# CB041 Química y Electroquímica

Departamento de Química

## T1B: Estructura electrónica

Autora: Adriana Romero

.UBAfiuba FACULTAD DE INGENIERÍA

# Material de Estudio

## 1. Libros de Texto. (todos, en particular….)

•PRINCIPIOS DE QUIMICA. Los caminos del descubrimiento. P. Atkins, L. Jones. 3ra. Edición. Ed. Médica Panamericana, Barcelona, 2006.

•QUIMICA. R. Chang. 6ta. Edición. McGraw Hill, México, 1999.

•QUÍMICA. La ciencia central. Brown, LeMay, Bursten. 7ma. Edición. Ed. Pearson Educación.

•Conocimientos previos: QUÍMICA BÁSICA. Di Risio, Roverano, Vazquez (Libro del CBC)

## 2. Guía del Aula

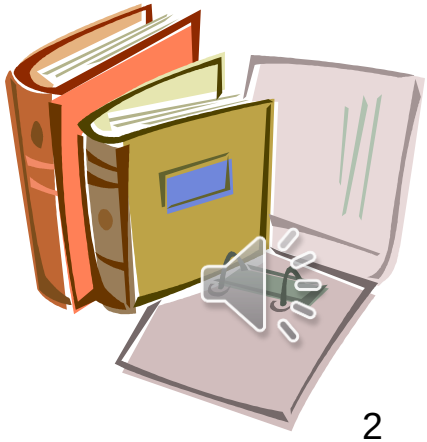
Cátedra de Química B.

## 3. Guía de Trabajos Prácticos.

Cátedra de Química B.

## 4. Material Adicional.

Apuntes del curso.



# PARTÍCULAS SUBATÓMICAS

Para identificar un ELEMENTO es suficiente conocer su **Z,** para identificar un ÁTOMO es necesario conocer **Z** y **A**

## NÚMERO ATÓMICO (Z)

Es el número de protones que con tiene el núcleo de cualquier átomo de un elemento.

**Z = n°p**

## NÚMERO MÁSICO (A)

Es la suma del número de protones más el número de neutrones que contiene el núcleo de un átomo.

**A = n°p + n°n**

## NUCLEIDO

$^{A}_{Z}X$

Átomo caracterizado por los valores determinados de Z y A

## ISÓTOPOS

Son átomos de un mismo elemen- to, que difieren en sus números másicos.

**= Z y ≠ A**

## ISÓBAROS

Son átomos de distintos elemen- tos, con igual número másico.

**≠ Z y = A**

EJEMPLOS

$^{1}_{1}H$ $^{2}_{1}H$ $^{3}_{1}H$

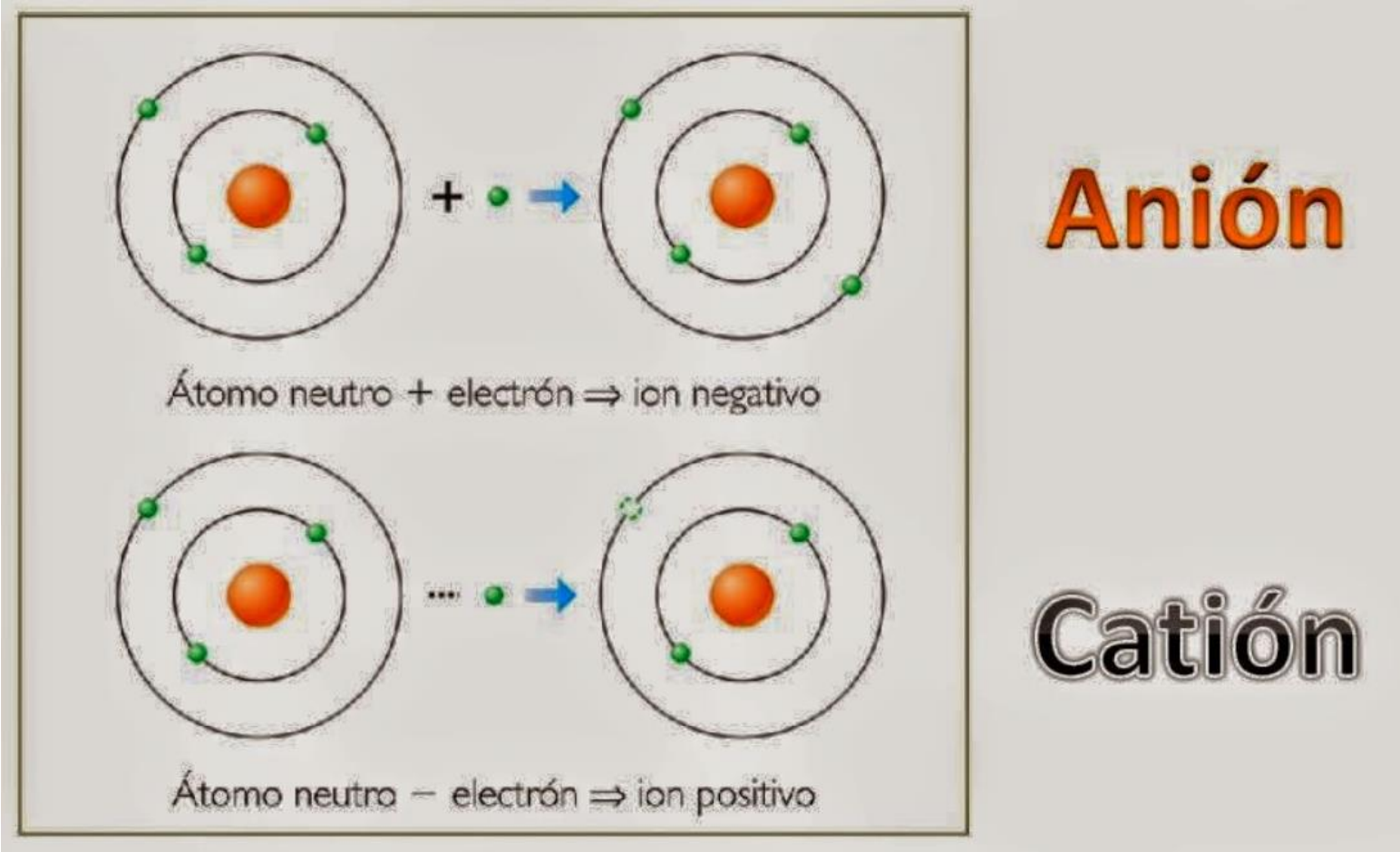
$^{40}_{20}Ca$ $^{40}_{18}Ar$





Datos del libro de Di Risio

**Iones:** especie que queda cuando un atomo neutro ha perdido o ganado electrones
Son especies con CARGA.






 Datos del libro de Di Risio

# PARTÍCULAS SUBATÓMICAS

Si un átomo de Cloro (carga 0) **gana** un electrón

$^{35}_{17}Cl + e^- \rightarrow {}^{35}_{17}Cl^-$

Se forma el **anión monovalente** del Cloro (carga -1)

Si un átomo de Oxígeno (carga 0) **gana** dos electrones

$^{16}_{8}O + 2e^- \rightarrow {}^{16}_{8}O^{2-}$

Se forma el **anión divalente** del Oxígeno (carga -2)

Si un átomo de Sodio (carga 0) **pierde** un electrón

$^{23}_{11}Na \rightarrow e^- + {}^{23}_{11}Na^+$

Se forma el **catión monovalente** del Sodio (carga +1)

Si un átomo de Calcio (carga 0) **pierde** dos electrones

$^{40}_{20}Ca \rightarrow 2e^- + {}^{40}_{20}Ca^{2+}$

Se forma el **catión divalente** del Calcio (carga +2)

Un átomo puede transformarse en un ion por **ganancia** o **pérdida** de electrones





Datos del libro de Di Risio

# MODELO ATÓMICO DE BOHR

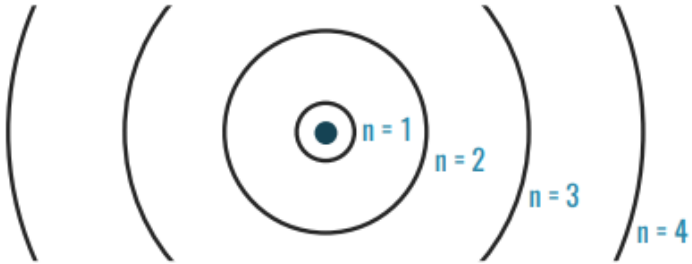
## 1er Postulado

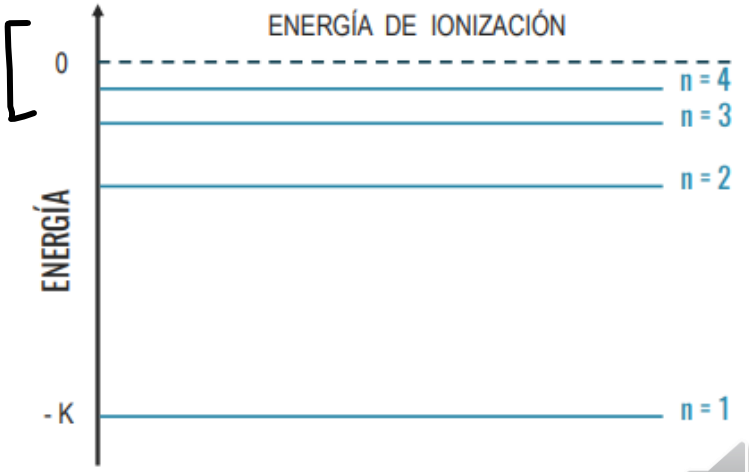
El electrón sólo puede moverse en algunas **órbitas permitidas** en las que no emite ni absorbe energía.

**Cada órbita:**

- Está caracterizada por un número natural n;
- Es circular y tiene un radio determinado $r_n$;
- Tiene asociada una energía del electrón, $E_n$, constante y puede calcularse según:

$$E_n = -K/n^2$$




los niveles más altos se solapan ¿Tienen cierto ancho?



 Datos del libro de Di Risio

# MODELO ATÓMICO DE BOHR

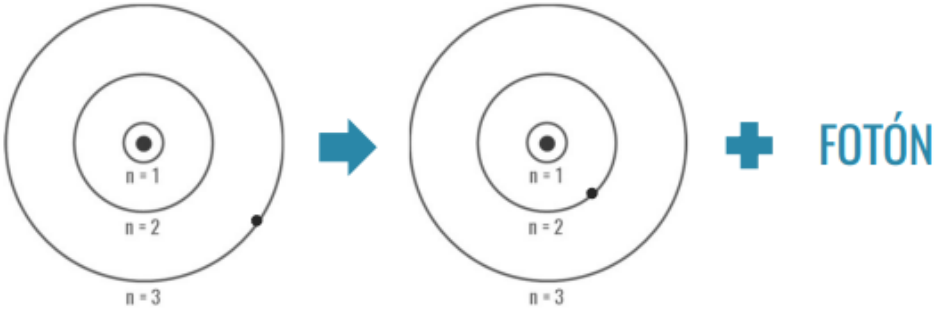
## 2do Postulado

El electrón sólo **gana o pierde energía**, cuando "salta" de una órbita permitida a otra, **absorbiendo o emitiendo un fotón**.

El electrón se encuentra normalmente en el nivel de menor energía (**nivel fundamental**).

Cuando recibe algún estímulo externo puede ocupar niveles de mayor energía, **niveles excitados**.

Cuando pierde energía, cae espontáneamente a una órbita más cercana al núcleo, emitiendo un fotón luminoso.




A partir de este modelo Bohr logra explicar el espectro de emisión del Hidrógeno





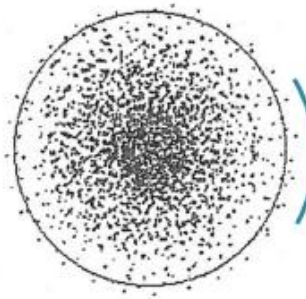
Datos del libro de Di Risio

# MODELO ATÓMICO ORBITAL

| Naturaleza Ondulatoria de la Materia | DE BROGLIE |
|---|---|
| Toda partícula material, en movimiento, posee simultáneamente propiedades ondulatorias. | |

| Principio de Incertidumbre | HEISENBERG |
|---|---|
| Es imposible conocer simultáneamente y con precisión, la posición y la velocidad de una micropartícula. | |

| Ecuación de Ondas | SCHRÖDINGER |
|---|---|
| Propone una ecuación que brinda información sobre la región donde es más probable encontrar al electrón | |



ORBITAL ≠ ÓRBITA

Al resolver la ecuación de ondas para el hidrógeno se obtiene que la energía total del electrón sólo puede tomar los siguientes valores: $E_n = -K/n^2$, **el mismo resultado que había predicho el modelo de Bohr.**





Datos del libro de Di Risio

# MODELO ATÓMICO ORBITAL

En la ecuación de ondas es necesario introducir ciertos parámetros para resolverla, **los Números Cuánticos**

Humo
Algún sentido
debe tener

| | | |
|---|---|---|
| NÚMERO CUÁNTICO **PRINCIPAL** | Sólo puede tomar valores enteros positivos.<br>Caracteriza **el tamaño** del orbital.<br>Nivel Energético | **n** |
| NÚMERO CUÁNTICO **AZIMUTAL** | Sólo puede tomar valores enteros entre **0** y **n-1**.<br>Caracteriza **la forma** del orbital.<br>Subnivel Energético | **l** |
| NÚMERO CUÁNTICO **MAGNÉTICO** | Sólo puede tomar valores enteros entre **-l** y **+l**.<br>Caracteriza **la orientación** del orbital.<br>Cantidad de orbitales con la misma energía. | **m** |
| NÚMERO CUÁNTICO **de SPIN** | Sólo puede tomar los valores **-1/2** y **+1/2**.<br>Caracteriza **el sentido de giro** del electrón en un orbital.<br>Por orbital entran 2 electrones. | **s** |





Datos del libro de Di Risio

# MODELO ATÓMICO ORBITAL

**Principio de Exclusión** — **PAULI**

En un átomo, no pueden existir dos electrones con los mismos valores de sus cuatro números cuánticos.

| Tamaño | Forma | Orientación | Spin |
|---|---|---|---|
| | del Orbital | | del Electrón |
| **n** | **l** | **m** | **s** |

ENERGÍA

ORBITAL

ELECTRÓN

Como sólo hay 2 posibles valores para s

-1/2 o +1/2

Sólo entran

**2 electrones por orbital**

Estos 4 numeritos caracterizan a los electrones de un átomo



Datos del libro de Di Risio

# MODELO ATÓMICO ORBITAL

## Valores que pueden tomar los Números Cuánticos

$n \in \mathbb{Z}$

1, 2, 3, 4, 5, ...

$l \in \mathbb{Z} / 0 \leq l < n$

0, 1, 2, ..., (n – 1)

$m \in \mathbb{Z} / -l \leq m \leq +l$

-l, ..., -1, 0, 1, ..., +l

| n | l | m | Orbitales |
|---|---|---|---|
| 1 | 0 | 0 | **1s** |
| 2 | 0 | 0 | **2s** |
| | 1 | -1, 0, +1 | 3 x **2p** |
| 3 | 0 | 0 | **3s** |
| | 1 | -1, 0, +1 | 3 x **3p** |
| | 2 | -2, -1, 0, +1, +2 | 5 x **3d** |
| 4 | 0 | 0 | **4s** |
| | 1 | -1, 0, +1 | 3 x **4p** |
| | 2 | -2, -1, 0, +1, +2 | 5 x **4d** |
| | 3 | -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3 | 7 x **4f** |
| 5 | 0 | 0 | **5s** |
| | 1 | -1, 0, +1 | 3 x **5p** |
| | 2 | -2, -1, 0, +1, +2 | 5 x **5d** |
| | 3 | -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3 | 7 x **5f** |
| | 4 | -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4 | 9 x **5g** |

Los números cuánticos **n**, **m** y **s** se indican mediante números, mientras que el número cuántico **l**, se simboliza con letras

| 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|
| s | p | d | f | g |

¿Xq hay 2 formas de escribir lo mismo?



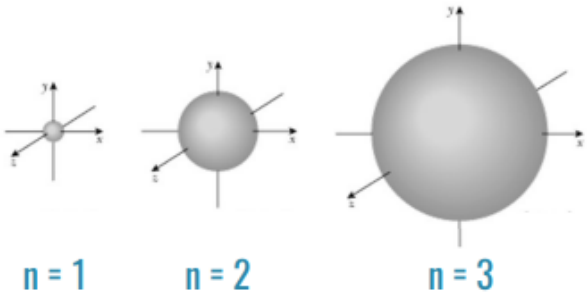


Datos del libro de Di Risio

# MODELO ATÓMICO ORBITAL

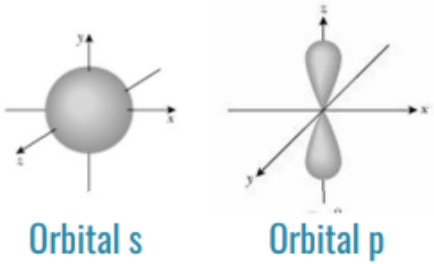
## Tamaño del Orbital

Cuanto mayor es **n** mayor es el tamaño de la región donde es probable encontrar al electrón.



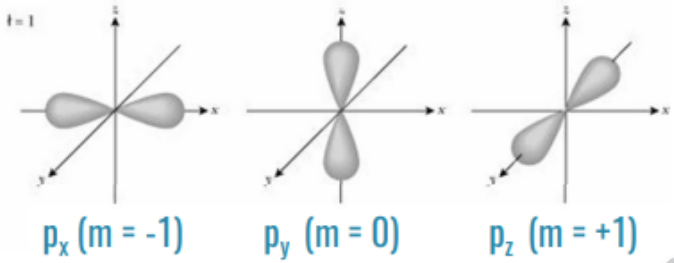

## Forma del Orbital

Los orbitales s (**l** = 0) tienen forma esférica, mientras que los orbitales p (**l** = 1) tienen forma lobular.




## Orientación del Orbital

Para un mismo subnivel puede haber varios orbitales que sólo difieren en su disposición espacial.

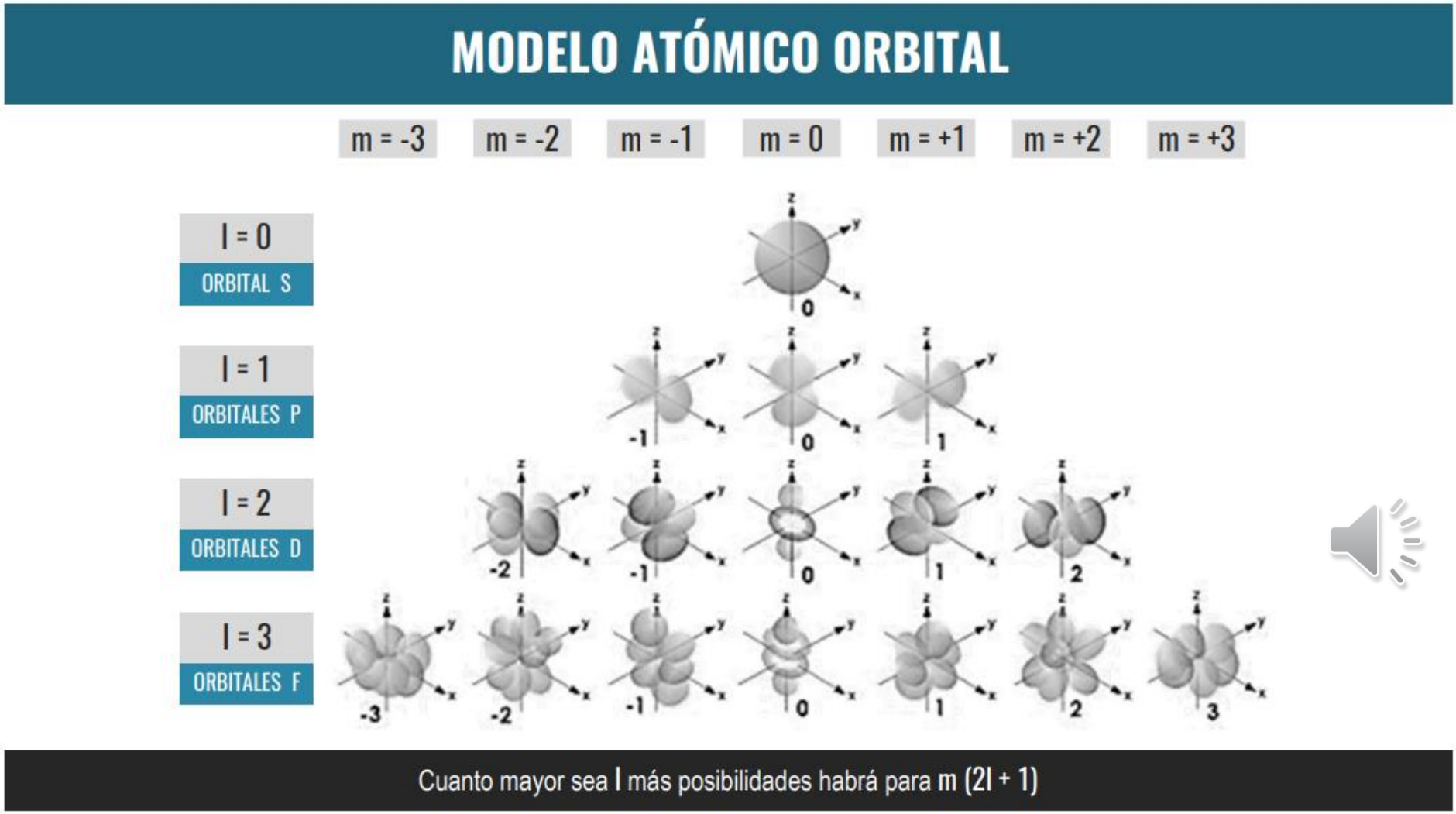



Recordemos que **Un orbital es una zona del espacio donde es más probable encontrar al electrón.**





Datos del libro de Di Risio



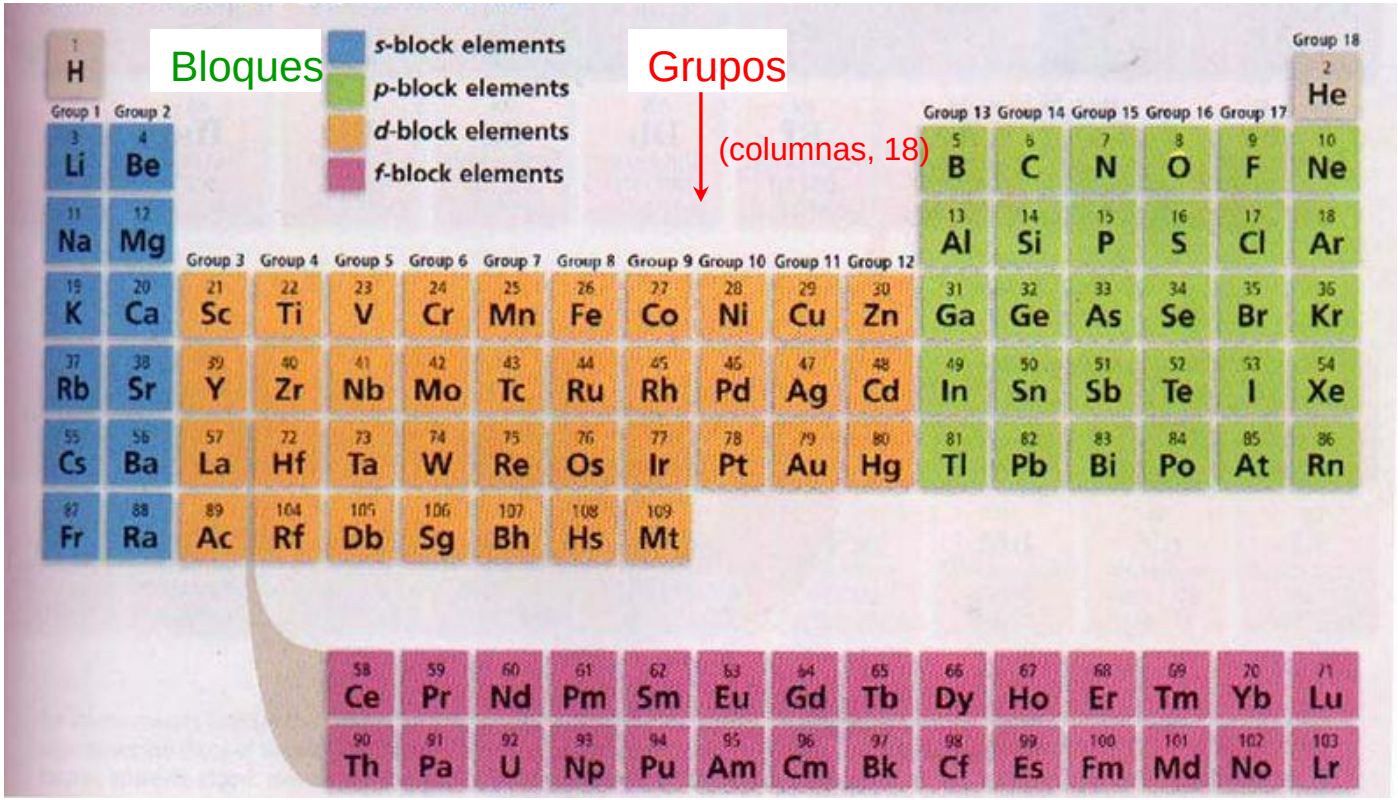

Recordemos que **Un orbital es una zona del espacio donde es más probable encontrar al electrón.**





Datos del libro de Di Risio

# Tabla Periódica



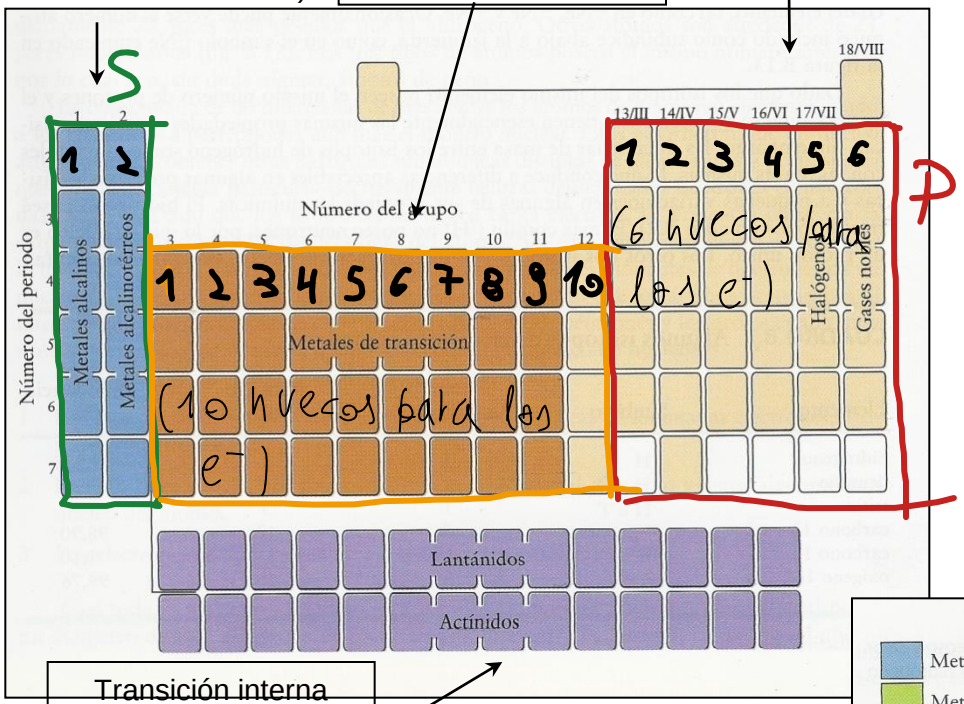

Cuando los elementos se clasifican según su número atómico y se ordenan en filas de determinada longitud, forman familias que presentan tendencias regulares en sus propiedades. Este ordenamiento es la tabla periódica. La división en bloques está relacionada con su estructura atómica (configuraciones electrónicas).

Sin embargo el hecho de que la organización de la tabla corresponda a la estructura electrónica de los átomos era desconocido para sus descubridores . La tabla fue desarrollada únicamente a partir de las propiedades físicas y químicas de los elementos (Meyer y Mendeleev 1869). Primero se propuso un ordenamiento en función de su masa atómica creciente pero al poco tiempo se dieron cuenta que se mantenía un patrón repetitivo uniforme si estaba organizada en función de los **números atómicos (Z)**(nº de protones en el nucleo) (Moseley 1915).

Metales fuertemente reactivos (último electrón en orbital s)

Metales transición (último electrón en orbital d)

Estos poco Reactivos (último electrón en orbital p)




Transición interna (último electrón en orbital f)

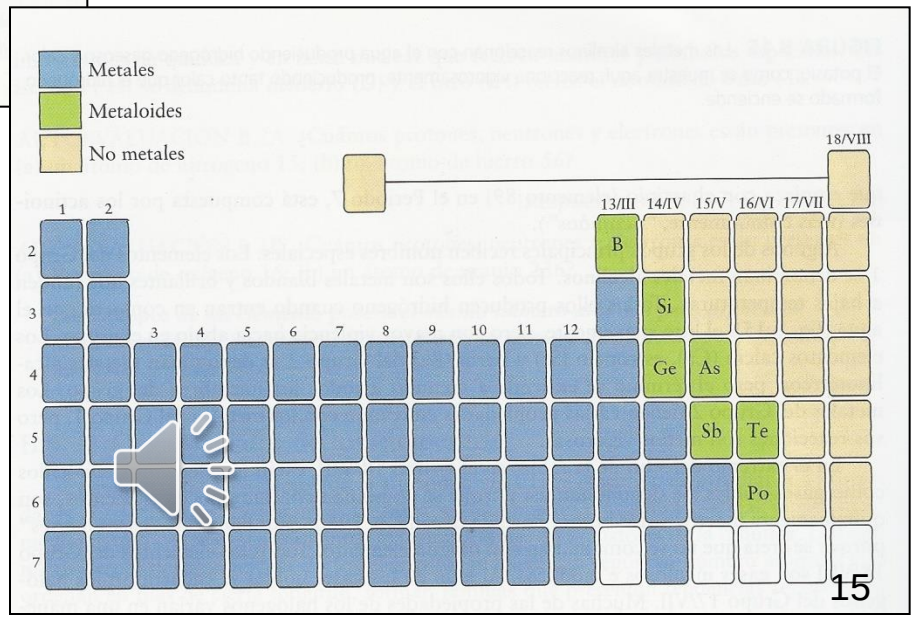
Si imaginamos q el núcleo del átomo se encuentra arriba de la tabla, y ésta simula los niveles y orbitales alrededor del núcleo, podemos ver q EL LUGAR Q OCUPA EL ELEMENTO EN LA TABLA ES EL LUGAR Q OCUPA SU ÚLTIMO ELECTRÓN.

**Bloques:** son las 4 regiones rectangulares de la tabla y debido a la estructura electrónica reciben los nombres de s, p, d y f (orbitales).

**Metal**: conduce la electricidad, posee brillo, y es maleable y dúctil

**No Metal**: no conducen, no es maleables ni dúctil

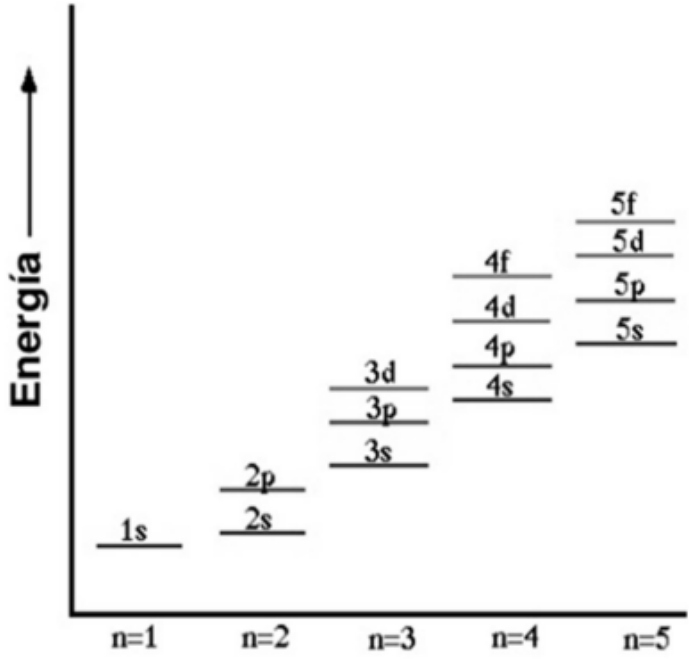
**Metaloides:** poseen la apariencia de un metal y algunas de sus propiedades pero se comporta químicamente como un no metal






A.Romero

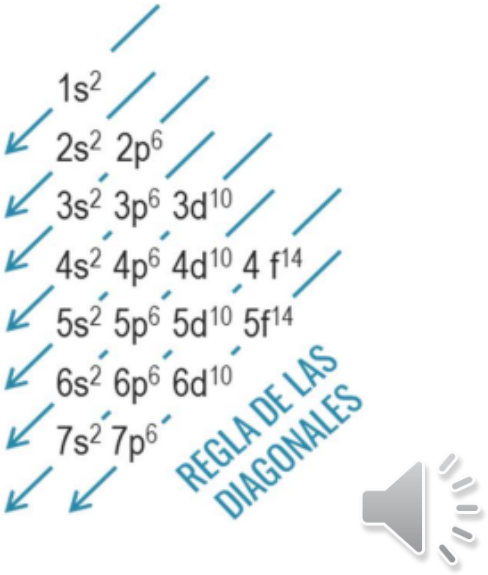
# MODELO ATÓMICO ORBITAL




## Energía Orbital

Cada orbital tiene una **energía** asociada que depende de **n** y **l** (nivel y subnivel energético).

La energía del orbital aumenta con **n**, y para un mismo valor de **n**, aumenta con **l**.




## Mínima Energía

En una especie polielectrónica los electrones se ubican ocupando los orbitales de menor energía.





Datos del libro de Di Risio

# Configuración electrónica (CE)

| Niveles | | electrones |
|---|---|---|
| 1 | $1s^2$ | 2 |
| 2 | $2s^2\ 2p^6$ | 8 |
| 3 | $3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}$ | 18 |
| 4 | $4s^2\ 4p^6\ 4d^{10}\ 4f^{14}$ | 32 |
| 5 | $5s^2\ 5p^6\ 5d^{10}\ 5f^{14}$ | 32 |
| 6 | $6s^2\ 6p^6\ 6d^{10}\ 6f^{14}$ | 32 |
| 7 | $7s^2\ 7p^6\ 7d^{10}\ 7f^{14}$ | 32 |

De lo dicho anteriormente, aparece la regla de las diagonales. Es una regla que predice como se ubicarán los electrones alrededor del núcleo.

| Átomo | Z | Configuración electrónica |
|---|---|---|
| Li | 3 | $1s^2 2s^1$ |
| Be | 4 | $1s^2 2s^2$ |
| B | 5 | $1s^2 2s^2 2p^1$ |
| C | 6 | $1s^2 2s^2 2p^2$ |
| N | 7 | $1s^2 2s^2 2p^3$ |
| O | 8 | $1s^2 2s^2 2p^4$ |
| F | 9 | $1s^2 2s^2 2p^5$ |
| Ne | 10 | $1s^2 2s^2 2p^6$ |

# MODELO ATÓMICO ORBITAL

## Configuración Electrónica (CE)

La expresión que indica la ubicación de los electrones en los orbitales de un átomo en su estado fundamental.

Se van llenando primero los orbitales con **menor energía** (regla de las diagonales).

| | El Átomo de |
|---|---|
| CE (H) : $1s^1$ | **H** tiene **1** electrón |
| CE (He) : $1s^2$ | **He** tiene **2** electrones |
| CE (Li) : $1s^2\ 2s^1$ | **Li** tiene **3** electrones |
| CE (N) : $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$ | **N** tiene **7** electrones |

CE Desarrollada

CE (Mn) : $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^5$

Mn tiene 25 electrones

Se llena el orbital 4s antes que el 3d

CE Abreviada

CE (Mn) : [Ar] $4s^2\ 3d^5$

Siempre referida al Gas Noble anterior

CE Externa (CEE)

CEE (Mn) : $4s^2\ 3d^5$

Sólo los orbitales ocupados del último nivel y orbitales **d** y **f** de niveles inferiores sólo si están incompletos





Datos del libro de Di Risio