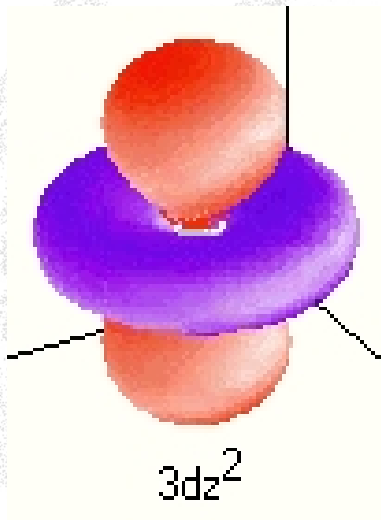




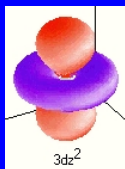
Elementos químicos

QUÍMICA APLICADA. TEMA 1

Ingeniería Técnica Naval



I. El átomo de hidrógeno	2
II. Átomos polieletrónicos	12
III. Configuraciones electrónicas	13
IV. Sistema periódico	16
V. Propiedades periódicas	22

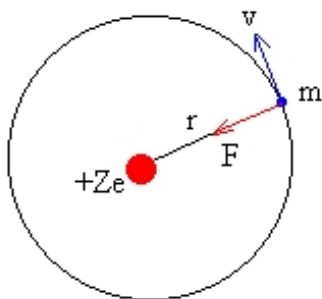


Primer modelo atómico

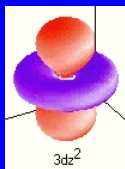
Daniel Bohr

Hipótesis:

- Ley de Coulomb y ley del movimiento de Newton.
- No válida la electromagnética clásica.
- La ley de Planck $E=h \nu$.



Explicaba el espectro del H e hidrogenoides, no de átomos polielectrónicos.



Inicios de la mecánica cuántica

ELEMENTOS QUÍMICOS

I. El átomo de hidrógeno

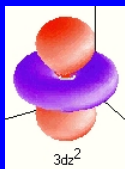


Principios del siglo XX \Rightarrow Varios hechos confirman la necesidad de una nueva teoría (fenómeno microscópicos)

- **Efecto fotoeléctrico** (Einstein, 1905).
- Louis De Broglie (1924), **naturaleza ondulatoria de la materia**

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad h = 6,0610^{-34} J s^{-1}$$

- Davisson y Germer (1927) **difracción de electrones** en cristal de Ni.



Desarrollo de la mecánica cuántica

ELEMENTOS QUÍMICOS

I. El átomo de hidrógeno

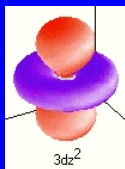


Heisenberg

- Formula el **principio de incertidumbre** $\Delta x \Delta p \geq \hbar = \frac{h}{2\pi}$
- Descartamos la idea de trayectorias, hablamos de **probabilidades de que el electrón ocupe un determinado volumen del espacio**.

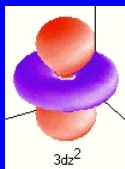
Schrödinger

- **La ecuación Schrödinger** relaciona la amplitud de onda (probabilidad) con la energía total y las coordenadas.
- Las soluciones de esta ecuación dan los valores de energía y de forma matemática, natural los números cuánticos.



Números atómicos

- 1.) La ecuación de Schrödinger sólo tiene solución para **ciertos valores de energía cuantizada**.
- 2.) Aparecen 3 parámetros de cuantización, los **números cuánticos**
 - n** número cuántico principal
 - l** número cuántico azimutal
 - m_l** número cuántico magnético.
- 3.) Cada trio **(n,l,m_l)** corresponde a una solución de la ecuación de Schrödinger .
- 4.) **Φ función de onda**. Φ carece de significado físico. |Φ|² es la densidad de probabilidad.
- 5.) **Orbital**: zona del espacio en que existe cierta probabilidad de encontrar al electrón.

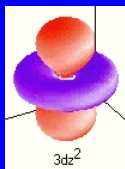


Números atómicos



- 6.) Si bien la probabilidad sólo es estrictamente cero a $r \rightarrow \infty$, se define la **superficie límite** que une los puntos con igual valor de Φ de modo que existe un **90 % de probabilidad** de encontrar al electrón dentro de la misma.
- 7.) Cada trio (n, l, m_l) define un orbital atómico:

$n \rightarrow$	nivel energético, tamaño	$n = 0, 1, 2, \dots \infty$
$l \rightarrow$	forma geométrica, define los subniveles	$l = 0, 1, 2 \dots n-1$ <i>s, p, d, f</i>
$m_l \rightarrow$	orientación espacial	$m_l = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots l$ ($2l+1$) valores

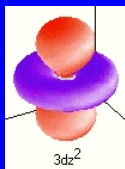


Orbitales atómicos

número (nivel energético) + letra (subnivel) + subíndice

	$2 \cdot m_l + 1$ en cada subnivel
1 orbital <i>s</i>	en cada subnivel <i>s</i>
3 orbitales <i>p</i>	en cada subnivel <i>p</i>
5 orbitales <i>d</i>	en cada subnivel <i>d</i>
7 orbital <i>f</i>	en cada subnivel <i>f</i>

n=1	subnivel <i>s</i>
n=2	subniveles <i>s, p</i>
n=3	subniveles <i>s, p, d</i>
n=4	subniveles <i>s, p, d, f</i>

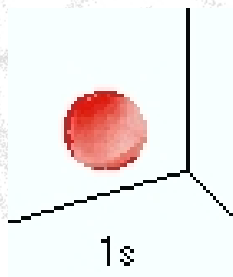


Orbitales s

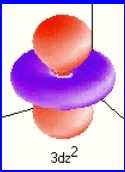
En el átomo de H la Φ correspondiente al orbital 1s

$$\Phi_{1s} = N_{1s} e^{-kr}$$

y la superficie límite es una esfera:



Orbitales p

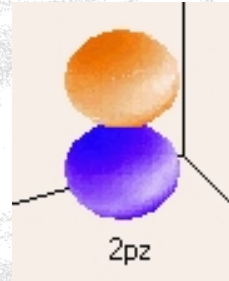
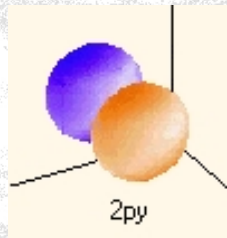
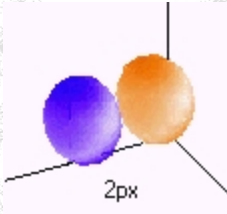


Son bilobulares. Φ distinto signo en cada lóbulo.

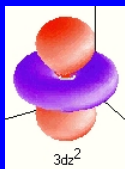
$$\Phi_{2p_x} = N_{2p} x e^{-kr/2}$$

$$\Phi_{2p_y} = N_{2p} y e^{-kr/2}$$

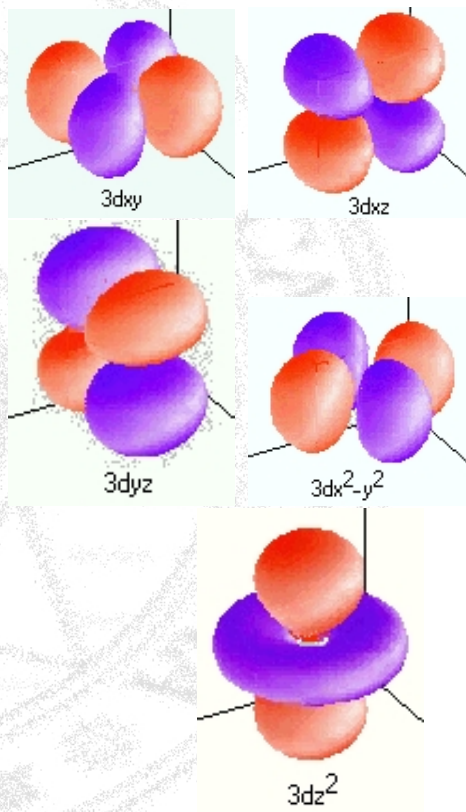
$$\Phi_{2p_z} = N_{2p} z e^{-kr/2}$$

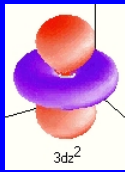


Orbitales d



$$\begin{aligned}\Phi_{3d_{xz}} &= N_{3d} xze^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{x^2-y^2}} &= N_{3d} (x^2 - y^2)e^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{xy}} &= N_{3d} xye^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{z^2}} &= N_{3d} z^2e^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{yz}} &= N_{3d} yze^{-kr/3}\end{aligned}$$

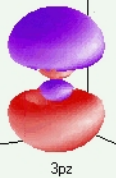




Espín electrónico

- El **espín electrónico** no aparece directamente en la ecuación de Schrödinger del átomo de H. Se introduce a posteriori, en la formulación relativista de la mecánica cuántica de **Dirac**.
- La Φ del átomo de H se multiplica por una **función de espín** asociada a un número cuántico $m_s = \pm 1/2$.
- En cada subnivel tendremos $2 \cdot 2 \cdot m_l + 1$ electrones.

- **Interacciones de repulsión electrónica:** No existe resolución analítica de la ecuación de Schrödinger .
- **Aproximaciones:** la más conocida es la de Hartree o de campo autoconsistente.
- **Conclusiones de las aproximaciones:**
 - Los electrones, en átomos polieletrónicos, ocupan orbitales similares a los del átomo de H.
 - Los orbitales de un mismo nivel (n) presentan distinta energía para los distintos subniveles (l).
 - $E(n,l)$, debido al aumento de Z y apantallamiento de otros electrones.

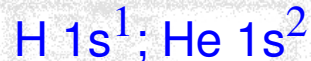


Llenado de orbitales

Se determina situando los electrones en los orbitales atómicos

- **Principio de Aufbau:**

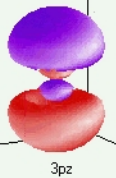
La configuración electrónica de un elemento es análoga a la del elemento anterior, y se distingue de la misma por el último electrón introducido



- **Principio de exclusión de Pauli:**

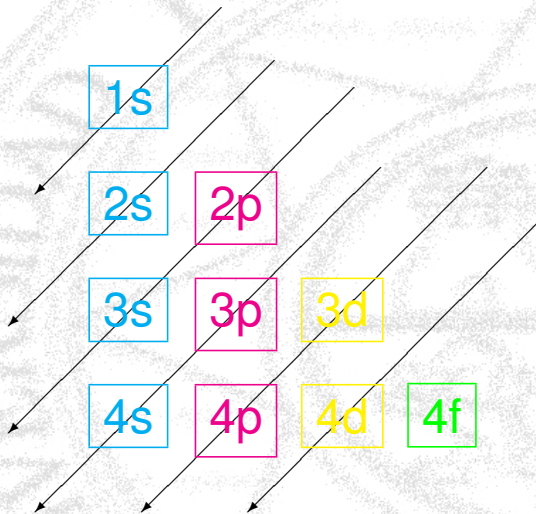
En un mismo átomo no pueden coexistir dos electrones con los 4 número cuánticos iguales \Rightarrow Para cada orbital (n, l, m_l) sólo son posibles 2 electrones; $m_s = \pm 1/2$.





Llenado de orbitales

- **Regla de Weismesser** para el orden de llenado.

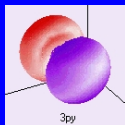


$$\left[(n+l) - \frac{l}{l+1} \right] \Rightarrow (n+l)$$

igual (n+l), menor n

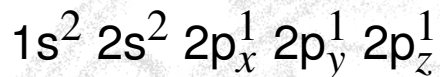
- **Regla de Hund** (Orbitales degenerados)

Los electrones al ocupar un subnivel lo hacen procurando que el desapareamiento sea máximo y sus espines sean paralelos

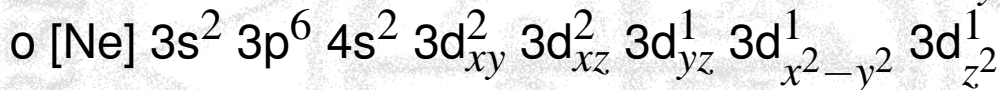
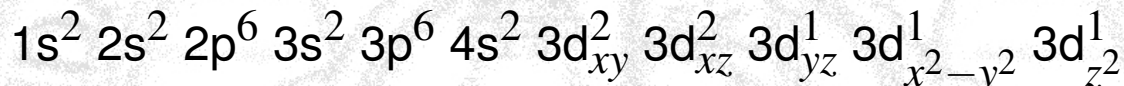


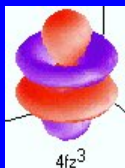
Números atómicos

Ejemplo N(Z=7)



Ejemplo Co(Z=27)





Introducción histórica

- 1828, se conocía 54 elementos químicos
- 1829, **Triadas de Döbereiner**, propiedades afines, Br, Cl e I; Ca, Sr y Ba; S, Se y Te.
- 1852, **Hélice de Chancourtois**, según pesos atómicos.
- 1864, **ley de las octavas de Newlands**, propiedades repetidas cada 7 elementos.
- 1964, **Tabla de Meyer**, relacionó propiedades y pesos atómicos.
- 1964, **Tabla de Mendeleiev** con 63 elementos.

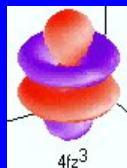


Tabla periódica de Mendeleiev

ELEMENTOS QUÍMICOS

IV. Sistema periódico

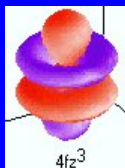
17

Aciertos:

1. Utilizo pesos atómicos para ordenar los elementos, incluyendo huecos si las propiedades no concordaban.
2. Preveyó la existencia de nuevos elementos.
3. Valoró las propiedades químicas y físicas.

Fallos:

1. El H no tiene lugar.
2. Orden invertido en algunos pesos atómicos.
3. Lantánidos y actínidos no tenían lugar.
4. Demasiado importancia a la valencia.
5. El peso atómico no variaba periódicamente.



Descripción del sistema periódico

ELEMENTOS QUÍMICOS

IV. Sistema periódico

18

- Sistema periódico actual o **tabla larga o de Werner-Pavth** ordena los átomos según número atómico.
- Posee **7 periodos** o filas y **18 columnas**.
- **Fila** \Rightarrow elementos con los electrones en los mismos niveles electrónicos.
- **Columna** \Rightarrow elementos con configuraciones electrónicas homólogas y propiedades químicas similares (excepción, columnas 8, 9 y 10 un solo grupo.)
- Dividida en **2 subgrupos A y B**.



Descripción del sistema periódico

ELEMENTOS QUÍMICOS

IV. Sistema periódico

19

WebElements: the periodic table on the world-wide web
www.webelements.com

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18					
Hydrogen 1 H 1.00794																	Helium 2 He 4.002602					
Lithium 3 Li 6.941	Beryllium 4 Be 9.0122	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: auto;"> <p>Key:</p> <p>element name atomic number symbol atomic weight (mean relative mass)</p> </div>										Boron 5 B 10.811	Carbon 6 C 12.011	Nitrogen 7 N 14.007	Oxygen 8 O 15.999	Fluorine 9 F 18.998	Neon 10 Ne 20.180					
Sodium 11 Na 22.990	Magnesium 12 Mg 24.305																Aluminum 13 Al 26.982	Silicon 14 Si 28.086	Phosphorus 15 P 30.974	Sulfur 16 S 32.065	Chlorine 17 Cl 35.453	Argon 18 Ar 39.948
Potassium 19 K 39.098	Calcium 20 Ca 40.078	Scandium 21 Sc 44.956	Titanium 22 Ti 47.887	Vanadium 23 V 50.942	Chromium 24 Cr 51.996	Manganese 25 Mn 54.938	Iron 26 Fe 55.845	Cobalt 27 Co 58.933	Nickel 28 Ni 58.693	Copper 29 Cu 63.546	Zinc 30 Zn 65.38	Gallium 31 Ga 69.723	Germanium 32 Ge 72.61	Arsenic 33 As 74.922	Selenium 34 Se 78.96	Bromine 35 Br 79.904	Krypton 36 Kr 83.80					
Rubidium 37 Rb 85.468	Sr 87.62	Yttrium 39 Y 88.906	Zirconium 40 Zr 91.224	Niobium 41 Nb 92.906	Molybdenum 42 Mo 95.94	Technetium 43 Tc [98]	Ruthenium 44 Ru 101.07	Rhodium 45 Rh 102.91	Palladium 46 Pd 106.42	Silver 47 Ag 107.87	Cadmium 48 Cd 112.41	Indium 49 In 114.82	Tin 50 Sn 118.71	Antimony 51 Sb 121.76	Tellurium 52 Te 127.60	Iodine 53 I 126.90	Xenon 54 Xe 131.29					
Cesium 55 Cs 132.91	Barium 56 Ba 137.33	* 57-70	Lanthanum 57 La 138.91	Hafnium 72 Hf 178.49	Tantalum 73 Ta 180.93	Tungsten 74 W 183.84	Rhenium 75 Re 186.21	Osmium 76 Os 190.23	Iridium 77 Ir 192.22	Platinum 78 Pt 195.08	Gold 79 Au 196.97	Mercury 80 Hg 200.59	Thallium 81 Tl 204.38	Lead 82 Pb 207.2	Bismuth 83 Bi 208.98	Polonium 84 Po [209]	Astatine 85 At [220]	Radon 86 Rn [222]				
Francium 87 Fr [223]	Ra [226]	** 89-102	Actinium 89 Ac [227]	Rf [261]	Db [281]	Sg [281]	Bh [282]	Hs [283]	Mt [283]	Ds [285]	Rg [285]	Uub [286]	Uut [286]	Uuq [286]	Uup [286]	Uuh [286]	Uus [286]	Uuo [286]				

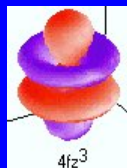
*lanthanoids

**actinoids

Lanthanum 57 La 138.91	Cerium 58 Ce 140.12	Praseodymium 59 Pr 140.91	Niobium 60 Nb 92.906	Promethium 61 Pm [145]	Samarium 62 Sm 150.36	Europium 63 Eu 151.96	Gadolinium 64 Gd 157.25	Terbium 65 Tb 158.93	Dysprosium 66 Dy 162.50	Holmium 67 Ho 164.93	Erbium 68 Er 167.26	Thulium 69 Tm 168.93	Ytterbium 70 Yb 173.05
Actinium 89 Ac [227]	Thorium 90 Th 232.04	Protactinium 91 Pa 231.04	Uranium 92 U 238.03	Np [237]	Pu [244]	Am [243]	Cm [247]	Bk [247]	Cf [251]	Es [252]	Fm [257]	Md [288]	No [289]

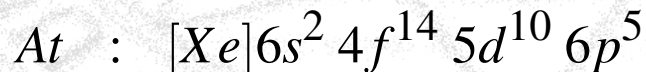
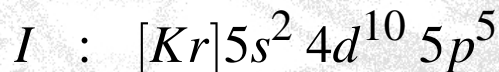
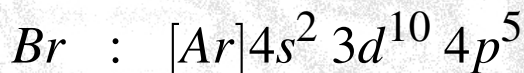
Symbols and names: the symbols and names of the elements, and their spellings are those recommended by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC - <http://www.iupac.org>). Names have yet to be proposed for the most recently discovered elements beyond 112 and so those used here are IUPAC's temporary systematic names. In the USA and some other countries, the spellings aluminium and cesium are normal while in the UK and elsewhere the common spelling is sulphur.

Group labels: the numeric system (I-VI) used here is the older IUPAC convention. Atomic weights (mean relative masses): Adapted from the latest elements, these are the IUPAC 2007 values and given to 5 significant figures. Elements for which the atomic weight is given within square brackets have no stable nuclides and are represented by the element's longest lived nuclide (shown in parentheses in the line of writing). ©2007 by Ilya Shvab (WebElements Ltd and University of Sheffield, webelements@sheffield.ac.uk). All rights reserved. For updates to this table see http://www.webelements.com/elements/Printable_Periodic_Table/Version/date: 21 September 2007.



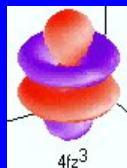
Sistema periódico

- Los elementos en el Sistema periódico se relacionan con las **configuraciones electrónicas** de los elementos.
- Los elementos situados en la **misma columna** del sistema periódico:



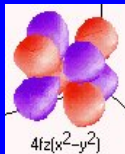
Todas del tipo: $ns^2 np^5$

Pocas excepciones.



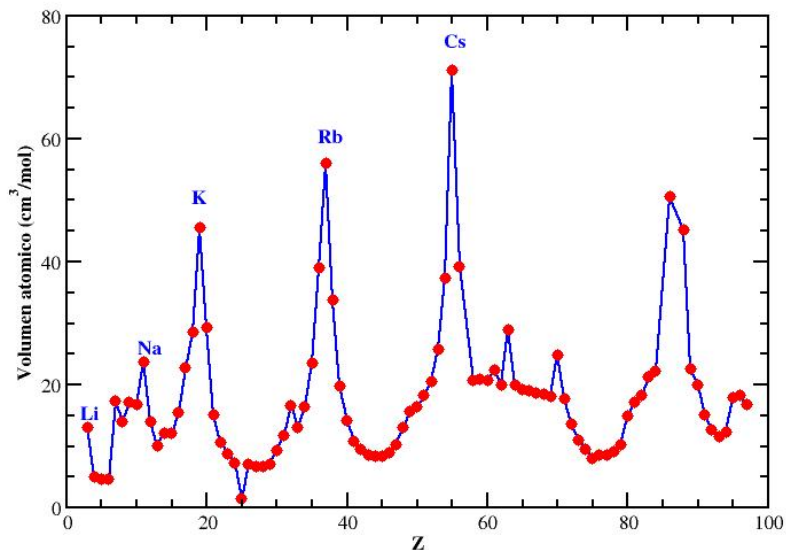
Sistema periódico

Grupo	Nombre del grupo	Configuración
IA	metales alcalinos	ns^1
IIA	metales alcalinotérreos	ns^2
IIIA	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^1$
IVA	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^2$
VA	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^3$
VIA	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^4$
VIIA	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^5$
VIII	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^6$ a $ns^2 (n-1)d^8$
IB	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^9$
IIB	metales de transición	$ns^2 (n-1)d^{10}$
IIIB	metales térreos	$ns^2 np^1$
IVB	carbonoides	$ns^2 np^2$
VB	nitrogenoides	$ns^2 np^3$
VIB	calcógenos	$ns^2 np^4$
VII B	halógenos	$ns^2 np^5$
O	Gases nobles	$ns^2 np^6$
	Lántanidos y actínidos	$ns^2 (n-1)d^{10} (n-2)f^x$



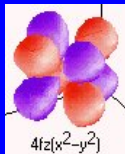
Volumen atómico

- Masa de un átomo / densidad.
- Depende de la temperatura y del tipo de red cristalina (ρ).



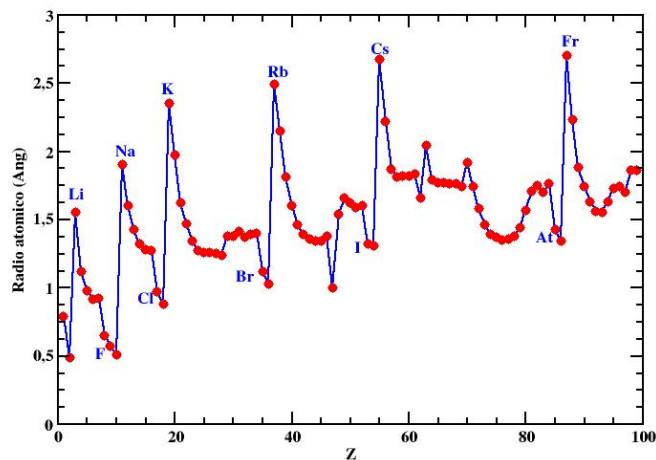
Grupo \uparrow , nueva capa electrónica.

Periodo \leftarrow , aumenta la carga nuclear en mismo subnivel, aumenta fuerza de atracción, disminuye V.



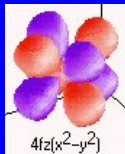
Radios atómicos

Radio iónico \Rightarrow La distancia interatómica entre 2 átomos en un cristal iónico es la suma de sus radios iónicos. (Bondad de la interpenetrabilidad de las atmósferas iónicas)



Grupo \uparrow , aumenta Z.

Serie isoelectrónica \downarrow , aumenta Z con igual carga nuclear.

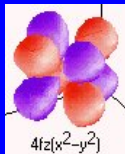


Radios atómicos

Radio metálico \Rightarrow Difracción de rayos X de un cristal metálico. Siempre mayor que el iónico. En un grupo crece con Z y en el periodo disminuye fuertemente al principio, después más lentamente, pasa por un mínimo en el grupo VIII y sigue creciendo lentamente.

Radio covalente \Rightarrow Mitad de la distancia internuclear en moléculas diatómicas homonucleares. En los grupos aumentan al aumentar Z, En los periodos (excepto IIB y VIB) disminuye al aumentar Z.

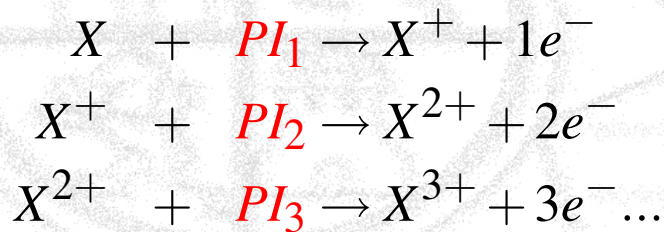
Radio van der Waals \Rightarrow Mitad de la distancia existente entre 2 átomos iguales de moléculas contiguas entre las que sólo existe interacción van der Waals. Poco utilizado.



Energías de ionización

Energía mínima necesaria para arrancar un electrón de un átomo en estado gaseoso.

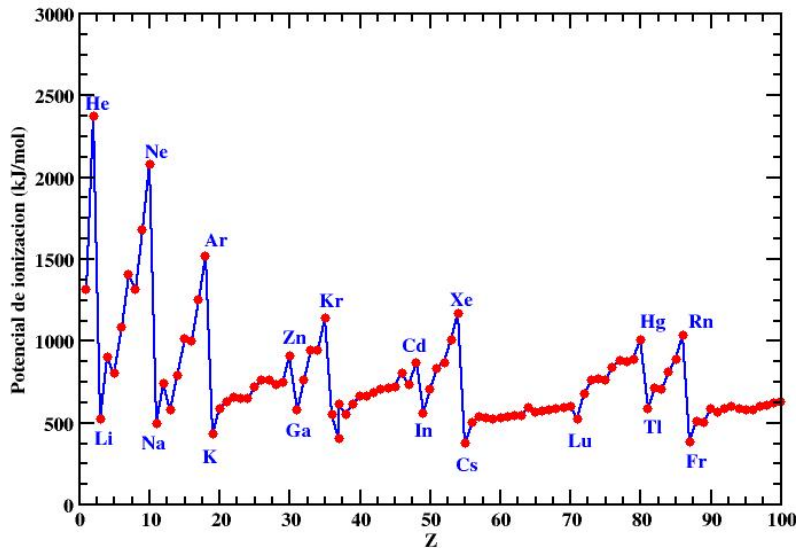
Determinación experimental.



$$PI_1 < PI_2 < PI_3 \dots$$



Energías de ionización

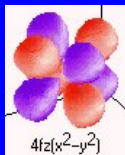


Grupo ↓, aumenta Z, aumento del radio atómico y efecto de apantallamiento de capas.

Periodo ↑, aumenta Z aumenta carga nuclear.

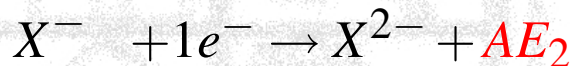
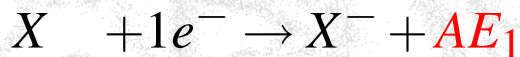
Mayor tendencia a forma X^+ \Rightarrow menores PI_1 (alcalinos).

Menor tendencia a forma X^+ \Rightarrow mayores PI_1 (halógenos).



Afinidad electrónica

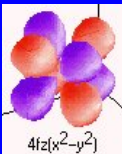
Energía necesaria para que un átomo o ion en estado gaseoso adquiera un electrón.



Energía liberada \Rightarrow mayor EA mayor tendencia X^{-}

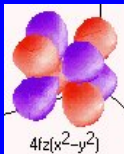
Medida experimental difícil \Rightarrow Ciclo Born-Haber

AE_1 suelen ser exotérmicas, AE_2 endotérmicas.



Afinidad electrónica

						H +73	He -48
Li +60	Be ≤ 0	B +27	C +122	N -7	O +141 -844	F +328	Ne -116
Na +53	Mg ≤ 0	Al +43	Si +134	P +72	S +200 -532	Cl +349	Ar -96
K +48	Ca +2	Ga +29	Ge +116	As +78	Se +195	Br +325	Kr -96
Rb +47	Sr +5	In +29	Sn +116	Sb +103	Te +190	I +295	Xe -77
Cs +46	Ba +14	Tl +19	Pb +35	Bi +91	Po +174	At +270	Rn -68



Electronegatividad

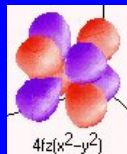
Capacidad relativa de un átomo para atraer a los pares de electrones de los enlaces

Definición de Mulliken:

$$E_N = k(PI + EA) \quad k \text{ constante de proporcionalidad}$$

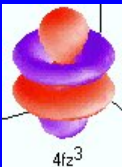
E_N en grupo disminuye al aumentar Z

E_N en periodo aumenta al aumentar Z



Electronegatividad

H																
2.1																
Li	Be											B	C	N	O	F
1.0	1.5											2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl
0.9	1.2											1.5	1.8	2.1	2.5	3.0
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
0.8	1.0	1.3	1.5	1.6	1.6	1.5	1.8	1.8	1.8	1.9	1.6	1.6	1.8	2.0	2.4	2.8
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	1.9	2.2	2.2	2.2	1.9	1.7	1.7	1.8	1.9	2.1	2.5
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At
0.7	0.9	1.2	1.3	1.5	1.7	1.9	2.2	2.2	2.7	2.4	1.9	1.8	1.9	1.9	2.0	2.2
Fr	Ra	Lr														
0.7	0.9	1.3														



Estados de oxidación.I.

IA	}	I
Li		
Na		
K		
Rb		
Cs		
Fr		

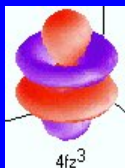
IIA	}	II
Be		
Mg		
Ca		
Sr		
Ba		
Ra		

IIIA	}	III
B		
Al		
Ga	}	I, III
In		
Tl		

IVA	}	IV
C		
Si	}	II, IV
Ge		
Sn		
Pb		

VA	}	I a V	
N			
P		}	III, V
As			
Sb			
Bi			

VIA	}	II
O		
S	}	III, IV, VI
Se		
Te		
Po		



Estados de oxidación.II.

VIIIA

F } I
Cl }
Br } I, III, V, VII
I }
At }

IIIB

Sc }
Y } III
La }
Ac }

IVB

Ti }
Zr } II, III, IV
Hf }

VB

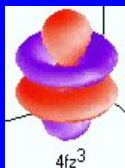
V }
Nb } II, III, IV, V
Ta }

VIB

Cr }
Mo } II, III, IV, V, VI
W }

VIIIB

Mn }
Tc } II a VII
Re }



Estados de oxidación.III.

VIII B

Fe II, III

Ru }
Os } II a VIII

Co }
Rh } II, III, IV, VI

Ir }
Ni II, III

Pd II, IV

Pt II, IV, V, VI

IB Cu I, II

Ag I

Au I, III

VIII B Zn }
Cd } II

Hg II, I