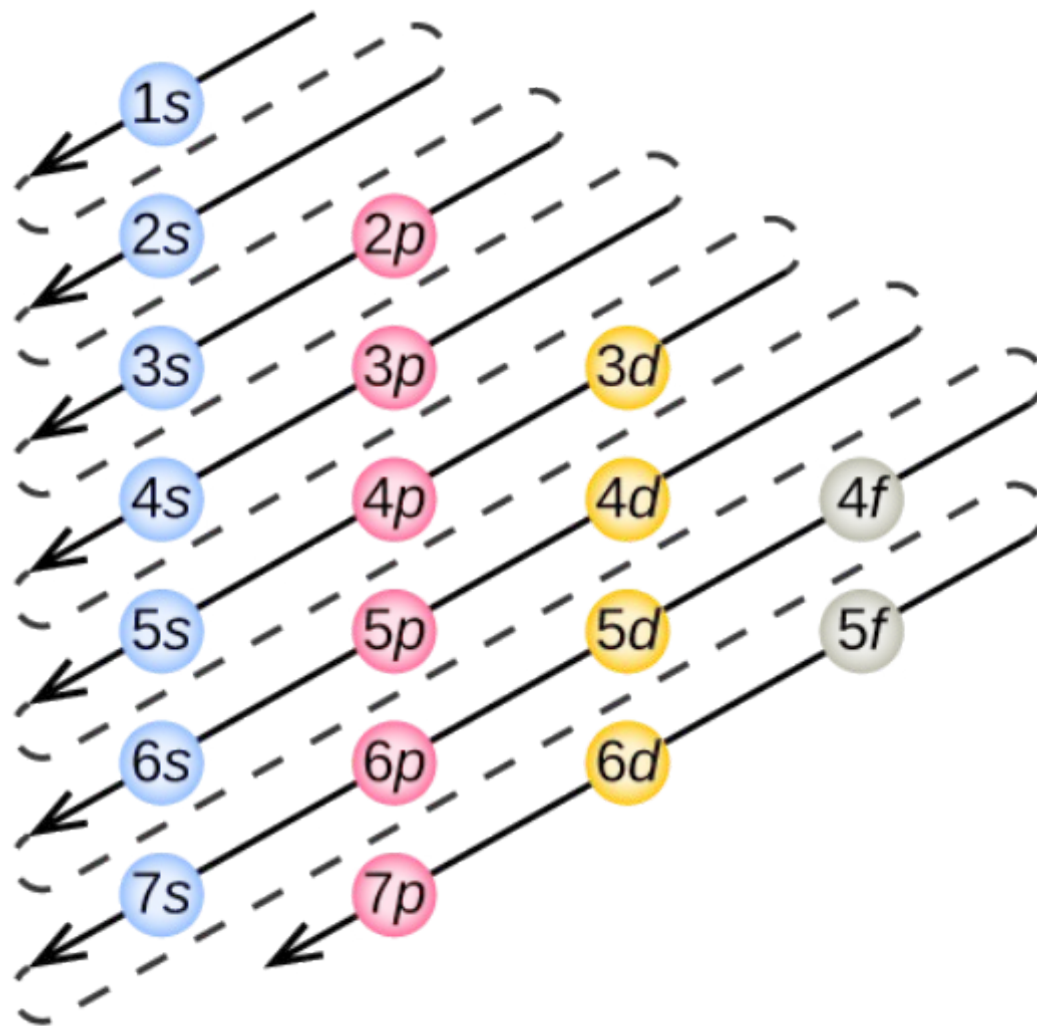


TEMA 1: FUNDAMENTOS DE QUIMICA GENERAL

Distribución de los electrones en los átomos.



Cantidades características de los átomos de los elementos

- El **número atómico** o carga nuclear de un elemento químico es igual al **número de protones** que hay en el núcleo de cada átomo de ese elemento. Se simboliza con la letra **Z**.
Un elemento químico está formado por átomos que tienen el mismo número de protones en su núcleo.
- El número de neutrones del núcleo de un átomo se simboliza con la letra **N**.
- El **número másico** es la suma del **número de protones y de neutrones** del núcleo de un átomo. Se simboliza con la letra **A**.

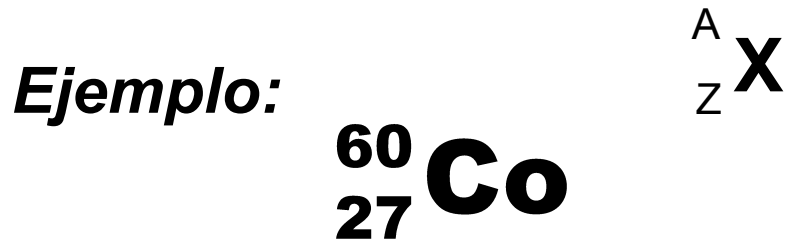
$$\mathbf{A} = \mathbf{Z} + \mathbf{N}$$

- El número atómico (Z) es una propiedad característica de cada elemento químico, determina la identidad del mismo.
- El número másico (A) no es una propiedad característica del elemento químico.
- Los números atómicos son siempre números enteros exactos, pues los protones no existen en cantidades fraccionarias.

Son isótopos aquellos átomos de un mismo elemento que tienen números másicos diferentes por tener distinto número de neutrones, pero no difieren en el número de protones.

A los átomos de un mismo isótopo se denomina *nucleido*.

Convención de nomenclatura y símbolo de nucleido:



donde *Co* es el *símbolo del elemento*, con supraíndice **60 y subíndice **27** ubicados a la izquierda del símbolo.**

Literal: cobalto 60, identifica al isótopo del cobalto que tiene $A=60$, $Z=27$ y $N=33$.

El cobalto 60 se utiliza en el tratamiento del cáncer, emite una radiación mas potente que el radio y es mas barato que éste (Radioterapia).

Ejercicios:

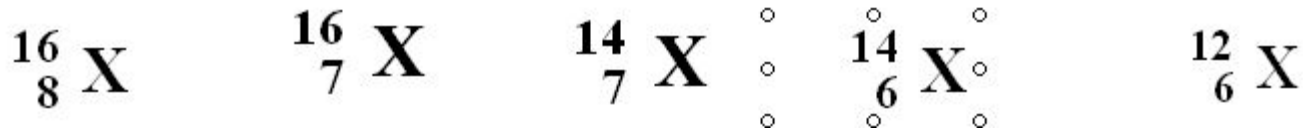
1.- El isótopo radiactivo yodo 131 se emplea para el tratamiento de cáncer de la tiroides y la medición de la actividad del hígado y el metabolismo de grasas. a) ¿Cuál es el número atómico de este isótopo?. b) ¿Cuántos neutrones contienen los átomos de este isótopo?

2.- ¡Es posible que tengas un poco de americio radiactivo en tu casa! El isótopo ${}_{95}^{241}\text{Am}$

se emplea en detectores de humo domésticos del tipo de ionización.

- a) ¿Cuántos protones están presentes en cada átomo de este isótopo?
b) ¿Cuántos neutrones contienen los átomos de este isótopo?

3.- a) De los que siguen, ¿cuáles son isótopos del mismo elemento? Identifica a cada elemento.



b) ¿Cuáles de los cinco tipos de átomos tienen el mismo número de neutrones?

4.- Consultando a la tabla periódica, completa el siguiente cuadro:

Símbolo nuclear	Especificación literal	Z	A	N	Número de electrones
${}_{7}^{16}\text{N}$					
	yodo 128				
		82	207		
${}_{12}^{24}\text{Mg}$					
		37		49	
				45	34

LOS ÁTOMOS: el mundo cuántico

¿De qué está compuesta la materia?

ÁTOMOS

La mecánica cuántica es una teoría matemática que explica las estructuras y propiedades de los átomos; combina las propiedades de las partículas y de las ondas.

Entender la estructura electrónica del átomo nos permitirá comprender y explicar los fenómenos químicos de la naturaleza.

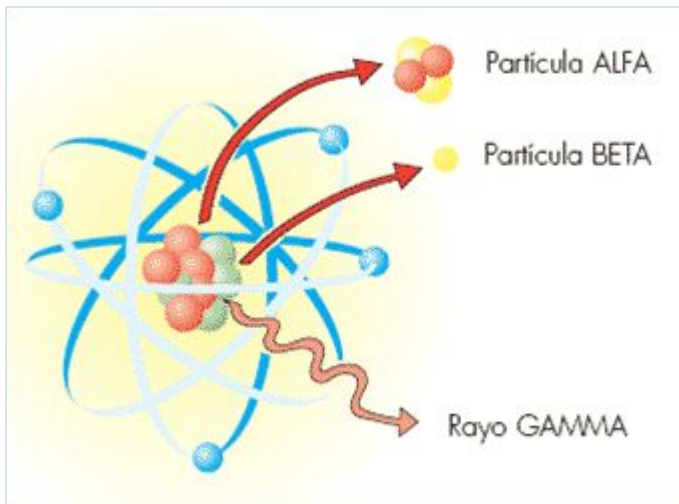
¿Qué es la Radiación?

*Es la transmisión de la energía a través del espacio y la materia.
Puede producirse en dos formas:*

Particulada

Núcleos atómicos o partículas subatómicas que se mueven a alta velocidad.

Ej: los rayos alfa, los rayos beta y los rayos catódicos.

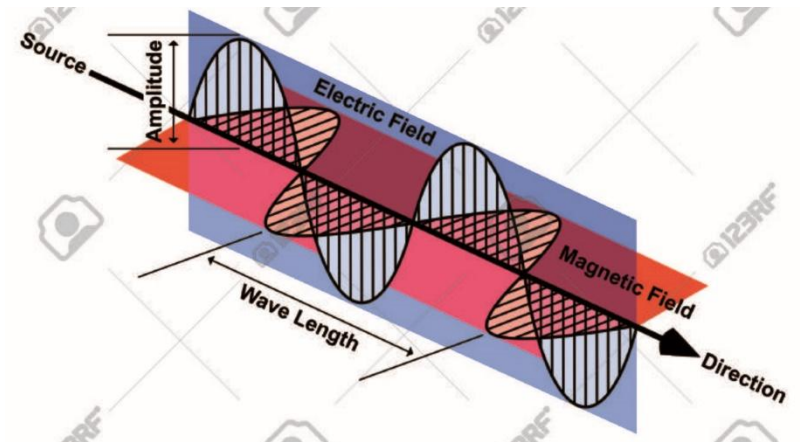


Electromagnética

Movimiento de energía a través del espacio como una combinación de los campos eléctricos y magnéticos.

Se genera cuando se altera la velocidad de una partícula cargada eléctricamente.

Ej: los rayos gamma, los rayos X, los rayos UV, la luz visible, la radiación infrarroja (calor), las microondas y las ondas de radio.



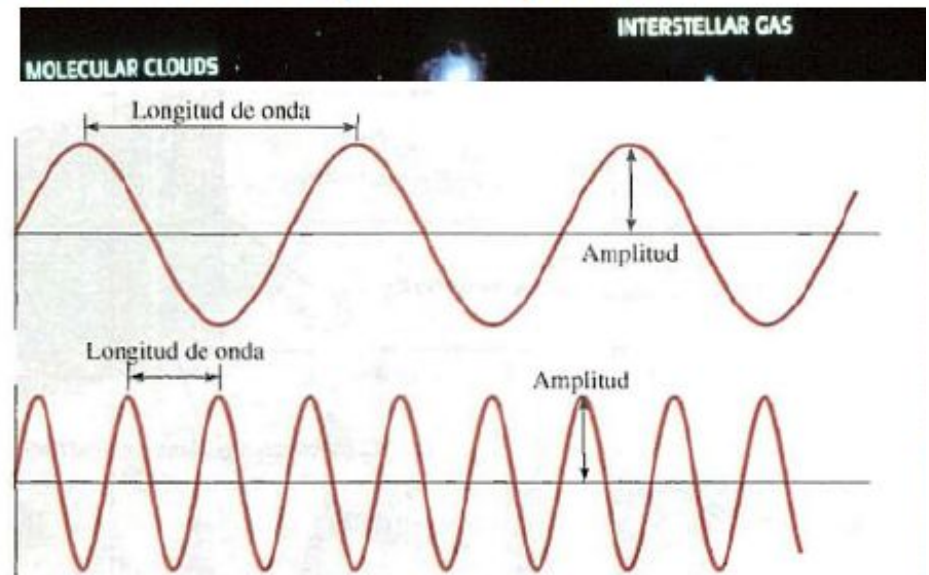
Radiación electromagnética

Una de las formas de energía que se propaga por el espacio es la **radiación electromagnética**.

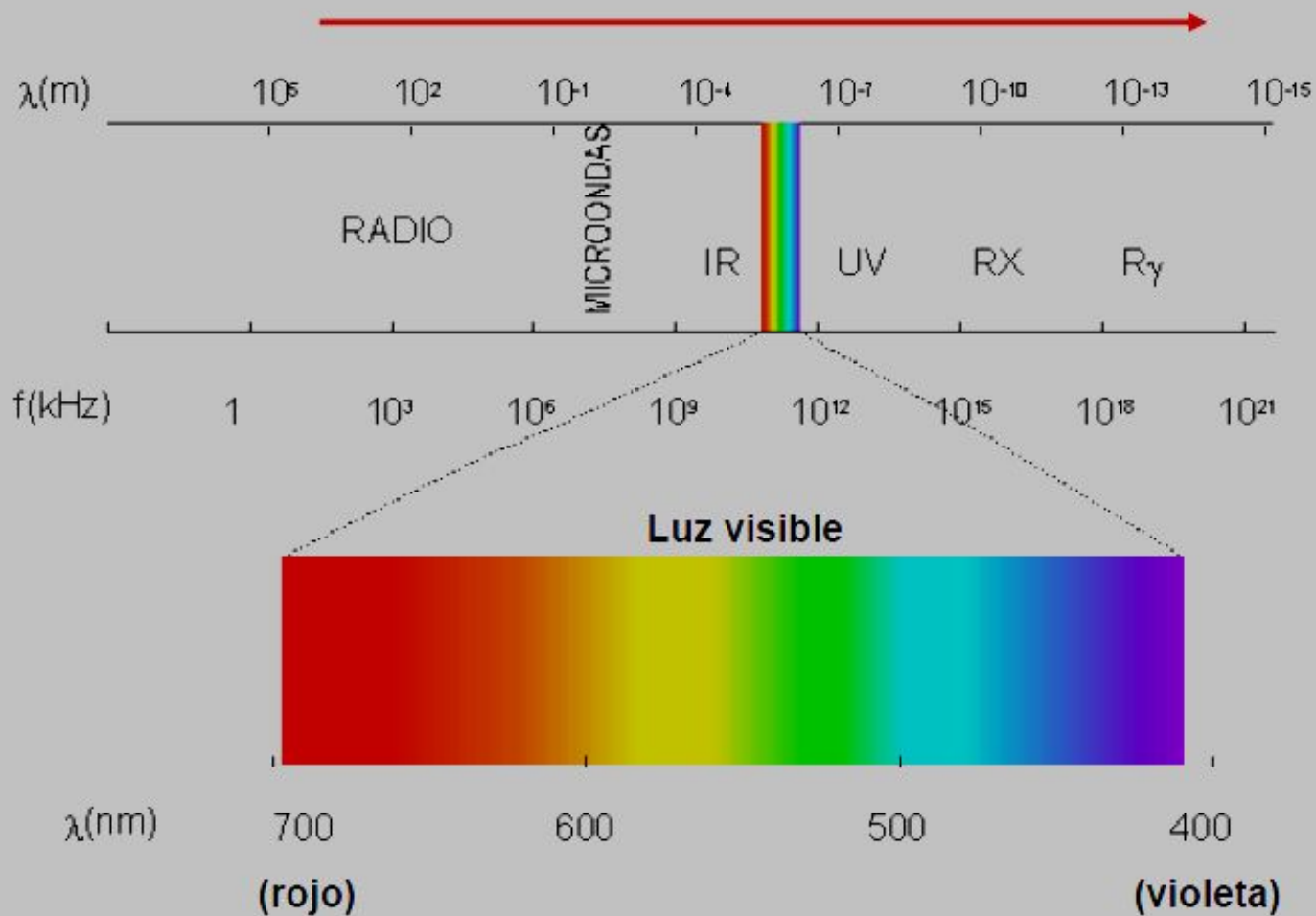
Todas las formas de energía radiante exhiben el mismo **comportamiento ondulatorio**.

Las ondas tienen 4 características principales:

- Amplitud
- Longitud de onda (λ)
nm
- Frecuencia (ν)
Hz
- Velocidad ($\mu = \lambda \cdot \nu$)
m/s

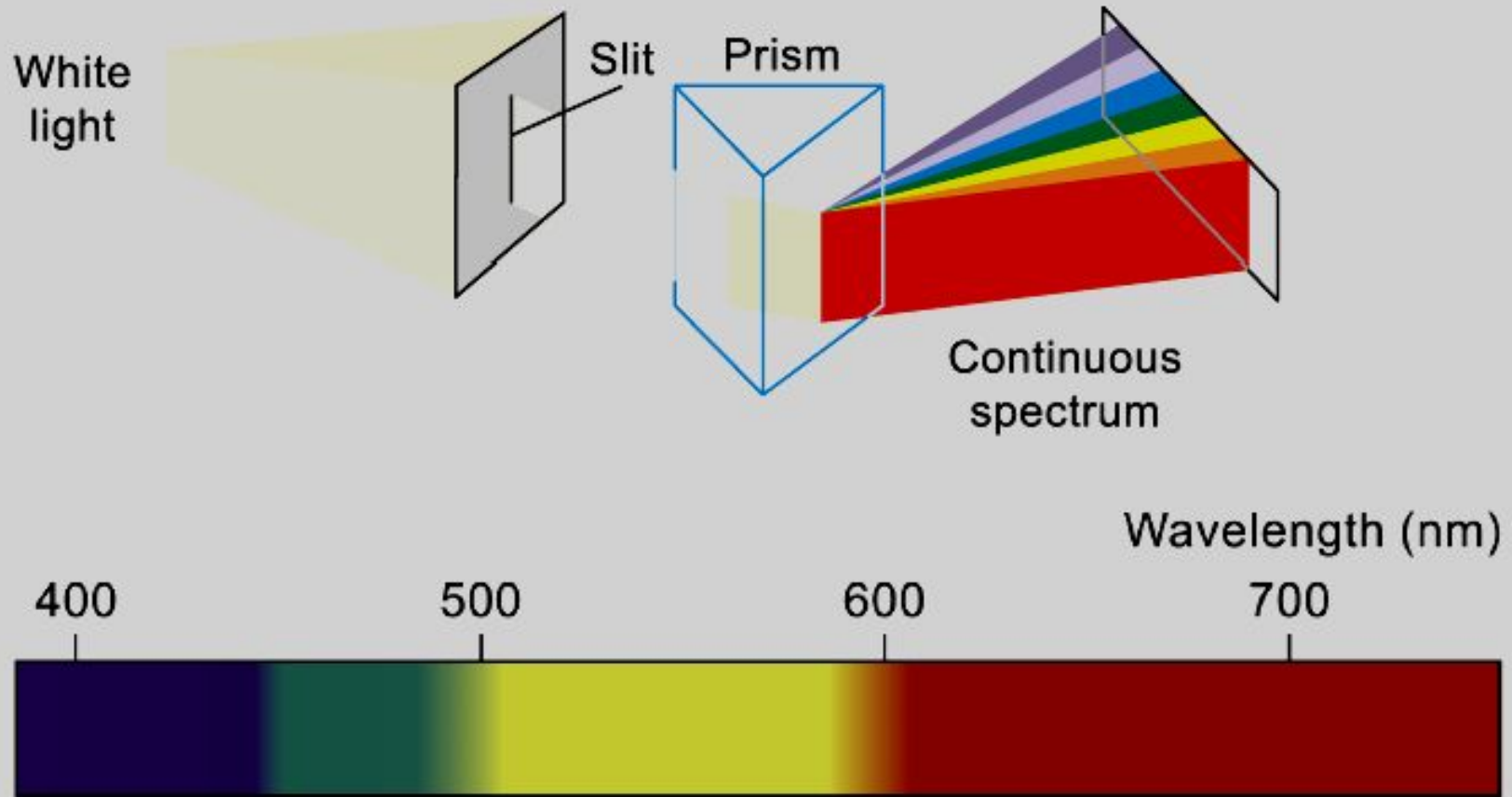


Espectro de la radiación electromagnética



Espectroscopía: es el análisis de la radiación EM emitida o absorbida por las sustancias.

Espectro continuo de la luz blanca



La luz blanca, que incluye a la luz solar, es una mezcla de todas las longitudes de onda de la luz visible.

Naturaleza corpuscular: ESPECTROS DE LOS ELEMENTOS

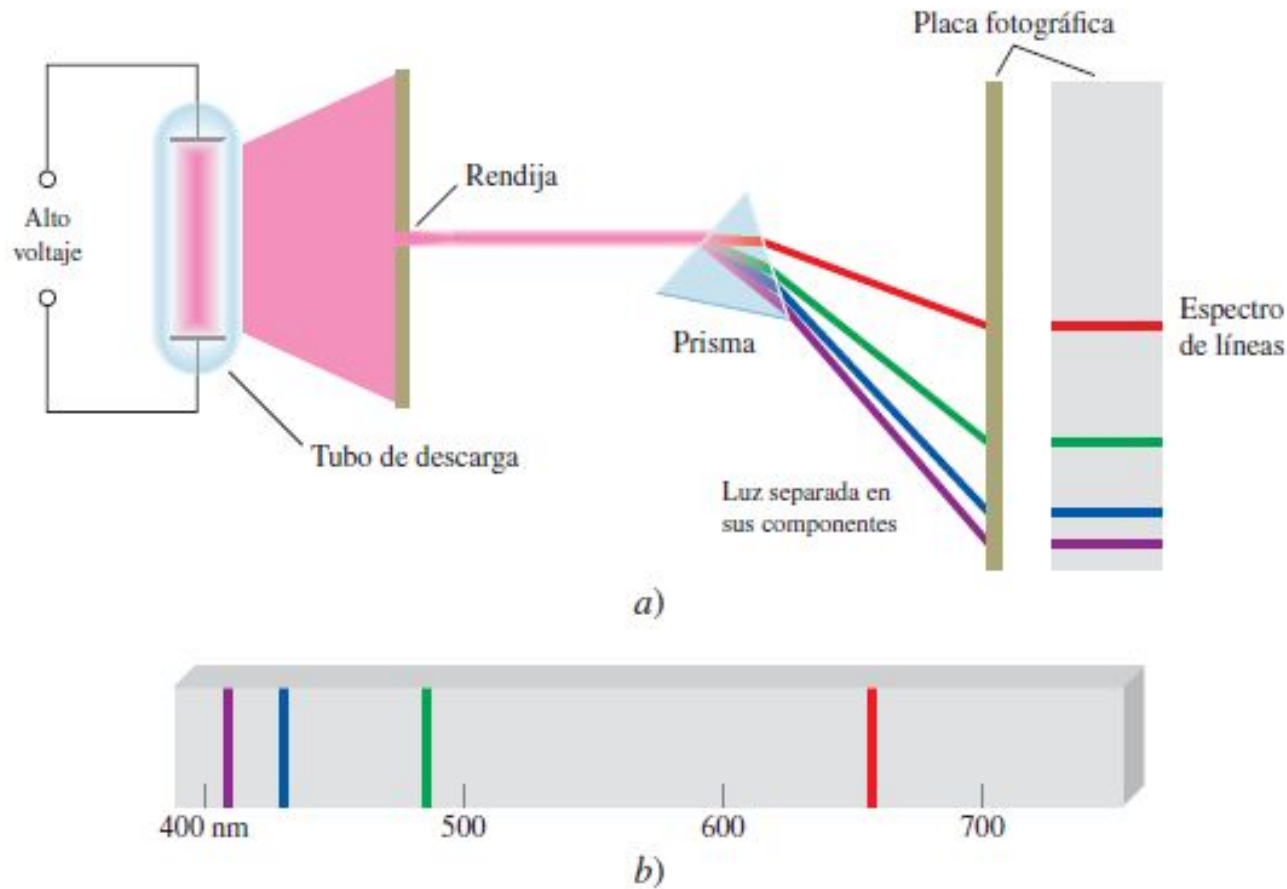
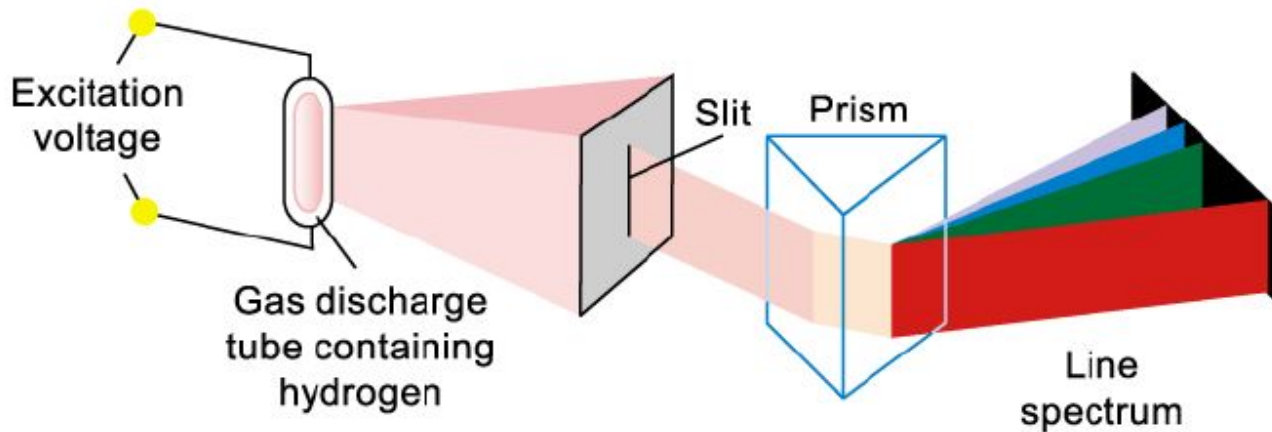


Figura 7.6 a) Dispositivo experimental para estudiar los espectros de emisión de átomos y moléculas. El gas en estudio se encuentra en un tubo de descarga que contiene dos electrodos. Al fluir los electrones del electrodo negativo al electrodo positivo, chocan con el gas. Este proceso de choque finalmente provoca la emisión de la luz por parte de los átomos (o moléculas). La luz emitida se separa en sus componentes por medio de un prisma. Cada componente de color se enfoca en una posición definida, de acuerdo con su longitud de onda, y da lugar a una imagen colorida sobre la placa fotográfica. Las imágenes a color se denominan líneas espectrales. b) Espectro de emisión de líneas de los átomos de hidrógeno.



Naturaleza corpuscular: *ESPECTROS DE LOS ELEMENTOS*

Espectro de emisión del hidrógeno



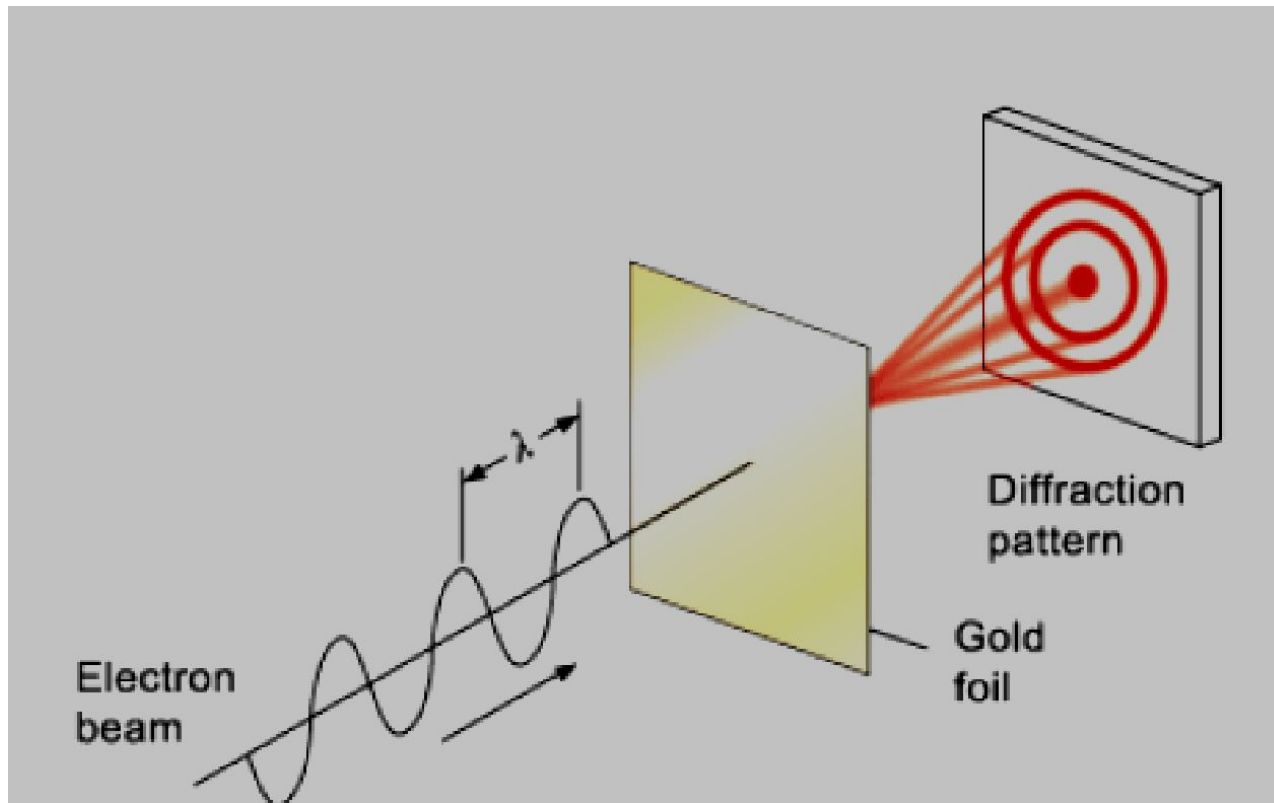
“Los espectros de emisión de los elementos son como las huellas dactilares de los átomos.”



Cuando se aplica energía a los átomos de hidrógeno, éste emite luz sólo a ciertas longitudes de onda, es decir que se producen únicamente determinados cambios de energía. **El átomo de hidrógeno tiene niveles de energía discretos**, es decir que puede perder energía solo en ciertas cantidades discretas.

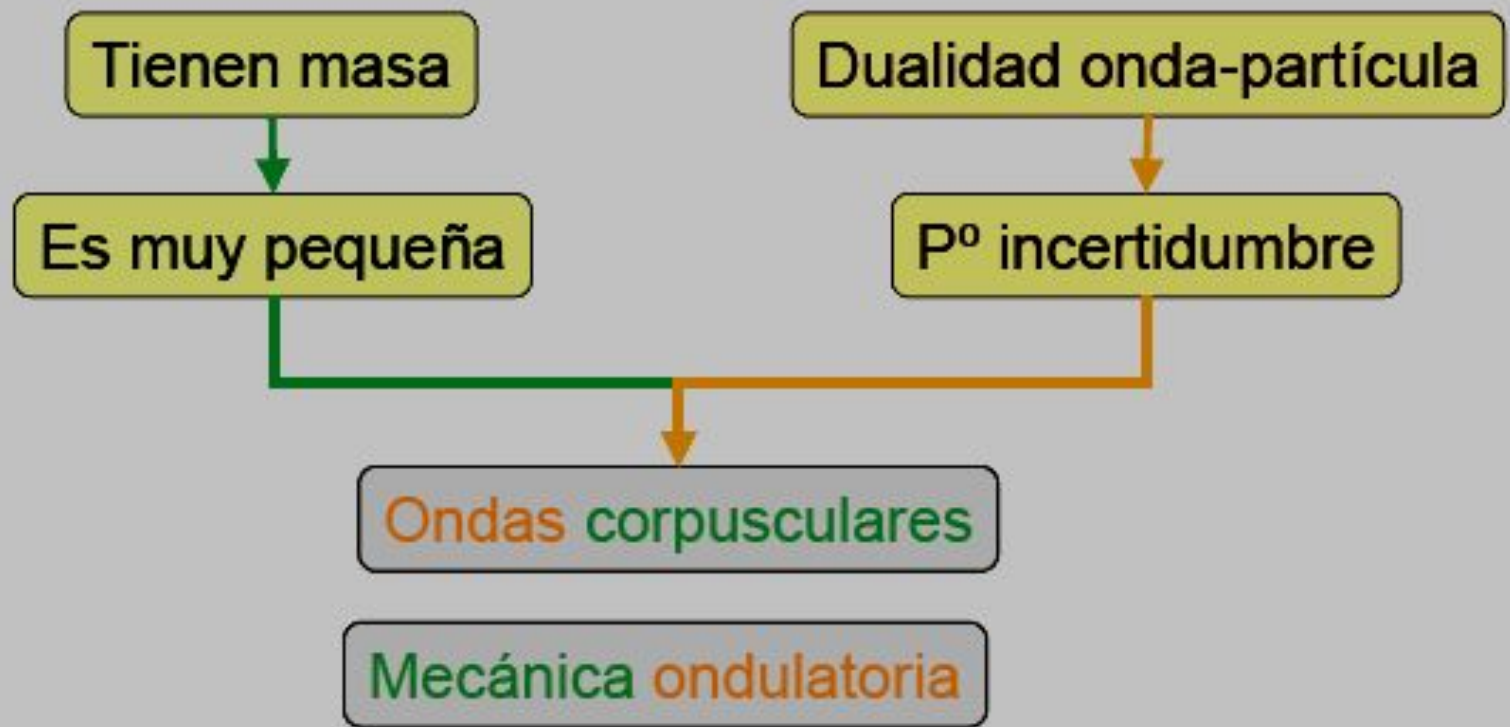
Modelo atómico de la mecánica ondulatoria

♦ Tomando en consideración que la luz se comporta de manera simultánea como onda y como corriente de partículas, Broglie y Schrödinger (1924-1926) sugirieron la probabilidad de que el electrón exhibiese ambas características.



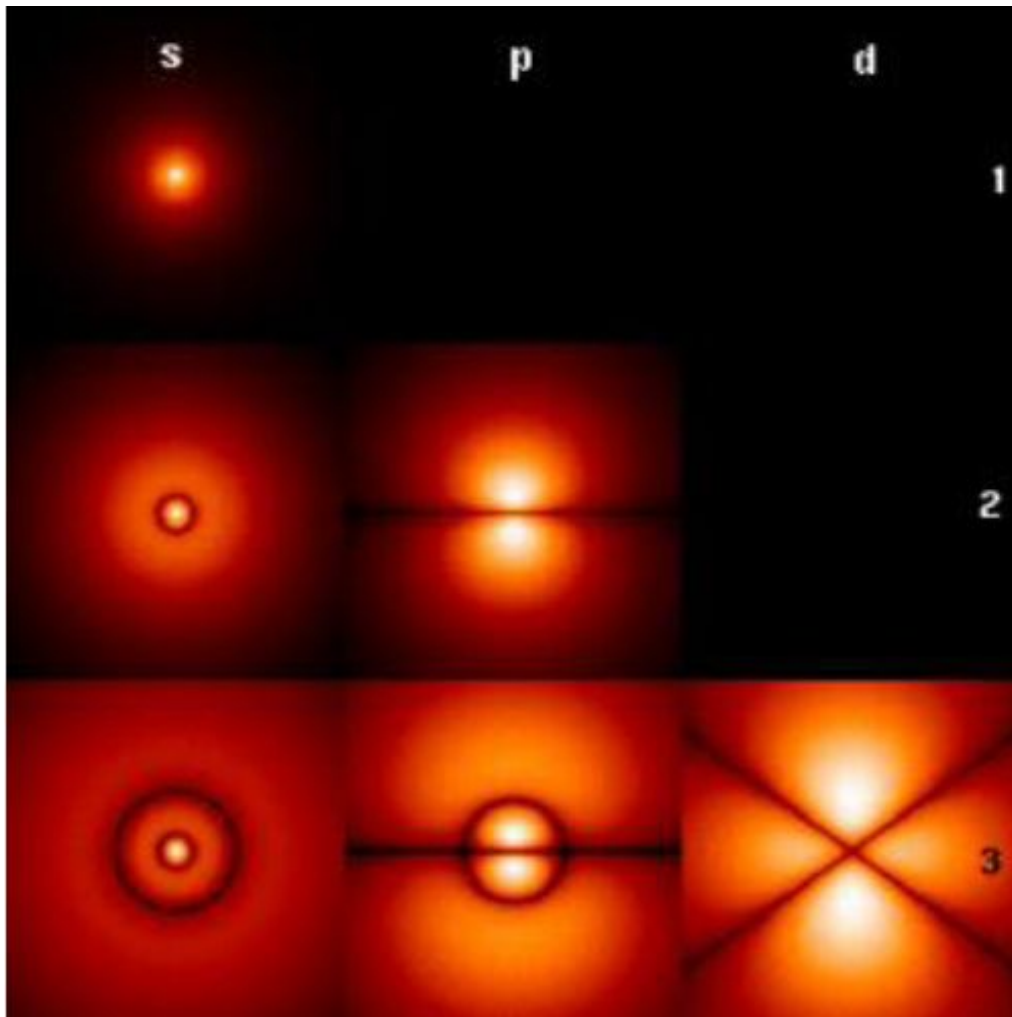
Davisson y Germer (1925) demostraron que los e- producen un patrón de difracción cuando son reflejados en un cristal.

¿Cuál es la naturaleza de electrones en el átomo?



Modelo atómico de la mecánica ondulatoria

- ◆ Tomando en consideración que la luz se comporta de manera simultánea como onda y como corriente de partículas, Broglie y Schrödinger (1924-1926) sugirieron la probabilidad de que el electrón exhibiese ambas características.
- ◆ Principio de incertidumbre de Heisenberg: "*es imposible conocer con certeza el momento y la posición de una partícula simultáneamente*".
- ◆ En realidad el e^- no viaja en la órbita alrededor del núcleo con una trayectoria definida, como suponía Bohr.
- ◆ Los estados del e^- se describen mediante orbitales atómicos.
- ◆ **Un orbital atómico** se define como la región del átomo donde es máxima la probabilidad de encontrar al e^- .



Orbitales atómicos

- Las nubes electrónicas tridimensionales determinan diferentes orbitales.
- Las expresiones matemáticas para los orbitales atómicos se obtienen como soluciones de la Ecuación de Schrödinger.
- La densidad del sombreado representa la probabilidad de encontrar al e⁻ en cualquier punto.

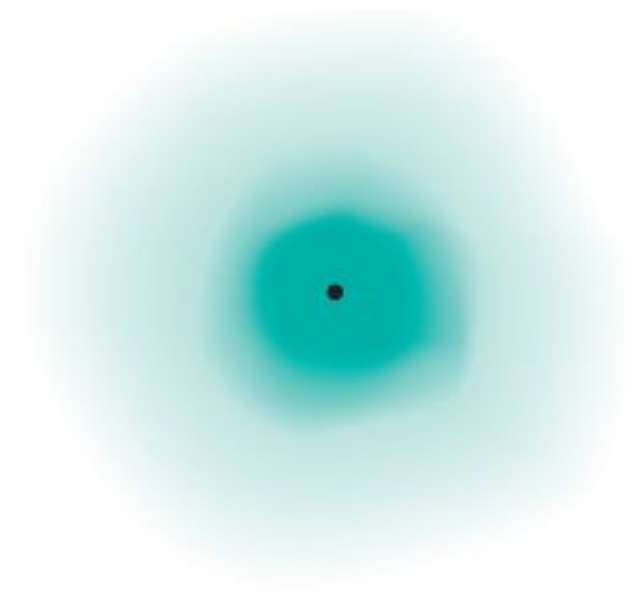


Figura 7.15 Representación de la distribución de la densidad electrónica que rodea al núcleo en el átomo de hidrógeno. Muestra una alta probabilidad de encontrar al electrón más cercano al núcleo.

Para el **átomo de hidrógeno**, la ecuación de Schrödinger especifica los posibles estados de energía que puede ocupar su electrón. Esta ecuación define un conjunto de **números cuánticos** con los que es posible construir un modelo comprensible del átomo de hidrógeno.

Para distinguir entre la descripción de un átomo por el modelo de Bohr y con la mecánica cuántica, el concepto de órbita se sustituye con el de **orbital atómico**.

Resumiendo....

● Los **números cuánticos** describen la distribución de los e^- en los átomos.

● La distribución de los e^- en los orbitales de un átomo, descrita por los números cuánticos, se denomina **CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA** del átomo.

Para describir la distribución de los electrones en los átomos, la mecánica cuántica precisa de los **números cuánticos**. Estos números se derivan de la **solución matemática de la ecuación de Schrödinger** y son: el **número cuántico principal**, el **número cuántico del momento angular**, **número cuántico magnético** y el **de spin**. Estos números se utilizan para describir los orbitales atómicos e identificar a los electrones que están dentro.

Números cuánticos:	Especifica:
1. <i>Principal (n)</i> $n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$	ENERGÍA del orbital
2. <i>Angular o azimutal (l)</i> $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ <i>s p d f</i>	FORMA del orbital
3. <i>Magnético (m)</i> $m = -l, \dots, 0, \dots, l$	ORIENTACIÓN EN EL ESPACIO del orbital
4. <i>Spin (s)</i> $s = +1/2, -1/2$	ESTADO DE ESPÍN del electrón

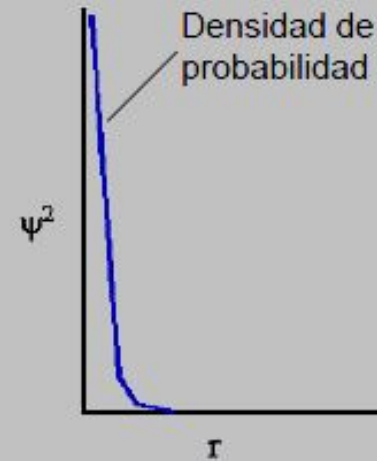
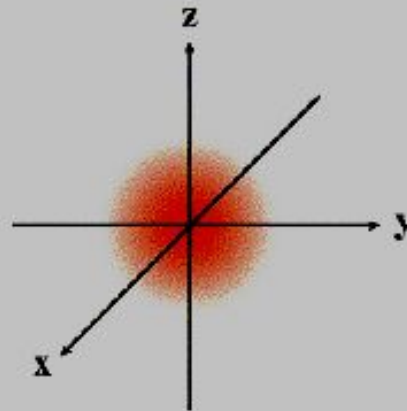


Relación entre números cuánticos y orbitales atómicos

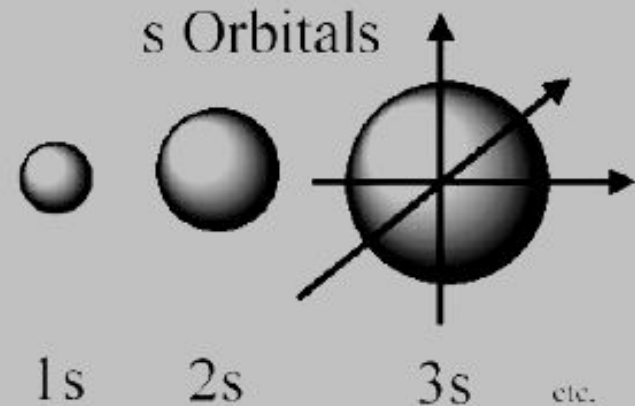
n	ℓ	m_ℓ	Número de orbitales	Designación de orbitales atómicos
1	0	0	1	$1s$
2	0	0	1	$2s$
	1	-1, 0, 1	3	$2p_x, 2p_y, 2p_z$
3	0	0	1	$3s$
	1	-1, 0, 1	3	$3p_x, 3p_y, 3p_z$
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	$3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz}$ $3d_{x^2-y^2}, 3d_{z^2}$



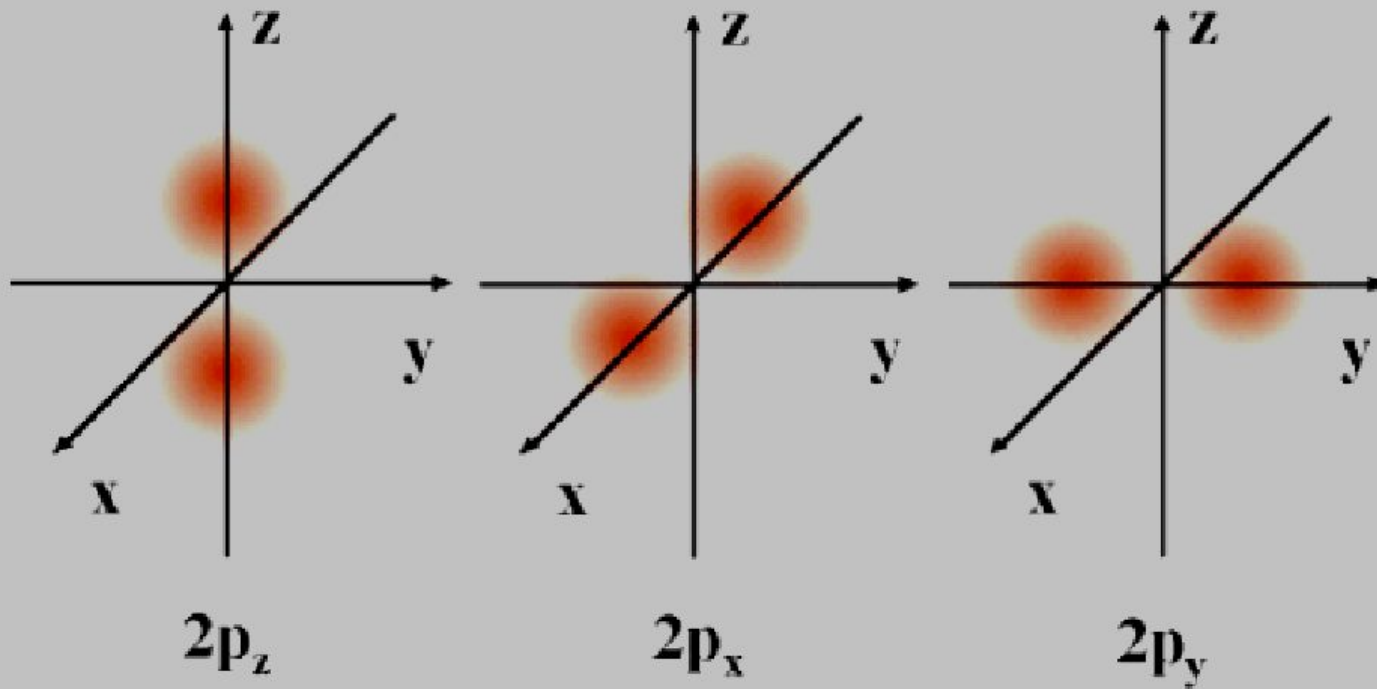
Orbitales S



El **tamaño** del orbital s aumenta al aumentar el número cuántico principal (n).



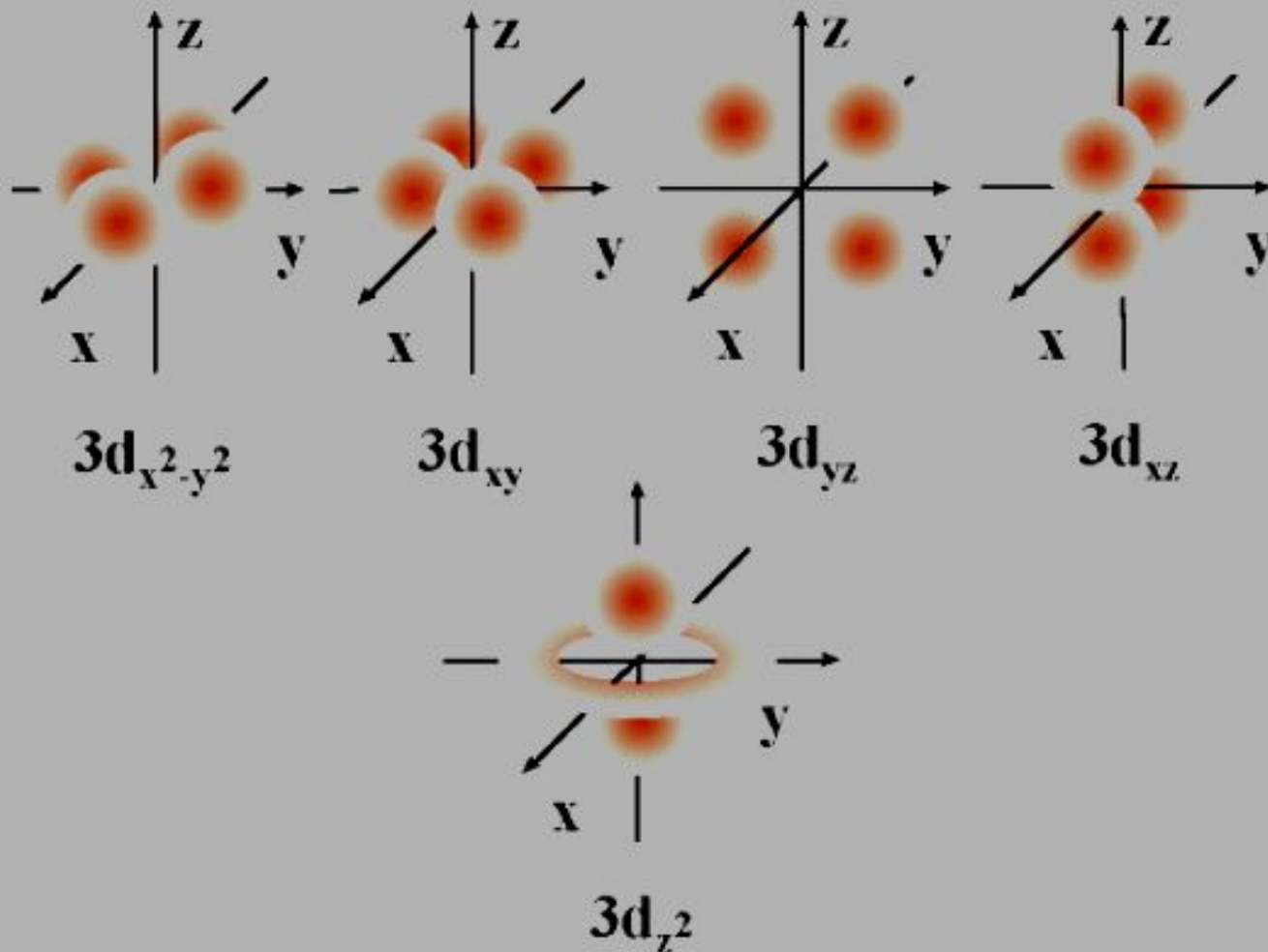
Orbitales p → Comienzan con el número cuántico principal $n = 2$



Estos 3 orbitales p tienen el mismo tamaño, forma y energía;
sólo difieren en su orientación espacial.

Orbitales d

→ Comienzan con el número cuántico principal $n = 3$



Orbitales **f**

→ Comienzan con el número cuántico principal $n = 4$

2 de los 7 orbitales 4f



f_{xz}^2

6 lobúlos



f_{xyz}

8 lobúlos

+ otros 5 orbitales

Configuración Electrónica y Clasificación Periódica de los Elementos

La **estructura electrónica** de un átomo se indica mediante su **configuración electrónica**.

La **configuración electrónica** muestra una lista de todos los **orbitales ocupados** indicando el **número de electrones** que contiene cada uno.

Configuración electrónica del átomo de hidrógeno (diagrama de recuadros)

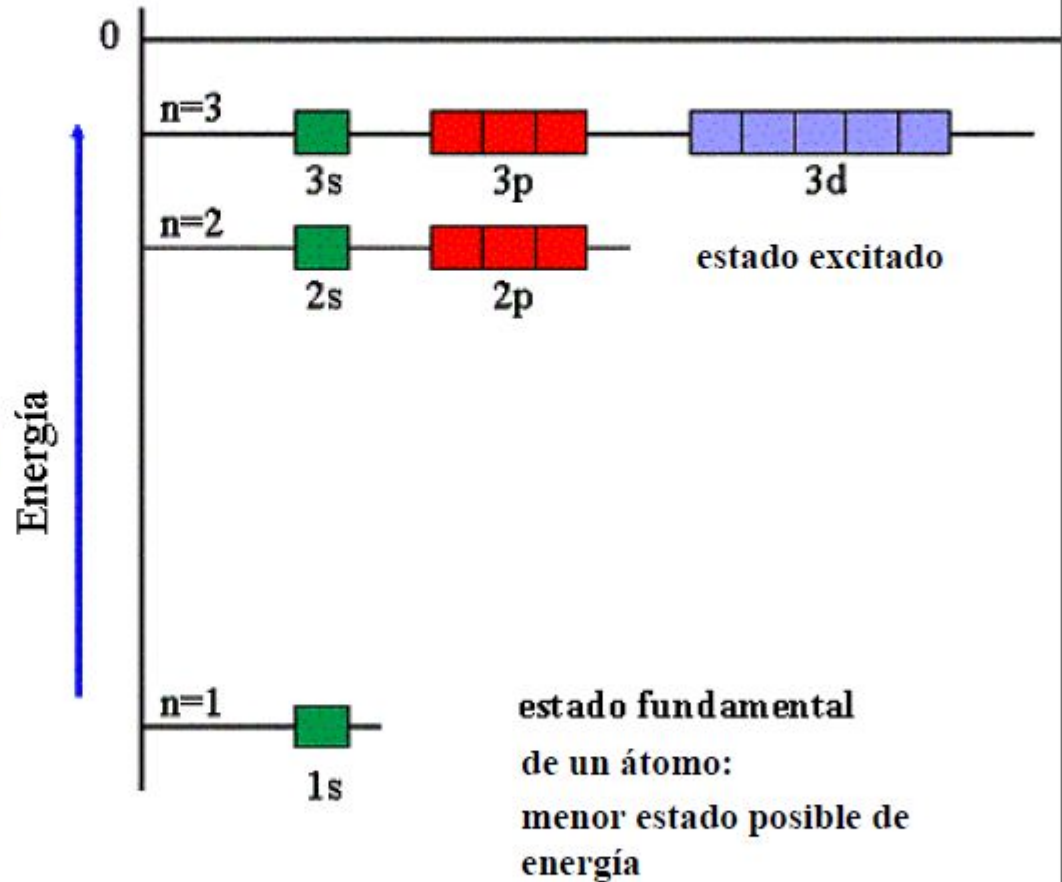
Elemento	Z	Diagrama de orbitales	Configuración electrónica
		1s 2s 2p 3s	
H	1		$1s^1$ expresa el número de electrones en el orbital o subnivel
		expresa el número cuántico principal n	expresa el número cuántico de momento angular l



Se lee “uno ese uno”

Niveles de energía de los orbitales

- En condiciones normales el e^- de un átomo de hidrógeno está en su estado fundamental (en el orbital 1s).
- El e^- puede pasar a un estado excitado mediante la absorción de un fotón con el número apropiado de cuantos de energía.



Principio de Aufbau para la construcción del sistema periódico

A medida que Z aumenta en una unidad, los e^- se agregan de a uno a los orbitales, simultáneamente con el agregado de uno en uno de p^+ (protones) en el núcleo y siempre ocupando *el nivel de menor energía*.

El nuevo electrón que ha ingresado se conoce como **electrón diferenciador**.

Regla de Orden de llenado de los subniveles

Se llena primero, aquel subnivel que tenga la suma $(n+l)$ más baja.

Ej: el subnivel $4s$ ($n=4$, $l=0$; $4+0=4$) se llena antes que subnivel $3d$ ($n=3$, $l=2$; $3+2=5$)

Cuando $(n+l)$ da el mismo valor para dos subniveles, **se llenará primero aquel que tenga menor valor de n** :

$3d$ ($3+2=5$) se llena antes que $4p$ ($4+1=5$)

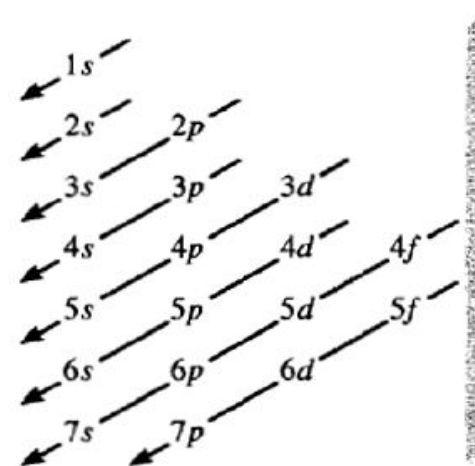










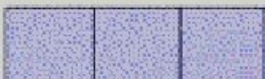















FIGURA 7.24 Orden de llenado de los subniveles atómicos en un átomo polielectrónico. Se comienza con el orbital $1s$ y se continúa hacia abajo siguiendo la dirección de las flechas. Así, el orden de llenado es: $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d \dots$

El orden de llenado (recuadro en rosa) no deben saber de memoria ya que se encuentra en la tabla periódica.

Elemento	Z	Diagrama de orbitales				Configuración electrónica
		1s	2s	2p	3s	
H	1					$1s^1$
He	2					$1s^2$
Li	3					$1s^2 2s^1$
Be	4					$1s^2 2s^2$
B	5					$1s^2 2s^2 2p_x^1$
C	6					$1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

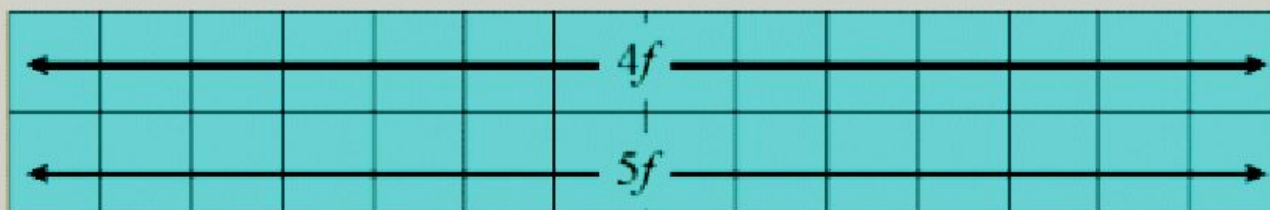
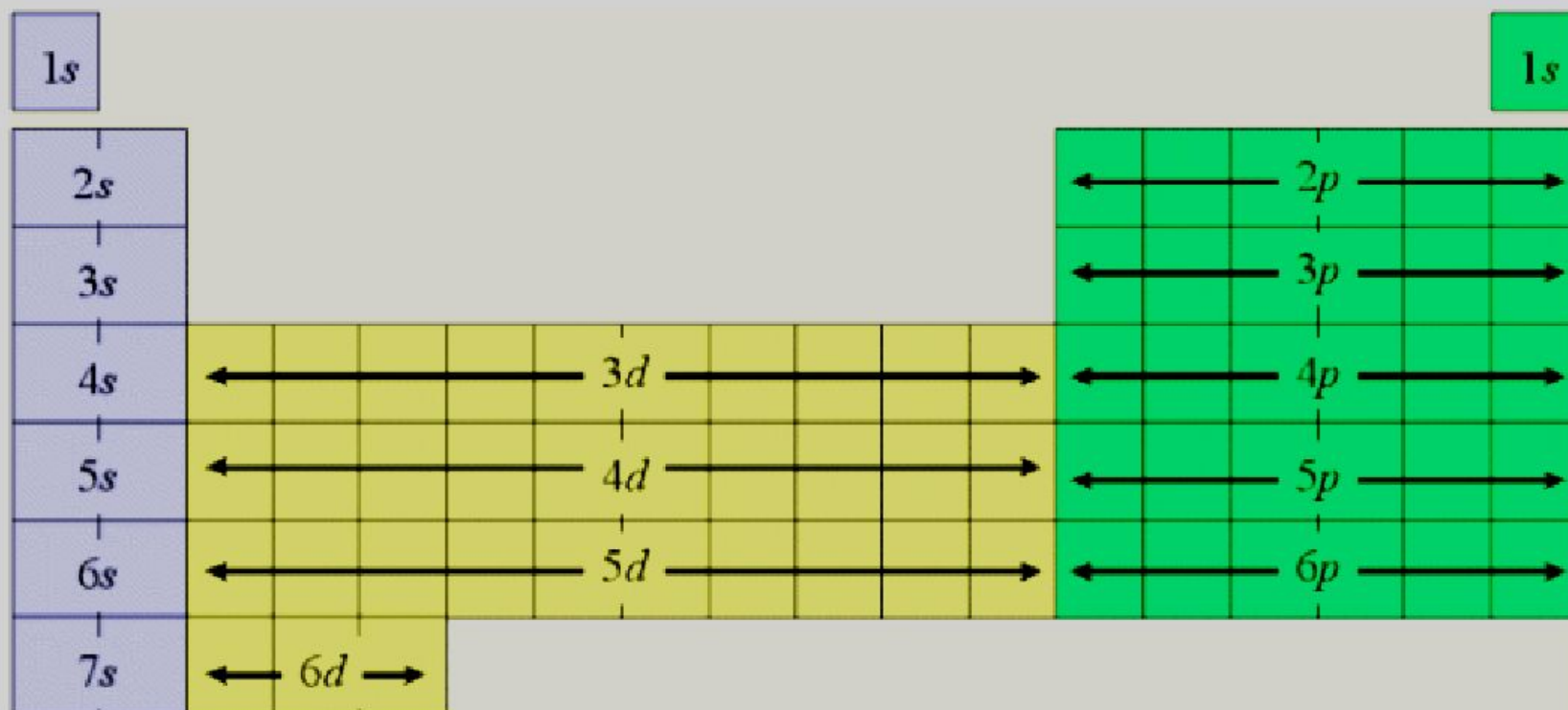
Principio de exclusión de Pauli: No más de dos e^- pueden ocupar un orbital dado. Cuando 2 e^- ocupan un orbital, sus espines deben estar apareados.

Regla de Hund: Si en un subnivel hay más de un orbital disponible, se deben ubicar los e^- con espines paralelos en orbitales diferentes de dicho subnivel, en lugar de aparear 2 e^- en uno de los orbitales.

Niveles de energía, subniveles y número de e⁻

Principal (<i>n</i>) NIVEL	Azimutal (<i>l</i>)	Magnético (<i>m</i>)	SUBNIVEL	Número máximo de e ⁻ ($2n^2$)
1	0	1	1s	2 2
2	0	1	2s	2 8
	1	3	2p	6
3	0	1	3s	2
	1	3	3p	6 18
	2	5	3d	10
4	0	1	4s	2
	1	3	4p	6 32
	2	5	4d	10
	3	7	4f	14

Clasificación de los grupos de elementos en la tabla periódica según el tipo de subnivel que ocupan los e⁻ más externos



Ejercitación:

1- Escribir la configuración electrónica de:

- a) Nitrógeno**
- b) Elemento cuyo Z: 11**
- c) Elemento cuyo Z: 15.**
- d) Neón**

2- Escribir las configuraciones electrónicas abreviadas de a, b y c del ejercicio 1

La configuración abreviada se encuentra en la tabla periódica, tiene en cuenta que los primeros subniveles son iguales a las del gas noble inmediato anterior. Ej. para el nitrógeno, N: $[\text{He}]2s^22p^3$).