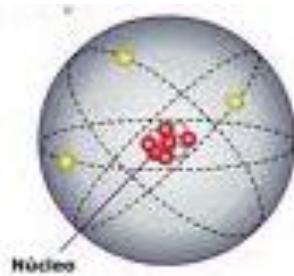
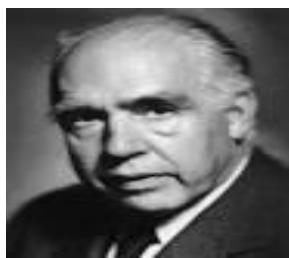




QUIMICA
Unidad N° 3 : - "ESTRUCTURA ATÓMICA"



ESTRUCTURA ATÓMICA



Niels BOHR



John DALTON

MODELO ATÓMICO ACTUAL

El modelo atómico actual se construye a partir de los siguientes supuestos:

- Como el electrón es una partícula en movimiento, lleva asociada una onda.

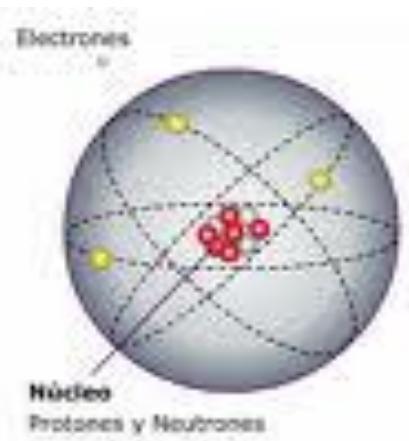
Puesto que no es posible conocer todo del electrón durante todo el tiempo

Principio de Incertidumbre: “**No se puede conocer simultáneamente y con precisión absoluta la posición y la cantidad de movimiento de un electrón**”) se emplearan probabilidades para indicar cuales son sus propiedades (posición- velocidad-energía-etc.).

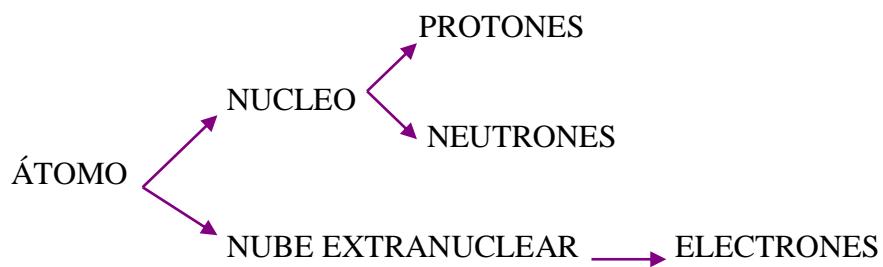
- La energía de los electrones está cuantizada, es decir, solo puede tener ciertos valores y no puede tener ningún otro.

La ecuación de una onda tiene varias soluciones. Cada una de ellas describe una posible situación en la que puede encontrarse el electrón. Las distintas soluciones se obtienen introduciendo unos números llamados **Números Cuánticos**, cuyos valores varían dentro de ciertos límites. Las soluciones son funciones matemáticas y pueden representarse gráficamente. Esta representación delimita una región del espacio alrededor del núcleo, donde la probabilidad de encontrar un electrón es máxima. A estas regiones se las llama **orbítales**.

ORBITAL: **región del espacio alrededor del núcleo donde hay mayor probabilidad de encontrar un electrón con cierta energía.**



Podemos decir que en el Modelo Atómico Actual el átomo está formado por dos zonas:



El núcleo atómico contiene casi toda la masa del átomo. Los protones y los neutrones tienen prácticamente la misma masa: 1,0073 y 1,0087 una respectivamente. Como la diferencia es tan pequeña se puede pasar por alto y considerar que la masa del protón y del neutrón es la misma **1uma**.

Uma: significa Unidad de Masa Atómica. Es una unidad que utilizan los químicos para no trabajar con valores muy pequeños de masa.

$$1\text{uma} = 1,66 \cdot 10^{-24}\text{g}$$

Los electrones tienen una masa tan pequeña que por lo general no se les tiene en cuenta, se considera entonces que su masa es **0 uma**

El protón tiene la misma carga eléctrica del electrón pero de signo contrario.

Los neutrones no tienen carga eléctrica.

PARTÍCULA	SIMBOLO	CARGA	CARGA NETA	MASA (g)	MASA (uma)	MASA RELATIVA AL ELECTRÓN
ELECTRÓN	e^-	$-1,602 \cdot 10^{-19}\text{C}$	-1	$9,1095 \cdot 10^{-28}$	0	1
PROTÓN	p^+	$+1,602 \cdot 10^{-19}\text{C}$	+1	$1,6725 \cdot 10^{-24}$	1	1836
NEUTRÓN	n°	0	0	$1,6725 \cdot 10^{-24}$	1	1836

La cantidad de protones que tiene un átomo está determinado por su **NÚMERO ATÓMICO**, este se representa con la letra **Z**. Es característico de cada elemento.

Como los átomos son neutros eléctricamente la cantidad de protones es la misma que la de electrones por lo tanto el Z me indica el número de protones y de electrones.

Ej; **Z = 8** significa que ese elemento tiene **8 protones y 8 electrones**.

Todos los elementos están ordenados en la tabla periódica por orden creciente de Z.

El número de neutrones se calcula conociendo el número atómico y el **NÚMERO MÁSICO** (se lo representa con la letra **A**).

El número másico es la suma de la cantidad de protones y neutrones que tiene el núcleo por lo tanto:

$$Nº \text{ neutrones} = A - Z$$

El número másico aparece en la tabla periódica debajo del nombre de cada elemento, pero no es un número entero, esto se debe a la presencia de **ISÓTOPOS**.

La palabra isótopos viene del griego que significa **ISOS**: igual, **TOPOS**: lugar.

Los isótopos, denominados así por el químico **Frederick SODDY**, ocupan el mismo lugar en la tabla periódica, tienen el mismo número de protones y electrones pero difieren en la cantidad de neutrones.

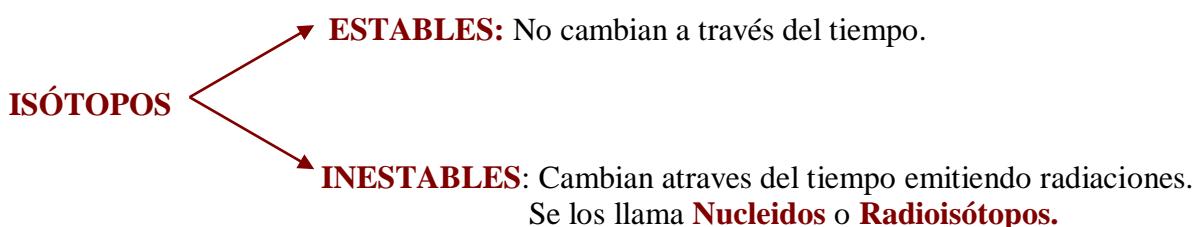
El valor de la masa atómica relativa de un elemento se calcula como la masa promedio de la mezcla natural de los isótopos.

En la naturaleza existen dos isótopos de la Plata

ISÓTOPOS	ABUNDANCIA (%)	MASA (uma)
^{107}Ag	51,94	106,95
^{109}Ag	46,06	108,913

$$\text{Masa promedio Ag} = \frac{51,94\% \cdot 106,95 \text{ uma} + 46,06\% \cdot 108,913 \text{ uma}}{100\%} = 107,870 \text{ uma}$$

Los isótopos pueden ser:



En el núcleo los protones, a pesar de tener todos carga positiva y repelerse, permanecen unidos por fuerzas de atracción muy intensas llamadas fuerzas nucleares, además los neutrones actúan como ganchos manteniendo unido a los protones en una especie de red. Cuando hay exceso de protones y neutrones (mas de 83) el núcleo es inestable y se desintegra emitiendo radiaciones. **La emisión espontánea de radiación se conoce como Radioactividad natural.**

Las radiaciones emitidas pueden ser: **α (alfa); β (beta); γ (gama).**

CARACTERISTICAS DE LAS RADIACIONES

Radiaciones α	Radiaciones β	Radiaciones γ
Son partículas materiales con la masa de un núcleo de He	Son partículas materiales con masa y carga igual a la del e^-	Son radiaciones electromagnéticas de elevada energía y velocidad igual a la de la luz
Están formadas por 2 protones y 2 neutrones.	Abandonan el átomo a velocidad de la luz.	
Sufren desviación contraria a los rayos catódicos	Sufren la misma desviación que los rayos catódicos	No sufren desviación en un campo magnético
Tienen carga positiva +2	Tienen carga negativa -1	No tienen carga
Tienen poca penetrabilidad, las detiene una hoja de papel	Son más penetrantes que los rayos α , las detiene una lámina de aluminio	Son altamente penetrantes, solo pueden ser detenidas por una lámina gruesa de plomo
Se la puede representar: ${}^4_2\text{He}$ Ej: ${}^{226}_{88}\text{Ra} \longrightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + {}^4_2\text{He}$	Se la puede representar: ${}^0_{-1}\text{e}$ Ej: ${}^{218}_{84}\text{Po} \longrightarrow {}^{218}_{85}\text{At} + {}^0_{-1}\text{e}$	Se la representa: γ Ej: ${}^{125}_{52}\text{Te} \longrightarrow {}^{125}_{52}\text{Te} + \gamma$

PARTÍCULAS SUBATÓMICAS.

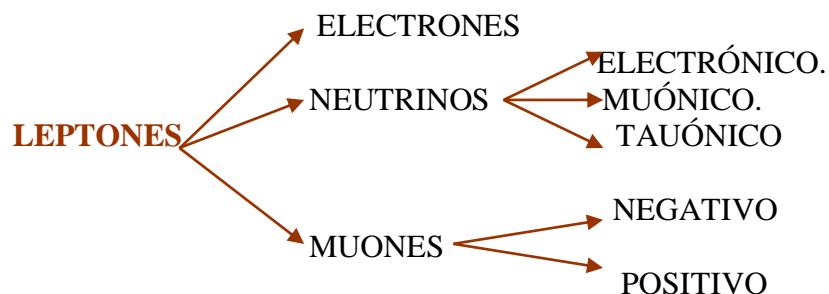
En el año 1932 **Carl ANDERSON** descubre otra partícula: el **POSITRÓN**, que es igual al electrón pero de signo contrario (e^+).

En 1931 **Wolfgang PAULI** postuló la existencia de los neutrinos pero recién fueron descubiertos en 1956.

El positrón y otras partículas se descubrieron en la década del 50 con la aparición de los aceleradores de partículas y los detectores de partículas. Estas partículas se producen o desaparecen después de una reacción en ciertas condiciones.

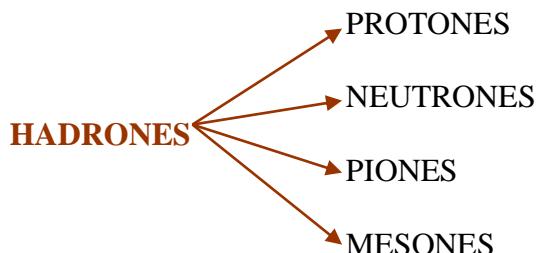
Las partículas subatómicas se las puede clasificar hoy en dos grandes grupos:

1) LEPTONES: Son partículas mas livianas que se desplazan libremente. Ellos son:

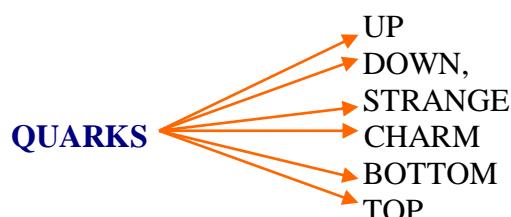


2) HADRONES: Son partículas mas pesadas, formadas por otras mas pequeñas llamadas **QUARKS**.

Los hadrones son:



Se conocen seis tipos diferentes de quarks:



Un protón esta formado por 3 quarks: 2 quarks up y 1 down.

Un neutrón esta formado por 3 quarks: 1 quarks up y 2 down.

NÚMEROS CUÁNTICOS

La ecuación de una onda planteada por **Schroedinger** en el modelo atómico actual es:

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

Diagrama que muestra la ecuación de Schrödinger con las siguientes etiquetas:

- Segunda derivada con respecto a x : $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$
- Función de onda de Schrödinger: ψ
- Posición: x
- Energía: E
- Energía potencial: V

Al resolver esta ecuación surgen valores numéricos conocidos como **Números Cuánticos**.

Cada uno de ellos describe una posible situación en la que puede encontrarse el electrón y cuyos valores varían dentro de ciertos límites. Las soluciones son funciones matemáticas y pueden representarse gráficamente.

Los **Números Cuánticos** son cuatro:

1) NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL:

Se lo representa con la letra “*n*”.

Esta relacionado con la distancia radial media entre el electrón y el núcleo; como la energía y la distancia estan vinculadas, el valor de este número está relacionado con la energía asociada al electrón y con el volumen o tamaño del orbital.

Puede tomar valores enteros positivos: **1, 2, 3, 4**, que representan el primero, segundo, tercero, etc. Niveles de energía de los electrones en un átomo.

Según el modelo de Bohr correspondían a las capas K, L, M,.....

2) NÚMERO CUÁNTICO AZIMUTAL o SECUNDARIO:

Se lo representa con la letra “*l*”

Está relacionado con la forma del orbital. Cada nivel 1, 2, 3,... esta formado por uno o mas subniveles, cada uno de estos subniveles esta caracterizado por un valor del número cuántico azimutal.

Dicho número puede tener valores de **0 a (n-1)** y esta caracterizado por letras:

$l = 0$ *s*

$l = 1$ *p*

$l = 2$ *d*

$l = 3$ *f*

$l = 4$ *g*

3) NÚMERO CUÁNTICO MAGNÉTICO:

Se lo representa con la letra “*m*”.

Esta relacionado con la orientación espacial del orbital. Puede tomar valores entre $-l; 0; +l$.

Para $l = 0$ *m* puede tomar solo valor 0, es decir que existe una sola forma en que el orbital s pueda orientarse en el espacio (simetría esférica). Por lo tanto $l = 0; m = 0$.

Para $l = 1$, *m* toma los valores $m = -1, m = 0, m = +1$.

El orbital p puede orientarse en tres formas distintas en el espacio, según los ejes cartesianos p_x, p_y, p_z formando ángulos de 90° entre sí.

Para $l = 2$ el número cuántico magnético puede tomar cinco valores ($m = -2; -1; 0; +1; +2$) por lo tanto habrá cinco orientaciones diferentes en el espacio para los orbitales *d*.

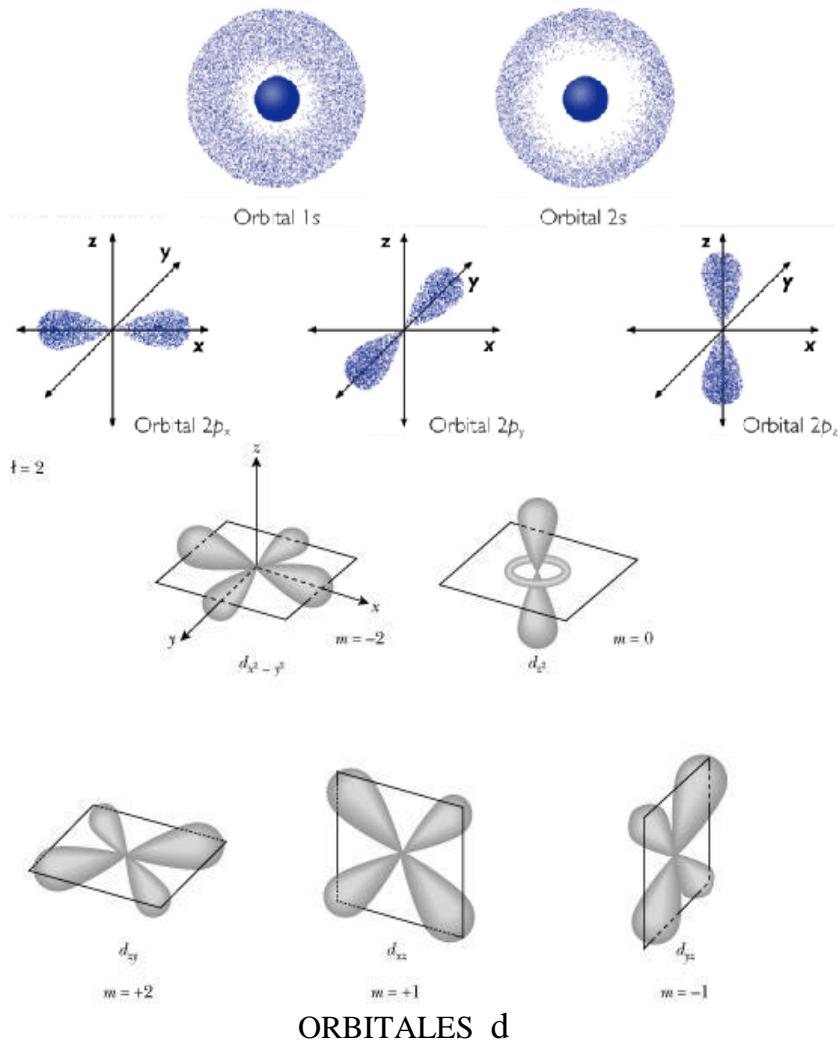
Las diferentes orientaciones en el espacio no indican niveles energéticos diferentes, todos los orbitales *p* tienen la misma energía. La energía está relacionada con el valor de *n* pero influye además el valor de *l*. La energía asociada al nivel s es menor que la correspondiente al nivel p y esta a su vez menor que la del nivel d. Pero la diferencia de energía entre dos orbitales con número cuántico principal distinto es mucho mayor que la diferencia de energía entre subniveles con igual número cuántico principal.

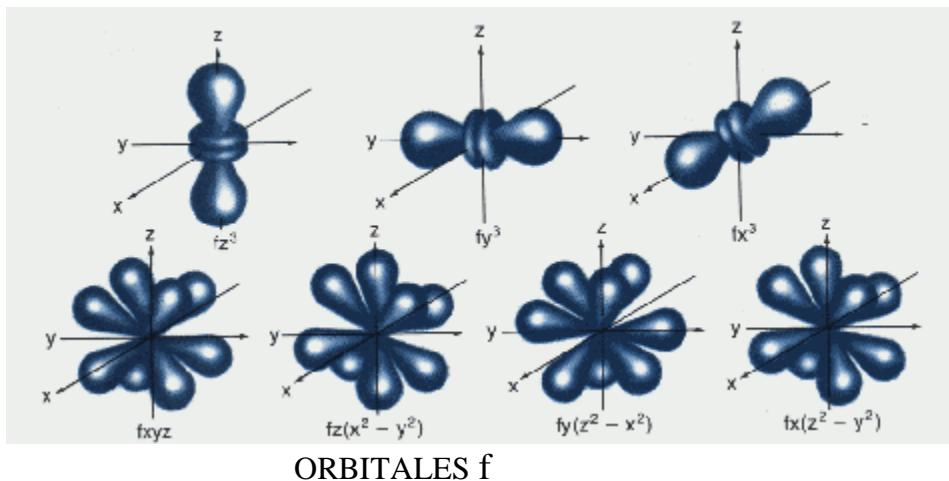
El orden de energía creciente para los diferentes orbitales es:

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s \cong 3d, 4p, 5s \cong 4d, 5p, 6s \cong 4f \cong 5d, 6p, 7s, 5f$.

Existe una regla mnemotécnica para recordar el orden de la energía creciente llamada regla de las diagonales, que se la encuentra en las tablas periódicas actuales.

REPRESENTACION DE LOS ORBITALES





4) NÚMERO CUÁNTICO DE SPIN:

Se lo representa con la letra “ \hat{s} ”.

Está relacionado con el sentido de giro del electrón sobre sí mismo.

Puede tomar solo dos valores $+\frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$ que indican sentido de giro igual que las agujas del reloj o contrario.

En resumen:

- El nivel está caracterizado por “n”.
- El subnivel está caracterizado por “n” y “l”.
- El orbital está caracterizado por “n”, “l”, “m”.
- El electrón está caracterizado por “n”, “l”, “m”, “ \hat{s} ”

CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA.

Cada electrón en un átomo está descripto por un conjunto de valores de cuatro números cuánticos (**n**, **l**, **m**, **\hat{s}**).

Cada conjunto de números cuánticos está sujeto a una restricción expresada por el **Principio de Exclusión de Pauli** que dice: “**en un átomo no existen dos electrones cuyo conjunto de números cuánticos sean iguales**” dicho con otras palabras en un átomo no existen dos electrones con sus cuatro números cuánticos iguales.

Escribir la configuración electrónica (CE) de un átomo es indicar los orbitales asociados a los diferentes electrones que lo componen.

En la CE se indica el nivel y el subnivel de energía en el cual se encuentran los electrones.

Para el átomo de **H** la CE es **1s¹** ya que posee un solo electrón en el nivel más bajo de energía o sea **n = 1**. Si **n = 1 l = 0** corresponde el subnivel s.

Para el **He** la CE es **1s²**, en este caso los dos electrones deben tener espines opuestos o sea, **-1/2, +1/2**, para cumplir el principio de Pauli.

El **Li** tiene 3 electrones. Dos de ellos asociados al nivel 1s pero el tercero no puede estarlo porque violaría el principio de exclusión, por lo tanto el tercer electrón debe entrar en el nivel 2. Para $n = 2$, l puede ser 0 ó 1, $m_l = 0$ corresponde al de menor energía, por lo tanto la CE del **Li** es $1s^2 2s^1$.

Para el **B** (5 electrones) la CE es $1s^2 2s^2 2p^1$. En el B aparece por primera vez un electrón asociado al subnivel p, pero puede ser p_x , p_y o p_z , en forma indiferente ya que todos ellos tienen la misma energía.

En el caso del **C** (6 electrones), el último electrón podría ubicarse en el mismo orbital en que está el electrón anterior con espín opuesto, o podría ocupar cualesquiera de los otros orbitales p. La experiencia muestra que es más estable la configuración en que los electrones están en diferentes orbitales con espines paralelos. **La regla de máxima multiplicidad de Hund** dice: "*Los electrones tienden a ocupar diferentes orbitales del mismo subnivel, dando un orden de llenado en que hay la máxima cantidad de orbitales semicompletos*".

La CE del C será: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$.

A los **orbitales p** de un mismo nivel le corresponden **6 electrones** con sus números cuánticos distintos. Los electrones quedan distribuidos de la siguiente manera: 2 en el p_x ; 2 en el p_y ; 2 en el p_z . En cambio a los **orbitales d** le corresponden un máximo de **10 electrones** y a los **f** hasta **14 electrones**.

Para determinar la CE electrónica de átomos poli electrónicos se debe considerar:

1. El diagrama de energía de los orbitales atómicos. Recordar la regla de las diagonales.

2. Asignarle a ellos los electrones teniendo en cuenta el principio de exclusión y el de máxima multiplicidad.

Ejemplos:

$$\text{CE}_{\text{Zr}} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^2$$

Sin embargo para algunos átomos su configuración electrónica no concuerda con la que se obtiene de hacer uso de la regla de las diagonales, por ejemplo:

	CE Teórica	CE Real
Cu (29)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

La razón de esta desviación es la tendencia que presentan los átomos o los iones de tener los subniveles p, d, f completos o semicompletos, los cuales le confieren estabilidad al átomo. Pero aún así hay configuraciones que no se pueden explicar, por ejemplo las del W:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^4$$

Este tipo de irregularidades aparece en los átomos de gran tamaño y no son fáciles de explicar, ya que los niveles de energía de números cuánticos mayores que 5 difieren muy poco entre sí y se hacen muy importantes los entrecruzamientos de los mismos.