

# ESTRUCTURA ATÓMICA

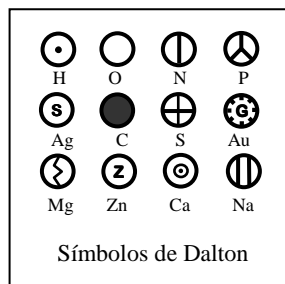
## Modelos atómicos

Fue en la antigua Grecia donde surgió la idea de que la materia estaba constituida por partículas indivisibles, que llamaron átomos (Demócrito y Leucipo). Esta idea era contraria a las de Platón y Aristóteles quienes mantenían que la materia era continua. Fue esta última la que prevaleció hasta finales del s. XVIII, cuando comenzaron a cimentarse los pilares de la química moderna (Lavoisier, Dalton, Proust, ...)

### Modelo atómico de Dalton.

Las leyes ponderales podían explicarse si se admitía a la existencia de átomos. Da ahí surgió la teoría atómica de Dalton. Sus principios eran:

- La materia está formada por átomos (partículas indivisibles)
- Los átomos de un mismo elemento son iguales entre sí.
- Los átomos de un elemento químico son diferentes de los de otro elemento.
- Los compuestos químicos se forman por la unión de átomos de los correspondientes elementos en proporción fija.

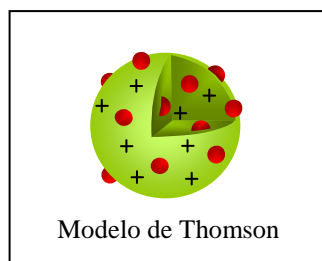


Dalton (1766-1844) planteó unos símbolos que representaban a cada uno de los elementos conocidos. Más tarde, según fueron conociéndose más elementos, Berzelius propuso el utilizar como símbolo de cada elemento una o dos letras relativas a sus nombres.

### Modelo atómico de Thomson.

A lo largo del s.XIX experiencias sobre la naturaleza eléctrica de la materia, la radioactividad y el descubrimiento del electrón (rayos catódicos) y la determinación de su carga (experiencia de Millikan) sugirieron que el átomo no era indivisible (contenía partículas cargadas).

Thomson (1856-1940) basándose en el hecho de que la materia se presenta, generalmente, en estado neutro, propuso un modelo en el que el átomo estaba formado en una esfera con masa y carga positiva con los suficientes electrones insertados ella como para neutralizar la carga positiva de dicha esfera (modelo del pastel de pasas)



### Modelo atómico de Rutherford

E. Rutherford (1871-1937) se propuso investigar la naturaleza del átomo bombardeando una finísima lámina de oro con partículas  $\alpha$  (núcleos de helio,  $\text{He}^{2+}$ ): Observó que:

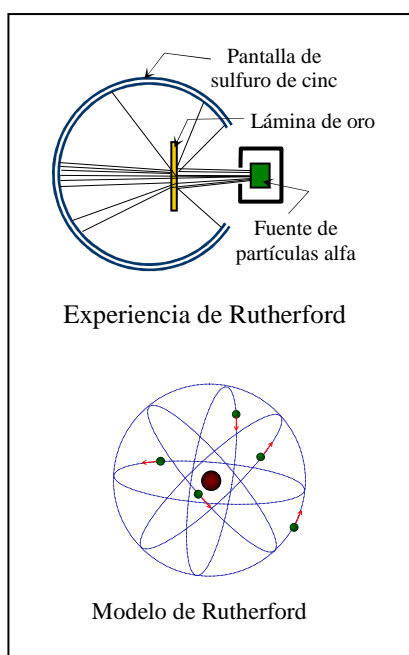
- La mayor parte de las partículas  $\alpha$  atravesaban la lámina sin desviarse
- Algunas sufrían diversas desviaciones
- y, aproximadamente, una de cada 20000 rebotaba, siendo detectada por las pantallas fluorescentes colocadas delante de la lámina (como si al disparar una bala sobre un papel ésta saliese rebotada hacia atrás)

Rutherford explicó los resultados de la experiencia proponiendo un nuevo modelo de átomo. En él:

- El átomo estaría constituido por un núcleo, en el que se concentraría casi toda la masa y la carga positiva.
- Alrededor del núcleo, y situados a distancias relativamente grandes, se encontrarían girando los electrones en número igual al de unidades positivas del núcleo.

Este modelo se asemejaría al de un diminuto sistema planetario en el que los electrones giran alrededor del núcleo como lo hacen los planetas alrededor del Sol.

(Rutherford y colaboradores demostraron que el radio del núcleo, del orden de  $10^{-15}$  m, es mucho menor que el del átomo, del orden de  $10^{-10}$  m para el átomo de H, concluyendo que la mayor parte del átomo está prácticamente vacía)



Este modelo explicaba los resultados de la lámina de oro:

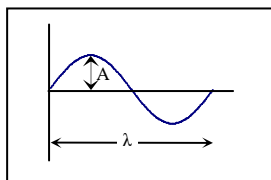
- Las partículas  $\alpha$  que pasan lejos del núcleo no sufren desviaciones (los electrones de la corteza prácticamente no las afectan)
- Las que pasan cerca se desvían debido a la repulsión electrostática que tiene lugar entre éstas y las cargas del núcleo
- Aquellas partículas que chocan contra el núcleo rebotan.

Sin embargo este modelo presentaba algunos problemas: según las leyes clásicas del electromagnetismo toda partícula cargada que gira emite radiación electromagnética, por lo que el electrón irá perdiendo energía y al final acabaría precipitándose sobre el núcleo; además era incapaz de justificar los espectros atómicos discontinuos.

Bohr propuso un nuevo modelo atómico, que basándose en la mecánica clásica (modelo de Rutherford), incorporaba las ideas de Planck e Einsten sobre la cuantización de la energía (radiación del cuerpo negro, efecto fotoeléctrico y espectros atómicos)

## Radiación electromagnética y espectros atómicos

El *movimiento ondulatorio* es una forma de transmisión de energía, sin transporte neto de materia, mediante la propagación de una determinada perturbación. Esta perturbación se denomina onda.



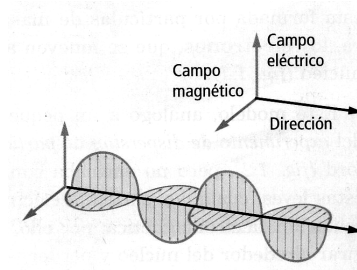
Las ondas pueden describirse en función de su *longitud de onda*,  $\lambda$ , que es la distancia que separa dos puntos que se encuentran en el mismo estado de vibración, *frecuencia*,  $\nu$ , número de ondas que pasan por un punto en un segundo, *periodo* T, tiempo que tarda el movimiento ondulatorio en avanzar una longitud de onda, *amplitud* (A) y *velocidad de propagación* ( $v$ )

La ecuación que relaciona alguna de estas magnitudes es:

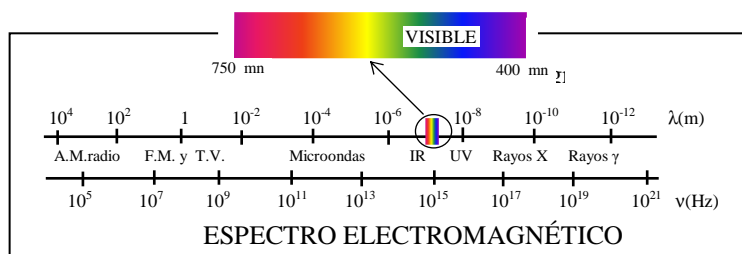
$$\lambda = v \cdot T = \frac{v}{\nu}$$

Clasificación:

- Onda mecánica: propagación de una perturbación a través de un medio (p.e. el sonido)
- Onda electromagnética: transmisión de la perturbación sin necesidad de medio físico (p.e. la luz). Una onda electromagnética (radiación electromagnética) está compuesta por un campo eléctrico y uno magnético que oscilan en direcciones perpendiculares y, a su vez, perpendiculares a la dirección de propagación. En el vacío la velocidad de propagación de las OEM ( $c$ ) es de  $3 \cdot 10^8$  m/s.



El conjunto de todas la radiaciones electromagnéticas (que difieren entre sí en su  $\lambda$  y por lo tanto en su  $\nu$ ) se denomina *espectro electromagnético* (ver figura). El ojo humano sólo es sensible a un pequeño intervalo de este espectro que se denomina luz visible.

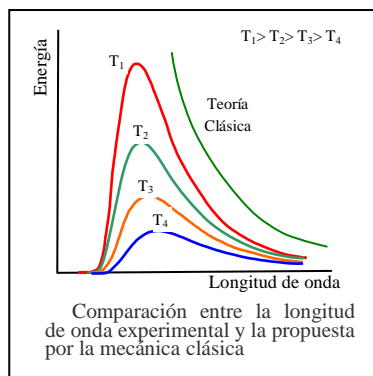


Las ondas electromagnéticas, con  $\lambda$  ligeramente inferiores a las de la luz visible, corresponden a la radiación ultravioleta (UV), y las ligeramente superiores a la radiación infrarroja (IR) (la radiación térmica emitida por los cuerpos se encuentra en la zona de IR). Los rayos X, con  $\lambda$  muy corta, penetran fácilmente en muchos materiales, mientras que las microondas cuya  $\lambda$  es del orden de algunos cm son absorbidas por las moléculas del agua en los

alimentos, siendo este hecho el fundamento de los hornos microondas; por último los rayos gamma, que son emitidos por isótopos radiactivos, tienen un poder de penetración elevado lo que puede ocasionar daño en las células de los tejidos de los seres vivos.

### ● Radiación del cuerpo negro.

Cuando se calientan los sólidos emiten radiación electromagnética en una amplia gama de longitudes de onda como consecuencia de la excitación térmica sufrida por sus átomos (luz roja en un calentador eléctrico, blanca brillante en una lámpara incandescente,...). La longitud de onda de la radiación más intensa depende de la temperatura (ley de Wien). Si la temperatura no es muy alta, los sólidos emiten principalmente radiación infrarroja (calor); si se eleva la temperatura hasta unos 1000 °C veremos el objeto de color rojo.



Un cuerpo negro es un emisor ideal de radiación que no refleja la que incide sobre él (queda atrapada), de forma que la que emite sólo depende de su temperatura.

Las experiencias realizadas mostraban que la energía radiante que emitía un cuerpo negro a determinada temperatura dependía de su longitud de onda. Si bien las explicaciones de esta dependencia eran satisfactorias con las teorías ondulatorias establecidas para bajas frecuencias ( $\lambda$ , elevadas), no lo eran para bajas longitudes de onda. Este problema era conocido con el nombre de “catástrofe ultravioleta”, ya que las predicciones teóricas apuntaban a que la energía radiante para esas frecuencias debería tender al infinito.

Para resolver el problema M. Planck (1858-1947) propuso una teoría que se apartaba radicalmente de las teorías clásicas: éstas suponían que los átomos emitían cualquier cantidad de energía. Planck formuló la hipótesis de que los átomos y moléculas emitían energía en forma de pequeños paquetes, cuantos de radiación o fotones.

La energía de un solo cuanto o fotón de una radiación depende de la frecuencia de la misma y está relacionada con ella mediante:

$$E = h \cdot \nu \quad \text{donde} \quad \begin{cases} E = \text{energía de la radiación emitida (o absorbida)} \\ \nu = \text{frecuencia de la radiación electromagnética} \\ h = \text{constante de Planck: } 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Julios.s} \end{cases}$$

La energía, al igual que la materia, no es una magnitud continua, sino que está formada por múltiplos enteros de cantidades elementales o cuantos de energía.

La hipótesis de Planck marcó el inicio de la denominada mecánica cuántica.

**Ejercicio resuelto 1.-** A una determinada temperatura un cuerpo negro emite una radiación cuya máxima intensidad corresponde a una frecuencia de  $10^{15}$  Hz. Calcula:

a) La longitud de onda correspondiente esa radiación.

b) La energía de un fotón

c) El número de fotones que deberían ser emitidos para aumentar 1 °C la temperatura de 1 ml de agua ( $c_e(\text{agua}) = 4180 \text{ J/Kg.K}$ )

$$a) \quad \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{10^{15} \text{ s}^{-1}} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

b) Según la ecuación de Planck:

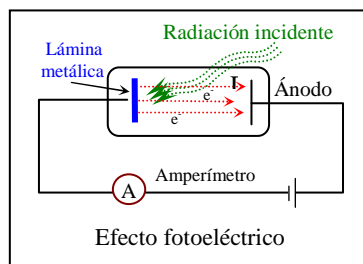
$$E = h \cdot \nu = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} \cdot 10^{15} \text{ Hz} = 6,63 \cdot 10^{-19} \text{ J (Energía de un fotón)}$$

c) Calor necesario para calentar el agua:  $Q = m \cdot c_e \cdot \Delta t = 1 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot 4180 \text{ J/Kg.K} \cdot 1 \text{ K} = 4,18 \text{ J (Energía necesaria)}$

$$E_{\text{Total}} = n \cdot E_{\text{Fotón}} \rightarrow n = \frac{4,18 \text{ J}}{6,63 \cdot 10^{-19} \text{ J/fotón}} = 6,3 \cdot 10^{18} \text{ Fotones}$$

ES1.- Compara la energía correspondiente a un fotón de radiación de luz roja cuya frecuencia es de  $4,3 \cdot 10^{14}$  Hz con la de otro de radiación verde cuya longitud de onda es de 5460 Å. Indica, ambas energías en eV. Sol: 1,78 eV y 2,28 eV

(1 eV es la energía que posee un electrón cuando se encuentra sometido a un potencial de 1 voltio:  $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ )



### • El efecto fotoeléctrico

Cuando se hace incidir luz de energía suficiente sobre una superficie metálica en el vacío, ésta emite electrones (efecto fotoeléctrico). El amperímetro del dispositivo (circuito) representado en la figura sólo indicará paso de corriente cuando el haz de luz que incide sobre la superficie metálica posea una determinada frecuencia.

De las experiencias realizadas se desprendían características que no podían explicarse mediante las teorías clásicas. Entre ellas encontraban que:

- Para una determinada superficie metálica existe una frecuencia mínima de la radiación incidente (denominada frecuencia umbral,  $\nu_0$ ), por debajo de la cual no se observará paso de corriente por el amperímetro del circuito.

- La energía cinética máxima de los electrones emitidos (fotodectrones) depende de la frecuencia de la radiación incidente, no de su intensidad. Es decir, depende de la energía de los fotones de dicha radiación y no de la cantidad de fotones que inciden en la superficie metálica.

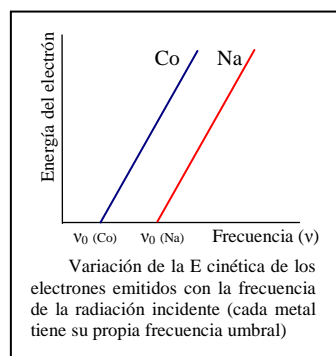
- Al aumentar la intensidad de la luz incidente aumentaba la intensidad de la corriente marcada por el amperímetro, es decir, mayor era el número de fotodectrones emitidos (siempre que la frecuencia de la radiación incidente superara la umbral para el correspondiente metal)

Según las leyes clásicas el efecto fotoeléctrico debería producirse para cualquier frecuencia siempre que la intensidad de la radiación fuese suficientemente grande. Por otra parte la energía de los electrones arrancados debería aumentar con la intensidad incidente, cosa que no sucede.

La explicación del efecto fotoeléctrico fue desarrollada en 1905 por A. Einstein (1879-1955) influido por la hipótesis que Planck había formulado años antes. Propuso que la radiación (luz) incidente estaba compuesta por pequeñas unidades de energía denominadas cuantos de energía o fotones siendo la energía de cada uno de ellos:

$$E_{\text{Fotón}} = h \cdot \nu$$

donde  $\nu$  la frecuencia de la radiación (luz) incidente.



Cuando un fotón de frecuencia  $\nu$ , siempre que ésta sea superior a la umbral del correspondiente metal, incide sobre la superficie metálica comunica su energía a un electrón. Una parte de esta energía ( $E_0$ ) se utiliza para vencer las fuerzas atractivas que lo mantienen unido al átomo metálico (para arrancarlo del metal) y el resto se invierte en aumentar la energía cinética del electrón arrancado ( $E_c$ ). (Si la energía del fotón que incide sobre un electrón es menor que la necesaria para arrancarlo éste no absorberá energía y no ocurrirá nada)

El balance energético propuesto por Einstein es:

$$E_{\text{Incidente}} = E_0 + E_{\text{cinética}} \rightarrow h \cdot \nu = h \cdot \nu_0 + \frac{1}{2} m_e \cdot v_e^2$$

en donde  $\nu_0$  es la frecuencia umbral del metal y  $h \cdot \nu_0$  la mínima energía que deberá tener el fotón de la luz incidente para producir el efecto fotoeléctrico.

**Ejercicio resuelto 2.-** Calcular la energía cinética de los fotodectrones emitidos al iluminar una superficie metálica de sodio con una luz cuya  $\lambda$  es de  $4500 \text{ \AA}$ . La frecuencia umbral del sodio es  $5 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$

Según el balance energético propuesto por Einstein:

$$E_{\text{Incidente}} = E_0 + E_{\text{cinética}} \rightarrow h \cdot \nu = h \cdot \nu_0 + E_c \quad \text{Como } \nu = \frac{c}{\lambda} \quad \text{obtenemos } \rightarrow h \cdot \frac{c}{\lambda} = h \cdot \nu_0 + E_c$$

Sustituyendo los valores y despejando  $E_c$ :

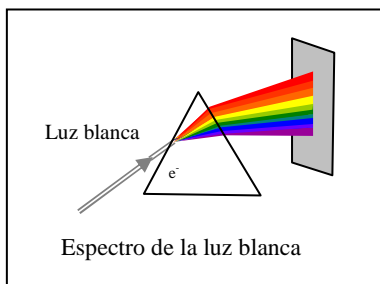
$$E_c = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{4500 \cdot 10^{-10} \text{ m}} - 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot 5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1} = 1,105 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

ES2.- Razona por qué, si la radiación con la que se ilumina una placa metálica no produce efecto fotoeléctrico, lo seguirá sin producir por mucho que aumentemos su intensidad.

ES3.- La energía de ionización del sodio ( $E_0$ ) es de  $3,7 \cdot 10^{-19} \text{ J/átomo}$ . Calcula la frecuencia mínima que deberá tener un fotón para producir efecto fotoeléctrico. Si el fotón incidente posee una energía de  $2,4 \text{ eV}$  ¿con qué velocidad saldrá el electrón arrancado? (La masa del electrón es  $9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ )

Sol:  $5,58 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ ;  $174,4 \text{ km/s}$

## • Espectros atómicos

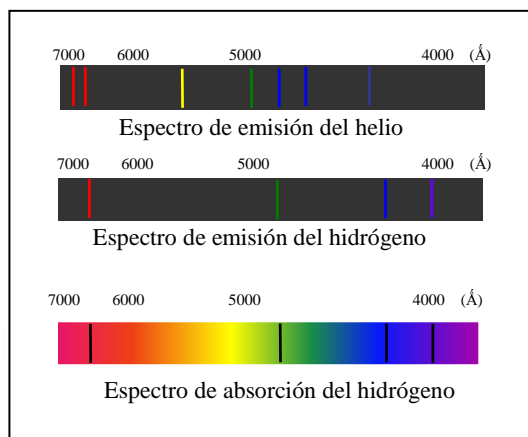


Un espectro es la separación de las distintas radiaciones elementales (cada una de una frecuencia única) en las que puede descomponerse una radiación compleja. La mayoría de las radiaciones emitidas por los sistemas son una superposición de radiaciones de distinta frecuencia. Si la luz blanca emitida por el sol la hacemos atravesar el prisma de un espectroscopio y la recogemos sobre una pantalla, obtendremos, debido al efecto de la dispersión producido, las distintas radiaciones que la componen dando lugar a un espectro continuo de emisión que contiene una gama de colores que va desde el violeta al rojo, similar al que vemos en el arco iris.

Tipos de espectros:

- De emisión, formado al recoger las radiaciones emitidas por una muestra, previamente excitada mediante una llama o una descarga eléctrica. Se produce cuando los electrones que se encuentran en estado excitado pasan a su estado fundamental.
- De absorción, cuando se recoge la radiación obtenida al hacer pasar luz blanca a través de una muestra. En éste faltarán las frecuencias de las radiaciones que hayan sido absorbidas por la muestra. (Al absorber radiación, algunos electrones de los átomos pasarán a un estado excitado)

Si sometemos a un elemento en estado gaseoso, a baja presión y temperatura, a una descarga eléctrica y analizamos la luz emitida obtendremos un espectro discontinuo de emisión. Si lo registramos en una placa fotográfica veremos que se encuentra formado por un conjunto de líneas sobre fondo negro, correspondientes a diferentes frecuencias, que son características de dicho elemento (independientemente de que se encuentre solo, mezclado o combinado) y que nos servirán para identificarlo.



El espectro de absorción de un elemento es complementario al de emisión: cada elemento absorbe las mismas radiaciones que es capaz de emitir. La suma de los espectros de absorción y emisión de un elemento nos proporciona la luz blanca.

El estudio de los espectros constituyó un nuevo método de análisis químico que permitió el descubrimiento de nuevos elementos.

La aparición de los primeros espectros discontinuos plantearon la cuestión de ¿por qué no eran continuos como el de la luz blanca? y la separación entre las rayas ¿tenía relación con la constitución íntima del elemento estudiado?

El primer espectro de emisión interpretado fue el del hidrógeno. J. Balmer (1825-1898) estudió y determinó la frecuencia de las rayas de la serie espectral (conjunto de rayas de un espectro atómico) que aparecían en la zona del visible: fue denominada serie de Balmer. Posteriormente, fueron detectadas también para el hidrógeno, utilizando espectrógrafos con mayor poder de resolución, otras series espectrales en la zona del ultravioleta y del infrarrojo que se conocen como series de Lyman, Pachen, Bracket y Pfund, en honor a sus descubridores.

La longitud de onda de las radiaciones correspondientes a todas las líneas de las diferentes series espectrales para el átomo de hidrógeno puede calcularse mediante la ecuación, meramente empírica, encontrada por el químico sueco J. Rydberg (1854-1919):

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{donde} \quad \begin{cases} n_1 < n_2 & \text{siendo ambos números enteros} \\ R & \text{es la constante de Rydberg de valor } 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \end{cases}$$

Cuando  $n_1 = 1$  y  $n_2$  toma los valores de 2, 3, 4,... se obtienen las  $\lambda$  de las líneas correspondientes a la serie espectral de Lyman

- Si  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3, 4, 5, \dots$  las de la serie de Balmer
- Si  $n_1 = 3$  y  $n_2 = 4, 5, \dots$  las de la serie de Pachen
- Si  $n_1 = 4$  y  $n_2 = 5, 6, \dots$  las de la serie de Bracket
- Si  $n_1 = 5$  y  $n_2 = 6, 7, \dots$  las de la serie de Pfund

Ejercicio resuelto 3.- Determina la frecuencia de la radiación que da lugar a la tercera línea de la serie de Balmer para el hidrógeno.  $R=1,097.10^7 \text{ m}^{-1}$

A partir de la ecuación de Rydberg, y siendo  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 5$ :

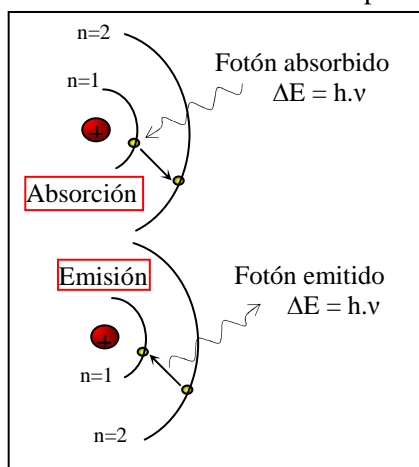
$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 1,097.10^7 \text{ m}^{-1} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right) \Rightarrow \lambda = 4,431.10^{-7} \text{ m}$$

y como  $v = \frac{c}{\lambda}$  sustituyendo los valores  $v = \frac{3.10^8 \text{ m/s}}{4,431.10^{-7} \text{ m}^{-1}} = 6,77.10^{14} \text{ Hz}$

ES4.- Calcula la longitud de onda de la radiación correspondiente a la segunda línea de la serie de Lyman. ¿A qué región del espectro corresponde? ¿Qué energía poseerá un fotón de dicha radiación? (Dato: R) Sol: 102,5 nm; 12,13 eV

## Modelo atómico de Bohr

Inspirado en la mecánica clásica pero incorporando las ideas de Planck e Einstein sobre la cuantización de la energía, Niels Bohr (1885-1962) propone un modelo atómico, basado en una serie de postulados, que explicaban satisfactoriamente el espectro de emisión del hidrógeno.



- 1º Postulado: El átomo tiene un núcleo donde se encuentran los protones y alrededor del cual giran los electrones, describiendo órbitas circulares, sin emitir energía.

- 2º Postulado: Sólo son permitidas determinadas órbitas (denominadas estacionarias) para el electrón; son aquellas que hacen que su momento angular sea múltiplo de  $h/2\pi$

$$m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

donde  $h$  es la constante de Planck,  $m$  y  $v$  la masa y velocidad del electrón en esa órbita,  $r$  el radio de la misma y  $n$  es un número entero, denominado número cuántico principal, que toma el valor de 1 para la órbita más cercana al núcleo, 2 para la segunda, ...

- 3º Postulado: Los electrones pueden pasar de una órbita estacionaria a otra absorbiendo o emitiendo energía en forma de radiación electromagnética. La energía absorbida por los electrones cuando pasan de una órbita a otra más externa o la emitida si lo hacen de una externa a otra más interna, es igual a la diferencia de energía ( $\Delta E$ ) existente entre dichas órbitas.

$$\Delta E = E_2 - E_1$$

Según el modelo atómico de Bohr, los electrones giran alrededor del núcleo describiendo órbitas circulares. En consecuencia, la fuerza electrostática entre núcleo y electrón (1) es la fuerza centrípeta responsable de su movimiento. Este hecho, combinado con la condición de órbita estacionaria (2), nos permite, mediante sencillos cálculos, determinar tanto el radio de las diferentes órbitas circulares como la energía y velocidad del electrón en ellas:

A partir de (1)  $F_c = F_e = k \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r^2} = m \cdot \frac{v^2}{r}$  y (2)  $m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$  se obtiene:

$$r = a \cdot n^2 \quad \text{y} \quad E = -A \cdot \frac{1}{n^2}$$

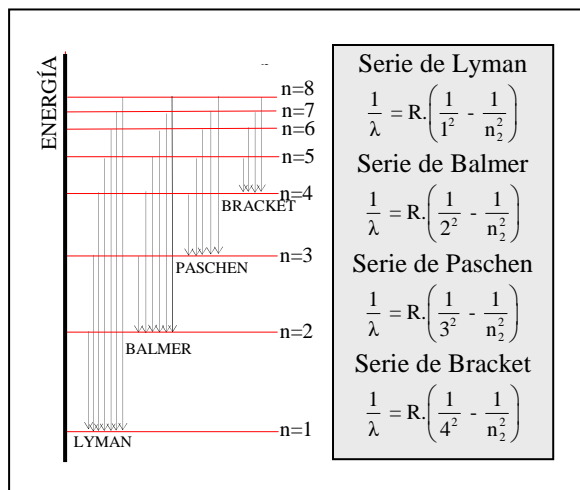
en donde  $a$  y  $A$  son constantes que dependen de la carga y masa del electrón

Como podemos comprobar, tanto la *energía del electrón, en cada una de las órbitas permitidas, como el radio de las mismas dependen del número cuántico principal ( $n$ )*.

ES5.- Para el átomo de hidrógeno, la energía del electrón en la primera órbita de Bohr es  $-13,6 \text{ eV}$ . Si lo excitamos a otros niveles ¿cuál será su energía en las dos siguientes órbitas? Sol:  $-3,4 \text{ eV}$  y  $-1,51 \text{ eV}$

En consecuencia, el  $e^-$  no puede ocupar cualquier órbita ni poseer cualquier valor de energía.

El valor negativo de la energía en las órbitas permitidas indica que ésta es menor que la energía del electrón libre ( $r = \infty$ ) a la que por convenio le asignamos el valor de cero. Un átomo está ionizado cuando el electrón alcanza la energía nula. La energía de ionización (la que se



debe suministrar a un átomo para que pierda su electrón) será igual, en valor absoluto, a la que tenía dicho electrón dentro del átomo.

El estado de menor energía se denomina estado fundamental ( $n = 1$  en el caso del electrón del hidrógeno), mientras que si el electrón ocupa una órbita diferente diremos que se encuentra en un estado excitado.

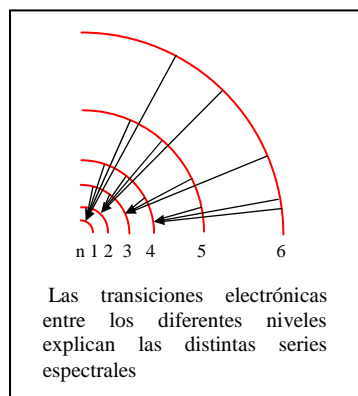
Cuando un átomo de hidrógeno absorbe energía suficiente su electrón pasa a un nivel energético superior; en ese estado el electrón no es estable y al regresar a un estado de menor energía emite energía en forma de radiación electromagnética:

La energía del fotón emitido será  $\Delta E = h \cdot \nu$ .

Si la transición ha tenido lugar entre los niveles  $n_2$  y  $n_1$  resultará que:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = -A \frac{1}{n_2^2} - \left( -A \frac{1}{n_1^2} \right) = A \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

igualando expresiones  $A \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \frac{A}{h \cdot c} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = \frac{1}{\lambda}$



Comparando esta expresión con la obtenida experimentalmente por Rydberg comprobamos que son prácticamente idénticas; la combinación de las constantes  $A/h \cdot c$  es coincidente con la  $R$  obtenida empíricamente.

Es decir, el modelo de Bohr permite la interpretación del espectro de emisión del hidrógeno. Este modelo sugiere que las líneas del espectro están asociadas a los cambios de energías del electrón cuando pasa de una órbita a otra.

Podemos observar que la energía que se libera en un tránsito  $n_2 \rightarrow n_1$  coincide con la que se requiere absorber para realizar el tránsito  $n_1 \rightarrow n_2$ . Esto explica el que los espectros de emisión y absorción sean complementarios.

ES6.- Utilizando la ecuación de Rydberg, halla la diferencia de energías entre la primera y segunda órbitas de Bohr y entre la segunda y tercera. Razona si en un átomo la diferencia de energía entre el nivel 5 y el 6 es igual a la existente entre los niveles segundo y tercero.  
 Sol:  $1,64 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ ;  $3,03 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

ES7.- Determina la energía de ionización del hidrógeno (J/mol) ( $R=1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ )

Sol:  $1,31 \cdot 10^6 \text{ J/mol}$

## Ampliación modelo de Bohr

A pesar de los éxitos en la interpretación de las series espectrales para el átomo de hidrógeno, este modelo presentaba notables deficiencias: no era capaz de interpretar satisfactoriamente átomos con más de un electrón, ni los desdoblamientos de las líneas espectrales que aparecieron cuando los espectroscopios tuvieron mayor poder de resolución. Se descubrió que lo que se creía una sola línea espectral era en realidad varias juntas.

La principal modificación que introdujo Sommerfeld fue la de suponer que las órbitas también podían ser elípticas y no sólo circulares como indicaba Bohr.

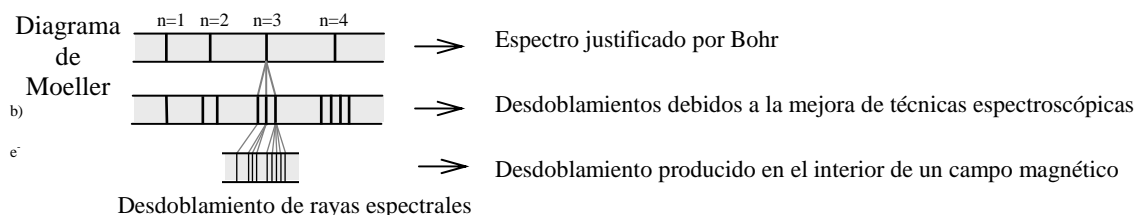
Allí donde éste último suponía un solo nivel energético (caracterizado por un único número cuántico  $n$ ) Sommerfeld proponía la existencia de varios subniveles energéticos que se corresponderían con órbitas ligeramente distintas que permitirían dar explicación a la aparición de las nuevas líneas del espectro. Para caracterizar estos subniveles se introdujo un nuevo número cuántico llamado secundario o azimutal,  $l$ , cuyo valor estaría en función del de  $n$  estando comprendido entre 0 y  $n-1$ .

Posteriormente Zeeman observó que las líneas espectrales sufrían un nuevo desdoblamiento al realizar los análisis bajo la acción de campos magnéticos. Este fenómeno desaparecerá al hacerlo el campo magnético exterior.

Este efecto, conocido como efecto Zeeman, indicaba que los electrones podrían tener varios estados energéticos de igual energía que variaban al verse afectados por campos eléctricos. Se

planteó la solución de admitir distintas orientaciones de órbitas que interaccionarían de diversa forma con dicho campo adquiriendo distintos valores de energía.

Hubo que introducir un nuevo número cuántico, el magnético,  $m$  ( $m_l$ ), que diese cuenta de las distintas orientaciones de un determinado nivel energético. Este tomará valores en función de  $l$ , que son los comprendidos entre  $-l$  y  $+l$ .



Más adelante y con la ayuda de campos magnéticos muy intensos y espectroscopios de alto poder de resolución se observó que cada línea del espectro se desdoblaban en dos. Este nuevo desdoblamiento, efecto Zeeman anómalo, se asoció a la existencia de dos posibles sentidos de rotación del electrón. Hizo falta añadir un cuarto número cuántico (spín),  $s$  ( $m_s$ ), que diese cuenta de esta situación. Sus valores son independientes de los otros tres y toma los de  $+1/2$  y  $-1/2$ .

Además del protón y el electrón, conocidos en la época de Bohr, se había predicho la existencia de otra partícula, de masa similar a la del protón pero carente de carga eléctrica. Dicha partícula, el neutrón, fue descubierta por J. Chadwick en 1932

*El estudio de los espectros atómicos, permite asociar la emisión de radiación de determinadas frecuencias con los cambios específicos de energía que pueden producirse dentro del átomo*

POSIBLES VALORES DE LOS NÚMEROS CUÁNTICOS			
Número cuántico	Valores posibles	Número cuántico	Valores posibles
Principal (n)	$n = 1, 2, 3, 4, \dots$	Magnético (m)	$m = -1, \dots, 0, \dots, +1$
Secundario (l)	$l = 0, 1, \dots, n-1$	Spín (s o $m_s$ )	$s = +1/2$ y $-1/2$

## MECÁNICA CUÁNTICA

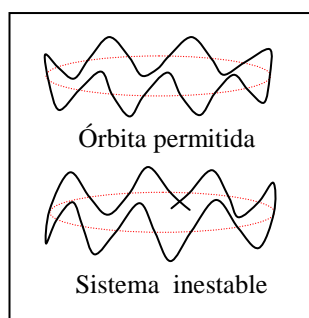
### Dualidad onda-partícula

La mayoría de los fenómenos relacionados con la luz pueden explicarse teniendo en cuenta su carácter ondulatorio. Sin embargo, para explicar el efecto fotoeléctrico es necesario considerar que la luz está formada por partículas denominadas fotones.

Aceptado el doble comportamiento ondulatorio-corpúscular de la luz, Louis de Broglie propuso hacerlo extensivo al resto de la materia; cualquier partícula en movimiento tendría propiedades que se asocian normalmente con las ondas (llevarían una onda asociada)

De Broglie, a partir de las ecuaciones utilizadas por Einstein para describir el comportamiento de los fotones, propuso la siguiente ecuación para calcular la longitud de onda asociada a cualquier partícula en movimiento:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v} \quad \text{en donde} \quad \begin{cases} h = \text{constante de Planck} \\ m = \text{masa de la partícula} \\ v = \text{velocidad de la partícula} \end{cases}$$



La naturaleza dual del electrón fue comprobada por Davison y Germer al conseguir difractor electrones, prueba inequívoca de su carácter ondulatorio. La longitud de onda medida era igual a la calculada según la ecuación de L. de Broglie.

Una órbita, en el modelo de Bohr, será posible cuando la longitud de la misma sea un múltiplo entero de la longitud de onda asociada al electrón (en caso contrario el sistema no sería estable):

$$2 \cdot \pi \cdot r = n \cdot \lambda \quad \rightarrow \quad 2 \cdot \pi \cdot r = n \cdot h / m \cdot v \quad \rightarrow \quad m \cdot v \cdot r = n \cdot h / 2 \cdot \pi$$

que es la expresión matemática del 2º postulado de Bohr.

**Ejercicio resuelto 4.-** Si entre el piloto y su F1 tienen una masa de 600 kg y alcanzan una velocidad de 306 km/h ¿cuál será su longitud de onda asociada?

La velocidad del F1 es 306 km/h = 85 m/s

Por tanto la longitud de onda asociada será  $\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}}{600 \text{ kg} \cdot 85 \text{ m/s}} = 1,3 \cdot 10^{-38} \text{ m}$

Las propiedades ondulatorias de la materia sólo son observables en partículas con una masa muy pequeña. Una partícula como una pelota de tenis de 50 g a 120 km/h tiene una longitud de onda asociada tan pequeña ( $3,98 \cdot 10^{-34} \text{ m}$ ) que es imposible detectarla; sus propiedades se describirán tratándolas mejor como partículas que como ondas.

ES8.- Calcula la frecuencia de la onda asociada a un electrón que posee una energía cinética de 3 eV. Datos:  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ;  $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$  Sol:  $4,23 \cdot 10^{17} \text{ Hz}$

ES9.- Calcula la longitud de onda asociada al electrón que es emitido por una lámina metálica de sodio cuando se ilumina con una radiación de 2,76 eV. Datos:  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ; frecuencia umbral del sodio =  $5 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ ;  $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$  Sol: 1,48 nm

## Principio de incertidumbre.

Si el electrón puede describirse como una onda ¿cómo podemos precisar su posición?

Una de las consecuencias de la naturaleza dual de las partículas fue el principio de incertidumbre de Heisenberg según el cual “es imposible conocer simultáneamente y con exactitud la posición y la cantidad de movimiento de una partícula”.

La expresión matemática de este principio es:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{h}{4\pi} \quad \text{donde} \quad \begin{cases} \Delta x \text{ es la incertidumbre o grado de error en la posición} \\ \Delta p \text{ es la incertidumbre o grado de error en la cantidad de movimiento} \end{cases}$$

Podemos aproximarnos a este principio si pensamos en el error que cometemos al medir la temperatura de un medio si introducimos un termómetro en él; si la masa del medio es pequeña el error cometido podrá ser apreciable. De forma similar para “observar” un electrón hemos de hacer incidir sobre él una luz que al ser absorbida por éste modificará su energía cinética y, por lo tanto, su velocidad. En el mundo subatómico, donde las partículas tienen muy poca masa, un conocimiento preciso de la posición implica una mayor inexactitud en la determinación de la velocidad.

En el modelo de Bohr ampliado, el átomo de hidrógeno entra en contradicción con el principio de incertidumbre, ya que en él se determinaba simultáneamente la posición y la velocidad del electrón. Aparece así el concepto de orbital en sustitución del de órbita y por tanto un nuevo atómico alternativo.

## Ecuación de onda de Schrödinger

En el nuevo modelo atómico, que se encuentra basado en la mecánica cuántica, el comportamiento ondulatorio del electrón dentro del átomo queda descrito por las llamadas funciones de onda ( $\psi$ ). Éstas se obtienen, mediante el uso de un aparato matemático complejo, como soluciones de la ecuación de onda.

La ecuación de onda incorpora las condiciones que debe cumplir el electrón para que el átomo sea un sistema estable.

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

donde  $\begin{cases} \Psi \text{ es la función de onda del electrón} \\ E \text{ es la energía del electrón} \\ V \text{ es la energía potencial del electrón} \end{cases}$

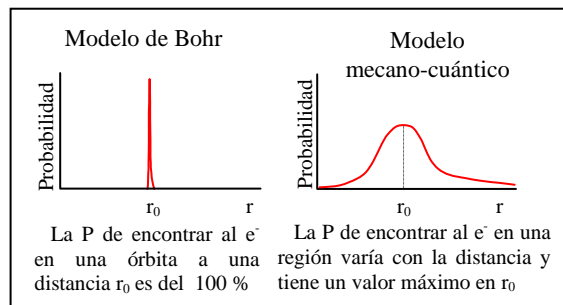
E. Schrödinger (1887-1961) propuso una ecuación de onda para describir las propiedades ondulatorias del electrón en átomo de hidrógeno en la que intervenía la masa, la energía y la función de onda de dicha partícula.

La solución de esta ecuación de onda nos informa sobre la energía y la función de onda asociada al electrón. Estas soluciones vienen determinadas por el valor de unos parámetros denominados números cuánticos, representados por  $n$ ,  $m$  y  $l$ . Son números enteros que aparecen

como consecuencia de la resolución matemática de la ecuación de onda y que anteriormente se habían introducido para explicar los desdoblamientos observados en las líneas espectrales.

Las funciones de onda ( $\psi$ ) no tienen significado físico, sin embargo su cuadrado ( $\psi^2$ ), representa la probabilidad de encontrar un electrón en una determinada región del espacio.

Cada grupo de tres valores permitidos de  $n$ ,  $m$  y  $l$  definen un orbital o zona en la que hay máxima probabilidad de encontrar un electrón y al que le corresponde un determinado nivel de energía dentro del átomo.



A diferencia del concepto de órbita como lugar donde se puede encontrar el electrón, la mecánica cuántica habla de orbital como una región del espacio con una determinada probabilidad de encontrarlo sin que sea posible concretarlo. Teniendo presente los principios estudiados debemos rechazar un modelo atómico con órbitas totalmente definidas e introducir el concepto de probabilidad de encontrar un electrón en un punto determinado (orbitales)

Una forma de imaginar el orbital es considerarlo como una nube de carga alrededor del núcleo. Las zonas con alta densidad de puntos (alta *densidad electrónica*) se asocian a zonas donde hay gran probabilidad de encontrar el electrón.

### Significado de los números cuánticos

Los números cuánticos que surgen como resultado de la resolución de la función de onda asociada al electrón son los mismos que fueron introducidos anteriormente cuando se trató de explicar los desdoblamientos de las líneas espectrales que aparecían cuando los espectroscopios tuvieron mayor poder de resolución (ampliación del modelo de Bohr)

Como se ha comentado, cada orbital se encuentra asociado al valor de los tres números cuánticos  $n$ ,  $m$  y  $l$ . Éstos son números enteros, relacionados entre sí, que proporcionan información sobre la energía del electrón en un orbital y las zonas del espacio de máxima probabilidad de encontrarlo.

• **Número cuántico principal ( $n$ ).** Toma valores enteros y positivos 1, 2, 3, 4,.... Se encuentra relacionado con la energía del orbital y su tamaño. Al aumentar  $n$  lo hace la energía del orbital y distancia a la que existe máxima probabilidad de encontrar el electrón. El conjunto de orbitales que tiene un mismo valor de  $n$  se les denomina **capa** o **nivel**.

• **Número cuántico secundario ( $l$ ).** Está asociado con la forma del orbital. Su valor se encuentra relacionado con el de  $n$  y toma valores enteros desde 0 hasta  $n-1$ . Cuando toma los valores 0, 1, 2 y 3 se habla de orbital  $s$  (nítido), orbital  $p$  (principal), orbital  $d$  (diffuse) y orbital  $f$  (fundamental). Los orbitales que tienen un mismo valor de  $n$  y  $l$  constituyen una misma **subcapa** o **subnivel**. (En cada nivel hay tantos subniveles como indica el valor de  $n$ )

• **Número cuántico magnético ( $m$ ).** Está relacionado con las distintas orientaciones espaciales del orbital. Puede tomar valores enteros comprendidos entre  $-l$  y  $+l$  incluido el 0. En cada subnivel hay  $2l+1$  orientaciones distintas.

Capa (n)	Subcapa (l)	(m)	Orbital Tipo	nº	Electrón		
1	0	0	1s	1	2	2	
2	0	0	2s	1	2	8	
	1	-1, 0, +1	2p	3	6		
3	0	0	3s	1	2	18	
	1	-1, 0, +1	3p	3	6		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5	10		
4	0	0	4s	1	2	32	
	1	-1, 0, +1	4p	3	6		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5	10		
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7	14		

Al aumentar el poder de resolución de los espectroscopios se observó un desdoblamiento de las líneas espectrales. Para explicar este fenómeno se postuló un cuarto número cuántico llamado de spín ( $s$  o  $m_s$ ) que nos informa del sentido de giro del electrón en torno a su eje. Puede tomar dos valores  $+1/2$  y  $-1/2$ . Los electrones que tienen igual spín se dice que tienen spines paralelos y los que lo tienen distinto opuestos o antiparalelos.

Por lo tanto para definir un orbital serán necesarios tres números cuánticos ( $n$ ,  $l$  y  $m$ ) mientras que el electrón en un átomo vendrá caracterizado por cuatro ( $n$ ,  $l$ ,  $m$  y  $s$ )

Ejercicio resuelto 5.- Indica cuáles de las siguientes combinaciones de números cuánticos **NO** son posibles para determinar el estado de un electrón en el átomo a)  $(1,1,0,+1/2)$ ; b)  $(2,1,1,-1/2)$ , c)  $(3,2,-2,1/2)$ , d)  $(1,2,1,-1/2)$  y f)  $(3,2,3,-1/2)$

- a) Incorrecta. El valor de  $l$  (1) no puede ser igual al de  $n$  (1)
- b) Correcta. Corresponde a un electrón de un orbital 2p
- c) Correcta. Electrón en orbital 3d
- d) Incorrecta. El valor de  $n$  (1) debe ser mayor que el de  $l$  (2)
- e) Incorrecta. El valor de  $m$  (3) no puede ser mayor que el de  $l$  (2)

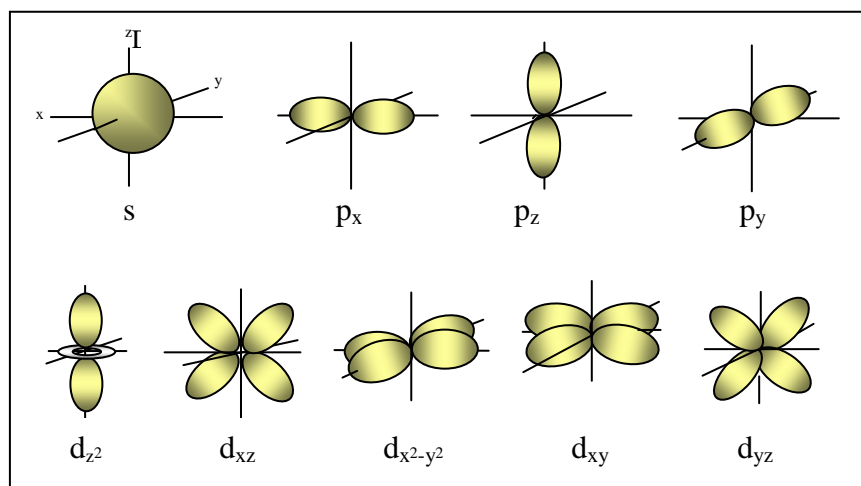
ES10.- Indica el significado de las siguientes asociaciones de números cuánticos. a)  $(3,1)$ , b)  $(2,1,-1)$ , c)  $(3,0,1)$  y d)  $(5,0,0,1/2)$

ES11.- Teniendo en cuenta los valores de los números cuánticos ¿por qué en la tercera capa existen cinco orbitales tipo d y ninguno tipo f?

ES12.- Escribe los números cuánticos correspondientes a: a) un orbital 2p, b) un orbital 6d, c) un electrón en un orbital 2s y d) un electrón en un orbital 3f

### Forma de los orbitales

Para conocerla es necesario determinar la región del espacio en la que se puede encontrar el electrón. Debemos conocer la distribución espacial de la densidad electrónica (nube electrónica).



Aunque ésta se extiende hasta el infinito una buena forma de representar un orbital será dibujar una superficie que encierre una zona del espacio en la que haya un 90 % de probabilidad de encontrar al electrón. (Una forma de “ver” los orbitales sería “fotografiar” millones de veces un electrón y superponer todas las “instantáneas”)

Los orbitales s ( $l = 0$ ) tienen forma esférica y su tamaño aumenta al hacerlo el valor de  $n$ . Para cada valor de  $n$  existe un solo orbital s.

Los orbitales p ( $l = 1$ ) están formados por dos lóbulos colocados a lo largo de un eje. Hay tres orbitales p (para valores de  $m$  de  $-1$ ,  $0$  y  $+1$ ) de igual forma y orientados a lo largo de los tres ejes  $x$ ,  $y$  y  $z$ . Se representan por  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$ .

Los orbitales d ( $l = 2$ ) tienen aspecto multilobular aunque con una distribución más compleja que la de los orbitales p. Hay cinco de ellos que corresponden a valores  $-2$ ,  $-1$ ,  $0$ ,  $+1$  y  $+2$  de  $m$ .

### Energía de los orbitales

En el átomo de hidrógeno la energía del electrón sólo depende de la distancia que lo separa del núcleo, por lo que ésta aumenta al hacerlo el número cuántico principal  $n$ .

Sin embargo en átomos polielectrónicos, los distintos electrones están sometidos además de a la atracción del núcleo a las repulsiones de los demás. En estos átomos, los electrones de valencia no experimentan el efecto de toda la carga nuclear ( $Z$ ) sino que se encuentran atraídos por una carga nuclear menor debido a existencia de electrones en niveles internos (**carga nuclear efectiva ( $Z^*$ )**)

En los átomos polielectrónicos las energías de los distintos orbitales no sólo depende de  $n$  sino también de  $l$ , si bien la importancia del primer número cuántico es superior a la del segundo. La energía de los orbitales aumenta cuando lo hace el valor  $n + l$ ; cuando la suma es la misma para dos orbitales diferentes el de mayor  $n$  tendrá más energía.

Como consecuencia, los orbitales de un mismo subnivel (igual valor de  $n$  y  $l$ ) tienen la misma energía y se les denomina **orbitales degenerados**.

El orden de energía que resulta, para átomos polielectrónicos, es  $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s$

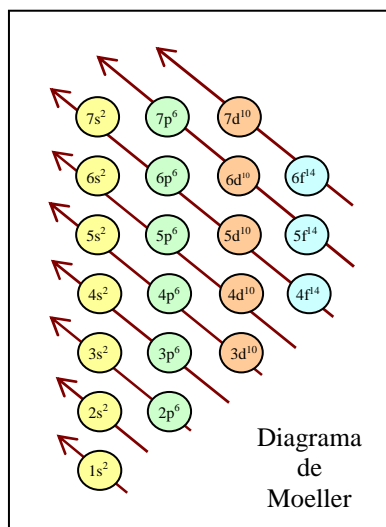
$$< 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6d \dots$$

### Configuración electrónica: reglas de construcción.

La distribución de los electrones los distintos orbitales de un átomo se denomina **configuración electrónica**. La configuración más estable en un átomo es aquella en la que los electrones ocupan los niveles energéticos más bajos posibles (**estado fundamental**). Para el hidrógeno este estado viene especificado por  $n = 1$ ;  $l = 0$ ;  $m_l = 0$  y  $s = +1/2$  o  $-1/2$ ; si el electrón es excitado podrá pasar al segundo nivel ( $n = 2$ ), al tercero ( $n = 3$ ), ...

La configuración electrónica se realiza siguiendo los criterios indicados en los siguientes principios:

- **Principio de exclusión de Pauli.** Establece que en un átomo no pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales. Según este principio en un orbital (caracterizado por  $n$ ,  $l$  y  $m$ ) solamente pueden encontrarse dos electrones con espines antiparalelos. Con ello se puede comprobar que el número máximo de electrones que podemos encontrarnos en un nivel viene dado por la expresión  $2n^2$ , siendo  $n$  el número cuántico del nivel.
- **Principio de Aufbau o de mínima energía.** Los electrones ocuparán los orbitales en orden creciente de energía, comenzando por los menos energéticos (menor valor de  $n + l$ ) que son los más cercanos al núcleo.
- **Principio de máxima multiplicidad o de Hund.** Cuando existen varios orbitales con los mismos valores de  $n$  y  $l$  (orbitales degenerados), éstos se semioocuparán primero y el emparejamiento de electrones no comenzará hasta que todos estén semioocupados. Se denominan electrones **desapareados** aquellos que están solos en un orbital. Si en un orbital tiene sus dos electrones decimos que están apareados y por lo tanto tendrán sus espines antiparalelos (u opuestos)



La configuración electrónica de un elemento se expresa indicando el nombre de los orbitales añadiendo un superíndice indicativo de los electrones que contiene cada uno.

$$n l^x$$

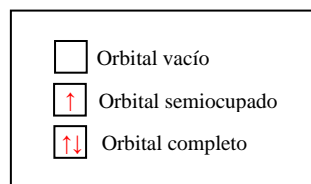
Su forma general abreviada sería  $n l^x$  donde  $n$  es el número cuántico principal (número de la capa o nivel),  $l$  el tipo de orbital s, p, d, ... y  $x$  el número de electrones que hay en ese orbital.

Con el fin de determinar del orden de llenado de orbitales en los átomos polieletrónicos se ha propuesto una regla nemotécnica fácil de utilizar que se denomina diagrama de Moeller.

Otra forma de indicar la notación electrónica es representar el electrón mediante una flecha dentro de un cuadrado que simboliza el orbital (*diagrama de orbital*)

Se simbolizarán mediante cuadrados unidos aquellos orbitales que posean los mismos valores de  $n$  y  $l$

Así, las estructuras electrónicas de los primeros elementos serán:



S	Z	C.E.	D.O.	S	Z	C.E.	D.O.
H	1	1s <sup>1</sup>	↑	B	5	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	↑↓ ↑↓ ↑
He	2	1s <sup>2</sup>	↑↓	C	6	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	↑↓ ↑↓ ↑ ↑
Li	3	1s <sup>2</sup> 2s <sup>1</sup>	↑↓ ↑	N	7	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑
Be	4	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	↑↓ ↑↓	O	8	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑

S = Símbolo; Z = Número Atómico; C.E. = Configuración Electrónica; D.O. = Diagrama de Orbital

En el caso del carbono, nitrógeno y oxígeno se ha tenido en cuenta el principio de máxima multiplicidad (Hund)

Como se ve, la configuración electrónica de un elemento es igual a la del elemento anterior salvo en el último electrón añadido que se denomina **electrón diferenciador**.

El nivel más externo de un átomo ocupado por electrones se denomina **capa de valencia**.

Es frecuente escribir la configuración electrónica de un elemento de forma abreviada indicando la del gas noble anterior. Por ejemplo, la configuración electrónica del magnesio:

$\text{Mg}(Z=12) : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$  o  $[\text{Ne}] 3s^2$  siendo  $[\text{Ne}]$  la configuración electrónica del Neón

ES13.- Escribe las configuraciones electrónicas, en su estado fundamental, del rubidio y del manganeso. Indica los números cuánticos de sus electrones diferenciadores y el número de electrones desapareados. Sol: Rb (5,0,0,1/2), Mn (3,2,2,1/2)

ES14.- Indica, mediante diagrama de orbital, la configuración electrónica de la capa de valencia del bromo.

ES15.- Las configuraciones electrónicas de los átomos neutros A y B son  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$  y  $1s^2 2s^2 2p^6 6p^1$  respectivamente. Razona la veracidad de las siguientes afirmaciones: a) A y B representan dos elementos diferentes, b) es necesario aportar energía para pasar de A a B y c) se requiere menos energía para arrancar un electrón de B que de A

*Ejercicio resuelto 6.- Indica si las siguientes configuraciones electrónicas corresponden a estados fundamentales, excitados o prohibidos: a)  $1s^2 2p^1$ , b)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ , c)  $1s^1 2s^1$ , d)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 2d^1$*

- a) Excitado: la configuración electrónica correspondiente al estado fundamental sería  $1s^2 2s^1$
- b) Fundamental
- c) Excitado: la configuración electrónica correspondiente al estado fundamental sería  $1s^2$
- d) Prohibido: el nivel 2 no posee orbitales tipo d

En algunos casos, aparecen alteraciones a las reglas anteriormente comentadas. Esto ocurre, por ejemplo, en los casos del cromo y del cobre:

Elemento	Configuración esperada	Configuración encontrada
Cr ( Z= 24)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$
Cu ( Z= 29)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

Esta circunstancia se explica debido a la pequeña diferencia de energía que existe entre los orbitales 3d y 4s, que queda compensada por la estabilidad adicional que la semioocupación u ocupación completa de los orbitales 3d confiere a los respectivos átomos.



- Configuración electrónica de un ion monoatómico.

Si se trata de un anión se añaden a los orbitales vacíos menos energéticos disponibles tantos electrones como carga negativa tenga el ion; si se trata de un catión se eliminarán tantos electrones como carga positiva tenga comenzando por los orbitales más energéticos.

ES16.- Escribe las configuraciones electrónicas de los iones:  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{O}^{2-}$  y  $\text{Fe}^{3+}$  ¿cuántos electrones desapareados tiene cada uno?

## DISTRIBUCIÓN ELECTRÓNICA REAL DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS

1	H	1s	39	Y	[Kr] 4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>	77	Ir	[Xe] 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>
2	He	1 s <sup>2</sup>	40	Zr	[Kr] 4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	78	Pt	[Xe] 5d <sup>9</sup> 6s <sup>1</sup>
3	Li	[He]2s <sup>2</sup>	41	Nb	[Kr] 4d <sup>4</sup> 5s <sup>1</sup>	79	Au	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>
4	Be	[He] 2s <sup>2</sup>	42	Mo	[Kr] 4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>	80	Hg	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>
5	B	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	43	Tc	[Kr] 4d <sup>6</sup> 5s <sup>1</sup>	81	Tl	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>
6	c	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	44	Ru	[Kr] 4d <sup>7</sup> 5s <sup>1</sup>	82	Pb	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>
7	N	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	45	Rh	[Kr] 4d <sup>8</sup> 5s <sup>1</sup>	83	Bi	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>
8	0	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	46	Pd	[Kr] 4d <sup>10</sup>	84	Po	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>
9	F	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	47	Ag	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>	85	At	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>
10	Ne	[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> = [Ne])	48	Cd	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	86	Rn	[Xe] 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup> = [Rn]
11	Na	[Ne] 3s <sup>1</sup>	49	In	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	87	Fr	[Rn] 7s <sup>1</sup>
12	Mg	[Ne] 3s <sup>2</sup>	50	Sn	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	88	Ra	[Rn] 7s <sup>2</sup>
13	Al	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	51	Sb	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	89	Ac	[Rn] 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>
14	Si	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	52	Te	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	90	Th	[Rn] 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>
15	P	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	53	I	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	91	Pa	[Rn] 5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>
16	S	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	54	Xe	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup> = [Xe]	92	U	[Rn] 5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>
17	Cl	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	55	Cs	[Xe] 6s <sup>1</sup>	93	Np	[Rn] 5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>
18	Ar	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> = [Ar])	56	Ba	[Xe] 6s <sup>2</sup>	94	Pu	[Rn] 5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>
19	K	[Ar] 4s <sup>1</sup>	57	La	[Xe] 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	95	Am	[Rn] 5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>
20	Ca	[Ar] 4s <sup>2</sup>	58	Ce	[Xe] 4f <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	96	Cm	[Rn] 5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>
21	Sc	[Ar] 3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	59	Pr	[Xe] 4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	97	Bk	[Rn] 5f <sup>8</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>
22	Ti	[Ar] 3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	60	Nd	[Xe] 4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	98	Cf	[Rn] 5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>
23	V	[Ar] 3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	61	pff]	[Xe] 4f <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	99	Es	[Rn] 5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup>
24	Cr	[Ar] 3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>	62	Sm	[Xe] 4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	100	Fm	[Rn] 5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup>
25	Mn	[Ar] 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	63	Eu	[Xe] 4f <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	101	Md	[Rn] 5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup>
26	Fe	[Ar] 3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	64	Gd	[Xe] 4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	102	No	[Rn] 5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup>
27	Co	[Ar] 3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	65	Tb	[Xe] 4f <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>	103	Lr	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>
28	Ni	[Ar] 3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	66	Dy	[Xe] 4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	104	Rf	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>
29	Cu	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	67	Ho	[Xe] 4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>	105	Db	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>3</sup> 7s <sup>2</sup>
30	Zn	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	68	Er	[Xe] 4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup>	106	Sg	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>4</sup> 7s <sup>2</sup>
31	Ga	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	69	Tm	[Xe] 4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup>	107	Bh	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>5</sup> 7s <sup>2</sup>
32	Ge	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	70	Yb	[Xe] 4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup>	108	Hs	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>
33	As	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	71	Lu	[Xe] 4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	109	Mt	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>
34	Se	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	72	Hf	[Xe] 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	110	Ds	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>8</sup> 7s <sup>2</sup>
35	Br	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	73	Ta	[Xe] 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	111	Uuu	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>
36	Kr	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup> = [Kr]	74	W	[Xe] 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	112	Uub	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>
37	Rb	[Kr] 5s <sup>1</sup>	75	Re	[Xe] 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	113	Uut	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>1</sup>
38	Sr	[Kr] 5s <sup>2</sup>	76	Os	[Xe] 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	114	Uuq	[Rn] 5f <sup>14</sup> 6d <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 7p <sup>2</sup>

# SISTEMA PERIÓDICO

## Introducción histórica

Hasta 1700 sólo se conocían alrededor de 12 elementos. A partir de esta fecha la lista aumentó rápidamente y durante el siglo XIX, conforme avanzaba el conocimiento de las propiedades físicas y químicas, surgió la necesidad de agruparlos y clasificarlos.

Un primer intento se debe a **Lavoisier** quien observó que muchos elementos presentaban propiedades semejantes. Estableció dos grandes grupos: metales (presentaban brillo, conducían la corriente, eran dúctiles y maleables...) y no metales (no eran conductores, formaban óxidos básicos...)

En 1929 **Döbereiner** observó que existían grupos de tres elementos (tríadas) con propiedades similares y en los que la masa atómica de uno de ellos coincidía con la media aritmética de las de los otros dos. (Ej. Ca, Sr, Ba; S, Se, Te; Cl, Br, I...)

Entre 1860 y 1865 se propusieron nuevas clasificaciones. Chancourtois ordenó los elementos según su masa atómica creciente y los dispuso en una especie de soporte cilíndrico (caracol telúrico) en donde los elementos con similares propiedades aparecían en columnas verticales. También utilizando el criterio de las masa atómicas crecientes **Newlands** formó grupos de siete elementos cada uno, de tal manera que cada ocho elementos aparecían propiedades similares; de denominó ley de las octavas por su similitud con las octavas musicales.

OCTAVAS DE NEWLANDS						
1	2	3	4	5	6	7
Li	Be	B	C	N	O	F
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
DO	RE	MI	FA	SOL	LA	SI

Estas clasificaciones fueron la base para que Mendeleiev y Mayer, de forma independiente, y cada uno basándose en propiedades diferentes, propusieran una tabla en la que los elementos se colocaban en orden creciente de su masa atómica. Mendeleiev, en cada columna de la tabla, coloca elementos con propiedades químicas similares no dudando en cambiar el orden de algún elemento (Ar-K, Te-I, Co-Ni) e incluso dejar huecos para elementos desconocidos de los que predijo alguna de sus propiedades y a los que denominó eka-boro (más tarde descubierto y denominado escandio), eka-aluminio (galio) y eka-silicio (germanio).

A pesar del avance que supuso en la clasificación de los elementos la tabla de Mendeleiev se encontró incapaz de hacer frente a los descubrimientos de los gases nobles, a la colocación de lantánidos y actínidos y al hecho de tener que intercambiar parejas de elementos para que sus propiedades fuesen similares.

## Sistema Periódico actual

Fue Moseley quien, estudiando las frecuencias de los rayos X producidos al bombardear los diferentes elementos con electrones, descubrió que éstas variaban de forma regular y eran función del número atómico (Z). A la vista de la importancia de este número en la estructura interna del átomo se pensó que era éste y no la masa atómica la responsable de las propiedades químicas de los elementos.

Utilizando como criterio el orden creciente del número atómico se solventaron las dificultades encontradas en la clasificación de Mendeleiev.

El actual sistema de clasificación organiza los elementos en función de su número atómico creciente y su construcción está relacionada con las configuraciones electrónicas de los mismos.

Consta de 18 columnas o **grupos**, numerados del 1 al 18, en donde encontramos elementos con propiedades similares. Algunos de ellos reciben nombres específicos:

Grupo 1: Alcalinos	Grupo 15: Nitrogenoideos
Grupo 2 : Alcalinotérreos	Grupo 16: Anfígenos o calcógenos
Grupo 13 : Térreos o boroideos	Grupo 17: Halógenos
Grupo 14 : Carbonoideos	Grupo 18: Gases nobles

Tiene 7 filas horizontales o **periodos**, numerados del 1 al 7, en donde los elementos varían sus propiedades de forma progresiva.

Los **metales** se encuentran a la izquierda y en el centro y los **no metales** a la derecha (salvo el hidrógeno que se coloca a la izquierda debido a su configuración electrónica)

Además, existen dos filas que, por comodidad, se colocan fuera de la tabla: son los **metales de transición interna** que están formados por los lantánidos y actínidos.

Como las propiedades químicas, y muchas de las físicas, dependen de los electrones del último nivel, la colocación de los elementos en el sistema periódico estará relacionada con sus configuraciones electrónicas.

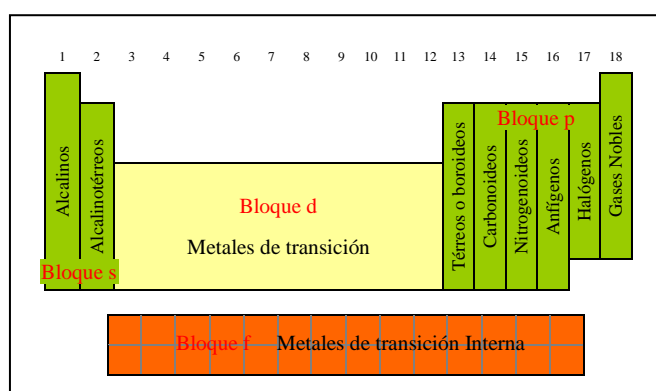
Atendiendo a éstos los elementos los podemos agrupar en los siguientes bloques:

- **Bloque s.** Formado por los elementos de los grupos 1 y 2. En ellos se completa el orbital s de la capa de valencia. Configuración  $ns^1$  y  $ns^2$  (n indica el número del periodo en el que se encuentra el elemento)

- **Bloque p.** Grupos del 13 al 18. Los electrones de la capa de valencia ocupan los orbitales p. Configuración de  $ns^2np^1$  a  $ns^2np^6$

Los elementos de estos dos bloques se denominan **elementos representativos**

- **Bloque d.** Elementos pertenecientes a los grupos del 3 al 12 (ambos inclusive). Su configuración va desde  $(n-1)d^1ns^2$  hasta  $(n-1)d^{10}ns^2$ . Se les denomina **elementos de transición**.

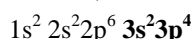


- **Bloque f.** Se les denomina **elementos de transición interna**. Está formado por dos series de 14 elementos cada una: los lantánidos y los actínidos. Su configuración electrónica va de  $(n-2)f^1(n-1)d^1ns^2$  hasta  $(n-2)f^{14}(n-1)d^1ns^2$

- El hidrógeno, que por su configuración electrónica se coloca en el grupo 1, tiene un comportamiento diferente al de los metales de su grupo. Éste se asemeja más al de los no metales (existe como molécula diatómica, forma hidruros metálicos...)

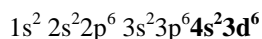
*Ejercicio resuelto 7.- Escribe la configuración electrónica, en su estado fundamental, de los elementos cuyo número atómico es 16 y 26. Deduce, a partir de ella, la posición de los citados elementos en la tabla periódica. ¿A qué elementos nos estamos refiriendo?*

a) Configuración electrónica, utilizando el diagrama de Moeller, del elemento con  $Z = 16$



Analizando la capa de valencia deducimos que se trata de un elemento del bloque p que se encuentra situado en el periodo 3 grupo 16. Se trata del azufre, S.

b) De manera similar procederemos con el elemento cuyo  $Z = 26$



La estructura de la capa de valencia establece que es un elemento del bloque d (metal de transición) puesto que el último electrón "colocado" se encuentra en el subnivel 3d. Está situado en el periodo 4, grupo 8 y se trata del hierro, Fe.

ES17.- Escribir el símbolo y la configuración en su estado fundamental del: a) cuarto metal alcalinotérreo, b) halógeno situado en el segundo nivel, c) el tercer gas noble y d) el potasio.

ES18.- Indica la configuración electrónica y a partir de ella la posición en el Sistema Periódico de los elementos cuyos números atómicos son 20 y 29. Identifícalos.

Sol: Ca y Cu

ES19.- Indica la configuración electrónica en su estado fundamental, el número atómico y el símbolo de los elementos situados en: a) grupo 2, periodo 3, b) grupo 14, periodo 4 y c) grupo 12, periodo 4

Sol: Mg, Ge y Zn

## Propiedades periódicas

Cuándo se puso de manifiesto que los cambios en determinadas propiedades de los elementos corresponden a una variación periódica de la estructura electrónica de los átomos de los mismos, se hizo evidente que las propiedades periódicas de los elementos son consecuencia de sus estructuras electrónicas, en concreto de su parte más externa.

El tamaño, la afinidad electrónica, el potencial de ionización..., que tienen extraordinaria importancia en los tipos de enlace y por lo tanto en el comportamiento químico de los elementos, dependen de los electrones de la última capa (*capa de valencia*) y de su distancia al núcleo. Para determinar esta última característica resulta decisivo el conocer la carga nuclear efectiva ( $Z^*$ )

Las propiedades mencionadas, que dependen de la configuración electrónica de los átomos, la cual se encuentra relacionada con la posición de los mismos en la tabla periódica, y que varían regularmente a lo largo de la misma, se denominan **propiedades periódicas**.

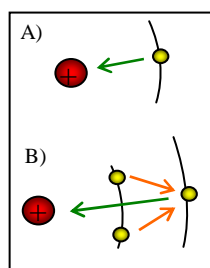
Entre éstas vamos a estudiar:

- el tamaño de los átomos e iones
- la energía (o potencial) de ionización,
- la afinidad electrónica,
- la electronegatividad y
- el carácter metálico de los elementos.

Como se ha comentado anteriormente un factor determinante a la hora de conocer cómo varían las propiedades periódicas es el concepto de carga nuclear efectiva.

La **carga nuclear efectiva** ( $Z^*$ ) de un átomo respecto a un electrón, es la carga que debería poseer el núcleo de dicho átomo para que, en ausencia de los demás electrones, la atracción sobre el electrón considerado fuese la misma que la que éste experimenta en el átomo real.

El núcleo de un átomo ejerce una fuerza de atracción sobre cada uno de los electrones. Esta atracción no será igual para los electrones externos que para los internos. La fuerza de atracción, con la que un electrón externo es atraído por parte del núcleo, se verá debilitada (apantallada) por la repulsión que sobre él ejercen los demás electrones.



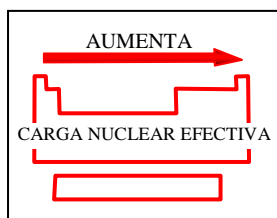
← Atracción  
→ Repulsión

El electrón situado cerca del núcleo desprovisto de electrones a su alrededor (fig. A) experimentará la atracción de toda la carga del núcleo. Si el átomo es multielectrónico (fig. B), el electrón sufrirá la repulsión de los electrones internos, por lo que la atracción neta será menor.

No todos los electrones ejercen la misma intensidad de apantallamiento: los electrones internos producen un apantallamiento mayor que los situados en el mismo nivel del electrón considerado. Los situados en niveles superiores no ejercen apantallamiento.

Podemos calcular la carga nuclear efectiva mediante la expresión:

$$Z^* = Z - a \quad \text{donde} \quad \begin{cases} Z \text{ es el número atómico} \\ a \text{ es el apantallamiento} \end{cases}$$



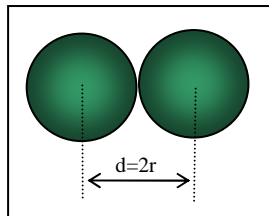
La carga nuclear efectiva sobre los electrones de valencia aumenta en un **periodo** al hacerlo el número atómico; al aumentar el número de protones y no hacerlo el de electrones interiores ni en número de capas del átomo los electrones de valencia se sentirán, a lo largo de un periodo, atraídos con mayor intensidad.

En un **grupo**,  $Z^*$  permanece casi invariable; el aumento en el número de protones del núcleo queda compensado por la mayor distancia entre éste y los electrones de valencia y el aumento del efecto apantallamiento ejercido por el creciente número de electrones internos.

### Radio atómico.

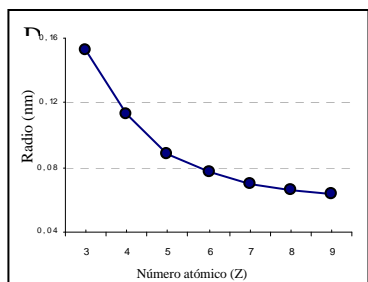
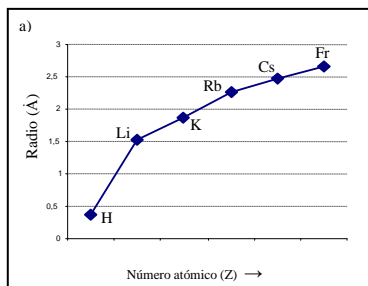
El radio atómico es la distancia que separa el núcleo del átomo de un elemento de su electrón más exterior.

El tamaño de los átomos es difícil de determinar ya que la nube electrónica (modelo mecano-

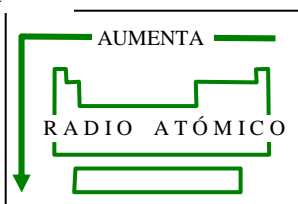


cuántico) que rodea al núcleo no tiene unos límites definidos. Una buena aproximación es considerar a los átomos e iones como esferas de determinadas dimensiones.

Mediante difracción de rayos X se ha podido medir las distancias entre los núcleos de dos átomos contiguos. De esta forma asignamos, como valor de radio atómico, la mitad de la distancia entre dos núcleos idénticos ( $d = 2 \cdot r$ ) bien en una molécula diatómica (radio covalente) bien en una red metálica (radio metálico).



VARIACIÓN RADIO ATÓMICO  
a) Elementos grupo 1 b) Elementos periodo 2



Al aumentar el número atómico el **radio atómico**:

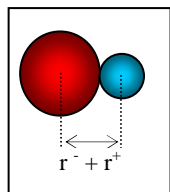
	En un grupo		En un periodo	
	Variación	Radio	Variación	Radio
$Z^*$	No varía	Igual	Aumenta	Menor
Niveles	Aumentan	Mayor	No varían	Igual
Global		<b>Mayor</b>		<b>Menor</b>

ES20.- Escribe las configuraciones electrónicas del sodio, silicio, neón y carbono. ¿Cuántos electrones desapareados presenta cada uno de ellos? Ordénalos de menor a mayor atómico, justificando tu respuesta.

Sol:  $r_{\text{Ne}} < r_{\text{C}} < r_{\text{Si}} < r_{\text{Na}}$

### Radio iónico.

Cuando los átomos ganan o pierden electrones se convierten en aniones (iones negativos) o en cationes (iones positivos) cuyos tamaños son diferentes del átomo del que proceden. El tamaño del correspondiente ion depende de los mismo factores de los que lo hacía el radio atómico: de  $Z^*$ , carga nuclear efectiva del ion, y de  $n$ , número de niveles del mismo.



Para conocer el radio de un ion se mide la distancia entre los núcleos de dos iones vecinos de un sólido iónico; ésta será la suma del radio del anión y la del catión. Conocido uno de ellos podrá calcularse, por diferencia, el del otro.

- Los iones positivos (**cationes**) tendrán un *radio menor* que el del átomo de procedencia. Al perder electrones las repulsiones entre los restantes (apantallamiento) disminuirán produciéndose una reducción de la nube electrónica y en consecuencia del tamaño del ion. La contracción de la nube será más acusada cuanto mayor sea la carga positiva del catión. En algunos casos esta disminución se deberá a que el átomo neutro ha perdido los electrones de la capa de valencia, por lo que los más externos serán los de la capa anterior.

- La formación de un ion negativo (**aniones**), que se produce con la incorporación de nuevos electrones, lleva consigo un *aumento en el tamaño* de la nube electrónica debido a que, aun permaneciendo constante la carga nuclear, aumenta la repulsión entre los electrones de la capa de valencia. Este aumento en el tamaño del anión será mayor cuanto mayor sea su carga negativa.

La variación en el tamaño de los radios iónicos en un grupo es similar a la observada en los radios atómicos (aumenta al hacerlo  $Z$ ). En un periodo esta variación es más difícil de estudiar.

Radios (nm)			
Atómico		Iónico	
Li	0,15	$\text{Li}^+$	0,06
Be	0,11	$\text{Be}^{2+}$	0,03
Al	0,14	$\text{Al}^{3+}$	0,05
F	0,06	$\text{F}^-$	0,14
O	0,065	$\text{O}^{2-}$	0,14
N	0,07	$\text{N}^{3-}$	0,17

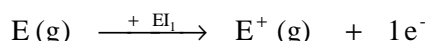
ES21.- Clasifica por orden creciente de tamaño las siguientes especies isoelectónicas:  $F^-$ ,  $Ne$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Na^+$  y  $O^{2-}$ . Justifica tu respuesta. De las especies iónicas anteriores ¿cuáles serán mayores y cuáles menores con respecto a sus correspondientes átomos neutros?

ES22.- Identifica los elementos A, B y C cuyos Z son, respectivamente, 16, 17 y 21. Escribe las configuraciones electrónicas de los iones que deben formar para que éstos sean isoelectónicos con el gas noble intermedio. Clasifica las especies iónicas anteriores según su tamaño creciente.

## Energía de ionización

Al comunicar energía a un átomo sus electrones de valencia pueden pasar de su estado fundamental a otros niveles de mayor energía (estado excitado). Si la energía suministrada es la suficiente, estos electrones pueden “escapar” del átomo formándose un ion positivo. Este proceso se denomina **ionización**.

Se define **primera energía de ionización ( $EI_1$ )** como la mínima energía que hay que suministrar a un átomo *neutro*, en estado *gaseoso* y en su estado *fundamental* para conseguir arrancarle un electrón y convertirlo en un ion monopositivo gaseoso.



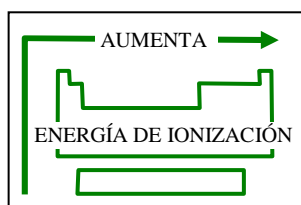
Se trata de una cantidad positiva puesto que es un proceso endotérmico y se expresa en eV/átomo (energía necesaria para ionizar un átomo) o en kJ/mol (energía necesaria para ionizar un mol de átomos); da una idea de la fuerza con la que los electrones se encuentran retenidos en un átomo.

Los valores de EI para los distintos elementos *dependen de la carga nuclear efectiva y del tamaño del átomo*.

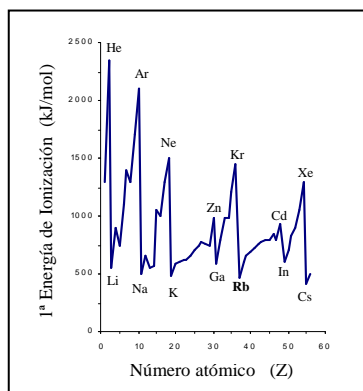
Salvo algunas excepciones la energía de ionización de los elementos aumenta en un periodo al hacerlo Z y disminuye en un grupo al aumentar el número atómico.

En un periodo el incremento es consecuencia del aumento de la carga nuclear efectiva. Esta hace que los electrones se encuentren más atraídos y sea mayor la energía necesaria para separarlos del núcleo. (Las irregularidades encontradas se deben a la existencia de orbitales llenos o semillenos que parecen conferir cierta estabilidad a los átomos que los poseen)

Al descender en un grupo aumenta *n* por tanto los electrones de valencia se encuentran a mayores distancias del núcleo; esto unido al efecto apantallamiento que ejercen los electrones de niveles internos hace que sean atraídos con menor fuerza y como consecuencia los valores de EI disminuyan.



Como puede observarse en la gráfica los gases nobles poseen EI elevadas lo que justifica su poca reactividad, al contrario que los metales alcalinos que debido a su baja EI presentan gran tendencia a perder el electrón más externo y alcanzar la configuración del correspondiente gas noble.



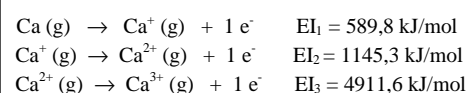
Si a un ion con carga positiva se le sigue suministrando energía puede llegar a perder un segundo electrón (segunda energía de ionización), un tercer electrón (tercera energía de ionización), etc... Las sucesivas energías de ionización aumentan gradualmente ya que la  $Z^*$  que experimentan los electrones más alejados del núcleo es cada vez mayor.

Al aumentar el número atómico la **energía de ionización**

	En un grupo		En un periodo	
	Variación	E.I.	Variación	E.I.
$Z^*$	No varía	Igual	Aumenta	Mayor
Niveles	Aumentan	Menor	No varían	Igual
Global		<b>Menor</b>		<b>Mayor</b>

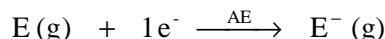
ES23.- ¿Qué elemento tendrá mayor su segunda energía de ionización el sodio o el magnesio? Justifícalo

ES24.- Observa los valores de las distintas EI correspondientes al calcio en la tabla adjunta. ¿A qué crees que se debe la gran variación existente entre la 2ªEI y la 3ªEI?



## Afinidad electrónica

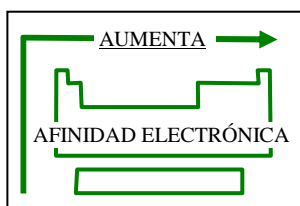
Los átomos pueden ganar electrones y convertirse en iones negativos. La energía intercambiada cuando un átomo neutro, en estado gaseoso y en su estado fundamental, capta un electrón transformándose en un ion mononegativo se denomina **afinidad electrónica** (o electroafinidad) (**AE**). El proceso se describe como:



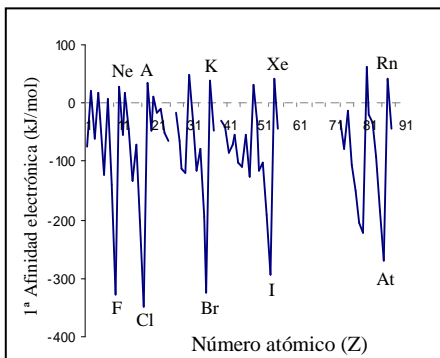
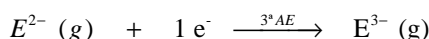
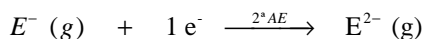
Como la energía de ionización, la afinidad electrónica se mide en eV/átomo o kJ/mol. Para la mayoría de los elementos este proceso es exotérmico ( $AE < 0$ ), pero existen casos en los que es necesario aportar energía para que un átomo capte un electrón en cuyo caso el valor de AE será positivo. (Recuerda que la energía absorbida se considera positiva, mientras que la desprendida, negativa)

En la mayor parte de los casos, dada la dificultad de medirse directamente, el valor de AE se ha calculado a partir del ciclo de Born-Haber que veremos posteriormente.

Como la fuerza con la que los electrones más externos son atraídos por el núcleo dependen de  $Z^*$  y de su distancia a éste la AE (en valor absoluto) aumenta al aumentar Z en un periodo y disminuye al descender en un grupo. Los elementos con mayor AE son los halógenos, ya que la adición de un electrón lleva a la formación de un ion de especial estabilidad con configuración de gas noble; éstos últimos elementos presentan valores positivos de EA lo que significa que para añadirles un electrón hay que aportar energía.



Igual que sucedía con la EI se pueden definir las segundas, terceras,... afinidades electrónicas:



Al aumentar el número atómico la **Afinidad Electrónica**\*

	En un grupo		En un periodo	
	Variación	A.E.	Variación	A.E.
$Z^*$	No varía	Igual	Aumenta	Mayor
Niveles	Aumentan	Menor	No varían	Igual
Global		<b>Menor</b>		<b>Mayor</b>

(\*) en valor absoluto

## Electronegatividad

Es una medida de la tendencia de un átomo a atraer hacia sí los electrones que comparte con otro cuando ambos forman parte de una molécula.

Se encuentra relacionada con los valores de AE y de EI (que son las magnitudes que reflejan la tendencia de un elemento a ganar o perder un electrón)

Entre las escalas de Electronegatividad elaboradas podemos citar la escala de Mulliken, basada en medidas de EI y AE

$$\text{Electronegatividad} = \frac{EI + AE}{2}$$

y la de Pauling, basada en medidas de energías de enlace en donde se asigna al hidrógeno el valor de 2,1. Es la más utilizada y en ella el flúor, que es el elemento más electronegativo, tiene un valor de 4 mientras que al cesio, el menos electronegativo, se le asigna 0,7 (A los gases nobles se les asigna el valor de 0 debido a su escasa tendencia a formar enlaces)

De acuerdo con lo comentado la electronegatividad aumenta a lo largo de un periodo al hacerlo Z y disminuye su valor al descender en un grupo. Los elementos más electronegativos son los no metales mientras que los metales poseen valores de electronegatividades inferiores a 2.

1	2	13	14	15	16	17	18
H 2,1							He 0
Li 1,0	Be 1,5	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0	Ne 0
Na 0,9	Mg 1,2	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0	Ar 0
K 0,8	Ca 1,0	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8	Kr 0
Rb 0,8	Sr 1,0	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5	Xe 0
Cs 0,7	Ba 0,9	Tl 1,7	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,2	Rn 0
Fr 0,7	Ra 0,9	ELECTRONEGATIVIDADES DE PAULING					

ES25.- Clasifica por orden creciente de su electronegatividad los siguientes elementos: V, K, Mg, Cl y C.

ES26.- Teniendo en cuenta la electronegatividad de los elementos, indica cómo es la polaridad de los siguientes enlaces (qué elemento soporta la carga negativa y cuál la positiva): H-Cl, Na-H, P-Cl, y C-Cl

## Carácter metálico

Esta propiedad se encuentra relacionada con la configuración electrónica de los átomos. Los metales son elementos que tienen tendencia a perder electrones convirtiéndose en cationes. Por lo tanto, el carácter metálico de un elemento se encuentra estrechamente relacionado con su Afinidad Electrónica y su Energía de Ionización.

Los metales poseen bajos valores de EI y electronegatividad lo que conlleva que puedan perder electrones y actúen como agentes reductores (redox).

El carácter metálico aumenta hacia la izquierda en un periodo y hacia abajo en un grupo.

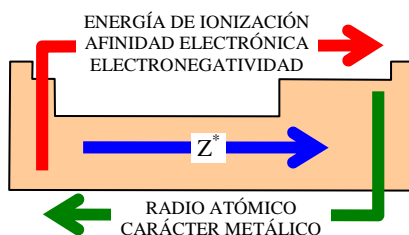
Los **metales** se encuentran en el centro y a la izquierda del sistema periódico (aunque el H es un elemento no metálico se encuentra en el grupo 1 debido a su configuración electrónica) mientras que los **no metales** ocupan la parte derecha y tienen tendencia a ganar electrones para adquirir configuración de gas noble. Entre ambos se localizan unos elementos con propiedades intermedias (unas veces actúan como metales y otras como no metales) que se denominan **semimetales**.

Los metales alcalinos perderán un electrón convirtiéndose en iones monopositivos, los alcalinotérreos perderán dos electrones convirtiéndose en iones dipositivos, mientras que los metales de transición perderán, en primer lugar los dos electrones  $s$  del último nivel y, después, tantos electrones  $d$  del anterior nivel como sea necesario para alcanzar la carga del ion correspondiente (ejemplo  $\text{Fe}^{2+}$  y  $\text{Fe}^{3+}$ )

La **reactividad** de un elemento vendrá determinada por su capacidad para unirse a otros.

En los metales ésta aumenta según lo haga la tendencia a ceder electrones: los más activos serán los que se encuentren en el Sistema Periódico en la parte izquierda e inferior.

Los no metales más activos serán los que tengan mayor tendencia a capturar electrones; la reactividad de los no metales se incrementa según ascendemos en un grupo y nos desplazamos hacia la derecha en un periodo.



1ª AFINIDAD ELECTRÓNICA (kJ/mol)																		He 21				
H -73																						
Li -60	Be -90																B -68	C -72	N -70	O -141	F -328	Ne -29
Na -53	Mg -74																Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar -35
K -48	Ca -90	Sc -18	Ti -8	V -51	Cr -64	Mn -76	Fe -16	Co -64	Ni -112	Cu -118	Zn -47	Ga -69	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325	Kr -39					
Rb -47	Sr -90	Y -30	Zr -41	Nb -86	Mo -72	Tc -53	Ru -101	Rh -110	Pd -145	Au -126	Cd -51	In -59	Sn -116	Sb -103	Te -190	I -295	Xe -41					
Cs -45	Ba -90	La -51	Hf -73	W -81	Re -74	Os -106	Ir -151	Pt -205	Au -223	Hg -61	Tl -20	Pb -35	Bi -91	Po -183	At -270	Rn -41						

1ª ENERGÍA DE IONIZACIÓN (kJ/mol)																He 2372	
H 1312																Ne 2081	
Li 520	Be 899															Ar 1521	
Na 496	Mg 738															Kr 1351	
K 419	Ca 590	Sc 633	Ti 659	V 651	Cr 653	Mn 717	Fe 762	Co 760	Ni 737	Cu 745	Zn 906	Ga 577	Ge 786	As 1012	Se 1281	Br 1140	Kr 1351
Rb 403	Sr 549	Y 603	Zr 662	Nb 652	Mo 702	Tc 702	Ru 710	Rh 720	Pd 804	Ag 731	Cd 868	In 579	Sn 709	Sb 858	Te 869	I 1048	Xe 1171
Cs 376	Ba 503	La 582	Hf 764	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 880	Pt 870	Au 890	Hg 1097	Tl 589	Pb 715	Bi 703	Po 812	At 920	Rn 1037
Fr 380	Ra 509	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo