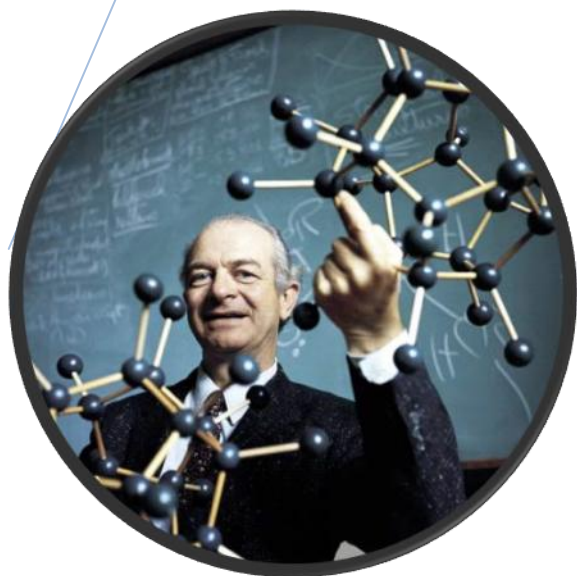




## Química General e Inorgánica I

*Si quieres tener buenas ideas, tienes que tener muchas ideas. La mayoría de ellas serán erróneas, y solo tienes que aprender cuáles desechar*

**Linus Pauling**





## Contenido

1.	Estructura del átomo.....	4
1.1	El átomo de Demócrito .....	4
1.2	Átomos y Electrones.....	4
1.2.1	El electrón.....	7
1.2.2	El modelo atómico de Thomson.....	14
1.3	Los rayos X y radiactividad .....	14
1.3.1	Rayos $\alpha$ .....	16
1.3.2	Rayos $\beta$ .....	17
1.3.3	Rayos $\gamma$ .....	17
1.4	El átomo Nuclear.....	17
1.4.1	La carga del electrón .....	17
1.4.2	El átomo nuclear .....	20
1.4.3	Las partículas positivas – “el protón” .....	22
1.4.4	El estudio de los isótopos.....	28
1.4.5	Otras partículas del átomo con relevancia química.....	30
1.5	Inicios de la Mecánica Cuántica .....	31
1.5.1	Espectroscopia .....	32
1.5.2	La Luz.....	32
1.5.3	Fotones.....	35
1.5.4	Efecto Fotoeléctrico .....	37
1.6	El espectro del átomo de Hidrógeno .....	38
1.7	Modelo Atómico de Bohr .....	42
1.7.1	Postulados del Modelo Atómico de Bohr .....	44
1.8	De Broglie y Dualidad onda – partícula.....	46
1.9	Principio de Incertidumbre de Heisenberg .....	48
1.10	Ecuación de Onda y Funciones de Onda .....	50
1.10.1	Función de onda y orbitales atómicos .....	51
1.10.2	Números Cuánticos .....	53
1.11	Orbitales Atómicos.....	56
1.11.1	Orbitales s.....	56



1.11.2	Orbitales p .....	57
1.11.3	Orbitales d y f .....	58
1.12	Spin del Electrón.....	59
1.13	Estructura del Átomo del Elemento Hidrógeno según el Modelo Cuántico .....	59
1.14	Estructuras de los Átomos Multielectrónicos – Energías Orbital.....	60
1.14.1	Carga Nuclear Efectiva .....	60
1.14.2	Principio de Exclusión de Pauli .....	62
1.14.3	Principio de Construcción.....	62
1.14.4	Configuraciones Electrónicas de los Iones .....	70
2.	Tabla Periódica .....	71
2.1	Descubrimiento de los Elementos y la necesidad de su clasificación .....	71
2.2	Clasificación de los Elementos Químicos .....	73
2.2.1	Propiedades de los Halógenos .....	77
2.2.2	Propiedades de los Metales Alcalinos.....	78
2.3	Ley Periódica para la clasificación de los elementos.....	79
2.4	Tabla Periódica Moderna .....	84
2.4.1	Nombres y Símbolos de los Elementos .....	84
2.4.2	Grupos y Períodos .....	85
2.4.3	Clasificación Periódica de los Elementos y relación con la Configuración Electrónica Cuántica de los mismos.....	89
2.4.4	Metales y No Metales .....	90
2.5	Propiedades Periódicas Extranucleares .....	91
2.5.1	Radios Atómicos y Radios Iónicos .....	91
2.5.2	Energía de Ionización .....	93
2.5.3	Afinidad Electrónica .....	94
2.5.4	Electronegatividad.....	95
2.5.	5 Dureza, blandura y polarizabilidad.....	97
3.	Uniones Química .....	98
3.1	Enlace Iónico .....	100
3.1.1	Factores que favorecen la formación de enlaces iónicos .....	104
3.1.2	Diagrama de puntos en compuestos iónicos .....	106
3.1.3	Elementos con más de un número de oxidación posible.....	107
3.2	Enlace covalente .....	108



3.2.1	Lewis y la Regla del Octeto en los enlaces covalentes .....	108
3.2.2	Estabilidad de las estructuras.....	109
3.2.3	Electronegatividad y polarización del enlace.....	111
3.2.4	Carga formal.....	113
3.2.5	Estructuras de resonancia.....	114
3.3	Enlace Metálico .....	116
4.	Estructura Molecular.....	118
4.1	Teoría de Orbitales Moleculares .....	118
4.1.1	Aplicación en el átomo de hidrógeno .....	119
4.1.2	Niveles energéticos superiores en moléculas diatómicas.....	120
4.1.3	Orden de Enlace .....	122
4.2	Teoría de Enlace de Valencia.....	123
4.2.3	Modelo de hibridación para moléculas poliatómicas .....	125
4.2.4	Moléculas con octeto expandido .....	128
4.2.5	Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de Valencia.....	131
5.	Propiedades Moleculares.....	133
5.1	Dipolos instantáneos e inducidos .....	133
5.2	Interacciones dipolo – dipolo.....	134
5.3	Interacción puente hidrógeno .....	135
	Bibliografía .....	142



## 1. Estructura del átomo

Realizaremos un viaje, en el tiempo, en un intento de adentrarnos en la estructura íntima de la partícula que constituye a todos los materiales que existen en el Universo: el átomo. En este viaje nos encontraremos con los físicos y los químicos que, a través de sus estudios y descubrimientos, llevaron a la concepción actual de la estructura interna del átomo.

### 1.1 El átomo de Demócrito

El concepto de que *los materiales están constituidos por diminutas partículas discretas* tuvo su origen en los filósofos griegos. En el siglo IV a.C. *Leucipo y Demócrito* expresaron la idea de que toda *la materia estaba formada por muchas partículas pequeñas e indivisibles* que llamó *átomos* "sin división" basando su esquema en las siguientes premisas:

1. Todo el Universo está hecho de tan sólo átomos y vacío.
2. Los átomos son partículas de materia increíblemente pequeñas, y por lo tanto invisibles.
3. Los átomos son indivisibles, indestructibles, eternos e intercambiables.
4. Hay una inmensa cantidad de clases de átomos distintos.
5. Los átomos pueden combinarse para formar todo lo que percibimos a nuestro alrededor.

Sin embargo, *el propósito de esta teoría no consistía en explicar fenómenos particulares* o cierto conjunto de observaciones, sino de dar una visión general del funcionamiento del universo que permitiera entender el cambio y la permanencia como tales.

### 1.2 Átomos y Electrones

Hasta los años 1802 – 1803 las ideas de estos pensadores, no recibieron la interpretación, más cuantitativa, que era necesaria para el desarrollo de la Teoría Atómica Moderna. En los años referidos, John Dalton, padre de la moderna teoría atómica, enunció los postulados en los que se resumía la conocida *Teoría Atómica de Dalton*.

1. Los materiales están formados por partículas extremadamente pequeñas denominadas átomos.
2. Todos los átomos de un mismo elemento son idénticos, particularmente tienen la misma masa.
3. Los átomos de un elemento son diferentes a los átomos de todos los demás elementos, particularmente difieren en la masa.
4. Los compuestos están formados por átomos de más de un elemento.



5. En cualquier reacción química, los átomos se combinan en proporciones numéricas simples.

Si A y B son dos elementos distintos ellos pueden combinarse entre sí según relaciones simples. Un átomo de A se combina con un átomo de B o dos átomos de A se combinan con tres átomos de B, etc.

La importancia fundamental de los pensamientos aportados por Dalton es indiscutible, más allá que *muchos de ellos no son ciertos en su esencia*, a la luz de los conocimientos de la actualidad. *La hipótesis de Dalton no podía someterse a verificación directa*, pero respondían a los hechos experimentales vigentes en su época, las Leyes Gravimétricas de Lavoisier y Proust fundamentalmente, y tuvieron influencia sobre el pensamiento químico durante más de un siglo.

Para recordar:

#### LEY DE LAVOISIER

En un sistema cerrado, sin intercambio con el exterior, la masa contenida en él permanece constante aunque se produzcan reacciones químicas en su interior. Esta ley fue enunciada por el químico francés Antoine Laurent Lavoisier en 1789. Y su expresión matemática se puede escribir de la siguiente forma:

$$m_{inicial} = m_{final}$$

#### LEY DE PROUST

Cuando dos o más sustancias se combinan para formar un compuesto, lo hacen siempre en proporciones de masa definida y constante. Esta ley fue enunciada por el químico francés Joseph Louis Proust en 1801. Y se puede expresar matemáticamente de la siguiente manera: si A se combina con B entonces

$$\frac{m_A}{m_B} = cte$$

En 1808 Gay-Lussac descubre, que cuando se forma cloruro de hidrógeno, antiguamente conocido como ácido muriático, a partir de hidrógeno y cloro, todos ellos en estado gaseoso, se encuentra que:

1 Volumen de cloro + 1 Volumen de hidrógeno = 2 Volúmenes de cloruro de hidrógeno

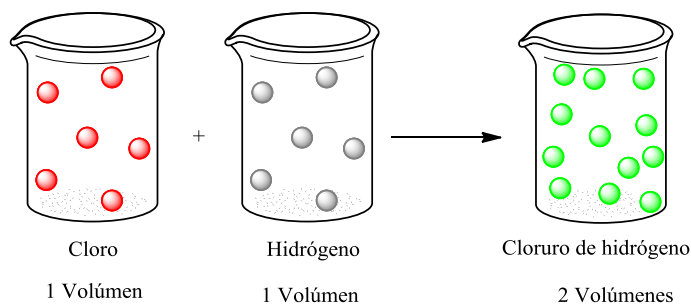


Figura. 1-1 Representación de la combinación de volúmenes según Gay-Lussac



Los volúmenes de los dos gases que reaccionan y los del producto de la reacción se encuentran en la razón más simple de 1 a 1 a 2. Análogamente, cuando el hidrógeno y el oxígeno reaccionan para formar vapor de agua:



Aquí también las razones de los volúmenes son números enteros simples.

La **Ley de Gay-Lussac** de la combinación por volumen **es estrictamente válida cuando se aplica a compuestos relativamente sencillos**, si se realiza con sustancias más complejas se observan excepciones solo aparentes.

Si se realizara la combustión completa del gas butano con oxígeno, en observaría que 2 volúmenes de butano requerirían 13 volúmenes de oxígeno para dar 18 volúmenes de producto en estado gaseoso en iguales condiciones de presión y temperatura.  
Difícilmente puede aceptarse que 2:13:18 son razones simples.

La Ley, que únicamente se aplica a reacciones en medio gaseoso, establece que **cuando dos gases se combinan químicamente lo hacen en proporciones simples de volumen**; además, **el volumen de los productos gaseoso guarda también una razón simple con el de los gases reaccionantes**.

Para resolver las discrepancias entre la Teoría Atómica de Dalton y los resultados experimentales de Gay Lussac, en 1811 el físico italiano **Amadeo Avogadro** supuso que **la mínima partícula posible de un gas simple, en su estado libre, no es el átomo sino la molécula**. Cada molécula de dichos gases está compuesta por dos átomos del elemento, moléculas diatómicas, y no por átomos sencillos como imaginaba Dalton.

De acuerdo con la Teoría Molecular de Avogadro, los gases simples poseen moléculas diatómicas, esta teoría puede resumirse en los siguientes postulados:

1. La materia está formada por partículas muy pequeñas y en continuo movimiento, formadas por uno o más átomos que pueden ser iguales o diferentes entre sí, llamadas moléculas.
2. Una sustancia simple tiene todas sus moléculas iguales, formadas a su vez por átomos del mismo elemento.
3. Las sustancias compuestas están formadas por moléculas iguales entre sí. Las moléculas de las sustancias compuestas están formadas por átomos de diferentes elementos.
4. Las transformaciones físicas no afectan a las moléculas, por lo tanto éstas durante un cambio físico no varían ni en número ni en clase.
5. Las transformaciones químicas afectan a las moléculas, por lo tanto éstas durante un cambio químico varían en número y clase. Sin embargo no varía el número y clase de los átomos durante la transformación.



6. Volúmenes iguales de cualquier gas, medidos en las mismas condiciones de presión y temperatura tienen el mismo número de moléculas.

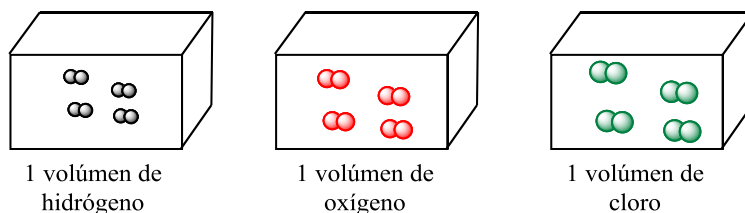


Figura. 1-2 Comparación de volúmenes de cualquier gas con la cantidad de partículas en las mismas condiciones de presión, volumen y temperatura

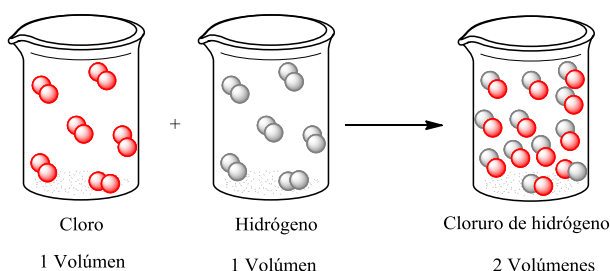


Figura. 1-3 Representación de la combinación de volúmenes según la Teoría Molecular de Avogadro

### 1.2.1 El electrón

#### Trabajo de Búsqueda Bibliográfica

Buscar información de los siguientes términos y vincular su importancia con los trabajos realizados por Michael Faraday al desarrollar las Leyes Fundamentales de la Electrólisis.

Descomposición electrolítica – El agua como disolvente electrolítico – Electrólisis de una solución salina acuosa.

A medida que fue transcurriendo el siglo XIX, esta idea vinculada a la existencia de partículas elementales más simples que el átomo, fue afirmándose, particularmente después de los trabajos de Michael Faraday, entre los años 1832 y 1833, donde se dan a conocer su descubrimiento experimental de las Leyes Fundamentales de la Electrólisis.

#### Para recordar:

1. La masa de una sustancia producida en la electrolisis por una reacción anódica o catódica es directamente proporcional a la cantidad de electricidad que pasa por la celda electrolítica
2. Las masas de diferentes sustancias producidas por la misma cantidad de electricidad son proporcionales a los pesos equivalentes de las mismas.





Luego de reflexionar sobre los trabajos realizados por Faraday, el **Dr. Johnstone Stoney**, expone en 1874, que **la electricidad está compuesta por unidades discretas de carga, asociadas a los átomos** que componen los materiales.

En 1891 Stoney insistió sobre este punto y sugirió el nombre de **electrón** para la **supuesta unidad de la electricidad**.

En el año 1879, **Sir William Crookes**, **estudió** en dispositivos llamados "Tubos de descarga en gases", **el comportamiento de los gases cuando son sometidos a presiones cercanas al vacío, y a la acción de una descarga eléctrica** producida al aplicar sobre los mismos un potencial elevado.



Figura. 1-4 Tubo de Crookes

Cuando a un tubo de vidrio que contiene gases se le aplica una diferencia de potencial de 10.000v, no se produce una descarga eléctrica hasta que gran parte del gas haya sido extraído del tubo. Ésta, empieza a tener lugar cuando la presión en el interior del tubo alcanza el orden de los 0,013atm.

#### Trabajo de Búsqueda Bibliográfica

Buscar información de los siguientes términos y vincular su importancia con los trabajos realizados por Crookes, Perrin y Thomson para la caracterización del electrón.

Campo Eléctrico – Campo magnético



La naturaleza de la **descarga**, que va acompañada por **emisión de luz** por el gas del tubo, cambia cuando la presión llega a ser inferior. Para valores de  $1,3 \times 10^{-3}$  atm, aparece en las proximidades del cátodo una zona oscura denominada "**espacio oscuro de Crookes**", mientras que se observan estriaciones en el resto del tubo.

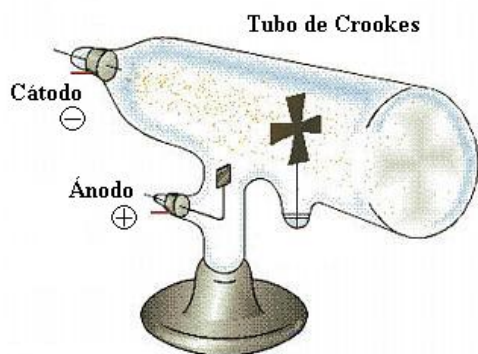


Figura. 1-5 Experimento utilizado para demostrar la existencia de los rayos catódicos

A **presiones aún menores**, el espacio de oscuro aumenta su superficie hasta que a  $1,3 \times 10^{-5}$  atm **cubre la totalidad del tubo**. A esta presión, los restos del gas contenidos en el tubo **no producen luz**, pero **el vidrio del tubo fluoresce**<sup>1</sup> con una débil luz verdosa. Al colocar un objeto dentro del

tubo se observó que se proyecta la sombra del mismo sobre el vidrio, el cual fluoresce excepto en la región sombreada. Debido a que la sombra se proyectaba en la superficie enfrentada al cátodo, se concluyó que éste fenómeno estaba conformado por una serie de rayos que viajan del cátodo hacia el ánodo y que eran capaces de hacer fluorescer el vidrio y se los denominó **Rayos Catódicos**.

**Jean Perrin** demostró en 1895 que estos **rayos catódicos** están formados por **partículas cargadas negativamente**. Para ello introdujo en el tubo de Crookes una placa con una rendija, con el fin de aislar un único haz de rayos catódicos. También colocó en su interior una pantalla fluorescente y al acercar un imán en la proximidad del tubo, de manera tal que el campo generado por el imán sea perpendicular a la dirección de propagación de los rayos, observándose que el haz de rayos era desplazado en la dirección correspondiente a la presencia de la carga negativa en las partículas.

<sup>1</sup> Fluorescencia: propiedad de algunos materiales de emitir radiaciones al recibir un estímulo luminoso

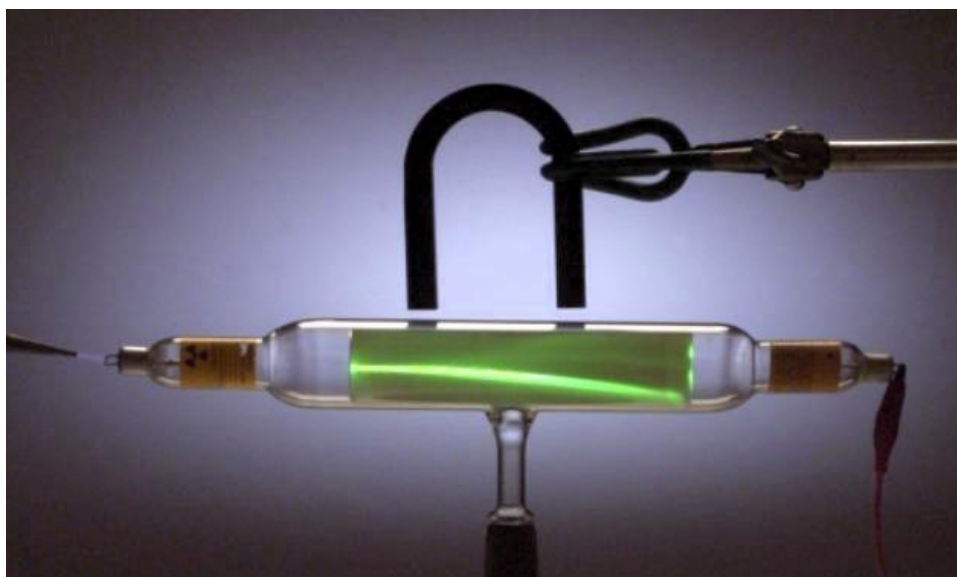


Figura. 1-6 Experimento de Perrin para demostrar que los rayos catódicos poseen carga negativa

Sin embargo, la magnitud de esta desviación no era suficiente para determinar la relación de carga-masa de estas partículas ya que no se conocía la velocidad con la que trasladaban las mismas.

**Los rayos catódicos son un haz de partículas negativas que se mueven a gran velocidad, se desplazan con trayectorias rectilíneas y producen fluorescencia.**

En 1897 J.J. Thomson llevó a cabo un experimento en el cual los rayos catódicos se someten a las acciones de un campo magnético y un campo eléctrico.

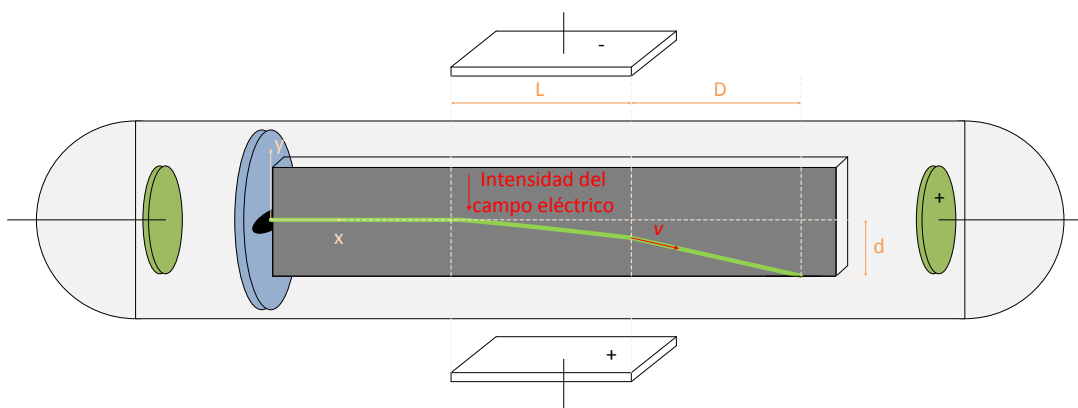


Figura. 1-7 Experimento realizado por Thomson

A través de lo observado por Perrin, Thomson utiliza un campo eléctrico y un campo magnético de forma tal que se compensen ambos campos y que la desviación de los rayos catódicos sea nula.

**Matemáticamente podemos definir al campo magnético como  $B = H \cdot q \cdot v$**



donde  $H$  es la intensidad del campo magnético,  $q$  la carga de los rayos catódicos y  $v$  la velocidad con la que se trasladan los rayos. Análogamente podemos definir al campo eléctrico como  $F = E \cdot q$  donde  $E$  es la intensidad del campo eléctrico.

Según lo realizado por Thomson, igualar el campo eléctrico con el campo magnético de manera que los rayos catódicos no se desvíen se puede interpretar matemáticamente como:

$$\begin{aligned} B &= F \\ H \cdot q \cdot v &= E \cdot q \\ H \cdot v &= E \end{aligned}$$

$$1.1 \quad v = \frac{E}{H}$$

La ecuación 1.1 establece que se puede determinar la velocidad de los rayos catódicos si se conocen el campo eléctrico y magnético utilizado en el experimento.

De esta manera **Thomson pudo calcular la velocidad de los rayos catódicos** y observó que **dependían del voltaje** que había actuado en el tubo de Crookes, sin embargo todos eran del orden de  $5 \times 10^7 \text{ m/s}$ , es decir, aproximadamente la sexta parte de la velocidad de la luz.

Si eliminamos el campo magnético de nuestro sistema modificado de Crookes, la desviación de la partícula solo depende del campo eléctrico. Por lo tanto dentro de las placas cargadas que generan el campo eléctrico nuestro rayo catódico “siente” una fuerza similar a la gravitatoria que produce su desviación.

Por lo tanto podemos suponer que dentro de las placas la partícula que conforma al rayo catódico se comporta como en un movimiento curvilíneo uniforme de aceleración constante. En este caso la aceleración en lugar de estar dada por la gravedad, como utilizaron en física de segundo año, está dada por el campo eléctrico.

Al tratarse de un movimiento curvilíneo podemos descomponer el movimiento en los ejes  $x$  e  $y$ .

De esta manera podemos tratar que la partícula se mueve como un movimiento rectilíneo uniforme en el eje  $x$  y como un “tiro libre o caída vertical” en el eje  $y$ .

Eje $x$	Eje $y$
1.2 $a_x = 0$	1.3 $a_y = \frac{q \cdot E}{m}$



$1.4 v_x = v_0$	$1.5 v_y = a_y \cdot t$
$1.6 x = v_0 \cdot t$	$1.7 y = \frac{1}{2} \cdot a_y \cdot t^2$

**Si reemplazamos 1.2 en 1.7 obtenemos**

$$1.8 y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m} \cdot t^2$$

**De 1.6 podemos definir qué**

$$1.9 t = \frac{x}{v_0}$$

**y así utilizar 1.9 en 1.8 quedando**

$$1.10 y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m} \cdot \left( \frac{x}{v_0} \right)^2$$

$x$  representa a la distancia que recorre la partícula, en este caso la partícula recorre una distancia igual al largo de la placa que genera el campo eléctrico, si definimos al largo de la placa como  $L$  entonces 1.10 se puede reescribir como:

$$1.11 y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m} \cdot \frac{L^2}{v_0^2}$$

Una vez que la partícula que compone al rayo catódico sale de las placas, mantiene la velocidad inicial como la última velocidad tangencial adquirida. Por lo tanto la expresión física de su recorrido equivale a la de un movimiento rectilíneo uniforme.

$$1.12 y = y_0 + v \cdot t$$

Como  $y_0$  es la posición inicial en la que la partícula sale orientada desde el eje  $y$  podemos considerar que la misma es la posición  $y$  determinada en la ecuación 1.11 por lo tanto podemos reescribir 1.12 como:

$$1.13 y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m} \cdot \frac{L^2}{v_0^2} + v \cdot t$$

Además la velocidad  $v$  sabemos que es la velocidad tangencial de la partícula es decir que vectorialmente  $v$  se puede reescribir como

$$1.14 \frac{v_y}{v_x} \cdot v_0$$

**Utilizando 1.14 en 1.13 obtendremos que**

$$1.15 y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m} \cdot \frac{L^2}{v_0^2} + \frac{v_y}{v_x} \cdot v_0 \cdot t$$

También podemos reemplazar 1.4, 1.3, 1.5, 1.9 en 1.15 y nos queda que la posición va a estar dada por



$$y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m} \cdot \frac{L^2}{v_0^2} + \frac{\frac{q \cdot E}{m} \cdot \frac{x}{v_0}}{v_0} \cdot v_0 \cdot \frac{x}{v_0}$$

$$y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m} \cdot \frac{L^2}{v_0^2} + \frac{q \cdot E}{m \cdot v_0^2} \cdot x^2$$

$$y = \frac{1}{2} \cdot \frac{q \cdot E}{m \cdot v_0^2} \cdot L^2 + \frac{q \cdot E}{m \cdot v_0^2} \cdot x^2$$

$$1.16 \quad y = \frac{q \cdot E}{m \cdot v_0^2} \left( \frac{1}{2} \cdot L^2 + x^2 \right)$$

Si llamamos  $D$  a la distancia que recorre la partícula sobre el eje  $x$  hasta chocar con la pantalla fluorescente y llamamos  $d$  a la distancia análoga sobre el eje  $y$  entonces podemos reescribir la ecuación 1.16 como:

$$1.17 \quad d = \frac{q \cdot E}{m \cdot v_0^2} \left( \frac{1}{2} \cdot L^2 + D^2 \right)$$

Finalmente todos los datos son medibles ya que depende de las posiciones, el largo de las placas, la intensidad del campo eléctrico y la velocidad inicial de la partícula que fue determinada en el ítem 1.2 excepto la relación carga masa que puede ser despejada.

$$1.18 \quad \frac{q}{m} = \frac{d \cdot \frac{v_0^2}{E}}{\frac{1}{2} \cdot L^2 + D^2}$$

Sabiendo la velocidad de los rayos, Thomson **pudo determinar la relación carga-masa de los mismos**, variando el campo eléctrico o magnético y midiendo la desviación del haz producida independientemente. De estos experimentos obtuvo que la relación carga-masa de ésta partícula vale  $1,76 \times 10^{11} \text{ C/kg}$  y este valor es constante sin importar la naturaleza del gas con el que se llene inicialmente el tubo de Crookes al igual que al cambiar los metales que conformaban los cátodos y ánodos. Por lo tanto éste experimento convenció a Thomson de que **estas partículas constituyen una forma de materia diferente de las formas ordinarias de la misma**.

Thomson comparó este valor de  $\frac{q}{m}$  con el obtenido por electrólisis, por lo tanto, se consideró correcta la suposición de Stoney de que una carga elemental está asociada con cada átomo de hidrógeno, y la comparación de las relaciones de masas establece que:



$$\frac{1.76 \times 10^8 \frac{C}{g_e}}{9.65 \times 10^4 \frac{C}{g_{H_2}}} = 1824 \frac{g_{H_2}}{g_e}$$

Por lo tanto, *esta partícula que produce a los rayos catódicos es aproximadamente 1000 veces más chicas que un átomo de hidrógeno*, y a ésta *partícula fundamental de carga negativa* Thomson la denominó *electrón*, como sugirió Stoney anteriormente.

La consecuencia tecnológica del descubrimiento de Thomson fue la invención del "Tubo de Rayos Catódicos" que se utilizaba en los televisores de tubo. Cada vez que el usuario ve un programa por televisión, debe darle las gracias a Thomson.

### 1.2.2 El modelo atómico de Thomson

Los *materiales*, desde el punto de vista eléctrico, *no son, en general, ni atraídos ni repelidos por electrodos cargados*. Esto pone de manifiesto que *los átomos* no tienen una carga eléctrica neta, es decir, que *son eléctricamente neutros*.

Sin embargo, a través del experimento realizado por Thomson se demostró que *todos los átomos contienen electrones* que, como hemos indicado, están cargados negativamente. En consecuencia, *los átomos deben contener en su estructura una carga positiva* suficiente, para contrarrestar y neutralizar, de esta forma, las cargas negativas de los electrones.

Thomson en 1904 sugirió que los electrones están dispersos en un material cargado positivamente, parecido a una gelatina que constituye al átomo, que imaginó como una esfera compacta, con densidad de carga y de masa homogéneas.



Figura. 1-8 Modelo Atómico de Thomson, conocido como el modelo del "pudín de pasas", por su semejanza con un postre tradicional inglés

## 1.3 Los rayos X y radiactividad

Wilhelm Röntgen, profesor de física de la Universidad de Würzburg, publicó en 1895 que *si la descarga de una bobina de inducción atraviesa un tubo de Crookes, y el mismo se recubre con una delgada lámina de cartón negro, se observa que si se coloca una pantalla fluorescente en el interior entre el tubo y el cartón, esta emite luz. Es decir, que se producen rayos que atraviesan el tubo* de Crookes. A estos rayos los denominó *Rayos X* y así demostró que eran *capaces de atravesar la materia* impenetrable a la luz ordinaria, y además capaces de *producir fluorescencia* en algunas sustancias, tales como el vidrio y la calcita.

Röntgen observó que una placa fotográfica era ennegrecida por la radiación, que los rayos no son desviados por un imán y que se manifiestan como procedentes de la región del tubo de vacío en la que inciden los rayos catódicos.



**Unas semanas después del anuncio de este gran descubrimiento, los rayos X fueron utilizados por los médicos para el reconocimiento de sus pacientes.**

Veinte años más tarde del descubrimiento de los rayos, cuando en 1912 se observó la difracción de los rayos X por los cristales, se confirmó que estos rayos se comportaban de manera similar a la luz ordinaria.



Figura. 1-9 Primer imagen de los huesos de la esposa de Röntgen, que prueban la existencia de los Rayos X.

Poco después de este descubrimiento, **Henri Poincaré** sugirió que la **radiación X puede estar relacionada con la fluorescencia que manifiesta el vidrio** del tubo de Crookes, en la región en que se emiten los rayos X. Esta sugerencia estimuló al físico francés Henri Becquerel a investigar algunos minerales fluorescentes.

En el año 1896, **Becquerel** constató que muchas **sustancias**, como por ejemplo los minerales y las sales de Uranio, son **capaces de emitir rayos que impresionan una placa fotográfica**, aun cuando la misma esté protegida por una capa de papel negro. Este descubrimiento fue un resultado casi accidental.



Figura. 1-10 Electroscopio simple. Cuando se comunica una carga eléctrica al pan de oro y a su soporte, sus dos hojas divergen a causa de la repulsión entre cargas eléctricas iguales.

Estudios subsiguientes demostraron que todos los **compuestos de Uranio** tenían la propiedad de **impresionar las placas fotográficas** con independencia de la fluorescencia, de la fosforescencia<sup>2</sup> o del estado físico.

Poco tiempo después se comprobó que algunos compuestos del elemento Torio poseían esta propiedad.

Todas estas **sustancias** han sido denominadas **"radioactivas"**, debido a la propiedad de **emitir espontáneamente radiaciones** que presentan. Además observó que la radiación producida por estos compuestos podía, al igual que los rayos X, descargar un electroscopio al ionizar el aire y hacerlo conductor.

El estudio sistemático de los minerales de Uranio, realizado por **Marie Curie**, con la colaboración de su esposo **Pierre Curie**, indicó que alguno de ellos, como el Uranio natural o la pechblenda emitían radiaciones de mayor intensidad, que los correspondientes al Uranio puro. Pensaron, entonces, que el mineral debía contener un material de actividad radioactiva mayor que el Uranio. De esta manera **descubrieron** otros dos **elementos, fuertemente radioactivos, el Polonio y el Radio**.

Estudios posteriores realizados por los esposos Curie y otros investigadores, pusieron de relieve la existencia de propiedades radioactivas entre todos los elementos más pesados.

<sup>2</sup> Fenómeno en el cual ciertas sustancias tienen la propiedad de absorber energía y almacenarla, para emitirla posteriormente en forma de radiación.





Los primeros trabajos y las investigaciones vinculadas a las sustancias radioactivas, estaban fundamentalmente relacionados con la **cesión espontánea de energía** de las mismas y fueron realizados cuando no se conocía su relación con las estructuras atómicas. Sin embargo, el conocimiento desarrollado con esta propiedad de algunos elementos, constituyeron posteriormente los fundamentos de la actual Teoría Atómica y, a la luz de los resultados que estos investigadores obtuvieron, deben considerarse como extraordinariamente notables.

Becquerel también continuó estudiando las propiedades de esta nueva radiación, y aprovechó las preparaciones fuertemente radiactivas obtenidas por los Curie. Así en 1899, demostró que **la radiación del radio puede ser desviada por un imán**.

En 1899, Ernest Rutherford, físico neozelandés, quien trabajaba bajo la dirección de Thomson,

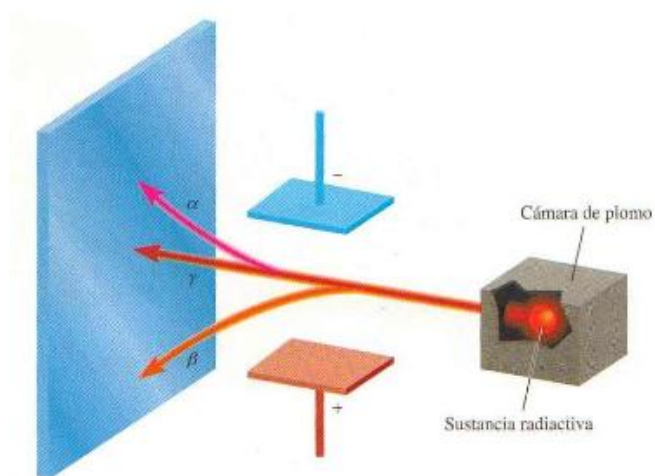


Figura. 1-11 Desviación de los rayos alfa y beta por acción de un

bloque de plomo, atraviesan un campo magnético intenso, con lo cual son desviados diferentemente, demostrando tener cargas eléctricas distintas.

### 1.3.1 Rayos $\alpha$

Son de **naturaleza corpuscular**, es decir, están formados por partículas que llevan dos cargas unitarias positivas y que tienen una masa relativa en la escala convencional de Masas Atómicas, de cuatro una. **Estudios posteriores** realizados por Rutherford, **demonstraron que son núcleos de átomos de Helio**. Pueden atravesar láminas de metal muy delgadas. Como tienen una masa relativamente grande y una elevada velocidad, son pocas las partículas  $\alpha$  que se desvían al atravesar un material y, por lo tanto, **tienen trayectorias esencialmente rectilíneas** de longitud definida que depende de su velocidad inicial.

La identidad entre las partículas alfa cargadas positivamente y los átomos de helio fue comprobada por Rutherford mediante un experimento en el cual hacía penetrar dentro de una cámara, a través de una lámina metálica, las partículas alfa, demostrando después la presencia de helio en la cámara. Además, pudo relacionar la cantidad de helio que existía en la cámara con el número de partículas alfa que habían atravesado la lámina.

dio a conocer que la radiación del uranio es, por lo menos, de dos tipos distintos, a los que llamó radiación  $\alpha$  y radiación  $\beta$ . A continuación un físico francés, P. Villard, anunció que también es emitida una tercera clase de radiación y la denominó radiación  $\gamma$ .

Los experimentos que demuestran la presencia de las **tres clases de rayos** están indicados en la [FIGURA. 1-11](#). Los rayos colimados al pasar por un estrecho orificio de un



### 1.3.2 Rayos $\beta$

Son de **naturaleza corpuscular**, es decir, están formados por partículas y **tienen carga negativa**. Consisten en partículas cargadas, que posteriormente se demostró, **son idénticas a los electrones**. A diferencia de las partículas  $\alpha$ , las  $\beta$  **no tienen velocidades definidas** y, **varían según el elemento emisor**, desde valores muy pequeños a un máximo que es característico de la sustancia emisora. Pueden atravesar láminas delgadas de Aluminio, de hasta 0,2 cm de espesor.

En 1899 el propio Becquerel descubrió que los rayos  $\beta$  podían ser deflectados por un campo magnético y lo hacían en la misma dirección de los electrones de Thomson. Convencido de que se trataba de las mismas partículas, usó la metodología de éste y encontró que la relación carga/masa de los rayos  $\beta$  era, en efecto, muy parecida a la de los electrones.

### 1.3.3 Rayos $\gamma$

Son rayos **sin carga eléctrica**, que no se desvían por campos eléctricos ni magnéticos. Son de **naturaleza electromagnética**, de longitud de onda muy corta, generalmente comprendida entre  $10^{-8}$  y  $10^{-11}$  cm. En lo que respecta a sus propiedades generales, **no existen casi diferencias entre los rayos  $\gamma$  y los rayos X**, excepto posiblemente en sus energías. Debido a esta semejanza con los rayos X, **pueden penetrar considerables distancias**, aún de materiales muy densos. Son muy penetrantes y, la exposición de organismos vivos a ellos, puede provocar daños importantes, si es prolongada. Posteriormente, los rayos  $\gamma$  fueron utilizados en el estudio de la estructura del átomo.

## 1.4 El átomo Nuclear

### 1.4.1 La carga del electrón

Algunos años después de los trabajos de Thomson, otros investigadores, especialmente el norteamericano **Robert Millikan**, diseñaron diversos experimentos para **medir** la **masa** y la **carga** del **electrón** por separado.

Como se conoce la relación  $\frac{q}{m}$  del electrón, es posible calcular su masa si se determina la carga del mismo. El método empleado por Millikan para la determinación de la carga transportada por un electrón, se basa en el hecho de que si se forman gotas muy pequeñas de un líquido, que puede ser agua o aceite, en un espacio que contiene partículas cargadas, las mismas tienden a "adosearse o pegarse" a las pequeñas gotas, transfiriéndoles, entonces, su carga.

**La carga que transporta la gota será positiva o negativa, de acuerdo a la partícula que se adose a ella.** Sin embargo, **la magnitud de la carga debe ser un múltiplo entero de la carga electrónica unitaria**. En la mayoría de los casos, cada gota de líquido transporta una carga unidad, pero algunas pueden transportar dos o más de tales cargas.



En algunas de las primeras experiencias, se obtenía, por expansión brusca de aire saturado con vapor de agua, una niebla que consistía en pequeñas gotas de agua cargadas eléctricamente. Una niebla de esta especie cae con velocidad constante bajo la influencia de la gravedad. Se obtienen resultados más exactos siguiendo el comportamiento de una sola gota en lugar de hacerlo con toda la nube.

Millikan, **para evitar errores por la evaporación del agua**, introdujo en su lugar, el **uso de aceite**.

Si  $v_1$  es la velocidad de descenso de una sola gota que cae en el aire,  $w$  es la masa de la gota y  $g$  es la aceleración de la gravedad,  $v_1$  será proporcional a  $w \cdot g$ . Supongamos que le aplicamos un campo eléctrico de intensidad  $E$  que produce la variación de la velocidad de descenso de la gota, la fuerza que actúa ahora sobre la misma, es  $E_\varepsilon = \pm w \cdot g$ , donde  $\varepsilon$  es la magnitud de la unidad de carga, el signo + indica que el campo ayuda a la gravedad y el signo - que se opone a la misma.

La velocidad uniforme de caída  $v_2$  de la gota, en estas condiciones, es de esta manera, proporcional a  $E_\varepsilon = \pm w \cdot g$  y, por lo tanto, resulta que:

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{w \cdot g}{E_\varepsilon \pm w \cdot g}$$

Los valores de  $v_1$  y  $v_2$  pueden determinarse por observación de la gota, la fuerza del campo  $E$  es conocida, al igual que  $g$ , por lo tanto, la determinación de la carga electrónica a partir de la ecuación anterior sólo requiere el conocimiento de la masa  $w$  de la gota.

Para determinar la masa de la gota se aplica la Ley de Stokes, de acuerdo a la cual la velocidad uniforme  $v$  de una gota esférica de radio  $r$  y de densidad  $\delta$ , que cae bajo la influencia de la gravedad a través de un gas de viscosidad  $\eta$ , está dada por la siguiente ecuación:

$$v = \frac{2 \cdot g \cdot r^2 \cdot \delta}{9 \cdot \eta}$$

En este caso el valor  $v$  de la expresión matemática anterior, es el mismo que  $v_1$ , es decir, la velocidad de descenso de la gota bajo la acción de la gravedad solamente. Si la viscosidad del aire y la densidad de la gota son conocidas, puede determinarse el radio de la gota. Al suponer que las gotas son esféricas, el volumen de cada una es  $\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^2$  y, de esta manera, la masa de la gota  $w$ , es

igual al producto de este volumen por la densidad del líquido que compone la gota:

$$w = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^2 \cdot \delta$$

De esta manera se dispone de todos los datos necesarios para determinar la carga electrónica.



En un **recipiente** sumergido en un termostato para mantener **constante** la **temperatura**, que **contiene aire** a una **presión constante** regulada por una bomba. Mediante un **atomizador** se puede introducir una fina **lluvia de gotas de aceite**.

La **placa (+)** está **perforada** por un cierto número de pequeños orificios, similares al indicado como **orificio pequeño**, se **conecta** a los terminales de una **batería de alto voltaje**. La **placa (-)** se conecta **a tierra**.

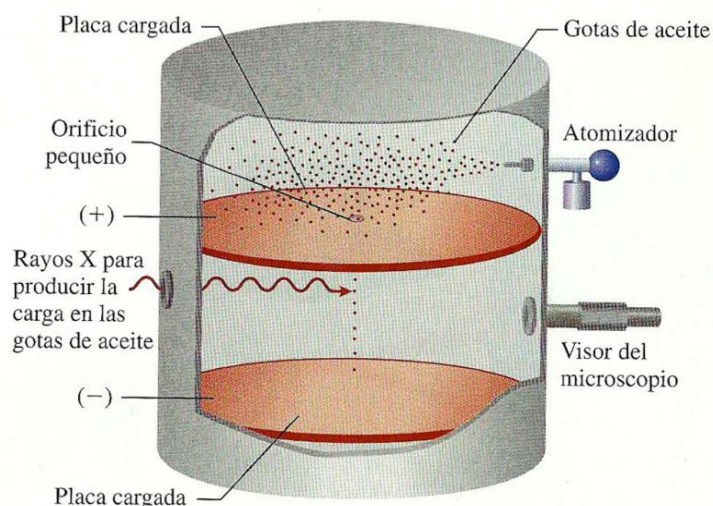


Figura. 1-12 Experimento de Millikan

Cuando una **gota** de aceite entra al **espacio** comprendido **entre las placas (+) y (-)**, al pasar a través de uno de los orificios, se **ionizaba el aire** a través de su **exposición a los rayos X**.

Al unirse a un ion gaseoso, **la gota de aceite se carga** y se la puede **mover hacia arriba o hacia abajo**, de acuerdo con el **signo de la carga** y el **sentido del campo eléctrico**, el cual puede invertirse de acuerdo a la

voluntad del experimentador.

Los resultados más seguros se obtuvieron cuando la gota se mueve hacia arriba.

La **velocidad** de ascenso o descenso de la gota **se mide por observación con un microscopio**, cuya iluminación se logra mediante un poderoso haz de luz que pasa a través del visor del microscopio. **Desconectando** la batería **se puede determinar la velocidad de descenso** bajo la sola acción de la gravedad.

En el desarrollo de los experimentos con la gota de aceite, pudo determinarse que si bien la velocidad de caída de la gota bajo la influencia de la gravedad es siempre constante, la velocidad de ascenso al aplicar el campo eléctrico, no era necesariamente la misma en todos ellos. Pudo explicarse esta observación en el hecho de que la gota no siempre transporta la misma carga. Sin embargo, cuando se calculan los **valores de las cargas** resulta que los mismos **son siempre un múltiplo entero exacto de una cantidad definida**, que se tomó como la **carga de un electrón** (carga electrónica unitaria).

La carga eléctrica del electrón, determinada de esta manera, es  $1,60 \cdot 10^{-19}C$ , donde C es la abreviatura de la unidad de carga del Sistema Internacional (SI), es decir, el culombio. Podemos considerar que este valor numérico es la "unidad de Carga" del electrón. Entonces nos referiremos a una unidad de carga negativa. Conocido el valor de la carga específica y de la carga del electrón es posible determinar la masa del mismo. Aproximadamente, hacia el año 1910, se sabía que la masa del electrón es de sólo  $9,11 \cdot 10^{-28}g$ .



El procedimiento más exacto para la determinación de la carga del electrón depende de un principio enteramente diferente, que implica el conocimiento de dos constantes: el faraday ( $2,8929 \text{ ues}$ ). También es  $96.496 \text{ coulomb}$ , que se expresa en ues multiplicando por  $2,998 \times 10^9$ , que se puede considerar como la carga total de todas las moléculas de 1 mol, si cada una transporta una unidad de carga, y el Número de Avogadro ( $6,0232 \times 10^{23}$ ), que es el número de moléculas que hay en 1 mol.

Resulta entonces que, la carga del electrón es igual al valor del faraday  $F$  dividido por el Número de Avogadro  $N_A$ , por lo tanto:

$$q = \frac{F}{N_A} = \frac{2,8928 \times 10^{14} \text{ ues}}{6,0232 \times 10^{23} e} = 4,8029 \times 10^{-10} \text{ ues}/e$$

Este es el valor que se acepta generalmente en la actualidad.

### 1.4.2 El átomo nuclear

Rutherford encargó a dos de sus discípulos, Hans Geiger y Ernest Marsden, que realizaran un experimento por él diseñado, con el objeto de que Marsden se familiarizase con un componente de un aparato.

**Geiger y Marsden** dispararon **partículas  $\alpha$**  para que atravesasen una **placa** muy delgada **de Oro** (Au), casi del espesor de un hoja delgada de papel, de manera que en el mismo sólo hay unos pocos átomos de este elemento. También trabajaron con láminas de Platino (Pt), Plata (Ag) y Cobre (Cu). Observaron detenidamente las posiciones de los **destellos producidos** en los puntos de la **pantalla de sulfuro de cinc** (ZnS) en los que habían chocado las partículas.

Puesto que creían que los átomos, de acuerdo al modelo de Thomson, eran esferas formadas por una masa gelatinosa positiva en la que estaban los electrones, ambos **esperaban que los rayos  $\alpha$  siguiesen una trayectoria recta a través de la lámina, ya que al encontrarse con una densidad de carga positiva homogénea, la interacción con los mencionados rayos, en cada instante, debía compensarse**. Como resultado de esto, era de esperar, que las partículas  $\alpha$  no experimentarían desviaciones en su trayectoria.

Lo que pudieron observar, como se muestra en la **FIGURA. 1-13**, después de realizar la experiencia propuesta por Rutherford, los dejó totalmente sorprendidos. Aunque la mayoría de las partículas  $\alpha$  sólo presentaban una ligera desviación en su trayectoria, aproximadamente 1 de cada 20.000 presentó más de  $90^\circ$  de desviación. **Una proporción**, bastante más baja que

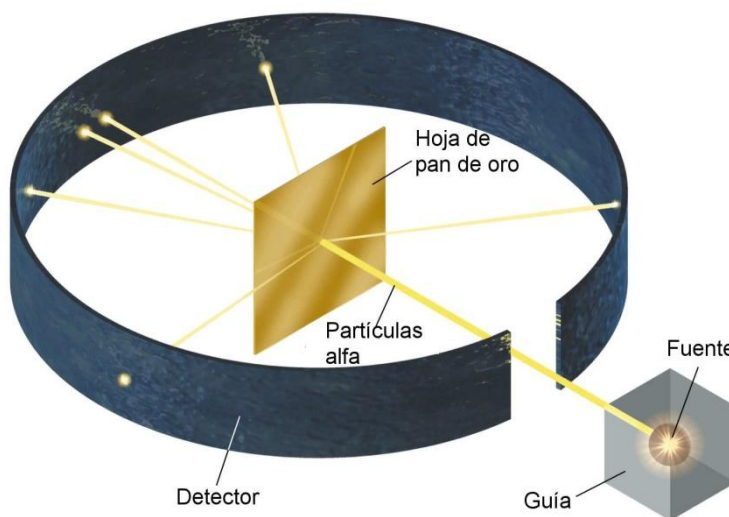
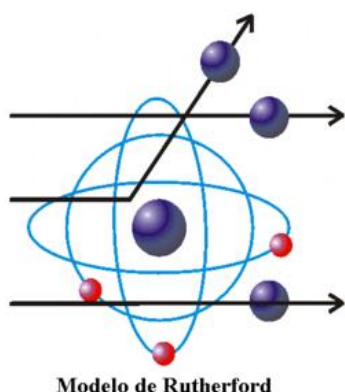


Figura. 1-13 Experimento de Rutherford, Geiger y Marsden



la anterior, *se desviaron 180°*, es decir, *cambiaron de sentido y retrocedieron hacia su punto de partida*. Ante estos resultados, Rutherford expresó: *"Es casi increíble. Parece como si hubieses disparado un proyectil de 15 pulgadas contra un fragmento de papel de seda y el mismo hubiese retornado al punto de origen y te hubiese alcanzado"*.

La explicación tenía, necesariamente que ser, que los átomos y las partículas que éstos componían, no eran glóbulos de gelatina, sino que son partículas duras que pueden rebotar unas contra las otras.



Modelo de Rutherford

Figura. 1-14 Explicación de las observaciones experimentales de Rutherford

Rutherford sugirió una estructura denominada "átomo nuclear", para explicar los resultados obtenidos en su experimento.

Propuso que *toda las carga positiva*, y *la mayor parte de la masa* del átomo, *están concentrados* formando una aglomeración muy pequeña, el *núcleo atómico*, y que los *electrones*, muy *separados unos de otros*, *se mueven alrededor de él, a distancias relativamente grandes* y en un número tal que *coincidan con el número de unidades de carga positiva* que lleva el núcleo, dando así un átomo eléctricamente neutro. Según el Modelo de Rutherford, como sucede en el sistema solar, *la mayor parte del átomo está vacía* y el núcleo representa el Sol y los electrones a los

planetas.

La idea de Rutherford, explica los resultados obtenidos por Geiger y Marsden. Las *partículas  $\alpha$*  son *núcleos* muy pequeños de *átomos de Helio* (He), que pasan a través de átomos de Oro (Au), que en la mayor parte de su volumen están vacíos, a menos que choquen directamente con el núcleo de algún átomo de Oro. Esto sucede con muy baja probabilidad y por lo tanto la mayoría de las partículas  $\alpha$  no experimentan desviación alguna. Cuando alguna *choca directamente con el núcleo del átomo de Oro, la carga positiva de la partícula es repelida fuertemente por la carga positiva del núcleo de Oro y se desvía* notablemente.

La medición cuantitativa de los ángulos de desviación o deflexión aportan importantes datos sobre las cargas y los diámetros de los núcleos atómicos.

Si el átomo se equiparara a una cancha de fútbol, el núcleo sería como la punta de un alfiler situado en su centro.

En un experimento en el que se bombardea una placa de oro de  $5.000 \text{ \AA}$  de espesor, con partículas  $\alpha$ , de manera tal que penetraran una 1.000 capas de átomos, sólo 1 partícula de cada 100.000 era desviada. Entonces solo alrededor de 1 partícula de cada 100.000.000 sería dispersada por una capa sencilla de átomos.

Por lo tanto, el núcleo tiene un área transversal de  $1 \times 10^{-8}$  parte del átomo.



$$\frac{\phi_{\text{núcleo}}}{\phi_{\text{átomo}}} = \sqrt{\frac{1}{100.000.000}} = 1 \times 10^{-4} \text{ \AA}$$

Dado que el diámetro del átomo es del orden de los angstrom, el del núcleo vale aproximadamente del orden de  $1 \times 10^{-12} \text{ cm}$

Los cálculos demuestran que el valor del radio de un núcleo atómico es de  $10^{-13}$  a  $10^{-12} \text{ cm}$  aproximadamente. Los radios de los átomos son del orden de  $10^{-8} \text{ cm}$ , es decir, casi 100.000 veces mayores. Resulta, de este modo, evidente que el átomo debe tener una estructura relativamente "vacía". Por otra parte, se ha comprobado que el volumen real de los electrones y núcleos que constituyen los átomos no es más que  $10^{-12}$  de volumen total o efectivo observado para los átomos.

### 1.4.3 Las partículas positivas - "el protón"

El descubrimiento del electrón, unidad eléctrica negativa, condujo naturalmente a la búsqueda de la correspondiente unidad de carga positiva.

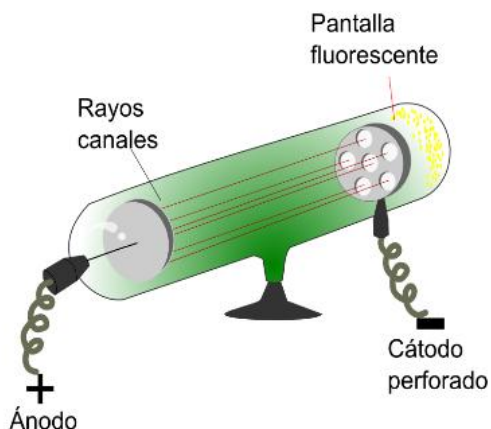


Figura. 1-15 Experimento donde se producen los rayos canales

En 1886 **Eugen Goldstein** descubrió que en los tubos de descarga en gases, en los que se producen los rayos catódicos, **también contienen rayos positivos** que consisten en una corriente de partículas cargadas positivamente, que se mueven en **sentido opuesto al de los rayos catódicos**, en trayectorias rectilíneas y que, también, **producen sombra y fluorescencia**. A los que Goldstein denominó **rayos positivos o canales**.

Una determinación de la relación  $q/m$  realizada en 1898 por Wilhelm **Wein**, demuestra que la **masa** de las mismas es mucho **mayor que la de los electrones**. En efecto, la partícula positiva más liviana que se ha descubierto de esta manera, tiene aproximadamente la misma masa que la del átomo de Hidrógeno. Una observación interesante es que esta **relación varía al variar los gases residuales** del tubo de Crookes.

Como conclusión de los experimentos realizados en 1918, donde Rutherford bombardea Nitrógeno (N) con partículas  $\alpha$ , obteniendo así oxígeno (O) y partículas de carga positiva.

Esta partícula es, probablemente, un **átomo de Hidrógeno que ha perdido su único electrón**, quedando así con una **carga positiva unitaria**. La misma se denomina **protón**, de acuerdo con lo propuesto por Rutherford en el año 1922.



El protón difiere fundamentalmente del electrón, porque éste último se puede considerar simplemente como una partícula material libre cargada en el sentido ordinario, mientras que el primero no.

**Rutherford realizó la primera transmutación nuclear obtenida de manera artificial.**

#### 1.4.3.1 Protones, neutrones y el Número Atómico (Z)

##### Trabajo de Búsqueda Bibliográfica

**Buscar información de los siguientes términos y vincular su importancia con los trabajos realizados por Moseley para la caracterización del electrón.**

**Espectros de emisión de rayos X – longitud de onda**

**Thomson demostró que un átomo contiene electrones. Rutherford planteó que estos electrones, en el átomo, rodean a un núcleo central cargado positivamente y muy pequeño en comparación con el tamaño del átomo. Los electrones se mueven alrededor de este núcleo y giran alrededor de su propio eje, como los planetas alrededor del Sol.**

Los físicos nucleares siguieron estudiando e investigando acerca de la existencia de otras partículas componentes del átomo.

Henry Moseley, un joven científico británico, fue el primero en medir los números atómicos con exactitud, poco antes de morir en acción durante la Primera guerra Mundial. Él sabía que cuando se bombardeaban materiales de diferentes elementos, utilizando electrones que se desplazan acelerados, los elementos emiten "Rayos X". Los mismos se comportan como ondas electromagnéticas, análogas a la luz, pero

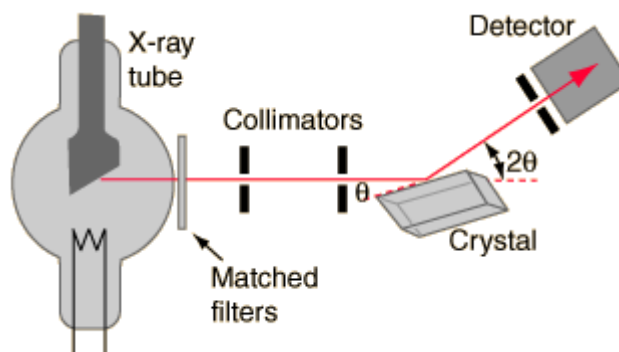


Figura. 1-16 Técnica de Bragg para estudiar la difracción de los rayos X por los cristales

de longitud de onda mucho menor. Son capaces de "atravesar" a muchas sustancias. Los rayos que constituyen la luz visible, tienen longitudes de onda comprendidas entre  $4 \times 10^{-5} \text{ cm}$  y  $8 \times 10^{-5} \text{ cm}$ , mientras que las longitudes de onda de los rayos X son del orden de  $1 \times 10^{-8} \text{ cm}$ .

El método más conveniente para obtener rayos X, como se observa en la FIGURA. 1-16, consiste en colocar una lámina metálica, denominada anticátodo<sup>3</sup>, en la trayectoria de los rayos catódicos, en un tubo de descarga en gases. En estas condiciones, el anticátodo emite rayos X. Las longitudes de onda de los rayos así emitidos, abarcan un intervalo bastante amplio, pero

<sup>3</sup> Electrodo de un tubo de Crookes, generalmente de wolframio, en donde incide el haz de electrones emitido por el cátodo y en el que se producen los rayos Roentgen o rayos X.





existen algunas cuya intensidad es mucho mayor que las del fondo general. Los valores de las mismas dependen del metal empleado como anticátodo, siendo bien definidas para cada elemento particular. Los rayos X correspondientes a un elemento dado se han denominado rayos X característicos del mismo.

Se ha podido demostrar, que los rayos X característicos se agrupan en un cierto número de series o grupos que se representan por las letras *K*, *L*, *M*, *N*, etc. El poder de penetración o "dureza" de estos rayos y sus longitudes de onda, aumentan en este orden. Para los elementos de Masa Atómica baja, se observan solamente miembros de las series *K* y *L*. A medida que la Masa Atómica aumenta, se pueden encontrar rayos X característicos de las series *M*, *N* y de las superiores. En cada grupo existen dos o más radiaciones características que se distinguen con las letras griegas  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , etc., utilizadas como subíndices, por ejemplo,  $K_{\alpha}$ ,  $K_{\beta}$ ,  $L_{\alpha}$ .

Con el objeto de estudiar los rayos X característicos de diversos elementos, Moseley, en el año 1913, utilizó como red de difracción cristales de ferrocianuro de potasio para determinar las longitudes de onda de los rayos X característicos de distintos elementos. Hacía incidir los rayos que emergían del cristal, en una placa fotográfica. De esta manera, la posición de la línea registrada en la placa, se podía relacionar con la longitud de onda de los rayos X característicos

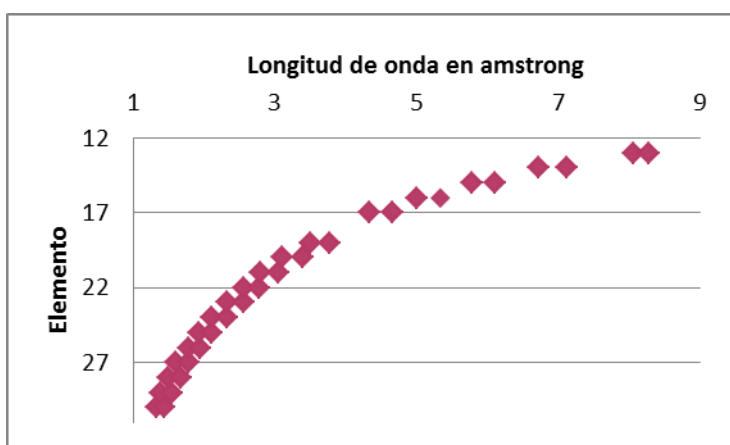


Figura. 1-17 Variación de la longitud de onda de las líneas de emisión de rayos X para distintos elementos

del elemento particular presente en el anticátodo.

No existe una relación inmediata entre la longitud de onda o la frecuencia, o sea, la velocidad de la luz dividida la longitud de onda, y la Masa Atómica Relativa de los elementos, como se observa en la FIGURA. 1-17. Sin embargo, Moseley encontró una relación sencilla entre las frecuencias de los rayos X

característicos y los números atómicos de los elementos respectivos.

Si  $\nu$  es la frecuencia de la radiación característica que pertenece a cualquier serie particular y  $Z$  es el número atómico del elemento que produce la radiación, entonces

$$\nu = a \cdot (Z - b)$$

Donde  $a$  es una constante de proporcionalidad y  $b$  tiene un valor definido para todas las líneas de una serie dada. Para los rayos  $K_{\alpha}$ , el valor de  $a^2$  es  $\frac{3}{4}R$ , donde  $R$  es el número de Rydberg en unidades de frecuencia y  $b$  es 1,0.



De acuerdo con la expresión matemática anterior, se debe obtener una línea recta cuando se representa gráficamente la raíz cuadrada de la frecuencia de los rayos X característicos de una determinada serie en función de los Números Atómicos de los elementos correspondientes. Esto se confirmó ampliamente, como puede observarse en el siguiente gráfico, [FIGURA. 1-18](#), cuyos valores son obtenidos experimentalmente:

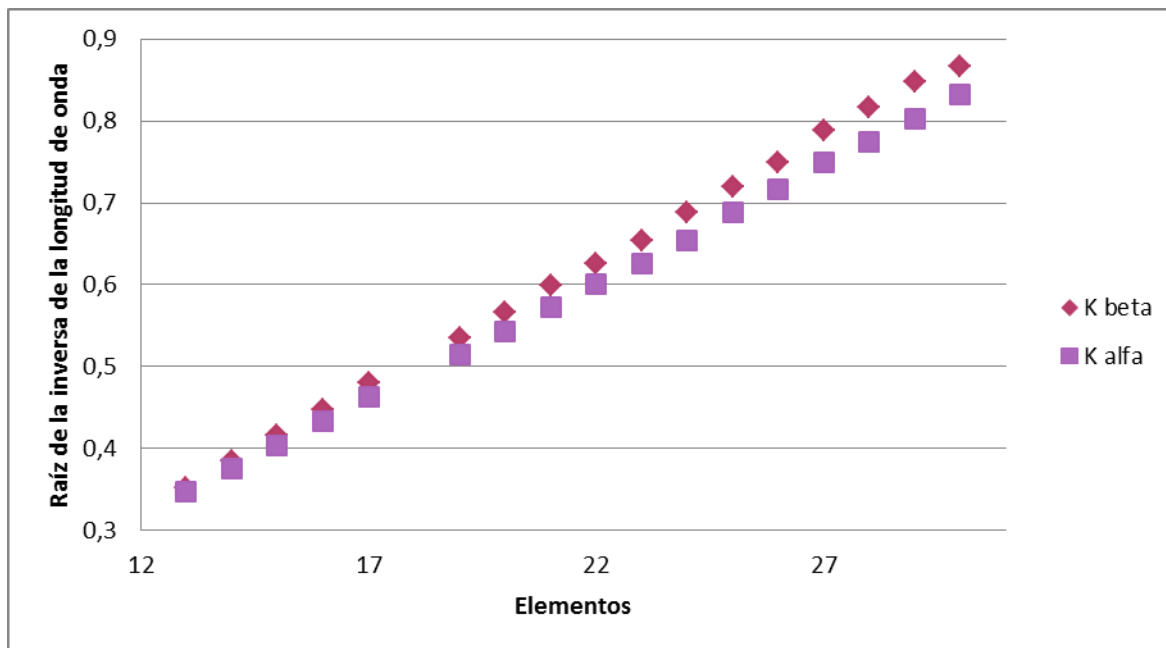


Figura. 1-18 Diagrama de Moseley de las líneas de rayos X

Se han observado, para ciertos elementos, algunas discrepancias que efectivamente tienen una importante interpretación teórica, pero en rasgos generales se satisface la relación dada entre la frecuencia de los rayos X característicos y el Número Atómico.

De esta manera, Moseley sugirió que el tipo de Rayos X emitidos por un determinado elemento, depende de su Número Atómico y, a partir de su experimentación con los Rayos X, determinó el valor de Z para muchos elementos.

Podemos concluir así que el Número Atómico de un elemento es una propiedad de significado fundamental, que está directamente vinculada con las propiedades específicas de los elementos.

En la actualidad se conoce el número atómico de todos los elementos. Se encuentran tabulados en la Tabla Periódica de los Elementos, en la parte superior del cuadro que representa a un elemento particular como se indica en la [FIGURA. 1-19](#).

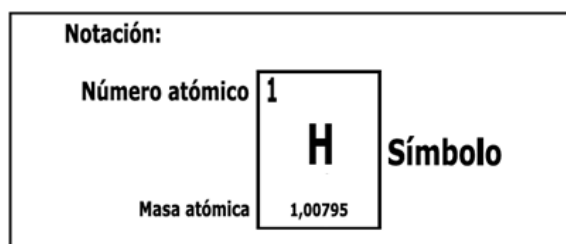


Figura. 1-19 Representación de un elemento en la Tabla

Como el átomo es eléctricamente neutro, y la carga del protón es igual en valor absoluto, pero de signo opuesto, a la del



electrón, es evidente que en el átomo coincide en número de protones con el número de electrones que giran alrededor del núcleo.

**A veces se usa como notación, indicar el Número Atómico de un elemento como sub – índice a la izquierda del símbolo químico del mismo.**



En 1920 Rutherford y otros investigadores habían propuesto que debería existir otro tipo de partícula subatómica en el núcleo. Según él, esta partícula podía originarse en un átomo de hidrógeno en el que el electrón habría caído al núcleo neutralizándolo eléctricamente.

La primera evidencia experimental de la existencia del neutrón fue observada por Walter Bothe y su alumno Herbert Becker en Alemania, aunque ellos no lo supieron interpretar como tal. En 1928, Bothe y Becker se interesaron por averiguar si las desintegraciones nucleares reportadas por Rutherford estaban acompañadas por algún tipo de radiación. En sus experimentos bombardeaban berilio con partículas  $\alpha$  que eran producto del decaimiento del polonio. Utilizando métodos eléctricos de detección, algo novedosos para su época, encontraron que efectivamente aparecía cierto tipo de radiaciones muy penetrantes que ellos interpretaron como rayos  $\gamma$ . Este tipo de radiaciones también aparecían al bombardear litio y boro. Lo más notable de su hallazgo era que, al determinar la energía de esas radiaciones, a

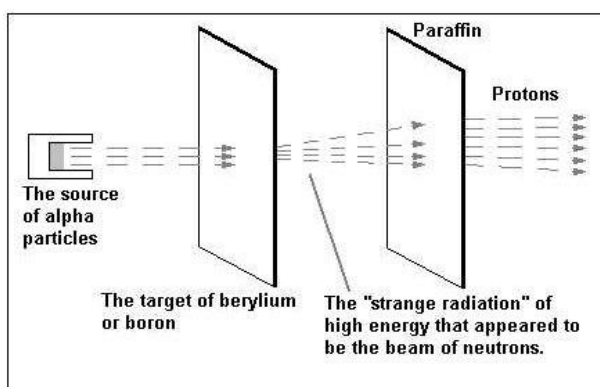


Figura. 1-20 Diagrama del experimento realizado por Joliot-Curie

través de su atenuación en diferentes materiales, concluyeron que ésta debería ser mayor que la energía de los  $\alpha$  incidentes, lo que fue interpretado vagamente como un efecto de la desintegración. Sin embargo, estos resultados intrigaron a la pareja francesa Irène Curie y Frederic Joliot.

Entre los primeros intereses científicos de la nueva pareja estuvieron los de reproducir y profundizar en los resultados de Bothe y Becker, utilizando una fuente muy poderosa de polonio. En enero de 1932, los Joliot-Curie descubren que, estas radiaciones eran capaces de expeler protones de una capa de parafina. Al tratar de medir la energía de estos protones encontraron que era enorme. Siguiendo la sugerencia de Bothe, calcularon que, si fuesen rayos  $\gamma$ , éstos deberían tener, al menos, diez veces más energía que los  $\alpha$  del polonio que los originaba. Tal resultado los llevó incluso a dudar sobre la conservación de la energía en los procesos de desintegración.

El mecanismo por medio del cual se suponía que la supuesta radiación  $\gamma$  arrancaba los protones de la parafina era un efecto predicho por Einstein en 1905 y confirmado por A. H. Compton en 1923.



**El efecto Compton, como se lo conoce, efecto había sido observado en la interacción entre rayos X y electrones, pero es igualmente válido para la dispersión de rayos  $\gamma$  por protones.**

Sin embargo, los protones son casi 2000 veces más pesados que los electrones, por lo que, para arrancarlos de un sólido, serían necesarios rayos  $\gamma$  de gran energía. Otro problema con esta interpretación era que, dado el número de protones observados, habría que suponer que la probabilidad de colisión entre los rayos  $\gamma$  y los protones de la parafina era millones de veces mayor a la que se esperaría de extrapolar el cálculo válido para el electrón.

Chadwick intuía que eran los neutrones los que estaban golpeando la capa de cera de parafina y extrayendo el hidrógeno. Curiosamente ya se había hecho un experimento similar en Cavendish, pero la fuente de polonio no era tan potente como la usada en el experimento de Joliot-Curie. Rápidamente empezó a trabajar en una réplica de este experimento.

Chadwick encontró que podían eyectar núcleos de nitrógeno de un polímero cianurado con energías considerables. Al repetir el cálculo de los Joliot-Curie, suponiendo todavía que se tratase de rayos  $\gamma$ , encontró que la energía necesaria para arrancar esos nitrógenos era casi el doble de la requerida para explicar el caso de los protones de la parafina. Sin embargo, si en lugar de rayos  $\gamma$  se suponía que se trataba de

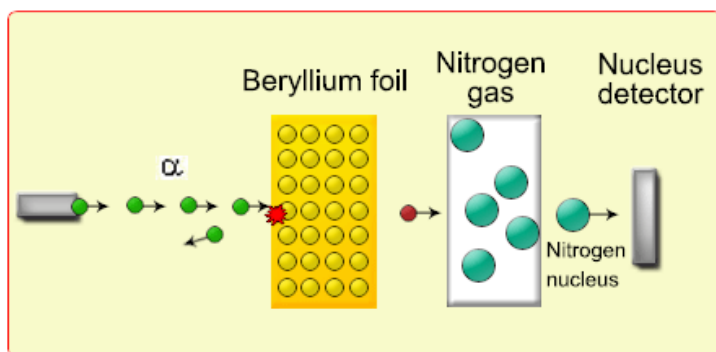


Figura. 1-21 Experimento de Chadwick

algun tipo de partícula, la masa que se deducía en ambos casos (protones de parafina y nitrógenos del polímero) resultaba ser consistentemente la misma y aproximadamente igual a la del protón. Por otro lado, la gran penetrabilidad de estas radiaciones implicaba que, de ser una partícula, ésta debería ser neutra.

El 27 de febrero de 1932, Chadwick reportó sus resultados, interpretándolos como evidencia de una nueva partícula neutra, a la que llamó neutrón, igual a la predicha por Rutherford doce años antes.

**El descubrimiento de Chadwick, sin embargo, no tuvo una repercusión inmediata en la concepción de la estructura del núcleo.**

Partícula	Símbolo	Carga	Masa (g)
Electrón	e	-1	$9,109 \times 10^{-28}$
Protón	p	+1	$1,673 \times 10^{-24}$
Neutrón	n	0	$1,675 \times 10^{-24}$

Tabla 1.1 Propiedades de las Partículas Subatómicas



Los elementos, en la Tabla Periódica Moderna están ordenados según los Números Atómicos. Las propiedades de los elementos, ordenados bajo este criterio, según los Números Atómicos crecientes, se repiten periódicamente. El carácter periódico de los elementos, es decir, la repetición cíclica de las propiedades al aumentar  $Z$ , es una de las características más notable de los materiales.

#### 1.4.4 El estudio de los isótopos

Las medidas precisas de las Masas Atómicas condujo a descubrimientos muy importantes en "nuestro viaje a través del tiempo" para intentar "descubrir" la naturaleza íntima de los átomos.

Otro de los postulados que fundamentaban la Teoría Atómica de Dalton era que "átomos del mismo elemento eran iguales y tienen las mismas propiedades, en particular tienen la misma masa". Por lo tanto para Dalton, como ya hemos establecido al estudiar su teoría, la masa del átomo era la propiedad que caracterizaba su comportamiento. En su época no se conocían métodos para medir las Masas Atómicas. Dalton intentó deducir las masas relativas mediante un conjunto de experimentos extremadamente ingeniosos basados en la masa de los elementos que se combinaban. De esta manera llegó a determinar que la masa de un átomo de Cobre es aproximadamente sesenta veces mayor que la de un átomo de Hidrógeno.

Posteriormente, se desarrolló uno de los métodos experimentales más importantes para el estudio de las masas atómicas y el descubrimiento de isótopos, a través del análisis de los rayos canales.

**En el año 1913, Thomson ideó un método, llamado "de la parábola", para determinar la carga específica de las partículas positivas de los rayos canales.**

Thomson afirmó que las partículas de masa 22 que se encontraban en el análisis correspondía a un elemento de propiedades semejantes a las del elemento Neón, que se encontraría formando parte de muestras del mismo. Pronto se pudo demostrar que estas afirmaciones no eran correctas y que se debían interpretar en el sentido de demostrar la existencia de un isótopo del elemento Neón de masa 22.

Posteriormente y, en forma casi simultánea, Dempster (en el año 1918) y Aston (en el año 1919) aplicaron un método diferente al usado por Thomson, denominado Espectrometría de Masas, para medir las masas de los átomos de manera más precisa.

Se alimenta, con átomos o moléculas del elemento (que puede ser un material gaseoso, como por ejemplo, el gas Neón, o bien el vapor de materiales sólidos o

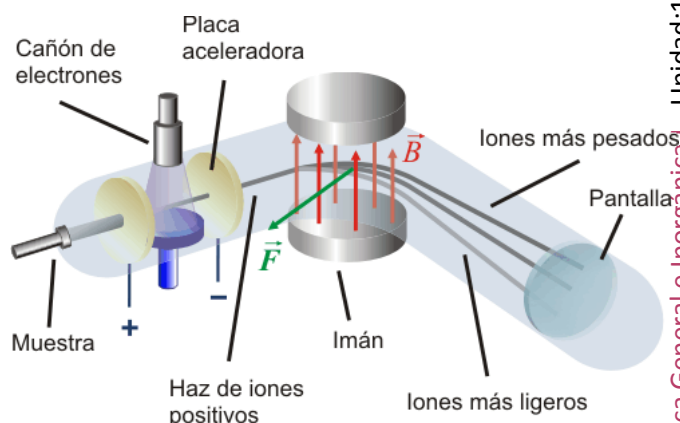


Figura. 1-22 Espectrómetro de masas



líquidos, como el Cinc y el Mercurio) la "cámara de ionización" del espectrómetro. En esta parte del dispositivo, las partículas se exponen a un haz de electrones que se mueven rápidamente. Cuando alguno de estos electrones choca con un átomo, puede provocar que se desprenda algún electrón del mismo (el más débilmente retenido por el núcleo atómico). De esta manera el átomo queda con una carga positiva y se obtiene un ion. Un ion es un átomo o un grupo de átomos con carga eléctrica, que puede ser positiva, en cuyo caso el ion se denomina catión, o la misma puede ser negativa y se llama anión.

Los iones positivos o cationes formados en la cámara de ionización, salen acelerados gracias a una alta tensión aplicada entre dos placas del espectrómetro. La velocidad alcanzada por los iones depende fundamentalmente de su masa, de manera tal, que los iones más livianos alcanzan velocidades más altas que los más pesados.

Cuando un ion pasa entre las dos placas curvas y cargadas del espectrómetro, la desviación

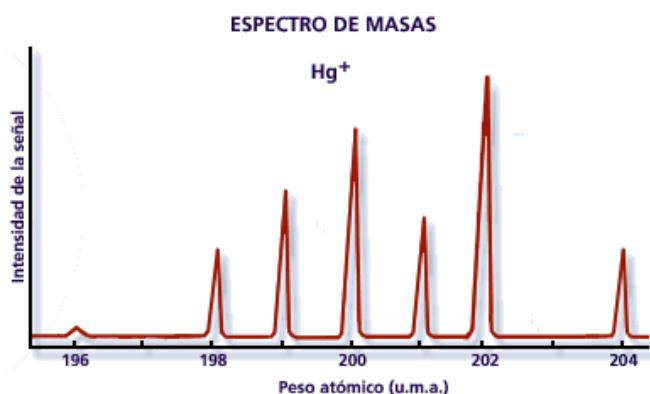


Figura. 1-23 Señal que grafica el detector de un espectrómetro de masas

que sufre su trayectoria depende de la velocidad con que los mismos se desplazan y, por lo tanto, de su masa. Puede, de esta manera, calcularse la masa del ion a partir de la tensión que es necesaria aplicar para desviar la trayectoria de los iones y, así, permitir que los iones lleguen al detector, que emite una señal, [FIGURA. 1-23](#).

La masa del átomo es la suma de la masa del ion y la del electrón. La masa de un mol de átomos se obtiene multiplicando la masa de un átomo por el Número de Avogadro. La Masa Atómica Relativa de un elemento coincide numéricamente con la masa de un mol de átomos del mismo.

Aplicando este método se pudo demostrar que en una muestra de Neón puro, hay tres tipos de átomos, que se encuentran en distintas proporciones, y que tienen las propiedades químicas del Neón. Se los denominó isótopos del Neón. Podemos, a esta altura, intentar una primera definición de isótopo que es la siguiente:

**"Los isótopos son átomos de un elemento que tienen el mismo número atómico pero que difieren en su Masa Atómica"**

Isótopo deriva del griego y significa "mismo lugar". Aunque los átomos de los isótopos tienen diferente masa, pertenecen a un solo elemento y ocupan el mismo lugar en la Tabla Periódica de los Elementos.

Si suponemos que el núcleo del átomo de un determinado elemento posee un número fijo de protones y un número variable de neutrones. Los neutrones contribuyen a la masa del átomo y no influyen en el número de electrones que el mismo posee. Por lo tanto para átomos con diferente número de neutrones, la masa variará, pero no las propiedades que caracterizan su



comportamiento que están dadas por la cantidad de electrones. Finalmente, la diferencia en el número de neutrones de los átomos con igual  $Z$  es la que determina la diferencia en las masas de los isótopos, pero no modifica sus propiedades químicas.

Se define el Número Másico ( $A$ ), como la suma del número de neutrones más el número de protones que hay en el núcleo del átomo. Es decir que  $A$  coincide con el número total de nucleones contenidos en el núcleo del átomo. Como el número de protones determina el Número Atómico ( $Z$ ) de un elemento, resulta

$$A = Z + n$$

El nombre de un isótopo se obtiene escribiendo su número de masa detrás de la palabra que representa el nombre del elemento. Por ejemplo: Neón – 20, Neón – 21 y Neón – 22. Su símbolo se obtiene escribiendo el Número Másico o Número de Masa a la izquierda del símbolo del elemento como superíndice. Por ejemplo:  $^{20}\text{Ne}$ ,  $^{21}\text{Ne}$  y  $^{22}\text{Ne}$ .

El Hidrógeno tiene tres isótopos. El más común  $^1\text{H}$  carece de neutrones y tiene en su núcleo un solo protón. Los otros dos isótopos están en la naturaleza en una proporción mucho menor que el anterior, pero como tienen importantes aplicaciones, les han sido otorgados nombres y símbolos especiales. Uno de estos isótopos  $^2\text{H}$  se denomina Deuterio (D), y el otro  $^3\text{H}$  se denomina Tritio (T).

**Un átomo de Deuterio, con un núcleo constituido por un protón y un neutrón, es aproximadamente dos veces más pesado que un átomo ordinario de Hidrógeno y, combinado con el átomo del elemento Oxígeno, forma el "agua pesada". La misma se usa en algunos reactores nucleares y tiene una densidad igual a  $1,11 \text{ g/cm}^3$  a  $20^\circ\text{C}$ . Esta densidad es 11 % superior a la del agua ordinaria.**

#### 1.4.5 Otras partículas del átomo con relevancia química

Además de los electrones, los protones y los neutrones, considerados las partículas estables del átomo, se han encontrado otras partículas constitutivas del átomo, que son inestables.

##### 1.4.5.1 Positrón

La contrapartida positiva del electrón fue descubierta más o menos fortuitamente en el año 1932, por Anderson, en el transcurso de los estudios de los efectos de los campos magnéticos sobre las partículas expulsadas de los núcleos atómicos, por la absorción de rayos cósmicos. En estos experimentos aparecieron trazas en la niebla, exactamente iguales a las que dan los electrones, pero que se desvían en sentido opuesto. Las partículas que dan origen a estas trazas han sido denominadas positrones. Se cree que se producen a expensas de la radiación cósmica por la creación de pares electrón – positrón. También se han observado en la desintegración de algunas sustancias radioactivas. Sin embargo, su existencia como partículas estables es muy poco probable en cualquier circunstancia, ya que los electrones y los positrones se aniquilan mutuamente con producción de radiación gamma.



#### 1.4.5.2 El neutrino y el antineutrino

Son partículas de masa pequeña y carga cero, cuya existencia ha sido postulada para explicar las variaciones de energía durante la emisión radiactiva de electrones y positrones. Se supone que el neutrino está asociado con el electrón y comparte su energía, mientras que el antineutrino representa el mismo papel con respecto al positrón. Aunque la existencia de estas partículas es muy probable, no existen acerca de esto pruebas concretas.

#### 1.4.5.3 El mesón

Para explicar las energías de enlaces en los núcleos, Yukawa postuló, en el año 1935, la existencia de una partícula, el mesón, de masa intermedia entre la del electrón y la del protón. Los mesones se descubrieron en un principio en los estudios de los rayos cósmicos y no existen dudas de los efectos de éstos sobre los materiales. Los mesones son de dos tipos, llamados  $\pi$  y  $\mu$ , siendo los primeros algo más pesados que los segundos. Ambos son inestables y pueden tener carga positiva y negativa. Un interesante análisis sobre las características de los mesones fue dado por Keller en el año 1949.

## 1.5 Inicios de la Mecánica Cuántica

El Modelo Atómico de Rutherford propone un átomo de Número Atómico  $Z$ , formado por un núcleo central, muy pequeño, compacto, con densidad de carga positiva homogéneamente distribuida, rodeado de  $Z$  electrones.

Rutherford esperaba poder describir el movimiento de los electrones alrededor del núcleo, usando los fundamentos de la "Mecánica Clásica", es decir, las leyes del movimiento propuestas por Isaac Newton en el siglo XVII. Pero cuando se aplicaban estas leyes para los electrones de los átomos, las mismas fallaban.

Las Leyes de Newton fueron sustituidas, para describir el comportamiento de las partículas subatómicas, por las de la Mecánica Cuántica. Se produjo una conmoción intelectual que sacudió los propios fundamentos de la ciencia.

**En éste, nuestro viaje a través del tiempo, en el que intentamos interpretar la naturaleza íntima del átomo, estamos en un punto en el que se entremezclan los distintos descubrimientos que permiten adentrarnos en el estudio sistemático del mismo, en una forma tan vertiginosa, como lenta fue la etapa del largo silencio, de más de veinte siglos, entre las teorías de los filósofos griegos y la Teoría atómica de Dalton. A partir de aquí podremos ver la importancia de la estructura atómica, es decir, la distribución de los electrones alrededor del núcleo del átomo.**

**Nuestro problema es, de ahora en más, poder explicar satisfactoriamente, cómo los electrones se mueven alrededor del núcleo atómico. La estructura atómica es la clave que permite comprender, interpretar y predecir las propiedades de los elementos, los compuestos que los mismos pueden formar y las reacciones químicas que experimentan.**





### 1.5.1 Espectroscopia

Muchos de los conocimientos que en la actualidad se tienen sobre la estructura atómica se han obtenido a través de la espectroscopía, que es el análisis de la luz y de otros tipos de radiación emitidos o absorbidos por las distintas sustancias. Espectroscopía deriva del latín y significa "aparición".



Figura. 1-24 Espectros a la llama de algunos elementos

Algunos elementos son capaces de emitir luz de colores característicos o una mezcla de colores cuando se mezclan sus compuestos en una llama, o bien, cuando sus vapores se someten a la acción de una descarga eléctrica.

Las luces que iluminan las autopistas y las zonas urbanas de las ciudades, son producidas por átomos de Sodio (Na)

que emite el color amarillo que las caracteriza. Los átomos de Potasio (K) emiten una luz de color violeta. El Rubidio (Rb) produce una llama roja (precisamente su nombre deriva del latín y significa "rojo") y el Cesio (Cs) una llama azul.

En general, la luz emitida resulta de una mezcla de colores que pueden separarse si se emplea un prisma, de manera semejante a lo que sucede con la luz del Sol, que es separada por las gotas de agua que forman la lluvia y produce el arco iris.

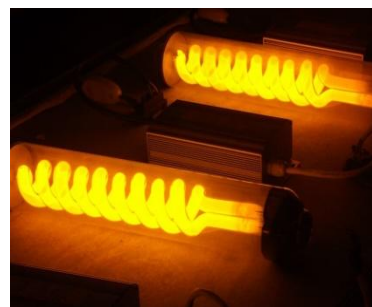


Figura. 1-25 Lámparas de sodio

Cuando se emplea un espectroscopio, los colores, una vez separados por el prisma, se registran fotográficamente y dan lugar a un "espectro". Puesto que cada color da una imagen, al ser registrados los mismos, forman una serie de "líneas espectrales" como se observa en la [FIGURA. 1-26](#).

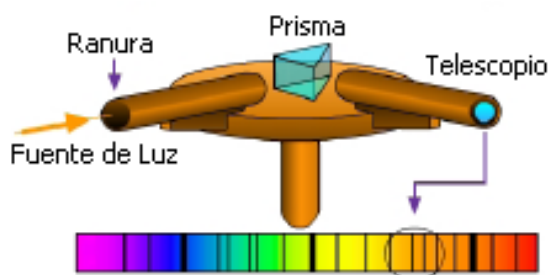


Figura. 1-26 Espectroscopio

### 1.5.2 La Luz

Durante la segunda mitad del siglo XVII, Isaac Newton, utilizando un espectroscopio con un prisma de vidrio, descompuso un delgado haz de luz solar en sus colores componentes: violeta, índigo, azul, verde, amarillo, anaranjado y rojo. Comprobó, que utilizando un segundo prisma, podía obtener nuevamente, por combinación de todo el espectro, un nuevo haz de luz blanca. Por otra parte, también comprobó que si elegía uno cualquiera de los colores del espectro, ninguna acción sobre él podía cambiarlo.



Newton estudió también los colores de las pompas de jabón, así como los que aparecen en una lente ligeramente convexa en contacto con una superficie plana de vidrio (anillos de Newton).

Newton comprendió que estos colores (colores de interferencia) podían explicarse mediante la Teoría Ondulatoria de la Luz, pero el hecho por él observado de que la luz se propaga en línea recta, se explica de manera más simple si se admite que la luz está constituida por partículas o corpúsculos. Intentó, sin éxito, aclarar estos fenómenos de interferencia, atribuyendo a tales corpúsculos propiedades adecuadas.



Figura. 1-27 Burbuja de jabon frente a la luz

Otros investigadores, en especial Christian Huygens (1629 – 1695), Augustin Jean Fresnel (1788 – 1827) y Thomas Young (1773 – 1829), establecieron el carácter ondulatorio de la luz sobre una base amplia y sólida.

En el año 1873, James Clerk Maxwell dedujo a partir de sus ecuaciones del campo electromagnético que el movimiento oscilatorio de una carga eléctrica puede producir ondas electromagnéticas con las propiedades de la luz. El físico alemán Heinrich Hertz (1857 – 1894) realizó en el año 1888 experimentos que lo confirmaron.

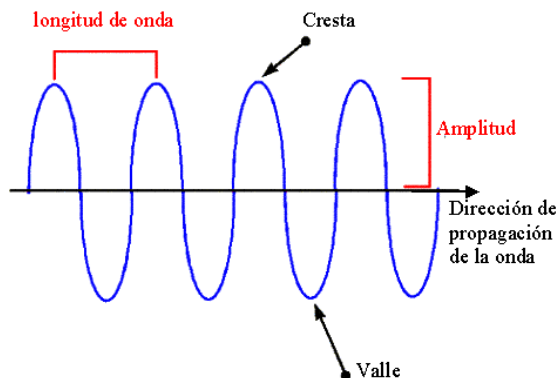


Figura. 1-28 Representación de una onda sinusoidal

Sobre la base de lo expuesto, podemos afirmar que la luz es una radiación electromagnética. Se trata de una onda formada por un campo eléctrico y un campo magnético, ambos oscilantes. Un campo magnético ejerce una fuerza sobre una

partícula cargada en movimiento. Un campo eléctrico, que ejerce un efecto más intenso sobre los materiales, actúa sobre cualquier partícula cargada, esté o no en movimiento. La oscilación del campo eléctrico de la luz es tal que su fuerza actúa inicialmente en un sentido y luego en el sentido opuesto. Llamamos ciclo a una evolución completa que comprende desde el campo considerado en un sentido, pasando por el opuesto y volviendo al inicial.

**La naturaleza del movimiento ondulatorio está representada por la curva sinusoidal.**

La distancia entre una cresta y la adyacente se denomina longitud de onda, se representa por la letra  $\lambda$  (letra griega lambda). La altura de la cresta se llama amplitud de la onda. Si las ondas se mueven con velocidad  $c$ , su frecuencia está representada por el símbolo  $\nu$  (letra griega nu) y es igual a  $\frac{c}{\lambda}$ , número de ondas que pasan por un punto fijo en la unidad de tiempo (1 segundo). Las dimensiones de la longitud de onda son las de longitud; las de la frecuencia,



número de ondas por segundo, en  $(\text{tiempo})^{-1}$ . El producto de la longitud de onda por la frecuencia tiene las dimensiones  $\frac{\text{longitud}}{\text{tiempo}}$ , es decir, las dimensiones correspondientes a la velocidad. Estas magnitudes están relacionadas a través de la siguiente expresión matemática:

$$\lambda \cdot \nu = c$$

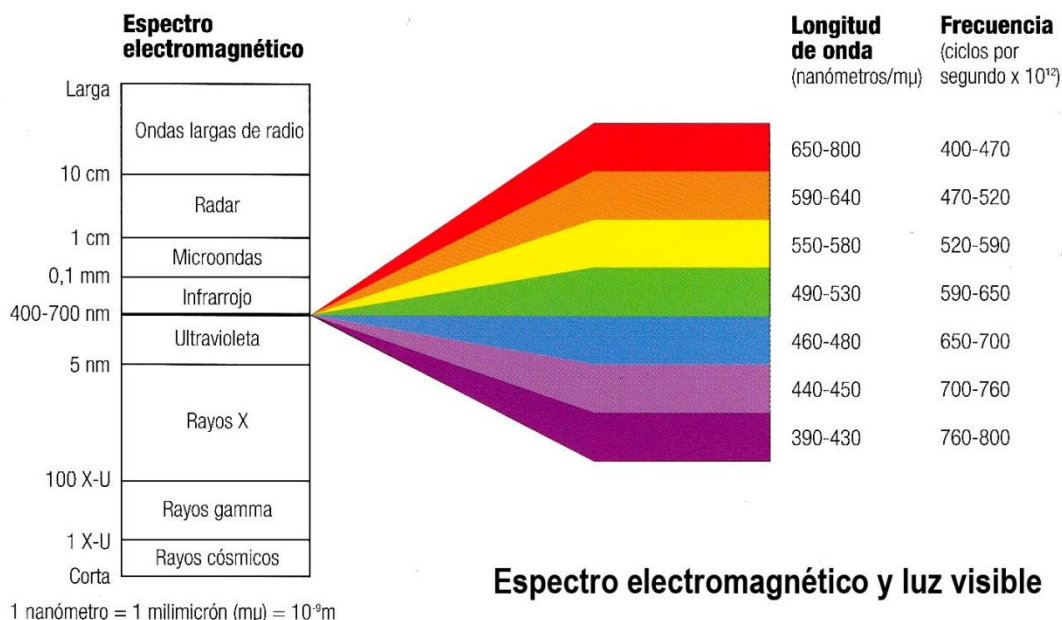
En el caso de una onda luminosa, como el ejemplificado en la [FIGURA. 1-28](#), la curva sinusoidal se utiliza para representar la intensidad del campo eléctrico en el espacio. El campo eléctrico de una onda luminosa es perpendicular a la dirección de propagación del rayo luminoso.

La ecuación anterior permite establecer que cuanto mayor es la frecuencia más chica es la longitud de onda asociada. La alta frecuencia de la luz azul está relacionada a una longitud de onda más corta (470 nm) que la vinculada con la luz roja, de frecuencia más baja (700 nm).

**Para recordar:**

$$1 \text{ nanómetro} = 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m.}$$

Los ojos del ser humano pueden detectar radiaciones electromagnéticas con longitudes de onda comprendidas entre 700 nm (luz roja) y 400 nm (luz violeta). Las radiaciones comprendidas en este intervalo constituyen la luz visible. La "luz blanca" como la luz del Sol, constituye una mezcla de todas las longitudes de onda de la luz visible.



**Figura. 1-29 Espectro electromagnético y luz visible**

Las longitudes de onda del conjunto de radiaciones electromagnéticas varían desde valores menores a un picometro, hasta valores que superan varios kilómetros, pero el ojo humano no es capaz de detectar todas las radiaciones, por dos motivos principalmente: uno porque las



radiaciones de ciertas longitudes de onda son absorbidas al pasar por el cristalino del ojo y, otro, porque las moléculas que componen la retina no responde a estas radiaciones.

La radiación ultravioleta es una radiación de frecuencia más alta y, por lo tanto, de longitud de onda más corta, que la luz violeta. Por este motivo se denomina anteponiendo el prefijo "ultra" que deriva del latín y significa "más allá".

La radiación infrarroja es percibida por las personas como calor y su frecuencia es más baja (con una mayor longitud de onda) que la de la luz roja. Por este motivo se denomina anteponiendo el prefijo "infra" que deriva del latín y significa "por debajo".

### 1.5.3 Fotones

La mecánica cuántica completa nuestra visión sobre la luz entendida como una onda, con una nueva perspectiva en la que la luz es descrita como una corriente de partículas denominadas "fotones". Cuanto mayor es la intensidad de la luz, tanto mayor es el número de fotones que componen el rayo.

Cada fotón es un paquete o un cuanto de energía, entendiendo por cuanto la palabra castellanizada de quantum, que deriva del latín y significa "cantidad". Las personas son capaces de percibir la energía de los fotones que componen la luz infrarroja emitida por el Sol en forma de calor asociado a la luz solar.

La energía de un único fotón es proporcional a la frecuencia de la luz, según puede entenderse claramente a través del análisis de la siguiente expresión matemática

$$E = h \cdot \nu$$

En la expresión anterior  $h$  es la constante de Planck, constante de fundamental importancia, que vale  $6,63 \times 10^{-34} \text{ J/Hz}$ . Es un homenaje a Max Planck, físico alemán que propuso por primera vez que la energía no se emite ni se absorbe en forma continua (como pensaban los físicos clásicos), sino que lo hace en forma de paquetes discretos de energía o "cuantos de energía". La Teoría Cuántica de Planck produjo una revolución en el ámbito científico cuando fue enunciada en el año 1900. Generó la escisión de la física, dividiéndola en la Física Clásica o Newtoniana, que puede explicar fenómenos físicos a nivel macroscópico, y la Física Cuántica que puede explicar el comportamiento de sistemas complejos tales como los que involucran a las partículas constitutivas del átomo.

La luz azul, por ejemplo, está compuesta por una corriente de fotones. A cada uno de estos fotones les corresponde una energía que puede determinarse de la siguiente manera, teniendo en cuenta que la frecuencia de esta radiación vale  $6,4 \times 10^{14} \text{ Hz}$

$$E = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J/Hz} \cdot 6,4 \times 10^{14} \text{ Hz} = 4,2 \times 10^{-19} \text{ J}$$



Un rayo de luz roja también está compuesto por una corriente de fotones, pero como la frecuencia de la luz roja es menor que la de la luz azul, cada uno de sus fotones tiene una energía menor  $2,8 \times 10^{-19} J$ .



Color	Frecuencia $\times 10^{14}$ Hz	Longitud de onda nm	Energía por fotón $\times 10^{-19}$ J
Rayos X y gamma	$10^3$ y por encima	3 y por debajo	600 y por encima
Ultravioleta	10	300	6,6
Violeta	7,1	420	4,7
Azul	6,4	470	4,2
Verde	5,7	530	3,7
Amarillo	5,2	580	3,4
Naranja	4,8	620	3,2
Rojo	4,3	700	2,8
Infrarojo	3,0	1000	1,9
Microondas y ondas de radio	$3 \times 10^{11}$ Hz y por encima	$3 \times 10^6$ y por debajo	$2 \times 10^{-22}$ J y por encima

Tabla 1.2 Valores típicos de ondas constituyentes de la luz

#### 1.5.4 Efecto Fotoeléctrico

Una de las pruebas de la relación que existe entre la frecuencia de una radiación y la energía de los fotones que la componen es el denominado efecto fotoeléctrico. El mismo es la emisión de electrones de la superficie de los metales cuando sobre los mismos incide luz ultravioleta.

Es posible demostrar que no se produce la emisión de electrones cuando la frecuencia de la luz incidente es inferior a cierto valor umbral característico de cada metal. Esta manera, se observó que la luz visible al incidir sobre una placa de Cinc, no produce la emisión de electrones, mientras que la luz ultravioleta de longitud de onda inferior a 350 nm provoca dicha emisión. El umbral fotoeléctrico corresponde a la longitud de onda máxima que resulta eficaz para producir la emisión de electrones de la superficie de un determinado elemento metálico.

**Los metales alcalinos son especialmente buenos emisores fotoeléctricos y sus umbrales están situados en la región del visible.**

Estos hechos experimentales constituyen una prueba de la existencia de paquetes energéticos, puesto que si un fotón tiene una energía demasiado baja no puede expulsar un electrón de la superficie del metal.

Estos fenómenos fueron explicados por Albert Einstein, en el año 1905, mediante su teoría del efecto fotoeléctrico. Supuso que la luz que incide sobre la placa metálica consta de cuantos de luz o fotones, de energía  $h \cdot \nu$ , y que cuando la luz es absorbida por el metal, toda la energía de un fotón se convierte en energía de un fotoelectrón. No obstante, el electrón debe utilizar parte de la energía recibida para abandonar el metal, que es la Energía de Primer Ionización del mismo. La restante es la energía cinética del fotoelectrón.

Teniendo en cuenta la Ley de Conservación de la Energía, la energía cinética del fotoelectrón, es decir, del electrón expulsado de la superficie del metal por su interacción con los fotones de la luz, es igual a la energía del fotón incidente menos la energía necesaria para que se



produzca la expulsión del electrón, que es la Energía de Primer Ionización y es una constante que depende de cada metal

$$1.19 E_c = h \cdot \nu - k$$

Donde  $E_c$  es la energía cinética del electrón,  $h \cdot \nu$  es la energía del fotón y  $k$  es la energía necesaria para extraer un electrón del metal.

Analizando la expresión matemática anterior, resulta que la misma corresponde con la ecuación de una recta de pendiente  $h$ . Si se representa gráficamente la Energía Cinética de los electrones emitidos en función de la frecuencia de la luz incidente en la superficie de un metal, se obtendrá una recta, que es lo que en la realidad se produce. Como la pendiente de la recta es  $h$ , éste es un método experimental para la determinación de la constante de Planck.

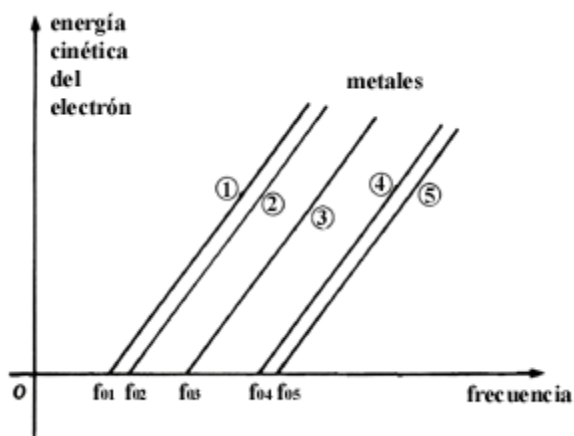


Figura. 1-30 Gráfico Energía cinética del electrón en función de la frecuencia.

obtenidas para distintos metales son paralelas”.

“Cuando se representa gráficamente la energía cinética de los electrones emitidos de la superficie de un metal a causa del efecto fotoeléctrico, en función de la frecuencia de la radiación ultravioleta incidente, se obtiene una recta. El valor de la pendiente de la misma es la constante de Planck,  $h$ , y es importante que por debajo de una frecuencia mínima (de umbral), que depende de cada metal, la emisión de electrones no se produce. Por otra parte, como para cualquier metal, la pendiente de la recta es siempre la misma, las rectas

## 1.6 El espectro del átomo de Hidrógeno

El espectro del átomo de Hidrógeno (H), en la zona del visible, está compuesto por tres líneas. La más intensa, que corresponde a una longitud de onda de 656 nm, es de color rojo. Una muestra excitada brilla, precisamente, con luz roja.

Los átomos de Hidrógeno cuando son excitados energéticamente, al volver a un estado de menor energía, más estable, emiten también, además de las radiaciones en el espectro del visible, radiaciones ultravioleta e infrarroja, que pueden ser detectadas electrónicamente.

El espectro completo del átomo de Hidrógeno, se parece a un conjunto enmarañado de líneas, en realidad presenta un modelo preciso. Una parte de este modelo, fue estudiada por un maestro de origen suizo, Joseph Balmer, en el año 1885. Balmer observó que las frecuencias de la región visible y las secuencias próximas a esta región se ajustan a la fórmula





$$\nu = \frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}$$

Siendo  $n = 3, 4, \dots$ . El símbolo  $\propto$  significa "es proporcional a". En la actualidad, las líneas que pueden describirse a través de la ecuación anterior se denominan serie de Balmer.

En el año 1908, W Ritz generalizó la ecuación determinada por Balmer en el Principio de Combinación. De acuerdo a este principio, el número de onda  $\nu^*$ , de cualquier línea de una serie espectral determinada del espectro del átomo de Hidrógeno puede estar representado por la siguiente ecuación:

$$1.20 \nu^* = \mathfrak{R} \cdot \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

En donde la constante  $\mathfrak{R}$ , denominada constante de Rydberg y vale  $3,29 \times 10^{15} \text{ Hz}$ .

El número de onda es el número de longitudes de onda por centímetro.

#### Matemáticamente

$$\nu^* = \frac{1}{\lambda}$$

Como

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

Por lo tanto, podemos establecer que el número de onda, también puede expresarse con la siguiente ecuación:

$$1.21 \nu^* = \frac{\nu}{c}$$

Todo el conjunto del espectro del átomo de Hidrógeno fue estudiado por Johannes Rydberg, especialista sueco en espectroscopía, quien descubrió todas las líneas espectrales de este elemento, incluidas las de las regiones ultravioleta e infrarroja. Cada una de las series se obtiene haciendo  $n_f = 1, 2, \dots$  y así sucesivamente, manteniendo constante el valor de  $n_f$  y variando regularmente  $n_i$  de una línea a otra. Con  $n_f = 2$  se obtiene la serie de Balmer. Cada una de las líneas de una serie se obtiene haciendo  $n_i = n_f + 1$ ,  $n_i = n_f + 2$  y así sucesivamente. Para la serie de Balmer  $n_f = 3, 4, \dots$

Expresiones semejantes, en las cuales  $n_f$  vale  $1, 3, 4, 5, \dots$ , representan las series de Lyman (ultravioleta) y las de Paschen, Brackett y Pfund (infrarrojo), respectivamente. En la Figura. 1-31 se da una representación esquemática del espectro completo del átomo del elemento Hidrógeno



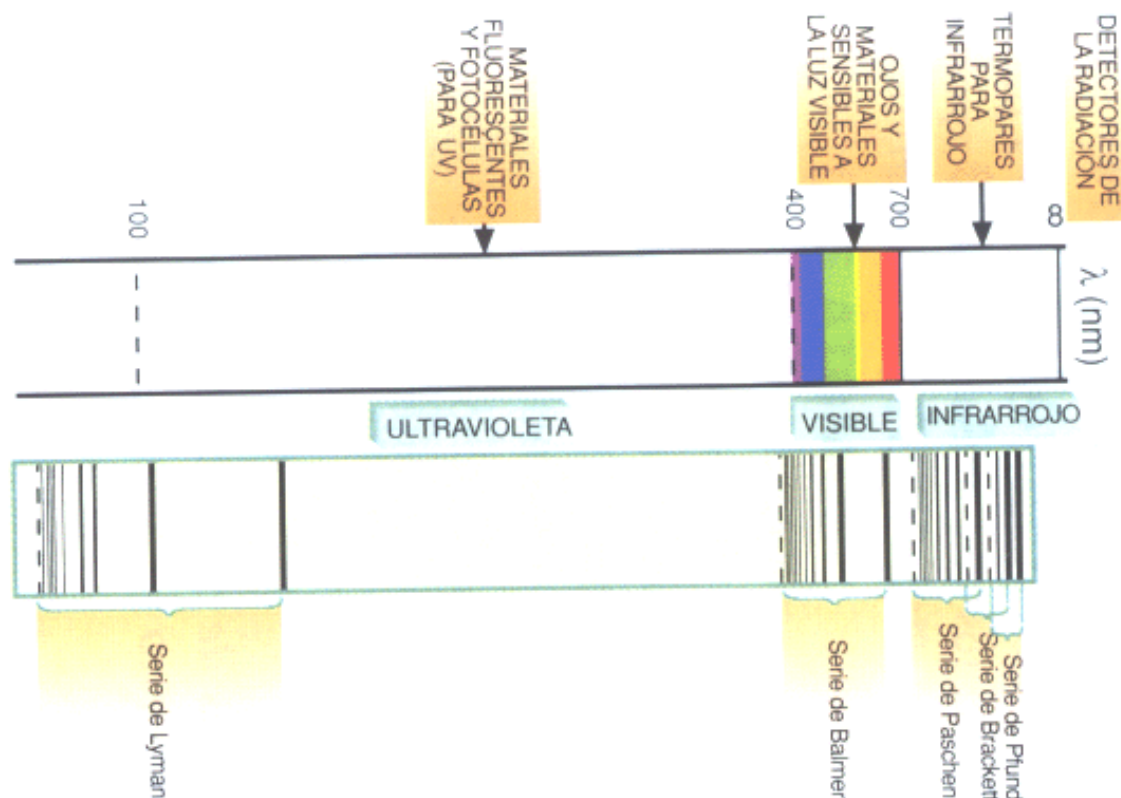


Figura. 1-31 Espectro completo del átomo de hidrógeno

Un hecho importante, vinculado al estudio de los espectros de líneas de los átomos de los distintos elementos conocidos en los experimentos de espectroscopía, es que cada uno de ellos es único y característico para cada elemento, como si fuera su “huella digital”. Esto permitió pensar que debe existir una relación entre la estructura del átomo, dada por su distribución electrónica alrededor del núcleo, y los espectros de emisión que estos producen.

La idea clave que relaciona las frecuencias específicas de la luz emitida por cualquier tipo de átomo con su estructura, consiste en que cada fotón es emitido por un átomo y la energía que transporta cada fotón procede del átomo que lo ha emitido. Al someter una muestra cualquiera al calentamiento o a una descarga eléctrica, la misma gana energía que modifica la estructura de los átomos que la componen. Cuando esta estructura, que no es favorable por su inestabilidad al tener un mayor contenido energético, vuelve a su estado anterior, perdiendo energía al emitir el átomo un fotón de luz. Si la energía del átomo, en este proceso, disminuye en  $\Delta E$ , ésta es la cantidad de energía que transporta el fotón de luz. Puesto que, de acuerdo con la Ecuación de Planck, la energía de un fotón de luz es  $h \cdot \nu$ , entonces la frecuencia de la luz generada por el átomo está determinada por

$$\Delta E = h \cdot \nu$$

Esta relación se denomina relación de frecuencia de Bohr y el nombre es un homenaje al científico de origen danés Niels Bohr, que fue quien la propuso.



La relación matemática dada por Bohr demuestra que si la disminución de energía es grande, se emite un fotón de luz de alta frecuencia y, por lo tanto, de baja longitud de onda. Si la disminución de energía, en cambio, es pequeña, se puede detectar luz roja o infrarroja de baja frecuencia.

**En este punto de nuestro viaje, a través de la historia, para conocer, describir, justificar y predecir las propiedades del átomo, estamos en condiciones de interpretar más adecuadamente la Teoría Cuántica de la radiación, postulada por Max Planck, en el año 1900, y ampliada por Albert Einstein, en el año 1905, aceptando una sorprendente conclusión. Hemos visto que el espectro del átomo del elemento Hidrógeno está constituido por radiaciones de cierta frecuencia. Por otra parte, hemos analizado que cada frecuencia representa un paquete de energía que se aleja del átomo en forma de fotón.**

**Un electrón de un átomo de Hidrógeno (su único electrón) puede presentar solamente ciertos valores de energía, ya que si esto no fuera así, el átomo podría emitir radiaciones en todas las frecuencias.**

Esta limitación se opone totalmente, como ya hemos indicado, a las predicciones de la Mecánica Clásica, según la cual la energía total asociada a un objeto, puede tener cualquier valor. Según la misma, puede darse cualquier valor de energía inicial a un péndulo, simplemente empujándolo con más o menos fuerza.

**Este descubrimiento puede resumirse diciendo que la energía está cuantizada. La cuantización de una propiedad es la restricción de dicha propiedad a ciertos valores.**

Los objetos macroscópicos "parecen ser" capaces de aceptar cualquier energía. Sin embargo, cuando se realiza un análisis profundo, es posible determinar que sólo pueden aceptar energía en cantidades discretas. Cuando, por ejemplo, vertemos un líquido en un recipiente, el líquido se presenta como un fluido continuo y parece que puede volcarse en el recipiente cualquier cantidad del mencionado líquido. Sin embargo, la cantidad más pequeña que puede transferirse al recipiente es una molécula del líquido. Puede considerarse que cada molécula es un "cuanto" del mismo. La cantidad de líquido que puede volcarse en el recipiente es un múltiplo entero de este "cuanto" que constituye cada molécula que compone al líquido.

**La Teoría Cuántica de Max Planck, establece que:**

**Un cuerpo no puede emitir o absorber energía en forma de radiación de manera continua, la energía puede ser absorbida o emitida solamente según múltiplos enteros de una cantidad definida denominada cuanto**

La expresión matemática correspondiente a esta teoría es la siguiente:

$$E = h \cdot \nu$$

Donde  $h$ , la constante de Planck, vale  $6,5252 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}$



Aplicando la expresión matemática de la Teoría Cuántica, se puede calcular la energía del cuanto en función de la frecuencia del número de onda. De esta manera:

$$1.22 E = h \cdot c \cdot \nu^*$$

## 1.7 Modelo Atómico de Bohr

Bohr intentó explicar el espectro del átomo del elemento Hidrógeno (H) proponiendo el que en la actualidad se denomina Modelo de Bohr del Átomo. En este modelo se supone que el único electrón del átomo de Hidrógeno puede describir solamente ciertas órbitas circulares alrededor del núcleo y que la energía del átomo es la suma de las energías cinética del electrón y potencial asociada a la órbita en la que el electrón se mueve.

Mediante su modelo Bohr pudo establecer los valores permitidos de las energías asociadas a las órbitas en las que los electrones se mueven alrededor del núcleo del átomo. Estos valores permitidos se denominan niveles de energía  $n$ .

Cuando el electrón está lejos del núcleo la energía es cero y la energía para el mismo es más baja (y de signo negativo) cuando el electrón forma parte del átomo. Al tener el electrón, de esta manera, menor contenido energético, adquiere estabilidad, de acuerdo al Principio de Mínima Energía.

El "número cuántico  $n$ " es un número entero positivo que designa las órbitas permitidas. Con  $n=1$  se designa a la órbita denominada  $K$  de más baja energía. Con  $n=2$  se designa a la órbita siguiente denominada  $L$ . Con  $n=3$  a la tercer órbita denominada  $M$  y así sucesivamente. La órbita  $K$  del nivel 1 de energía es la que está más cerca del núcleo del átomo y la que tiene menor contenido energético.

Cuando todos los electrones de un átomo, se encuentran en los niveles de energía más bajos posibles, se dice que el átomo está en su estado fundamental, es decir, en su estado de mínima energía.

Bohr logró desarrollar una fórmula matemática mediante la cual es posible calcular la energía de cada una de las órbitas y su trabajo final fue determinar cuantitativamente la disminución de energía cuando un electrón cae desde una órbita inicial de alta energía hasta una órbita final de menor energía.

Para explicar las frecuencias de las líneas observadas en los espectros de los átomos, Bohr sugirió como dijimos, que los electrones se mueven en órbitas estables definidas que rodean al núcleo, pudiendo ser posible cierto número de órbitas que corresponden a diferentes valores de energía.

Si suponemos que el momento angular de un electrón que se mueve en su órbita está "cuantificado", es decir, que consideramos el momento angular como un múltiplo entero exacto de una cantidad definida o cuanto. Bohr pudo obtener una expresión para la frecuencia



de las líneas espectrales del átomo de Hidrógeno que concordaba casi exactamente con los valores experimentales.

Mientras el electrón permanece en un nivel de energía determinado no hay absorción ni emisión de radiación. Cuando un electrón pasa de un nivel a otro, la energía del átomo varía y se produce una línea en el espectro atómico. Si  $E'$  es la energía del nivel o estado del cual parte el electrón y  $E''$  es la energía del nivel al cual pasa, la frecuencia de la línea espectral correspondiente estará dada por

$$1.23 \nu^* = \frac{E'' - E'}{h \cdot c}$$

Ya que  $E'' - E'$  es la energía absorbida o emitida por el átomo. Cada transición particular de un nivel de energía a otro dará origen a la formación de una línea espectral con una frecuencia definida. Si el átomo gana energía, o sea cuando el electrón pasa de un nivel de energía inferior a uno superior, la línea aparecerá en el espectro de absorción, pero si la transición es de un nivel superior a uno inferior, de manera que se produce desprendimiento de energía, la línea aparecerá como parte de un espectro de emisión.

A partir de la Ecuación 1.23, podemos escribir:

$$1.24 \nu^* = \frac{E''}{h \cdot c} - \frac{E'}{h \cdot c}$$

Comparando la ecuación 1.24 con la ecuación de Ritz 1.20, podemos deducir que la energía de un nivel dado se puede representar por:

$$E_n = k - \frac{\mathfrak{R} \cdot h \cdot c}{n^2}$$
$$k = \mathfrak{R} \cdot h \cdot c$$
$$1.25 E_n = \mathfrak{R} \cdot h \cdot c \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$

Se eligió el signo menos para hacer que los valores de la energía aumenten con los valores crecientes de  $n$ .

Dado que  $\mathfrak{R}$ ,  $h$  y  $c$  pueden ser considerados como constantes, es evidente que la energía de un electrón en cualquier nivel está determinada por el valor  $n^2$ , siendo  $n$  un número entero para el átomo de Hidrógeno o para aquellos semejantes al del Hidrógeno que contienen un solo electrón. Combinando los postulados del momento angular cuantificado con los métodos de la mecánica clásica, Bohr pudo deducir la ecuación anterior para la energía de un nivel dado y aún obtener el valor correcto de  $\mathfrak{R}$ , la constante de Rydberg dada por la siguiente expresión matemática:

$$\mathfrak{R} = \frac{2 \cdot \pi^2 \cdot \varepsilon^4 \cdot m}{h^3 \cdot c}$$

Donde  $\varepsilon$  es la carga y  $m$  es la masa del electrón. El número  $n$  de las ecuaciones anteriores, se denomina número cuántico refiriéndose cada valor de dicho número a un nivel de energía particular.



La energía necesaria para alejar un mol de electrones completamente del estado fundamental de un mol de átomos, que constituyen un sistema en estado gaseoso, a fin de formar un mol de iones cargados cada uno con una carga positiva (que también constituyen un sistema en estado gaseoso) y un mol de electrones libres, se denomina Energía de Primer Ionización o Potencial de Primer Ionización, y se expresa generalmente en electrón-volt. Su valor para el elemento Hidrógeno puede determinarse experimentalmente de varias formas. Una de ellas a partir de la longitud de onda (o del número de onda) del límite de la serie, poniendo  $n \rightarrow \infty$  en la ecuación 1.25.

De esta manera:

$$E_{\infty} = \mathfrak{R} \cdot h \cdot c = \frac{109.678 \text{ cm}^{-1} \cdot 6,625 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{seg} \cdot 2,99792 \times 10^{10} \text{ cm/s}}{6,24 \times 10^{11} \text{ eV}} = 13,6 \text{ eV}$$

**Este valor es casi exacto al medido experimentalmente para el Hidrógeno.**

Si un electrón adquiere más energía que la necesaria para permitir su extracción del átomo, la mayor parte de energía en exceso va con el electrón libre como energía cinética. Como la energía del cuanto de traslación es de pequeña magnitud, es continuamente variable. El espectro, más allá del límite de la serie, aparece, de esta manera, como continuo, aunque muy probablemente consiste en una serie de líneas tan juntas que resulta, hasta el momento, muy difícil de resolver.

A partir de todo este trabajo Bohr logró explicar satisfactoriamente el espectro de líneas del átomo de Hidrógeno. Calculó además el radio de cada una de las órbitas permitidas, que actualmente se denomina radio de Bohr y la velocidad del electrón en su órbita que es  $2.200 \text{ Km/s}$  o bien  $8.000.000 \text{ Km/h}$ .

### 1.7.1 Postulados del Modelo Atómico de Bohr

El Modelo Atómico de Bohr, que intenta explicar las frecuencias de las líneas en los espectros de los átomos, puede resumirse en:

#### 1º. Postulado

Los electrones de un átomo se mueven en órbitas estables que rodean al núcleo, en estados estacionarios de energía, sin absorber ni emitir energía en forma espontánea, por eso el término "estacionario". Puede haber un cierto número de órbitas que corresponden a diferentes valores de energía.

#### 2º. Postulado

La energía del electrón en un átomo no varía continuamente, sino que tiene uno u otro valor de un conjunto discreto de valores posibles. Es decir, en un átomo existe un número definido de niveles de energía y en cualquier instante la energía del electrón puede corresponder solamente a uno de estos niveles posibles.



### 3º. Postulado

Mientras un electrón permanece en un nivel de energía determinado, no hay absorción o emisión de radiación, es decir, permanece en un estado estacionario de energía.

### 4º. Postulado

Cuando un electrón pasa de un nivel de energía a otro en el átomo, la energía del mismo varía, y se produce una línea en el espectro atómico. Cada transición particular de un nivel de energía a otro dará origen a la formación de una línea espectral con una frecuencia definida. Si el átomo gana energía, el electrón pasa de un nivel inferior a otro superior y la línea aparecerá en el espectro de absorción. Si la transición, en cambio, es de un nivel superior a otro inferior de energía, de manera que hay desprendimiento de energía, la línea aparecerá como parte de un espectro de emisión.

### 5º. Postulado

En cada nivel de energía hay un número máximo de electrones que pueden ubicarse en su correspondiente órbita. Bohr estableció que el número máximo de electrones por órbita es  $2n^2$ , donde  $n$  es el nivel de energía en el que se encuentra la misma. Si  $n = 1$  el número máximo de electrones es 2, si  $n = 2$  es 8, si  $n = 3$  es 18 y, así, sucesivamente. Bohr, en este sentido, estableció la siguiente limitación: en el último nivel de energía del

átomo no puede haber más de ocho electrones en su órbita, ni más de 18 electrones en la órbita correspondiente al penúltimo nivel de energía de un átomo particular.

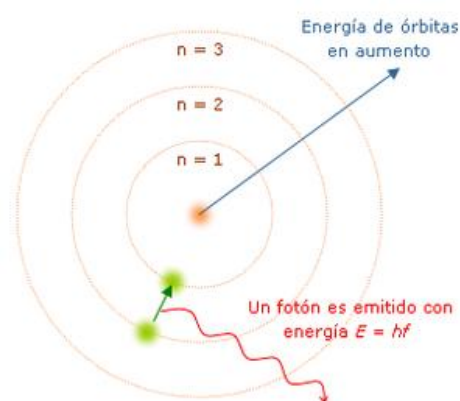


Figura. 1-32 Representación del átomo según el modelo de Bohr

De acuerdo a estos postulados, para el elemento Bromo (Br) de  $Z = 35$ , la configuración electrónica, es decir, la distribución de los electrones alrededor del núcleo del átomo, según el modelo de Bohr es la siguiente:



Es decir, que alrededor del núcleo del átomo de Bromo, sus 35 electrones, se distribuyen en cuatro niveles de energía de valores 1, 2, 3 y 4, en las correspondientes órbitas  $K, L, M$  y  $N$ , teniendo la última órbita incompleta con siete electrones.

Los cálculos efectuados por Bohr para explicar el espectro de líneas del átomo de Hidrógeno, constituyeron un éxito numérico espectacular, que permitió, en un principio, postular estructuras atómicas para los átomos de los distintos elementos, según los postulados dados por este importante científico.

La principal debilidad del Modelo Atómico de Bohr, es que fracasó en su intento, al aplicar su teoría, para átomos más complejos que el Hidrógeno. No pudo explicar los espectros de líneas



de sistemas atómicos con más de un electrón. Esto hizo sospechar que la Teoría de Bohr era errónea e incompleta. Con estudios posteriores esta sospecha se confirmó.

Otro punto débil, de importancia en la teoría de Bohr, es que la misma implica un conocimiento preciso de la posición (órbita) y de la cantidad de movimiento (que permite conocer la velocidad) del electrón. Posteriormente se demostró que este conocimiento es imposible a partir del Principio de Incertidumbre.

Tampoco es verdad que la energía asociada a un electrón en un cierto nivel está definida de manera exacta, sino que puede expresarse en términos de probabilidad por medio de las ecuaciones de la mecánica ondulatoria.

Por otra parte, el átomo formado por esta distribución de electrones, alrededor del núcleo atómico, en las órbitas circulares de los distintos niveles de energía, sería un "átomo plano".

Por los motivos expuestos y, al no poder explicar de manera satisfactoria, todos los hechos experimentales, es que fue necesario desechar el Modelo Atómico de Bohr y sustituirlo por otro. Sin embargo, como en los modelos anteriores, el de Bohr constituyó otro paso de fundamental importancia para el estudio de la estructura del átomo, al introducir el concepto de la cuantización de la energía del electrón cuando éste se mueve alrededor del núcleo del átomo.

## 1.8 De Broglie y Dualidad onda – partícula

La Mecánica Ondulatoria se basa en el concepto de la dualidad onda – partícula de los materiales. Albert Einstein, en el año 1905, sugirió que todas las radiaciones de naturaleza electromagnética, incluyendo a la luz, de la que sabemos que se propaga en forma ondulatoria, no sólo se absorben o se emiten como números enteros de cuantos de energía, sino que también se transmiten en el espacio como "partículas". En el caso de la luz, estas partículas se denominan fotones. Cada fotón transporta un cuanto  $E$  de energía que se relaciona con el número de onda de la radiación según la ecuación **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia..**

L. De Broglie, en el año 1923, sugirió que esta característica de comportamiento dual se puede aplicar también a los materiales. Pudo demostrar que una partícula de masa  $m$ , que se mueve a una velocidad  $v$  y, por lo tanto, tiene una cantidad de movimiento  $m \cdot v$ , debe estar asociada a una longitud de onda a través de la siguiente ecuación:

$$1.26 \lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

La propiedad de la partícula, denominada cantidad de movimiento, en la ecuación anterior, está relacionada con la propiedad de la onda, dada por la longitud de onda  $\lambda$  a través de la Constante de Planck  $h$ .

De acuerdo a la relación dada por De Broglie, una partícula pesada, que se



**desplaza a una velocidad elevada tiene una longitud de onda pequeña. Una partícula pequeña que se mueve a bajas velocidades tiene asociada una longitud de onda grande.**

Para los objetos comunes, no es posible detectar la onda asociada a los mismos, ya que sus longitudes asociadas son muy pequeñas. Por ejemplo, para una pelota de tenis de masa igual a 100g que se mueve con una velocidad de  $65 \text{ Km/h}$ , la longitud de onda asociada es inferior a  $10^{-30} \text{ m}$ . Este valor es inferior al diámetro del núcleo del átomo.

De esta manera, los científicos que desarrollaron la Mecánica Clásica pudieron encontrar una perfecta relación entre la teoría y las observaciones empíricas debido a que la naturaleza de onda de los materiales, que desconocían por completo, no podía detectarse para los objetos materiales que podían observar (como pelotas y planetas). Pero para una partícula material como el electrón, que se mueve a una velocidad del orden de  $2.000 \text{ Km/s}$ , la longitud de onda asociada es de  $360 \text{ pm}$ , equiparable al diámetro de un átomo (aproximadamente el doble del radio de Bohr,  $106 \text{ pm}$ ). Por este motivo, cuando se intenta explicar el comportamiento de los electrones a través de los postulados de la Mecánica Clásica, los mismos fracasaron, ya que debe tenerse en cuenta su carácter de onda.

Las condiciones necesarias para una demostración experimental de la Teoría de De Broglie con electrones, puede desarrollarse del siguiente modo:

**Un electrón con carga  $\varepsilon$  acelerado a través de un potencial  $V$  adquiere una energía cinética dada por  $\varepsilon \cdot V$ , que puede, por supuesto, también expresarse por  $\frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2$ , de manera tal que:**

$$1.27 \ v = \sqrt{\frac{2 \cdot V \cdot \varepsilon}{m}}$$

**Si en la ecuación de De Broglie 1.26 sustituimos este valor de  $v$ , tenemos la expresión matemática siguiente:**

$$1.28 \ \lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot V \cdot \varepsilon \cdot m}}$$

**Si ahora, en la ecuación 1.28, reemplazamos por los valores que conocemos se obtiene:**

$$\lambda = \frac{6,62 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}}{\sqrt{2 \cdot V \cdot 4,80 \times 10^{-10} \text{ uee} \cdot 9,11 \times 10^{-28} \text{ g}}}$$
$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot V}} \times 10^{-8} \text{ cm}$$

**Con el potencial  $V$  dado en  $\text{ues}$ . Como  $1 \text{ ues}$  es aproximadamente igual a  $300 \text{ v}$ , resulta:**

$$1.29 \ \lambda = \sqrt{\frac{150}{V}} \times 10^{-8} \text{ cm}$$





**Con  $V$  dado ahora en volt. Es evidente, analizando la expresión 1.29, que un electrón acelerado por un potencial de  $100v$  estará asociado a una longitud de onda de  $1,23 \times 10^{-8} cm$ , es decir  $1,23 \text{ \AA}$ .**

Los sólidos cristalinos pueden actuar como redes de difracción para longitudes de onda de este orden de magnitud, como por ejemplo, para los rayos X. Por lo tanto, la naturaleza de onda de los electrones podría demostrarse, si los mismos pudieran ser difractados mediante sólidos, como sucede para los rayos X.

Uno de los primeros experimentos que demostraron el carácter ondulatorio de los electrones, fue llevado a cabo por los científicos norteamericanos Clinton Davisson y Lester Germer en el año 1927. Ellos sabían que cuando cualquier tipo de onda pasa a través de una rejilla con un espacio comparable a su longitud de onda, da lugar a una pauta de difracción característica en cada uno de los casos. Demostraron que los electrones generan una pauta de difracción esperada si se usa un cristal como red de difracción. Las distintas capas del cristal actúan como una rejilla de difracción. Comprobaron que corresponde exactamente a la longitud de onda que cabría esperar de la relación dada por De Broglie, demostrando de esta forma la validez cuantitativa de la expresión matemática dada por este científico.

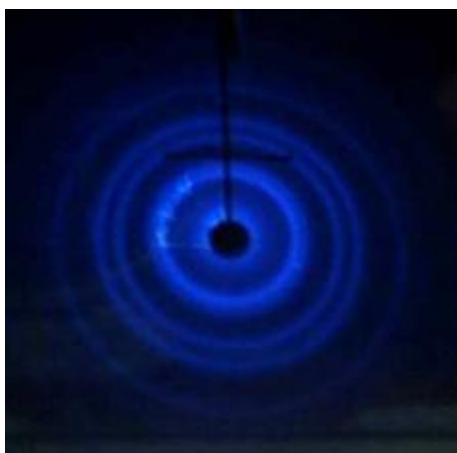


Figura. 1-33 Anillos de difracción que se obtienen cuando un haz de electrones acelerados pasa a través de láminas delgadas de Oro

Desde el año 1927 se pudo demostrar que otras partículas materiales, además de los electrones, tienen propiedades ondulatorias. Pudieron observarse efectos de difracción con núcleos de átomos del elemento Hidrógeno, H (constituidos por 1 protón) y con núcleos del átomo del elemento Helio, He, así como también, para neutrones.

En la actualidad existen pocas dudas acerca de la naturaleza dual onda – partícula de los materiales, pero como hemos mencionado anteriormente, el análisis de la ecuación de De Broglie permite establecer que con la masa creciente, se obtienen longitudes de onda menores para una determinada velocidad, siendo entonces las mismas más difíciles de detectar.

**Con el microscopio electrónico en la actualidad ha sido posible resolver objetos de hasta  $50nm$  de tamaño, resultado más que satisfactorio si lo comparamos con un tamaño mínimo de  $3000 \text{ \AA}$  necesario, cuando se utiliza un microscopio óptico común.**



## 1.9 Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Un análisis acerca del mecanismo de producción de los anillos de difracción de los electrones, tiene importantes conclusiones desde el punto de vista teórico.

Los anillos completos fueron producidos sobre una placa fotográfica, luego de varias horas, por la acción de un intenso haz de electrones que atravesaba una lámina delgada de metal y que eran difractados por la misma.

Si consideráramos un solo electrón, el mismo chocará con la placa fotográfica en algún punto que pertenecerá a uno de los anillos: pero no podemos predecir exactamente en qué punto lo hará. Es decir, que aun conociendo exactamente la cantidad de movimiento del electrón (que implica conocer exactamente su velocidad de movimiento) a través del potencial aplicado, es incierta la posición del mismo en los anillos de difracción.

Si reemplazáramos la placa por una pantalla de centelleo de sulfuro de cinc, sería posible definir con exactitud la posición del electrón incidente, pero simultáneamente su cantidad de movimiento se tornaría incierta, debido fundamentalmente a la transferencia de una cantidad desconocida de energía a las moléculas que componen la pantalla.

Este comportamiento se resume en el Principio de Incertidumbre enunciado por W. Heisenberg

**"Es imposible determinar exacta y simultáneamente la cantidad de movimiento y la posición de una partícula"**

En forma cuantitativa, este principio puede enunciarse del siguiente modo:

$$1.30 \Delta p \cdot \Delta q \cong h$$

Donde  $\Delta p$  y  $\Delta q$  son las incertidumbres en la cantidad de movimiento y en la posición respectivamente, y  $h$  es la constante de Planck.

Supongamos que realizamos un experimento en el que se determina con una gran exactitud la cantidad de movimiento  $p$  (con lo cual la incertidumbre  $\Delta p$  es muy chica), entonces el valor de la posición  $q$  es incierto ( $\Delta q$  es muy grande), este caso constituye un experimento sobre partículas. Por otra parte, en un experimento desarrollado para ondas, se determina  $q$  con mucha precisión mientras que  $p$  carece de significación. De esta forma, partículas como los electrones, los protones u otra forma de material no pueden exhibir simultáneamente propiedades de onda y de partícula.

Como la cantidad de movimiento  $p$  es igual a  $m \cdot v$ , en la expresión 1.30, podemos reemplazar  $p$  obteniendo la siguiente expresión matemática:

$$\Delta v \cdot \Delta q \cong \frac{h}{m}$$



Para partículas pesadas  $\frac{h}{m}$  es un valor muy chico y para cuerpos de tamaño macroscópico tenderá a cero. Para este tipo de cuerpos, el producto  $\Delta v \cdot \Delta q$  es tan pequeño, que las incertidumbres en la velocidad y en la posición son despreciables y están muy alejadas del intervalo posible para detectarlas. En estos casos, la Mecánica Clásica, que postula la posibilidad de determinar con exactitud la posición y la velocidad de una partícula resulta aplicable.

**En el caso de las partículas sub – atómicas y similares a ella, la Mecánica Clásica es inadecuada y es reemplazada por la Mecánica Cuántica u Ondulatoria.**

El Principio de Incertidumbre de Heisenberg involucra que la Teoría de Bohr, según la cual los electrones se mueven en órbitas y, por lo tanto, se conoce simultáneamente con exactitud la velocidad y la posición de los mismos en cada instante, no es válida.

## 1.10 Ecuación de Onda y Funciones de Onda

Teniendo en cuenta el movimiento ondulatorio de los electrones, la onda asociada a los mismos, debe corresponder de alguna manera, con el movimiento del electrón alrededor del núcleo del átomo. Como la trayectoria que describe el electrón es cerrada, es razonable suponer que la longitud de onda (o su frecuencia) tiene un valor tal que el camino es cubierto por un número entero de ellas. Las ondas de otras frecuencias se anularán mutuamente por interferencia.

A través de este razonamiento podemos afirmar, entonces, que el electrón puede tener sólo valores de energía que correspondan a esas frecuencias permitidas. De este modo, la Teoría Ondulatoria lleva directamente al concepto de niveles discretos de energía, tal como fue enunciado por Max Planck en el año 1900 y aplicado posteriormente por Bohr en su Modelo Atómico.

Las ondas que tienen frecuencias permitidas, que no presentan interferencia, son ondas estacionarias. Un ejemplo unidimensional de un movimiento ondulatorio como éste es el que puede observarse en el movimiento ondulatorio asociado para una cuerda fija en sus dos extremos.

Las frecuencias de los siguientes modos de vibración son múltiplos enteros de la frecuencia fundamental  $\nu_0$ , o sea,  $\nu_n = n \cdot \nu_0$ , donde  $n$  es un número cuántico.

**Cualquier movimiento de una onda estacionaria puede ser representado por una función de tipo sinusoidal de la forma**

$$1.31 A = \psi \cdot \sin(2\pi \cdot \nu \cdot t)$$

**Donde  $A$  es el desplazamiento de una onda de frecuencia  $\nu$ , en cualquier punto  $(x, y, z)$  en un tiempo  $t$ , y  $\psi$  es la amplitud de la vibración en el punto dado.  $\psi$  es una función independiente del tiempo y que sólo depende de las**



coordenadas  $(x, y, z)$ .

$$\psi(x, y, z)$$

Combinando la ecuación de onda 1.31 con la ecuación de onda normal

$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \cdot \nabla^2 u$ , donde  $\nabla^2$  es el laplaciano y donde  $c$  es una constante

equivalente a la velocidad de propagación de la onda. Generalizando los resultados obtenidos al introducir la ecuación dada por De Broglie ¡Error! No se encuentra el origen de la referencia., E. Schrödinger, en el año 1926, dedujo una expresión matemática aplicable para el comportamiento ondulatorio de partículas tales como el electrón

$$1.32 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (E - V) \cdot \psi = 0$$

Donde  $m$  es la masa de la partícula,  $E$  su energía total y  $V$  su energía potencial. La cantidad  $\psi$  se denomina autofunción o función de onda de la partícula.

Así como la función  $\psi$  de la expresión 1.31 sólo tiene significado para ciertos valores definidos de frecuencia, la función de onda  $\psi$  de la ecuación 1.32 es una solución satisfactoria de la ecuación, sólo para determinados valores denominados autovalores de la energía total  $E$ . Estos valores son equivalentes para los niveles discretos de energía postulados por Bohr. El tratamiento dado por la Mecánica Ondulatoria también nos lleva al requerimiento de estados de energía definidos para los electrones del átomo. Con la resolución de la Ecuación de Schrödinger se llega a los mismos resultados obtenidos por Bohr para el átomo del elemento Hidrógeno y para cationes hidrogenoides (con un solo electrón), pero evitando la aplicación de procedimientos y postulados que en la actualidad se consideran como no válidos.

En este punto es necesario realizar la siguiente aclaración: sólo hemos dado la Ecuación de Schrödinger como una información, ya que los conocimientos de matemática y física necesarios para el intento de su resolución para un átomo en particular, son mucho más avanzados que los que disponen en este momento. Lo importante es la interpretación y aplicación de la misma para entender el Modelo Atómico Cuántico, proceso que sí realizaremos en el tratamiento de este tema.

### 1.10.1 Función de onda y orbitales atómicos

En la producción de los anillos de difracción, cuando un haz de electrones acelerados atraviesa una placa de metal de espesor mínimo, resulta evidente que en los anillos la posibilidad o probabilidad de encontrar electrones es mayor que en las zonas como las determinadas entre los mismos. Es decir, cuando un electrón se difracta la probabilidad de que llegue a uno de los anillos es elevada, mientras que la posibilidad de que llegue a las zonas entre los anillos es muy baja o nula. De esta manera, es posible afirmar que la densidad electrónica, en las regiones determinadas por los anillos, es alta y, por lo tanto, es también alta la intensidad de la onda asociada.



La intensidad de una onda luminosa o sonora es proporcional, en cualquier punto, al cuadrado de su amplitud en dicho punto. Análogamente, el cuadrado de la autofunción,  $\psi^2$ , puede interpretarse como la probabilidad de que un electrón aparezca en cualquier punto especificado del diagrama de difracción.

Este análisis puede ser aplicado y generalizarse para los electrones de un átomo. La probabilidad de encontrar un electrón en cualquier punto  $(x, y, z)$ , es proporcional a  $\psi^2$  en ese punto, donde  $\psi$  es la función de onda que corresponde a uno de los valores permitidos de energía que pueden deducirse de la Ecuación de Schrödinger. Estos valores de energía permitidos, como ya hemos mencionado, son equivalentes a los niveles de energía postulados por Bohr en los que, de acuerdo a su Modelo Atómico se ubican las órbitas en las que se mueven los electrones alrededor del núcleo atómico, las funciones de onda son los equivalentes para la Mecánica Ondulatoria de las mencionadas órbitas. Estas funciones de onda se denominan orbitales atómicos.

**Aunque las palabras órbita y orbital son parecidas, es evidente que son diferentes difieren en una letra: la L. Son palabras diferentes que están asociadas, por supuesto, a conceptos diferentes.**

Mientras las órbitas de Bohr representan el lugar en el que el electrón se mueve alrededor del núcleo, que significa conocer la trayectoria del mismo, para los cual es posible determinar simultáneamente su velocidad y su posición. Esto no es válido de acuerdo al principio de Incertidumbre de Heisenberg. El concepto de orbital, por otra parte, está asociado a la zona del espacio atómico, alrededor del núcleo del átomo y con un determinado contenido de energía permitido, en donde la probabilidad de encontrar un electrón es máxima.

**Mientras que la órbita, para una cierta cantidad de movimiento, no puede describirse con ninguna certidumbre, la expresión para el orbital puede ser escrita exactamente.**

Podemos sintetizar el análisis realizado hasta el momento, a partir de la Mecánica Cuántica, para el estudio del movimiento del electrón alrededor del núcleo de un átomo, de la siguiente manera:

- Un electrón se mueve como si fuera una onda y sólo es posible hablar de la probabilidad de encontrarlo en un punto dado del espacio atómico.
- La ecuación de onda que resume el desplazamiento del electrón se denomina función de onda  $\psi$ , que admite valores grandes en algunas regiones del espacio del átomo alrededor del núcleo y es pequeña en otras, como si se tratara de una ola.
- Según la interpretación de la Ecuación de Onda, dada por Born, la probabilidad de encontrar un electrón en un punto dado es proporcional al cuadrado de  $\psi$  en ese punto.
- Las Funciones de Onda cuadrática, se denominan orbital atómico. Los mismos pueden visualizarse de manera tal que definen una región del espacio atómico en la cual la



probabilidad de encontrar un electrón es elevada. Es posible establecer el gráfico de la función  $\psi^2$ , con lo cual se obtiene un dibujo de los orbitales atómicos y explicar sus propiedades sin que sea necesario detenerse en detalles matemáticos complejos.

- La ecuación que debe resolverse para determinar estos orbitales fue planteada por el alemán Erwin Schrödinger quien, al resolver la misma, observó que sólo existen soluciones para determinados valores de energía. Por consiguiente, mientras Bohr tuvo que suponer que sólo era posible que el electrón se moviera en ciertos niveles estacionarios de energía en órbitas definidas, Schrödinger dedujo, a partir de su ecuación, que la energía del átomo está cuantizada.

Conceptualmente podemos pensar que el electrón es una onda que se desplaza en el espacio situado alrededor del núcleo del átomo.

Solamente determinadas longitudes de onda permiten el desplazamiento del electrón alrededor del núcleo en niveles energéticos permitidos, y cada onda lleva asociada una energía diferente.

**Por una coincidencia, que resulta sorprendente, los niveles de energía determinados a partir de la Ecuación de Schrödinger resultan ser exactamente iguales a los obtenidos por Bohr. Como los cálculos de Bohr se ajustan a los datos espectroscópicos correspondientes al átomo del elemento Hidrógeno, el Modelo Cuántico del átomo también está de acuerdo con los datos experimentales. Sin embargo, este modelo, basado en la Mecánica Cuántica, tiene fundamentos más sólidos que el Modelo de Bohr y puede ser aplicado para explicar el comportamiento de los electrones en átomos más complejos que el de Hidrógeno.**

### 1.10.2 Números Cuánticos

Cada orbital atómico está, según el Modelo Atómico Cuántico, especificado por tres números que se denominan números cuánticos.

**"Un número cuántico es un número que designa el estado de un electrón y especifica el valor de una propiedad"**

Los tres números cuánticos de Schrödinger son: el número cuántico principal  $n$ , el número cuántico secundario o acimutal  $l$  y el número cuántico magnético  $m_l$ .

#### 1.10.2.1 Número Cuántico Principal

Determina la energía de un electrón que pertenece a un átomo y puede adoptar los valores 1, 2, 3, ... hasta infinito. Para el átomo del elemento Hidrógeno, pero no para los átomos de más de un electrón, todos los orbitales con  $n = 2$  tienen la misma energía y lo mismo es válido para los orbitales de  $n = 3$  y para los valores superiores de  $n$ . Todos los orbitales de igual valor de  $n$  forman un nivel de energía del átomo. De esta manera, todos los orbitales con  $n = 3$  (nueve en total, ya que el número total de orbitales correspondientes a un número cuántico  $n$  son  $n^2$ ) forman el tercer nivel de energía de un átomo. Cuanto mayor es el valor



de  $n$ , tanto mayor es la distancia media entre el nivel de energía y el núcleo del átomo. Un electrón con  $n = 1$  está más cerca del núcleo que un electrón con  $n = 2$ , por ejemplo.

### 1.10.2 Número Cuántico Secundario o acimutal

Los orbitales que pertenecen a un determinado nivel de energía están, a su vez, agrupados en “subniveles de energía” dentro del correspondiente nivel.

Este número cuántico puede adoptar los valores  $0, 1, 2, \dots, n-1$ ; es decir,  $l$  puede adoptar  $n$  valores. Esto quiere decir, que en el nivel 1 de energía sólo hay un subnivel energético  $l = 0$ . Para el nivel de  $n = 2$  hay dos subniveles de energía (uno con  $l = 0$  y otro con  $l = 1$ ) y, así sucesivamente.

Corrientemente los subniveles de energía se denominan con letras en lugar de números.

**Por lo tanto, en el tercer nivel de energía hay tres subniveles denominados s, p, d.**

	s ( $l=0$ )	p ( $l=1$ )	d ( $l=2$ )	f ( $l=3$ )
n=1				
n=2				
n=3				
n=4				
n=5				
n=6				
n=7				

Figura. 1-34 Representación de los orbitales atómicos y las letras utilizadas para identificarlos según el  $n$ ,  $l$  y  $m_l$ .

Los distintos subniveles de energía corresponden a las diferentes velocidades con las que un electrón puede desplazarse alrededor del núcleo del átomo. Si un electrón está en un subnivel  $s$  no circula  $l = 0$ . Si se encuentra en el subnivel  $p$  circula a una velocidad determinada. En el caso de estar en el subnivel  $d$  circula con mayor velocidad y, así, sucesivamente. Para el átomo del elemento Hidrógeno, pero no para los átomos con más de un electrón, la energía del electrón (que es la suma de sus energías cinética y potencial) es la misma independientemente del subnivel que ocupe en un determinado nivel de energía.



### 1.10.2.3 Número Cuántico Magnético

En cada subnivel de energía hay  $2l + 1$  orbitales individuales, que están designados por el número cuántico magnético  $m_l$ , que para un determinado subnivel de energía dado por el número cuántico  $l$  puede adoptar  $2l + 1$  valores posibles.

Estos valores son:  $l, l-1, l-2, \dots, -l$ . Por ejemplo: si estamos analizando el subnivel  $p$  de cualquier nivel de energía, le corresponde un valor  $l=1$ , en cada subnivel  $p$  hay tres orbitales, que presentan números cuánticos magnéticos  $1, 0, -1$ . Estos orbitales se denominan  $p_x, p_y, p_z$ . Estos subíndices especifican de un modo más directo las formas y direcciones de los orbitales, como vemos en la [FIGURA. 1-34](#).





Número cuántico	Símbolo	Valores	Significado
Principal	$n$	1, 2, 3, ...	Especifica el nivel de energía del electrón
Secundario	$l$	0, ..., $n-1$	Designa el subnivel de energía en el que se ubican los orbitales dentro de un determinado nivel de energía.
Magnético	$m_l$	$l, l-1, \dots, -l$	Designa los orbitales que están dentro de cada subnivel de energía.
Magnético de spin	$m_s$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	Designa el estado del spin del electrón

Tabla 1.3 Números Cuánticos

#### Trabajo a realizar

Utilizando la información de la tabla de Números Cuánticos, elaborar una tabla que contenga la siguiente información para los primeros 4 niveles de energía:

Nivel de energía – Subnivel de energía – Tipo de orbital – Número de orbitales – Energía del orbital expresada como múltiplo de  $h \cdot \mathcal{R}$

## 1.11 Orbitales Atómicos

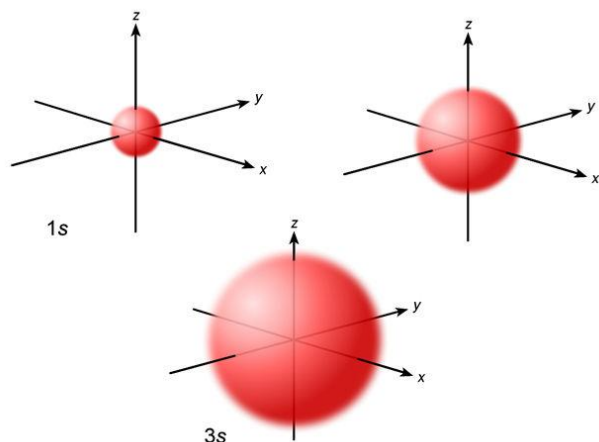
### 1.11.1 Orbitales s

El orbital de mínima energía del átomo del elemento Hidrógeno es el orbital  $1s$ , caracterizado por los números cuánticos:  $n=1$ ,  $l=0$ ,  $m_l=0$ . Es el único orbital permitido cuando  $n=1$ . Un electrón que se encuentre en la región del espacio atómico caracterizada por el orbital  $1s$  "ocupa" el orbital  $1s$  y es "un electrón  $1s$ ".

La representación gráfica de la función orbital es lo que denominamos forma del orbital y constituye la zona del espacio atómico alrededor del núcleo del átomo, dentro de un determinado nivel y subnivel de energía, donde la probabilidad de encontrar un electrón, caracterizado por los números cuánticos que determinan el nivel y el subnivel de energía, es máxima. La forma del orbital representa, entonces, las regiones atómicas en las que la densidad electrónica es mayor.



En la [FIGURA. 1-35](#) se utiliza el sombreado para indicar la probabilidad de encontrar un electrón en cualquier punto que rodea al núcleo. El sombreado es más intenso cerca del núcleo, puesto que la probabilidad de encontrar un electrón en esta zona es mayor. El sombreado se hace menos intenso al aumentar la distancia al núcleo. Esto significa, que al aumentar la distancia respecto del núcleo, disminuye la probabilidad de encontrar el electrón. La región sombreada suele llamarse nube de carga del electrón.



©NCSSM 2003

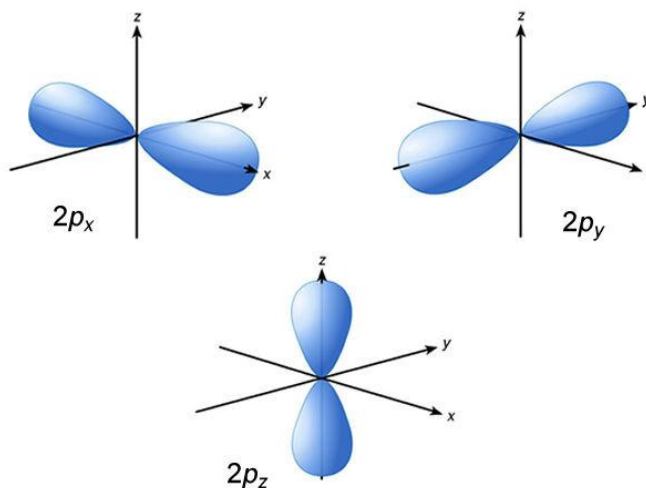
Figura. 1-35 Orbitales s

Todos los orbitales s, en cualquier nivel de energía, tienen simetría esférica, es decir, que la probabilidad de encontrar un electrón a una cierta distancia del núcleo, en este tipo de orbitales, es igual en cualquier dirección. Los orbitales s son adireccionales. Teniendo en cuenta esto, también suele representarse a los orbitales s con una esfera denominada superficie límite, que delimita una región dentro de la cual la probabilidad de encontrar un electrón es del orden de 90 %. Para un átomo del elemento Hidrógeno el radio de la superficie límite es de  $140\text{ pm}$ .

### 1.11.2 Orbitales p

Cuando  $n > 1$  pueden existir tres orbitales con número cuántico  $l = 1$ , llamados orbitales p, que presentan la forma y las orientaciones en el espacio que se indican en la [FIGURA. 1-36](#).

Los tres orbitales tienen la misma forma, pero están orientados en direcciones diferentes del espacio: cada uno se extiende a lo largo de un eje distinto perpendicular a los demás, es decir, que el ángulo entre los orbitales p es de  $90^\circ$ . Los mismos se designan, para indicar su orientación espacial, con los nombres de los ejes de coordenadas cartesianas:  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  respectivamente. Es más probable encontrar un electrón  $p_x$  cerca del eje x que en otros puntos del espacio.



©NCSSM 2003

Figura. 1-36 Orbitales p



Un orbital  $p$  posee un plano nodal, es decir, un plano en que la probabilidad de encontrar un electrón  $p$  es nula. Este plano se extiende a través del núcleo del átomo.

El ángulo que separa a los orbitales  $p$  ( $90^\circ$ ) permite que la separación entre estas "nubes de carga" sea máxima, de manera tal que, las fuerzas de repulsión que se establece entre zonas en las que se mueven partículas del mismo signo de carga (electrones), sea mínima. De esta manera la distribución de los electrones contribuye a la estabilidad del átomo.

### 1.11.3 Orbitales $d$ y $f$

Para los niveles de energía con  $n > 2$ , puede haber cinco orbitales con  $l = 2$ , denominados orbitales  $d$ . La forma de designar a estos orbitales y sus superficies límites se indican en la [FIGURA. 1-37](#).

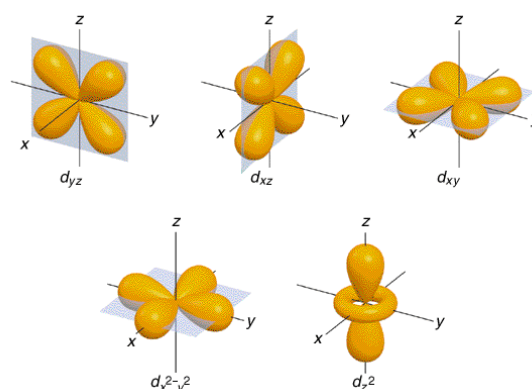


Figura. 1-37 Orbitales  $d$

Cuatro de los orbitales  $d$  tienen forma lobular, mientras que el orbital  $d_{z^2}$  presenta una forma diferente a la de los demás.

Cuando  $n > 3$ , aparecen los orbitales  $f$ .

Hay en total siete orbitales para cada valor de  $n > 3$ , pero, no existen actualmente representaciones de los mismos que puedan ser aplicadas en su totalidad, sin embargo uno de los modelos propuesto que explica algunas de las propiedades de estos orbitales son los que se encuentran en la [FIGURA. 1-38](#), pero no es necesario memorizarlas ya que son de carácter teórico y complejas de representar.

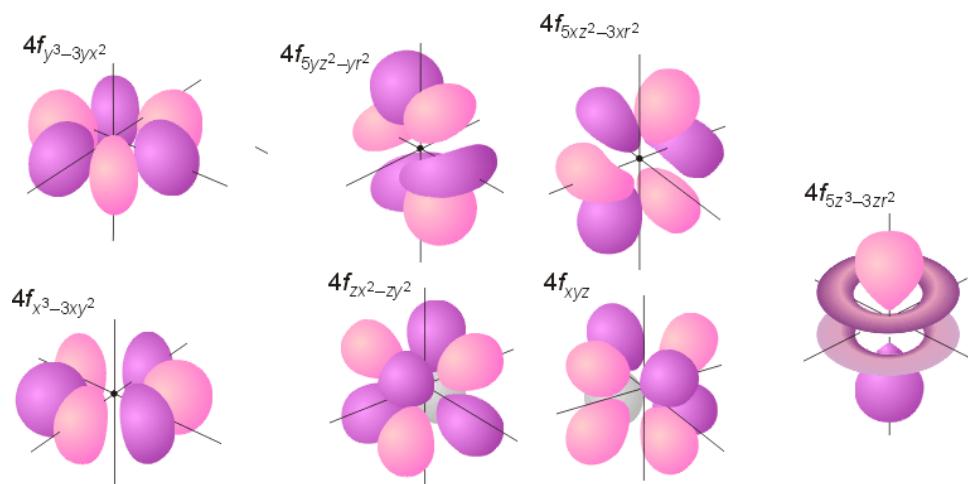


Figura. 1-38 Modelo teórico de los orbitales  $f$



## 1.12 Spin del Electrón

Un estudio detallado del espectro del átomo del elemento Hidrógeno indica que las líneas que lo componen no presentan exactamente las frecuencias determinadas por los cálculos de Schrödinger. En el año 1925, los físicos americanos de origen holandés, Samuel Goudsmit y George Uhlenbeck, pudieron explicar estas pequeñas diferencias. Propusieron que el electrón se comporta, de alguna manera, como una esfera que gira sobre su eje, similar a la rotación de la Tierra. Esta propiedad se denomina spin del electrón.

Un electrón presenta solamente dos estados posibles de spin, que se representan con flechas

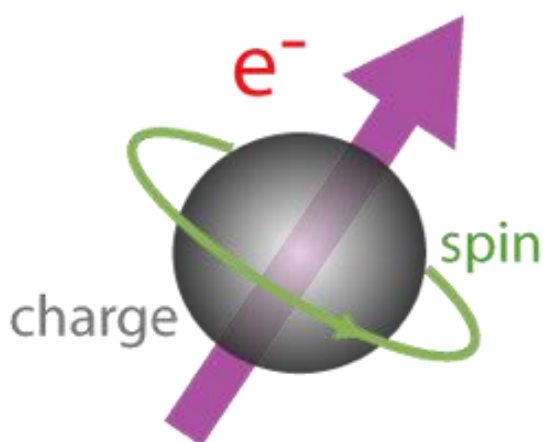


Figura. 1-39 Representación del electrón

verticales orientadas en sentido opuesto:  $\uparrow$  y  $\downarrow$ . Podemos establecer la siguiente comparación: un electrón gira alrededor de su eje a velocidad constante, o bien en el sentido de movimiento de las agujas de un reloj (estado  $\uparrow$ ), o en el sentido opuesto al movimiento de las mismas (estado  $\downarrow$ ). Los dos estados del spin de un electrón están caracterizados por un cuarto número cuántico, el número cuántico magnético del spin,  $m_s$ , que solamente puede adoptar dos valores posibles:  $+\frac{1}{2}$  y  $-\frac{1}{2}$ , para un electrón  $\uparrow$  y

para un electrón  $\downarrow$ , respectivamente.

El descubrimiento de que sólo es posible para un electrón dos estados de spin., permitió explicar el experimento que en el año 1920 habían realizado Otto Stern y Walter Gerlach. Estos científicos hicieron pasar un haz de átomos del elemento Plata entre dos polos de un potente imán que generaba un campo no homogéneo (es decir, cuya intensidad varía de un lugar a otro). Observaron que el haz se dividía en dos. Podemos explicar este hecho del siguiente modo: un átomo de Plata tiene un número impar de electrones  $Z = 47$  y en este experimento se comporta como si fuera un átomo de Hidrógeno con su único electrón. Como resultado del spin del electrón impar, el átomo se comporta como un pequeño imán y al recorrer su trayectoria es desviado por el imán del laboratorio. El haz se divide en dos porque los átomos con un electrón impar  $\uparrow$  sufrieron un empuje en una dirección y los átomos con un electrón par  $\downarrow$  experimentaron un empuje en la dirección opuesta.

## 1.13 Estructura del Átomo del Elemento Hidrógeno según el Modelo Cuántico

El único electrón que compone al átomo del elemento Hidrógeno puede ocupar cualquiera de los orbitales que hemos descripto. Cuando se encuentra en su estado de mínima energía, que



es el estado más estable, se dice que el átomo se encuentra en su estado fundamental. En estas condiciones, el electrón ocupa el orbital  $1s$  y está determinado por sus cuatro números cuánticos que adoptan los siguientes valores:

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

El electrón puede encontrarse en uno u otro estado de spin. Si se entrega al electrón suficiente energía como para alcanzar el  $n = 2$ , el electrón podría ubicarse en cualquiera de los cuatro orbitales presentes en este nivel (el orbital  $2s$  o cualquiera de los tres orbitales  $p$ ). Si se suministra más energía al electrón, puede alcanzar el nivel  $n = 3$ , y ocupar cualquiera de los nueve orbitales presentes en el mismo (el  $3s$ , los tres orbitales  $3p$  y los cinco orbitales  $3d$ ).

El electrón es expulsado del átomo cuando recibe una energía suficiente que le permita vencer la fuerza de atracción que ejerce el núcleo del átomo. En estas condiciones, al perder un electrón el átomo, se dice que el mismo se ha ionizado.

La energía necesaria para ionizar un átomo de Hidrógeno, que se encuentra en su estado fundamental, es la cantidad de energía que debe entregarse al mismo para llevarlo desde el orbital con  $n = 1$  hasta un nivel con energía nula (que es la energía que corresponde a una gran separación entre el electrón y el protón). Esta energía está dada por el producto  $h \cdot \mathcal{R}$  y vale  $2,18 \times 10^{-18} J$ . Por lo tanto, para ionizar un mol de átomos del elemento Hidrógeno, que constituyan un sistema en estado gaseoso, es necesaria una cantidad de energía  $6,02 \times 10^{23}$  veces mayor, es decir, una energía de  $1,31 MJ$ .

## 1.14 Estructuras de los Átomos Multielectrónicos – Energías Orbital

En estado neutro, todos los átomos de los distintos elementos conocidos, diferentes al Hidrógeno, tienen más de un electrón. El átomo de Helio  $Z = 2$  posee dos electrones, el átomo de Litio  $Z = 3$  tres electrones y, en general un átomo de un elemento de Número atómico  $Z$  posee  $Z$  electrones. Todos estos son ejemplos de átomos multielectrónicos.

En un átomo de estas características, los electrones ocupan orbitales parecidos a los del átomo de Hidrógeno, pero que difieren en las energías. El núcleo, al tener un mayor número de protones atrae a los electrones con mayor intensidad y, como resultado de este efecto, la energía asociada a cada orbital disminuye. Por otra parte, entre los electrones hay fuerzas de repulsión, aumentando, de esta manera, la energía de estos electrones.

### 1.14.1 Carga Nuclear Efectiva

Para el átomo de Hidrógeno, como hay un solo electrón, no existen fuerzas de repulsión entre electrones de un mismo átomo. Esto determina que la energía de los orbitales de un mismo nivel de energía tenga el mismo contenido energético. En los átomos multielectrónicos, las repulsiones establecidas entre electrón y electrón determinan que un orbital  $s$  tenga menor



energía que uno  $p$  del mismo nivel y, a su vez, que la energía asociada a los orbitales  $p$  sea menor que la de los orbitales  $d$  perteneciente al mismo nivel de energía. Sin embargo, los electrones de un determinado subnivel de energía en el que se encuentran los orbitales atómicos, tienen la misma energía, como por ejemplo para cada uno de los orbitales  $2p$ .

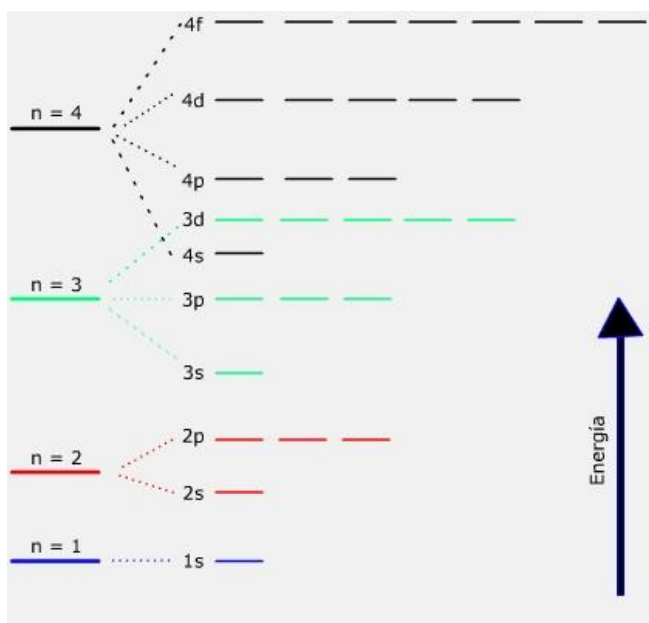


Figura. 1-40 Gráfico de energía de un átomo polielectrónico

El orden de los orbitales en los distintos niveles de energía, según su contenido energético con referencia al núcleo del átomo y, la distribución de los electrones en cada uno de ellos es lo que determina la configuración electrónica cuántica del elemento y su representación en función de la energía asociada constituye el denominado Gráfico de Energía del Átomo.

Las diferencias, que pueden observarse en la energía de los orbitales, dentro de un mismo nivel de energía, pueden atribuirse principalmente a dos factores:

- Un electrón  $s$  puede encontrarse muy cerca del núcleo del átomo, mientras que lo mismo no es posible para los electrones  $p$ . Por lo tanto, es posible establecer que un electrón  $s$  penetra más cerca del núcleo que un electrón  $p$ .
- Cada electrón presenta fuerzas de repulsión con los demás electrones del átomo.

Esto determina que el mismo esté menos atraído por el núcleo que en los casos, como el del Hidrógeno, en el que no están presentes otros electrones. Se dice que en estos casos el electrón está apantallado de la fuerza atractiva del núcleo por los demás electrones que componen al átomo. De esta forma, la carga nuclear efectiva es menor que la carga real del núcleo.

Estos dos factores, finalmente, se relacionan entre sí ya que como un electrón  $s$  penetra más cerca del núcleo que un electrón  $p$ , dentro de un mismo nivel de energía del átomo, está menos apantallado de la atracción que el núcleo ejerce sobre los otros electrones del átomo. De esta forma, los electrones  $s$  son atraídos por una carga nuclear efectiva más fuerte que los electrones  $p$  estando, por consiguiente, más atraído por el núcleo. En base a lo expuesto, es posible afirmar que:

**Un electrón  $s$  tiene una energía algo menor (más negativa) que la de un electrón  $p$  dentro de un mismo nivel de energía.**



Un razonamiento similar al expuesto, puede realizarse para analizar la diferencia en el contenido de energía de los subniveles  $p$  y  $d$ . Diferencias en cuanto a penetración y apantallamiento aparecen entre estos orbitales, que determinan que, en término medio, los electrones  $d$  estén más alejados del núcleo que los electrones  $p$ .

Los efectos de apantallamiento y de penetración pueden ser considerables: un orbital  $4s$  tiene una energía bastante más baja que la de los orbitales  $4p$  y  $4d$ , de manera tal que puede presentar un contenido energético inferior al de los orbitales  $3d$  del mismo átomo. Que este efecto ocurra o no en un átomo determinado, depende de su número de electrones. En algunos átomos, el orbital  $4s$  presenta un contenido de energía menos que el de un orbital  $3d$ , pero en otros su energía es más alta. Esto es posible de observar en las estructuras electrónicas de algunos metales de transición.

### 1.14.2 Principio de Exclusión de Pauli

El nivel mínimo de energía correspondiente a un átomo, no corresponde a la configuración en la cual todos los electrones ocupan el orbital  $1s$ . Esto fue establecido por el austríaco Wolfgang Pauli en el año 1925, en el Principio de Exclusión que puede enunciarse del modo siguiente:

**Solamente dos electrones como máximo pueden ocupar un mismo orbital y sus spines son opuesto, es decir, los electrones están apareados**

Los spines de dos electrones están apareados cuando un electrón es  $\uparrow$  (el spin vale  $+\frac{1}{2}$ ) y el otro es  $\downarrow$  (el spin vale  $-\frac{1}{2}$ ). Dos electrones apareados se designan de la siguiente forma:  $\uparrow\downarrow$ . Por lo tanto, cuando se establece el diagrama de energía correspondiente a la configuración electrónica de un átomo, en cada recinto, que representa un orbital del mismo, puede haber como máximo dos electrones con spines opuestos, es decir, dos electrones apareados.

Otra forma de enunciar el Principio de Exclusión de Pauli es la siguiente:

**En un átomo, no pueden existir dos electrones con sus cuatro números cuánticos idénticos, deben diferir al menos en uno de ellos**

Es decir, que si dos electrones están en el orbital  $1s$  y tienen ambos  $n=1$   $l=0$   $m_l=0$ , deben diferir entonces en el valor de  $m_s$  que podrá ser  $\uparrow$  (spin  $+\frac{1}{2}$ ) o  $\downarrow$  (spin  $-\frac{1}{2}$ ).

### 1.14.3 Principio de Construcción

Para predecir la configuración electrónica de mínima energía para un determinado átomo de un elemento, se aplica un procedimiento llamado Principio de Construcción.

Aplicando este principio es posible determinar la configuración de mínima energía total para el átomo, teniendo en cuenta la energía cinética de los electrones, la fuerza de atracción que



sobre los mismos ejerce el núcleo del átomo y la repulsión de los electrones entre sí. El Principio el orden de llenado de los orbitales a medida que se agregan los electrones uno a uno, hasta que están presentes  $Z$  electrones del átomo del elemento de Número Atómico  $Z$ .

La [FIGURA. 1-40](#) que indica el gráfico de energía de un elemento es un primer indicio del orden de llenado de los orbitales, según el contenido de energía respecto del núcleo, que es el siguiente:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d$$

Para los valores de  $Z$  comprendidos entre 1 y 20. Por otra parte, para los valores de  $Z$  entre 21 y 38, el orden de llenado de los orbitales, según el contenido de energía respecto del núcleo, que es el siguiente:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d$$

No es necesario memorizar el orden de llenado de los electrones en los orbitales de un determinado átomo, ya que se obtiene la misma configuración cuando se añaden electrones en el orden indicado en la [FIGURA. 1-40](#) que corresponde a la estructura de la Tabla Periódica Moderna de los Elementos.

Para asignar la configuración electrónica y el correspondiente gráfico de energía de un átomo de un elemento de Número Atómico  $Z$  se procede del modo siguiente:

1. Se añaden  $Z$  electrones, uno a uno, en los distintos orbitales de cada nivel de energía, ubicados en el correspondiente subnivel energético, según el orden indicado. De acuerdo al Principio de Exclusión de Pauli, en cada orbital no pueden existir más de dos electrones con spin opuesto.
2. Si en un subnivel de energía hay más de un orbital con el mismo contenido energético (como en el caso de los orbitales  $p, d$  o  $f$ ), antes de aparearse, los electrones ocupan primero todos los orbitales posibles del mencionado subnivel con spines paralelos entre sí.

La segunda regla indicada se llama Regla de Hund, en honor al físico alemán especialista en espectroscopía Fritz Hund, que fue quien la propuso. Los electrones poseen spines paralelos (que se indica del modo siguiente:  $\uparrow\uparrow$ ) cuando giran en torno a su eje en la misma dirección.

La explicación de la Regla de Hund se basa en la repulsión que se produce entre los electrones de un átomo. Al ocupar los electrones, dentro de un mismo subnivel de energía, distintos orbitales atómicos, están más alejados entre sí que si se ubicaran en el mismo orbital. De esta manera la repulsión entre los mismos es mínima, se repelen menos entre sí, la energía del átomo es más baja y, por lo tanto, la configuración electrónica del mismo, es más estable.





### 1.14.3.1 Del Hidrógeno (H) al Sodio (Na)

Para ejemplificar la aplicación del Principio de Construcción, podemos determinar la configuración electrónica y el correspondiente gráfico de energía de los elementos de  $Z = 1$  (Hidrógeno, H) hasta el elemento de  $Z = 11$  (Sodio, Na).

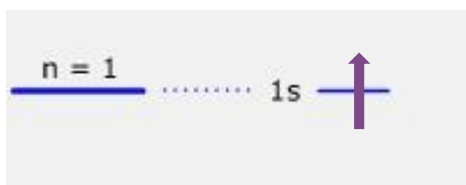
Elemento Hidrógeno (H)  $Z=1$

Configuración Electrónica



Donde 1 representa el nivel de energía,  $s$  representa el subnivel de energía y el correspondiente orbital y el superíndice 1 indica el número de electrones ubicados en el mismo.

Gráfico de Energía:

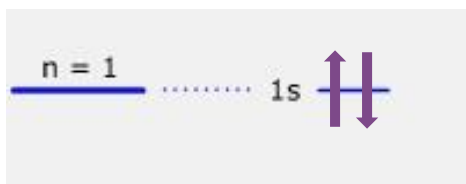


Elemento Helio (He)  $Z=2$ :

Configuración Electrónica:



Gráfico de Energía:

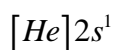


Elemento Litio (Li)  $Z=3$ :

Configuración Electrónica:



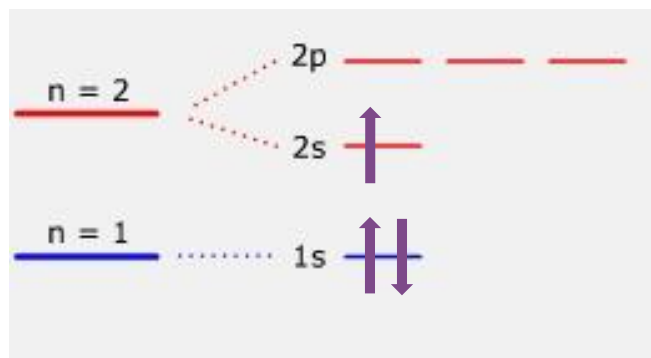
Puesto que el átomo del elemento Litio está formado por un solo electrón  $2s$  en su nivel de energía externo, y su nivel de energía interno tiene la configuración electrónica del Helio, suele simplificarse la configuración electrónica de la siguiente manera:



Resulta útil pensar la configuración electrónica de un átomo de los elementos de  $Z > 2$  como si el mismo estuviera formado por una parte interna de igual configuración que el elemento inértido anterior y rodeada de los electrones ubicados en el nivel de energía externo.



Gráfico de Energía:



Elemento Berilio (Be) Z=4:

Configuración Electrónica:

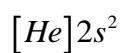
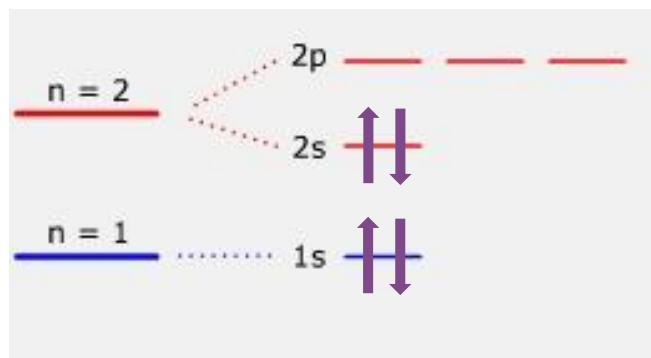


Gráfico de Energía:



Elemento Boro (B) Z=5:

Configuración Electrónica:

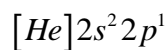
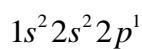
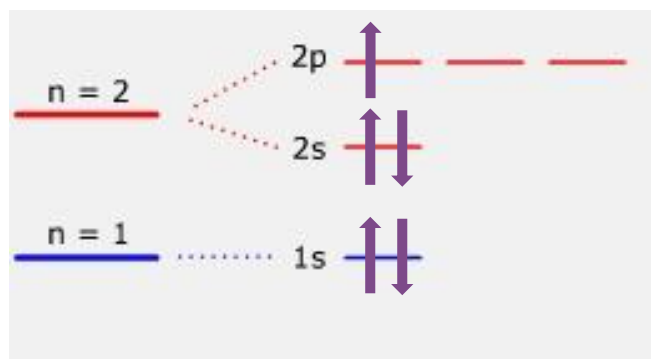


Gráfico de Energía:





Elemento Carbono (C) Z=6:

Configuración Electrónica:

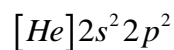
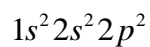
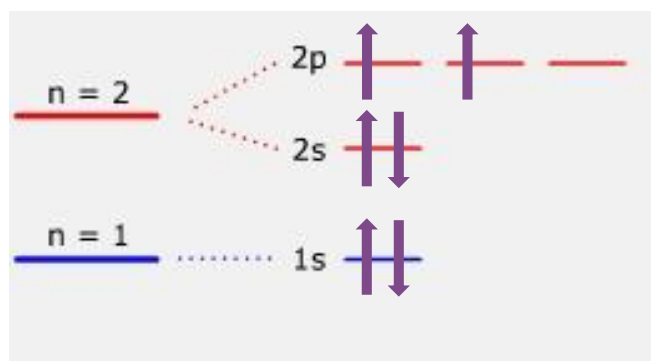


Gráfico de Energía:



Elemento Nitrógeno (N) Z=7:

Configuración Electrónica:

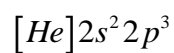
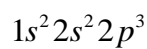
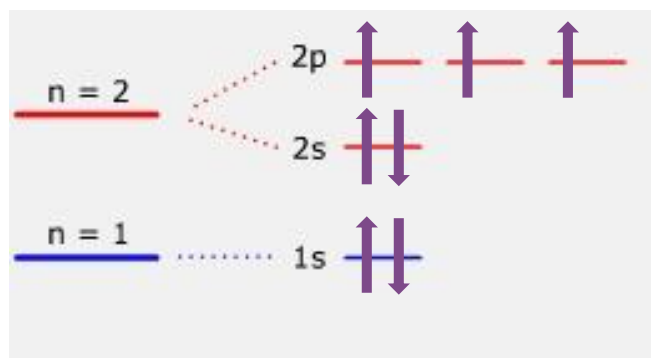


Gráfico de Energía:



Elemento Oxígeno (O) Z=8:

Configuración Electrónica:

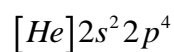
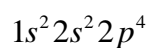
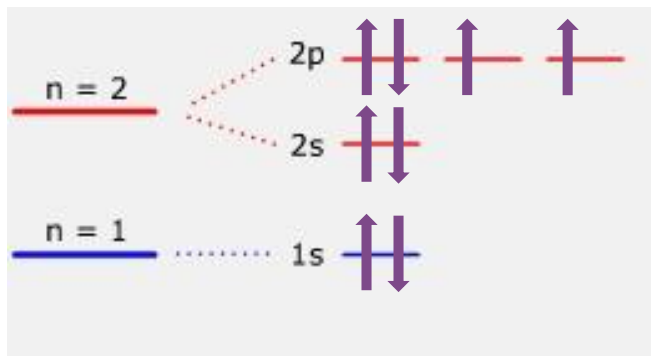




Gráfico de Energía:



Elemento Flúor (F) Z=9:

Configuración Electrónica:

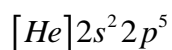
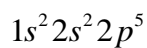
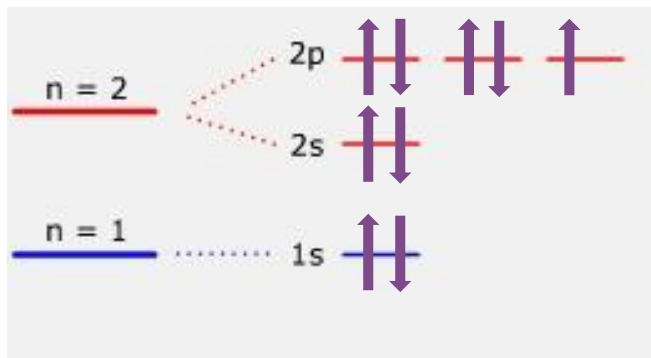


Gráfico de Energía:



Elemento Neón (Ne) Z=10:

Configuración Electrónica:

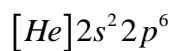
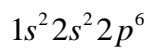
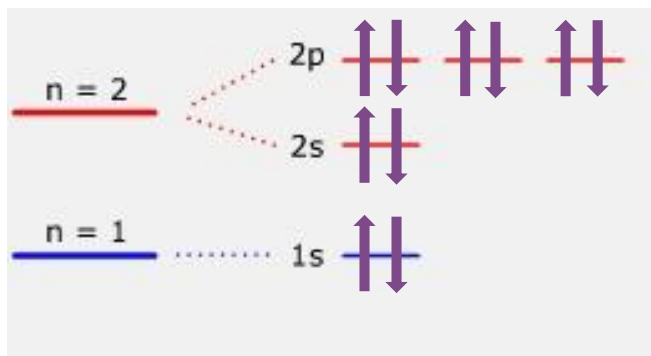


Gráfico de Energía:





Elemento Sodio (Na) Z=11:

Configuración Electrónica:

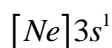
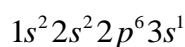
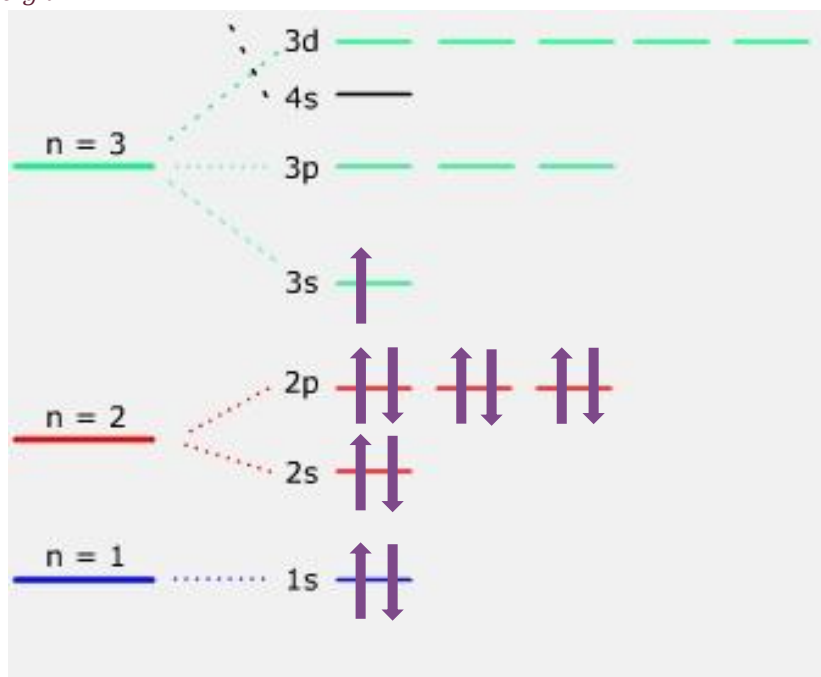


Gráfico de Energía:

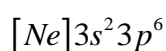


Para los elementos inértidos, como todos sus niveles de energía están completos, con respecto al número máximo de electrones permitidos en cada uno, se dice que para los mismos la configuración electrónica constituye un nivel cerrado. La configuración electrónica externa del elemento Litio (Li), que es un metal fuertemente activo desde el punto de vista de la reactividad química, tiene un único electrón en un orbital  $2s$ . Para el elemento Sodio (Na), que también es un metal activo, también tiene un solo electrón en su nivel de energía externo, en el orbital  $3s$ . Resulta evidente, que con algunos conceptos sobre la estructura del átomo, es posible comenzar a explicar el carácter periódico de los elementos.

**Aplicando el Principio de Construcción se llega de manera periódica a configuraciones electrónicas externas similares y, por lo tanto, a comportamientos químicos también parecidos.**

### 1.14.3.2 Llenado de Orbitales d

La configuración electrónica del Argón (Ar) es la siguiente:



Los tres primeros niveles de energía están completos. El Argón es un elemento inértido, que compone la sustancia simple monoatómica del mismo nombre, que es un gas inerte, incoloro e



inodoro, parecido al gas Neón. Como resultado de la penetración y del apantallamiento, los orbitales  $4s$  tienen un contenido energético más bajo que los  $3d$  y, por lo tanto, se llenan antes. De esta manera, las dos configuraciones electrónicas siguientes son  $[Ar]4s^1$  y  $[Ar]4s^2$ , que corresponden a los elementos Potasio (K) y Calcio (Ca) respectivamente. A partir de este elemento, el Calcio, se ocupan los orbitales  $3d$  y se produce un cambio en el ritmo de llenado de los orbitales en los elementos de la Tabla Periódica.

Los 10 electrones siguientes están destinados a los elementos comprendidos entre el Escandio (Sc) de  $Z = 21$  y el Zinc (Zn) de  $Z = 30$ , que ocupan los cinco orbitales  $3d$  del tercer nivel de energía. De esta forma, la configuración electrónica del Escandio es  $[Ar]3d^1 4s^1$ , y la de su vecino, el Titanio (Ti) es  $[Ar]3d^2 4s^1$ .

**Es importante notar que en la configuración electrónica se escriben los electrones  $4s$  después de los electrones  $3d$ .**

Esto pone de manifiesto el cambio en el orden de energía de los orbitales, que comienza en el escandio, y que determina que los orbitales  $3d$  tienen menos energía que los  $4s$ . El Principio de Construcción permite obtener la configuración global correcta, aun cuando el orden en el que se agregan los electrones según este principio no coincide exactamente con el orden real de energías del átomo.

No podemos, entonces, obtener de forma tan directa como antes, la configuración electrónica de un átomo, ya que la configuración del subnivel semicompleto  $d^5$  y la del completo  $d^{10}$ , son más estables de lo que sugiere la teoría simplificada. En algunos casos, el átomo neutro tiene una energía total más baja si el subnivel  $3d$  está semicompleto con cinco electrones con spin paralelo, o completo con 10 electrones, por transferencia de un electrón desde el subnivel  $4s$ . Por ejemplo, la configuración del Cromo (Cr) es  $[Ar]3d^5 4s^1$  y la del Cobre (Cu) es  $[Ar]3d^{10} 4s^1$ .

Una vez completo el subnivel  $3d$ , a partir del Galio (Ga) se llenan los orbitales  $4p$ . Por ejemplo, la configuración del átomo del elemento Arsénico (As) de  $Z = 33$ , que pertenece al grupo 15 de la Clasificación Moderna de los Elementos, es  $[Ar]3d^5 4s^2 4p^3$ .

El cuarto período de la Tabla Periódica de los Elementos está compuesto por 18 elementos, puesto que los orbitales  $4s$  y  $4p$  pueden contener un total de 8 electrones y los orbitales  $3d$  un total de 10 electrones más. Se trata del primer "período largo" de la Clasificación de los Elementos.

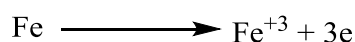
A continuación se ocupa el orbital  $5s$  y después se llenan los orbitales  $4d$ . Como sucede en el cuarto período, la energía de los orbitales  $4d$  es menor que la del  $5s$ , una vez que éste ha sido ocupado con dos electrones. Un cambio similar ocurre en el sexto período, pero se ocupan los orbitales  $4f$ . El Cerio, por ejemplo, presenta la configuración electrónica



$[Xe]4f^26s^2$ . Luego los electrones continúan ocupando los siete orbitales  $4f$ . El Iterbio presenta los siete orbitales  $4f$  completos y su configuración es  $[Xe]4f^{14}6s^2$ . Luego se ocupan los orbitales  $5d$  y finalmente los  $6p$ . Por ejemplo, la configuración electrónica del Bismuto (Bi), de  $Z = 83$ , es  $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$ .

#### 1.14.4 Configuraciones Electrónicas de los Iones

Un catión es un ion positivo, que puede estar constituido por uno o más átomos del mismo o distintos elementos. En el caso de los cationes formados por un átomo de un elemento particular, se obtienen cuando el mismo cede uno o más electrones más débilmente retenido/s. Si el número cuántico principal del último nivel de energía es  $n$ , los electrones pueden ser extraídos en el siguiente orden: primero los electrones  $np$ , luego los electrones  $ns$  y finalmente los electrones  $(n-1)d$ . Si por ejemplo analizamos la siguiente reacción de oxidación:



Teniendo en cuenta que, la configuración electrónica del átomo de Hierro (Fe) es  $[Ar]3d^64s^2$  y que cuando el mismo se transforma en el catión Hierro (III) (antes denominado catión férrico),  $\text{Fe}^{+3}$ , el proceso requiere la cesión de tres electrones, la configuración electrónica del catión será:  $[Ar]3d^5$ . Como no tiene el átomo de Hierro electrones  $p$ , se ceden primero los electrones  $4s$  y luego un electrón  $4d$ .

Un anión es un ion negativo, que puede estar constituido por uno o más átomos, del mismo, o distintos elementos. En el caso de los aniones formados por un átomo de un elemento particular, se obtienen cuando el mismo gana uno o más electrones. Los aniones, al formarse, ganan electrones que se ubican en orbitales vacíos o con un solo electrón en el último nivel de energía y tiende a adquirir la configuración electrónica externa del elemento inértido más cercano. En el caso del átomo del elemento Nitrógeno (N), cuya configuración electrónica es  $1s^22s^22p^3$ , vemos que para adquirir la configuración electrónica del inértido más cercano (el Neón, Ne), necesita ganar 3 electrones. Por consiguiente la configuración electrónica del anión nitruro,  $\text{N}^{-3}$  es:  $1s^22s^22p^6$ , que es la configuración electrónica correspondiente al elemento Neón.

...De esta manera hemos llegado al final, de por lo menos las etapas más importantes de nuestro viaje, a través del tiempo y de la historia de la ciencia. En este viaje seguramente hemos comenzado a interpretar el comportamiento y algunas propiedades de esta partícula, que como ya hemos dicho, es común a todo material que existe en el Universo, a las formas animadas e inanimadas y es, sin duda alguna, el origen de la vida, cuando a partir de sus combinaciones químicas, forma diferentes materiales. Pero tengan presente, es sólo una primera etapa para develar a esta misteriosa, fascinante partícula que es el átomo. Este viaje continúa, sin pausa aún en nuestros días y seguramente, no



tendrá fin...

## 2. Tabla Periódica

Aplicando muchos de los conceptos de los que ya disponemos, nos proponemos realizar, algunos de los pasos que los químicos hicieron en su intento para clasificar a los elementos sistemáticamente. Este intento se enlaza con la necesidad de encontrar la propiedad que caracterice realmente el comportamiento del átomo, de aquí la relación permanente entre el desarrollo del conocimiento de la Estructura Atómica y la evolución en la clasificación de los elementos hasta llegar a la Tabla Periódica que hoy conocemos.

### 2.1 Descubrimiento de los Elementos y la necesidad de su clasificación

Desde los comienzos de la historia de la humanidad, desde que el hombre apareció y se desarrolló en el planeta Tierra, utilizó, caracterizó y modificó a los materiales que lo rodeaban para realizar sus actividades.



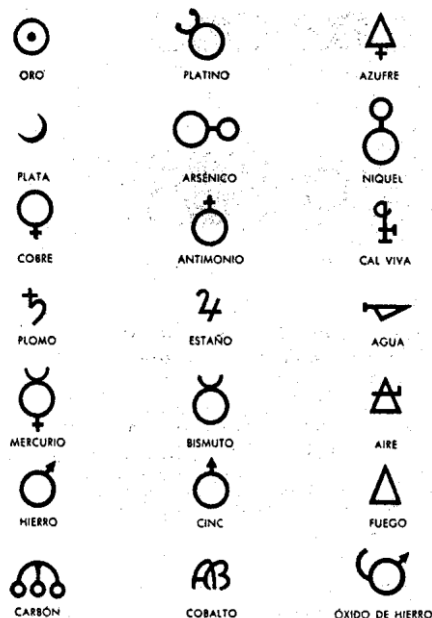
Figura. 2-1 La espagiría es la aplicación de arte de la alquimia en la preparación de tinturas vegetales y metálicas.

Así, a través del tiempo, se comprobó que las sustancias que constituyen a los materiales están compuestas por distintos elementos químicos, a partir de cuyo descubrimiento fue necesario su estudio y caracterización.

A principios del siglo XIX, hacia el año 1830, ya se conocían más de cincuenta elementos diferentes.

Los químicos empezaron a tener serios problemas:

- A medida que se fueron descubriendo los elementos había que asignarles un nombre y un símbolo que permitan identificarlos y diferenciarlos entre sí. En un principio, el nombre derivaba de la forma latina o griega que describía algún rasgo característico de la sustancia simple que forma el elemento. Este criterio fue modificándose en el tiempo. Los símbolos de los elementos también fueron variando hasta llegar a ser los que conocemos actualmente. Los griegos, para designar a los metales y a otras sustancias, empleaban contracciones de sus nombres o representaciones de los planetas. Los alquimistas utilizaban un sistema similar para simbolizar a los distintos elementos. Con el tiempo la situación que se







alcanzó en el intento de asignar símbolos a los elementos se transformó en un caos en el que existían para cada elemento varios símbolos posibles. En un intento de sistematizar la nomenclatura y generalizar su uso, Dalton propuso un sistema esquemático en el cual los átomos de diversos elementos se representaban mediante líneas y círculos; diversas agrupaciones de círculos representaban sus "átomos compuestos". El sueco Jöns Jacob Berzelius propuso símbolos que, con pequeñas modificaciones, son similares a los actuales.

- Primero los alquimistas y luego los químicos, experimentalmente lograron aislar y purificar las sustancias simples que los distintos elementos formaban. De esta manera pudieron determinar, también en forma experimental, las propiedades físicas y químicas de cada una de estas sustancias simples. A partir de estas propiedades podían describirse las características fundamentales de los elementos. Por ejemplo: el elemento Oxígeno se presenta en la naturaleza formando la sustancia simple oxígeno, que es un gas incoloro, inodoro e insípido, constituido por moléculas diatómicas. El gas oxígeno tiene como variedad alotrópica al ozono. Puede combinarse con metales y no metales formando compuestos binarios llamados óxidos. Estos, al reaccionar con el agua, forman compuestos ternarios: los oxo - ácidos y los hidróxidos. Combinado con el elemento Hidrógeno forma la sustancia agua que, por sus propiedades, es una de las sustancias fundamentales en la naturaleza. También el elemento Oxígeno compone un número importante de sustancias orgánicas, como los alcoholes, los glúcidos, los aminoácidos, entre otros.

A medida que se fueron descubriendo los distintos elementos, que se los fue caracterizando, a través de las propiedades de las sustancias simples que forman, que son las que se encuentran libres en la naturaleza. Resulta evidente que la información acumulada en la primera mitad del siglo XIX era inmensa. En este punto, la otra parte del problema en el que los químicos de la época estaban inmersos es clara: ¿cómo ordenar toda esta información para que la misma resulte realmente útil y de fácil acceso?

Surge de esta manera la necesidad de "clasificar a los elementos". Cuando nos referimos a clasificar queremos decir establecer relaciones entre las partes componentes de un sistema particular, es decir, ordenar sobre la base de un criterio predeterminado. Es necesario, entonces, definir claramente el criterio que se va a aplicar.

El avance que los químicos lograron en los numerosos intentos de clasificación sistemática de los elementos, está íntimamente vinculado con el conocimiento, a través de la historia, de la estructura del átomo. Es por este motivo que, de acuerdo al Modelo Atómico vigente en cada momento, el criterio de clasificación de los elementos fue variando. Esto responde al hecho de que cada tipo particular de átomo, con sus características estructurales, define a un elemento. A su vez, los elementos componen a las sustancias simples, a sus variedades alotrópicas y a las sustancias compuestas que constituyen los distintos materiales que se presentan en la naturaleza.



Cuando hablamos de Dimitri Mendeleev y su genial desarrollo, la Tabla Periódica de los Elementos, basada en la llamada Ley Periódica: "Las propiedades de los elementos son funciones periódicas de sus Masas Atómicas crecientes", vemos una herramienta de gran utilidad en el laboratorio, en el análisis del comportamiento de las sustancias o para resolver distintos tipos de problemas.

Es curioso ver que es posible encontrar, según la bibliografía consultada, las diferentes formas en que se escribe el apellido de este genial químico: Mendeleiev, Mendelejev, Mendelejev, entre otras. Utilizaremos, simplemente por elección, Mendelejev.

## 2.2 Clasificación de los Elementos Químicos

Es posible observar numerosas regularidades en las propiedades y el comportamiento de los elementos, podemos decir que los elementos químicos poseen una serie de regularidades o modelos de conducta.

Una propiedad fundamental de los elementos es la actividad química o reactividad química y, podemos decir, que casi todas las sustancias simples que componen los elementos poseen actividad química, o sea, bajo ciertas condiciones de presión y temperatura, cada una se combinará con otro o con varios para formar distintos compuestos. Sin embargo, hay seis, que carecen de reactividad o actividad o, que la misma es muy baja.

Esas sustancias simples que no son químicamente activas se presentan en la naturaleza en

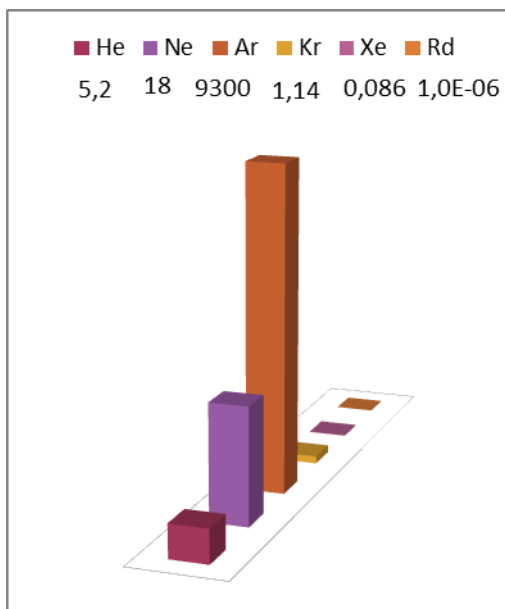


Figura. 2-3 Abundancia de los gases nobles en la corteza terrestre en ppm por volumen en la atmósfera

estado gaseoso y son los llamados gases nobles o raros y están compuestos por los denominados "elementos inértidos". Los mismos son: el Helio (He), el Neón (Ne), el Argón (Ar), el Kriptón (Kr), el Xenón (Xe) y el Radón (Rn). Forman las sustancias simples que se presentan en la naturaleza como gases constituidos por moléculas monoatómicas. Es importante aclarar que hablamos de "gases nobles o raros" cuando nos referimos a las sustancias simples que están compuestas por los "elementos inértidos". Teniendo en cuenta el significado de elemento y sustancia simple esta diferencia no es sutil.

Primero podemos decir que sí, son raros, exceptuando al Argón, que se encuentra en casi el 1% en el aire, los demás sólo existen en cantidades muy pequeñas. Por otra parte, se los denomina nobles, por su inactividad química, y fueron conocidos durante mucho tiempo como gases inertes, ya que no se conocía ningún compuesto formado por estos elementos, hasta que, en



el año 1962, lograron prepararse algunos compuestos estables de los mismos. A pesar de ello, la inactividad química compartida por los gases nobles, indica una semejanza fundamental entre estos seis elementos que los componen, además de presentar muchas otras propiedades comunes entre ellos. Por ejemplo, a temperatura ambiente, todos ellos son gaseosos y, a diferencia de otros gases, sólo existen como especies cuyas moléculas son monoatómicas.

**Debido a la baja abundancia en la naturaleza, ser incoloros, inodoros y de poca actividad química, resultó muy difícil demostrar su presencia en la naturaleza.**

La primera vez que se tuvo idea de la existencia de un gas, hasta ese momento desconocido, fue durante los experimentos realizados por Henry Cavendish quien intentaba convertir el nitrógeno, sustancia abundante en el aire, pero poco reactiva, en ácido nítrico, químicamente activo. Durante los mismos "le quedó una burbuja, aparentemente de aire, por lo cual, si hay algo que sea diferente al nitrógeno, sólo estará presente en no más que  $\frac{1}{120}$  parte del total de aire inicial".

Casi cien años después, al repetirse estos experimentos y someter a esta "burbuja de aire" a todas las pruebas conocidas, se concluyó que se había descubierto un nuevo elemento y que éste, a diferencia de todos los demás, parecía químicamente inerte. Se lo denominó Argón, que quiere decir "perezoso".

El Helio fue identificado en el sol, de ahí su nombre, por medio de un espectroscopio enfocado al sol durante un eclipse observado en la India en el año 1868. En el espectro observado, aparecía una línea amarilla que no podía atribuirse a ningún elemento conocido en la Tierra.

Estudios posteriores en muestras de aire líquido, permitieron aislar otros tres gases nobles, compuestos por los elementos, Neón (nuevo), Kriptón (oculto) y Xenón (extraño).

Finalmente se aisló al Radón, como subproducto de la desintegración radiactiva del Radio.

Propiedades	He	Ne	Ar	Kr	Xe	Rn
Masa atómica [uma]	4,00	20,18	39,94	83,80	131,3	222
Punto de Fusión [°C]	-272	-249	-189	-157	-112	-110
Punto de Ebullición [°C]	-269	-246	.186	-153	-107	-62
Calor de Fusión [Kcal/mol]	-	0,08	0,27	0,36	0,49	0,8
Calor de Vaporización [Kcal/mol]	0,02	0,44	1,50	2,31	3,27	3,92

Tabla 2.1 Algunas propiedades de los gases nobles

A partir de los datos consignados en la Tabla 2.1, ¿Es posible establecer alguna relación entre las propiedades físicas de las sustancias simples que forman los elementos inértidos y la Masa Atómica de los mismos?

¿Los valores numéricos de estas propiedades físicas aumentan o disminuyen? A partir de este análisis es posible elaborar las siguientes conclusiones:

- La primer fila, aparecen, en orden creciente, de menor a mayor, las Masas Atómicas de los elementos inértidos, expresadas en uma (unidad de masa atómica).



- Las propiedades físicas de las sustancias simples que forman los elementos inértidos que aparecen como ejemplo en la Tabla 2.1, aumentan al aumentar la Masa Atómica Relativa de los mismos.

#### Trabajo a realizar

A partir de los datos consignados en la Tabla 2.1 realizar un gráfico en un sistema de coordenadas cartesianas utilizando como variable dependiente la propiedad física analizada y en la variable independiente la Masa Atómica del elemento.

Luego de realizar los gráficos responder las siguientes consignas:

Si se descubriese la existencia de un elemento inértido cuya Masa Atómica sea, por ejemplo, 300 uma, a partir de las conclusiones expuestas: ¿cuál podrá ser su Punto de Fusión? ¿Tendrá valores próximos a  $-249\text{ }^{\circ}\text{C}$  o a  $-110\text{ }^{\circ}\text{C}$ ?

A partir de los datos experimentales consignados en la Tabla 2.1, podemos concluir que el Punto de Fusión de los gases nobles aumenta al aumentar la Masa Atómica de los mismos. Es posible entonces, predecir que para este hipotético elemento, cuya Masa Atómica es mayor que la del Radón, el Punto de Fusión de la sustancia simple que forma, debe ser también mayor a la de éste, o sea, mayor a  $-110\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

Teniendo en cuenta la curva obtenida al graficar los Puntos de Fusión de los gases nobles conocidos en función de la Masa Atómica de los elementos inértidos que los componen, a partir de la Masa Atómica de nuestro hipotético elemento inértido,  $A = 300\text{ uma}$ , extrapolar el valor aproximado de su Punto de Fusión, que será un poco mayor a  $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Como estamos analizando valores que corresponden a números negativos, un número de menor valor absoluto es mayor que el de mayor valor absoluto, es decir, que sí  $|-110^{\circ}\text{C}| > |100^{\circ}\text{C}|$ , esto implica que  $-100 > -110^{\circ}\text{C}$ .

Resumiendo, hemos podido establecer que si se descubre un elemento inértido de Masa Atómica 300 uma su Punto de Fusión debería ser del orden de  $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$  a partir del siguiente razonamiento, basado en las conclusiones que pueden desarrollarse con los datos experimentales dados en la Tabla 2.1:

- Es un elemento inértido.
- Luego, debe compartir propiedades químicas comunes con los mismos y, las propiedades físicas de la sustancia simple que forma, deben guardar una relación con las de los otros elementos inértidos.
- Las propiedades físicas de los gases nobles, que son las sustancias simples que forman los elementos inértidos, aumentan con la Masa Atómica de los mismos, ya que están constituidos por moléculas monoatómicas.

Entonces con los datos y los conocimientos que hemos desarrollado a partir de los mismos, podemos decir que



**Las propiedades químicas y las propiedades físicas de los elementos de una misma familia o grupo de la Tabla Periódica, guardan una relación estrecha con su Masa Atómica**

Esta relación nos permite inferir o predecir las propiedades que debería poseer un elemento aún no descubierto, ubicado en la columna 0 de la Tabla de Mendeleev y que, por lo tanto, fuera un inértido.

Es importante aclarar que, de manera expresa, diferenciamos conceptualmente, en todo momento, el uso de las palabras "elemento" y "sustancia simple". Como sabemos, los elementos están caracterizados por un tipo particular de átomo, con un número definido de electrones, protones y neutrones que lo componen y determinan sus propiedades. Los átomos no tienen estado de agregación: no son sólidos, líquidos o gaseosos. Las sustancias simples, que se nombran con la misma denominación del elemento que las componen, están formadas por una única clase de átomos. Pueden ser monoatómicas, cuando la atomicidad es uno y, en este caso, la molécula coincide con el átomo, o poliatómicas, cuando las moléculas están formadas por dos o más átomos del mismo elemento. Las sustancias simples, a diferencia de los elementos, se presentan en la naturaleza en diferentes estados de agregación – sólido, líquido o gas – según las condiciones de presión y temperatura en las que se encuentren.

El estado de agregación de una sustancia es el resultado de las fuerzas de interacción entre las partículas que la componen a una determinada presión y temperatura. Las fuerzas de interacción pueden ser de atracción o de repulsión. Si predominan las fuerzas de atracción entre las partículas, la sustancia se presenta en estado sólido. Si, en cambio, predominan las fuerzas de repulsión, el estado en el que se encuentra la sustancia es gaseoso. Finalmente, si las fuerzas atractivas están equilibradas con las de repulsión, el estado de agregación es el líquido.

Es evidente, que si tenemos en cuenta el significado de cada una de las propiedades físicas dadas en la tabla de datos experimentales con la que estamos trabajando, todas ellas dependen de la intensidad de estas fuerzas, fundamentalmente de las de atracción, en las distintas sustancias simples que forman los elementos inértidos.

Si analizamos los datos consignados en la [TABLA 2.1](#), podemos afirmar, que los valores correspondientes a los calores de fusión y de vaporización de los gases nobles son muy bajos. Es decir, se requiere poca energía para vencer las fuerzas de atracción presentes entre los átomos de estos elementos cuando se encuentran en un sistema en estado líquido o gaseoso.

Si analizamos los valores correspondientes a las propiedades físicas de la sustancia simple formada por el elemento Helio, teniendo en cuenta los valores bajos del Punto de Fusión y de Ebullición de la misma, podemos afirmar que las fuerzas de atracción entre sus átomos son muy bajas, si los mismos constituyen un sistema en estado líquido o sólido.



**El Punto de Ebullición del gas Helio es el más bajo de todas las sustancias conocidas, y sólo es posible su solidificación cuando se aplican bajas temperaturas y presiones muy elevadas en forma conjunta.**

Si continuamos avanzando en nuestro interés por estudiar las propiedades de los elementos químicos y las sustancias que forman, en un intento que nos permita encontrar coincidencia y similitudes entre los mismos para poder clasificarlos, de manera tal que se facilite su estudio sistemático, podemos, a partir de la metodología aplicada para los gases nobles, considerar la existencia de grupos de elementos con características y propiedades afines. A esta altura de nuestro estudio, si conocemos las propiedades de un grupo de elementos, es posible predecir las propiedades de cualquier otro miembro de esta familia. Para comprobarlo estudiemos otros grupos de elementos que sabemos tienen propiedades similares, como por ejemplo, los halógenos y los metales alcalinos.

### 2.2.1 Propiedades de los Halógenos

Debido a la elevada reactividad química de los halógenos, ninguno de ellos existe en la naturaleza en forma elemental. Cuatro de sus elementos forman cuatro sustancias simples diatómicas: el Flúor ( $F_2$ ), el Cloro ( $Cl_2$ ), el Bromo ( $Br_2$ ) y el Yodo ( $I_2$ ).

Si bien, estas sustancias simples se encuentran en Condiciones Standard de Presión y Temperatura (CSPT corresponden a una presión de 1 atm y a una temperatura de 25 °C) en distintos estados de agregación y, por lo tanto, con un aspecto físico muy diferente, tienen propiedades muy similares en cuanto a su comportamiento químico. Entre ellas, podemos citar a modo de ejemplo, la facilidad que presentan para formar sales binarias cuando reaccionan con los metales. Por esta propiedad se los llama "formadores de sales" de donde proviene el nombre de "halógenos" con el que se los identifica y a sus sales se las denominan "haluros".

En la familia hay un quinto elemento de mayor Masa Atómica, que es de origen sintético y se denomina Astatato (At). Si bien, este elemento no posee forma estable en condiciones ambientales, conociendo las propiedades de los otros miembros del grupo, es posible predecir las del Astatato.

Para poder elaborar algunas conclusiones, aplicando el método de trabajo que utilizamos para los elementos inértidos, analizaremos los datos experimentales que se presentan en la Tabla 2.2:

Propiedades	F	Cl	Br	I	At
Masa atómica [uma]	19,0	35,5	79,9	127	
Punto de Fusión [°C]	-220	-102	-7	114	



Punto de Ebullición [°C]	-188	-34	58	184
Calor de Fusión [Kcal/mol <sup>4</sup> ]	0,12	1,53	2,52	3,74
Calor de Vaporización [Kcal/mol <sup>4</sup> ]	1,56	4,88	7,18	9,98
Fórmula del haluro de sodio	NaF	NaCl	NaBr	NaI

Tabla 2.2 Algunas propiedades de los halógenos

#### Trabajo a realizar

A partir de los datos consignados en la Tabla 2.2 realizar un gráfico en un sistema de coordenadas cartesianas utilizando como variable dependiente la propiedad física analizada y en la variable independiente la Masa Atómica del elemento.

Luego de realizar los gráficos responder las siguientes consignas:

¿Cómo se modifican las propiedades, cuyos datos están indicados en la Tabla 2.2, al aumentar la Masa Molecular de las sustancias simples involucradas? Elabore las correspondientes conclusiones.

En CSPT, es decir, a 25 °C y 1 bar de presión, cuál es el estado de agregación en el que estas sustancias se encuentran en la naturaleza? ¿Cuál sería el estado de agregación que podríamos esperar para la sustancia simple que forma el elemento Ástato?

¿Es posible, a partir de los datos disponibles, predecir la fórmula química para el haluro que formaría el ástato con el elemento sodio? De ser posible escriba la fórmula correspondiente.

#### 2.2.2 Propiedades de los Metales Alcalinos

Podemos realizar un análisis similar al efectuado con los elementos inértidos y con los halógenos con los elementos del grupo de los metales alcalinos. Este nombre deriva de los compuestos que forman estos elementos conocidos como álcalis o bases fuertes. Ellos son: el Litio (Li), el Sodio (Na), el Potasio (K), el Rubidio (Rb) y el Cesio (Cs). El último elemento de la familia es el Francio (Fr) se forma en las series naturales de desintegración radioactiva y mediante reacciones nucleares artificiales apropiadas.

Todos estos elementos son muy activos químicamente, y se presentan en la naturaleza como sustancias simples monoatómicas. Son metales blandos, de color blanco o muy claro y con brillo metálico. Al ser tan activos reaccionan violentamente con el agua y más lentamente con el oxígeno del aire, con el que forman óxidos iónicos. Por este motivo, se conservan en una atmósfera seca o inerte o en un solvente libre de oxígeno.

Propiedades	Li	Na	K	Rb	Cs	Fr
Masa atómica [uma]	6,9	23,0	39,1	85,5	132,9	
Punto de Fusión [°C]	180	98	63	39	29	
Punto de Ebullición [°C]	1331	890	766	701	685	

<sup>4</sup> Valores expresados por mol de X<sub>2</sub>



Calor de Fusión [Kcal/mol]	0,72	0,62	0,55	0,52	0,50
Calor de Vaporización [Kcal/mol]	32,2	21,3	18,5	16,5	15,8
Densidad [g/cm <sup>3</sup> ]	0,53	0,97	0,86	1,52	1,87

Tabla 2.3 Algunas propiedades de los metales alcalinos





### Trabajo a realizar

A partir de los datos consignados en la Tabla 2.3 realizar un gráfico en un sistema de coordenadas cartesianas utilizando como variable dependiente la propiedad física analizada y en la variable independiente la Masa Atómica del elemento.

Luego de realizar los gráficos responder las siguientes consignas:

¿Cómo se modifican las propiedades al aumentar la Masa Atómica de las sustancias simples monoatómicas involucradas?

En CSPT, es decir, a 25 °C y 1 atm de presión, cuál es el estado de agregación en el que estas sustancias se encuentran en la naturaleza? ¿Cuál sería el estado de agregación que podríamos esperar para la sustancia simple que forma el elemento Francio?

Luego de observar esta tabla, también como en los casos anteriores, podemos sacar varias conclusiones sobre las propiedades de esta familia, entre ellas su semejanza física y su actividad química.

**Por su tendencia a formar cationes con una carga positiva,  $Me^+$ , las propiedades químicas de estos elementos son esencialmente las de este tipo de cationes.**

La facilidad, vinculada a la formación de los cationes  $Me^+$ , está relacionada al hecho de que al ceder su único electrón externo, estos elementos adquieren, en el ion formado, la configuración electrónica externa estable del elemento inértido más cercano.

De todos los elementos de la Clasificación Periódica, los metales del Grupo 1, son los que muestran más claramente y con menos complicaciones el efecto del aumento del tamaño y de la Masa Atómica sobre las propiedades físicas y químicas de las sustancias que forman.

## 2.3 Ley Periódica para la clasificación de los elementos

Hemos estudiado dos familias de elementos con distintas propiedades entre sí. Podemos decir, que cada una de ellas presenta una cierta regularidad en su comportamiento químico y en la variación de las propiedades físicas de las sustancias simples que forman, cuando los ordenamos en orden creciente de las Masas Atómicas de los elementos que las componen.

Es importante que, en este punto, nos detengamos para interpretar por qué hemos utilizado la palabra regularidad. Una cierta regularidad en el comportamiento químico y en la variación de las propiedades físicas de las sustancias simples que forman los elementos, está vinculada al hecho de que, cuando se ordena a los mismos en función de las Masas Atómicas crecientes, se



observa que cada un cierto número de elementos, las propiedades que caracterizan el comportamiento de los átomos, se repiten de manera periódica.



Propiedades	He	Li	F	Ne	Na	Cl	Ar	K	Br	Kr	Rb	I	Xe	Cs
Masa Atómica	4,0	6,9	18,0	20,2	23,0	35,5	39,9	39,1	79,9	83,8	85,5	127	131	133

Tabla 2.4 Masas Atómicas

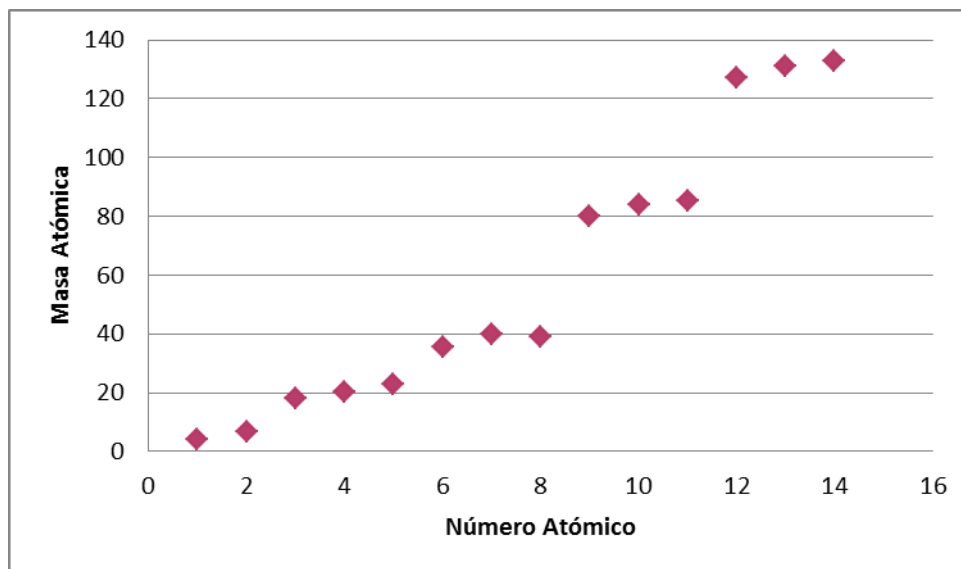


Figura. 2-4 Relación entre la masa atómica y el número atómico de los elementos

Podemos afirmar, a partir del análisis de los datos de la Tabla 2.4, que al ordenar a los elementos de cada una de las familias constituidas por los elementos inértidos, los halógenos y los metales alcalinos, según sus Masas Atómicas crecientes, se repiten las propiedades, periódicamente, cada tres elementos. La anomalía presente en el orden de ubicación del Argón y el Potasio, constituye una excepción que analizaremos más adelante.

**Existe una periodicidad en las propiedades de los elementos químicos que está relacionada con las Masas Atómicas de los mismos.**

**Todo este análisis que hemos realizado y que coincide en la metodología aplicada por los químicos, favoreció el desarrollo de la química como ciencia, por que permitió una clasificación sistemática de los elementos conocidos que, por otra parte, brinda los datos necesarios para prever la existencia de otros.**

En el año 1829 J. W. Dobereimer (químico alemán) intentó una sistematización, pero fueron Dimitri Mendeleev (químico ruso) y Lothar Meyer (químico alemán), quienes, en forma independiente, alrededor del año 1869, descubrieron el principio de periodicidad de los elementos y, con un estudio sistemático de las propiedades físicas y químicas de las sustancias simples y de las sustancias compuestas que forman los distintos elementos por ese entonces conocidos, pudieron enunciar una Ley Periódica:



**"Las propiedades de los elementos son funciones de sus Pesos<sup>5</sup> Atómicas".**

Mendeleyev escribió, en hojas separadas, a manera de fichas, para cada uno de los elementos conocidos, datos entre los que podemos citar: Masa Atómica, propiedades físicas de las sustancias simples que forma cada elemento (Punto de Fusión, Punto de Ebullición, Solubilidad en distintos solventes, entre otras), propiedades químicas de las mismas y algunas propiedades físicas y químicas de sustancias compuestas que forman los distintos elementos.

**Según cuenta la leyenda, Mendeleyev planteó el esquema global de la Tabla Periódica, después de dedicar todo un día, el 17 de febrero de 1869, a pensar intensamente.**

Colocó en las paredes de su laboratorio estas hojas, ordenándolas de forma diferente, en un intento por encontrar un ordenamiento que le permitiese agrupar a los elementos a partir de sus propiedades comunes. De esta manera, al ordenar a los mismos según sus Masas Atómicas crecientes, verificó que las propiedades químicas de sus sustancias simples, se repetían periódicamente y que sus propiedades físicas variaban gradualmente según este ordenamiento.

En este proceso, Mendeleyev encontró, al igual que nosotros al analizar los datos consignados en la Tabla 2.4, que el Potasio (Masa Atómica 39,1 uma) y el Argón (Masa Atómica 39,9 uma), cuando se ordenaban según sus Masas Atómicas crecientes, quedaban en grupos o familias de elementos con las que sus propiedades no coincidían. El Potasio se ubicaba en el grupo de los elementos inértidos y el Argón en el de los metales alcalinos. Invirtió la ubicación de los mismos y colocó al Potasio que posee propiedades comparables con las de los metales alcalinos y al Argón con los elementos inértidos de propiedades similares a él. Mendeleyev tuvo que hacer otras inversiones, como por ejemplo, para el Yodo y el Telurio, contradiciendo de esta manera su Ley Periódica.

Por otra parte, comprobó que resultaba necesario dejar "huecos" o espacios vacíos que, según él pensaba, serían ocupados por elementos hasta ese momento no descubiertos en la naturaleza. Uno de ellos era el que debería ubicarse debajo del Silicio (Si), en el grupo IV de su Tabla Periódica, al que denominó "eka - Silicio" ( que significa similar al Silicio). Pero Mendeleyev no se quedó en este punto. A partir del análisis de las propiedades físicas y químicas de los elementos que rodeaban a esos "huecos" que él dejaba en su tabla, pudo predecir las propiedades de los mismos.

Propiedad	Eka-Silicio	Germanio (Ge)
Masa Atómica [uma]	72	72,6
Densidad [g/cm <sup>3</sup> ]	5,5	5,35
Punto de Fusión [°C]	Alto	937
Apariencia	Gris oscuro	Gris oscuro
Óxido que forma	EO <sub>2</sub>	GeO <sub>2</sub>

<sup>5</sup> Actualmente el término peso es incorrecto ya que esta variable depende de la gravedad, el término correcto es masa. Sin embargo, se ha dejado peso para mantener el contexto histórico



Apariencia	Sólido Blanco	Sólido Blanco
Ácido/Básico	Anfótero	Anfótero
Densidad [g/cm <sup>3</sup> ]	4,7	4,23
Cloruro que forma	ECl <sub>4</sub>	GeCl <sub>4</sub>
Punto de Ebullición [°C]	<100	84
Densidad [g/cm <sup>3</sup> ]	1,9	1,84

Tabla 2.5 Predicciones aportadas por Mendeleev para el eka-Silicio

En estos dos hechos, la inversión de su Ley Periódica y la predicción acerca de la existencia de elementos no descubiertos y de las propiedades de las sustancias que los mismos forman, resulta evidente la genialidad de este extraordinario químico que fue Mendeleev y el aporte fundamental que realizó para el desarrollo de la química como ciencia. Como consecuencia del reconocimiento de la necesidad de realizar estas "inversiones" pensó que debía existir otra propiedad del átomo que permitiera caracterizar mejor su comportamiento que la Masa Atómica, es decir, que la Ley Periódica responde a esta propiedad, desconocida por los químicos de su época y por él mismo.

En este punto es importante detenernos. No resulta extraño que los químicos de la época de Mendeleev, para estudiar las formas posibles de clasificación sistemática de los elementos, tomaran como referencia posible de comparación las Masas Atómicas de los mismos. En ese momento, el modelo atómico vigente, era el enunciado por Joseph Dalton, quien en varios postulados resumió su Teoría Atómica. Según este modelo, la propiedad que caracterizaba el comportamiento químico de los átomos era la Masa Atómica. El desarrollo de una clasificación sistemática de los elementos está íntimamente relacionado con el conocimiento, cada vez más profundo, de la naturaleza y estructura de los átomos.

Es cierto que no puede negarse el aporte dado por Mendeleev en el desarrollo de una clasificación de los elementos adecuada. Sin embargo, no puede dejar de mencionarse que la corrección de las anomalías presentes en su tabla periódica, se deben a Henry Moseley (químico inglés, que estudiamos en la Unidad 1) que dedujo la existencia de cierto orden numérico para los elementos, y le asignó a cada elemento un Número Atómico que determinaba dicho orden. De esta manera, pudo corregirse la inversión en la posición de los elementos Argón y Potasio de la tabla de Mendeleev, al asignarle respectivamente el número atómico 18 y 19, eliminando el problema de la inversión de las Masas Atómicas de 39,9 uma para el Argón y 39,1 uma para el Potasio. En forma análoga solucionó las inversiones entre el Cobalto y el Níquel, o entre el Yodo y el Telurio.

Moseley, en el año 1913, estudió la difracción de los Rayos X característicos de diversos elementos, utilizando como red de difracción un cristal de ferrocianuro de potasio, haciendo incidir los rayos resultantes del proceso de difracción, sobre una placa fotográfica. De esta manera, la posición de la línea registrada en la placa se podía relacionar con la longitud de onda de los rayos X característicos del elemento particular en estudio. Si bien no existe una relación inmediata entre la longitud de onda o la frecuencia con la Masa Atómica, Moseley encontró una relación muy simple entre las frecuencias de los rayos X característicos y un número al que denominó Número Atómico del elemento respectivo. El mismo puede, en



principio, definirse como "el número de orden de un elemento en la tabla periódica". De esta manera, se pudieron justificar las inversiones realizadas por Mendeleev y explicar la presencia de "huecos" que este importante químico dejó en su Tabla Periódica.

En la actualidad definimos al Número Atómico (Z) de un elemento como el número que coincide con la cantidad de protones que un átomo de un cierto elemento tiene en su núcleo y que, además, es el número de electrones que giran en torno a él en determinados orbitales atómicos. Como las propiedades que caracterizan el comportamiento de los átomos están vinculadas a su configuración electrónica, es decir, a la distribución de los electrones en niveles de energía, sub - niveles de energía y orbitales, resulta absolutamente claro que las propiedades de los mismos están determinadas fundamentalmente por este número.

Hemos mencionado que el avance en el estudio de la estructura del átomo permite encontrar propiedades del mismo que caracterizan su comportamiento y propiedades específicas.

**En la actualidad sabemos que la propiedad que caracteriza el comportamiento químico de los átomos es el Número Atómico.**

Luego, es posible enunciar la Ley de Periódica Moderna de la manera siguiente:

**Las propiedades de los elementos y sus compuestos son funciones periódicas al ordenar a los elementos según el Número Atómico creciente de los mismos**

## 2.4 Tabla Periódica Moderna

Se han descubierto hasta la actualidad 114 elementos, y a cada uno de ellos, como ya hemos mencionado, se le ha asignado un número y un símbolo.

Aunque el número de elementos a estudiar, 114, pueda parecer grande, hemos podido establecer que es posible ordenarlos sistemáticamente en función del Número Atómico creciente de los mismos. Este ordenamiento permite facilitar el estudio de sus propiedades. A partir de este momento, a los efectos de la química, podemos considerar que todos los elementos están constituidos por sólo tres partículas subatómicas: el protón y el neutrón en el núcleo del átomo y los electrones, en un número igual al de protones, girando en orbitales atómicos alrededor de él.

### 2.4.1 Nombres y Símbolos de los Elementos

Ya hemos mencionado que los nombres de algunos elementos son antiguos, pues fueron descubiertos hace mucho tiempo. Este es el caso del Cobre, nombre que deriva de "Cyprus" (Chipre), en donde era extraído de las minas, y del Oro, que deriva de la palabra latina "aurum". El nombre de los elementos descubiertos o sintetizados en el laboratorio más recientemente ha resultado de la creación, más o menos afortunada, de sus descubridores. En algunos casos el nombre de un elemento refleja alguna propiedad característica. El Cloro es un gas de color verde amarillento y su nombre deriva de la palabra griega que significa dicho color. En otros casos, los químicos parecen convertirse en poetas, como para el Vanadio, que



forma compuestos coloreados muy atractivos, y su nombre deriva de "Vanadis", diosa escandinava de la belleza. Para otros elementos su nombre constituye un homenaje a personas o a lugares. Este es el caso de elementos como el Americio, el Berquelio, el Californio, el Einstenio y el Curio.

Muchos de los elementos descubiertos más recientemente o sintetizados artificialmente todavía no tienen un nombre definitivo y se conocen con nombres transitorios. Este es el caso del Ununtrio (es el elemento de Número Atómico 113: un significa uno, un uno y trio tres).

Los elementos se representan, como ya se ha indicado, mediante símbolos químicos formados por letras. Muchos por la primer letra, en imprenta mayúscula, del nombre del elemento (Hidrógeno – H, Boro – B, entre otros) y otros por la primera y la segunda letra de su nombre (por ejemplo Helio – He y Níquel – Ni) o por la primera letra y otra cualquiera del nombre (Magnesio – Mg, Plutonio – Pu, por citar dos ejemplos).

**El símbolo de un elemento se indica con la primer letra se en mayúscula y la segunda con minúscula, siempre en imprenta.**

Elemento	Símbolo	Origen del símbolo
<b>Antimonio</b>	Sb	Stibium
<b>Cobre</b>	Cu	Cuprum
<b>Oro</b>	Au	Aurum
<b>Hierro</b>	Fe	Ferrum
<b>Plomo</b>	Pb	Plumbum
<b>Mercurio</b>	Hg	Hidargyrum
<b>Potasio</b>	K	Kalium
<b>Plata</b>	Ag	Argentum
<b>Sodio</b>	Na	Natrium
<b>Estaño</b>	Sn	Stannum
<b>Volframio</b>	W	Wolfram

Tabla 2.6 Elementos con sus simbología y significado

### 2.4.2 Grupos y Períodos

En la [FIGURA. 2-5](#), se esquematiza la Tabla Periódica Moderna, encontramos una serie de hileras verticales (columnas) y otra de hileras horizontales (filas).



**IUPAC Periodic Table of the Elements**

1		Key										13						18																	
1 H Hydrogen (1.007, 1.008)	2 He Helium 4.002	3		4		5		6		7		8		9		10		11		12		13		14		15		16		17		18			
3 Li Lithium (6.938, 6.941)	4 Be Beryllium 9.012	5 B Boron (10.80, 10.82)		6 C Carbon (12.00, 12.02)		7 N Nitrogen (14.00, 14.01)		8 O Oxygen (15.99, 16.00)		9 F Fluorine 18.99		10 Ne Neon 20.18		11 Na Sodium 22.99		12 Mg Magnesium (24.30, 24.31)		13 Al Aluminum 26.98		14 Si Silicon (28.08, 28.09)		15 P Phosphorus 30.97		16 S Sulfur (32.05, 32.07)		17 Cl Chlorine (35.44, 35.46)		18 Ar Argon 39.95							
19 K Potassium 39.10	20 Ca Calcium 40.08	21 Sc Scandium 44.96	22 Ti Titanium 47.87	23 V Vanadium 50.94	24 Cr Chromium 52.00	25 Mn Manganese 54.94	26 Fe Iron 55.85	27 Co Cobalt 58.93	28 Ni Nickel 58.69	29 Cu Copper 63.55	30 Zn Zinc 65.38(2)	31 Ga Gallium 69.72	32 Ge Germanium 72.63	33 As Arsenic 74.92	34 Se Selenium 78.96(3)	35 Br Bromine (79.90, 79.91)	36 Kr Krypton 83.80	37 Rb Rubidium 85.47	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.91	40 Zr Zirconium 91.22	41 Nb Niobium 92.91	42 Mo Molybdenum 95.94(2)	43 Tc Technetium	44 Ru Ruthenium 101.1	45 Rh Rhodium 102.9	46 Pd Palladium 106.4	47 Ag Silver 107.9	48 Cd Cadmium 112.4	49 In Indium 114.8	50 Sn Tin 118.7	51 Sb Antimony 121.8	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.9	54 Xe Xenon 131.3
55 Cs Cesium 132.9	56 Ba Barium 137.3	57-71 Lanthanoids	72 Hf Hafnium 178.5	73 Ta Tantalum 180.9	74 W Tungsten 183.8	75 Re Rhenium 186.2	76 Os Osmium 190.2	77 Ir Iridium 192.2	78 Pt Platinum 195.1	79 Au Gold 197.0	80 Hg Mercury 200.6	81 Tl Thallium (204.3, 204.4)	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 209.0	84 Po Polonium	85 At Astatine	86 Rn Radon	87 Fr Francium	88 Ra Radium	89-103 Actinoids	104 Rf Rutherfordium	105 Db Dubnium	106 Sg Seaborgium	107 Bh Bohrium	108 Hs Hassium	109 Mt Meitnerium	110 Ds Darmstadtium	111 Rg Roentgenium	112 Cn Copernicium	114 Fl Flerovium	116 Lv Livermorium				
57 La Lanthanum 138.9	58 Ce Cerium 140.1	59 Pr Praseodymium 140.9	60 Nd Neodymium 144.2	61 Pm Promethium	62 Sm Samarium 150.4	63 Eu Europium 152.0	64 Gd Gadolinium 157.3	65 Tb Terbium 158.9	66 Dy Dysprosium 162.5	67 Ho Holmium 164.9	68 Er Erbium 167.3	69 Tm Thulium 168.9	70 Yb Ytterbium 173.1	71 Lu Lutetium 175.0																					
89 Ac Actinium	90 Th Thorium 232.0	91 Pa Protactinium 231.0	92 U Uranium 238.0	93 Np Neptunium	94 Pu Plutonium	95 Am Americium	96 Cm Curium	97 Bk Berkelium	98 Cf Californium	99 Es Einsteinium	100 Fm Fermium	101 Md Mendelevium	102 No Nobelium	103 Lr Lawrencium																					

Figura. 2-5 Tabla periódica publicada por IUPAC

Las columnas se denominan grupos, numerados del 1 al 18 en la nomenclatura actual. Podemos ubicar entre las mismas a los metales alcalinos en la columna uno que corresponde al Grupo 1. Por otra parte, los elementos inértidos están ubicados en la última columna que corresponde al Grupo 18 y a los halógenos en el Grupo 17.

Las filas se denominan Períodos y se numeran del 1 al 7 (del primero al séptimo).

El Hidrógeno, que está ubicado en el primer período y puede encontrarse, según la tabla que analicemos, en el grupo 1 o en el grupo 17 indistintamente, ya que su ubicación es siempre discutible; sin embargo, la IPAC lo acepta formalmente en el grupo 1.

El Hidrógeno presenta algunas propiedades comunes con los metales alcalinos (forma un catión con una carga positiva, la sustancia simple hidrógeno es un agente reductor, entre otras propiedades comunes con los metales alcalinos) y con los halógenos (forma moléculas diatómicas, se presenta en CSPT como un gas, se combina con los metales alcalinos y alcalinotérreos formando un anión con una carga negativa y actúa en estas combinaciones como un agente oxidante, entre otras propiedades comunes con los halógenos). Por este motivo podría, con Z = 1, ubicarse en el Grupo 1 o en el Grupo 17. Generalmente se lo ubica en el Grupo 1 y, también en algunas Tablas Periódicas, aparece en el centro de la misma.

Hasta aquí una presentación, que podríamos calificar de meramente descriptiva. En este punto es necesario que nos formulemos la siguiente pregunta

¿Cuál es la utilidad, desde el punto de vista químico de la clasificación de los elementos en Grupos y Períodos a partir de la Ley Periódica?

Trataremos de encontrar la aplicación química más importante de la Tabla Periódica Moderna analizando un ejemplo concreto.





**Cuando se mezcla una solución de hidróxido de sodio (NaOH) y una solución de ácido clorhídrico (HCl), se produce una reacción química, denominada neutralización, en la que se obtiene cloruro de sodio (NaCl) y agua (H<sub>2</sub>O).**

**La ecuación química correspondiente a esta reacción es la siguiente:**



**El concepto de periodicidad nos permite predecir que las soluciones acuosas de los hidróxidos que forman los elementos litio y potasio, ubicados junto con el sodio en el grupo 1, tienen un comportamiento parecido al del hidróxido de sodio: cuando se combinan con soluciones acuosas de los hidrácidos, formados por elementos Flúor, Cloro, Bromo e Yodo del grupo 17, de comportamiento parecido al del ácido clorhídrico. Se formarán, de esta manera, los haluros alcalinos correspondientes. Es importante aclarar que no consideramos los hidróxidos del Rubidio, del Cesio y del Francio, también metales alcalinos del grupo 1, como tampoco el hidrácido que forma el Astatio, halógeno del grupo 17, ya que estos elementos forman, por su naturaleza química, sustancias poco estables, con lo cual las reacciones que producen se deben realizar en condiciones de control estrictas. Algunos de ellos tienen propiedades radioactivas.**

Por lo tanto gracias al conocimiento del comportamiento químico del hidróxido de sodio con el ácido clorhídrico podemos predecir las reacciones de los dos hidróxidos de los metales alcalinos indicados con los tres hidrácidos de los halógenos, siempre en medio acuoso. Es decir conoceremos un total de nueve reacciones. Esta generalización simplifica, de esta manera, el estudio del comportamiento químico de las sustancias.

Si conocemos la química del elemento sodio, podemos esperar un comportamiento análogo, no igual, de todos los otros miembros de su grupo.

En síntesis, un elemento y sus congéneres (los demás elementos de su grupo), presentan un comportamiento similar y sus propiedades varían gradualmente. Como hemos visto en nuestro ejemplo, las propiedades del elemento Sodio constituyen un parámetro de comparación con las propiedades de los demás elementos del Grupo 1 al que pertenece. Los metales alcalinos, que constituyen este grupo, son blandos y de aspecto plateado. Funden a bajas temperaturas (el Litio a 180°C, el Potasio a 64°C y el Cesio a 30°C). Todos desprenden hidrógeno gaseoso cuando reaccionan químicamente con el agua y, mientras el Litio lo hace de un modo suave y controlable el Cesio lo hace de forma violenta y explosiva. Es decir, que la reactividad química de los metales alcalinos con el agua aumenta en el Grupo de arriba hacia abajo. Esto pone en evidencia la variación gradual en una misma propiedad de los elementos que pertenecen a un mismo grupo. Todos los metales del Grupo 1 se guardan sumergidos en solventes de naturaleza orgánica para evitar que entren en contacto con el oxígeno del aire y formen los respectivos óxidos o con la humedad ambiente con la que forman el hidróxido correspondiente.

En la columna siguiente a la de los alcalinos en la Tabla Periódica, está el Grupo 2, que incluye a los denominados metales alcalinotérreos. Los mismos son el Berilio, el Calcio, el Estroncio, el



Bario y el Radio. Se parecen a los metales alcalinos en varios aspectos, pero su reactividad química es menor: por ejemplo reaccionan con el agua para formar hidróxidos de modo menos energético. El Calcio, el estroncio y el Bario reaccionan con suficiente fuerza como para liberar hidrógeno gaseoso del agua, pero el Magnesio sólo lo libera en caliente y el Berilio no reacciona con el agua ni calentado al rojo vivo. Otra vez podemos concluir que la reactividad química aumenta en el Grupo de arriba hacia abajo, variando gradualmente.

En el otro extremo de la Tabla tenemos al Grupo 18, cuyos elementos reciben el nombre de inértidos y las sustancias simples gaseosas que forman, gases nobles o inertes. Como hemos visto, los mismos forman muy pocos compuestos, de ahí su denominación. Químicamente hablando constituyen un grupo aparte. Hasta la década de los sesenta eran llamados inertes, ya que se creía que no formaban ningún compuesto. Desde entonces se han obtenido unas pocas docenas de sustancias cuando reaccionan el Kriptón, el Xenón y el Radón con oxígeno y flúor. Todas las sustancias simples de los elementos de este grupo son gases incoloros e inodoros y sus moléculas son monoatómicas dado que sus átomos están aislados e independientes entre sí al tener una configuración electrónica estable con todos sus niveles de energía completos.

En el Grupo 17 encontramos a los elementos llamados halógenos. Los más importantes son el Flúor, el Cloro, el Bromo y el Yodo. Muchas de las propiedades de estos elementos varían gradualmente al avanzar en el Grupo de arriba hacia abajo, es decir, al pasar del flúor hacia el Yodo. La sustancia simple flúor es un gas de color amarillo pálido, casi incoloro, la sustancia simple cloro es un gas de olor picante e irritante de las mucosas de color amarillo verdoso, en tanto que la sustancia simple bromo es un líquido de color pardo rojizo y la sustancia simple yodo es un sólido de color negro purpúreo que sublima a presión atmosférica cuando se lo calienta formando un gas violeta.

Los elementos ubicados en columnas entre los grupos 2 y 13 de la Tabla Periódica Moderna, se denominan metales de transición. Este nombre hace referencia a que, desde el punto de vista químico, constituyen una etapa intermedia, de transición, entre los metales muy activos de los Grupos 1 y 2 y los no metales, de comportamiento anfótero de los grupos 13 y 14, hasta los no metales activos de los Grupos 15, 16 y 17.

Es decir, en los Períodos (filas horizontales) de la Tabla Periódica, las propiedades varían gradualmente, de manera tal que cada período comienza con un metal fuertemente activo y culmina (sin contar a los inértidos) en un no metal, también fuertemente activo, el carácter metálico en un período, de izquierda a derecha. Los metales de transición son entonces elementos con un carácter menos metálico y una reactividad química menor que los alcalinos y los alcalinotérreos. Entre ellos podemos dar como ejemplo al Titanio y al Hierro, importantes desde el punto de vista de sus aplicaciones estructurales, al cobre, a la Plata y al Oro, empleados para acuñar monedas, entre otras muchas aplicaciones.



### 2.4.3 Clasificación Periódica de los Elementos y relación con la Configuración Electrónica Cuántica de los mismos.

En función de las semejanzas y las diferencias en la configuración electrónica cuántica de los elementos, los mismos se pueden clasificar en cuatro tipos diferentes:

#### 2.4.3.1 Elementos Inértidos

Constituyen el Grupo 18 de la Tabla Periódica Moderna. Se caracterizan por tener en su estructura atómica todos los niveles de energía completos. Esta propiedad determina la estabilidad química de estos elementos. La configuración electrónica externa de todos estos elementos, con excepción del Helio, es:  $ns^2np^6$ , donde  $n$  es el último nivel de energía del elemento. Para el Helio es:  $1s^2$ .

#### 2.4.3.2 Elementos Representativos

Los elementos de este tipo están caracterizados por átomos en los que el último nivel de energía está incompleto, mientras que los subyacentes están todos completos. Como muchos de estos elementos abundan en la naturaleza, es frecuente que los materiales más comunes, de los que estamos rodeados en nuestra vida cotidiana, estén compuestos por estos elementos. La proximidad de los elementos representativos a los elementos inértidos, determina que presenten una tendencia a reaccionar químicamente, ganando o cediendo electrones, para alcanzar la configuración electrónica externa del inértido más próximo. A su vez, estos elementos pueden clasificarse en:

##### 2.4.3.2.1 Metales Representativos

Son los elementos de los Grupos 1 y 2. Se caracterizan por tener en su estructura atómica el último nivel de energía incompleto. Constituyen el Bloque s de la Tabla Periódica, porque su configuración electrónica externa, que determinan el comportamiento químico de los átomos, es  $ns^1$ , donde  $n$  es el último nivel de energía.

##### 2.4.3.2.2 No Metales Representativos

Son los elementos de los Grupos 13 al 17. Se caracterizan por tener en su estructura atómica el último nivel de energía incompleto. Constituyen el Bloque p de la Tabla Periódica, porque su configuración electrónica externa general de estos elementos, que determinan el comportamiento químico de los átomos, es  $ns^1np^x$  con  $\{x \in \mathbb{N} / 1 \leq x \leq 5\}$ .

#### 2.4.3.3 Metales de Transición

Constituyen los elementos de los Grupos 3 al 12 de la Tabla Periódica Moderna. Los elementos de este tipo están caracterizados por átomos que tienen en su estructura atómica los dos últimos niveles de energía incompletos. En los mismos se encuentra presente un subnivel d que está ocupado parcialmente. Por este motivo constituyen el Bloque d de la Tabla Periódica. La configuración electrónica externa general de estos elementos, que determina el comportamiento químico de los átomos, es  $(n-1)d^xns^2$  con  $\{x \in \mathbb{N} / 1 \leq x \leq 9\}$ . Debemos indicar que no es absolutamente precisa la presencia de dos electrones  $ns$ , conociéndose elementos que tienen un electrón  $ns$  e, incluso, ningún electrón  $ns$ . Todos estos elementos



son metálicos. Aun cuando alguno de ellos son escasos, otros se encuentran en una abundancia mayor en la naturaleza. Los elementos de este tipo se parecen sorprendentemente entre sí, fundamentalmente en sus propiedades físicas.

#### 2.4.3.4 Elementos de Transición Interna

Los elementos de este tipo son elementos de transición, aun cuando puedan diferenciarse electrónicamente de los elementos de transición regulares, en el sentido de ser, literalmente, miembros de una serie de transición, dentro de una serie de transición. Se caracterizan por tener en su estructura atómica los tres últimos niveles de energía incompletos. Los átomos de estos elementos contienen, no sólo los subniveles  $d$  y  $p$  incompletos del penúltimo y último nivel de energía, respectivamente, sino también el subnivel  $f$  parcialmente ocupado. Por este motivo, Constituyen el Bloque  $f$  de la Tabla Periódica. La configuración electrónica externa general, que determina el comportamiento químico de los átomos, es  $(n-2)f^x(n-1)s^2(n-1)p^6(n-1)d^1ns^2$  con  $\{x \in \mathbb{Z} / 1 \leq x \leq 13\}$ , donde  $n$  es el último nivel de energía con electrones del átomo. Para estos elementos, teniendo en cuenta que contienen electrones  $f$ ,  $n$  tiene que ser mayor o igual a seis. Por otra parte, a los 14 elementos ubicados en el Período 6 – Grupo 3 se los denomina Lantánidos, conocidos también como "tierras raras", y a los 14 elementos ubicados en el Período 7 – Grupo 3 se los denomina Actínidos, a los que se los suele llamar elementos "transuránicos".

#### 2.4.4 Metales y No Metales

Las sustancias simples metálicas, formadas por átomos de elementos clasificados como metales, se presentan en la naturaleza en estado sólido (con excepción del Mercurio que es un líquido), son conductoras del calor y la electricidad, poseen un brillo característico denominado "brillo metálico" y, en general, son "dúctiles y maleables". Una sustancia "maleable" (que deriva de la palabra latina malleus, que significa martillo) es aquella que puede formar láminas delgadas usando un martillo para tal fin. Una sustancia es "dúctil" (palabra derivada del latín: "ductilis" que significa alargable) es aquella que puede alargarse para formar alambres. La sustancia simple sodio, constituida por átomos del elemento Sodio, conduce la electricidad, posee brillo metálico cuando es recién cortado, ya que se oxida fácilmente en contacto con el oxígeno del aire. Es maleable y razonablemente dúctil.

Las sustancias simples no metálicas, formadas por átomos de elementos clasificados como no metales, pueden presentarse en la naturaleza en estado sólido (como el grafito), en estado líquido (como el Bromo) y en estado gaseoso (como el oxígeno). Son malos conductores del calor y la electricidad (con excepción del grafito) y las sustancias sólidas no son dúctiles ni maleables. La sustancia simple azufre, formada por moléculas octa – atómicas constituidas por ocho átomos del elemento Azufre, es un sólido frágil de color amarillo que no conduce la corriente eléctrica, no puede extenderse en láminas delgadas usando un martillo y no puede alargarse para formar alambres. Todas las sustancias que en condiciones atmosféricas se presentan en la naturaleza en estado gaseoso son no metales. El caso del Hidrógeno es particular como ya lo hemos indicado.



Si observamos en la Tabla Periódica, la posición de los elementos metálicos y la de los no metálicos, podemos corroborar, otra vez, la respuesta a la pregunta que nos formulamos acerca de la aplicación química de la misma. Es posible constatar fácilmente que los elementos de mayor carácter metálico se encuentran en la parte inferior izquierda de la Tabla Periódica, en tanto que los elementos de mayor carácter no metálico ocupan la parte superior derecha. Ahora se hace patente una de las primeras aplicaciones de la Tabla Periódica: al simplemente dar un vistazo en la misma es posible establecer si un elemento es un metal, un no metal o un inértido. Es posible que quien en este momento lea este texto nunca haya oído hablar del Selenio (Se), pero su posición indica que es un no metal, incluso puede deducir que debe presentar propiedades similares a las del elemento Azufre (S), ubicado en el mismo grupo (el 16) inmediatamente arriba.

## 2.5 Propiedades Periódicas Extranucleares

Las características químicas de un elemento y de sus compuestos y, en gran parte, también sus propiedades físicas, están determinadas por las propiedades extranucleares del átomo e ion del que derivan.

Estas propiedades están determinadas, en gran parte, por los electrones que se encuentran en los niveles cuánticos más elevados, es decir, por los "electrones externos", ya que los electrones de los niveles internos, "subyacentes", no suelen ser afectados directamente en las reacciones químicas, su influencia se limita, solamente, a modificar el comportamiento de los externos.

Podemos afirmar que los elementos que poseen un determinado tipo de configuración electrónica, tendrán un conjunto de propiedades características. Esto es exacto en su esencia, pero no en los detalles. Si bien es cierto que elementos con igual configuración electrónica externa tienen propiedades parecidas, al igual que las sustancias que forman, pueden encontrarse, a pesar de ello, diferencias y variaciones significativas, que exigen una explicación desde otro punto de vista.

Para comprender mejor estos aspectos que se señalan en los párrafos anteriores, existen ciertos factores, tales como, el tamaño, la atracción y la repulsión de electrones y el comportamiento magnético, que facilitan la interpretación y comprensión de las propiedades de los elementos.

### 2.5.1 Radios Atómicos y Radios Iónicos

Teniendo en cuenta que las nubes de carga de los átomos y de los iones no tienen contornos muy definidos, es necesaria una definición precisa del concepto de radio.

**El radio metálico de un metal, es la mitad de la distancia entre los centros de dos átomos vecinos, en una muestra sólida de la sustancia simple que forma el elemento metálico.**



Para la determinación del radio iónico, se supone que la distancia entre los centros de dos iones vecinos que componen un sólido iónico es la suma de los radios iónicos del catión y del anión. De esta manera, si se conoce el radio de un ion es posible, a partir de su valor, calcular el de otros iones que se combinen químicamente con él para formar compuestos.

**Muchos radios de metales y de cationes son del orden de 100 pm (pm = picometro =  $10^{-12}$ m). Los radios aniónicos son generalmente mayores y, frecuentemente, son del orden de 200 pm.**

Analizando los valores de los radios que figuran en las Tablas, indican que los radios metálicos, en general disminuyen de izquierda a derecha a lo largo de un Período de la Tabla Periódica de los Elementos y, que aumentan de arriba hacia abajo a lo largo de un Grupo de la misma.

La disminución que se produce en un Período de izquierda a derecha (por ejemplo, del Litio al Neón) es consecuencia del aumento de la atracción entre el núcleo del átomo y los electrones externo, a medida que aumenta la carga del núcleo.

El aumento del radio al descender en un Grupo de la Clasificación Periódica de los Elementos (por ejemplo, del Berilio al Radio), es el resultado que se produce por que los electrones externos se ubican, sucesivamente de elemento a elemento del Grupo, en niveles de energía más lejanos al núcleo del átomo.

Analizando los datos experimentales, puede observarse que los cationes son menores que los átomos de los que derivan y que, los aniones son mayores que los átomos de los que se forman.

La disminución del radio al formarse un catión, se debe a que cuando un átomo cede uno o más electrones, quedan los "niveles subyacentes" (internos) expuestos. La diferencia entre los radios del átomo y del catión puede ser importante ya que, por regla general, la parte interna de un átomo, es más pequeña que él, por la atracción que ejerce el núcleo por estos electrones más cercanos.

Los radios de los cationes derivados de los átomos de los distintos elementos varían en un Período y en un Grupo en el mismo sentido que los radios metálicos, por exactamente las mismas razones ya expuestas.

El aumento del radio al formarse un anión, se debe a que cuando un átomo gana uno o más electrones, al aumentar el número de estas partículas, aumenta la repulsión de los electrones entre sí. La variación, en Grupos y Períodos de la Tabla Periódica de los Elementos, es paralela a la indicada para los átomos y para los cationes.

Los aniones de menor radio son los correspondientes a los elementos ubicados en la parte superior derecha de la Tabla Periódica, cercanos al elemento Flúor, que forma el anión de menor radio, el "anión fluoruro ( $F^-$ ).

Los métodos empleados para la medición de radios atómicos y radios iónicos, se basan fundamentalmente en la Difracción de Rayos X con sustancias en estado de agregación sólido.

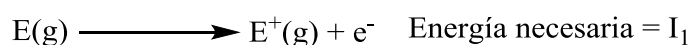


### 2.5.2 Energía de Ionización

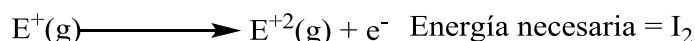
Podemos definir la "Energía de Ionización" de un elemento de la siguiente manera:

**Es la energía mínima necesaria que debe entregarse a un sistema, en estado gaseoso y compuesto por un mol de átomos de un elemento, para extraerle un mol de los electrones externos. En este proceso se forman un mol de cationes monopositivos, que constituyen un sistema en estado gaseoso**

Siendo todavía más precisos, la Primera Energía de Ionización,  $I_1$ , de un elemento E es la energía mínima necesaria para separar de un sistema gaseoso, un mol de electrones a un mol de átomos en su estado fundamental. Este proceso se puede simbolizar del siguiente modo:



La Segunda Energía de Ionización,  $I_2$ , de un elemento E es la energía mínima necesaria para separar de un sistema gaseoso, un mol de electrones a un mol de cationes monopositivos  $E^+$ . Este proceso se puede simbolizar del siguiente modo:



En la Tabla 2.7 se indican los valores correspondientes a la primera y segunda Energía de Ionización de los elementos pertenecientes a los Grupos principales de la Tabla Periódica.

1	2	13	14	15	16	17	18
							He 2372 5251
Li 519 7298	Be 900 1757	B 801 2427				F 1681 3374	Ne 2081 3952
Na 496 4562	Mg 738 1451	Al 578 1817	Si 787 1577		S 1000 2252		Ar 1521 2666
K 419 3052	Ca 590 1145	Ga 579 1979	Ge 762 1538	As 947 1798	Se 941 2045		
Rb 403 2633	Sr 550 1064	In 558 1821	Sn 709 1412	Sb 834 1595	Te 869 1790		
Cs 376 2234	Ba 503 965	Tl 589 1971	Pb 716 1451	Bi 703 1610			

Tabla 2.7 1ª y 2ª Energía de ionización de los grupos más representativos expresadas en KJ/mol

La mayor parte de las primeras energías de ionización están comprendidas entre 500 y  $1000 \frac{KJ}{mol}$ . La segunda energía de ionización de un elemento es siempre mayor que la



primera, ya que es necesaria una energía mayor para extraer un mol de electrones de un mol de iones dotados de una carga positiva que de un átomo neutro.

Para los metales alcalinos (Grupo 1), por ejemplo, la segunda energía de ionización es considerablemente mayor que la primera. En otros casos, como por ejemplo, para los metales alcalinotérreos (grupo 2) ambos valores son muy próximos.

La energía necesaria para extraer los electrones internos o "subyacentes" es siempre mayor que la necesaria para extraer un electrón externo. Al tener números cuánticos principales menores (menor contenido energético), los electrones internos están más cerca del núcleo, quien los atrae más fuertemente.

**La Energía de ionización varía periódicamente con el número atómico. Esto se ve claramente, en la primera energía de ionización, como puede comprobarse al analizar los datos experimentales.**

**La Energía de Ionización aumenta en un Período de la Clasificación de los Elementos, de izquierda a derecha y, al principio del período siguiente presenta un valor inferior.**

En un grupo, la Energía de Ionización. Aumenta de abajo hacia arriba. De esta manera, los elementos de menor Energía de ionización están a la izquierda, en la parte inferior de la Tabla Periódica, cerca del Cesio y los de mayor Energía de ionización están arriba hacia la derecha, cerca del Helio.

Que en un período, la Energía de Ionización aumente de izquierda a derecha, coincide con que en ese sentido disminuye el radio del átomo. Al estar más cerca los electrones externos del núcleo y ser mayor la carga del núcleo, la atracción que éste ejerce sobre los mismos es mayor y por lo tanto son más difíciles de extraer, requiriendo una mayor energía para este fin.

La disminución de la energía de ionización al descender en un Grupo, es debido a que los electrones externos ocupan una zona cada vez más alejada del núcleo, a la que le corresponde un número cuántico principal mayor y, por consiguiente, estos electrones están menos ligados al núcleo del átomo.

Estas tendencias presentan algunas anomalías que pueden atribuirse a los efectos de las fuerzas de repulsión entre los electrones, en partículas entre aquellos que ocupan un mismo subnivel de energía.

Las bajas energías de ionización de los elementos ubicados a la izquierda de la Tabla Periódica, los metales alcalinos y alcalinotérreos, explican el fuerte carácter metálico de los mismos. Por otra parte, los elementos que se encuentran a la derecha en la Clasificación de los Elementos, presentan altas energías de ionización, no pierden electrones con facilidad y son no metales.

### 2.5.3 Afinidad Electrónica

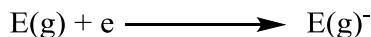
Podemos definir la "Afinidad Electrónica" de un elemento de la siguiente manera:

**Es la energía que libera un sistema, en estado gaseoso y compuesto por un mol**





de átomos de un elemento, cuando gana un mol de los electrones. En este proceso se forman un mol de aniones mononegativos, que constituyen un sistema en estado gaseoso.



El cambio de entalpía involucrado en este proceso se denomina Entalpía de ganancia de un electrón,  $\Delta H_{\text{ganancia}}$ . Puede ser positivo, que implica un proceso endotérmico, o puede ser negativo, que involucra un proceso exotérmico.

Se establece que un elemento tiene una elevada afinidad electrónica, si el proceso descrito es exotérmico, es decir, si la entalpía de ganancia de un electrón es negativa.

Un elemento tiene una baja afinidad electrónica si el proceso por el cual se gana un mol de electrones es endotérmico o, sólo un poco exotérmico.

Podemos generalizar, que el proceso de ganancia de un mol de electrones es más exotérmico para los elementos ubicados en la parte superior derecha de la Tabla Periódica de los Elementos, y es muy exotérmica cerca del elemento Flúor. En estos átomos, el electrón que se gana ocupa un orbital situado cerca de un núcleo con alta densidad de carga positiva. Esta situación es energéticamente favorable, por lo tanto, se libera energía y el proceso es exotérmico.

#### 2.5.4 Electronegatividad

Es probable que un átomo tenga tendencia a formar un catión en caso de tener baja energía de ionización y una baja afinidad electrónica. Por otra parte, es probable, que un átomo tenga tendencia a formar un anión en caso de tener una alta afinidad electrónica y una elevada energía de ionización.

En la [TABLA 2.8](#) se muestra el modelo de comportamiento de los elementos frente a las energías estudiadas.

Energía de ionización (EI)	Afinidad Electrónica (EAE)	Comportamiento
Baja	Baja	Forma Cation
Alta	Alta	Forma Anión

Tabla 2.8 Comportamiento de los elementos frente a las EI y EAE

Esta tabla puede resumirse, de un modo ingenioso, introduciendo el concepto de electronegatividad,  $X$ , que se define de la siguiente manera:

$$X = \frac{EI + EAE}{2}$$



Cuando la energía de ionización y la afinidad electrónicas son bajas,  $X$  es bajo. Cuando la energía de ionización y la afinidad electrónica son altas,  $X$  es alta. Esto hace que la tabla anterior se simplifique y se convierta en la siguiente.

Electronegatividad	Comportamiento
Baja	Forma Cation
Alta	Forma Anión

Tabla 2.9 Comportamiento de los elementos en función de su electronegatividad

Un elemento con baja electronegatividad, se denomina "electropositivo". Los elementos del Bloque s, de modo especial el Cesio, son los elementos más electropositivos.

En función de los conceptos ya expuestos y de los datos experimentales que pueden encontrarse en diferentes bibliografías, es posible establecer la dependencia de la electronegatividad, en relación a la ubicación del elemento en la Tabla Periódica.

La tendencia hacia valores más altos en la parte superior derecha de la misma coincide con la tendencia que presentan la energía de ionización y la afinidad electrónica. Por lo tanto el Flúor, y los elementos de los grupos 16 y 17 ubicados cercanos a él, son los más electronegativos. El Cesio y otros metales del bloque s, situados cerca de él son los más electropositivos.

El carácter altamente electronegativo de los halógenos y altamente electropositivo de los metales alcalinos explica la formación de compuestos iónicos, cuando reaccionan estos tipos de elementos.

1	2	13	14	15	16	17
H 2,20 3,06						
Li 0,98 1,28	Be 1,57 1,99	B 2,04 1,83	C 2,55 2,67	N 3,04 3,08	O 3,44 3,22	F 3,98 4,43
Na 0,93 1,21	Mg 1,31 1,63	Al 1,61 1,37	Si 1,90 2,03	P 2,19 2,39	S 2,58 2,65	Cl 3,16 3,54
K 0,82 1,03	Ca 1,00 1,30	Ga 1,81 1,34	Ge 2,01 1,95	As 2,18 2,26	Se 2,55 2,51	Br 2,96 3,24
Rb 0,82 0,99	Sr 0,95 1,21	In 1,78 1,30	Sn 1,96 1,83	Sb 2,05 2,06	Te 2,10 2,34	I 2,66 2,88
Cs 0,79	Ba 0,89	Tl 2,04	Pb 2,33	Bi 2,02		

Tabla 2.10 Electronegatividades de Pauling y Mulliken



### 2.5.5 Dureza, blandura y polarizabilidad

Hemos visto que la media de las energías de los orbitales frontera, la semisuma de la energía de ionización y la afinidad electrónica, es una de las definiciones de electronegatividad de un elemento. Podemos establecer una forma de medir la dureza como

**La diferencia entre la energía de ionización del átomo neutro y su anión.**

$$\eta = \frac{EI - EAE}{2}$$

La dureza es grande cuando los dos niveles están muy separados energéticamente. La dureza es baja, o mejor dicho, el átomo es "blando", cuando las energías de los orbitales frontera son similares.

A partir de esta definición, los átomos y iones más duros son aquellos que tienen energías de ionización altas y afinidades electrónicas bajas. Si la energía de ionización es mucho mayor que la afinidad electrónica, la dureza se relaciona con la energía de ionización alta.

**Los átomos y iones más duros son los de pequeño tamaño, situados cerca del flúor.**

Los átomos y iones más blandos son los que tienen energía de ionización bajas y afinidades electrónicas también bajas; estos son los átomos y iones de los elementos alcalinos más densos y de los halógenos más densos.

**Los átomos menos densos de un grupo son generalmente duros y los más densos blandos.**

La dureza es, generalmente, una propiedad que complementa a la electronegatividad a la hora de determinar el resultado de las reacciones, por lo que es importante conocer cual e ambas influencias es la dominante.

**La dureza indica la sensibilidad de los átomos a la presencia de los campos eléctricos, especialmente de aquellos que son originados por átomos y iones vecinos.**

La polarizabilidad, que se denomina con la letra  $\alpha$ , es la facilidad con la que un átomo o ion puede ser distorsionado por un campo eléctrico.

**Los átomos y iones duros especies con polarizabilidades bajas.**

**En la química, uno de los efectos polarizantes más importantes, es la presencia de otro átomo de su entorno. Las variaciones energéticas que producen estos efectos son los causantes de la adhesión de un átomo con otro, formando un enlace químico. Tema que ya estamos en condiciones de analizar en la próxima unidad.**



### 3. Uniones Química

**En el mundo que nos rodea se muestra una gran cantidad de materiales diversos, sustancias de todos los tipos con diferentes apariencias, colores, olores y consistencias. Las hay benéficas y tóxicas, ligeras o rígidas y pesadas. Sin importar las diferentes propiedades químicas de los compuestos, hay una característica común en ellos, para formar un compuesto, los átomos se unen. ¿Qué es lo que hace que los átomos permanezcan unidos? ¿Cuál es el pegamento que provoca que los átomos no se separen? ¿Cómo representamos un compuesto químico?**

Cuando se analizan las propiedades de las sustancias conocidas, ya sean simples o compuestas, inorgánicas u orgánicas, es posible verificar diferencias en el comportamiento, tanto desde el punto de vista de las propiedades físicas como de las propiedades químicas. Algunas tienen altos puntos de fusión y de ebullición, otras tienen bajos puntos de fusión y de ebullición; algunas son solubles en agua y otras son muy poco solubles en este solvente; algunas son termoestables, otras termolábiles; algunas conducen la corriente eléctrica y otras no son buenos conductores de la electricidad, algunas son fuertemente reactivas otras solamente reaccionan en condiciones enérgicas de reacción, entre otras propiedades.

Friedrich Wöhler, importante químico orgánico, en 1835 decía "... Hoy por hoy, la química orgánica está a punto de enloquecerme. Se me figura como un bosque tropical primitivo, lleno de las cosas más notables, una selva infinita, terrible, en la que uno no se atreve a penetrar porque parece que no hay salida..." Y Wöhler sólo se refería a las sustancias orgánicas, más allá que su número es muy superior al de las sustancias inorgánicas conocidas. La selva está allí y en ella hay aspectos aún más notables que los soñados por Wöhler. Sin embargo, podemos penetrar en ella sin el temor de perder nuestro camino puesto que tenemos un mapa: la Teoría Estructural, que es la base sobre la cual se han juntado millones de hechos acerca de miles de compuestos individuales, ordenándolos de forma sistemática. Es la base sobre la cual estos hechos pueden explicarse y comprenderse mejor.

La Teoría Estructural es el almacén de ideas acerca de cómo se unen los átomos para formar moléculas. Tiene que ver con el orden en que se juntan los átomos entre sí y con los electrones que, de alguna manera, los mantienen unidos. Tiene que ver con las formas y tamaños de las moléculas que generan estos átomos, o con los iones que pueden producir y la manera en la que los mismos se ubican en una estructura, entre otros aspectos.

La Teoría Estructural permite interpretar y predecir propiedades físicas, comportamiento químico, velocidades de reacción, tipos de reacción, entre otras posibilidades.

El Enlace Químico es la unión entre los átomos para formar sustancias simples o compuestas. Un enlace químico se forma entre dos átomos si la disposición resultante de los



dos núcleos y sus electrones tiene una energía menor que la energía total de los átomos separados, en función de tener parámetros termodinámicos espontáneos<sup>6</sup>.

Se produce porque los átomos en conjunto, son más estables que los átomos aislados y los responsables de la formación de uniones son los denominados, electrones de valencia.

**Los electrones de valencia son los electrones más externos en la estructura electrónica de los átomos, es decir, son los electrones que están en niveles de energía incompletos.**

Grupo 16	
8 3,5	15,9994 -2
<b>O</b>	
[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	
Oxígeno	
16 2,5	32,064 6,4,3,-2
<b>S</b>	
[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	
Azufre	

Configuración electrónica externa (C.E.E)

Figura. 3-1 Representación de la configuración electrónica sobre un mismo grupo. Se observa que en ambos elementos, el último nivel de energía posee una configuración electrónica de s<sup>2</sup> p<sup>4</sup>.

La menor energía puede lograrse mediante la transferencia completa de uno o más electrones de un átomo a otro, proceso en el que se forman iones de carga opuesta, y el compuesto se forma por la atracción electrostática de estos iones. Esta atracción se denomina Enlace iónico.

Por otra parte, la menor energía puede alcanzarse cuando los átomos comparten electrones: entonces los átomos se unen mediante un Enlace Covalente formándose moléculas individuales.

Un tercer tipo de enlace es el Enlace Metálico que se establece entre los átomos de los elementos metálicos que forman las sustancias simples monoatómicas denominadas metales.

Las actuales teorías sobre los enlaces químicos surgen de los trabajos que en 1916 desarrollaron Walther Kossel en Alemania para el Enlace Iónico y G. N. Lewis, en Estados Unidos, para el Enlace Covalente. Tanto Kossel como Lewis basaron sus ideas en el concepto que considera que el átomo está formado por un núcleo positivo que se halla rodeado de electrones que estaban en determinados niveles de energía (Modelo de Bohr). Cada nivel de

<sup>6</sup> Cuando nos referimos a un parámetro termodinámico, hablamos de un sistema en el cual ocurre un proceso, y la energía consumida o liberada en éste proceso, depende únicamente del conjunto de energías iniciales y finales del sistema, sin importar el camino por el cual se llega a las mismas.



energía se completa con un número máximo de electrones, alcanzándose la máxima estabilidad cuando se completa el nivel más externo, con ocho electrones, como lo hacen los elementos inértidos. Tanto el enlace iónico como el covalente se producen por la tendencia de los átomos a alcanzar la configuración electrónica estable del elemento inértido más cercano: Teoría del Octeto Electrónico de Lewis.

### 3.1 Enlace Iónico

Los átomos de los elementos que tienen *energías de ionización bajas forman cationes*, y los que tienen una *alta afinidad electrónica* tienden a *formar aniones*. Los compuestos iónicos se forman por atracciones electrostáticas de los iones, es decir, si un átomo en su estado fundamental, cede un electrón, este queda con carga neta positiva, y si otro átomo acepta ese electrón queda simultáneamente con carga negativa. Como bien sabemos, *las cargas netas opuestas se atraen*, esta atracción electrostática de cargas netas genera un enlace entre esos átomos.

**La fuerza electrostática que une a los iones en un compuesto iónico se denomina enlace iónico.**

En 1916 fueron descritos los compuestos iónicos como un sistema eléctricamente neutro formado por cationes y aniones que, por la atracción entre ellos, se mantienen unidos. Esta atracción se conoce como "enlace iónico". También es llamado electrovalente.

Muchos son los factores que contribuyen a mantener unidos dos iones, por ello es difícil encontrar enlaces puramente iónicos. Pero este modelo nos permite explicar los enlaces de muchos, en particular aquellos que forman elementos del grupo s, como por ejemplo el óxido de magnesio.

Este tipo de unión involucra un necesario intercambio de energía, y en base éste, predecir o no la posibilidad de formación de este tipo de enlace. Por lo tanto, es necesario comprender los cambios energéticos que acompañan la formación de los iones y sus interacciones.

Consideremos por qué la energía de un cristal de cloruro de potasio es menor que la de un conjunto de átomos de potasio y de cloro separados. Podemos pensar EAE la formación del sólido se lleva a cabo en tres pasos: los átomos de potasio liberan electrones que son aceptados por los átomos de cloro y entonces los aniones y cationes resultantes se aglomeran formando un cristal.

Consideremos que pasa cuando se forma un par iónico, al unirse un átomo de potasio y uno de cloro. Esta situación y la liberación de energía producida, también ocurre en la formación de un sólido, donde intervienen un número enorme de iones, que nos permite aplicar estos conceptos a casos reales. El átomo de potasio tiene una muy baja Energía de Ionización y

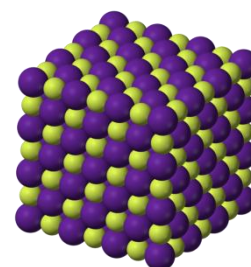


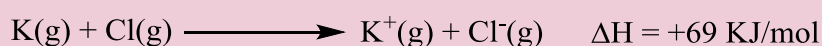
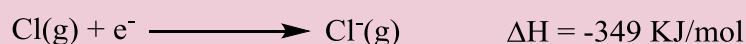
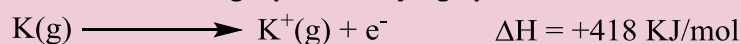
Figura. 3-2 Las esferas violetas corresponden a átomos de Cs mientras que las verdes a átomos de F.



Afinidad Electrónica y transfiere un electrón al átomo de cloro, que tiene altos valores de Energía de Ionización y Afinidad Electrónica.

Al iniciarse esta unión los átomos de cloro y potasio se encuentra relativamente alejados, y comienzan a acercarse, hasta que a una cierta distancia el átomo de potasio cede un electrón que es capturado por el átomo de cloro. En este proceso tendremos la conversión del potasio al catión  $K^+$  y del cloro al anión  $Cl^-$ . El intercambio de energía se debe a la "energía de ionización del potasio", que permite la formación del catión  $K^+$ , a la energía liberada al formarse el anión  $Cl^-$ , que es la afinidad electrónica del cloro.

Ahora podemos calcular la energía puesta en juego para esta unión.



En este punto, el cambio neto de energía involucra un aumento de energía de +69 KJ. Hasta aquí no se observa que la formación del cloruro de potasio (KCl) esté favorecida.

Sin embargo, a estas dos contribuciones debe agregarse la "energía potencial", dada por la atracción coulombica (de naturaleza electroestática) que proviene de la atracción entre los iones de carga opuesta en el sólido. Esta atracción depende de la distancia,  $d$  (expresada en  $pm$ , picómetros) entre los mismos y del valor de la carga de cada ion. Para un mol de pares iónicos, donde llamamos  $z_A$  y  $z_B$  a los números de carga de los iones potasio y cloro ( $K^+ = +1$  y  $Cl^- = -1$ )

$$E = \frac{z_A \cdot z_B}{d} \cdot 1,39 \times 10^5 \frac{KJ}{mol} \cdot pm$$

La energía potencial de los iones es cero cuando no interaccionan por estar muy alejados.

$$\lim_{d \rightarrow \infty} E = \lim_{d \rightarrow \infty} \left[ \frac{z_A \cdot z_B}{d} \right] \cdot 1,39 \times 10^5 \frac{KJ}{mol} = 0$$

Para una distancia menor a  $2.000 pm$ , por ejemplo  $1.900 pm$ , tendremos

$$E = -73 \frac{KJ}{mol}$$

$$E = \frac{1 \cdot (-1)}{1.900 pm} \cdot 1,39 \times 10^5 \frac{KJ \cdot pm}{mol} = -73 \frac{KJ}{mol}$$

Cuando los dos iones en cada par están en contacto, es decir a una distancia de un diámetro iónico, que en este ejemplo corresponde a  $d = 314 pm$ , la energía

potencial es de  $-433 \frac{KJ}{mol}$ .

Resumiendo podemos decir que la energía total intercambiada, debida a la energía necesaria para formar los iones a partir de los átomos, es de  $+69 \frac{KJ}{mol}$  y

la de atracción entre los iones está dada por  $-433 \frac{KJ}{mol}$ , por lo tanto, la



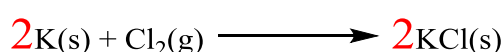
formación de un mol de pares iónicos, está dada por la suma algebraica entre ambas energías.

$$\Delta E = +69 \frac{KJ}{mol} - 433 \frac{KJ}{mol} = 364 \frac{KJ}{mol}$$

Dado que este valor representa una sustancial disminución de energía, podemos suponer que se verá favorecido que ocurra esta reacción.

Ahora podemos preguntarnos ¿cuándo se ve favorecida la formación de un sólido iónico?

Tratemos de responder esta pregunta al estudiar la formación de cloruro de potasio (KCl), a partir de K(s) y Cl(g)



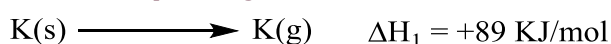
Esta reacción tiene lugar en varios pasos.

- Formación de dos moles de potasio gaseoso.
- Ruptura del enlace (disociación) de las moléculas de cloro gaseoso
- Transferencia de electrones del potasio al cloro y formación de iones de signo opuesto.
- Unión de los iones potasio y cloro

El Ciclo de Born - Haber involucrará una serie de pasos o etapas, en cada uno de los cuales estará involucrada una determinada variación de entalpía.

Veamos como suceden estos pasos y la energía puesta en juego en cada uno de ellos. Los valores de la energía intercambiada se obtienen de tablas en libros y manuales y se aplican las Leyes de Hess derivadas de la Primera Ley de la Termodinámica.

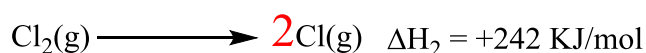
1º. Formación de dos moles de potasio gaseoso.



Para dos moles la energía necesaria es el doble:  $E_1 = n_1 \cdot \Delta H_1 = 2 \text{ mol} \cdot 89 \frac{KJ}{mol} = 178 \text{ KJ}$

2º. Ruptura del enlace (disociación) de las moléculas de cloro gaseoso

Donde una molécula de cloro gaseoso se disocia en dos átomos de cloro gaseoso.

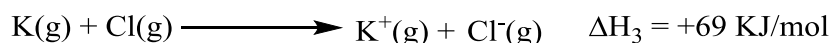


En este instante imaginariamente tenemos un gas formado átomos de potasio y de cloro.

3º. Transferencia de electrones del potasio al cloro y formación de iones de signo opuesto

En el gas formado comienzan a acercarse los átomos hasta una distancia tal que permite la transferencia de electrones del potasio al cloro y se forma un gas de iones, que se encuentran a una distancia que todavía no permite la unión entre los iones.





Como nosotros tenemos dos moles de átomos de potasio y dos moles de átomos de cloro

$$\text{gaseoso } E_3 = n_3 \cdot \Delta H_3 = 2 \text{ mol} \cdot 69 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} = 138 \text{ KJ}$$

Las variaciones de entalpía producidas hasta este momento son todas endotérmicas, y suman  $558 \text{ KJ}$ . Por lo tanto podemos asegurar  $+279 \text{ KJ}$  es la variación de entalpía necesaria para formar un mol de gas de iones a partir de potasio sólido y cloro gaseoso.

#### 4º. Unión de los iones potasio y cloro

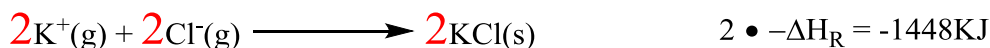
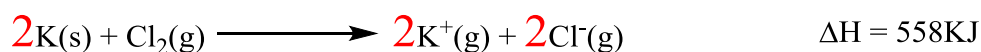
Los iones potasio y cloro se unen para formar un sólido, el cloruro de potasio, y al igual que en la formación de un par iónico se necesita una gran cantidad de energía, en este caso una disminución de gran importancia, debida a la atracción, que cada uno de los cationes y de los aniones presentes, y a la repulsión que se produce entre los mismos cuando cada uno actúa frente a todos los otros, cationes o aniones respectivamente. Este valor, se denomina Entalpía Reticular y se lo describe como  $\Delta H_R$  y se calcula a partir de la siguiente ecuación denominada ecuación de Kapustinskii:

$$\Delta H_R = -\frac{n \cdot z_A \cdot z_B}{d} \cdot \left(1 - \frac{d^*}{d}\right) \cdot K$$

Donde  $d = r_A + r_B$ ,  $K = 121.000 \frac{\text{KJ} \cdot \text{pm}}{\text{mol}}$ ,  $d^* = 34,5 \text{ pm}$  y  $n$  es el número de iones por unidad de fórmula.

$$\Delta H_R = -\frac{2 \cdot 1 \cdot (-1)}{295 \text{ pm}} \cdot \left(1 - \frac{34,5 \text{ pm}}{295 \text{ pm}}\right) \cdot 121.000 \frac{\text{KJ} \cdot \text{pm}}{\text{mol}} = 724 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}}$$

Este valor, que es positivo, es la energía necesaria para romper el retículo cristalino del cloruro de potasio para formar sus iones en estado gaseoso.



Este valor corresponde a la energía necesaria para formar dos moles de cloruro de potasio sólido a partir de cloro y potasio, sin embargo para formar únicamente un mol, el valor de ésta energía disminuye hasta la mitad. Por lo que la energía necesaria para formar un mol de cloruro de potasio a partir de sus elementos vale  $-445 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}}$ .

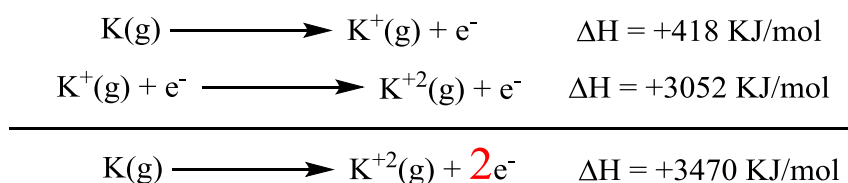


Comprobamos entonces, que se produce una gran disminución de la entalpía al formarse un mol de cloruro de potasio sólido a partir de las sustancias simples de sus átomos constituyentes.

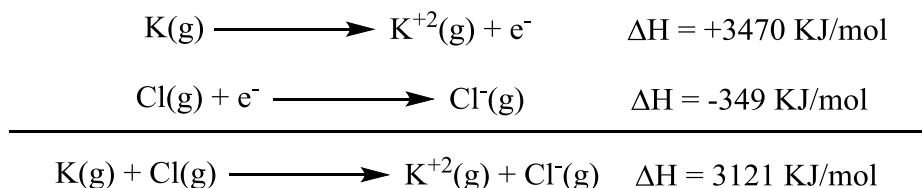
También observamos que la formación del cloruro de potasio es una reacción exotérmica por las variaciones de entalpía puestas en juego.

Pero que es lo que ocurre si estudiamos la formación de un compuesto imaginario, formado por un átomo de potasio y dos de cloro,  $KCl_2$ , donde el potasio actúa con estado de oxidación +2.

En este caso se debe considerar la primera y la segunda energía de ionización, para la formación del  $K^{+2}$ .



Por lo tanto la energía para la formación de ambos iones se calcula:



Y así, una energía que valía  $+69 \frac{KJ}{mol}$  aumento aproximadamente cuarenta y cinco veces su valor. Y finalmente si usamos este nuevo valor la energía necesaria para que se formara nuestro nuevo cloruro de potasio valdrá  $+809 \frac{KJ}{mol}$

### 3.1.1 Factores que favorecen la formación de enlaces iónicos

- Cuando la energía liberada en la formación de un sólido iónico, excede a la energía consumida a la de la formación de los iones reactivos.
- La entalpía de formación del ión, siempre que la energía de ionización del elemento que forma el catión no sea elevada.
- La afinidad electrónica del elemento que forma el anión no sea muy baja.

Es necesario señalar que no se considera que un sólido iónico esté unido por enlaces entre pares de iones específicos: todos los cationes interactúan en mayor o en menor medida con todos los aniones, todos los cationes se repelen entre sí, al igual que todos los aniones se repelen entre sí. Un enlace iónico es una característica "global" del cristal entero, que produce una disminución neta de la energía del sistema tomando en cuenta el cristal completo.



Es este punto es posible comprender la formación de un enlace iónico y a entender cuándo es posible esperar que se forme. Hay disminución neta de la energía cuando la atracción neta entre los iones es mayor que la energía necesaria para formar esos iones. Prácticamente, la mayor contribución a los requerimientos de energía viene de la energía de ionización del elemento que forma el catión. Típicamente, sólo los elementos metálicos tienen Energías de Ionización lo bastante bajas como para que la formación de cationes monoatómicos sea energéticamente posible.

**Los enlaces iónicos se limitan a los compuestos formados entre elementos con bajos valores de Energía de Ionización y de Afinidad Electrónica con elementos de elevados valores de Energía de Ionización y de Afinidad Electrónica**

Por lo tanto los compuestos iónicos generalmente se forman entre los elementos ubicados a la izquierda de la tabla periódica, que aportan los cationes cediendo electrones, y los de la derecha de ella, que aportan los aniones, ganando electrones.

Resumiendo, los elementos metálicos pueden ceder sus electrones externos más débilmente retenidos por el núcleo transformándose en cationes; mientras que los elementos no metálicos acomodan esos electrones en sus niveles más externos para transformarse en aniones.

El enlace iónico resulta de la transferencia de electrones desde un átomo con bajas energía de ionización y afinidad electrónica que los cede formando un catión a otro que los gana por tener una elevada energía de ionización y afinidad electrónica y forma un anión. La atracción electrostática entre los iones de carga opuesta es, como se ha mencionado, el enlace iónico.

Vemos que estamos hablando de los elementos del bloque s, los que forman cationes con número de oxidación coincidente con su número de grupo ( $K^+$  o  $Ca^{+2}$ ). Lo mismo ocurre con los elementos de la parte inferior del bloque p, que además forman cationes con número de oxidación igual al número de grupo menos dos ( $Sn^{+4}$  y  $Sn^{+2}$  o  $Pb^{+4}$  y  $Pb^{+2}$ ).

Los elementos de la parte superior derecha del bloque p, forman aniones, con número de oxidación igual al número de grupo menos ocho, (el  $O^{-2}$  o el  $Cl^-$ )

**Predecir la fórmula del compuesto formado por Bario y Azufre.**

**¿El compuesto formado tendrá carácter iónico?**

**Rta: Sí, ya que el Bario proviene del bloque s, y el Azufre se encuentra en la parte superior derecha del bloque p.**

**Por lo tanto podemos predecir que el Bario (Grupo II) formará un catión  $Ba^{+2}$  al ceder dos electrones y el Azufre (Grupo VI) formará el anión  $S^{-2}$ , al ganar dos electrones (que no deben porque, ser del mismo átomo de Bario).**

**Y se obtiene la fórmula eléctricamente neutra dada por  $BaS$ .**



### 3.1.2 Diagrama de puntos en compuestos iónicos

Lewis, quien fuera profesor del Instituto Tecnológico de Massachusetts, distribuyó los electrones de los elementos de un mismo periodo, sobre un cubo. Observando, que únicamente podía poner 8 electrones, uno por arista. Y también observó que los compuestos químicos (conocidos hasta esa época) también cumplían con la misma secuencia. Los átomos centrales quedaban rodeados por 8 electrones, esto no significaba ni más ni menos, que los compuestos adquirirían una estructura electrónica estable, comparable a la un gas noble, el cual tiene 8 electrones en su último nivel de energía.

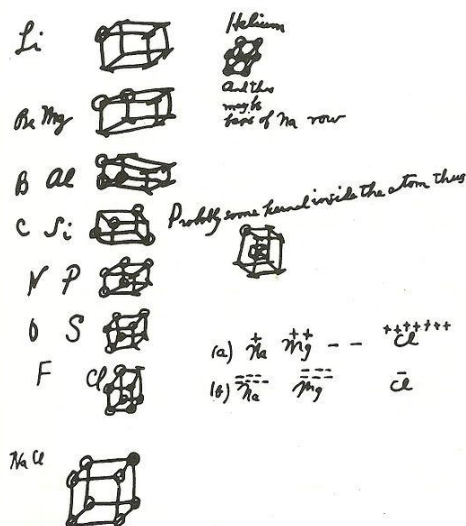


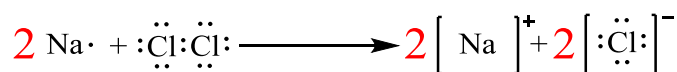
Figura. 3-3 Diagrama de distribución electrónica de los elementos, realizado por Lewis.

Para representar los electrones del último nivel de energía de los átomos que participan de un enlace iónico se ideó el "diagrama electrónico de puntos" basado en las observaciones realizadas por Lewis. En el representamos al símbolo del elemento, rodeado por un punto por cada electrón de valencia.

$\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \text{Cl} \\ \cdot \\ \cdot \end{array}$	$\text{H} \cdot$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \text{N} \\ \cdot \\ \cdot \end{array}$
$\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \text{O} \\ \cdot \\ \cdot \end{array}$	$\text{He} \cdot$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \text{Mg} \\ \cdot \\ \cdot \end{array}$
$\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \text{F} \\ \cdot \\ \cdot \end{array}$	$\text{Na} \cdot$	$\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \text{Ca} \\ \cdot \\ \cdot \end{array}$

Tabla 3.1 Diagrama de puntos

Podemos utilizar este diagrama para representar la formación del cloruro de sodio, a partir de los átomos de cloro y sodio.



El átomo de sodio cede un electrón que es tomado por el átomo de cloro para formar los iones sodio y cloruro respectivamente. Esto ocurre cuando ambos átomos se acercan a una distancia dada, se produce una reacción cuyo resultado es la formación de un ion sodio ( $\text{Na}^+$ ) y un ion cloruro ( $\text{Cl}^-$ ), ambas partículas están cargadas eléctricamente.

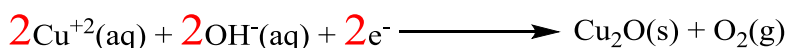


### 3.1.3 Elementos con más de un número de oxidación posible

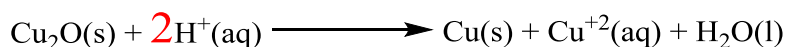
Ya hemos visto situaciones en las que un mismo elemento puede actuar con más de un número de oxidación para formar iones. En el caso preciso del bloque p, unas líneas más arriba y, agregamos a hora que lo mismo sucede con los elementos del bloque d.

#### 3.1.3.1 El bloque d

El cobre forma el ion  $\text{Cu}^+$  al ceder un electrón 4s, pero por su relativamente baja segunda energía de ionización puede ceder un segundo electrón y formar un ion  $\text{Cu}^{+2}$ . Permittedole formar el óxido de cobre (I) ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ), de color rojo y el óxido de cobre (II) ( $\text{CuO}$ ), de color negro.



El cobre pierde fácilmente un electrón d para dar Cu (II). El óxido de Cu(I) en solución diluida de ácido sulfúrico no forma sulfato de cobre (I) sino que reacciona dando sulfato de cobre (II) y cobre metálico, reacción de dismutación. Estas reacciones se caracterizan por que en ellas una misma sustancia sufre un proceso de oxidación y simultáneamente uno de reducción.



Esto también ocurre con los otros elementos del grupo del cobre, como la plata y el oro.

#### 3.1.3.2 El bloque p

Entre los elementos próximos al margen izquierdo de este grupo se presenta la posibilidad de elementos con múltiples estados de oxidación.

Los mismos provienen de la diferencia de energía entre los sub – niveles s y p y de la energía adicional para extraer dos electrones de valencia, luego ceder los electrones p. Esta característica permite justificar las propiedades de los elementos metálicos en la tabla periódica.

Se puede predecir la fórmula de los compuestos formados por iones monoatómicos de los elementos de los principales grupos asumiendo que los átomos que forman los cationes han cedido sus electrones menos retenidos, de valencia, mientras que los átomos que forman los aniones han ganado electrones en sus niveles más externos, de modo tal que los iones formados adquieren la configuración electrónica externa con ocho electrones (octeto electrónico) o el doblete en el caso de los elementos H, Li y Be. Los átomos de muchos metales del bloque d y muchos no metales anfóteros del bloque p forman más de un catión.



## 3.2 Enlace covalente

A pesar de que el concepto de molécula se conoce desde el siglo XVII, no fue sino hasta principios del siglo XX que se empezó a comprender como y porque se forman las moléculas. El primer avance importante en este campo fue realizado por Gilbert Newton Lewis, quien sugirió que un enlace químico implica que los átomos compartan electrones. En este enlace, cada electrón del par compartido está atraído por los núcleos de ambos átomos. Por lo tanto, estas uniones no están generadas por cargas netas, como en el enlace iónico; sino que están generadas por una atracción electrostática de densidades de carga. A esta atracción se la denomina dipolo.

**La diferencia de electronegatividad de dos elementos A–B, sirve para predecir de forma cualitativa el tipo de enlace que se formará entre A y B.**

**Si  $\Delta EL < 0,4$  el enlace corresponde a un enlace covalente no polar**

**Si  $0,4 \leq \Delta EL \leq 0,7$  el enlace corresponde a un enlace covalente polar**

**Si  $\Delta EL > 0,7$  el enlace tiene carácter iónico**

### 3.2.1 Lewis y la Regla del Octeto en los enlaces covalentes

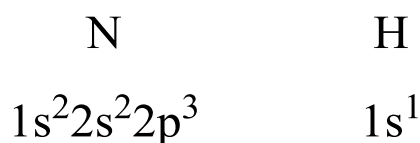
Lewis en 1917 enunció su *Regla del Octeto*, que como bien dice, es una regla no una ley, y como toda regla tiene excepciones.

**La tendencia de los átomos de los elementos del sistema periódico es completar sus últimos niveles de energía con una cantidad de 8 electrones de tal forma que adquiere una configuración muy estable.**

#### 3.2.1.1 ¿Cómo se arma una estructura de Lewis?

Supongamos que tenemos una molécula covalente, de las más simples, el amoníaco  $\text{NH}_3$  por ejemplo.

1. Identificamos los electrones de valencia de ambos átomos.



2. Armamos las estructuras electrónicas de ambos átomos. Para ello se colocan los electrones de valencia alrededor del átomo. Se colocan los primeros cuatro electrones individualmente, y luego los otros 4, apareando a los electrones libres. Dos electrones en un elemento son un par de electrones sin compartir.

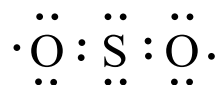


3. Identificamos el átomo central, generalmente es el átomo que mayor necesidad de captar electrones tiene. En nuestro caso el nitrógeno.
4. Ordenamos los átomos en forma cuadrada, alrededor del átomo central.





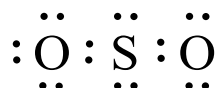
Siguiendo con el ejemplo anterior del dióxido de azufre, llegamos a que una estructura posible para este compuesto es:



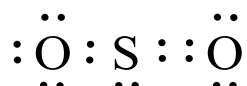
### 3.2.2.1 ¿Esta estructura de Lewis realmente representa a la estructura de la molécula?

Según el modelo propuesto por Lewis, las estructuras más estables son aquellas que tienen pares de electrones compartidos, lo cual esta estructura no cumple ya que cada oxígeno posee un electrón desapareado.

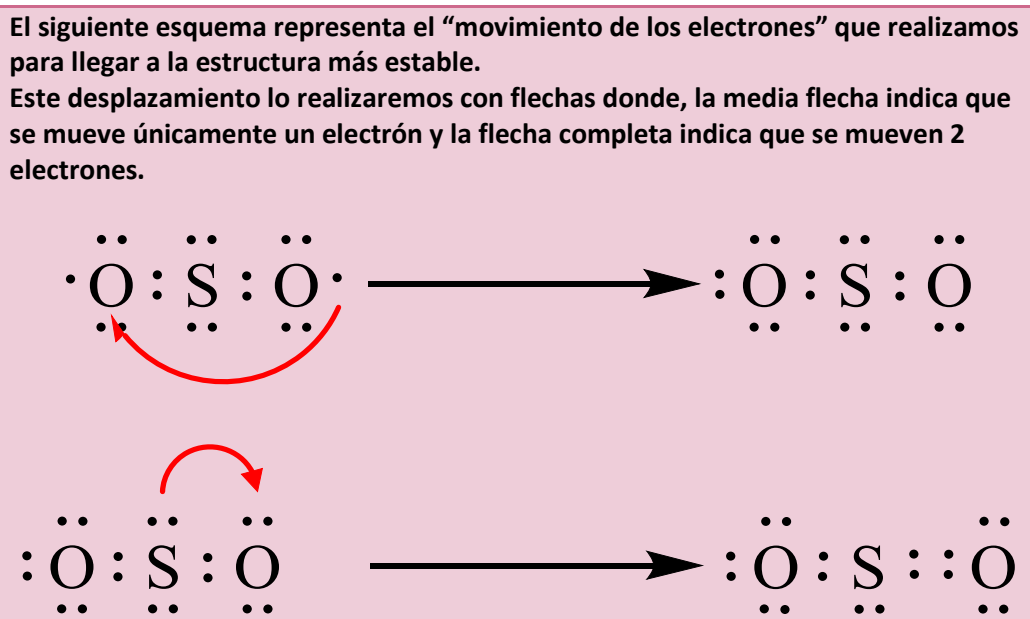
Por lo tanto podemos suponer que esos dos electrones se encuentran sobre el mismo oxígeno formando un par compartido.



Sin embargo esta estructura, sería aún más estable, si todos los átomos cumplieran con la regla del octeto. Para ello, el átomo que tiene deficiencia en electrones deberá atraer electrones del átomo vecino, en nuestro ejemplo el azufre. Dado que el mismo tiene dos pares de electrones sin compartir, éstos pueden servir para formar uniones múltiples. Por lo tanto, uno de los dos pares de electrones que posee el azufre, serán también compartidos por el oxígeno.



De esta forma, los dos oxígenos y el azufre tienen 8 electrones en su alrededor y cumplen con la regla del octeto, siendo ésta la estructura más estable.







Para simplificar estos diagramas de puntos de Lewis en la actualidad se representan las uniones químicas, es decir, a los pares de electrones compartidos como una línea que va de un átomo al otro, dejando como puntos los pares de electrones sin compartir. Por lo tanto, la estructura de Lewis del dióxido de azufre, puede representarse como se indica en la FIGURA. 3-4. Cada par de electrones compartidos se indica con una línea, es decir, que dos pares de electrones se representan con una doble línea.

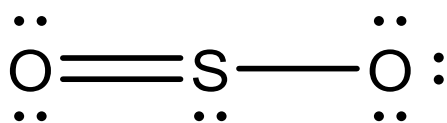


Figura. 3-4 Estructura de Lewis del dióxido de azufre

Figura. 3-4 Estructura de Lewis del dióxido de azufre, puede representarse como se indica en la FIGURA. 3-4. Cada par de electrones compartidos se indica con una línea, es decir, que dos pares de electrones se representan con una doble línea.

### 3.2.3 Electronegatividad y polarización del enlace.

Cuando dos átomos comparten por igual los dos electrones del enlace covalente se dice que el enlace es no polar, como ocurre en el enlace covalente de la molécula de hidrógeno, en el enlace covalente de la molécula de cloro, o en el enlace covalente carbono-carbono del etano. Sin embargo, la mayor parte de los enlaces covalentes están formados por dos átomos diferentes, de manera que los electrones del enlace son atraídos con mayor intensidad por uno de los dos átomos que forman el enlace. Cuando esto ocurre el enlace covalente se denomina enlace polar. Por ejemplo, cuando el carbono se enlaza al cloro el par de electrones del enlace se encuentra atraído con más intensidad por el átomo de cloro, de manera que sobre el átomo de carbono aparece una pequeña carga parcial positiva y sobre el átomo de cloro aparece una cantidad igual de carga negativa.

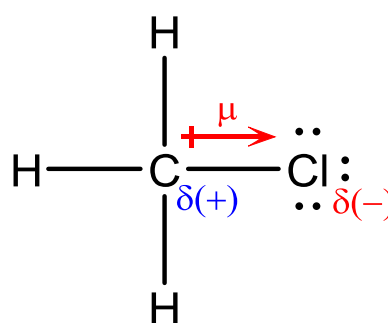


Figura. 3-5 Enlace covalente polar C-Cl de la molécula de clorometano. La polaridad del enlace se indica con una flecha que dirige su punta hacia el extremo negativo del enlace polar y un signo más (+) en el extremo positivo del enlace.

La polaridad del enlace se mide mediante su momento dipolar ( $\mu$ ) que se define como la cantidad de diferencia de carga multiplicada por la longitud del enlace. El símbolo  $\delta(+)$  quiere decir una pequeña cantidad de carga positiva y el símbolo  $\delta(-)$  quiere decir una pequeña cantidad de carga negativa.

A fin de predecir si un enlace covalente va a ser polar se recurre a la comparación de las electronegatividades de los átomos que forman el enlace. La electronegatividad se define como la tendencia del núcleo atómico a la atracción de electrones.

Pauling desarrolló una escala de electronegatividades relativas para la mayoría de los átomos.

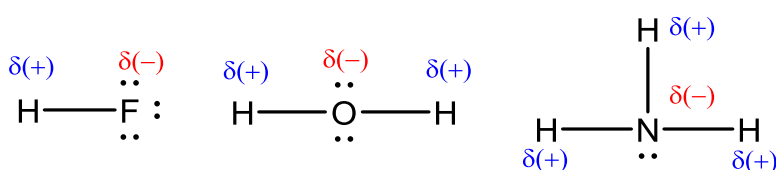


Figura. 3-6 Polaridad de los enlaces en las estructuras de Lewis de los compuestos, Fluoruro de hidrógeno, agua, amoníaco.

En el Sistema Periódico la electronegatividad aumenta de izquierda a derecha y disminuye al bajar en una



columna, por lo que el flúor es el elemento más electronegativo, algunos valores pueden verse en la [TABLA 2.10](#) Como se deduce de la tabla anterior, un enlace C-H debería estar muy poco polarizado, puesto que la electronegatividad del hidrógeno y del carbono es similar.

Sin embargo, los halógenos, el oxígeno y el nitrógeno, que son heteroátomos que suelen aparecer en las estructuras orgánicas, son más electronegativos que el carbono y, por tanto, los enlaces  $C-X$ ,  $C-O$  y  $C-N$  son polares.

En algunos de los temas de esta asignatura se dará una representación del contorno de densidad electrónica de determinadas moléculas. La asimetría en la distribución de carga se indicará con un sistema de colores que varía de tonalidad según el valor del potencial electrostático

El color **rojo** indica una zona de la estructura con elevada densidad de carga **negativa**, debido a presencia de átomos muy electronegativos, mientras que un color **azul** indica una zona de la estructura con déficit de carga debido a la presencia de átomos poco electronegativos.

rojo < naranja < amarillo < verde < azul

El enlace  $H-F$  del fluoruro de hidrógeno, que se muestra en la [FIGURA. 3-6](#) está fuertemente polarizado y la densidad de carga a lo largo del enlace entre el flúor y el hidrógeno está desplazada hacia el átomo más electronegativo (flúor) creando un potencial electrostático negativo alrededor de dicho átomo (color rojo) y en consecuencia un potencial electrostático positivo alrededor del hidrógeno (color azul, como se muestra en la [FIGURA. 3-7](#).

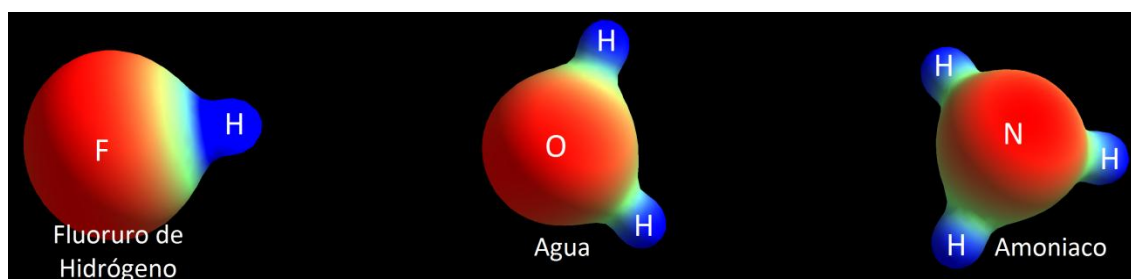


Figura. 3-7 Mapa de potencial electrostático para algunos compuestos

Lo mismo ocurre en el caso de la molécula de agua, en el que la mayor electronegatividad del oxígeno provoca la polarización de los enlaces  $H-O$ .

El caso del amoníaco es similar al de la molécula de agua: el nitrógeno es más electronegativo que el hidrógeno y, por tanto, los tres enlaces  $H-N$  son polares. La densidad de carga se halla desplazada hacia el nitrógeno lo cual se ve perfectamente en el diagrama de contorno de potencial electrostático de la [FIGURA. 3-7](#), por la aparición de una zona de color rojo en la parte superior del nitrógeno, y la aparición de una zona de color azul en la parte inferior donde se encuentran los tres átomos de hidrógeno.



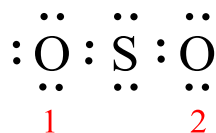
### 3.2.4 Carga formal

En los enlaces polares las cargas parciales sobre los átomos son reales. Sin embargo, cuando se dibujan determinadas estructuras químicas, según la representación de Lewis, aparecen cargas eléctricas asociadas a algunos átomos, denominadas cargas formales. Las cargas formales permiten contar el número de electrones de un átomo determinado de una estructura, y se calculan según la siguiente ecuación:

$$3.1 C_F = e_{\text{valencia}} - \text{enlaces} - \text{electrones sin compartir}$$

En el [PUNTO 3.2.2.1](#) analizamos dos estructuras posibles para el  $\text{SO}_2$  y utilizamos el criterio del octeto para analizar su estabilidad. Ahora podemos también, analizar la carga formal de cada átomo presente en una estructura de Lewis.

En la primer estructura podemos calcular entonces las cargas formales de cada átomo, para ello utilizaremos la ecuación 3.1



A cada oxígeno, se le asignó un número de referencia ya que ambos no son, en carácter de las uniones químicas que realizan, idénticos.

$$C_{FO_1} = 6 - 1 - 6 = -1$$

$$C_{FS} = 6 - 2 - 4 = 0$$

$$C_{FO_2} = 6 - 1 - 4 = +1$$

De acuerdo a los resultados obtenidos el oxígeno 2, posee "carga aparente positiva" para mantenerse unido al átomo de azufre, sin embargo, si vemos la [TABLA 2.10](#) observamos que el oxígeno es más electronegativo que el azufre, por lo tanto, sería bastante improbable que el átomo más electronegativo posea una carga positiva.

**La suma de todas las cargas formales de cada átomo individual debe dar como resultado la carga neta de la molécula.**

Analicemos ahora la otra estructura propuesta, que según el octeto de Lewis representa la estructura más estable.





En realidad, el dióxido de azufre no es la estructura resonante I ni tampoco la estructura resonante II, sino la estructura que resultaría al mezclar las características asociadas a la estructura I y a la II.

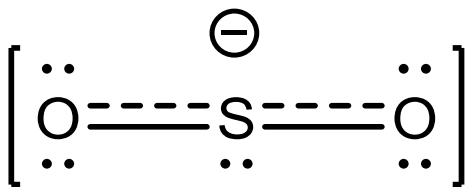


Figura. 3-9 Híbrido de resonancia del dióxido de azufre.

El problema de dibujar los compuestos como híbridos de resonancia reside en la imposibilidad de contar el número de electrones sobre algunos átomos. Por ejemplo, en la estructura de híbrido de resonancia del dióxido de azufre se hace difícil saber el número de electrones sobre el átomo de azufre o sobre los átomos de oxígeno. Aunque los híbridos de resonancia dan una imagen más real del orden de enlace y de la distribución electrónica de la molécula no se suelen utilizar con asiduidad. Una forma de escribir el híbrido de resonancia, que sí permite el contaje de los electrones en cada átomo, consiste en encerrar entre corchetes a todas las estructuras resonantes conectándolas entre sí mediante una flecha de doble punta, tal y como se ha descrito en la [FIGURA. 3-8](#).

### 3.2.5.1 Contribución de las estructuras resonantes.

La mayor o menor contribución de las estructuras resonantes a la descripción de la molécula se puede relacionar con la mayor o menor estabilidad que teóricamente puede atribuirse a cada estructura. De forma cualitativa se puede evaluar esta mayor o menor estabilidad teniendo en cuenta los siguientes puntos:

1. Una estructura resonante será tanto más estable cuanto mayor sea el número de enlaces formales que posea.
2. Las estructuras iónicas con separación de cargas son más inestables que las no cargadas.
3. Entre dos estructuras resonantes con separación de cargas, y en igualdad de otras condiciones, será más estable la estructura con la carga negativa en el átomo más electronegativo.
4. Las estructuras resonantes con octetos completos en todos los átomos de la segunda fila del Sistema Periódico son particularmente estables, aunque ello suponga la presencia de una carga positiva en un átomo electronegativo.

### 3.2.5.2 Cómo dibujar estructuras resonantes.

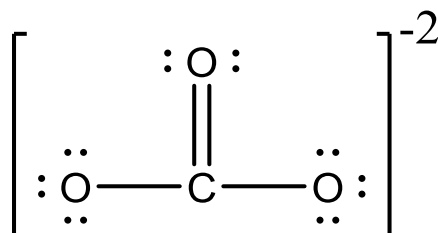
Para dibujar correctamente las estructuras resonantes de un compuesto conviene seguir las siguientes reglas:

1. Dibujar una estructura de Lewis para el compuesto en cuestión.
2. Tomando como base la estructura de Lewis acabada de dibujar se dibuja otra estructura de Lewis de manera que:
  - a. Todos los núcleos mantengan su posición original.
  - b. Se mantenga el mismo número de electrones apareados.

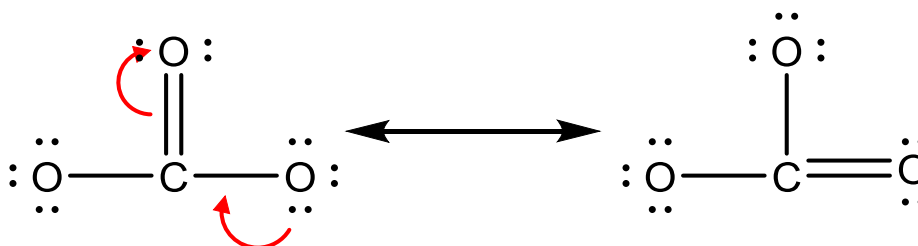
A continuación se aplican estas reglas para el dibujo de las estructuras resonantes del anión carbonato:



1º. Se dibuja la estructura de Lewis del anión carbonato



2º. Tomando como base la estructura de Lewis acabada de dibujar se dibuja otra estructura de Lewis que mantenga los núcleos en la misma posición y que contenga el mismo número de electrones apareados que la primera.



El método de las estructuras resonantes permite describir al anión como un híbrido de resonancia entre las 3 estructuras resonantes que se pueden armar. De las tres estructuras resonantes las tres contribuyen en igual proporción en la composición del híbrido de resonancia.

### 3.3 Enlace Metálico

El enlace metálico se comprende mejor a través de la consideración de las características físicas y de cómo éstas pueden interpretarse en función de un concepto lógico.

Entre las propiedades físicas que son características de los elementos metálicos podemos encontrar las siguientes:

#### 1º. Conductión

Los elementos metálicos en general presentan elevada conductividad eléctrica sin transporte de materia y elevada conductividad térmica. La conductividad eléctrica es una función periódica del número atómico, siendo máxima para los metales que poseen un único electrón de valencia y mínima para los que tienen múltiples electrones de valencia. Generalmente, ésta conductividad, decrece al aumentar la temperatura.

#### 2º. Ópticas

Los metales están provistos uniformemente de brillo y todos salvo el cobre y el oro son plateados o grisáceos. Es evidente que, salvo los dos citados, los metales deben absorber luz de todas las frecuencias e inmediatamente irradiarla.



### 3º. Mecánicas

Los metales se caracterizan por poseer propiedades mecánicas tales como la ductilidad, maleabilidad y desplazamiento ante la acción de una fuerza. Aun cuando tienen poca resistencia a la deformación, existen fuerzas de cohesión que impiden la fractura total de los objetos metálicos.

### 4º. Emisión

Muchos metales, cuando son sometidos a la acción de radiaciones de corta longitud de onda, o cuando se calientan hasta temperaturas suficientemente altas emiten, haces de electrones. Se trata respectivamente de los fenómenos de emisión fotoeléctrica y termoiónica. La emisión fotoeléctrica, es independiente de la temperatura hasta aquella temperatura en la cual se inicia la emisión termoiónica, donde los electrones son emitidos como consecuencia de la energía térmica del sistema.

### 5º. Estructural

Los metales poseen empaquetamientos densos, en los que cada partícula está asociada con un gran número de partículas inmediatas. En comparación con otros elementos o compuestos, sus densidades resultan elevadas.

**La cantidad de átomos que rodean a otros átomos, a una distancia relativamente cercana en un metal, indican que el enlace de los metales es diferente al de otros elementos o compuestos.**

Es evidente, que en el enlace metálico, no hay ninguna contribución iónica, ni se puede tener un conjunto de enlaces covalentes comunes entre todos los pares de átomos, puesto que no hay ni electrones, ni orbitales suficientes.

El enlace metálico se puede estudiar desde las teorías de enlaces propuestas por Drude y aplicadas y ampliadas posteriormente por Lorentz y Pauli.

Podemos suponer que los metales contienen grandes cantidades de electrones que se desplazan en los espacios que quedan entre los átomos. A partir de esta suposición se puede decir que los metales consisten en redes formadas por esferas fijas, donde los electrones son retenidos por todos los átomos que forman la estructura que forma el metal, y estos electrones ocupan un número extraordinariamente grande de niveles energéticos, cada uno de los cuales no puede contener más de dos electrones. Por lo tanto podemos decir que los electrones ocupan bandas limitadas sobre el seno del metal, denominadas zonas de Brillouin.

Los electrones pueden ser transferidos de un nivel de energía a otro sin el consumo de cantidades de energía grandes. Es por esto, que se puede considerar que los electrones de los metales son relativamente "libres".

Debido a esta difusión electrónica generada por los electrones "libres", los átomos de los metales tienden a ordenarse para poseer la menor energía libre posible, es decir, ser lo más estable posible.



## 4. Estructura Molecular

Hasta el momento, hemos analizado los compuestos químicos desde la estructura interna de los átomos que los conforman, hasta como representar las uniones químicas que forman a los mismos. Sin embargo, las estructuras de Lewis solo nos permiten representar las uniones químicas. Pero: ¿qué le ocurren a los orbitales atómicos cuando ocurre una unión química? ¿los compuestos están en el plano o en el espacio?

### 4.1 Teoría de Orbitales Moleculares

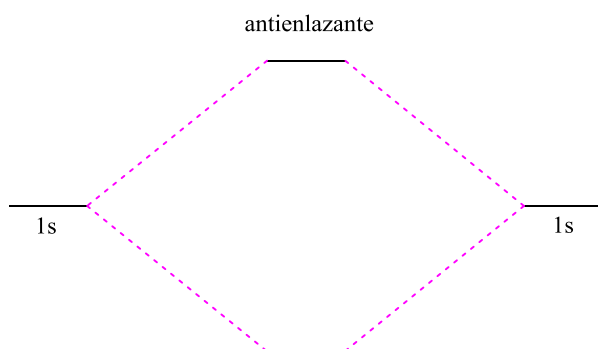
Recordemos que definimos orbital como la zona del espacio atómico alrededor del núcleo del átomo, dentro de un determinado nivel y subnivel de energía, donde la probabilidad de encontrar un electrón es máxima.

Mientras que un orbital atómico, representa la probabilidad de encontrar un electrón alrededor del átomo, un orbital molecular describe como se distribuyen los electrones sobre los átomos de una molécula y se mantienen unidos.

Para analizar la Teoría de Orbitales Moleculares o TOM, consideraremos moléculas diatómicas homonucleares, es decir, que poseen dos átomos del mismo elemento. Al igual que en la descripción de las estructuras electrónicas de los átomos, se supone que una primera aproximación es que la función de onda  $\psi$  de todos los electrones que posee la molécula, se puede escribir como el producto de cada función de onda individual de cada electrón. Estas funciones de onda unielectrónicas son lo que definimos como orbitales moleculares teóricos. Y como en los átomos, el orbital molecular va a estar definido por el cuadrado de esta función de onda. La segunda aproximación que se puede hacer, indica que cuando un electrón está cerca del núcleo de un átomo, su función de onda se parece a la de un orbital atómico de dicho átomo. A partir de estas dos observaciones y a efectos prácticos, podemos suponer que un orbital molecular se forma mediante la superposición de orbitales atómicos.

Este modelo en el que orbitales atómicos se combinan para dar orbitales moleculares se conoce como "Combinación Lineal de Orbitales Atómicos o CLOA"

Como ésta combinación es lineal, entonces si se combinan  $N$  orbitales atómicos deben formarse  $N$  orbitales moleculares. Y cada uno de ellos tendrá una contribución energética según sus propiedades. Uno de los orbitales moleculares queda por debajo de los niveles de energía atómicos y los demás se distribuyen entre esos dos extremos. El orbital molecular que posee menor energía, es decir el que se



Profesora Susana Palomino y Zenteno, Fabián Blanco - 2015  
Figura. 4-1 Diagrama energético de combinación de dos orbitales atómicos 1s dando dos orbitales moleculares.





encuentra más abajo, se simboliza con el símbolo  $\psi_+$ , y se denomina orbital enlazante. Recibe este nombre porque disminuye la energía de la molécula si es ocupado por electrones. Un electrón que ocupe este orbital, tiene una mayor probabilidad de encontrarse en la región internuclear, pudiendo interactuar fuertemente con ambos núcleos. Mientras que el orbital de mayor energía, se simboliza  $\psi_-$  y se denomina orbital antienlazante. Se denomina de esta manera, ya que si es ocupado por electrones, la energía de la molécula es mayor que la de los átomos por separado. Los electrones que ocupen este orbital, evitan en gran parte, la región internuclear y se ven forzados a ocupar regiones menos favorables. Todo lo aquí descrito se puede observar en la [FIGURA. 4-1](#) donde se representa en un diagrama de energía la combinación de dos orbitales atómicos dando los orbitales enlazantes y antienlazantes.

#### 4.1.1 Aplicación en el átomo de hidrógeno

Otra forma de pensar el significado de los orbitales enlazantes y antienlazantes es considerar los signos, relacionados con las energías de los orbitales atómicos. Estos signos pueden ser únicamente positivo y negativo, lo cual denotaremos con colores azul y rojo.

Si tenemos dos átomos de hidrógeno cada uno con un orbital s y 1 electrón, al combinar estos dos orbitales atómicos obtenemos dos posibles soluciones, según el criterio planteado que se junten dos orbitales s con el mismo signo, o por el contrario, que se junten dos orbitales de signo opuesto.

En la [FIGURA. 4-2](#) se muestra como al solaparse dos orbitales atómicos de igual signo, se genera una única nube electrónica capaz de rodear a toda la molécula, por lo que, como definimos anteriormente, este sería el orbital enlazante. En cambio si solapamos dos orbitales atómicos de signo contrario no se produce un solapamiento real sino que estas densidades se oponen entre sí y genera que los electrones se alejen del átomo vecino, este orbital por lo tanto es el antienlazante.

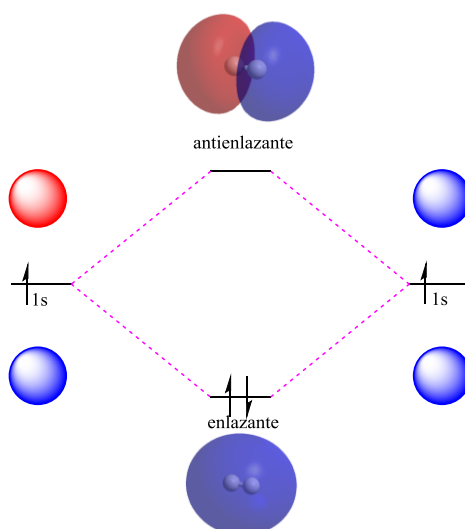


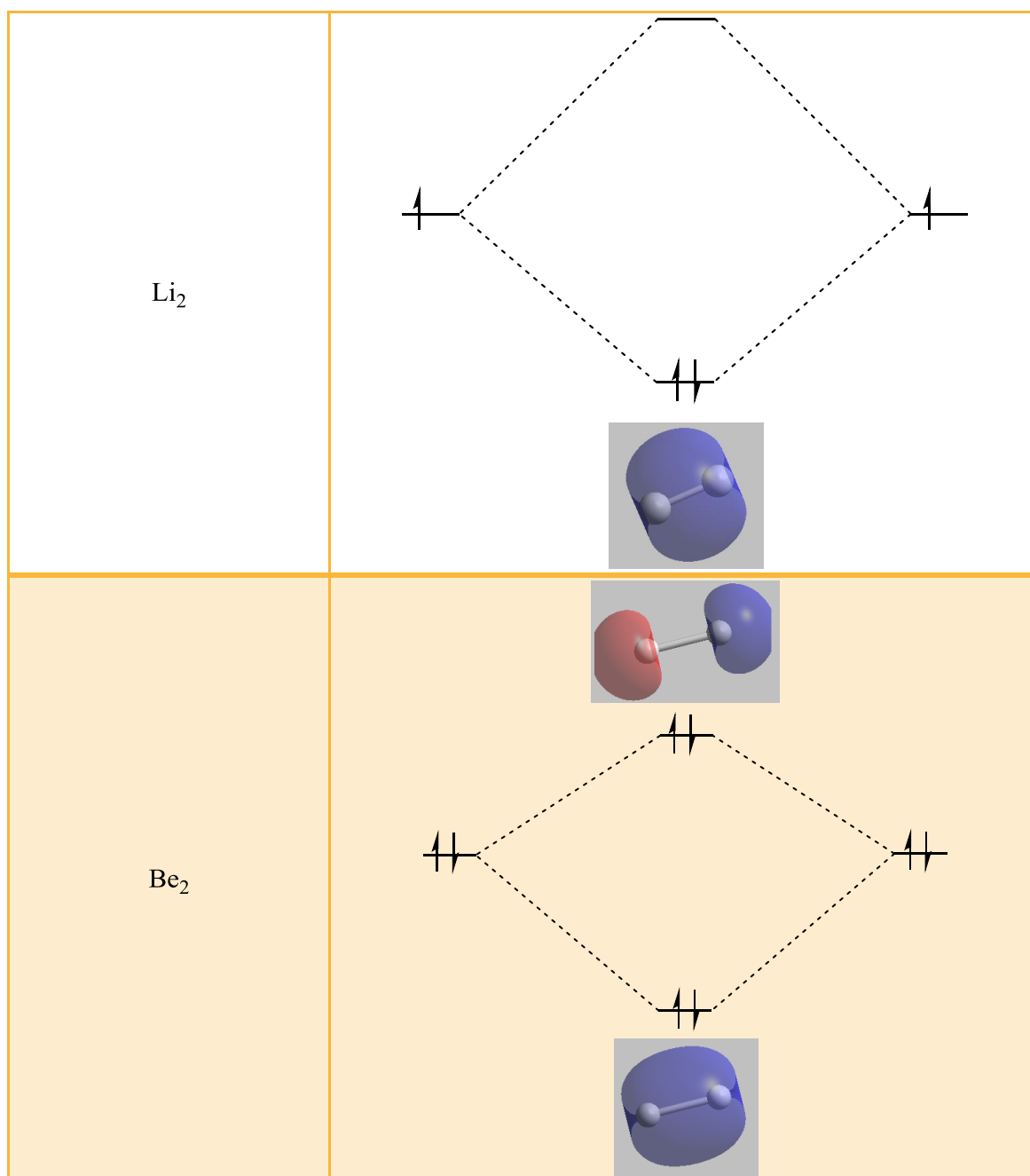
Figura. 4-2 Formación de orbitales moleculares para la molécula de hidrógeno

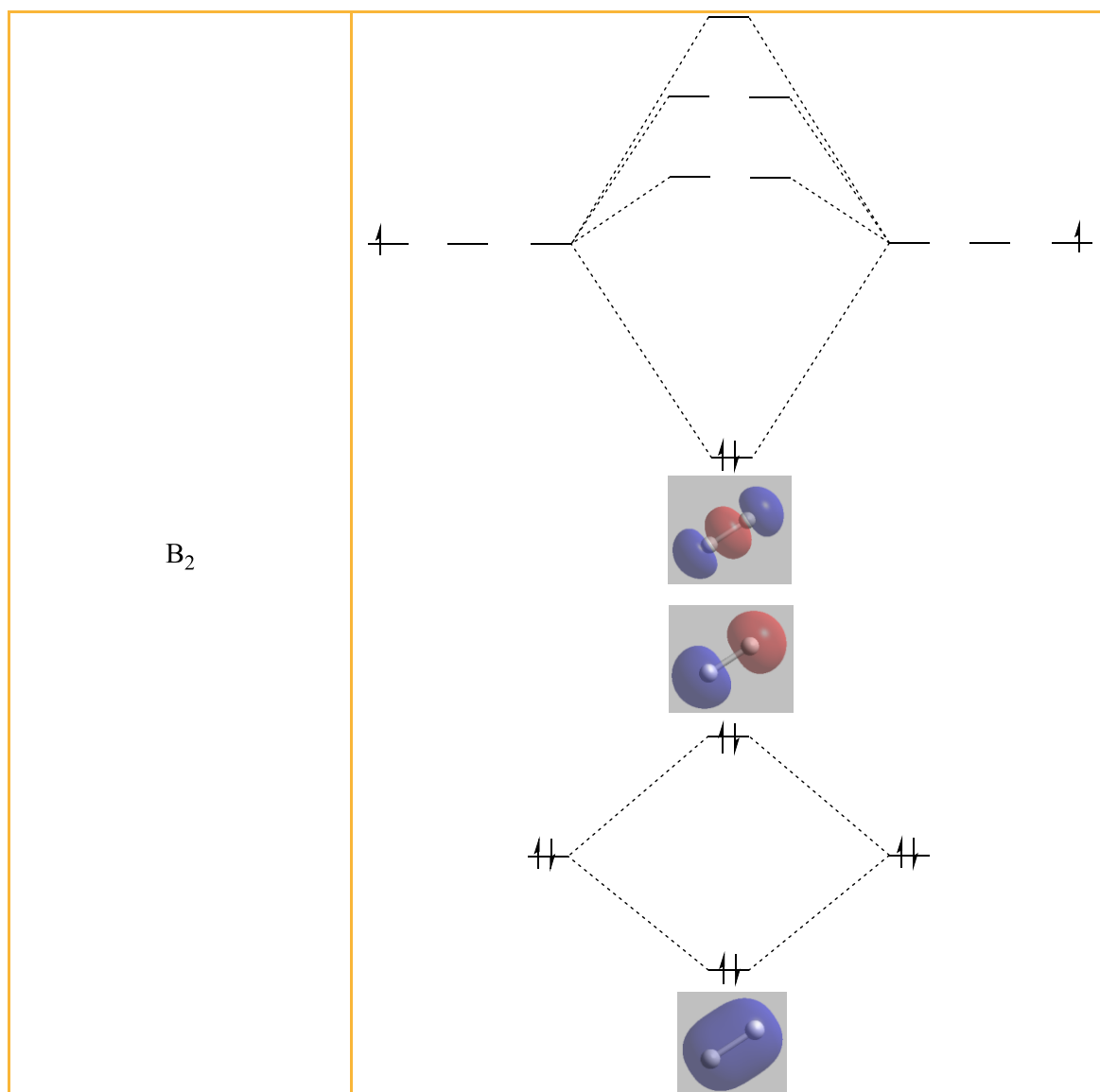


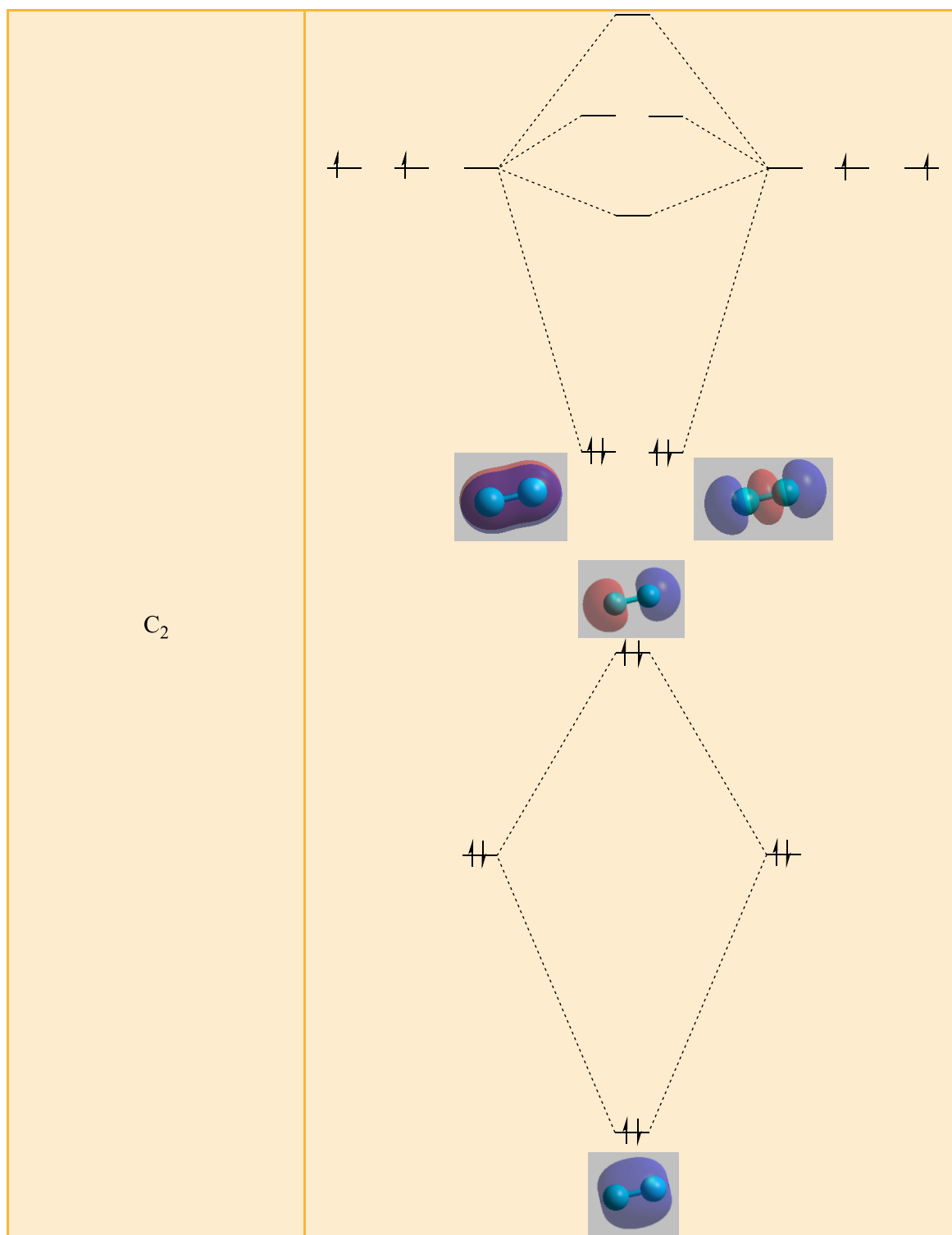
Ambos enlaces como son producto del solapamiento de orbitales atómicos se denominan orbitales tipo sigma  $\sigma$ , y para diferenciar entre el enlazante y el antienlazante, al que es orbital antienlazante se le agrega un asterisco  $\sigma^*$ .

#### 4.1.2 Niveles energéticos superiores en moléculas diatómicas

Aplicando el mismo criterio, podemos analizar cualquier molécula diatómica. Daremos como ejemplo, los orbitales moleculares de las moléculas diatómicas de los elementos del segundo periodo.







### 4.1.3 Orden de Enlace

El Orden de Enlace, intenta describir el tipo de enlace entre los pares de átomos de una molécula, basándose en la TOM, permitiendo así establecer un nexo con las interpretaciones de Lewis. El Orden de Enlace, que se puede escribir como O.E, identifica un par electrónico de un orbital enlazante, como un enlace y un par electrónico de un orbital antienlazante con un



"antienlace" entre dos átomos. Matemáticamente podemos representar el Orden de Enlace como:

$$O.E = \frac{1}{2} \cdot (\text{número de electrones en orbitales enlazantes}) - (\text{número de electrones en orbitales antienlazantes})$$

## 4.2 Teoría de Enlace de Valencia

Lewis logró desarrollar un método para describir las estructuras de las moléculas, sin embargo, este no tenía consideraciones mecánico cuánticas, debido a que estas todavía no se habían aplicado al modelo atómico, cuando las presentó.

El modelo de Lewis establece la organización electrónica de las uniones químicas en una molécula, pero no explica la naturaleza íntima del enlace químico.

Supongamos que dos átomos que se encuentran muy alejados comienzan a acercarse. Primero los electrones van a ser atraídos por los núcleos, luego los electrones van a repelerse entre sí y si continúan acercándose los núcleos comenzarán a repelerse entre sí. En la [FIGURA. 4-3](#), se puede ver como varía la energía de dos átomos de hidrógeno a medida que se acercan entre ellos. Se observa que se alcanza un mínimo a una distancia que corresponde a  $0,74 \text{ \AA}$  y a una energía de  $-436 \text{ KJ/mol}$ . Estos valores corresponden a la longitud de enlace en la molécula de  $\text{H}_2$  y a la energía de formación de enlace.

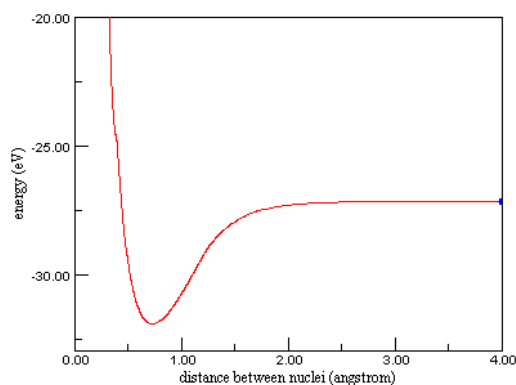


Figura. 4-3 Energía de dos átomos de hidrógeno a medida que se acercan sus núcleos.

La Teoría de Enlace de Valencia o como se abrevia por sus siglas, TEV, considera que el enlace químico se produce por superposición o "solapamiento" de los orbitales atómicos.

**Cuando estos se solapan se produce una interferencia constructiva de las ondas, aumenta la probabilidad de hallar al electrón entre ambos átomos.**

Analizando la molécula de  $\text{H}_2$ , el enlace se formará entonces, por el solapamiento de los orbitales 1s de cada uno de los hidrógenos, podemos observar cómo se "unen" las zonas orbitales creando dos zonas máximas y simétricas para encontrar al electrón. Si

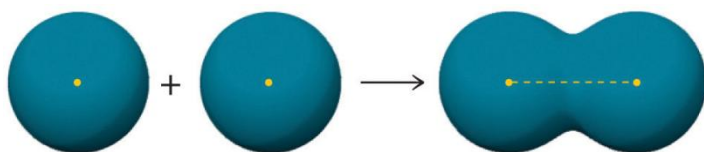


Figura. 4-4 Solapamiento de orbitales atómicos de orbitales s.



comparamos ahora con la combinación de un orbital s y un orbital p, como sucede en la molécula de HCl o de dos orbitales p, como en el caso de la molécula de Cl<sub>2</sub>.

Podemos observar que en el HCl el H hidrógeno tiene un electrón en su orbital 1s, mientras que el Cl tiene un electrón desapareado en uno de sus orbitales p (por convención se supone que se encuentra en el p<sub>z</sub>, pero podría ser cualquiera de los tres). En este caso el enlace es producto del solapamiento del orbital 1s del H con el 2p<sub>z</sub> del Cl. En la molécula de Cl<sub>2</sub> el enlace se genera por el solapamiento de los orbitales 2p<sub>z</sub> de los Cl.

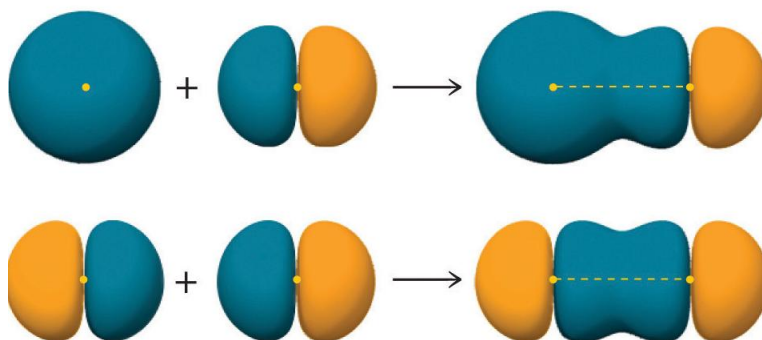


Figura. 4-5 solapamientos de orbitales 2s y 2p

**Un orbital p<sub>z</sub> solo puede solaparse con un orbital de las mismas características que él, es decir con un p<sub>z</sub>, de igual manera, un p<sub>x</sub> con un p<sub>x</sub> y un p<sub>y</sub> con un p<sub>y</sub> debido a la dirección de los orbitales en el espacio.**

Estos tres enlaces que vemos representados en las FIGURA. 4-4 y FIGURA. 4-5 se denominan enlaces sigma (σ) debido a que el solapamiento de los orbitales se produce de forma frontal aumentando la densidad electrónica en la zona internuclear.

De acuerdo con el modelo de Lewis el O<sub>2</sub> presenta un enlace doble. El O, como se observa en el diagrama de la FIGURA. 4-7 presenta dos electrones desapareados que se encuentran en diferentes orbitales p. Como se vio anteriormente en la molécula de Cl<sub>2</sub> los orbitales p<sub>z</sub> que apuntan en la dirección correcta pueden solaparse para formar un enlace simple que se denominaba de tipo σ. Ahora todavía hay un electrón desapareado en cada oxígeno, pero que se encuentran en un orbital que se encuentra en dirección perpendicular a la del enlace. Estos orbitales, sienten atracción y esto permite que puedan solaparse para formar un segundo enlace, pero no de manera frontal como el primer enlace sino de forma lateral, dando lugar a lo que se denomina enlace π.

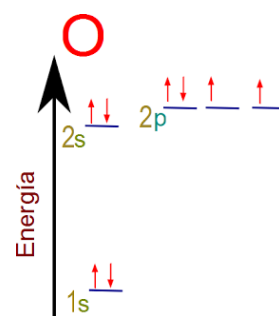


Figura. 4-7 Diagrama de energía del oxígeno

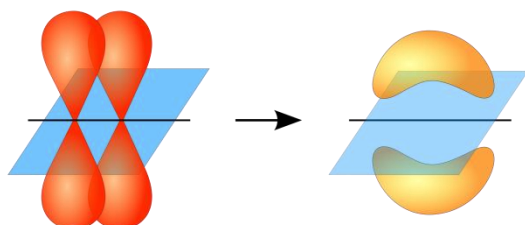


Figura. 4-6 Solapamiento lateral de orbitales p.

σ y uno o dos enlaces π dependiendo de si se trata de un doble o triple enlace como en el caso del N<sub>2</sub>.

formar un segundo enlace, pero no de manera frontal como el primer enlace sino de forma lateral, dando lugar a lo que se denomina enlace π.

Cuando existe un enlace múltiple este se encuentra conformado siempre por un enlace



### 4.2.3 Modelo de hibridación para moléculas poliatómicas

La Teoría de Enlace de Valencia funciona perfectamente para moléculas diatómicas, pero a partir de moléculas con 3 o más átomos, se encuentra con el problema de que no puede explicar las observaciones experimentales realizadas sobre la disposición de los átomos de una molécula en el espacio.

Analicemos la molécula del H<sub>2</sub>O. Experimentalmente, se ha determinado que el H<sub>2</sub>O presenta un ángulo de enlace de 104,5°. Según la Teoría de Enlace de Valencia. El O presenta dos electrones desapareados en dos orbitales p diferentes, por lo que puede cada uno de estos orbitales, puede solaparse con un orbital s del H. Como se puede observar en la [FIGURA. 4-8](#) los enlaces p presentan una separación de 90° y no de 104,5°. Por lo tanto la Teoría de Enlace de Valencia, no alcanza para explicar la distribución en el espacio de la molécula de agua.

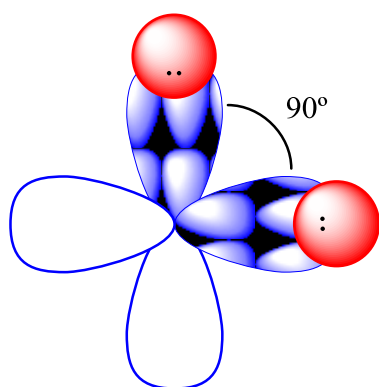


Figura. 4-8 Molécula del agua según TEV.

Consideremos ahora la molécula de CH<sub>4</sub>, donde el C es el átomo central. Por lo tanto, los orbitales de su último nivel son los que se solaparían con los orbitales 1s de los cuatro H, pero si vemos la [FIGURA. 4-9](#) se analiza cómo se encuentran distribuidos los orbitales del C, donde tenemos el orbital 2s con forma esférica y los orbitales 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub> y 2p<sub>z</sub>.

Se observa también, que presenta dos electrones desapareados en orbitales p que pueden formar enlaces un orbital p vacío y un orbital s con dos electrones. Por consiguiente, sería esperable, según la TEV que el compuesto que formara el carbono, sea el CH<sub>2</sub> y no el CH<sub>4</sub>.

Para formar 4 enlaces con los átomos de H, es necesario que el átomo tenga 4 electrones desapareados, esto puede lograrse entregándole energía al átomo de C para que un electrón del orbital s aumente su energía y pase a un orbital p como se

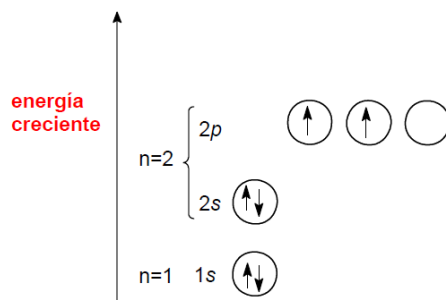


Figura. 4-9 Estado fundamental del átomo de carbono

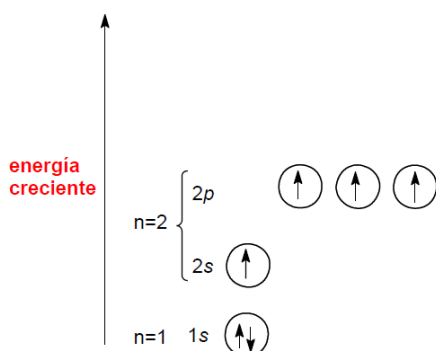


Figura. 4-10 Estado excitado del átomo de carbono.

Profesora Susana Palomino y Tco. Qco. Fabián Blanco - 2015

observa en la [FIGURA. 4-10](#). De esta manera el C puede formar 4 enlaces con los H para formar el CH<sub>4</sub>, Sin embargo, nuevamente aparece el problema de la geometría. Los orbitales p tienen un ángulo de separación de 90°, mientras que el orbital s es esférico por lo que el otro H puede solaparse por cualquier lado, entonces la geometría del CH<sub>4</sub> debería parecerse a la [FIGURA. 4-11](#).



La cual no se corresponde a la obtenida experimentalmente, donde todos los ángulos que forman los enlaces C–H son de  $109,5^\circ$ .

Para salvar esta contradicción Linus Pauling introdujo el concepto de "Hibridación de orbitales". Donde propone que el átomo de C no utilizaba sus orbitales s y p para formar enlaces sino una "mezcla" de los mismos.

Al referirnos a una "mezcla" de orbitales, uno se está refiriendo realmente a una combinación lineal de las funciones de onda que describen los orbitales. Cuando uno necesita obtener 4 orbitales equivalentes, como en el caso del  $\text{CH}_4$  es necesario combinar 4 orbitales, en este caso serían el  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  y  $2p_z$ . A los orbitales obtenidos por esta combinación se los denomina orbitales  $sp^3$ .

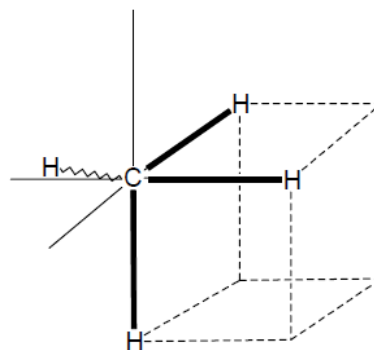


Figura. 4-11 Estructura del metano según la TEV.

**A partir de cálculos puede demostrarse que estos cuatro orbitales  $sp^3$  están separados entre sí por ángulos de  $109,5^\circ$  concordando ahora el modelo con los resultados experimentales.**

Al realizar el gráfico de energía del átomo de C libre y del átomo de C el enlace se tiene que los orbitales  $2sp^3$  tienen una energía mayor que el orbital  $2s$  del carbono libre, pero menor que la de los orbitales  $2p$ .

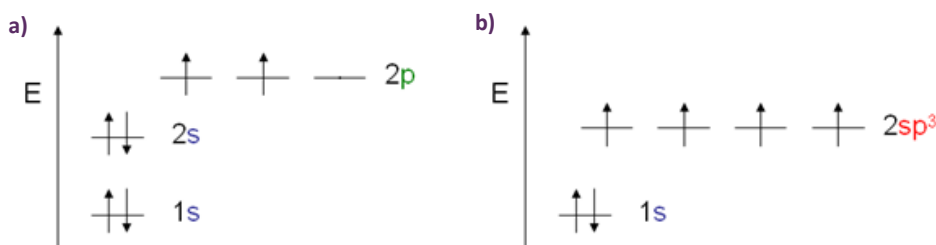


Figura. 4-12 a) estado fundamental del átomo de carbono. b) estado híbrido del átomo de carbono



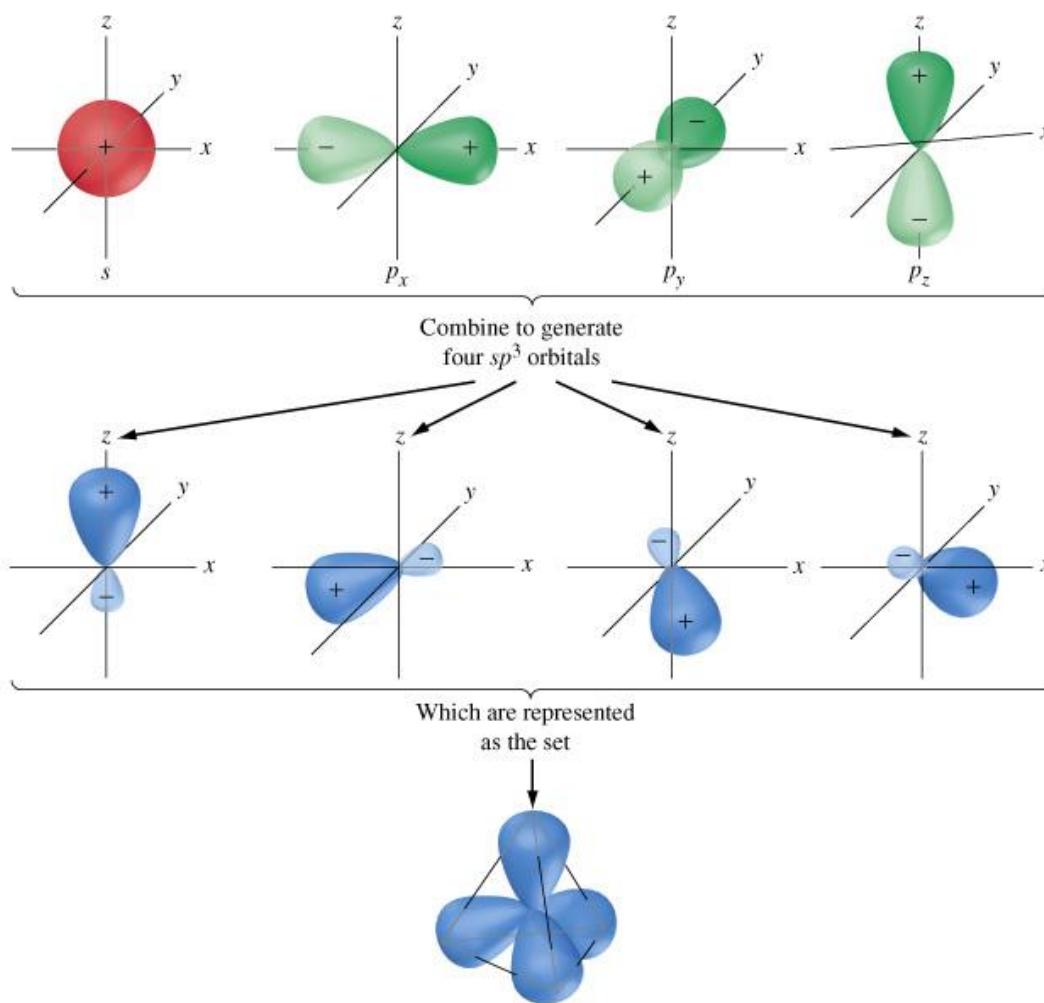


Figura. 4-13 Combinación de los orbitales atómicos para formar los orbitales híbridos

En el caso de moléculas con enlaces múltiples, como ser, los casos del eteno (etileno) y el etino (acetileno), que son moléculas derivadas del carbono. Se comportan de manera similar que las anteriores.

El eteno tiene la fórmula molecular  $C_2H_4$ . Aquí ambos C son átomos centrales, entonces puede asignarse una hibridación en torno de cada uno de los átomos. Por lo tanto, asignamos la hibridación, en función a la cantidad de enlaces  $\sigma$  y  $\pi$ . En este caso cada carbono tiene tres enlaces del tipo  $\sigma$  y forman un doble enlace que es del tipo  $\pi$ . Por lo tanto si analizamos los diagramas de energía de un átomo de carbono, podemos observar que es necesario formar tres orbitales híbridos para formar las uniones. Para ello es necesario que en la

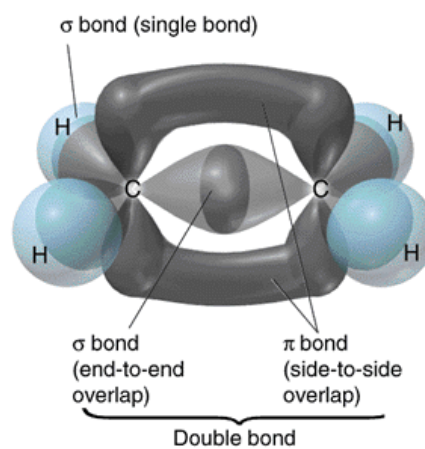


Figura. 4-14 Orbitales involucrados en la formación del eteno.



combinación de los 4 orbitales atómicos nos quedan 3 orbitales híbridos y uno no sea alterado, como se muestra en el diagrama de energías de la [FIGURA. 4-15](#).

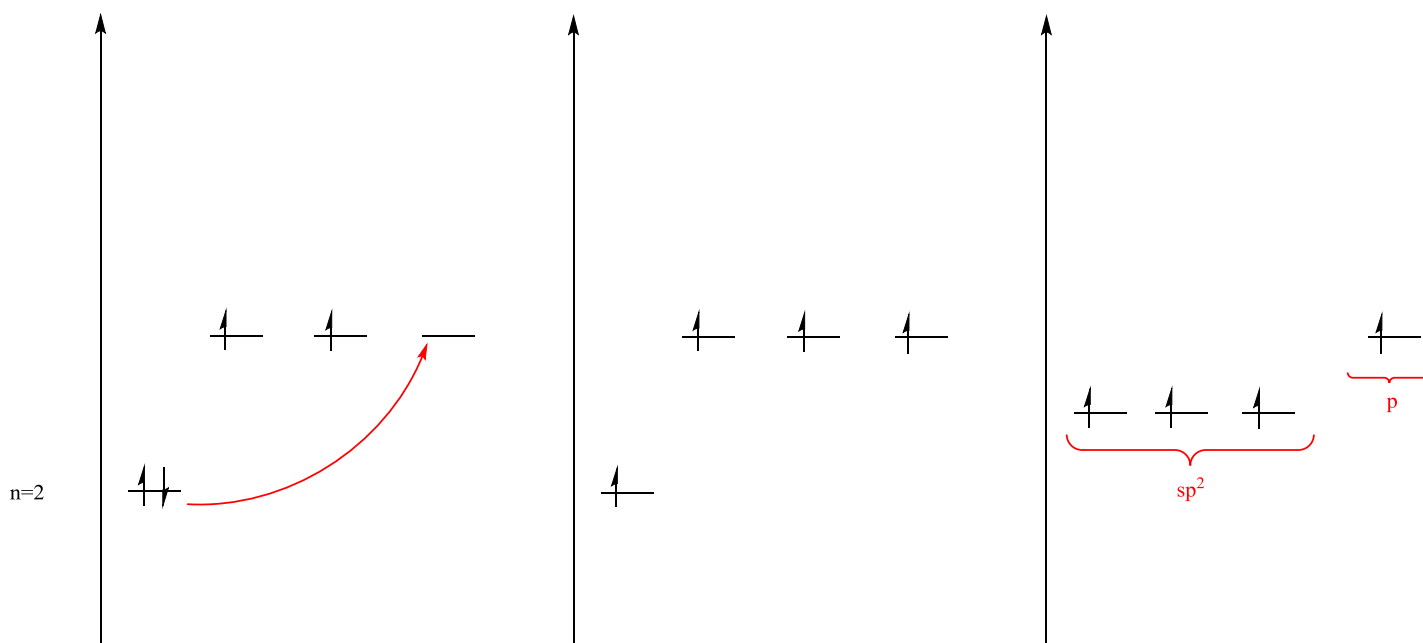


Figura. 4-15 a) estado fundamental. b) estado excitado. c) estado híbrido

Cada C puede formar 3 enlaces del tipo sigma: 2 enlaces  $\sigma(sp^2 - s)$  con los H y un enlace  $\sigma(sp^2 - sp^2)$  con el otro C. Además forma un enlace del tipo pi:  $\pi(p - p)$

#### 4.2.4 Moléculas con octeto expandido

Hay compuestos químicos, que no cumplen con las Reglas de Lewis y tienen la capacidad de expandir su octeto electrónico. No es casualidad que los elementos capaces de hacer esto sean elementos que pertenecen del tercer periodo en adelante. A partir del tercer período, los átomos cuentan con los orbitales d vacíos, que se encuentran cercanos en energía a los orbitales p, esta cercanía les permite formar parte de las combinaciones lineales de orbitales y así formar enlaces.

En el  $\text{PCl}_5$  existen 5 enlaces simple P-Cl, para explicar esto utilizando la TEV es necesario proponer un esquema de hibridación de orbitales que permita obtener como resultado 5 orbitales híbridos, pero para ello es necesario combinar 5 orbitales y aquí es donde entran en juego los orbitales d, como se observan en la [FIGURA. 4-16](#).

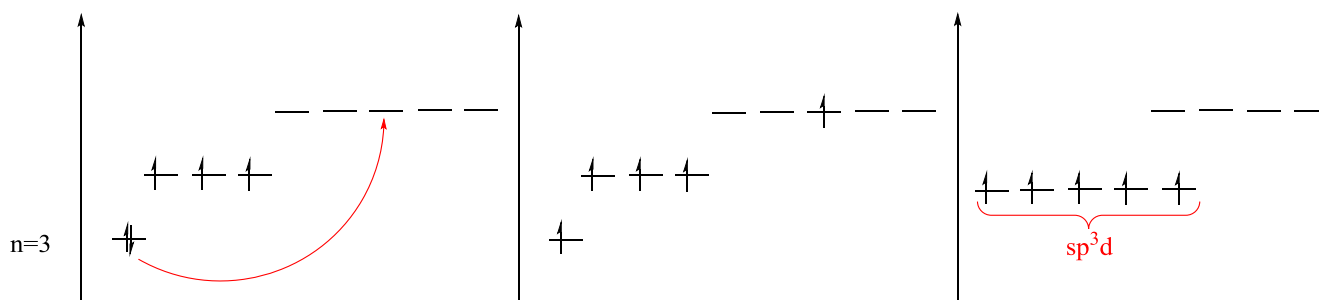


Figura. 4-16 Diagrama de hibridación del fósforo

En el caso del  $\text{SF}_6$  se observan 6 enlaces simples S-F, por lo que nuevamente es necesario recurrir a un esquema de hibridación que involucre a los orbitales d. Como esta vez se necesitan 6 orbitales híbridos es necesario combinar 6 orbitales, como se observa en la [FIGURA. 4-17](#). Por lo que el  $\text{SF}_6$  presenta 6 enlaces  $\sigma(sp^3d^2 - p)$ .

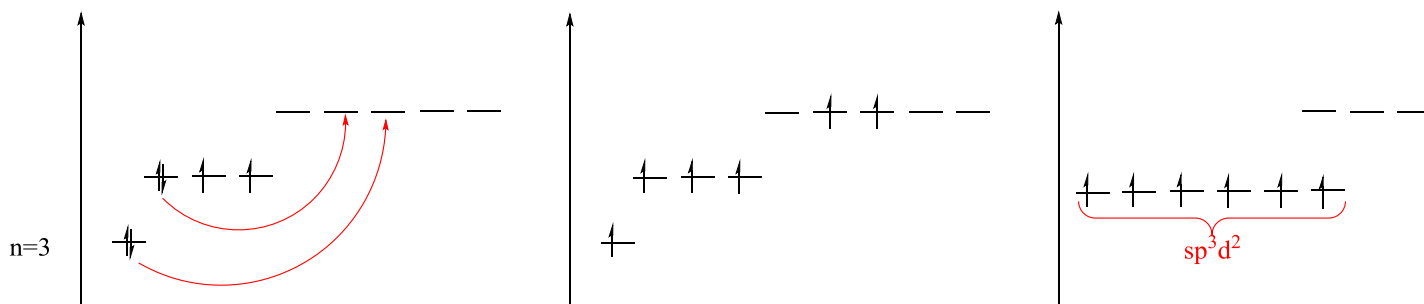


Figura. 4-17 Hibridación de los orbitales del azufre

La Lewis del anión sulfato se puede representar mediante cuatro uniones simples, sin embargo experimentalmente se observa que la longitud del enlace real S-O de ésta molécula, está a una distancia que se acerca más a un doble enlace.

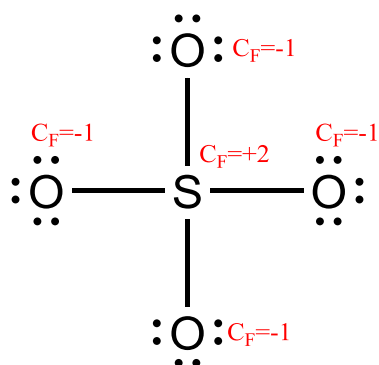


Figura. 4-18 Estructura de Lewis del sulfato.

Si consideramos la Lewis de la estructura, podemos observar inicialmente todos los enlaces simples, y cada oxígeno y el azufre con su carga formal, tal que como es una molécula cargada la sumatoria de todas las cargas formales debe dar -2. Pero como ya vimos, el azufre posee orbitales d cercanos energía. Al igual que en el  $\text{SF}_6$ , el azufre puede utilizar estos mismos orbitales, pero en vez de utilizarlos para formar enlaces  $\sigma$ , se acomodan de manera tal que queden perpendiculares con orbitales p del oxígeno, formando un doble enlace como se observa en la.

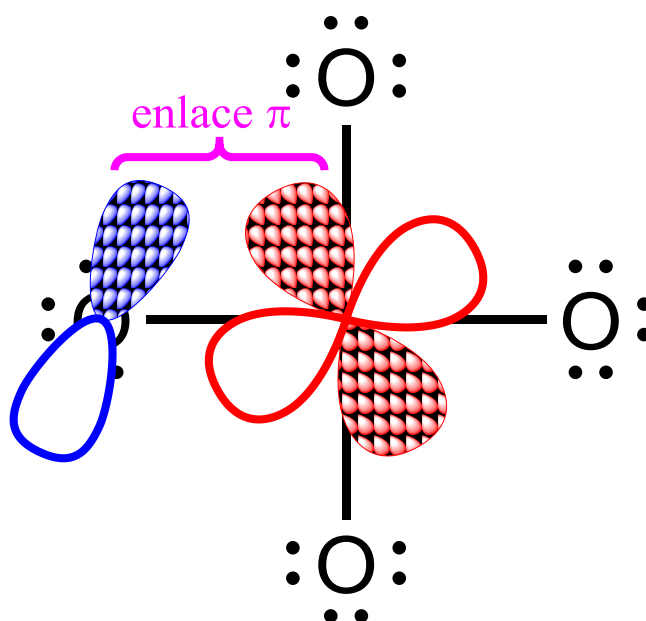


Figura. 4-19 Representación de un enlace p-d en la molécula de sulfato

La formación de estos dobles enlaces, permiten la máxima reducción de carga formal sobre el átomo de azufre, en una configuración que presenta dos enlaces simples S–O y dos enlaces dobles S=O, de manera que el S tiene en total 12 electrones.

**Realizar el diagrama de energías donde se observen el estado fundamental del azufre, su estado excitado y su estado híbrido para formar la molécula de  $\text{SO}_4^{-2}$**

Al tratar de describir esta molécula utilizando la TEV vamos a considerar que el S se encuentra unido a 4 átomos y no tiene pares libres, es decir que necesita 4 orbitales para unirse, y como ya habíamos visto para formar 4 orbitales el tipo de hibridación que debe adoptar es  $sp^3$ .

Como los oxígenos no están unidos a otro elemento que no sea el azufre, y los orbitales  $sp^3$  tienen mucho carácter p, se produce fácilmente un solapamiento entre un orbital  $sp^3$  y un orbital p, entonces podemos decir que los oxígenos en este caso no están hibridados, caso distinto que en el de la molécula de ácido sulfúrico.

**Realizar el diagrama de energías donde se observen el estado fundamental del azufre y el oxígeno, su estado excitado y su estado híbrido para formar la molécula de  $\text{H}_2\text{SO}_4$**

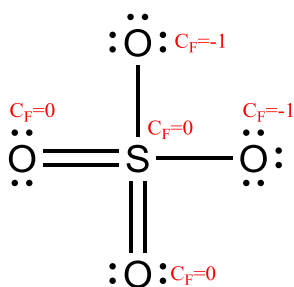


Figura. 4-20 Estructura del anión sulfato considerando el efecto de retrodonación.

Por lo que tendríamos 4 enlaces  $\sigma(sp^3 - p)$  entre el S y los O. Ahora para formar enlaces dobles es necesario formar enlaces del tipo  $\pi$ , como los 3 orbitales p del azufre se encuentran combinados en el esquema de hibridación, para poder formar los enlaces  $\pi$  se utilizan los orbitales 3d vacíos del que pueden unirse lateralmente, con alguno de los orbitales p de los oxígenos dando lugar a dos enlaces  $\pi(d - p)$ .



Este fenómeno en donde orbitales d cercanos en energía se reordenan para formar enlaces del tipo  $\pi$ , con orbitales p, de los elementos vecinos, se denomina retrodonación  $\pi$ .

#### 4.2.5 Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de Valencia

La Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de Valencia o más conocida como Teoría de TREPEV, es un método diseñado para estimar la forma espacial de las moléculas poliatómicas. La descripción de geometría se aplica en torno a los átomos que se encuentran unidos a 2 o más átomos.

**En la molécula de  $H_2SO_4$  se describe la geometría en torno al átomo de S y de los O unidos a H.**

La hipótesis fundamental de este modelo es que los grupos electrónicos (pares libres, electrones desapareados, enlaces simples, dobles o triples) se repelen entre sí y se acomoda espacialmente de manera tal que la distancia de su separación sea máxima.

**Si queremos la óptima separación de tres puntos en el espacio, los mismos se separaran en ángulos de  $120^\circ$  formando un triángulo en el plano.**

Los pares electrónicos pueden ser tanto enlaces, como pares libres, pero el nombre de la forma va a estar determinado solo por la disposición de los átomos, que generalmente, para los casos más comunes, únicamente están dadas por la cantidad de átomos a separar.

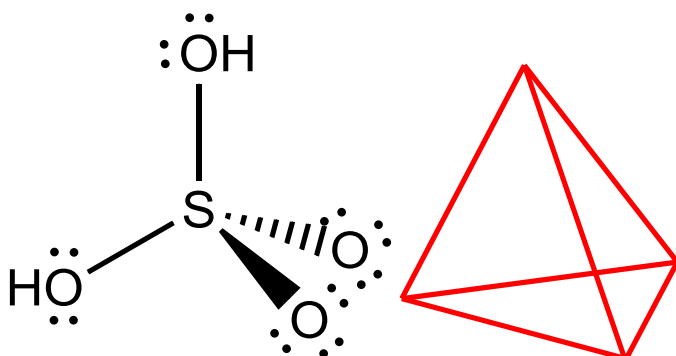


Figura. 4-21 Representación tetraédrica de la molécula de ácido sulfúrico.

La repulsión que ejercen los pares libres tiende a producir una variación en los ángulos de los enlaces. Esto puede explicarse a partir de que la nube de carga electrónica generada por los pares libres, se extiende en el espacio debido y fuerzan a los electrones de enlace a acercarse entre sí.

La fuerza de las repulsiones entre los diferentes tipos de grupos electrónicos tiene el siguiente orden:

**enlace – enlace < par libre – enlace < par libre – par libre**

La geometría puede dividirse en dos categorías, la Geometría Electrónica, que es aquella que considera los átomos y los pares de electrones libres, y la Geometría Molecular, que es aquella que considera únicamente los átomos y la forma de la molécula.

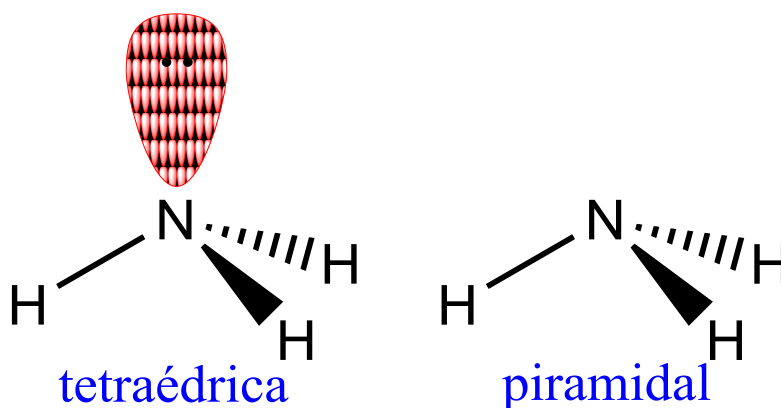


Figura. 4-22 Representaciones electrónica y molecular en base TREPEV del amoniaco

Nombre	Geometría electrónica	Geometría molecular		
Lineal		X — E — X		
Plana trigonal				
Tetraédrica				
Bipirámide trigonal				
Octaédrica				



Tabla 4.1 Geometrías de TREPEV

## 5. Propiedades Moleculares

A esta altura de la materia, ya sabemos cómo se comportan distintas sustancias, por ejemplo, sabemos que el Helio forma enlaces químicos poco estables, condensa a una temperatura de 4K y solidifica a 1K y 25atm. Ahora ¿podemos predecir estos comportamientos?

### 5.1 Dipolos instantáneos e inducidos

Cuando describimos una estructura electrónica, realmente nos referimos a la probabilidad de encontrar a un electrón en una determinada región en un momento dado. A partir de esta probabilidad, podemos suponer que existe un

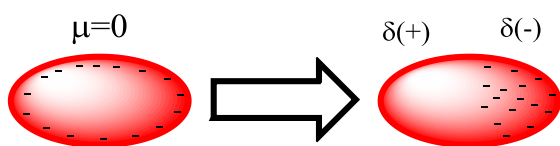


Figura. 5-2 Formación de un dipolo instantáneo

instante, en el que los electrones se encuentren concentrados en una región particular del átomo o molécula. Este desplazamiento de electrones hace que una especie, normalmente definida como no polar, se convierta momentáneamente en una especie polar. Es decir, que se forma un momento dipolar instantáneo sobre el átomo o molécula analizado. Si al formarse éste dipolo instantáneo sobre la partícula se encuentra otra

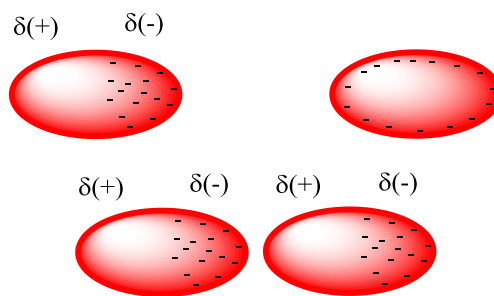


Figura. 5-1 Dipolo inducido.

cercana, los electrones de ésta nueva partícula podrán desplazarse, por inducción, y así poseer un momento dipolar inducido por la partícula vecina.

**Éste fenómeno en el cual una partícula con momento dipolar se acerca a otra con momento dipolar nulo, y se produce un nuevo dipolo se denomina, dipolo inducido.**

Si consideramos estos dos procesos, de manera conjunta, nos permite pensar que existen fuerzas en las partículas que producen atracciones, estas fuerzas se denominan como fuerzas intermoleculares de atracción y en particular, a esta fuerza se la puede denominar como dipolo – dipolo inducido.

**Las interacciones del tipo dipolo – dipolo inducido, son también llamadas como fuerzas de dispersión o fuerzas de London, debido a que Fritz London fue quien proporciono una explicación teórica sobre estas interacciones.**

Estas interacciones están vinculadas con la polarizabilidad de las partículas. Ya hemos visto que la polarizabilidad aumenta con el número de electrones y el número de electrones a su vez con la masa atómica o molecular según sean átomos o moléculas. Cuando las partículas son



grandes, los electrones de valencia se encuentran alejados del núcleo. Estos se desplazan con más facilidad y la polarizabilidad de la partícula aumenta. Como las fuerzas de dispersión son más fuertes cuando la polarizabilidad aumenta, las partículas se atraen entre sí más fuertemente. Estas interacciones producen aumentos en los puntos de fusión y ebullición.

**El Helio tiene una masa atómica de 4 uma mientras que el Radon posee una masa atómica de 222 uma. Por lo tanto, es deducible, que como el Radon tiene una mayor masa, el átomo va a ser más polarizable y por ende, su punto de ebullición va a ser mayor que el del Helio. Esto se corrobora experimentalmente el Helio tiene un punto de ebullición de 4K mientras que el radón uno de 211K.**

**¿Qué ocurre con la serie de las moléculas de los halógenos?**

La intensidad con la que actúan las fuerzas de dispersión, depende de la forma de la molécula. Los electrones en moléculas lineales, se desplazan más fácilmente que en moléculas pequeñas, compactas y simétricas.

**Las moléculas lineales, son más polarizables.**

## 5.2 Interacciones dipolo – dipolo

En una sustancia polar, las moléculas tienen momentos dipolares permanentes. Esto produce, un ordenamiento parcial de las moléculas, donde intentan alinearse las densidades de carga negativas con las positivas. Esto produce desviaciones positivas en los puntos de fusión.

**Si consideramos el N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> y el NO, podemos observar lo siguiente:**

	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	NO
Momento dipolar (Davy)	0	0	0,153
Masa molecular relativa (uma)	28	32	30
Punto de Ebullición (K)	77,34	90,19	121,39

**Si sólo se consideraran las fuerzas de dispersión, se esperaría que el NO tuviese un punto de ebullición intermedio al del nitrógeno y el oxígeno. Sin embargo, experimentalmente se sabe que el NO tiene un punto de ebullición mayor que éstos. Y esto se debe a que la molécula de NO tiene un pequeño momento dipolar y esto permite un ordenamiento de las partículas que requerirá mayor energía para romper estas interacciones y pasar del estado líquido al gaseoso.**





### 5.3 Interacción puente hidrógeno

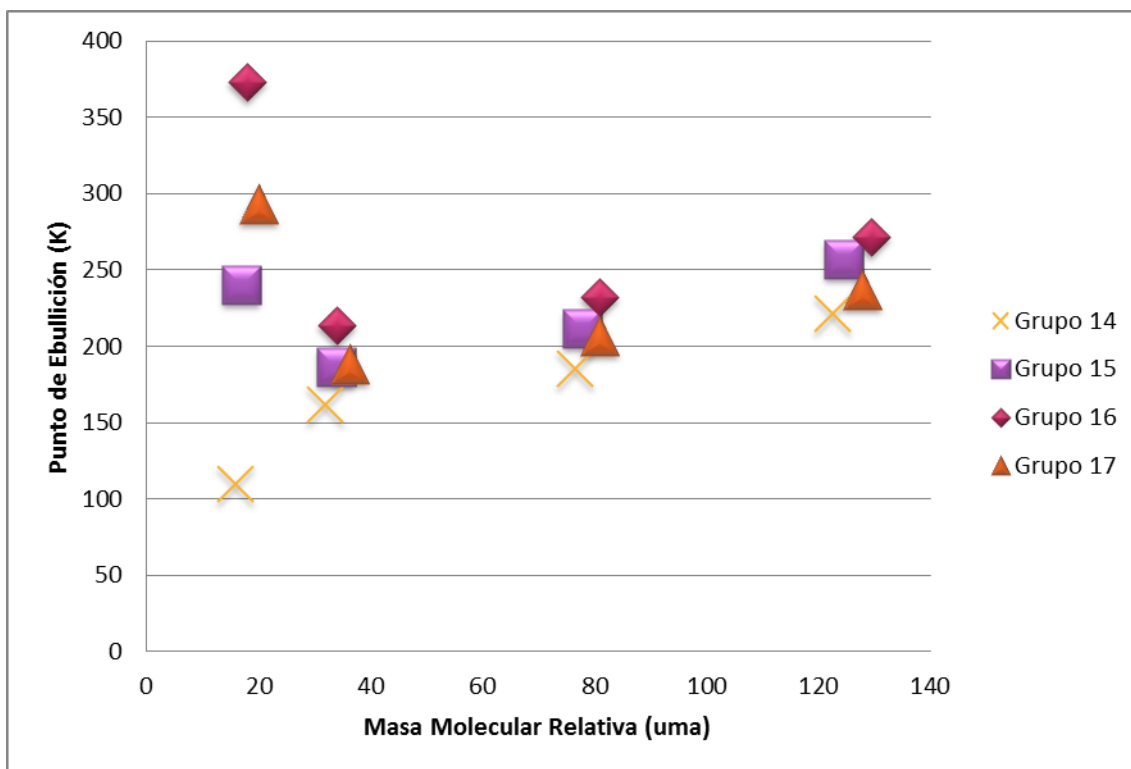


Figura. 5-3 Puntos de ebullición de los hidruros de los grupos 14 a 17

Como se puede ver en la [FIGURA. 5-3](#) se puede ver como del tercer periodo en adelante, los

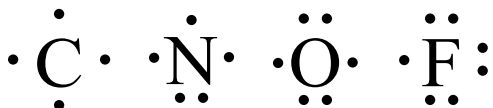


Figura. 5-4 Estructuras electrónicas de los elementos del segundo periodo.

puntos de ebullición se comportan según lo esperado por las fuerzas de London. Sin embargo al observar los hidruros correspondientes al segundo periodo, se visualiza que el H<sub>2</sub>O, el HF y el NH<sub>3</sub>; se desvían de éste comportamiento siendo el metano, CH<sub>4</sub>, el único que mantiene la tendencia esperable.

Si analizamos la molécula del fluoruro de hidrógeno, podemos ver que la alineación de los dipolos coloca a un átomo de hidrógeno entre dos átomos de flúor. Debido al pequeño tamaño del átomo de hidrógeno, los dipolos se encuentran muy próximos entre sí y producen una fuerte atracción del tipo dipolo – dipolo.

El átomo de hidrógeno posee una unión covalente a un átomo de flúor, pero también está débilmente unido a un átomo de flúor de la molécula vecina.

Esto se debe a que los pares de electrones que posee el flúor, tienen la suficiente fuerza para atraer y formar un “puente” con un hidrógeno entre los dos átomos de flúor.

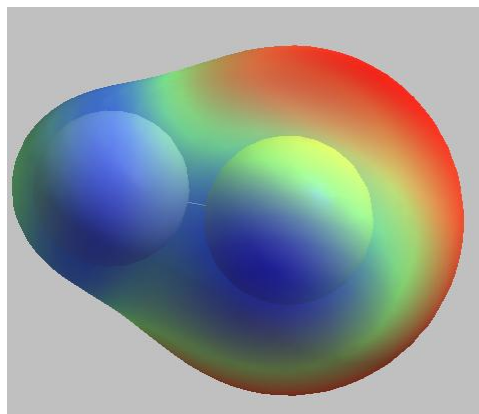


Figura. 5-5 Densidad electrónica en el fluoruro de hidrógeno.



**Este tipo de unión intermolecular se denomina enlace puente de hidrógeno.**

Un puente hidrógeno, se forma cuando un átomo de H se encuentra unido a un átomo muy electronegativo y éste mismo se encuentra atraído simultáneamente por el átomo electronegativo de una molécula vecina.

Los enlaces de puente hidrógeno son posibles sólo en algunos compuestos que poseen hidrógeno, porque el resto de los átomos, de mayor radio, tienen electrones que apantallan disminuyendo la carga nuclear efectiva.

**Los átomos de O, N y F son los que cumplen las condiciones necesarias para formar enlaces puente de hidrógeno.**

Este tipo de enlaces, comparados con las fuerzas intermoleculares ya descritas, son relativamente fuertes, con energías del orden de 15 a 40  $KJ/mol$ . Sin embargo, son más débiles que un enlace covalente sencillo, que tiene energías mayores de 150  $KJ/mol$ .

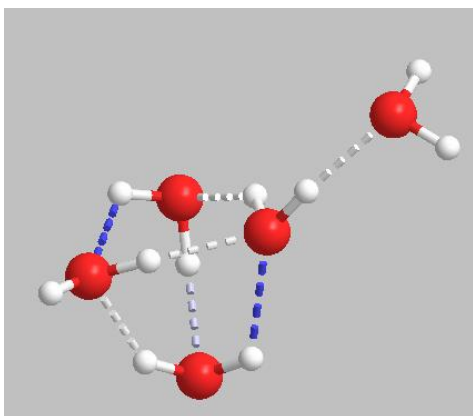


Figura. 5-6 Representación tetraédrica de las moléculas del agua en estado sólido.

Cuando el agua líquida se calienta por encima del punto de fusión, los enlaces puente hidrógeno continúan rompiéndose. Las moléculas se empaquetan más y la densidad del agua líquida continúa aumentando. El agua líquida alcanza su densidad máxima a 3,98°C. Por encima de esta temperatura el agua posee un comportamiento "normal" y su densidad disminuye al aumentar la temperatura.

El agua es sin duda la sustancia más común en la que tiene lugar el puente hidrógeno, es más, es la causa predominante de la desviación tan alta que posee el punto de ebullición con respecto al resto de los compuestos analizados.

La estructura abierta del hielo le proporciona una baja densidad. Cuando el hielo funde, algunos de los enlaces hidrógeno se rompen, esto permite a las moléculas de agua estar ordenadas en forma más compacta, lo que justifica el aumento de densidad cuando el hielo funde.

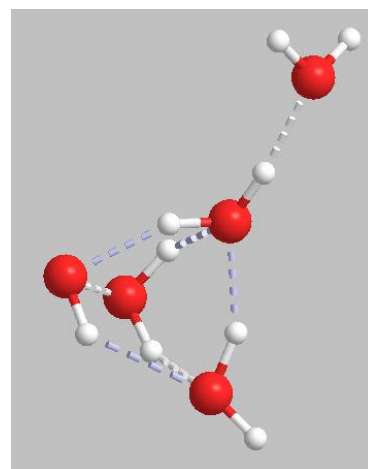


Figura. 5-7 Representación del agua a 3,98°C. Los enlaces hidrógeno celestes son más débiles que los azules.



## Cuestionario 1: El mundo subatómico

1. Explique en función de los postulados de Leucipo y Demócrito, a qué se denomina átomo.
2. ¿A partir de que conceptos, Dalton elabora los postulados de su Teoría Atómica?
3. Gay-Lussac, se opuso a la Teoría de Dalton. ¿Qué errores encuentra en la Teoría propuesta?, ¿Quién propone una solución a esta discrepancia?, ¿En qué consistió?
4. Michael Faraday, en la década del 30 realiza estudios relacionados con la electricidad, desarrollando así las Leyes Fundamentales de la Electrolisis, explique en qué consiste dichas leyes.
5. A partir de los trabajos de Faraday, Stoney amplía la definición de electricidad, ¿Cuál fue su definición?
6. En 1879, Crookes, estudió el comportamiento de descargas eléctricas sobre gases a bajas presiones. ¿En que consistieron los experimentos?, ¿Qué resultados obtuvo?
7. Perrin, trabajo posteriormente con los tubos de descarga utilizados por Crookes. ¿En qué consistieron sus experimentos?, ¿A qué conclusiones llegó?
8. Defina rayos catódicos.
9. Thomson trabajo con los rayos catódicos, explique en qué consistió su experimento y a que conclusiones llegó.
10. A partir de los resultados de su primer experimento, Thomson lo comparó con los resultados obtenidos por Faraday determinados en la electrólisis del hidrógeno. ¿A qué conclusión llegó al comparar dichos resultados?
11. Explique en qué consistió el Modelo Atómico propuesto por Thomson.
12. Röntgen, trabajo sobre bobinas de inducción y descubrió un fenómeno muy particular ¿En qué consistió este fenómeno?, ¿Cómo era su comportamiento?
13. ¿Qué hipótesis realizada por Poincaré, estimula a Becquerel a realizar investigaciones sobre minerales fluorescentes?, ¿A qué conclusiones llega?
14. En función a lo estudiado por Röntgen, Poincaré y Becquerel, defina sustancia radioactiva.
15. Marie y Pierre Curie trabajaron con sustancias radiactivas, ¿En qué consistieron sus estudios?
16. Posteriormente Becquerel realiza estudios sobre los resultados de los Curie, ¿qué pudo demostrar en función de estos resultados?
17. En su primer experimento, Rutherford hace pasar un haz de rayos provenientes de un colimador a través de un orificio de plomo, aplicando un campo magnético. Él y Villard posteriormente clasifican sus resultados como tres tipos de partículas. ¿Cuáles eran dichas partículas?, ¿Qué propiedades tienen?
18. Describa en que consistieron los experimentos de Millikan. ¿Por qué era necesario conocer la viscosidad del gas donde circula la gota?, ¿Cuáles fueron los resultados obtenidos?
19. ¿En qué consistió el experimento realizado por Geiger y Marsden, quienes pertenecían al equipo de trabajo de Rutherford?, ¿Qué resultados obtuvieron?, ¿Concordaba con lo esperado?



20. Explique el modelo propuesto por Rutherford luego de analizar los resultados experimentales. ¿Cómo determinó el tamaño del núcleo?
21. Explique, en que consistieron los resultados experimentales de Goldstein y Wein.
22. ¿Qué resultados obtiene Rutherford al bombardear Nitrógeno con partículas alfa?, ¿A qué conclusión pudo llegar a partir de estos resultados?
23. Explique en qué experimentos se basó Moseley para determinar con exactitud los números atómicos de los elementos.
24. Defina Rayos X característicos del elemento. ¿De qué depende el poder de dureza de los mismos?
25. ¿En qué consistió el experimento realizado por Moseley?, ¿Cuáles fueron los resultados obtenidos?, ¿Qué pudo concluir?
26. Defina Número Atómico
27. Dado los siguientes elementos, escriba de manera correcta el símbolo del elemento con su número atómico:
  - a. H
  - b. Li
  - c. P
  - d. U
  - e. Kr
  - f. Fr
28. En 1920, Rutherford y otros investigadores proponen la existencia de otra partícula. ¿Qué propiedades tenía la partícula propuesta?
29. ¿En qué consistieron los experimentos realizados por Bothe y Becker?, ¿En base a qué resultados los realizaron?, ¿Qué resultados obtienen?
30. La pareja Curie-Joliot, continuando la experimentación iniciada por Bothe y Becker. ¿Qué resultados obtienen?, ¿Eran coherentes esos resultados?
31. ¿Cuál fue la suposición de Chadwick?, ¿Qué consideración hace al realizar los cálculos necesarios para calcular la energía de éstas partículas?, ¿Qué resultados obtuvo?
32. ¿Qué resultados obtiene Thomson al determinar masas atómicas con el método de la parábola?, ¿En qué consiste el Espectrómetro de masas realizado para determinar las masas atómicas por Dempster y Aston?, ¿Qué se pudo demostrar con este método?
33. Defina isotopo y número másico.
34. Explique brevemente los siguiente términos relacionados con partículas subatómicas:
  - a. Positrón
  - b. Neutrino y antineutrino
  - c. Mesón
35. Completar la siguiente tabla:

---

	11	23		0
D		2	1	0

---



---

	56	54	82	
		54	26	+3
		187		0
Te			78	-2

---

## Cuestionario 2: La Física Cuántica

1. Defina espectroscopia y explique el funcionamiento de un espectroscopio.
2. ¿En que consistieron los descubrimientos realizados por Newton en el campo de la espectroscopia?
3. ¿En qué consiste la Teoría ondulatoria de la luz?, ¿Qué consideraciones simplifican lo observado por Newton?
4. ¿Cuáles fueron los resultados obtenidos por Maxwell y Hertz al trabajar con las ecuaciones de Campo Magnético?
5. Defina Luz, longitud de onda y amplitud de onda
6. ¿Cómo se relaciona la frecuencia con la longitud de onda?
7. Los siguientes equipos electrónicos trabajan con la frecuencia indicada, indique a que espectro electromagnético corresponde la misma:
  - a. Horno Microondas (2,45GHz)
  - b. Celular (850MHz – 1900MHz)
  - c. Wi-Fi (2,45GHz – 5GHz)
  - d. Radio AM (530KHz – 1540KHz)
  - e. Radio FM (87,1MHz – 108,1MHz)
  - f. Equipo de Rayos X (30KHz)
8. Defina fotón, ¿Cuál es su importancia al estudiar la luz?
9. Enuncie la Teoría de Max Planck
10. Explique a que denominamos Efecto Fotoeléctrico.
11. ¿A qué corresponde el Umbral Fotoeléctrico?, ¿En qué consiste la Teoría del Efecto Fotoeléctrico desarrollada por Einstein?
12. ¿De qué factores depende la Energía de ionización de un metal?
13. ¿Cómo se aprovechó el efecto fotoeléctrico para determinar de manera más precisa la constante de Planck?
14. Determine la Energía cinética que adquiere el electrón de un átomo de cobre cuando se le irradia luz con frecuencia de  $3,0 \times 10^{39} \text{ Hz}$ .
15. Defina espectro.
16. ¿A qué longitudes de onda y colores corresponden las líneas espectrales del átomo de hidrógeno?
17. ¿En qué consiste el modelo de Balmer que explica las líneas espectrales del hidrógeno?, ¿En qué consistió la generalización realizada por Ritz?
18. ¿A qué denominamos número de onda?



19. ¿En qué consiste la relación de frecuencia de Bohr?
20. Justifique la siguiente afirmación: "un electrón del átomo de hidrógeno, puede presentar solamente ciertos valores de energía".
21. ¿En qué se diferencian la Mecánica Clásica de la Mecánica Cuántica?
22. Enuncie la Teoría Cuántica de Max Planck y dé su expresión matemática.
23. ¿En base a qué consideraciones, Bohr explica el espectro de líneas del átomo de Hidrógeno?
24. Enuncie los postulados del Modelo de Bohr, e indique cuales fueron sus limitaciones.
25. ¿En qué consistieron las explicaciones del comportamiento dual de la luz, realizadas por De Broglie?
26. ¿En qué consistió el análisis del comportamiento dual de los electrones realizado por Davisson y Germer?
27. ¿En qué consiste y como se explica el Principio de Incertidumbre?
28. ¿A qué se denomina onda estacionaria?
29. ¿Cuál es la ecuación desarrollada por Schrödinger y cuál es su significado?
30. ¿Cuál es la relación entre el Modelo de Bohr y el Modelo de Schrödinger?
31. Definir: Función de onda, orbital.
32. Explique los conceptos generales de la Mecánica Cuántica en función al estudio del movimiento del electrón alrededor de un núcleo.
33. Discuta la veracidad de la siguiente afirmación "Un haz con cualquier longitud de onda permite el desplazamiento de un electrón alrededor del núcleo, aumentando éste su nivel de energía"
34. Defina: Número Cuántico, Número Cuántico Principal, Número Cuántico Secundario, Número Cuántico Magnético.
35. Describa geoméricamente e interprete la misma de los orbitales "s, p, d"
36. ¿A qué se denomina, spin electrónico o momento de spin?
37. Dados los siguientes elementos determinar los número cuánticos para cada caso: H, He, Na<sup>+</sup>, Cl<sup>-</sup>
38. Defina, Carga Nuclear Efectiva.
39. Enuncie el Principio de Exclusión de Pauli y explique en qué consiste el Principio de Construcción.
40. Dar la Configuración Electrónica "CE", la Configuración Electrónica Externa "CEE" y el Diagrama de Energía para los primeros 40 elementos de la Tabla Periódica con sus respectivos iones más importantes.



## Trabajos de Integración

En los trabajos de integración analizaremos las propiedades de los grupos más representativos de la Tabla Periódica. Estos trabajos constan de una serie de preguntas, que a través de la comparación y búsqueda bibliográfica permitirá concluir y observar los comportamientos fundamentales de estos elementos.

Hidrógeno



## Bibliografía

- Atkins, P., & Jones, L. (1998). *Química: Moléculas, Materia, Cambio*. Barcelona: Omega, S.A. Cambridgesoft. (s.f.). ChemBioOffice.
- Cotton, F. A., & Wilkinson, G. (1990). *Química Inorgánica Avanzada*. México: Limusa.
- Cotton, F. A., & Wilkinson, G. (1993). *Química Inorgánica Básica*. México: Limusa.
- Gutierrez Suburu, M. E. (2013). *Química Inorgánica*. Buenos Aires: Escuela Técnica Nº1 "Ing. Otto Krause".
- Housecroft, C. E., & Sharpe, A. G. (2006). *Química Inorgánica*. Madrid: Pearson Educación, S.A.
- Hypercube, Inc. (s.f.). HyperChem Professional.
- Moeller, T. (1961). *Química Inorgánica*. Barcelona: Reverté, S.A.
- Palomino, S. B. (2013). *Enlace Química*. Buenos Aires: Instituto Superior del Profesorado "Joaquín V. Gonzalez" - Profesorado de Química.
- Palomino, S. B. (2013). *Estructura del átomo*. Buenos Aires: Instituto Superior del Profesorado "Joaquín V. Gonzalez" - Profesorado de Química.
- Palomino, S. B. (2013). *Tabla Periódica de los Elementos*. Buenos Aires: Instituto Superior del Profesorado "Joaquín V. Gonzalez" - Profesorado de Química.
- Pauling, L. (1958). *Química General*. Madrid: Aguilar, S.A.
- Petrucci, R. H., Harwood, W. S., & Herring, F. G. (2003). *Química General*. Madrid: Pearson Educación, S.A.
- Shriver, D. F., Atkins, P. W., & Langford, C. H. (1998). *Química Inorgánica* (Vol. 2). Barcelona: Reverté, S.A.
- Shriver, D. F., Atkins, P. W., & Langford, C. H. (2007). *Química Inorgánica* (Vol. 1). Barcelona: Reverté, S.A.



