

# TEMA 2: ESTRUCTURA ATÓMICA Y CLASIFICACIÓN PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS (resumen)

1. Orígenes de la teoría cuántica. Hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico. Espectros atómicos.
2. Modelo atómico de Bohr y sus limitaciones.
3. Introducción a la mecánica cuántica. Hipótesis de De Broglie. Principio de Heisenberg. Mecánica ondulatoria.
4. Orbitales atómicos. Números cuánticos. Configuraciones electrónicas.
5. Sistema periódico: clasificación periódica de los elementos. Variación periódica de las propiedades de los elementos.

## Introducción

### Resumen de modelos atómicos

Dalton

Thomson

Rutherford

### Composición del átomo: el neutrón.

El átomo está formado por:

- Un núcleo en el que hay protones (cargados positivamente) y neutrones (descubiertos por Chadwick en 1932, a los que se debe la mayor parte de la masa del átomo y con carga neutra). Ambas partículas también se llaman en conjunto nucleones). Entre ambas partículas se concentra casi toda la masa del átomo. El tamaño del núcleo es unas 10000 veces menor que el del átomo.
- Una corteza en la que se encuentran los electrones.

Partícula	Carga	Masa (Kg.)
Protón	+1	$1,6725 \cdot 10^{-27}$
Neutrón	0	$1,6748 \cdot 10^{-27}$
Electrón	-1	$9,1096 \cdot 10^{-31}$

Masas y cargas de constituyentes del átomo tomando como unidad de carga eléctrica la del electrón:  $1,6 \cdot 10^{-19}$  C)

### TAMAÑO DE LOS ÁTOMOS

Para medir los átomos se usa el ANGSTROM (A) =  $10^{-10}$  metros.

Según esta unidad: Radio atómico = 1 A Radio nuclear =  $10^{-4}$  A

### ISÓTOPOS

Todos los átomos de un mismo elemento químico tienen el mismo número de protones pero pueden diferir en el número de neutrones.

Se llaman **isótopos** a los átomos de un mismo elemento químico que tienen el mismo número atómico pero distinto número másico.

### ¿Qué hace a los átomos diferentes unos de otros?

Podemos identificar a un átomo por el número de protones que tiene en su núcleo.

NÚMERO ATÓMICO (Z) = Número de protones que contiene el núcleo de un átomo.

(en un átomo neutro coincide con el número de electrones)

NÚMERO MÁSIKO (A) = Número de protones + número de neutrones.

(generalmente los átomos contienen el mismo número de protones que de neutrones)

Con estos datos, un átomo se puede representar por un símbolo o abreviatura del elemento, su número atómico y su número másico de la siguiente manera:



## 1.- Orígenes de la teoría cuántica. Hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico. Espectros atómicos.

### Hipótesis de Planck.

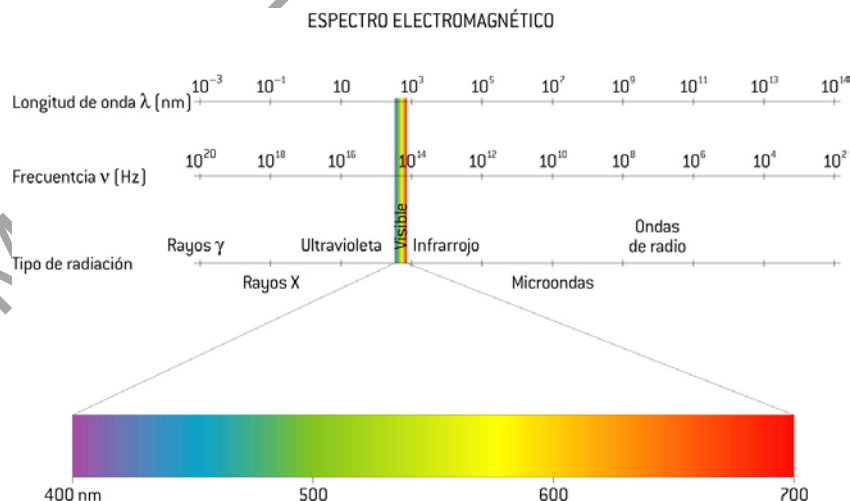
En 1900 Planck formuló que la energía se radia en unidades pequeñas separadas denominadas cuantos.

### Efecto fotoeléctrico.

Formación y liberación de partículas eléctricamente cargadas que se produce en la materia cuando es irradiada con luz u otra radiación electromagnética. En el efecto fotoeléctrico externo se liberan electrones en la superficie de un conductor metálico al absorber energía de la luz que incide sobre dicha superficie.

### Espectros atómicos: Espectros de emisión y espectros de absorción

Espectros atómicos:



**Espectro de absorción:** se obtiene cuando un haz de luz blanca atraviesa una muestra de un elemento y, posteriormente, la luz emergente se hace pasar por un prisma (que separa la luz en las distintas frecuencias que la componen)

**Espectro de emisión:** se obtiene cuando una muestra gaseosa de un elemento se calienta hasta altas temperaturas y se hace pasar la luz emitida a través de un prisma

El espectro de emisión de un elemento es el negativo del espectro de absorción: a la frecuencia a la que en el espectro de absorción hay una línea negra, en el de emisión hay una línea emitida, y viceversa.

## 2.- El modelo atómico de Böhr y sus limitaciones.

### Modelo atómico de Bohr

#### Postulados

Se basa en los siguientes postulados:

Primer postulado: Los electrones giran en torno al núcleo en órbitas circulares de energía fija:

$$r = \frac{nh}{2\pi mV}$$

$h$  = Cte. de Planck =  $6,625 \cdot 10^{-34}$  J s

$m$  = masa del electrón

$v$  = velocidad del electrón

En las órbitas los electrones se mueven sin perder energía.

Segundo postulado: Solo están permitidas determinadas órbitas cuya energía tome cierto valor restringido.

$$E = \frac{-R_H}{n^2}$$

$R_H$  = Cte. Rydberg =  $2,180 \cdot 10^{-18}$  J

$n$  = número entero (1,2,3....)

La órbita o nivel de energía más baja corresponde a  $n = 1$ , y se le llama **nivel fundamental**. Cuanto mayor es  $n$ , mayor es la energía del nivel

El número “ $n$ ” indica el orden de los niveles de energía, y recibe el nombre de **número cuántico principal**.

El nivel de menor energía,  $n = 1$ , también se le denomina capa K. Los niveles  $n = 2, 3, 4$ , etc., se llaman, respectivamente, capas L, M, N, etc.

Tercer postulado: Un electrón podrá saltar de una órbita a otra absorbiendo o emitiendo la energía necesaria, que corresponde a la diferencia energética de las órbitas:

$$\Delta E = E(n_j) - E(n_i)$$

#### Intercambios energéticos

- Si un **electrón asciende** desde una órbita  $n_i$  a otra de mayor energía  $n_j$  debe **absorber** una cantidad de energía igual a:  $\Delta E = E(n_j) - E(n_i)$
- Si un **electrón desciende** desde una órbita  $n_j$  a otra de menor energía  $n_i$ , la diferencia de energía  $\Delta E = E(n_j) - E(n_i)$  se **emite** en el salto.

La energía intercambiada por un electrón en un salto puede adoptar la forma de radiación electromagnética, que puede considerarse una onda o un chorro de partículas llamadas **fotones** cuya energía es proporcional a la frecuencia de radiación ( $\nu$ ):

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

#### Explicación del espectro del hidrógeno: series espectrales

El modelo atómico de Bohr explica satisfactoriamente el espectro del átomo de hidrógeno

- Los **espectros de absorción** se originan cuando los electrones absorben la energía de los fotones y ascienden desde un nivel ( $n_i$ ) hasta otro de mayor energía ( $n_j$ )
- Los **espectros de emisión** se deben a las radiaciones emitidas cuando un electrón “excitado” en un nivel alto ( $n_j$ ) desciende a otro nivel de energía inferior ( $n_i$ )

$$\Delta E = E(n_j) - E(n_i) = h \nu$$

$$\nu = \frac{E(n_j) - E(n_i)}{h}$$

Por tanto, las frecuencias de las líneas del espectro satisfacen la ecuación:

$$\nu = \frac{R_H}{h} \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right)$$

( $R_H/h$ ) vale ( $2,180 \cdot 10^{-18} \text{ J} / 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ ) =  $3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$

El modelo atómico de Bohr interpreta las series espectrales del hidrógeno. Las rayas espectrales de las distintas series se pueden asimilar a distintas transiciones electrónicas.

Serie	Tránsito	Zona
Lyman	De $n > 1$ hasta $n = 1$	Ultravioleta
Balmer	De $n > 2$ hasta $n = 2$	Visible
Paschen	De $n > 3$ hasta $n = 3$	Infrarrojo
Brackett	De $n > 4$ hasta $n = 4$	
Pfund	De $n > 5$ hasta $n = 5$	

### Limitaciones del modelo atómico de Bohr

- Aunque el átomo de Bohr justificó bien el espectro visible del hidrógeno (fórmula de Balmer), pronto surgieron dificultades incluso para este mismo espectros, algunos de cuyos detalles no era capaz de justificar. Por tal motivo, Sommerfeld (1916) perfeccionó el modelo de Bohr, considerando que las órbitas podrían ser también elípticas. Pero este modelo sólo pudo ser aplicado al átomo de H y a iones con un solo electrón ( $\text{He}^+$  por ejemplo).
- Además, algunas de sus propuestas estaban introducidas de manera arbitraria (órbitas estacionarias, números cuánticos, ...).
- Bohr proponía que los niveles energéticos permitidos ( $E = -R_H/n^2$ ) estaban cuantizados por un número cuántico, el número cuántico principal ( $n$ ). Más adelante se puso de relieve, que en un átomo diferente al de hidrógeno, cada nivel está formado por subniveles de energía, cada uno de ellos definido por el  $n^{\circ}$  cuántico secundario " $l$ ". Por otra parte, si se aplica al átomo un campo magnético apropiado, se ponen de relieve dos fenómenos:
  - Los subniveles se desdoblán en varios más (efecto Zeeman), entonces, cada uno de ellos viene definido por el valor del  $n^{\circ}$  cuántico magnético " $m$ ".
  - El electrón se manifiesta como un minúsculo imán, pudiendo su pequeño campo magnético sumarse o bien ir en contra del aplicado. Un  $n^{\circ}$  cuántico de spin " $s$ " o " $m_s$ " define esta posibilidad.

Aunque el modelo no es el que se acepta hoy en día, varias de sus ideas básicas, como las restricciones de energía y posición del electrón en el átomo y el mecanismo de emisión de luz por salto del electrón, no han perdido vigencia y son recogidas en el modelo actual.

### 3.- Introducción a la mecánica cuántica. Hipótesis de De Broglie. Principio de incertidumbre o de Heisenberg. Mecánica ondulatoria.

#### Fundamentos de teoría cuántica

Se fundamenta en dos hipótesis:

- La dualidad onda corpúsculo (hipótesis de De Broglie).
- El principio de indeterminación de Heisenberg.

#### Dualidad onda - corpúsculo: Hipótesis de De Broglie.

De Broglie sugirió que un electrón puede mostrar propiedades de onda. La longitud de onda asociada a una partícula de masa  $m$  y velocidad  $v$ , viene dada por:

$$\lambda = \frac{h}{mV} \quad \text{donde } h \text{ es la constante de Plank.}$$

#### Determinismo e indeterminismo: principio de incertidumbre o de indeterminación de Heisenberg.

Heisenberg propuso la imposibilidad de conocer con precisión, y a la vez, la posición y la velocidad de una partícula. Se trata al electrón como una onda y se intenta determinar la probabilidad de encontrarlo en un punto determinado del espacio

La probabilidad en un punto es proporcional al cuadrado de la función de onda ( $\psi$ )

$$P(x, y, z) \propto \psi^2(x, y, z)$$

La mecánica cuántica establece que sólo son válidas las funciones de una ecuación matemática, conocida como ecuación de Schrödinger o ecuación de ondas.

Desgraciadamente, la ecuación de ondas es por lo general muy difícil de resolver. Aplicada a los átomos, proporciona una solución exacta para el H y aproximadas para el resto de los átomos. Estas soluciones se denominan **orbitales**.

### 4.- Orbitales atómicos. Números cuánticos. Configuraciones electrónicas

#### a) Cuantización: números cuánticos y su significado.

Un orbital está determinado por el valor de tres números cuánticos ( $n, l, m_l$ ). Estos números imponen unos valores posibles "cuantizados" a determinadas magnitudes físicas.

##### **Número cuántico principal, $n$**

- Puede tomar valores enteros 1, 2, 3, etc.
- Cuantiza la energía total del electrón y el tamaño de la órbita.

##### **Número cuántico secundario o azimutal, $l$**

- Sólo puede tomar valores enteros que van de 0 a  $n-1$
- Cuantiza el módulo del momento angular,  $L$ , del electrón y la forma del orbital.

##### **Número cuántico magnético, $m_l$**

- Sólo puede tomar valores enteros que van desde  $-l$  a  $+l$ , incluyendo el cero.

- Cuantiza la orientación del momento angular del electrón  $L$  y la orientación de la órbita en presencia de un campo magnético.

### Número cuántico de spin.

Hay un cuarto número cuántico, el **número cuántico de espín,  $m_s$** , que fue postulado por Pauli para explicar la posible existencia de dos electrones con una energía ligeramente distinta en un orbital.

Los dos posibles valores son  $+1/2$  y  $-1/2$ , corresponden a las dos posibles orientaciones de un momento angular propio del electrón denominado espín,  $S$ .

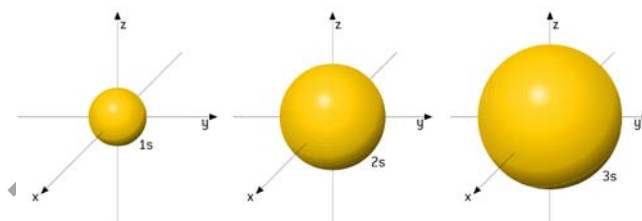
### b) Orbitales

Un orbital es una solución de la ecuación de ondas aplicada a un átomo. Determina la región del espacio donde hay una probabilidad muy alta de encontrar a los electrones

#### b.1) Forma y orientación de los orbitales.

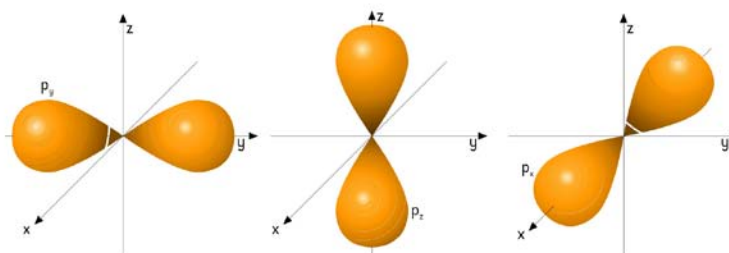
##### **Orbitales s ( $l = 0$ )**

- Tienen forma esférica
- La probabilidad de encontrar al electrón es la misma en todas las direcciones radiales
- La distancia media del electrón al núcleo sigue el orden  $3s > 2s > 1s$



##### **Orbitales p ( $l = 1$ )**

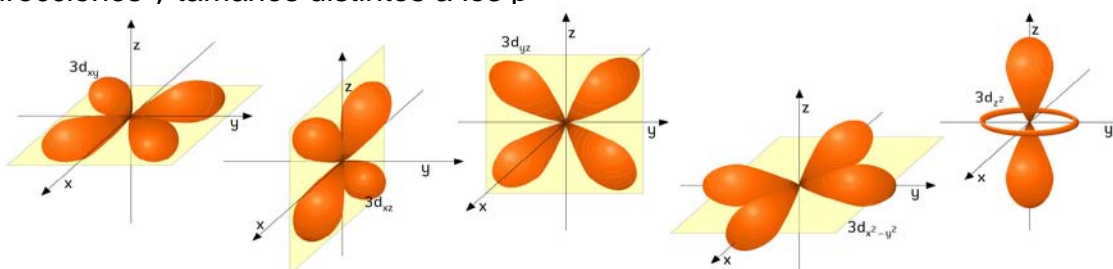
- Tienen forma de elipsoides de revolución y se diferencian sólo en la orientación en el espacio
- Un electrón que se encuentre en un orbital  $p_x$  pasa la mayor parte del tiempo en las proximidades del eje  $X$ . Análogamente ocurren con  $p_y$  y  $p_z$
- Los tres orbitales  $np$  tienen igual forma y tamaño



##### **Orbitales d ( $l = 2$ )**

Tienen forma de elipsoides de revolución

Tienen direcciones y tamaños distintos a los p



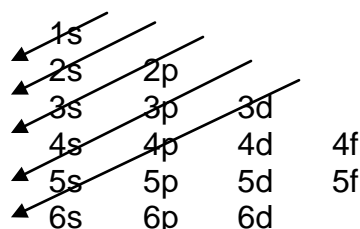
El valor de  $n$  afecta al tamaño del orbital, pero no a su forma. Cuanto mayor sea el valor de  $n$ , más grande es el orbital

## **b.2) Energía de los orbitales.**

### **¿Cómo saber el orden de llenado electrónico según su energía?**

Regla de llenado de Hund o regla  $(n+l)$ : la energía de un orbital en orden a su llenado es tanto menor cuanto más pequeña sea la suma  $(n+l)$ . Cuando hay varios orbitales con igual valor de  $n+l$ , tiene mayor energía aquel que tenga menor valor de  $n$

Diagrama de Möller



Por cualquiera de los dos métodos el orden sería:

1s , 2s , 2p , 3s , 3p , 4s , 3d , 4p , 5s , 4d , 5p , 6s , 4f , 5d , 6p , ...

## **c) Configuraciones electrónicas. Formas de representarlas.**

Los sistemas evolucionan hasta alcanzar situaciones de mínima energía. La disposición de los electrones alrededor del núcleo en un átomo, es de la forma más estable posible, y se denomina **configuración electrónica**.

### **Reglas para rellenar los orbitales.**

- **Principio de Aufbau:** Los electrones entran en los orbitales de energía más bajos disponibles
- **Principio de exclusión de Pauli:** en un orbital atómico solo caben, como mucho, dos electrones. Estos deben tener espines opuestos (si esto es así se dice que están apareados y se representan mediante flechas verticales  $\uparrow$  y  $\downarrow$ )
- **Segunda regla de Hund:** cuando varios electrones ocupan orbitales de la misma energía (es decir, de un mismo subnivel), se disponen de modo que tenga el máximo número de electrones desapareados (con el mismo espín)

## **5.- Sistema periódico: clasificación periódica de los elementos. Variación periódica de las propiedades de los elementos.**

### **a) Sistema periódico.**

- Características de la tabla periódica.
  - Columnas - grupos (18) y filas - períodos (7)
  - Capa de valencia (última capa  $s$  y  $p$ , a la que se deben las propiedades químicas similares para un grupo).
  - Iones (situación)
  - Metales, no metales, semimetales.

- Nombres de algunos grupos.
  - Alcalinos
  - Alcalino – térreos
  - Térreos
  - Carbonoides
  - Nitrogenoides
  - Anfígenos
  - Halógenos
  - Gases nobles
  
- Bloques del sistema periódico.
  - Elementos representativos
    - Grupos IA y IIA: bloque s
    - Grupos IIIA – VIIIA: bloque p
  - Metales de transición (grupos B): bloque d
  - Metales de transición interna: bloque f
  
- Excepciones en la tabla periódica.
  - La situación del hidrógeno.
  - Las excepciones a las configuraciones esperables.
  - Zn, Cd, Hg no se consideran habitualmente metales de transición por su comportamiento químico diferente [  $ns^2 (n-1) d^{10}$  ]

## **b) Propiedades que varían de forma periódica**

### **El tamaño atómico**

#### **Variación del tamaño de los átomos**

- En un grupo: el tamaño atómico aumenta al descender en un grupo
  - \* Al descender en el grupo aumenta el número atómico y, por tanto, la carga nuclear. Los electrones son atraídos con más fuerza y por consiguiente disminuye el tamaño
  - \* Al descender en el grupo, aumentan el número de capas, con lo que el tamaño aumenta. Este factor prevalece sobre el anterior
- En un período: el tamaño atómico disminuye al avanzar en un período
  - \* Al aumentar el número de electrones en la misma capa, aumenta la carga nuclear y los electrones se acercan más al núcleo

Dentro de cada período, los átomos de los metales alcalinos son los más grandes. Los de menor volumen son los de transición y los del grupo 13

#### **Variación del tamaño de los iones**

- En cationes: el tamaño del catión es más pequeño que el del átomo neutro ya que al perder electrones de la capa más externa, los que quedan son atraídos por el núcleo con más fuerza por la carga positiva del núcleo
- En aniones: el tamaño del anión es más grande que el del átomo neutro. Un ión negativo se forma cuando el átomo gana electrones. Estos electrones aumentan las fuerzas de repulsión existentes entre ellos

## Energía de ionización

**1ª energía de ionización (EI)** es la energía necesaria para arrancar el electrón más externo de un átomo en estado gaseoso:



**2ª energía de ionización** es la energía necesaria para arrancar el siguiente electrón del ión monopositivo formado:



En un grupo: La energía de ionización disminuye al descender en un grupo ya que la carga nuclear aumenta y también aumenta el número de capas electrónicas, por lo que el electrón a separar que está en el nivel energético más externo, éste siente menos la atracción de la carga nuclear (está más apantallado) y necesita menos energía para ser separado del átomo

En un período: La energía de ionización crece al avanzar en un período ya que al avanzar en un período, disminuye el tamaño atómico y aumenta la carga positiva del núcleo. Así, los electrones al estar atraídos cada vez con más fuerza, cuesta más arrancarlos.

## Afinidad electrónica

**Afinidad electrónica** es el cambio de energía que acompaña al proceso de adición de un electrón a un átomo gaseoso (AE). Los valores de la afinidad electrónica se consideran, normalmente, para 1 mol de átomos. Aplicando el convenio de termodinámica de signos, un ejemplo sería:



La afinidad electrónica está relacionada con el **carácter oxidante** de un elemento. Cuanta mayor energía desprenda un elemento al ganar un electrón, mayor será su carácter oxidante. Así, los halógenos tienen un elevado carácter oxidante, al contrario de los alcalinotérreos que carecen de carácter oxidante.

## Electronegatividad

La **electronegatividad** es la tendencia que tienen los átomos de un elemento a atraer hacia sí los electrones cuando se combinan con átomos de otro elemento. Por tanto es una propiedad de los átomos enlazados.

La determinación de la electronegatividad se hace conforme a dos escalas:

- Escala de Mulliken. Considera la electronegatividad como una propiedad de los átomos aislados, su valor es:  $\text{EN} = (\text{AE} + \text{EI}) / 2$
- Escala de Pauling. Se expresa en unidades arbitrarias: al flúor, se le asigna el valor más alto, por ser el elemento más electronegativo, tiene un valor de 4 y al cesio, que es el menos electronegativo se le asigna el valor de 0,7

La electronegatividad **aumenta** con el número atómico **en un período** y **disminuye en un grupo**.

## **Carácter metálico**

Según el carácter metálico podemos considerar los elementos como:

### **Metales:**

- Pierden fácilmente electrones para formar cationes
- Bajas energías de ionización
- Bajas afinidades electrónicas
- Bajas electronegatividades
- Forman compuestos con los no metales, pero no con los metales

### **No Metales:**

- Ganan fácilmente electrones para formar aniones
- Elevadas energías de ionización
- Elevadas afinidades electrónicas
- Elevadas electronegatividades
- Forman compuestos con los metales, y otros con los no metales

### **Semimetales:**

- Poseen propiedades intermedias entre los metales y los no metales (Si, Ge)

### **Tendencias de la reactividad:**

Los metales reaccionan perdiendo electrones, así cuanto menor sea su energía de ionización serán más reactivos. La reactividad:

- Disminuye al avanzar en un período
- Aumenta al descender en el grupo

Los no metales reaccionan ganando electrones, así cuanto mayor sea su afinidad electrónica serán más reactivos. La reactividad:

- Aumenta al avanzar en un período
- Aumenta al ascender en el grupo

En los gases nobles la reactividad es casi nula o muy baja, debido a que poseen configuraciones electrónicas muy estables.