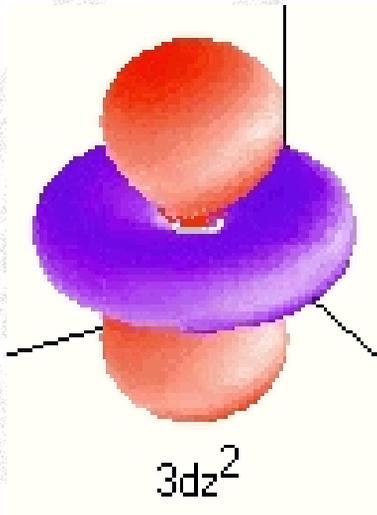




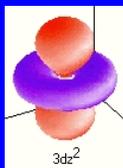
# Elementos químicos

QUÍMICA APLICADA. TEMA 1

Ingeniería Técnica Naval



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

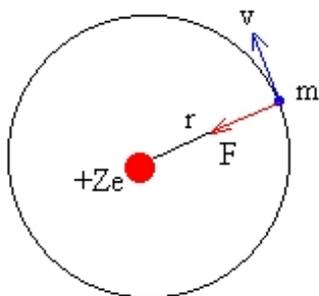


# Primer modelo atómico

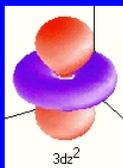
Daniel Bohr

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

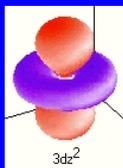


Principios del siglo XX  $\Rightarrow$  Varios hechos confirman la necesidad de una nueva teoría (fenómeno microscópicos)

- **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

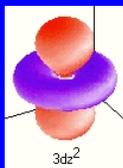


## Heisenberg

- 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**.

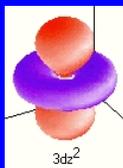
## Schrödinger

- **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<sub>l</sub>** número cuántico magnético.
- 3.) Cada trio **(n,l,m<sub>l</sub>)** corresponde a una solución de la ecuación de Schrödinger .
- 4.) **Φ función de onda**. Φ carece de significado físico.  $|\Phi|^2$  es la densidad de probabilidad.
- 5.) **Orbital**: zona del espacio en que existe cierta probabilidad de encontrar al electrón.

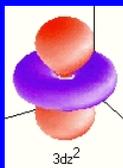


# Números atómicos



- 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  $\Phi$  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

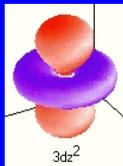
número (nivel energético) + letra (subnivel) + subíndice

---

	$2 \cdot m_l + 1$ 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>



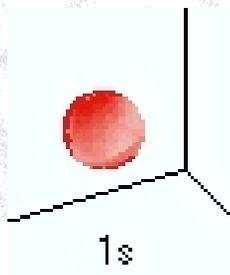
# Orbitales s



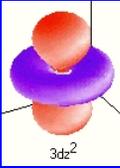
En el átomo de H la  $\Phi$  correspondiente al orbital 1s

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

y la superficie límite es una esfera:



# Orbitales p

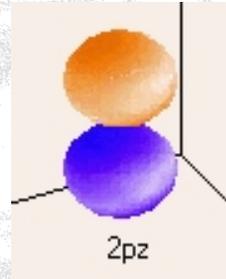
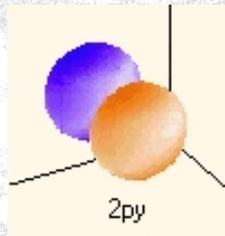
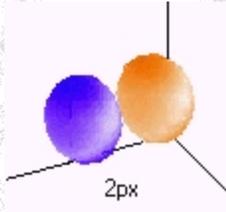


Son bilobulares.  $\Phi$  distinto signo en cada lóbulo.

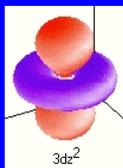
$$\Phi_{2p_x} = N_{2p} x e^{-kr/2}$$

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

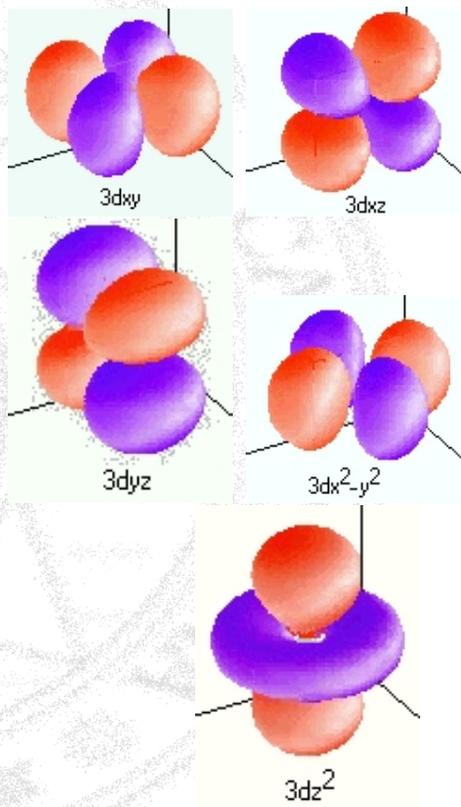
$$\Phi_{2p_z} = N_{2p} z e^{-kr/2}$$

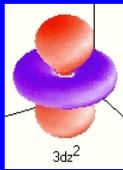


# Orbitales d



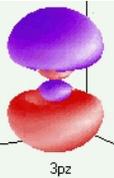
$$\begin{aligned}\Phi_{3d_{xz}} &= N_{3d} xze^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{x^2-y^2}} &= N_{3d} (x^2 - y^2)e^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{xy}} &= N_{3d} xye^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{z^2}} &= N_{3d} z^2e^{-kr/3} \\ \Phi_{3d_{yz}} &= N_{3d} yze^{-kr/3}\end{aligned}$$



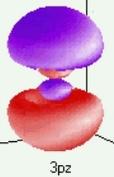


# Espín electrónico

- 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  $\Phi$  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:**

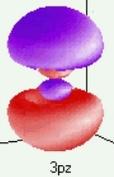
*La configuración electrónica de un elemento es análoga a la del elemento anterior, y se distingue de la misma por el último electrón introducido*



- **Principio de exclusión de Pauli:**

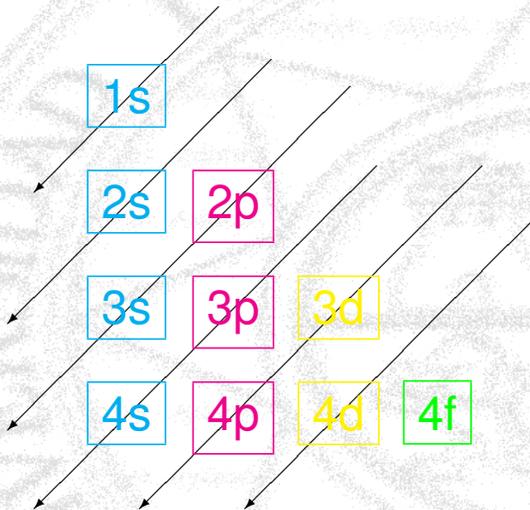
*En un mismo átomo no pueden coexistir dos electrones con los 4 números cuánticos iguales  $\Rightarrow$  Para cada orbital  $(n, l, m_l)$  sólo son posibles 2 electrones;  $m_s = \pm 1/2$ .*





# Llenado de orbitales

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

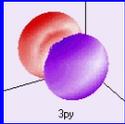


$$\left[ (n+l) - \frac{l}{l+1} \right] \Rightarrow (n+l)$$

igual (n+l), menor n

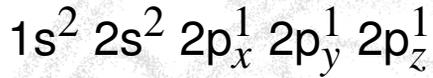
- **Regla de Hund** (Orbitales degenerados)

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

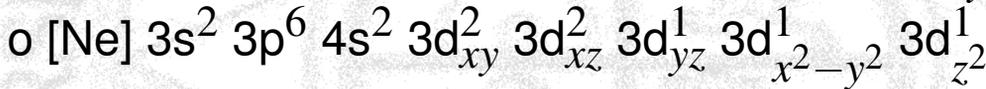
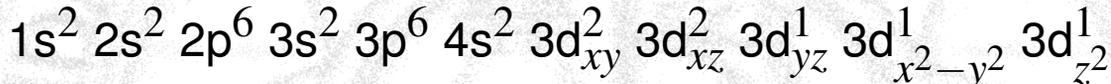


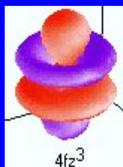
# Números atómicos

Ejemplo N(Z=7)



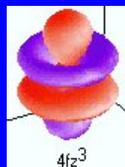
Ejemplo Co(Z=27)





## 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

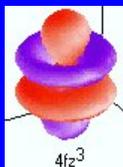
17

## 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.



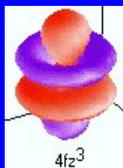
# Descripción del sistema periódico

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](http://www.webelements.com)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18			
Hydrogen 1 <b>H</b> 1.00794																	Helium 2 <b>He</b> 4.002602			
Lithium 3 <b>Li</b> 6.941	Beryllium 4 <b>Be</b> 9.0122											Boron 5 <b>B</b> 10.811	Carbon 6 <b>C</b> 12.011	Nitrogen 7 <b>N</b> 14.007	Oxygen 8 <b>O</b> 15.999	Fluorine 9 <b>F</b> 18.998	Neon 10 <b>Ne</b> 20.180			
Sodium 11 <b>Na</b> 22.990	Magnesium 12 <b>Mg</b> 24.305											Aluminum 13 <b>Al</b> 26.982	Silicon 14 <b>Si</b> 28.086	Phosphorus 15 <b>P</b> 30.974	Sulfur 16 <b>S</b> 32.065	Chlorine 17 <b>Cl</b> 35.453	Argon 18 <b>Ar</b> 39.948			
Potassium 19 <b>K</b> 39.098	Calcium 20 <b>Ca</b> 40.078											Gallium 31 <b>Ga</b> 69.723	Germanium 32 <b>Ge</b> 72.61	Arsenic 33 <b>As</b> 74.922	Selenium 34 <b>Se</b> 78.96	Bromine 35 <b>Br</b> 79.904	Krypton 36 <b>Kr</b> 83.80			
Rubidium 37 <b>Rb</b> 85.468	Sr 87.62											Cadmium 48 <b>Cd</b> 112.41	In 49 <b>In</b> 114.82	Sn 50 <b>Sn</b> 118.71	Sb 51 <b>Sb</b> 121.76	Te 52 <b>Te</b> 127.60	I 53 <b>I</b> 126.90	Xe 54 <b>Xe</b> 131.29		
Cesium 55 <b>Cs</b> 132.91	Ba 137.33											Au 79 <b>Au</b> 196.97	Hg 80 <b>Hg</b> 200.59	Tl 81 <b>Tl</b> 204.38	Pb 82 <b>Pb</b> 207.2	Bi 83 <b>Bi</b> 208.98	Po 84 <b>Po</b> [209]	At 85 <b>At</b> [220]	Rn 86 <b>Rn</b> [222]	
Francium 87 <b>Fr</b> [223]	Ra [226]											Ds [281]	Rg [281]	Uub [281]	Uut [281]	Uuq [281]	Uup [281]	Uuh [281]	Uus [281]	Uuo [281]

Key:  
 element name  
 atomic number  
 symbol  
 atomic weight (mean relative mass)

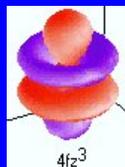
\*lanthanoids

\*\*actinoids

Lanthanum 57 <b>La</b> 138.91	Cerium 58 <b>Ce</b> 140.12	Praseodymium 59 <b>Pr</b> 140.91	Niodymium 60 <b>Nd</b> 144.24	Promethium 61 <b>Pm</b> [145]	Samarium 62 <b>Sm</b> 150.36	Europium 63 <b>Eu</b> 151.96	Gadolinium 64 <b>Gd</b> 157.25	Terbium 65 <b>Tb</b> 158.93	Dysprosium 66 <b>Dy</b> 162.50	Holmium 67 <b>Ho</b> 164.93	Erbium 68 <b>Er</b> 167.26	Thulium 69 <b>Tm</b> 168.93	Ytterbium 70 <b>Yb</b> 173.05
Actinium 89 <b>Ac</b> [227]	Thorium 90 <b>Th</b> 232.04	Protactinium 91 <b>Pa</b> 231.04	Uranium 92 <b>U</b> 238.03	Neptunium 93 <b>Np</b> [237]	Plutonium 94 <b>Pu</b> [244]	Americium 95 <b>Am</b> [243]	Curium 96 <b>Cm</b> [247]	Berkelium 97 <b>Bk</b> [247]	Californium 98 <b>Cf</b> [251]	Einsteinium 99 <b>Es</b> [252]	Fermium 100 <b>Fm</b> [257]	Mendelevium 101 <b>Md</b> [258]	Nobelium 102 <b>No</b> [259]

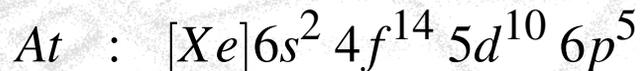
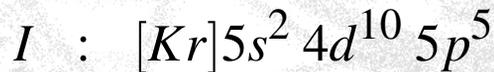
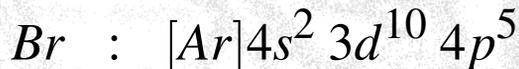
Symbols and names: the symbols and names of the elements, and their spellings are those recommended by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC - <http://www.iupac.org>). Names have yet to be proposed for the most recently discovered elements beyond 112 and so those used here are 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 IUPAC convention.  
 Atomic weights (mean relative masses): Adapted from the heaviest 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](mailto:webelements@sheffield.ac.uk)). All rights reserved. For updates to this table see [http://www.webelements.com/elements/Printable\\_Periodic\\_Table/Version/date](http://www.webelements.com/elements/Printable_Periodic_Table/Version/date): 21 September 2007.



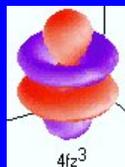
# Sistema periódico

- 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:



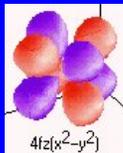
Todas del tipo:  $ns^2 np^5$

Pocas excepciones.



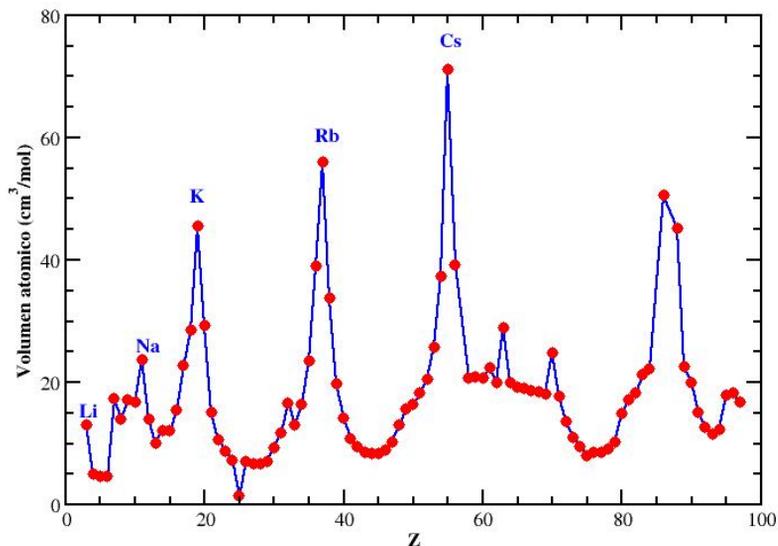
# Sistema periódico

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	$ns^2 (n-1)d^{10} (n-2)f^x$



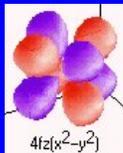
# Volumen atómico

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



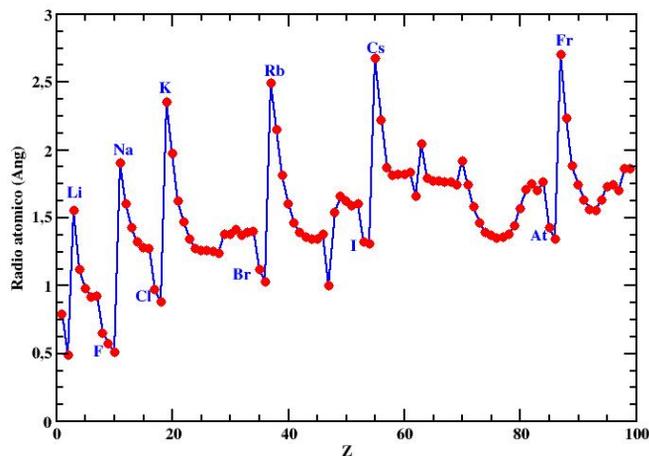
Grupo  $\uparrow$ , nueva capa electrónica.

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



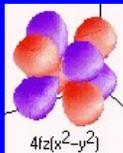
# Radios atómicos

**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.

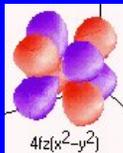


## Radios atómicos

**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  $Z$ .

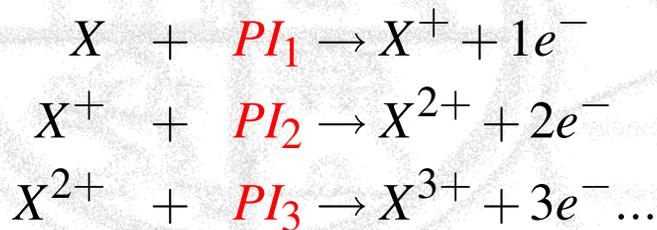
**Radio van der Waals**  $\Rightarrow$  Mitad de la distancia existente entre 2 átomos iguales de moléculas contiguas entre las que sólo existe interacción van der Waals. Poco utilizado.



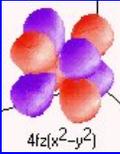
# Energías de ionización

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

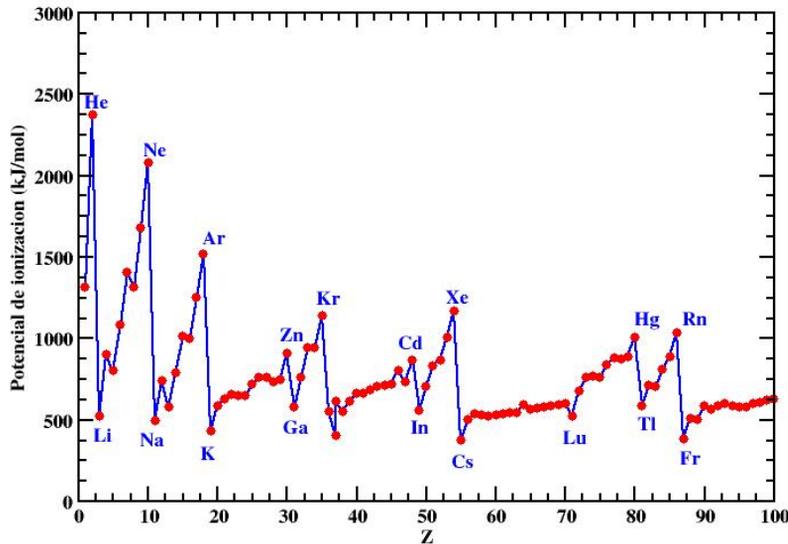
Determinación experimental.



$$PI_1 < PI_2 < PI_3 \dots$$



# Energías de ionización

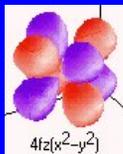


Grupo ↓, aumenta Z, aumento del radio atómico y efecto de apantallamiento de capas.

Periodo ↑, aumenta Z aumenta carga nuclear.

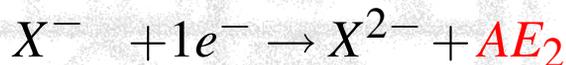
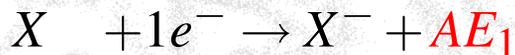
Mayor tendencia a forma  $X^+$   $\Rightarrow$  menores  $PI_1$  (alcalinos).

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



# Afinidad electrónica

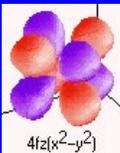
*Energía necesaria para que un átomo o ion en estado gaseoso adquiera un electrón.*



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

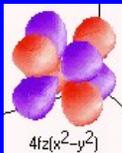
Medida experimental difícil  $\Rightarrow$  Ciclo Born-Haber

$AE_1$  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

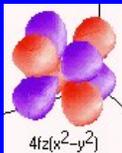
*Capacidad relativa de un átomo para atraer a los pares de electrones de los enlaces*

Definición de Mulliken:

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

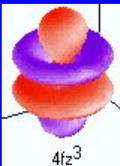
$E_N$  en grupo disminuye al aumentar Z

$E_N$  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.

<b>IA</b>	}	<b>I</b>
Li		
Na		
K		
Rb		
Cs		
Fr		

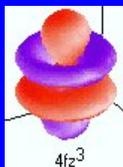
<b>IIA</b>	}	<b>II</b>
Be		
Mg		
Ca		
Sr		
Ba		
Ra		

<b>IIIA</b>	}	<b>III</b>
B		
Al		
Ga	}	<b>I, III</b>
In		
Tl		

<b>IVA</b>	}	<b>IV</b>
C		
Si	}	<b>II, IV</b>
Ge		
Sn		
Pb		

<b>VA</b>	}	<b>I a V</b>
N		
P	}	<b>III, V</b>
As		
Sb		
Bi		

<b>VIA</b>	}	<b>II</b>
O		
S	}	<b>III, IV, VI</b>
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

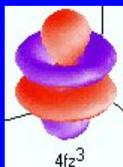
V }  
Nb } II, III, IV, V  
Ta }

## VIB

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

## VII B

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