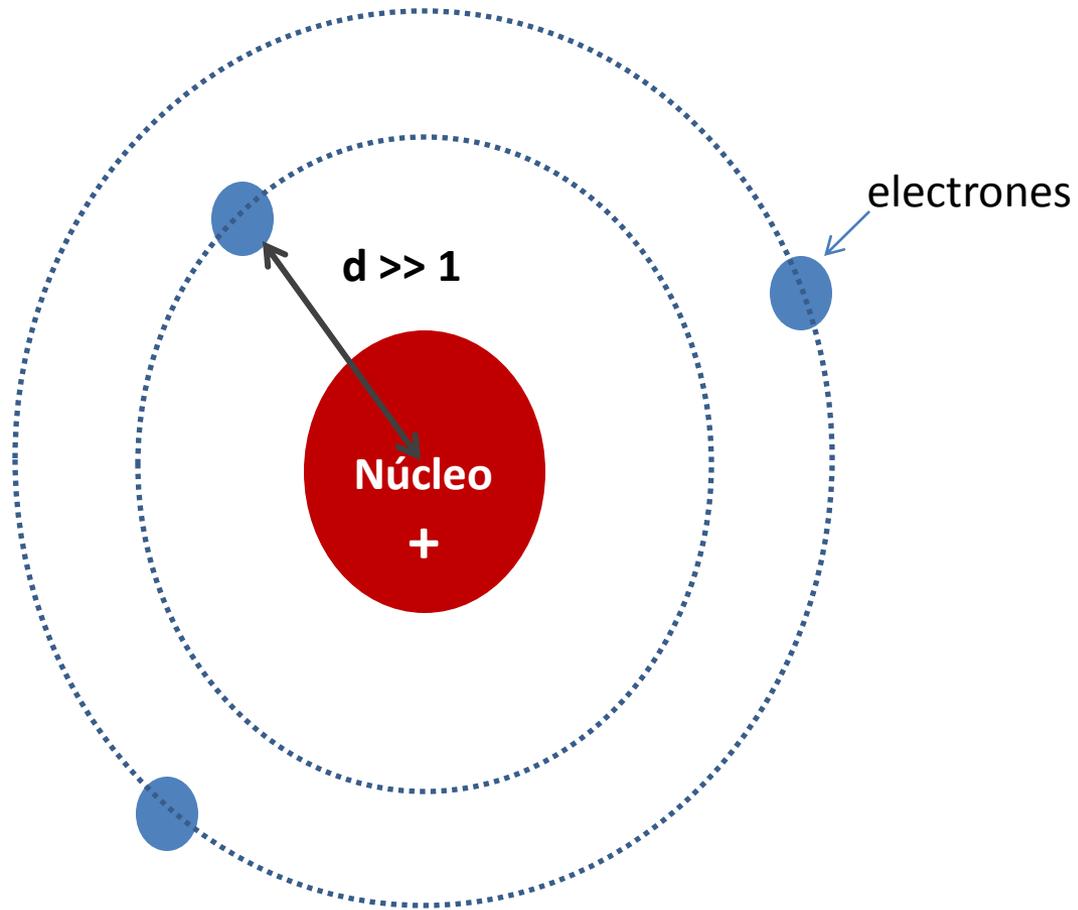
El experimento de Rutherford.



Rutherford bombardeó una lámina de oro muy delgada con partículas alfa. Las partículas alfa están formadas por **dos protones** y **dos neutrones**. Estas partículas están cargadas positivamente y son mucho más pesadas que el electrón. Para sorpresa de Rutherford, la mayoría de partículas- α atravesaban el metal en línea recta sin sufrir desviaciones en su trayectoria. Según esto, la lámina de oro era discontinua a escala atómica. Unas pocas partículas- α eran desviadas de su trayectoria y algunas rebotaban perpendicularmente a la superficie del metal. Los electrones del metal no podían ser la causa de estos choques debido a su baja masa y tamaño. La hipótesis más probable era que el metal estaba formado por un **núcleo atómico** positivo y pesado, que era el responsable de la desviación de las partículas- α rodeado por una nube de electrones muy difusa y lejana.



Visión *simplista* del átomo a partir de la experiencia de Rutherford...

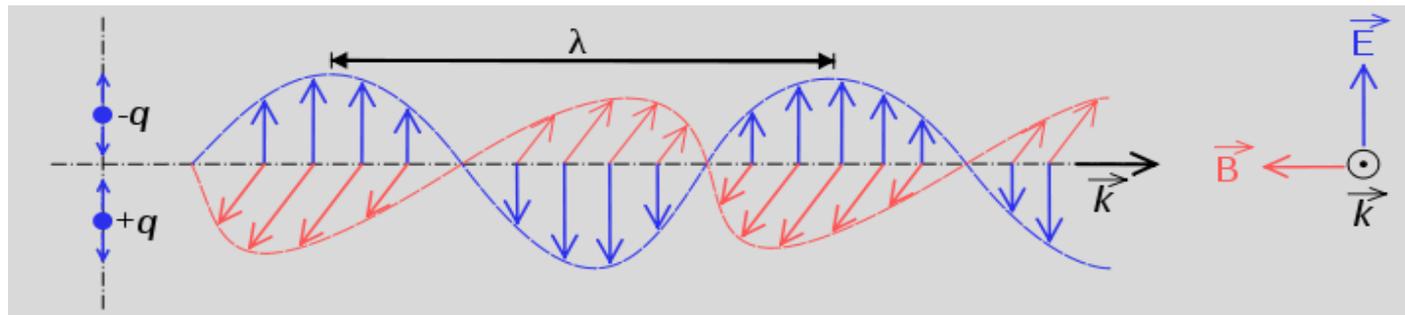


Ondas electromagnéticas.

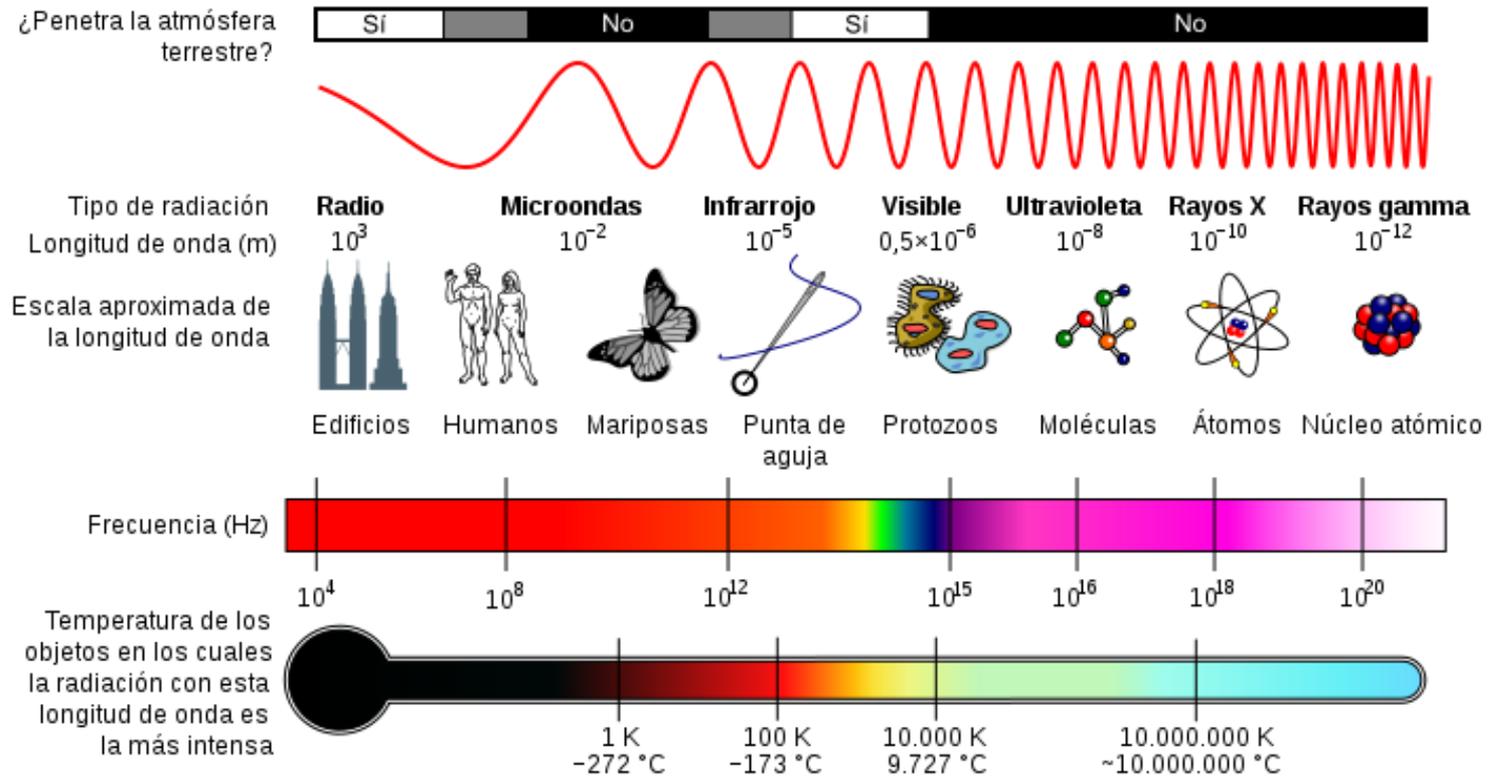
Las radiaciones electromagnéticas se propagan como ondas. Una onda electromagnética se define como la superposición de un **campo eléctrico** y otro **magnético** mutuamente perpendiculares y oscilantes. Las OEM propagan energía radiante tanto en el vacío como a través de los materiales. Como toda onda la OEM puede describirse por su frecuencia (ν) o su longitud de onda (λ).

En realidad, una onda electromagnética (OEM) es algo bastante cotidiano:

1. La luz visible es una OEM.
2. La telefonía móvil es posible gracias a las OEM (frecuencia de microondas y radio).
3. Un microondas calienta por OEM (de la frecuencia de microondas).
4. Una radiografía de rayos X se obtiene por radiaciones de OEM (frecuencia de RX).
5. Estamos continuamente atravesados por OEM (espectro electromagnético).



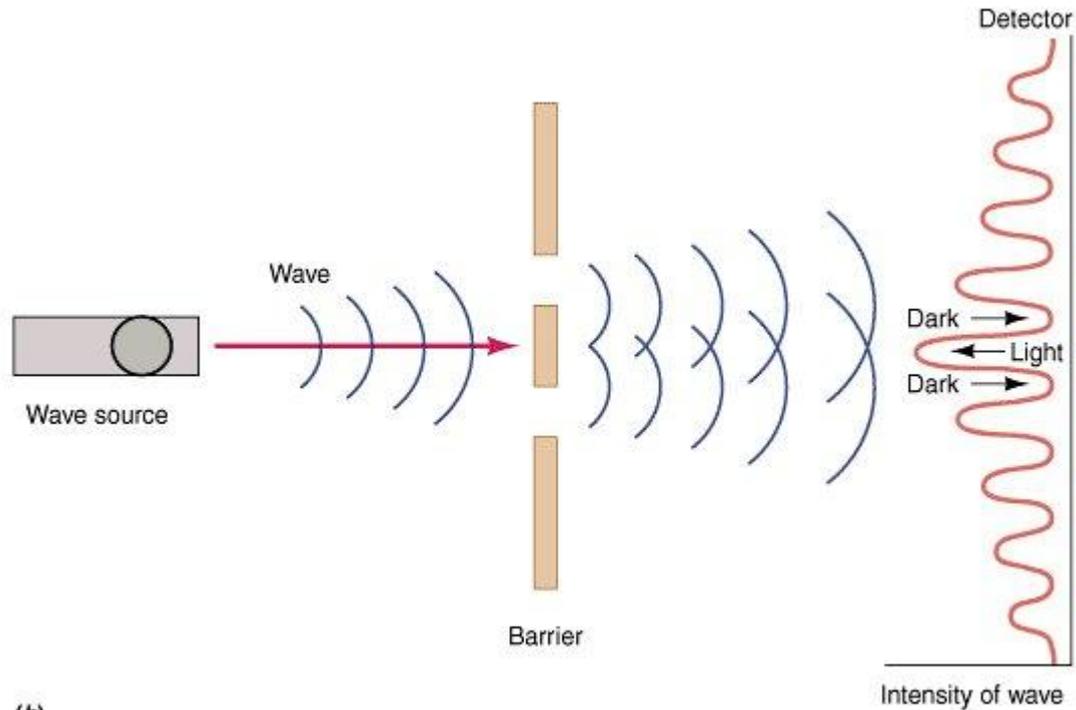
El espectro electromagnético y las ondas electromagnéticas (OEM)



La energía de cualquier OEM puede calcularse por la ecuación: $E = h \nu$, donde h es una constante conocida, en J.s y ν es la frecuencia de la onda, en s⁻¹.

$$\Rightarrow E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

El experimento de la doble rendija de Young, **la luz es una onda...**

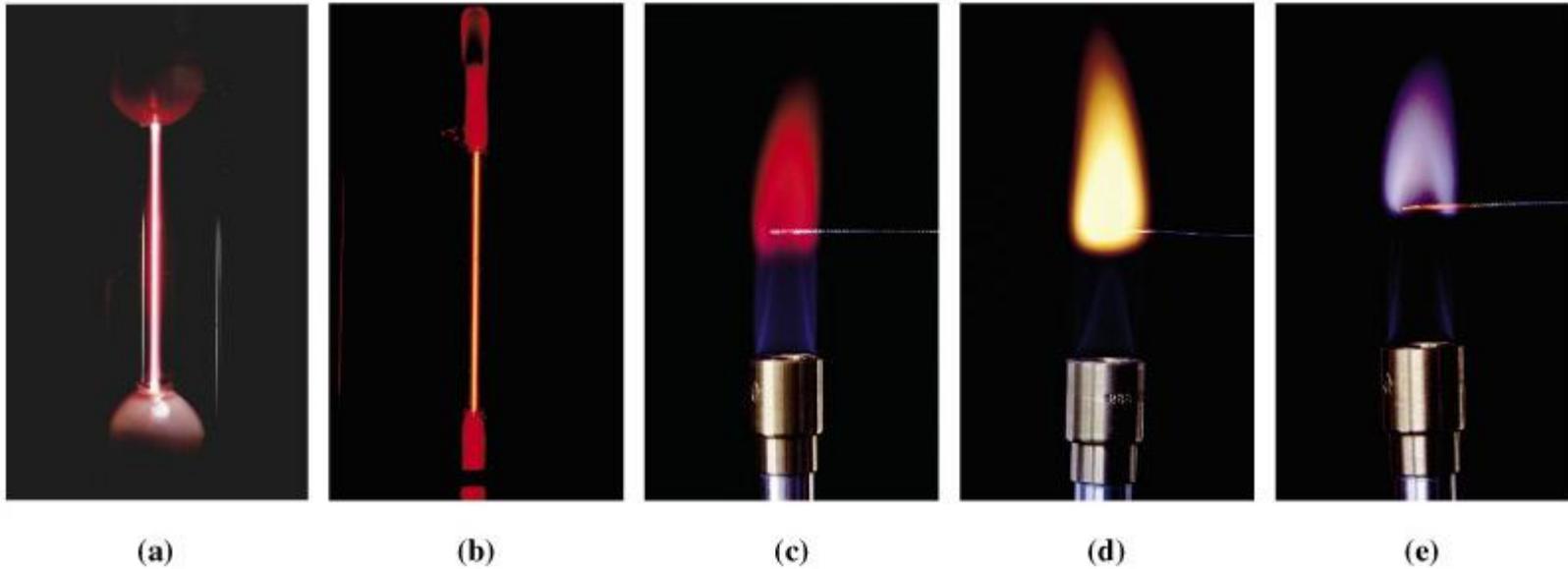


(b)

Copyright 1998 by John Wiley and Sons, Inc. All rights reserved.

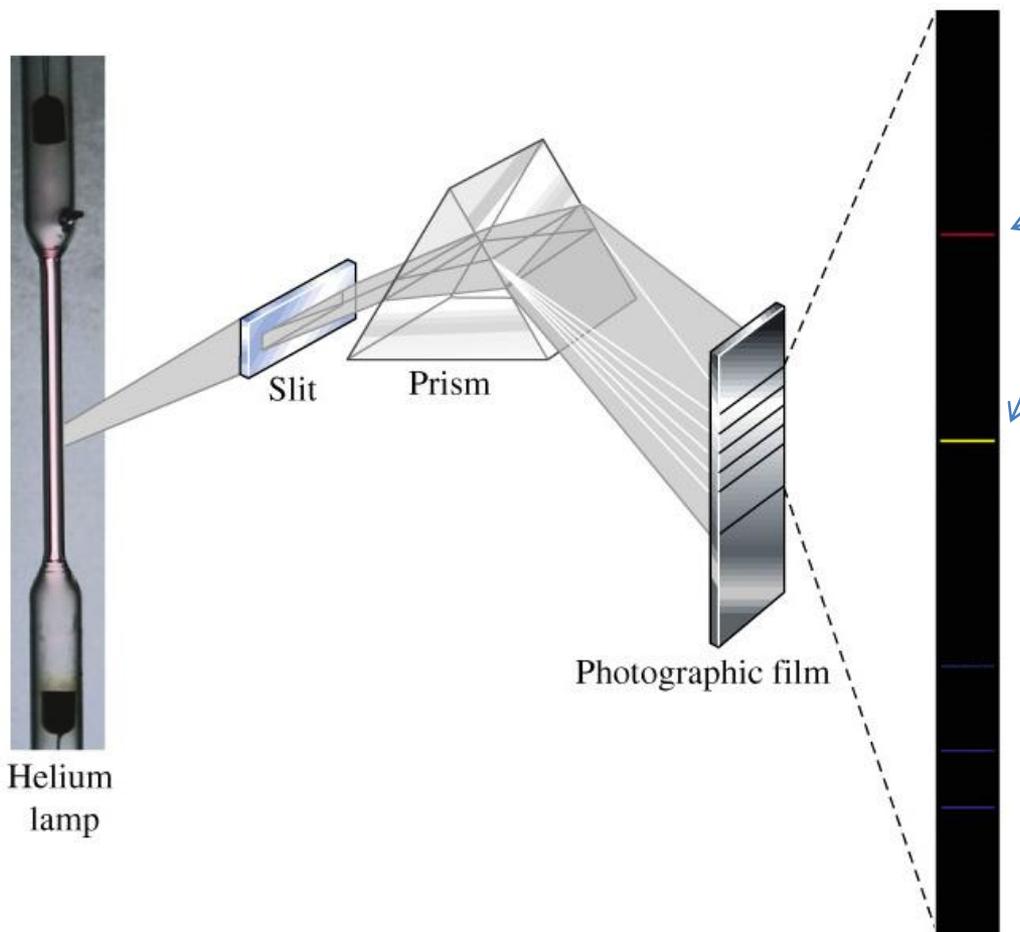
Espectros atómicos y el comienzo de la física cuántica...

H₂, He, Li, Na, K.



Las imágenes a y b muestran la luz emitida por gases (H₂ y He) dentro de tubos de descarga eléctrica. Cuando se excitan en una llama filamentos de metales como Li, Na y K se obtienen colores (espectros) característicos de cada metal.

Espectro atómico de Helio (He);



Al medir las posiciones e intensidad de las líneas emitidas una vez registradas en un film fotográfico se obtiene un patrón propio para cada elemento analizado. El espectro atómico es por tanto una especie de huella dactilar del átomo.

La serie de Balmer: $\rightarrow \nu = 3,2881 \times 10^{15} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ s}^{-1}$



Balmer estudió el espectro de emisión del hidrógeno y observó claramente unas líneas intensas para el elemento a: **410.1, 434.0, 486.1 y 656,3 nm**, todas ellas apreciables a simple vista en la placa fotográfica. Tras numerosos ensayos obtuvo una ecuación empírica que justificaba la posición de la serie de líneas encontrada para el espectro de emisión del H. En la **ecuación de Balmer**, ν es la frecuencia de la radiación o línea espectral emitida y n debe ser un número entero mayor que 2. Al sustituir en la ecuación por $n = 3$ se obtiene una $\nu = 4.57 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ es decir una $\lambda = 656.9 \text{ nm}$ muy parecida a la línea obtenida más a la derecha. Si hallamos la λ asociada a $n = 4, 5, 6...$ obtenemos valores de **486.6, 434.5, 410.6 nm...**, que se parecen bastante a las posiciones observadas experimentalmente en el espectro de emisión del hidrógeno. Otras líneas más energéticas de longitud de onda más corta (UV) no se muestran en la figura superior pero la ecuación de Balmer predice también su posición.

Conclusión sobre el experimento de Balmer:

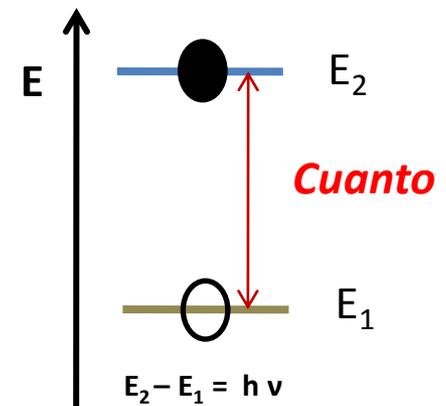
$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

Si los **espectros atómicos** están formados por un **número limitado de líneas**, esto sugiere que **hay un número limitado de valores de energía** que son capaces de excitar los átomos. La física clásica del S. XIX era incapaz de explicar este hecho, puesto que debería haber *infinitos valores posibles* de energía para excitar un elemento. Sin embargo, la serie de Balmer demuestra que el número de valores de energía asociado a las líneas es limitado. A partir de este momento comienzan las bases de una nueva forma de ver la física, conocida como **física cuántica**.

Planck formula entonces su famoso principio:

¡La ENERGÍA ES DISCONTINUA al igual que LA MATERIA!

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$



La revolucionaria hipótesis de **Planck**.

- El alemán Max Planck (1858-1947) puede considerarse como el precursor de la **teoría cuántica** y fue galardonado por ello con el premio Nobel de Física en 1918. Parece ser que **Planck** demostró más interés por comprender la física que por revolucionarla, pero en 1900 presentó al mundo una hipótesis muy novedosa y simple a la vez. ***En los sistemas microscópicos no todas las energías son permitidas. La energía está cuantizada y la luz toma valores discretos de energía que son múltiplos enteros del cuanto elemental $h\nu$.***

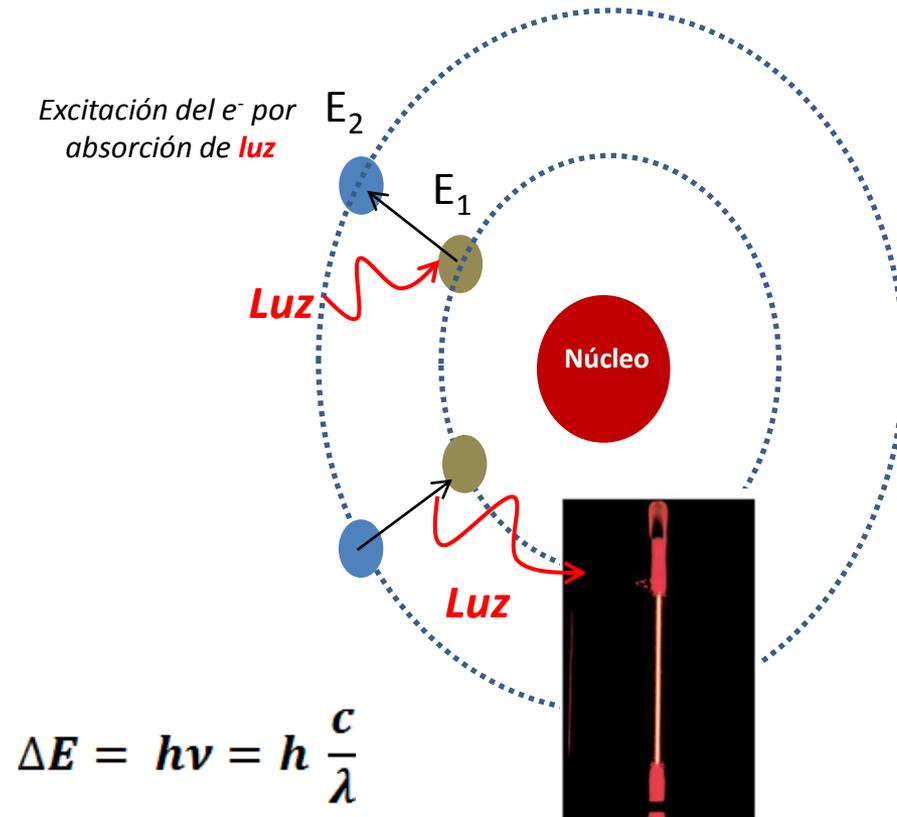


Max Planck Físico alemán (1858-1947) Premio Nobel 1918.

A principios del S. XX esta teoría fue puesta en entredicho por muchos científicos, incluido Planck, pues se venía de una concepción clásica, newtoniana, en la que la energía de un cuerpo podía tomar cualquier valor. Posteriormente la teoría cuántica, basada en la hipótesis de Planck, permitió explicar el efecto fotoeléctrico y los modelos atómicos modernos. El nacimiento de la física y la química cuántica, permitió un avance social y tecnológico sin precedentes.

Antes de todo esto, cuando Planck tenía solo 16 años era un alumno avanzado en filosofía, filología clásica y ciencias, además de buen músico, pues tocaba el cello y el piano. Por esa razón lógicamente se planteó qué camino escoger. Su profesor de física, lo desanimó en cierto modo pues le dijo que en física todo estaba casi descubierto!!!.

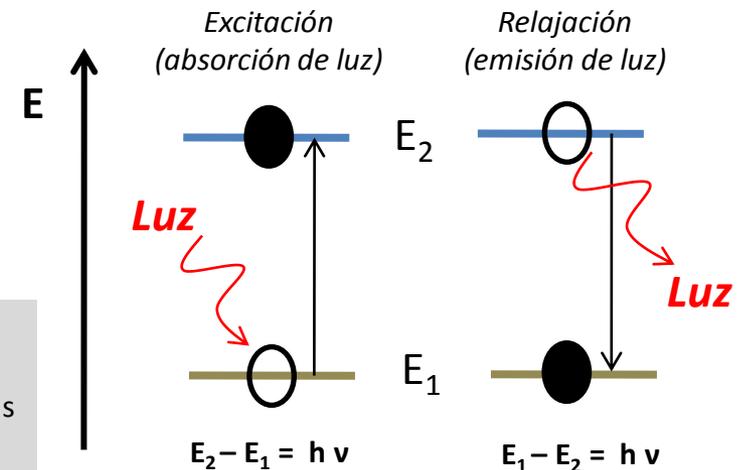
Hipótesis de Planck y su aplicación al átomo:



$$\Delta E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

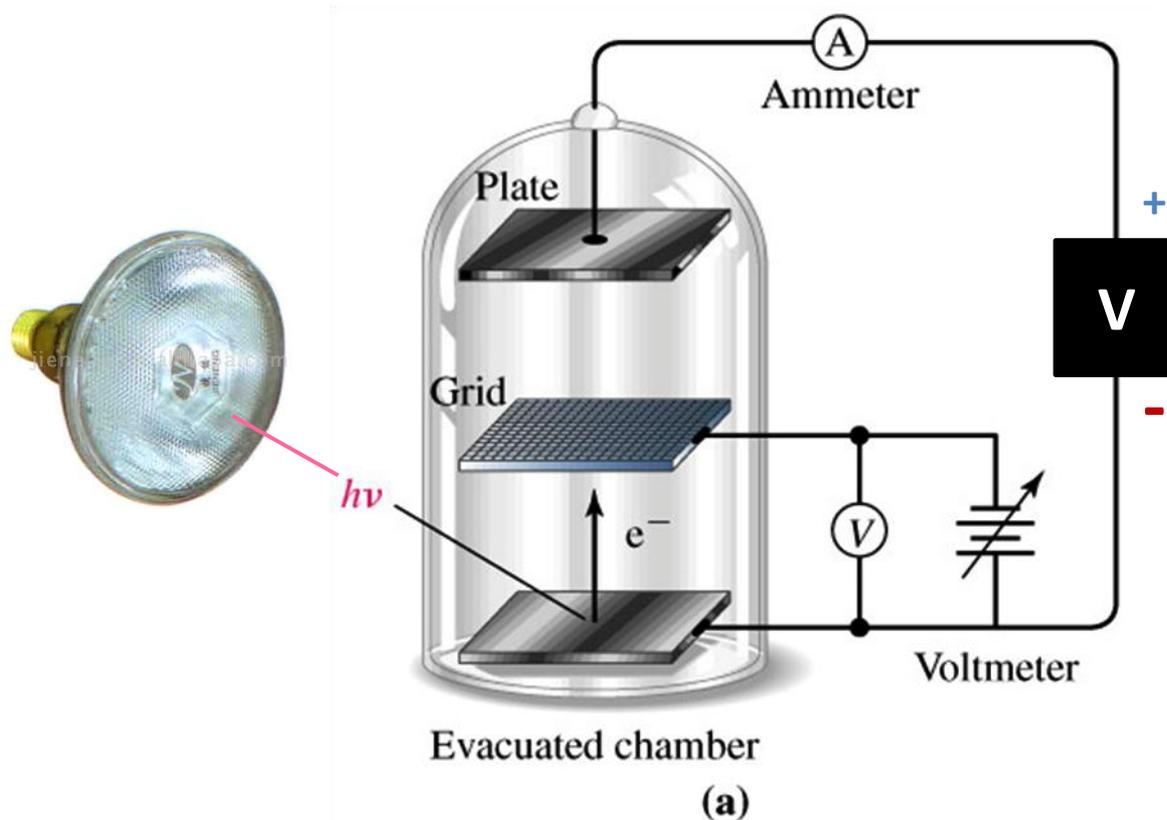
E es la Energía radiante de la luz (OEM), expresada en J
 ν es la frecuencia de la luz radiante, en s^{-1}
 h es la constante de Planck y toma el valor $6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} = 4.134 \times 10^{-15} \text{ eV s}$
 c es la velocidad de propagación de la luz, cuyo valor es $3 \times 10^8 \text{ m/s}$
 λ es la longitud de onda de la radiación incidente, en m

La hipótesis de Planck permite explicar las **transiciones electrónicas** dentro del átomo al absorber o emitir esta una OEM. El electrón puede pasar de un estado energético inferior a otro superior (transito electrónico) cuando absorbe justamente **un cuanto** de radiación correspondiente a la diferencia de energía entre los estados inicial y final ($h\nu$). Este tránsito se conoce como **excitación electrónica**. Si el electrón regresa a su estado inicial pasa de una órbita más energética a otra menor, de forma que **emite un cuanto** de energía ($h\nu$) en forma de luz o radiación electromagnética. El proceso se conoce como **relajación electrónica**.



El experimento del efecto fotoeléctrico.

Este experimento puso de manifiesto la **naturaleza dual de la luz**. El dispositivo consiste en: i) un foco de emisión de luz $h\nu$ (OEM), ii) una fuente de voltaje (V) que mantiene la diferencia de potencial entre dos placas, iii) una inferior (ánodo) a la que llega la luz y otra superior (cátodo) a la que llegan los *electrones* desde la placa inferior y iv) un amperímetro que mide el paso de corriente.



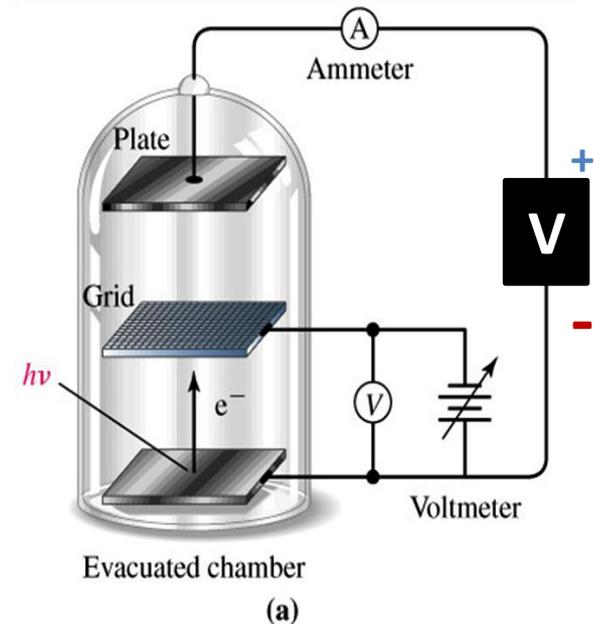
Observaciones empíricas del efecto fotoeléctrico.

1. Cuando se irradia el ánodo metálico con una luz (OEM) de la frecuencia adecuada (ν), se pueden llegar a arrancar electrones del metal (**fotolectrones**).

2. Cada metal, precisa una energía mínima para arrancar electrones. Se denomina frecuencia umbral (ν_0) a la frecuencia mínima de la energía necesaria (umbral) para extraer fotoelectrones. Esta energía umbral ($h\nu_0$) se conoce también como **trabajo de extracción**.

3. Si se supera el trabajo de extracción ($h\nu_0$) todo exceso de energía se aprovecha en dotar de **energía cinética** a los electrones ($\frac{1}{2} m v^2$) que son acelerados hacia la placa superior (cátodo).

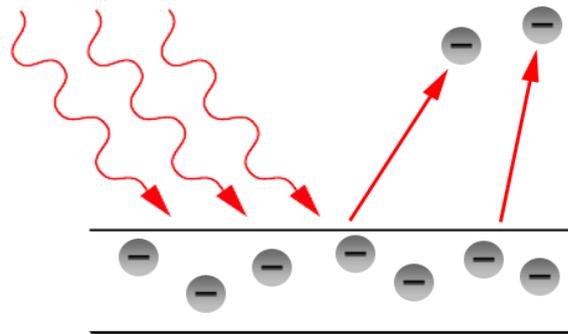
4. Se observa experimentalmente que, una vez superada la frecuencia umbral (ν_0), a **mayor intensidad de la luz**, **mayor número de fotolectrones** son generados (aumento de corriente en el amperímetro). Sin embargo, un aumento de la intensidad de la luz, es decir del número de fotones por unidad de tiempo, no modifica la energía cinética de los fotolectrones. En otras palabras, solo hay corriente fotoeléctrica si se supera la frecuencia umbral (ν_0).



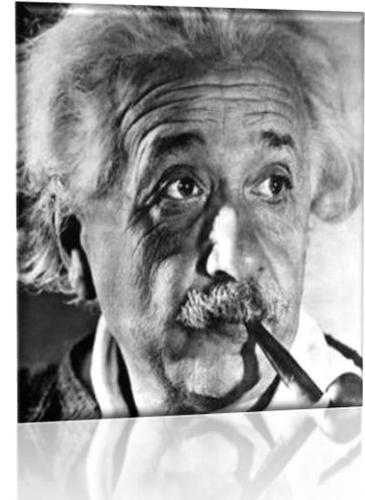
Explicación propuesta por *Einstein* sobre el efecto fotoeléctrico (1905). Premio Nobel de Física (1921)

Energía de la radiación electromagnética incidente: $h\nu$

Los electrones que salen expulsados del metal, lo hacen con una E cinética: $\frac{1}{2} m v^2$



Electrones en la **superficie** del metal irradiado. Solo se extraen cuando la luz incidente supera la energía umbral: $h\nu_0$



Einstein aplica el siguiente razonamiento... *Podemos considerar que la luz está formada por diminutas partículas llamadas **fotones**, que poseen una energía $h\nu$.*

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

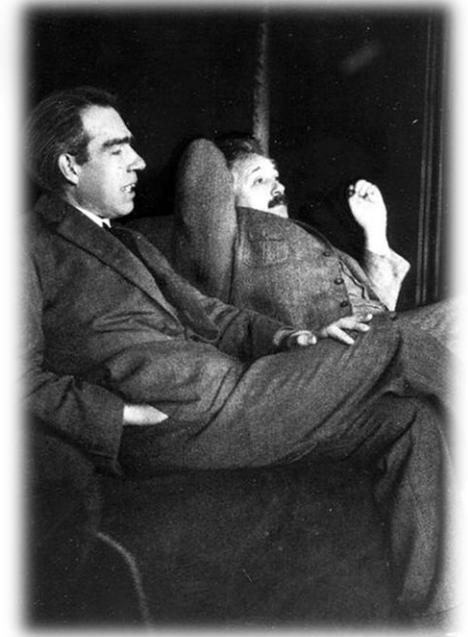
Trata la luz como **sistema de partículas (fotones)** chocando con otras partículas y aplica una ecuación de conservación de la energía. Cuando el fotón supera cierta energía umbral se vence la fuerza atractiva que mantiene al electrón unido al átomo metálico y se genera un fotoelectrón. Todo exceso de energía se usa como E cinética. A partir de este experimento, se habla de la **dualidad onda-partícula** de la luz.

El átomo de **Bohr**



Niels Bohr Físico danés (1885-1962) Premio Nobel 1922

- **Niels Bohr** desarrolló un modelo atómico muy sencillo y de gran éxito, basado en cuatro postulados de los cuales dos eran completamente **ciertos**, uno era **falso** y otro **verdad a medias**:
 1. En un átomo, el electrón tiene únicamente ciertos estados de energía definidos.
 2. Cuando un átomo está en uno de estos estados no irradia energía, pero al cambiar de un estado de alta energía a uno de energía inferior, el átomo emite un cuanto de radiación cuya energía es $h\nu$ e igual en magnitud a la diferencia de energía entre ambos niveles.
 3. En cualquiera de estos estados, el electrón se mueve siguiendo una órbita circular alrededor del núcleo.
 4. Los estados de movimiento electrónico permitidos son aquellos en los que el momento angular del electrón es múltiplo entero de $\frac{h}{2\pi}$.



Bohr y Einstein debatiendo la teoría cuántica

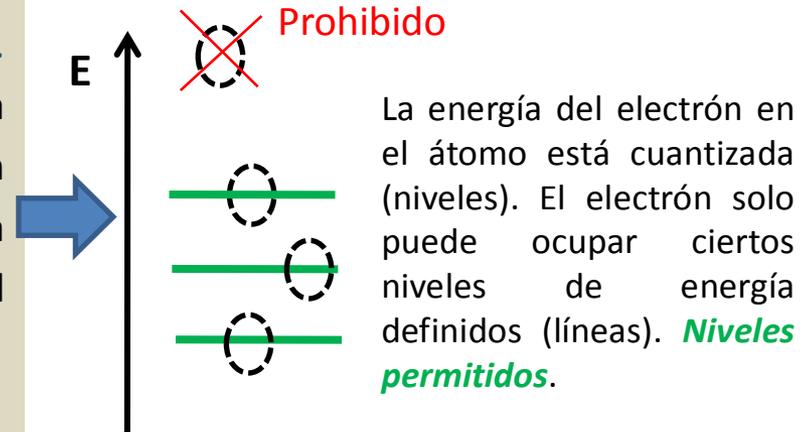
Análisis de los postulados de Bohr... en qué no acertó y por qué...

1. En un átomo, el electrón tiene únicamente ciertos estados de energía permitidos (órbitas). **Es correcto**, Bohr se basó en la nueva física cuántica afirmando que no todos los estados son permitidos. Además Bohr encontró una expresión para la energía del electrón en el átomo más simple (el de hidrógeno):

$$E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2}$$

Donde E_n es la energía del electrón en cada órbita, Z es el número atómico del átomo, n el número cuántico principal ($n=1, 2, 3\dots$) y R_H es la constante de **Rydberg** cuyo valor es 2.176×10^{-18} o 13.6, según si expresamos la energía en Julios (J) o electronvoltios (eV), respectivamente;

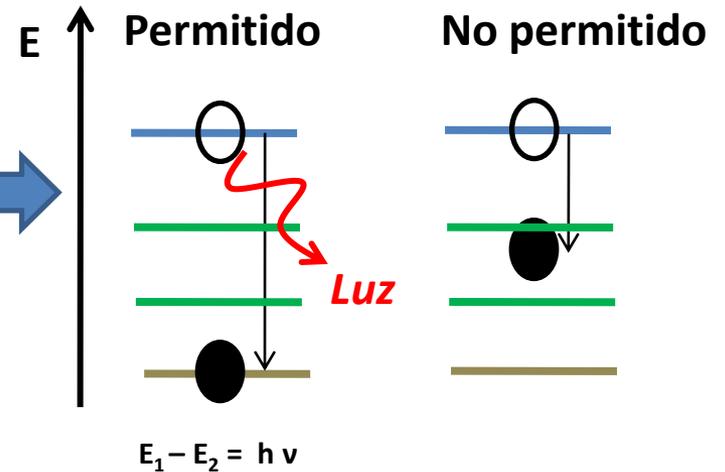
$1\text{eV} = 1.60 \times 10^{-19}$ Julios.

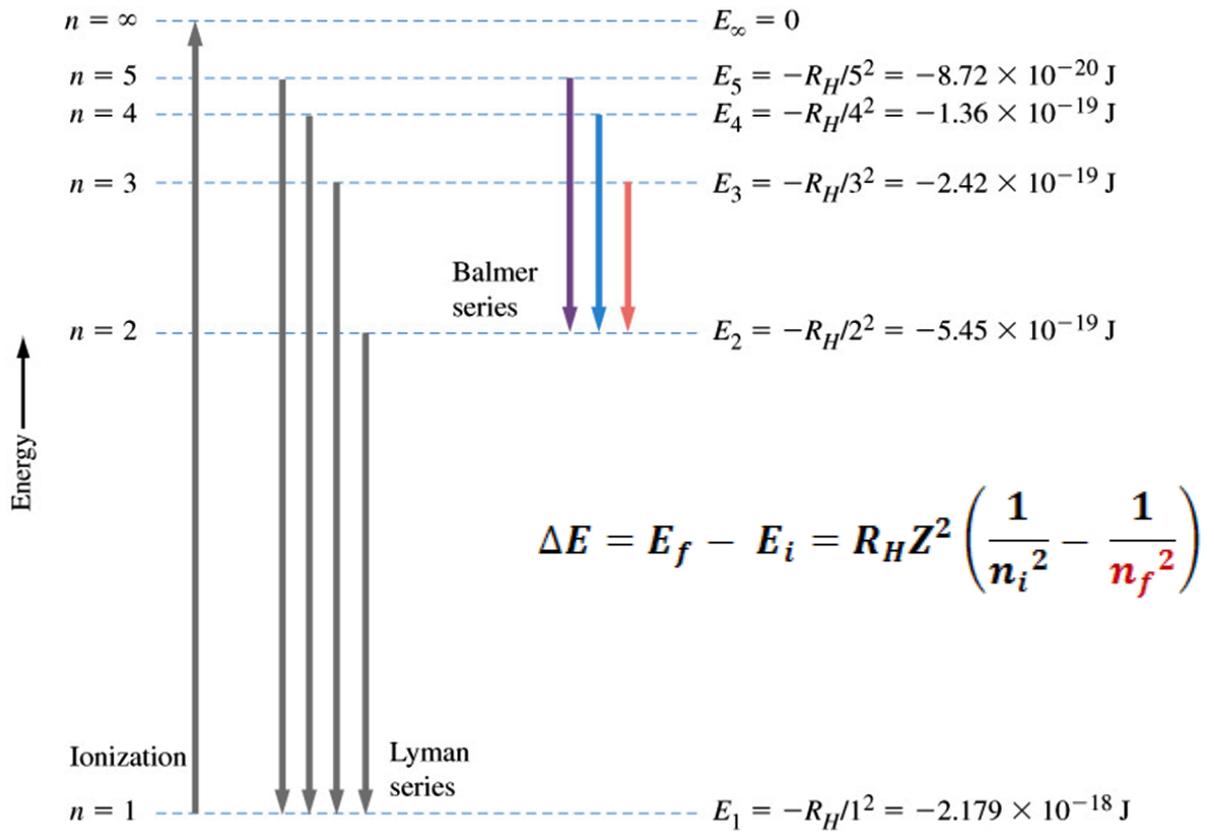


$$E_n = -2.176 \times 10^{-18} \frac{Z^2}{n^2} \text{ (J)}$$

$$E_n = -13.605 \frac{Z^2}{n^2} \text{ (eV)}$$

2. Cuando un átomo está en uno de estos estados no irradia energía, pero al cambiar de un estado de alta energía (E_2) a uno de energía inferior (E_1), el átomo emite **un cuanto** de radiación (luz) cuya energía $h\nu$ es igual en magnitud a la diferencia de energía entre ambos niveles ($E_2 - E_1$). **Es correcto.** Corresponde a la emisión de **un cuanto** de energía siguiendo la hipótesis de Planck. El electrón solo pasa a otra órbita de menor energía cuando emite exactamente la diferencia de energía entre ambas órbitas, que puede ser un número entero de veces el cuanto $h\nu$.





Ejercicio: Demostrar con este modelo que la transición de Balmer $n = 5$ a $n = 2$ (tránsito en color violeta) en el átomo de H, libera cuanto de luz cuya longitud de onda es 434.2 nm:

3. En cualquiera de estos estados, el electrón se mueve siguiendo una órbita circular alrededor del núcleo. **No es correcto.** La trayectoria del electrón en un átomo no es circular. Hoy sabemos que la forma más exacta de definir la posición del electrón en el átomo es mediante el concepto de **orbital**. Un orbital es una expresión matemática que nos da la probabilidad de encontrar al electrón en torno al núcleo. La forma de los orbitales puede ser esférica, alargada e incluso más compleja.

4. **Los estados de movimiento electrónico permitidos son aquellos en los que el momento angular del electrón es múltiplo entero de $h/2\pi$.** **Este postulado no es correcto** porque trata al electrón como una masa planetaria orbitando alrededor del núcleo. Por tanto Bohr asume que se puede determinar con precisión su momento lineal y posición. El principio de incertidumbre de Heisenberg demuestra que no es posible.

El átomo. Dimensiones y datos físicos.

Diámetro **nuclear** $\approx 10^{-15}$ m

Diámetro **atómico** $\approx 10^{-10}$ m

Partícula	Masa, kg	Carga, C	Carga, e
Electrón (corteza)	9.109×10^{-31}	-1.602×10^{-19}	-1
Protón (núcleo)	1.673×10^{-27}	$+1.602 \times 10^{-19}$	+1
Neutrón (núcleo)	1.675×10^{-27}	0	0

Núcleo: cuerpo pesado, cargado positivamente y localizado en el centro del átomo, que está formado por protones y neutrones.

Número másico, N: es el número total de protones y neutrones que posee un átomo en su núcleo.

Número atómico, Z: número de protones que posee un átomo en su núcleo.

2.2. Los números cuánticos.

- En *mecánica cuántica* se introduce el concepto de *función de onda*. Cada partícula o sistema físico se puede describir por esta función de onda $\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})$ que depende de la posición y el tiempo.
- La *función de onda* se usa en la ecuación de **Schrödinger**, que comentaremos aquí solo para justificar la aparición de los números cuánticos. Esta ecuación representa en la mecánica cuántica lo que las ecuaciones de Newton ($F = m a$) en la mecánica clásica.
- La ecuación de **Schrodinger** para el movimiento de una partícula en una dirección (x) es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

Donde m es la masa de la partícula y V es su energía potencial expresada en función de x . Las incógnitas de esta ecuación son la energía, E , y la función de onda Ψ . Cuando se aplica esta ecuación al sistema atómico más sencillo como el átomo de hidrógeno (formado por un protón y un electrón), al resolver la ecuación se obtiene que la energía E aparece en función de n , siendo n un número entero positivo ($n=1, 2, 3, \dots$), es decir la energía no puede tomar cualquier valor sino que está cuantizada. En cuanto a Ψ , esta función por sí misma no tiene significado físico pero su cuadrado nos da la **probabilidad** de encontrar a una partícula en una zona determinada (hipótesis de Born).

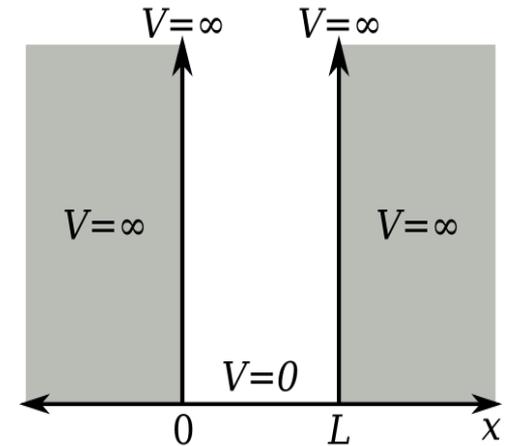
Resolución de la ecuación de **Schrödinger** usando un modelo simple;
El modelo de la **partícula en una caja de potencial** unidimensional.

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

Para resolver esta ecuación diferencial hemos de hallar ψ y E .

Consideramos el caso hipotético de una partícula atrapada en un pozo de potencial. La partícula queda atrapada porque mientras se mueve entre $(0, L)$ su potencial V es **cero**, pero al acercarse a las paredes en $x = 0$ y $x = L$ el potencial se hace infinito. Además, la función de onda ψ vale cero en $x = 0$ y $x = L$ (condiciones límite). La ecuación se simplifica a:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$



Desarrollo matemático

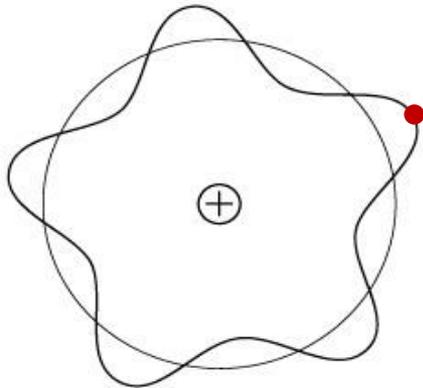
$\psi = A \text{ Sen } kx$ Debemos hallar A y k

$$\psi(L) = A \text{ Sen } kL = 0 \Rightarrow \begin{matrix} kL = n\pi \\ k = \frac{n\pi}{L} \end{matrix} \Rightarrow \psi = A \text{ Sen } \frac{n\pi}{L} x$$

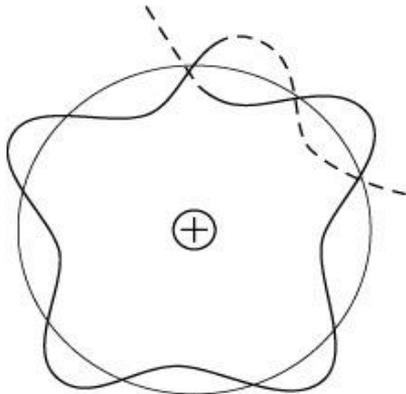
$dP = \psi^2(x) dx$ Hipótesis de Born

$$P = \int_0^L \psi^2(x) dx = 1 \Rightarrow \int_0^L A^2 \text{Sen}^2 \frac{n\pi}{L} x dx = A^2 \frac{L}{2} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{ Sen } \frac{n\pi}{L} x$$



(a)



(b)

Hipótesis de *de Broglie*

$$m v = p = \frac{h}{\lambda}$$



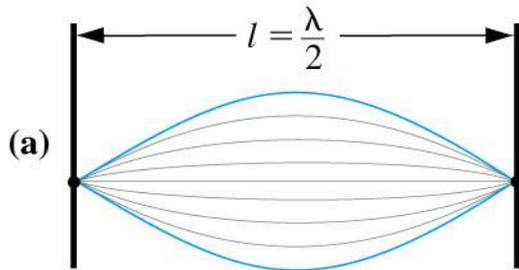
Si la luz que es una onda puede ser también concebida como una partícula, **¿podría el electrón (partícula) asemejarse a una onda?...**

El físico francés **Louis De Broglie** (Nobel de Física, 1929) formula la anterior hipótesis que, en realidad, viene a afirmar que **toda partícula en movimiento lleva una onda asociada.**

Ej: Un coche de 1000 kg a 120 km/h lleva asociada una onda de $2 \cdot 10^{-38}$ m (inapreciable). Sin embargo, para un **e⁻** moviéndose a 10^6 m/s ($m = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg) la onda asociada a su movimiento es $7.3 \cdot 10^{-10}$ m).

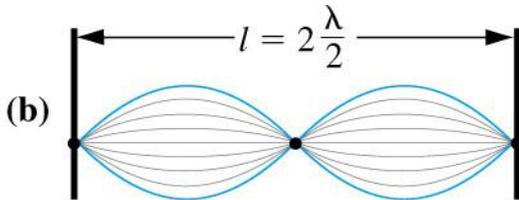
Si el electrón sigue órbitas estables (estacionarias) alrededor del núcleo, la trayectoria ondulatoria total debe ser un número entero (imagen superior).

Volviendo a la caja de potencial:

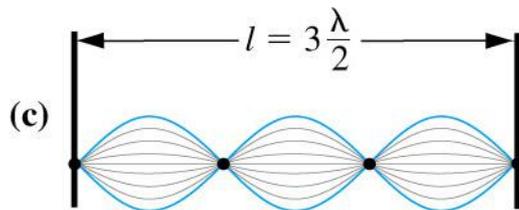


$$L = n \frac{\lambda}{2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$E_K = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2m} p^2$$



$$E = \frac{1}{2m} \frac{h^2}{\lambda^2} = \frac{1}{2m} \frac{h^2}{\frac{4L^2}{n^2}} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$



$$E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

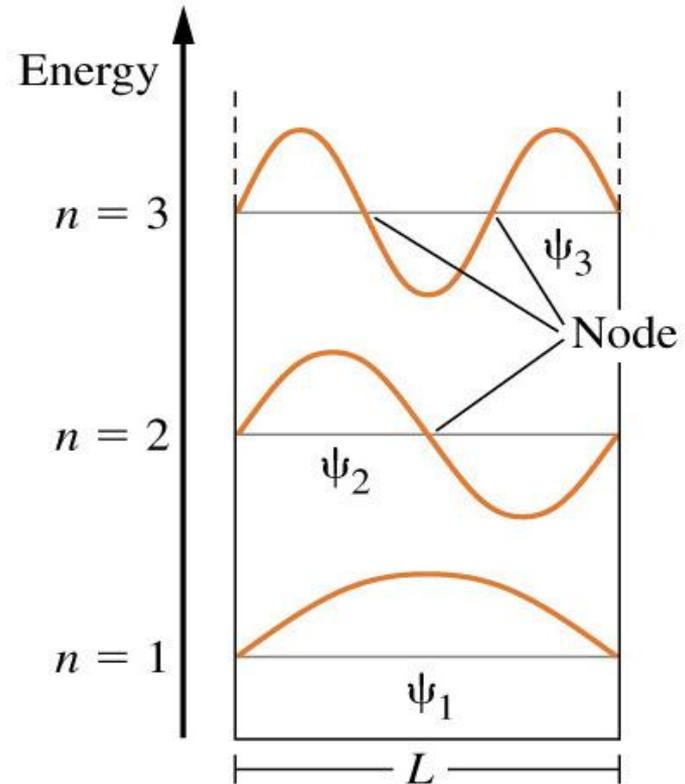
Solución para la ecuación de Schrodinger en una caja de potencial unidimensional.



$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{Sen} \frac{n\pi}{L} x$$

$$E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

La cuantización de la E aparece de forma natural (matemática) al resolver el problema de la partícula en la caja y establecer unas condiciones límite similares a las que experimentaría el electrón orbitando en torno al núcleo. El concepto de onda estacionaria introduce indirectamente la cuantización al introducir n.



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

The wave functions

Consideremos el átomo de hidrógeno por ser el sistema más simple formado únicamente por un **protón** en el núcleo y un **electrón** en la corteza externa. Al resolver la ecuación de Schrodinger para este átomo aparecen **tres números cuánticos**. Estos números cuánticos son:

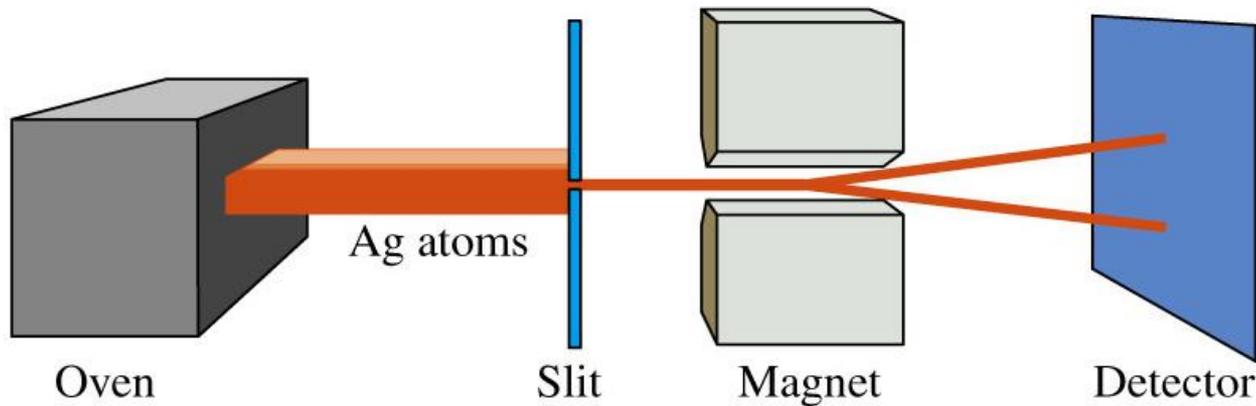
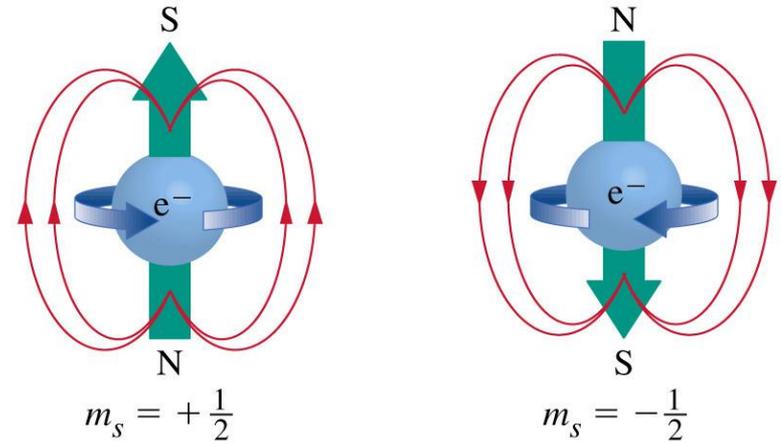
Número cuántico principal, n . Puede tomar cualquier valor entero positivo, mayor que cero, es decir $n = 1, 2, 3, \dots$. Es el número cuántico más importante porque su valor determina la energía del electrón en el átomo de hidrógeno. El valor de n en átomos polielectrónicos se relaciona con la distancia al núcleo del electrón. A mayor valor de n el orbital es más grande (menos penetrante).

Número cuántico secundario o del momento angular, l . Expresa la “forma” o geometría de los orbitales y determina el momento angular del electrón. A mayor valor de l mayor momento angular. Ahora bien, si el electrón posee momento angular también tiene energía cinética y la cantidad de energía está limitada por la energía total del electrón, es decir, no puede ser mayor que n . Puede demostrarse que l toma los valores: $0, 1, 2, \dots, n-1$. Cada valor de l es un subnivel de energía del nivel n .

Número cuántico magnético, m_l . Describe la orientación del orbital en el espacio. El electrón, en su movimiento orbital alrededor del núcleo, genera un campo magnético. El valor de m_l está asociado al giro del electrón y, por tanto, a su momento angular l . Así que m_l toma valores desde $-l$ hasta $+l$ pasando por el **cero**, es decir, $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l$ ($2l+1$ valores).

Experimento de Stern-Gerlach.

Átomos de Ag vaporizados en un horno son colimados en un haz. El haz de átomos pasa por un imán que divide el haz en dos. Solo puede explicarse suponiendo que la mitad de los átomos tenga un momento de spin igual pero de signo opuesto a la otra mitad ($m_s = +\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$)



Número cuántico del spin, m_s . Este número se postula a partir de la experimento anterior. Dado que **el electrón** gira también alrededor de su propio eje (spin = giro), al ser una partícula cargada en movimiento **genera un campo magnético** asociado su giro. Se comporta entonces como un pequeño imán y es sensible a otros campos magnéticos. Como el giro puede ser solo en dos direcciones (rotación a derechas o a izquierdas) el número cuántico del spin, m_s solo puede tomar dos valores que son $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$.

Los números cuánticos partiendo de n

n	l	Orbital	m _l	m _s	Combinaciones
1	0	1s	0	+ ½, - ½	2
2	0	2s	0	+ ½, - ½	2
2	1	2p	-1, 0, +1	+ ½, - ½	6 (total 8)
3	0	3s	0	+ ½, - ½	2
3	1	3p	-1, 0, +1	+ ½, - ½	6
3	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	+ ½, - ½	10 (total 18)
4	0	4s	0	+ ½, - ½	2
4	1	4p	-1, 0, +1	+ ½, - ½	6
4	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	+ ½, - ½	10
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	+ ½, - ½	14 (total 32)
n	0, 1, ... n-1	n orbitales	-l, ..., 0, ..., +l	+ ½, - ½	2n ²

Principio de exclusión de Pauli: Dos electrones en un mismo orbital (mismos n, l, m_l), deben tener spines diferentes (m_s).

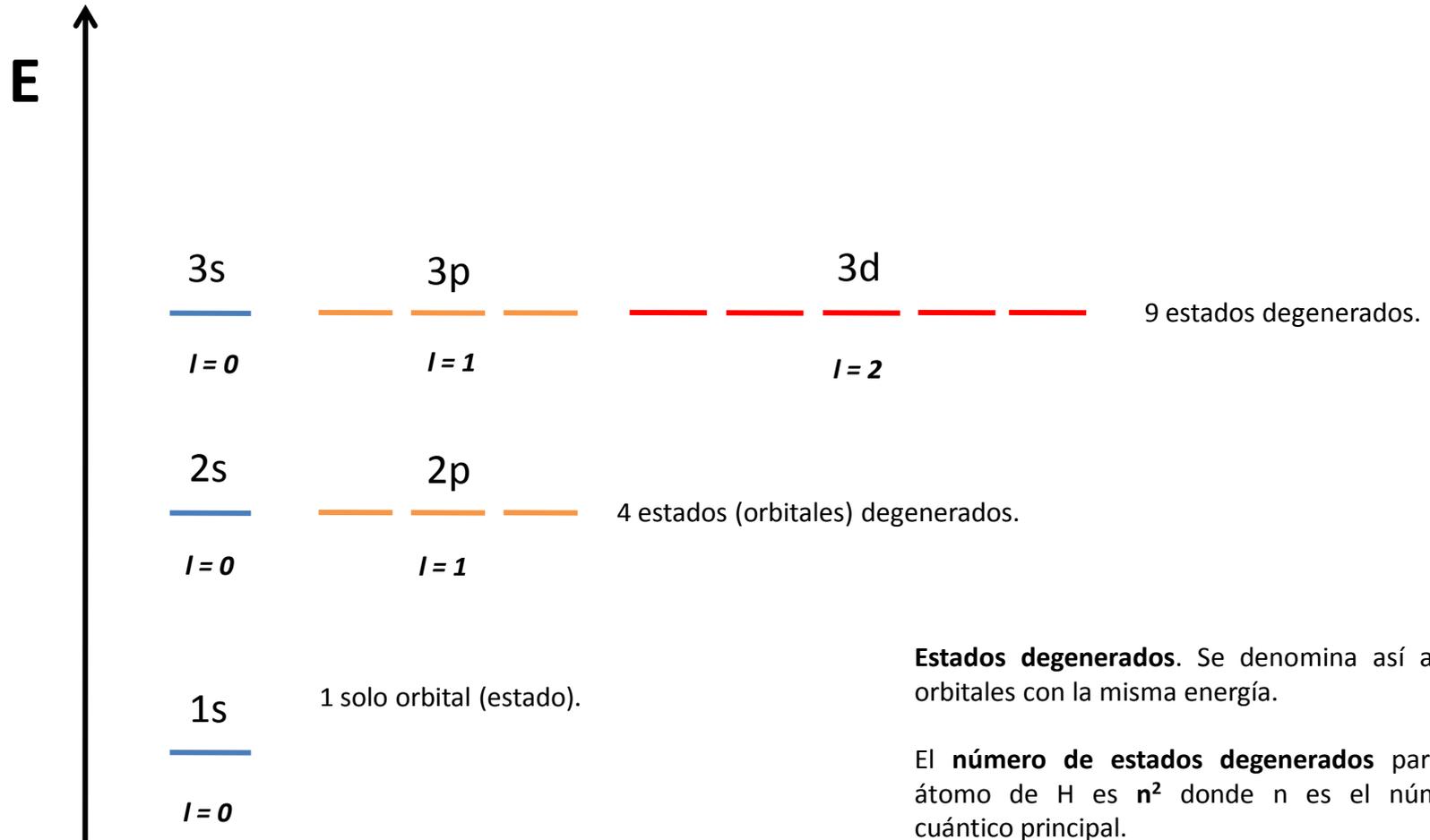
2.3. Orbitales atómicos.

- La resolución de la ecuación de Schrodinger **para el átomo de hidrógeno** lleva a la expresión matemática (Ψ) de los orbitales atómicos. En sentido estricto, los orbitales son expresiones matemáticas que constan de una parte radial y otra angular y que describen los estados energéticos del electrón en el átomo.
- En nuestro caso, es mucho más sencillo concebir los orbitales atómicos como zonas del espacio donde se encuentran los electrones.
- La ventaja de ser funciones matemáticas, es que se les puede asignar forma (geometría definida) y, por tanto, nos dan una idea de en qué dirección es más probable encontrar al electrón.
- La **energía** de los orbitales depende del número cuántico **n** y a su vez, para cada nivel de **n**, se establecen diferentes subniveles de energía que vienen dados por el número cuántico **l**. Además, como vemos en la tabla anterior, cada valor de **l da nombre a cada orbital**:
 - $l = 0$ orbitales **s**
 - $l = 1$ orbitales **p**
 - $l = 2$ orbitales **d**
 - $l = 3$ orbitales **f**
- Finalmente, la orientación espacial o geometría del orbital dependen de **m_l** .

Entonces ¿qué es un *orbital*?....

Un orbital es solo una función matemática. Para encontrar la forma matemática de cada orbital sería necesario resolver la ecuación de Schrödinger para cada átomo estudiado. Desde el punto de vista físico podemos imaginar el orbital como una región tridimensional, que está dispuesta alrededor del núcleo atómico y en la cual los electrones se mueven. Como para cada orbital existe un nivel de energía (ec. Schrödinger) les podemos asignar a estos orbitales diferentes niveles de energía que dan idea de su estabilidad. Los orbitales más estables son los de menor energía y viceversa. Asimismo, cada orbital puede alojar dos electrones.

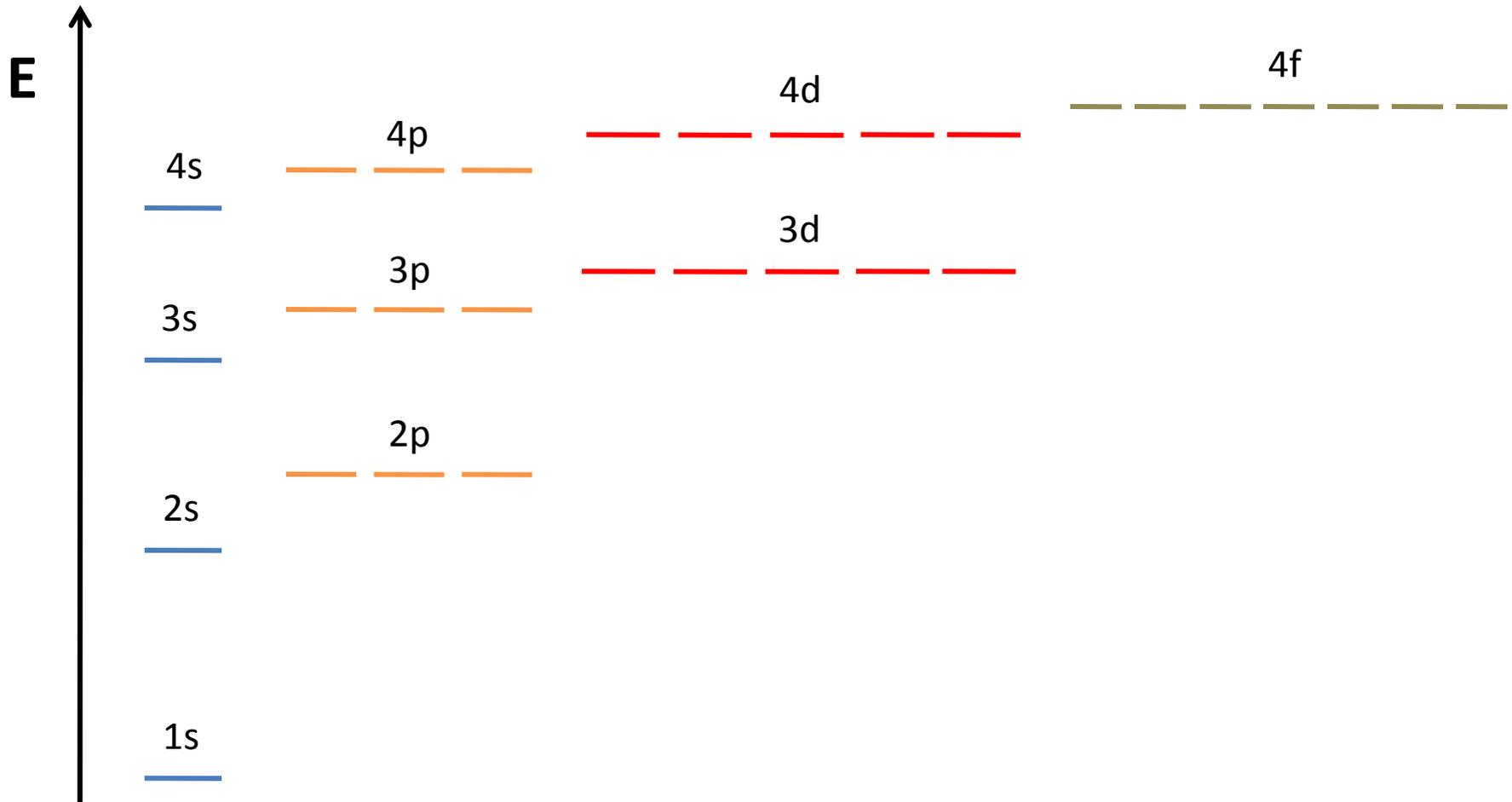
Diagrama de energía de los orbitales en *átomo de hidrógeno*



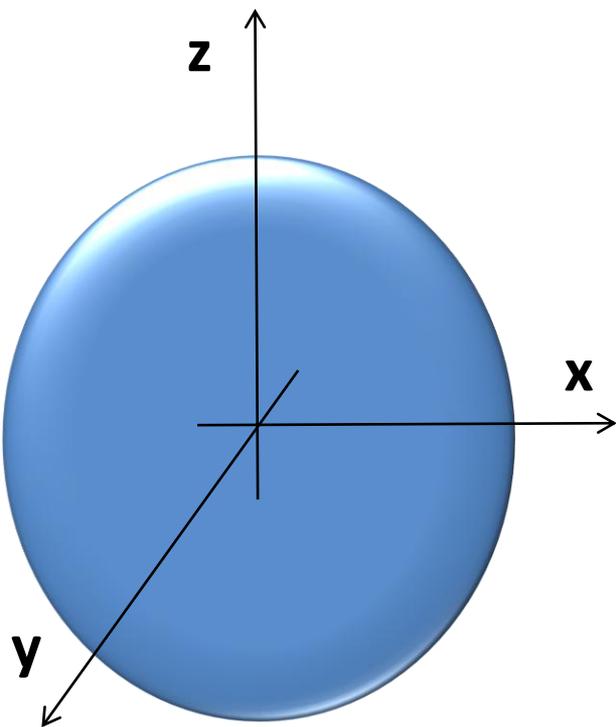
Estados degenerados. Se denomina así a los orbitales con la misma energía.

El **número de estados degenerados** para el átomo de H es n^2 donde n es el número cuántico principal.

Diagrama de energía de los orbitales en *átomos polieletrónicos*

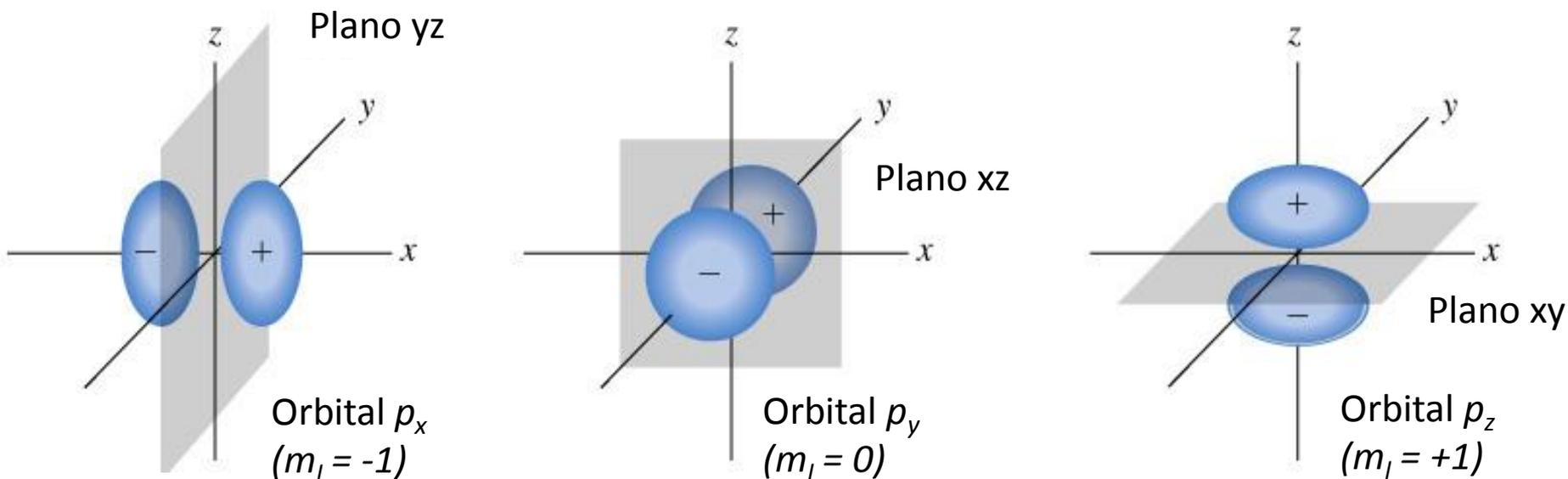


Representación gráfica de orbitales: **orbitales s ($l = 0$)**



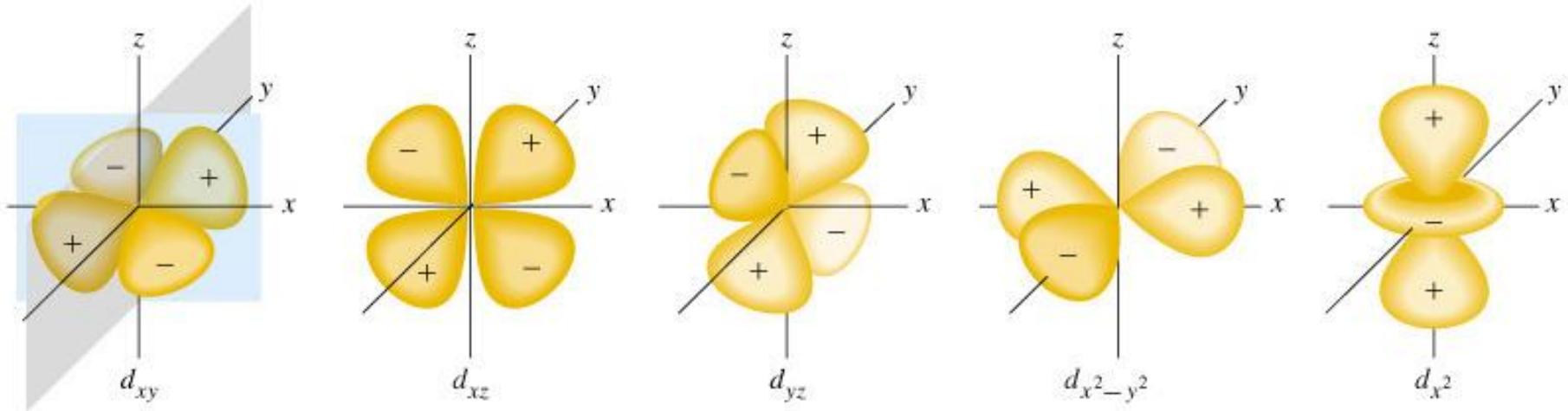
Cuando $l = 0$ tenemos los orbitales s. Como m_l solo puede tomar un valor (0), solo existe *un orbital s* para cada nivel n. Concibiendo el orbital como la zona del espacio donde están los electrones, **en orbitales s**, al tener *geometría esférica*, la probabilidad de encontrar al electrón es la misma en todas las direcciones. **En los orbitales s no existen direcciones preferenciales**. Además, en los diagramas de energía vemos que los orbitales **1s** y **2s** aparecen en la parte inferior, lo que significa que son **energéticamente más estables** que otros orbitales. Físicamente interpretamos esta estabilidad por su cercanía al núcleo del átomo.

Representación gráfica de orbitales: orbitales p ($l = 1$)



Cuando $l = 1$, m_l puede tomar tres valores ($-1, 0, +1$) por lo que tenemos *tres orbitales p*. Los **orbitales p** no tienen simetría esférica y están formados por dos **lóbulos**. **En los orbitales p existen direcciones preferenciales**, por lo que la probabilidad de encontrar al electrón no es la misma en todas las direcciones, siendo mayor a lo largo de los ejes que atraviesan los **lóbulos**. Además, existen lugares donde teóricamente la probabilidad de encontrar el electrón es cero (nodos). Por ejemplo el orbital p_x tiene un nodo en el plano yz. El orbital, al ser una función matemática, posee una parte positiva y otra negativa. Los orbitales p_x , p_y y p_z tienen la misma energía solo cambia su disposición geométrica (m_l). En los diagramas de energía vemos que los orbitales 2p, 3p y 4p aparecen ligeramente por encima de los respectivos 2s, 3s y 4s. Es decir, son orbitales menos penetrantes que los orbitales s y, por tanto, son **energéticamente menos estables**.

Representación gráfica de orbitales: **orbitales d ($l = 2$)**

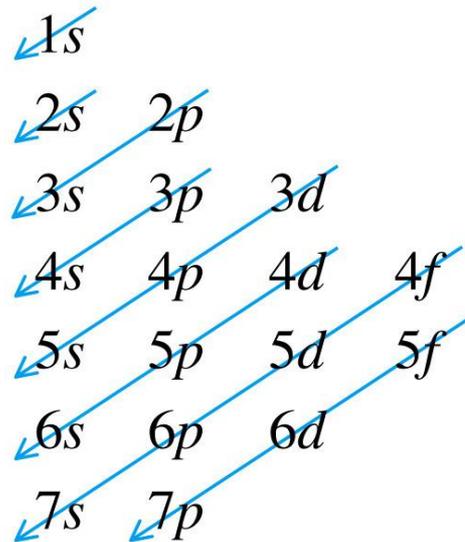


Cuando $l = 2$, m_l puede tomar cinco valores ($-2, -1, 0, +1, +2$) por lo que tenemos **cinco orbitales d**. En **orbitales d** tampoco hay simetría esférica y están formados por varios **lóbulos**. **En estos orbitales también existen direcciones** preferenciales, igual que en los p, por lo que la probabilidad de encontrar al electrón tampoco es la misma en todas las direcciones. En dos de estos orbitales los lóbulos se alinean a lo largo de los ejes coordenados z o x,y (orbitales d_x^2 y $d_x^2 - y^2$). En este caso la probabilidad de encontrar al electrón es más alta en estos ejes. En los otros tres orbitales (d_{xy} , d_{xz} y d_{yz}) los lóbulos están orientados a 45° entre los ejes coordenados y esas son las direcciones de más alta probabilidad electrónica. También tenemos dos nodos (planos nodales) en cada orbital. Por ejemplo, en el orbital d_{xy} hay dos nodos en los planos xz e yz. Los orbitales d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , d_x^2 , $d_x^2 - y^2$ tienen la misma energía solo cambia su disposición geométrica (m_l). En los diagramas de energía vemos que los orbitales d aparecen ligeramente por encima de los respectivos p. Se trata de orbitales más externos.

2.4. Llenado de orbitales.

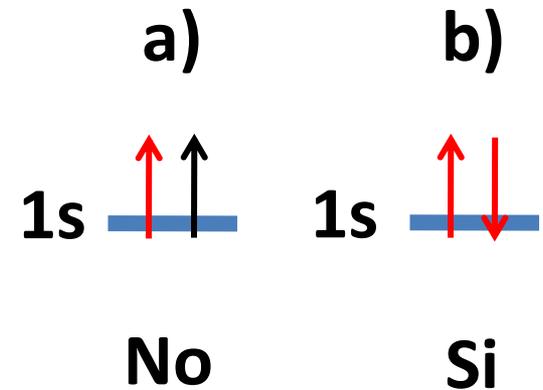
Para hallar la configuración electrónica de un elemento hemos de asignar dos electrones a cada orbital. Para ello, seguimos tres reglas:

1. Regla de ***Aufbau***. Se rellenan los orbitales de forma que la energía sea mínima.

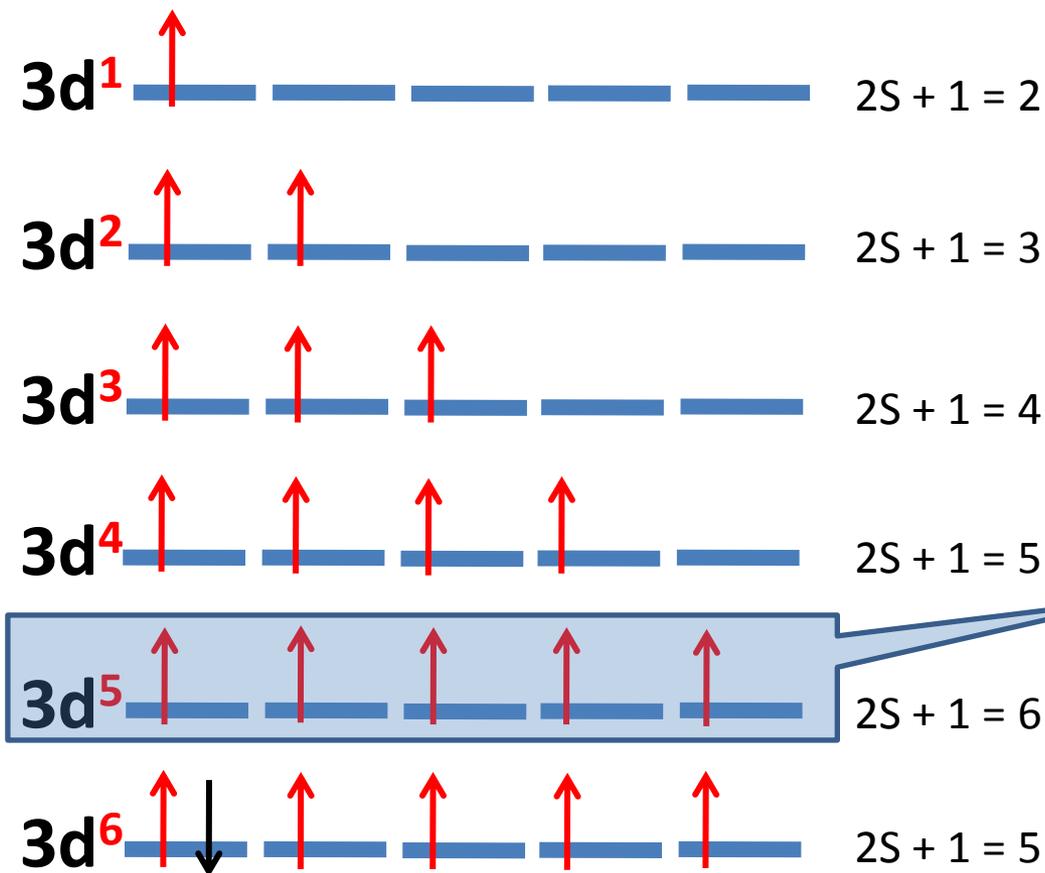


2. Principio de exclusión de *Pauli*. En un orbital no puede haber dos electrones con sus cuatro números cuánticos iguales.

- Considerando por ejemplo un átomo de Helio (He), al rellenar su único orbital atómico, el 1s, debemos colocar dos electrones. Se presentan, por tanto, las siguientes opciones:
- En la opción **a)** los números cuánticos (n, l, m_l, m_s) que caracterizan al primer y segundo electrón en el orbital 1s son $(1, 0, 0, +\frac{1}{2})$ y $(1, 0, 0, +\frac{1}{2})$. Esta opción no es posible pues tendríamos dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales tal como indica el **principio de exclusión de Pauli**.
- En la opción **b)** el primer electrón se caracteriza por $(1, 0, 0, +\frac{1}{2})$ mientras que el segundo por $(1, 0, 0, -\frac{1}{2})$ por lo que no se viola el **principio de exclusión de Pauli**.



3. Regla de **Hund**. Al rellenar los orbitales se busca la máxima multiplicidad de spin. En otras palabras, el orbital se semiocupa antes de acoplar segundos electrones. Esta regla es perfectamente concordante con el principio de mínima energía, pues existe menor repulsión entre cargas negativas si antes colocamos los electrones desapareados (orbital semiocupado).



La regla de llenado de **Hund** se ilustra aquí al llenar con 6 electrones los cinco orbitales 3d. La máxima multiplicidad de spin ($M = 2S+1$) se da al colocar cinco e⁻ todos ellos desapareados. A partir del estado $3d^6$ vuelve a disminuir la multiplicidad hasta llegar a uno en el llenado del $3d^{10}$.

Orbitales **semillenos** poseen una alta estabilidad (alta multiplicidad = estabilidad)

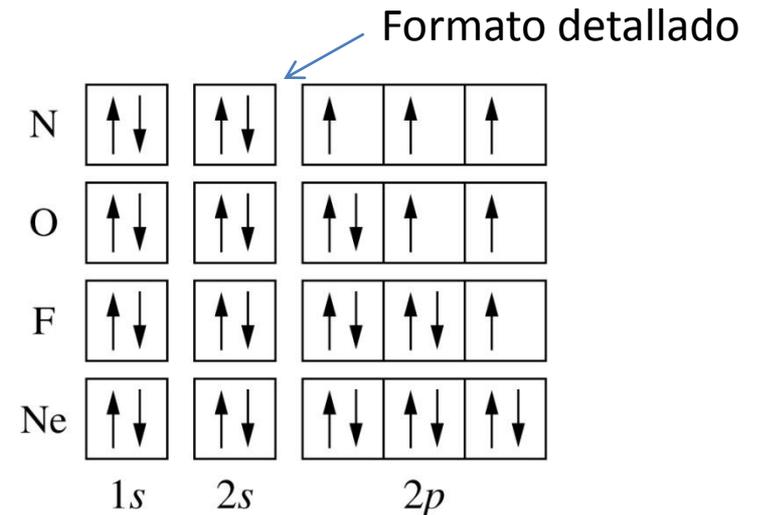
2.5. Configuración electrónica.

Para obtener la configuración electrónica de un átomo o ión basta con llenar los orbitales con electrones en orden de energía creciente, teniendo en cuenta las reglas anteriormente expuestas. Como dato de partida siempre se da el **número atómico Z**, que indica el número de protones del elemento. Si se trata de un átomo neutro Z coincidirá con el número de electrones. En aniones A^{n-} al tener un exceso de n electrones al número Z se le suman tantos electrones (n) como carga neta tenga el anión. En cationes C^{n+} se restan n electrones al número Z.

Ejemplo. Obtener las configuraciones electrónicas de los átomos cuyo número atómico Z está comprendido entre 1-10.

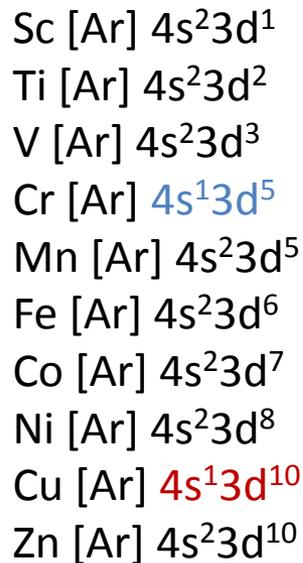
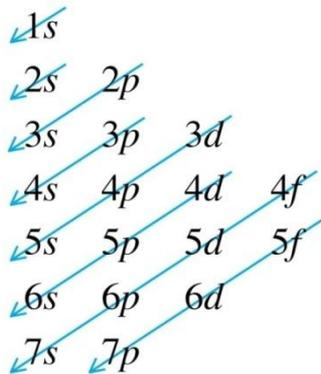
*Li: [He] 2s¹ equivale a:
1s² 2s¹

H: 1s¹
He: 1s²
*Li: [He] 2s¹ ← Formato clásico
Be: [He] 2s²
B: [He] 2s²2p¹
C: [He] 2s²2p²



Metales de transición.

Muchos metales de transición son de especial interés para nosotros pues se usan como materiales de construcción. Algunos ejemplos son el **Cu** y sus aleaciones, el **Ti** y sus aleaciones, el **V** a veces aleado en *aceros*, el **Cr** usado como revestimiento protector en *cromados*, el **Fe** componente principal de los *aceros* al carbono para hormigón armado o el **Zn** usado en *galvanizados*. En los metales de transición, la energía del orbital 4s es menor que la del 3d, por lo que los primeros se llenan antes. Sin embargo, las configuraciones electrónicas del Cr y el Cu alteran parcialmente el orden de llenado. En el caso del Cr, energéticamente es más favorable alcanzar la máxima multiplicidad de spin (menor repulsión electrónica) en el orbital 3d. En el caso del Cu, es más favorable aparear todos los electrones en el orbital 3d (capa cerrada).



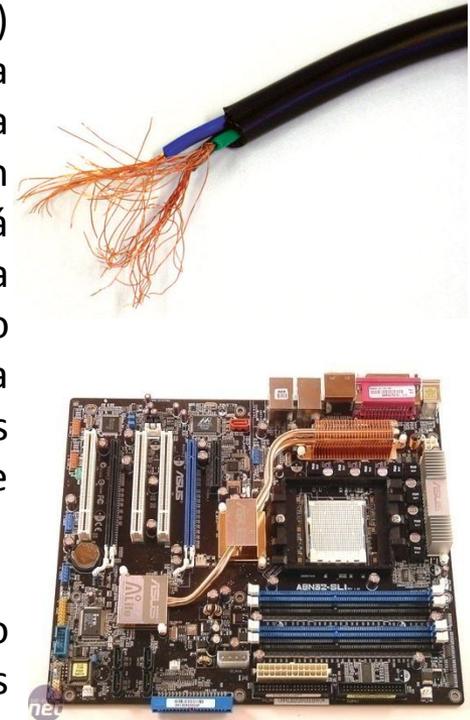
El Cu es el metal más usado en **cableado** por su alta conductividad eléctrica. La configuración electrónica puede explicar algunas de sus propiedades.

Configuración electrónica y **conductividad eléctrica** en metales de transición.

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
3	4	6	12	1	16	25	23	93	27
[Ar] 4s ² 3d ¹	[Ar] 4s ² 3d ²	[Ar] 4s ² 3d ³	[Ar] 4s ¹ 3d ⁵	[Ar] 4s ² 3d ⁵	[Ar] 4s ² 3d ⁶	[Ar] 4s ² 3d ⁷	[Ar] 4s ² 3d ⁸	[Ar] 4s ¹ 3d ¹⁰	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰

Tomando la conductividad del mejor conductor eléctrico conocido (plata) como 100%, en la segunda fila, se ha registrado la conductividad relativa a la plata para el resto de metales en %. Se aprecia un aumento brusco y caída repentina de la conductividad al pasar de V-Cr-Mn y de Ni-Cu-Zn. El electrón solitario del orbital **4s**, podría explicar este efecto. La capa 3d en el Cr está “cómoda” con su configuración al tener *alta multiplicidad de spin* (baja repulsión eléctrica) y la capa 3d del Cu está totalmente llena, por lo que no parece que estos electrones (acomodados) “trabajen” en el transporte de la corriente eléctrica (conductividad). Sin embargo, el electrón solitario en 4s está disponible y ocupa un orbital no direccional **4s** lo que explicaría en parte la alta conductividad del Cr o Cu al compararlos con sus metales vecinos.

En la segunda serie de transición, la plata da un comportamiento análogo pues su configuración electrónica es [Kr] 4d¹⁰5s¹. Al comparar con sus metales vecinos (plomo y cadmio) los valores de conductividad, en m⁻¹ Ω⁻¹ de Pb, Ag y Cd son: 5 x 10⁶, 63 x 10⁶ y 14 x 10⁶, respectivamente.



Configuración electrónica y **propiedades magnéticas** de materiales.

El *diamagnetismo* o *paramagnetismo* de un elemento se puede predecir por su configuración electrónica. Casi todos los materiales son sensibles (susceptibles) en mayor o menor grado a los **campos magnéticos**, de forma que dependiendo de su naturaleza el material puede ser repelido o atraído por el campo. Los materiales que se repelen con el campo magnético se llaman **diamagnéticos**, mientras que los que son atraídos son **paramagnéticos**.

El *paramagnetismo* está siempre asociado a electrones desapareados, ya que el electrón girando en torno a su propio eje genera un campo magnético. Es decir el electrón desapareado se comporta como un pequeño imán que no se cancela con otro imán de signo contrario. Por tanto un átomo es diamagnético cuando todos sus e^- están apareados (sus spines se cancelan). La susceptibilidad magnética de un elemento mide el grado de atracción o repulsión de este frente al campo magnético. Los materiales paramagnéticos suelen tener valores de susceptibilidad altos y positivos. Un ejemplo típico es el Fe (ferromagnetismo).

Fe: [Ar] $4s^2 3d^6$ (posee cuatro e^- desapareados en el orbital 3d)

El Fe^{2+} muestra la misma susceptibilidad que su precursor Fe. Esto indica que los dos electrones que se pierden son los del orbital 4s. Por tanto Fe^{2+} : $4s^0 3d^6$. Finalmente el Fe^{3+} es aún más paramagnético que Fe y Fe^{2+} , lo que se interpreta por la extracción de un e^- adicional del orbital 3d que resulta en cinco e^- desapareados; Fe^{3+} : [Ar] $4s^0 3d^5$ (mayor paramagnetismo).

2.6. Tabla periódica de los elementos.

- El **sistema periódico** se divide en *periodos* y *grupos*. La posición de cada elemento en la tabla no es casual, sino que reproduce bastante bien sus propiedades químico-físicas.
- En sentido horizontal tenemos **7 periodos** principales. En vertical **18 grupos**. Además cada grupo tiene una identificación e incluso nombre propio. Así por ejemplo, el primer grupo representa los metales alcalinos. El último los gases nobles. Las propiedades químicas y la reactividad de los elementos dentro de un mismo grupo son muy similares.
- En el sistema periódico actual tenemos 118 elementos.

La Tabla Periódica

Metales alcalinos

Gases Nobles

Alcalino-térreos

Halógenos

Grupos

Metales de transición

1 1A 1 H 1.00794	2 2A 2 He 4.00260											13 3A 5 B 10.811	14 4A 6 C 12.011	15 5A 7 N 14.0067	16 6A 8 O 15.9994	17 7A 9 F 18.9984	18 8A 10 Ne 20.1797		
3 Li 6.941	4 Be 9.01218	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	13 Al 26.9815	14 Si 28.0855	15 P 30.9738	16 S 32.06	17 Cl 35.4527	18 Ar 39.948		
11 Na 22.9898	12 Mg 24.3050	19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.9381	26 Fe 55.847	27 Co 58.9332	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29		
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	57 *La 138.906	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)		
87 Fr (223)	88 Ra 226.025	89 †Ac 227.028	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (272)		114 (287)		116 (289)		118 (293)		

*Lanthanide series	58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	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	71 Lu 174.967
†Actinide series	90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	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)	103 Lr (260)

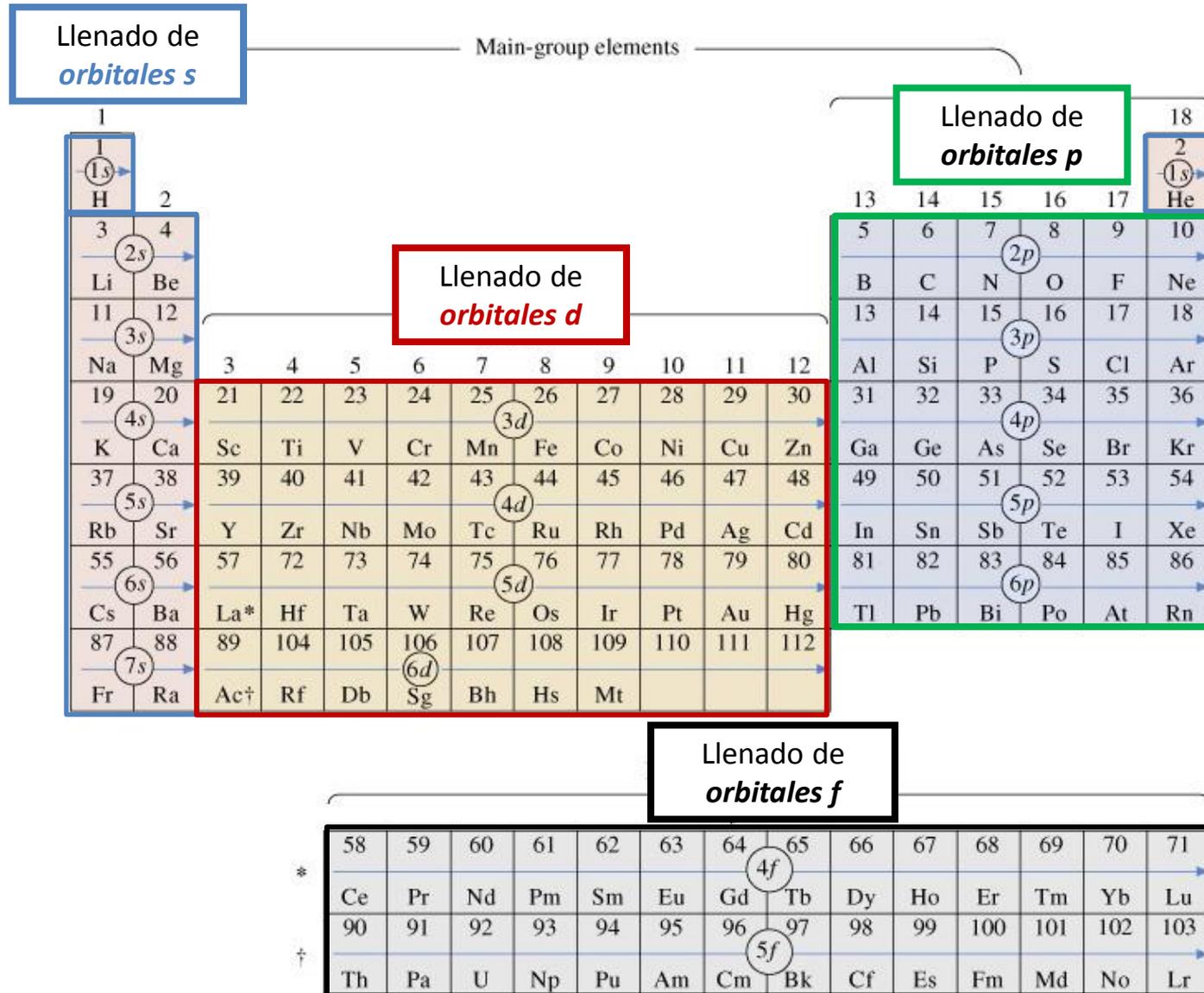
Grupos

Lantánidos y actínidos

Razonando el sistema periódico (configuración electrónica).

- La posición de cada elemento en el sistema periódico está relacionada con su configuración electrónica. Los **periodos** (horizontales) se caracterizan por el **número cuántico principal n** o nivel principal de energía, mientras que los **grupos** (verticales) representan la ocupación electrónica de los distintos **subniveles s, p, d y f** .
- En el primer periodo ($n=1$), se llena el orbital de más baja energía $1s$ y por tanto solo existen dos elementos H y He ($Z = 1-2$).
- En el segundo periodo ($n=2$), los átomos Li, Be, B, C, N, O, F y Ne son capaces de albergar 8 electrones más que se introducen en los orbitales $2s$ y $2p$ ($Z = 3-10$).
- En el tercer periodo ($n=3$) se introducen otros 8 electrones más ($Z = 11-18$) y se produce el llenado de los orbitales $3s$ y $3p$.
- En el cuarto periodo ($n=4$) se introduce la primera serie de metales de transición, que son los responsables del llenado $3d$ (pueden albergar 10 electrones). Así el periodo comienza con el llenado de los $4s$, los $3d$ y los $4p$ lo que supone un total de 18 electrones en este periodo ($Z = 19-36$). Ídem en el quinto periodo ($n=5$) donde se llenan los orbitales $5s$, $4d$ y $5p$ ($Z = 37-54$).
- El sexto periodo ($n=6$) es diferente porque, después de llenar el orbital $6s$, entra un electrón en el $5d$ (Lantano), pero después se llenan los $4f$. En este último orbital, dado que $l=3$, m_l toma 7 valores desde $-3, \dots, 0, \dots, +3$ que con las dos orientaciones posibles de spin, hacen un total de 14 electrones dando lugar a los 14 elementos de la primera serie de los lantánidos.

Llenado de orbitales – sistema periódico



Carácter metálico de los elementos.

Main-group elements

Metales												No metales						18
		Otros metales																2
(1s) →												p block						(1s) →
1	2											13	14	15	16	17	18	
H	He											B	C	N	O	F	Ne	
(2s) →		Metales de transición										(2p) →						
3	4	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
Li	Be	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
(3s) →												(3p) →						
11	12	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
Na	Mg	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
(4s) →												(4p) →						
19	20	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
(5s) →												(5p) →						
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
(6s) →												(6p) →						
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
(7s) →												(7p) →						
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112							
Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt										

Metales													
f block													
58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

*
†

Elementos del sistema periódico con interés en edificación.

Todos los materiales de carácter metálico tienen interés potencial o real en edificación porque:

1. Son **buenos conductores** de la electricidad (instalaciones eléctricas).
2. Son **dúctiles**, es decir, al traccionar se deforman plásticamente. Gracias a ello, el acero proporciona capacidad de deformación al hormigón armado usado en estructuras de edificación.
3. Son **resistentes y duros**. Las barras de acero para hormigón, así como otros metales y aleaciones, rompen a alta carga en tracción y son muy duros superficialmente (poco penetrables por impacto). Ambas propiedades son importantes en materiales para edificación.
4. Cuando se cortan o frotan poseen **brillo** característico. El aluminio, el titanio y otros metales se usan con finalidad decorativa (brillo) y protectora.
5. Poseen puntos de **fusión** moderados-altos. Esto garantiza que son estables al calor.
6. Poseen **elevadas densidades**. A mayor densidad mejor compactidad, resistencia y durabilidad.
7. Algunos son **magnéticos**. Propiedad interesante en instalaciones.
8. Forman **aleaciones** con propiedades muy interesantes. Por ejemplo aleando un metal **ligero** y **frágil** con otro **pesado** y **resistente** podemos llegar a obtener una aleación **ligera** y **resistente**.
9. Tienen tendencia a **oxidarse**. La oxidación es un proceso de pérdida de electrones. Plantea un problema de cara a la durabilidad del metal, aunque a veces la propia oxidación protege al metal (pasivación).

Acero (aleación de Fe-C)



Fe [Ar] 4s²3d⁶

El Fe es un metal fácilmente oxidable, puede perder los dos electrones del orbital 4s y un tercero del 3d. De ahí que sus estados de oxidación más frecuentes sean +2 y +3 y por eso las especies FeO y Fe₂O₃ son estables (herrumbre). Para protegerlo se alea con otros elementos (C, Cr, V) o se recubre con metales como el Zn (galvanizado).

Fragmento de *meteorito*.



Acero oxidado

Zincado electrolítico - Recubrimientos de Zn



Palacio consistorial de Cartagena.

Zn: [Ar] 4s²3d¹⁰

En ambiente seco es un metal con poca tendencia a oxidarse. Cuando se oxida se recubre de un carbonato básico que protege al resto del metal (pasivación).

Además, por su configuración electrónica vemos que se trata de un metal de “capa cerrada”. Los orbitales más externos están llenos, lo que le proporciona estabilidad adicional frente a la oxidación.

Zn : [Ar] 4s²3d¹⁰
Zn²⁺: [Ar] 4s⁰3d¹⁰





Galvanizado
acero recubierto con Zn

Cromado – tratamiento metálico superficial



Cr: [Ar] $4s^13d^5$

Se trata de un metal resistente a la oxidación. Esta resistencia podría explicarse por su configuración electrónica debido a su alta multiplicidad de spin (estabilidad adicional). Además, el cromo se autoprotege por *pasivación* metálica.



Copyright © 2008 Theodore W. Gray



Copyright © 2008 Theodore W. Gray

Aleaciones: Acero aleado con Cr-V

Pigmentos para pinturas de edificación



Óxido de cromo. Posee una extraordinaria estabilidad a la luz y a los álcalis del cemento. Es un pigmento muy usado en morteros coloreados y pinturas.

Titanio y sus aleaciones



Dióxido de titanio (TiO₂)

Este compuesto se usa como pigmento **blanqueante** y **cubriente** en las pinturas de revestimiento por su opacidad a la luz. De esta forma la pintura no presenta efectos de transparencia del soporte sobre el que se aplica. Se puede pintar una pared oscura con un color claro sin que se transparente el fondo.

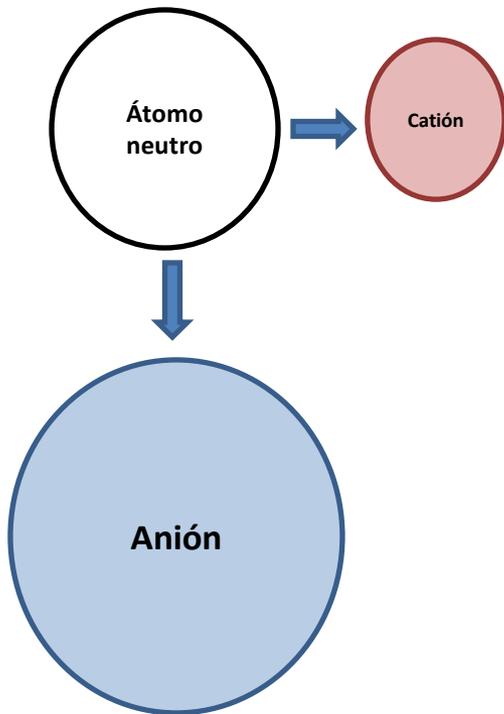


2.7. Propiedades periódicas.

- 1. Carga nuclear.** Aumenta ligeramente al avanzar por un periodo y rápidamente al bajar por un grupo. Esta carga está directamente relacionada con el número atómico Z , que indica el número de protones (cargas positivas) del núcleo.
- 2. Radio atómico.** Este valor viene condicionado por la carga del núcleo (Z) y la capa electrónica más externa. Hablamos de un tamaño del orden de picómetros, pm ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$) o de Angstroms ($1 \text{ A} = 10^{-10} \text{ m}$).
 - a.** Al avanzar por un **periodo**, lo que hacemos es colocar electrones dentro del mismo nivel principal n , en los diferentes subniveles s , d o p , así que la distancia de estos electrones al núcleo no varía mucho. Además la carga nuclear Z aumenta por lo que el radio disminuye al avanzar por un mismo periodo.
 - b.** Al bajar por un **grupo** los electrones se colocan en capas cada vez más externas por lo que el radio aumenta. Además, se produce un **efecto de apantallamiento** de los electrones más internos que impiden que los externos “sientan” el campo eléctrico intenso del núcleo. Gran parte del potencial eléctrico del núcleo se invierte en los electrones cercanos, que actúan como electrones “pantalla” respecto a los externos.

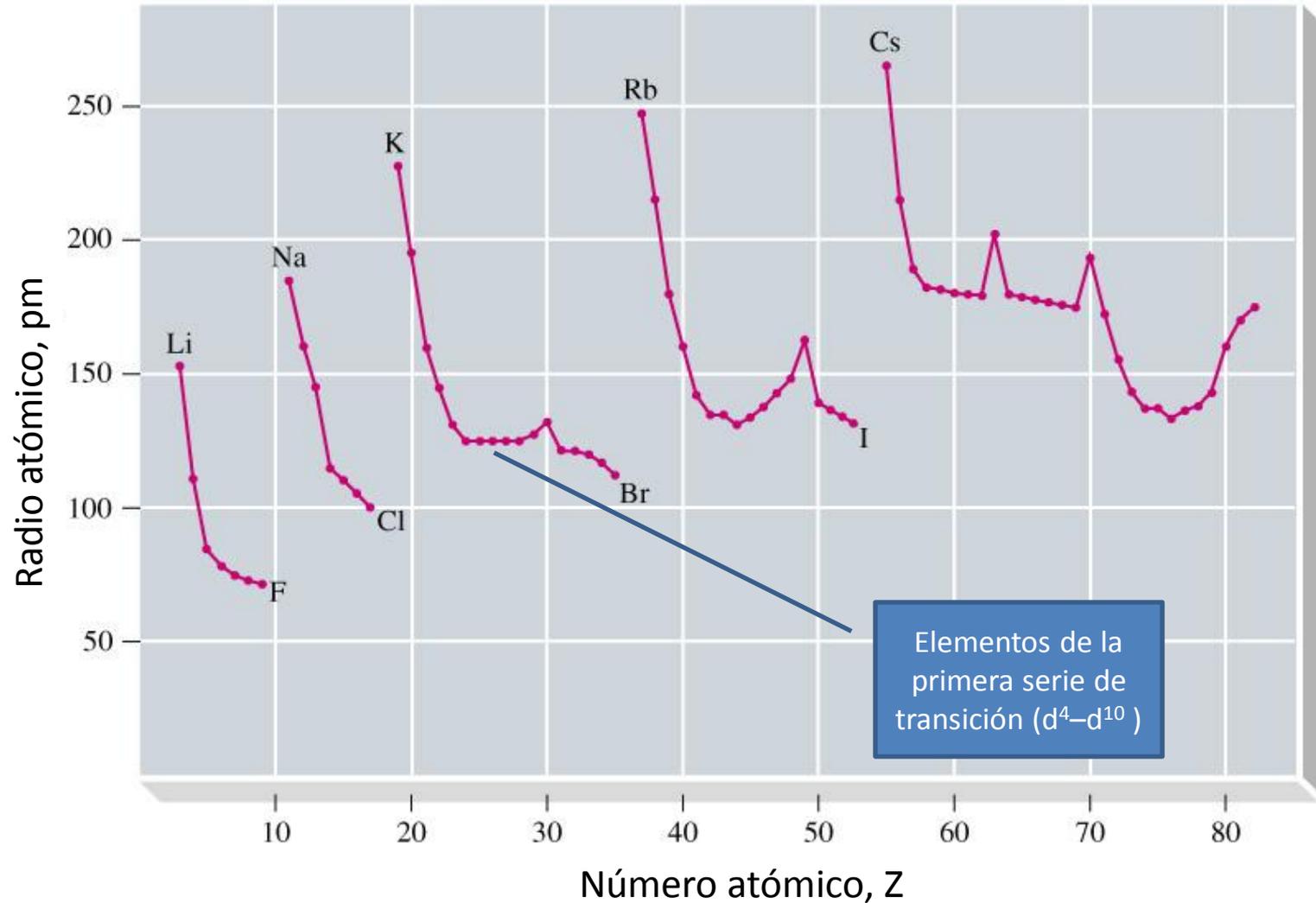
Radios catiónicos y aniónicos.

1 pm = 10^{-12} m
 1 pm = 100 Å



Li 152 Li ⁺ 59	Be 111 Be ²⁺ 27	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; background-color: #f0d0d0;"> El tamaño de un átomo de Na es de unos 186 pm ($1.86 \cdot 10^{-10}$ m) Al ionizarse y formar el Na⁺ su tamaño desciende a 99 pm. </div>										B 88	C 77	N 75 N ³⁻ 171	O 73 O ²⁻ 140	F 71 F ⁻ 133		
Na 186 Na ⁺ 99	Mg 160 Mg ²⁺ 72											Al 143 Al ³⁺ 53	Si 117	P 110 P ³⁻ 212	S 104 S ²⁻ 184	Cl 99 Cl ⁻ 181		
K 227 K ⁺ 138	Ca 197 Ca ²⁺ 100	Sc 161 Sc ³⁺ 75	Ti 145 Ti ²⁺ 86	V 132 V ²⁺ 79 V ³⁺ 64	Cr 125 Cr ²⁺ 82 Cr ³⁺ 62	Mn 124 Mn ²⁺ 83	Fe 124 Fe ²⁺ 77 Fe ³⁺ 65	Co 125 Co ²⁺ 75 Co ³⁺ 61	Ni 125 Ni ²⁺ 70	Cu 128 Cu ⁺ 96 Cu ²⁺ 73	Zn 133 Zn ²⁺ 75	Ga 122 Ga ³⁺ 62	Ge 122	As 121	Se 117 Se ²⁻ 198	Br 114 Br ⁻ 196		
Rb 248 Rb ⁺ 149	Sr 215 Sr ²⁺ 113											Ag 144 Ag ⁺ 115	Cd 149 Cd ²⁺ 95	In 163 In ³⁺ 79	Sn 141 Sn ²⁺ 93	Sb 140 Sb ³⁺ 76	Te 137 Te ²⁻ 221	I 133 I ⁻ 220

Radios atómicos



3. Electronegatividad. Es la tendencia que tiene el átomo a captar hacia sí mismo electrones, cuando está unido a otro átomo. El carácter electronegativo aumenta al avanzar hacia la derecha y arriba en el sistema periódico. Los elementos típicamente electronegativos son los halógenos F y Cl. *Mulliken* elaboró una escala de electronegatividad.

4. Energía de ionización. Ver apartado 2.8.

5. Afinidad electrónica. Ver apartado 2.8.

Electronegatividad

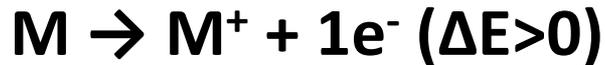
1 1A	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
1 H 1.00794																	2 He 4.00260
3 Li 6.941	4 Be 9.01218											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.0067	8 O 15.9994	9 F 18.9984	10 Ne 20.1797
11 Na 22.9898	12 Mg 24.3050	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 9B	10 10B	11 11B	12 2B	13 Al 26.9815	14 Si 28.0855	15 P 30.9738	16 S 32.06	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.69	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc 98.906	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	57 *La 138.905	58 Ce 140.12	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm 144.913	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	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	71 Lu 174.967	
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	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)	103 Lr (260)	
*Lanthanide series			58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm 144.913	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	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	71 Lu 174.967	
†Actinide series			90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	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)	103 Lr (260)	

← Más electropositivos

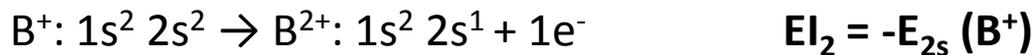
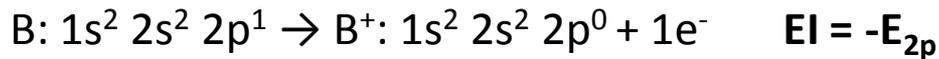
Más electronegativos →

2.8. Energía de ionización y afinidad electrónica.

Energía de Ionización, EI. Es la mínima energía necesaria para arrancar un electrón a un átomo neutro, según el proceso:



Como vemos se trata de un proceso **endotérmico**, es decir, se precisa aportar energía para arrancar el electrón. Puesto que la energía del electrón en el átomo viene dada por la capa y subcapa en la que se encuentra este, el valor de la energía de ionización se representa como: $\mathbf{EI = -E_{nl}}$ donde los números cuánticos n y l hacen referencia a la energía del electrón en el átomo, es decir a la energía que hemos de vencer para extraerlo. Siempre se extraen primero los electrones más externos, por ser los menos ligados al núcleo.

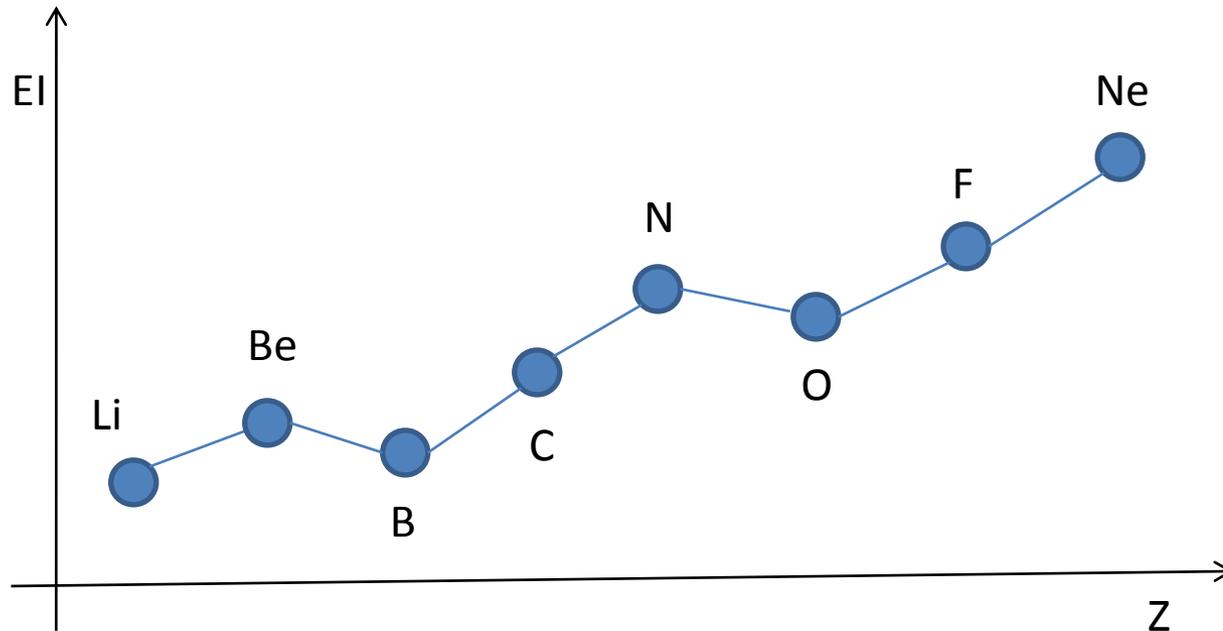


Ejemplo: Se presentan varias configuraciones electrónicas del Si en estado neutro e ionizado. De las siguientes opciones planteadas para este elemento, ¿qué electrón de los marcados en negrita requiere menor cantidad de energía para ser extraído?



Evolución de la **EI** en los elementos del sistema periódico (**periodos**).

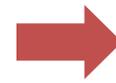
Analizando por ejemplo el valor de la **EI** al avanzar por el segundo periodo:



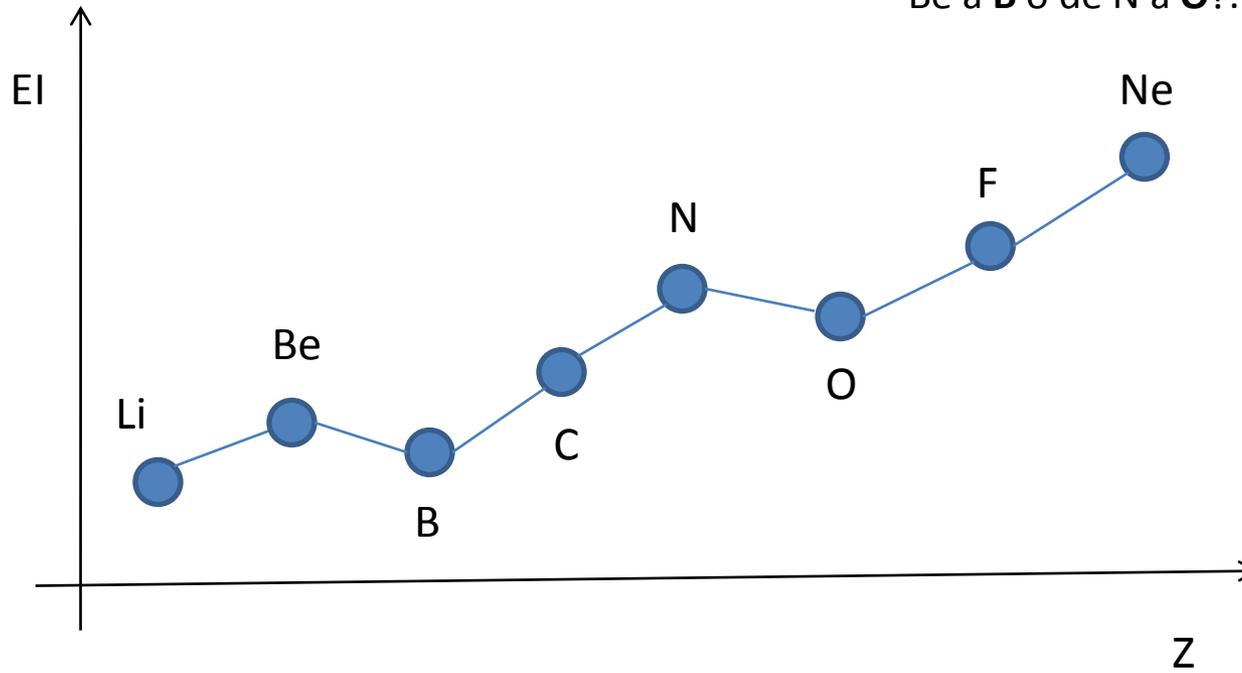
Encontramos que la EI aumenta ligeramente de izquierda a derecha. Esto se debe a:

1. El Z que influye en la carga nuclear aumenta ligeramente .
2. El radio atómico se mantiene constante e incluso disminuye algo al avanzar por el periodo.
3. Por tanto, la fuerza de atracción eléctrica (ley de Coulomb) *núcleo –electrón* aumenta y se necesita mayor E para ionizar los átomos.

B y O, irregularidades aparentes:



Si la EI aumenta al ir a la derecha por un periodo ¿por qué disminuye al pasar de Be a B o de N a O?



La respuesta está de nuevo en la **configuración electrónica**:

Be: $1s^2 2s^2 \rightarrow \text{Be}^+: 1s^2 2s^1 + 1 e^-$ (se arranca un e^- de orbital próximo al núcleo $2s$ y en capa cerrada)

B: $1s^2 2s^2 2p^1 \rightarrow \text{B}^+: 1s^2 2s^2 2p^0 + 1 e^-$ (es más fácil arrancar un e^- de un orbital $2p$)

N: $1s^2 2s^2 2p^3 \rightarrow \text{N}^+: 1s^2 2s^2 2p^2 + 1 e^-$ (en p^3 los 3 e^- están desapareados, sin repulsión)

O: $1s^2 2s^2 2p^4 \rightarrow \text{O}^+: 1s^2 2s^2 2p^3 + 1 e^-$ (es más fácil extraer un e^- en p^4 pues está apareado)

Evolución de la **EI** en los elementos del sistema periódico (**grupos**).

La EI disminuye de forma notoria al bajar por cualquier grupo del sistema periódico. Esto se debe a que:

1. El **radio atómico aumenta** y, por tanto, los electrones de las últimas capas (más ionizables) están más lejanos al núcleo.
2. Además, el **efecto de apantallamiento** de electrones de las capas internas, incrementa más el efecto anterior.
3. En definitiva, si consideramos la expresión de atracción electrostática de Coulomb, la fuerza de atracción del núcleo disminuye (átomos más ionizables).

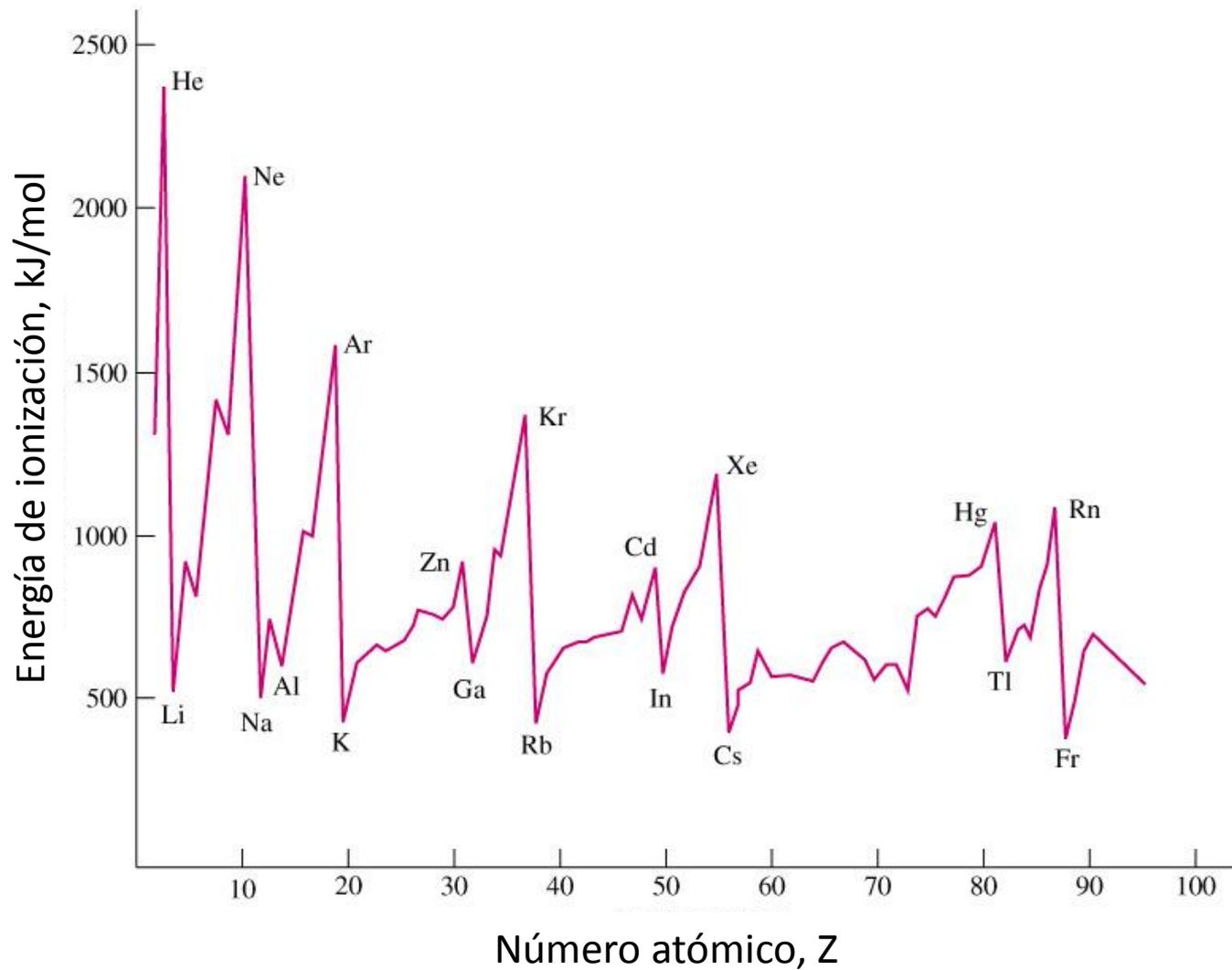
Vemos como ejemplo la primera energía de ionización del grupo de **metales alcalinos**:

Elemento (Z)	EI, kJ / mol
Hidrógeno (1)	1310
Litio (3)	518
Sodio (11)	493
Potasio (19)	418
Rubidio (37)	401
Cesio (55)	376

Si analizamos la misma tendencia para el grupo 2, comprobamos que la EI es mayor, ya que como hemos visto antes, al avanzar en cada periodo a la derecha la EI aumenta.

¿Tiene lógica que el potencial de ionización de los metales alcalinos sea más bajo que el de los alcalino térreos? (analizar la respuesta escribiendo las configuraciones electrónicas).

El variación general.



Afinidad electrónica, AE. Referida al átomo, es la energía que se desprende en el proceso:



Como vemos se trata de un proceso **exotérmico** que libera energía durante la captación del electrón. Es decir, la especie aniónica **M⁻** es termodinámicamente más estable que la **M**. Por convenio se toma el valor de la afinidad electrónica como la energía del proceso anterior pero cambiada de signo: **AE = -ΔE**.

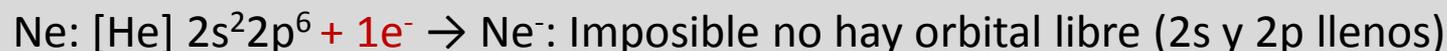
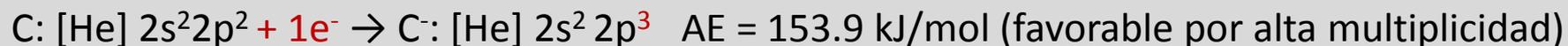
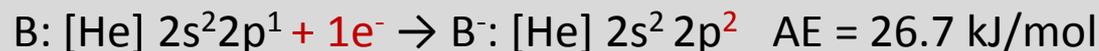
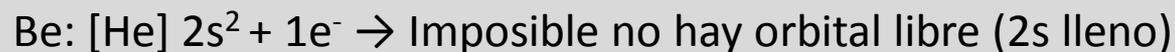
Por ejemplo, para un átomo de cloro y otro de nitrógeno las afinidades electrónicas son:



Lógicamente el proceso más favorable será el primero, es decir, el cloro tiene mucha más afinidad electrónica por ser más electronegativo que el nitrógeno. Esta diferencia se puede razonar escribiendo las configuraciones electrónicas.

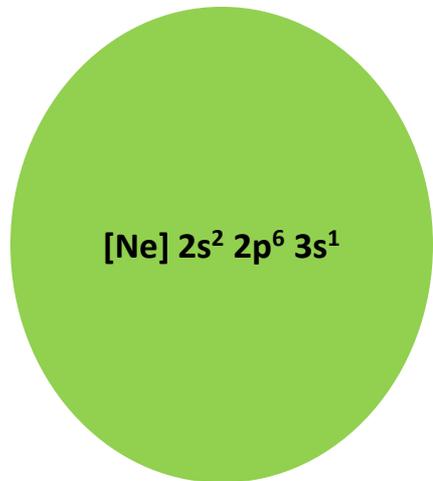
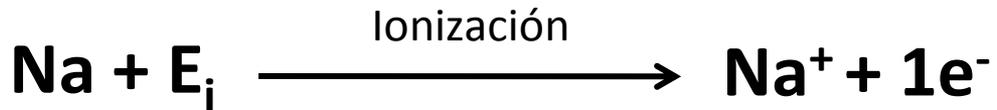


Variación de la AE

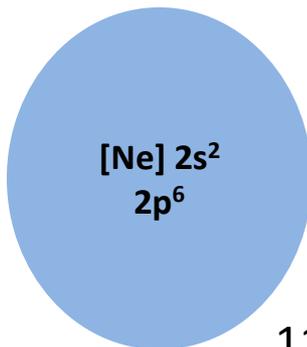


La afinidad electrónica, salvo excepciones justificables (Be, N y Ne) aumenta al avanzar por un **periodo** de izquierda a derecha.

Puede demostrarse, que la AE disminuye cuando bajamos por cualquier **grupo**.



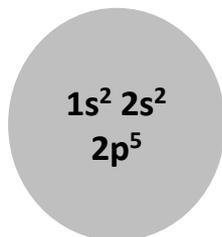
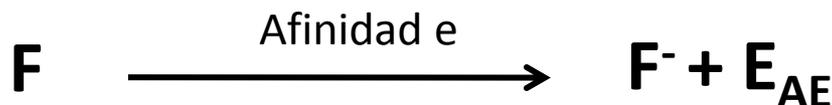
186 pm



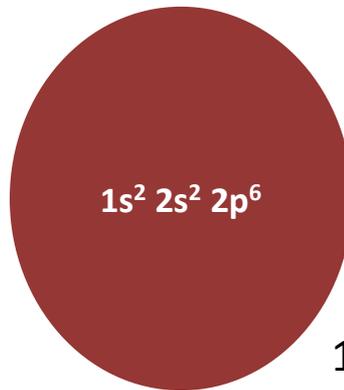
116 pm

Tamaño de átomos e iones:

Misma carga nuclear pero menor número de e⁻ implica un campo eléctrico **más eficaz** por parte del núcleo. Los cationes son más pequeños que sus átomos precursores.



64 pm



119 pm

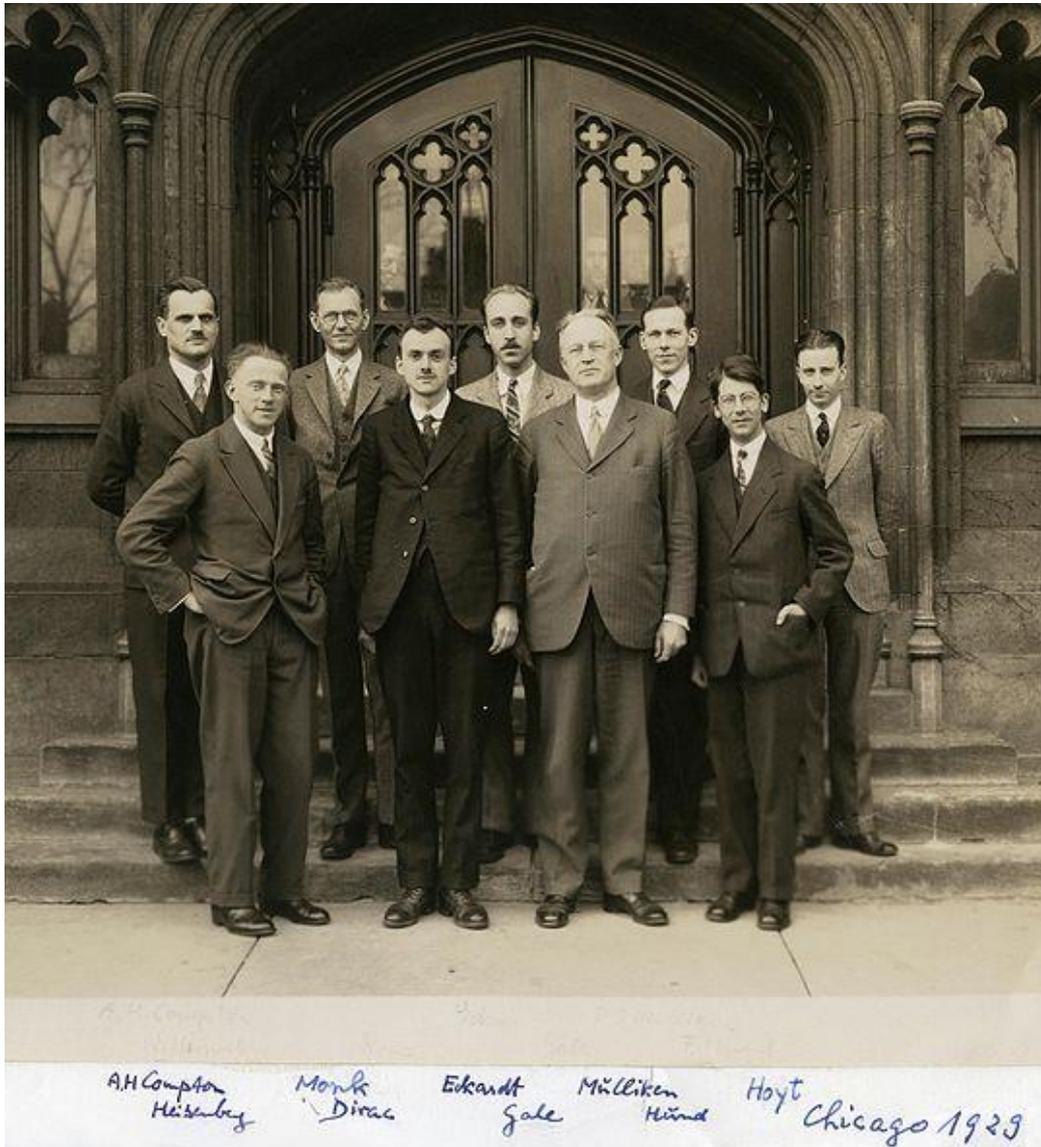
Misma carga nuclear y mayor número de e⁻, implica menor capacidad de atracción del núcleo. Los aniones son más grandes que sus átomos precursores.

Afinidad electrónica – conclusiones:

AE aumentando →

AE disminuyendo →

1 1A																	18 8A
1 H 1.00794	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	2 He 4.00260
3 Li 6.941	4 Be 9.01218											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.0067	8 O 15.9994	9 F 18.9984	10 Ne 20.1797
11 Na 22.9898	12 Mg 24.3050	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B		10 10	11 1B	12 2B	13 Al 26.9815	14 Si 28.0855	15 P 30.9738	16 S 32.066	17 Cl 35.4527	18 Ar 39.948
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.9381	26 Fe 55.847	27 Co 58.9332	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	*La 138.906	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra 226.025	†Ac 227.028	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (272)		114 (287)		116 (289)		118 (293)
*Lanthanide series		58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	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	71 Lu 174.967		
†Actinide series		90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	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)	103 Lr (260)		



Robert Mulliken 1896-1986.
Químico norteamericano.
Premio Nobel 1966.

Define la electronegatividad como:
 $EN = \frac{1}{2} (EI + AE)$. Es una escala que mide el compromiso que un átomo tiene entre perder e^- y ganarlos. Tabula los valores obtenidos para cada elemento y le asigna al F un valor arbitrario de $EN = 4$. Todas las demás EN se calculan y normalizan dentro de esta escala.