

Tema 7. Estructura atómica y sistema periódico

En cursos anteriores ya has estudiado los aspectos básicos de la estructura atómica, que se establecieron entre finales del siglo XIX y principios del XX. En la tabla siguiente se resumen las características de las partículas fundamentales.

Nombre	Símbolo	Carga/C	Carga relativa	Masa en reposo/kg	Masa en reposo/u	Masa en reposo aproximada/u
Electrón	e ⁻	-1,60 10 ⁻¹⁹	-1	9,109 10 ⁻³¹	0,0005	0
Protón	p ⁺	1,60 10 ⁻¹⁹	1	1,672 10 ⁻²⁷	1,0066	1
Neutrón	n	0	0	1,675 10 ⁻²⁷	1,0084	1

Recordarás que el modelo nuclear de Rutherford (1911) proponía que los electrones giraban alrededor del núcleo en órbitas circulares. En el núcleo central se encontraban los protones (los neutrones no se descubrieron hasta 1932).



Forma de representar un átomo de un elemento



- X Símbolo del elemento
- A Número másico ($A = p + n$)
- Z Número atómico ($Z = p$)

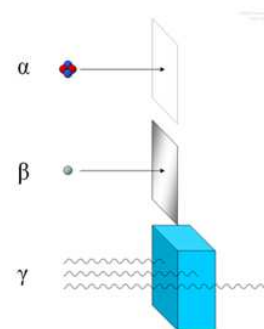
También sabes que la partícula que caracteriza a los elementos químicos es el número de protones nucleares, magnitud llamada **número atómico**. Hay átomos del mismo elemento que tienen diferente número de neutrones -¡los **isótopos**!- y que tienen diferente número de electrones - **iones**, positivos o negativos, cuando se pierden o ganan electrones-.

Sin embargo, debes tener presente que el modelo actual se utiliza porque explica adecuadamente las observaciones experimentales, ya que los modelos fueron cambiando conforme se iban descubriendo nuevos hechos que exigían su modificación.

¿Por qué es estable el núcleo?

Si te paras a pensar un momento, seguro que te das cuenta de por qué se ha planteado la pregunta. Efectivamente, en el núcleo hay protones, de carga positiva, concentrados en un volumen muy pequeño, ya que el radio del núcleo viene a ser la diezmilésima del radio del átomo. Por tanto, ¡las fuerzas repulsivas deben ser enormes!

Pero la presencia de neutrones en el núcleo estabiliza los núcleos mediante fuerzas atractivas nucleares, muy intensas pero de corto alcance (teoría del **campo mesónico de Yukawa**). Eso sí, cuando el número de protones va siendo muy grande, los núcleos se van desestabilizando, convirtiéndose en radiactivos.

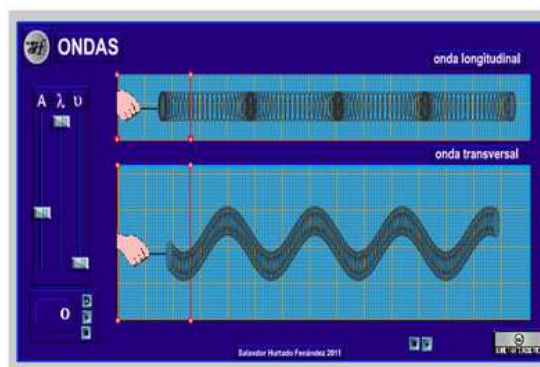
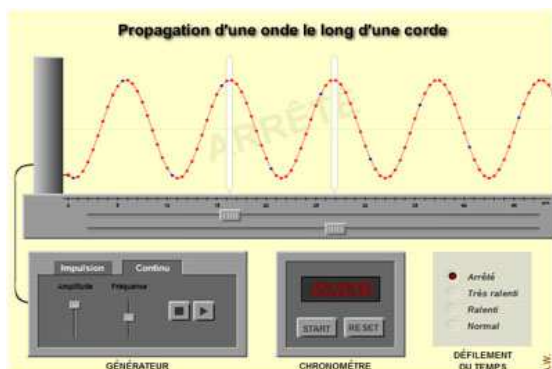


1. Cuantización de la energía

Ondas

La energía se puede transferir entre dos puntos por desplazamiento de materia -un choque, por ejemplo- o mediante un movimiento ondulatorio, una onda, sin desplazamiento de materia. Aunque se estudian en la Física de 2º de Bachillerato, ahora vas a ver dos simulaciones con objeto de que reconozcas sus características fundamentales: tipo de onda, amplitud, longitud de onda, frecuencia, número de ondas y velocidad.

En la primera puedes ver la propagación de un onda en una cuerda. Deteniendo la onda y moviendo las barras deslizadoras puedes determinar la **longitud de onda**, que es la mínima distancia entre dos puntos que se encuentran en el mismo estado de vibración. La **frecuencia** indica la cantidad de ondas que se produce por segundo (su unidad es el hertzio, Hz o s^{-1}), y el **número de ondas** la cantidad de ondas por unidad de longitud (habitualmente, cm^{-1}).



Fíjate en que tanto al producirse un pulso o la onda continua, los puntos de la cuerda vibran perpendicularmente a la dirección de movimiento de la onda, pero no avanzan en esa dirección. Puedes modificar la amplitud y la frecuencia, y determinar los valores de la longitud de onda, la velocidad y el número de ondas.

En la segunda simulación puedes ver cómo se generan ondas en un muelle, diferenciando ondas longitudinales (desplazamiento de la onda en la dirección de la vibración) o transversales (en direcciones perpendiculares).

Por último, hay un tipo especial de ondas que no necesitan materia para propagarse: son las **ondas electromagnéticas**, originadas por la propagación de un campo eléctrico y otro magnético perpendiculares. El caso más conocido es la luz, que se propaga en el vacío a $3 \cdot 10^8$ m/s, pero hay otros tipos de ondas electromagnéticas que te resultarán muy conocidos, como puedes ver en la presentación (ondas de radio, microondas, rayos X, etc).

Fotones

Algunos hechos experimentales descubiertos a partir de la mitad del siglo XIX sugerían que la energía radiante -por ejemplo, la luz-, no se transmitía de forma continua, sino que lo hacía en paquetes discretos (fotones).

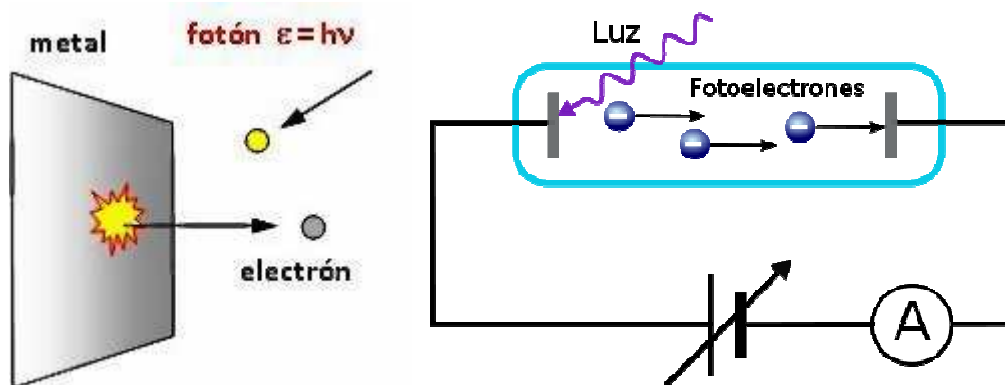
Observando la **radiación del cuerpo negro**, Planck postuló en 1900 que la energía absorbida o emitida por la materia no es continua (no se puede absorber o emitir cualquier cantidad de

energía), sino que se transfiere en unidades elementales de energía, **cuantos de energía o fotones**.

La energía de un fotón es $E = h\nu$, donde h es la constante de Planck ($6,62 \cdot 10^{-34}$ Js) y ν es la frecuencia de la energía radiante absorbida o emitida.

De acuerdo con la física de las ondas, la energía transferida en forma de radiación viene caracterizada por su longitud de onda λ y su frecuencia ν , relacionadas de la forma $\lambda = v/\nu$, donde v es la velocidad de desplazamiento de la onda (en el caso de la radiación electromagnética es la velocidad de la luz, c).

Posteriormente, **Einstein** estudió el **efecto fotoeléctrico** (emisión de electrones por algunos metales al incidir luz sobre ellos), y le dio una explicación basándose en la cuantización propuesta por Planck. Precisamente por eso recibió el premio Nobel en 1921.



1.1 Espectros atómicos

Uno de los avances fundamentales en el conocimiento de la estructura atómica vino originado por el trabajo de los espectroscopistas, que durante la segunda mitad de siglo XIX se dedicaron a recoger las impresiones fotográficas que dejaba la radiación (habitualmente luz) emitida por los diferentes elementos químicos conocidos. Esos registros se conocen con el nombre de **espectros**. Para obtenerlos, se comunicaba una gran cantidad de energía a la sustancia, mediante calor o chispa eléctrica, y utilizando un espectroscopio se analizaba y registraba la radiación emitida.

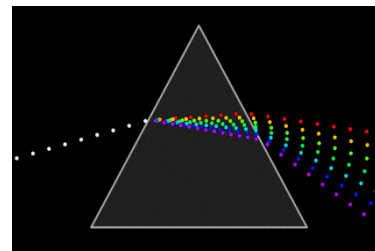
Cuando se calienta sodio o una sal de sodio a la llama, se emite un luz amarillo-naranja muy intensa. En otros casos, la luz es verde, o de otros colores. Y en otras ocasiones, la radiación emitida no es visible por el ojo humano.

También se puede comunicar energía eléctrica utilizando una bobina de Ruhmkorff: si se conectan los extremos de un tubo de descarga, en lugar de formarse un arco eléctrico se produce luz de colores diferentes según cuál sea el gas que hay en el tubo.

La energía de la radiación emitida viene dada por la expresión $E = h\nu = hc/\lambda$, donde E es la energía (J), h es la constante de Planck, ν es la frecuencia (Hz), λ es la longitud de onda (m) y c la velocidad de la luz ($3 \cdot 10^8$ m/s).

De esta ecuación se deduce que la energía de una radiación electromagnética es directamente proporcional a la frecuencia e inversamente proporcional a la longitud de onda. La radiación infrarroja es de menor frecuencia que la visible, y ésta menor que la ultravioleta y los rayos X. De ahí que los rayos X sean más nocivos para la salud que la radiación infrarroja o la luz emitida por una bombilla.

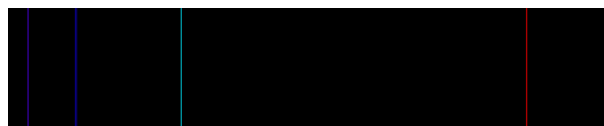
En el caso de la luz, el espectro es continuo, con radiaciones de todas las frecuencias. Pero al calentar un elemento gaseoso hasta que llega a la incandescencia, se produce una emisión de luz que, al hacerla pasar por un prisma, se descompone en forma de un espectro discontinuo, que consta de una serie de líneas correspondientes a determinadas frecuencias y longitudes de onda.



A este tipo de espectros se les conoce como **espectros de emisión**, y tienen como característica fundamental que cada elemento químico presenta un espectro característico propio, específico y diferente de los del resto de elementos, que sirve como "**huella digital**" permitiendo identificarlo fácilmente. De esa forma se descubrió el helio, identificando un elemento desconocido al realizar el análisis espectral de la radiación solar durante un eclipse de sol en 1868.

La ecuación de Rydberg

El espectro más sencillo y estudiado es el del hidrógeno. Las líneas que aparecen en la imagen corresponden a la zona visible, y forman la llamada serie de Balmer. Hay otra serie en la zona ultravioleta, más energética (serie de Lyman) y tres más en el infrarrojo (series de Paschen, Brackett y Pfund).



Analizando las longitudes de onda de las radiaciones emitidas, Balmer obtuvo en 1885 una ecuación puramente experimental que permitía reproducir las líneas correspondientes a las cinco series, en la que R es la constante de Rydberg ($1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$).

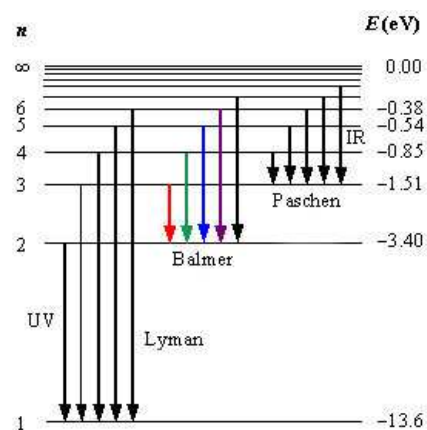
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Para la serie de Lyman, $n_1=1$ y $n_2=2,3,4,5,\dots$. Para las de Balmer, Paschen, Brackett y Pfund, n_1 es 2, 3, 4 ó 5, respectivamente, y n_2 es un número entero mayor que n_1 .

2. El modelo de Bohr

En 1913, Bohr aplicó la teoría cuántica de Planck y las leyes de la mecánica de Newton al modelo atómico de Rutherford, proponiendo que el átomo está cuantizado; es decir, que **el electrón no puede girar a cualquier distancia del núcleo ni tener cualquier energía, sino solamente algunas de entre todas las posibles.**

Este modelo se basa en **tres postulados**:



1. El electrón gira alrededor del núcleo en órbitas circulares estacionarias, en las que el electrón es estable y no emite energía.
2. Solamente son posibles las órbitas en las que el momento angular del electrón es un múltiplo entero de $h/2\pi$. Es decir, $mvr = nh/2\pi$
3. Cuando un electrón pasa de una órbita a otra de menor energía, la diferencia energética se emite en forma de fotones, de acuerdo con la ecuación de Planck, dando lugar a los espectros de emisión.

El primer principio va en contra de la física clásica, ya que las partículas cargadas, como los electrones, cuando llevan movimiento acelerado pierden energía, por lo que el electrón debería caer sobre el núcleo. Y el segundo no tiene ninguna base física, ya que Bohr lo introdujo para ajustar sus cálculos a los resultados experimentales.

Cuando se resuelve el planteamiento matemático del modelo, se obtiene que tanto el radio de giro del electrón en las órbitas como sus energías respectivas dependen de un número, n , que limita las posiciones y energías del electrón en el átomo. Tiene valores enteros a partir de 1, y se llama **número cuántico principal**.

$$r = a_0 n^2$$
$$E = -\frac{E_0}{n^2}$$

donde a_0 y E_0 son los valores del radio de giro y de la energía del electrón en la primera órbita, con $n=1$ y tienen unos valores de 0,529 angstroms y -13,6 eV respectivamente.

Observa que al aumentar n las órbitas se van haciendo más grandes (con radios $a_0, 4a_0, 9a_0, 16a_0$, etc).

Cuando un electrón pasa de una órbita en la que tiene más energía (n_2) hasta otra de menor energía (n_1 , más interna), emite la energía radiante correspondiente a esa diferencia energética $\Delta E = E_2 - E_1$. Teniendo en cuenta la ecuación de Planck:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = -\frac{E_0}{n_2^2} - \left(-\frac{E_0}{n_1^2}\right) = E_0 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

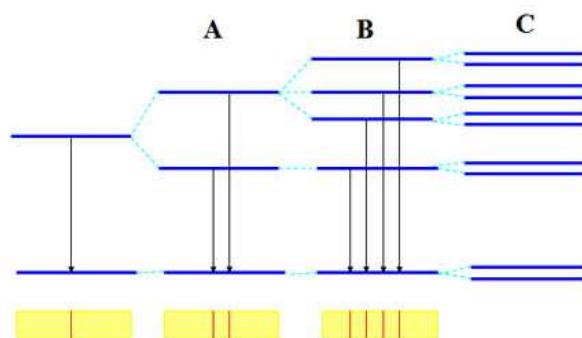
$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc} = \frac{E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

Éste fue el **gran éxito de Bohr**: aplicando su método, llegó a obtener la misma ecuación experimental a que habían llegado los espectroscopistas, con los mismos valores de la constante R y de los números n_1 y n_2 . ¡Pero ahora tenían un significado físico, relacionado con la situación y energía de los electrones en el átomo!

Como habrás observado, se habla de **órbitas** y de **niveles de energía** de forma prácticamente indistinta: en un caso se hace referencia a la situación de electrón en el átomo, y en el otro a la energía que tiene en cada una de ellas. En la imagen puedes ver el origen de las series espectrales del hidrógeno.

2.1 Números cuánticos

Al ir mejorando la calidad de los espectroscopios utilizados, se observó que algunas de las líneas que aparecían en los espectros en realidad estaban formadas por dos líneas muy juntas. Es decir, donde había una única transición entre niveles energéticos, en realidad había dos, lo que significa que no había un único nivel energético inicial, sino dos de energía muy parecida (A en la imagen).



Para explicar este hecho experimental, Sommerfeld completó el modelo de Bohr, proponiendo que los electrones podían moverse en órbitas elípticas, además de en circulares. Para ello, tuvo que introducir un número relacionado con la excentricidad de la elipse, **l** o **número cuántico secundario**, que toma valores entre 0 y $n-1$.

De esta forma, si $n=2$, puede haber dos órbitas, con $l=0$ o con $l=1$: precisamente los dos niveles de origen en las transiciones energéticas hasta la órbita con $n=1$.

Por otra parte, al realizar los espectros bajo la influencia de un campo magnético se observaba otro desdoblamiento de líneas en tres, cinco o siete (efecto Zeeman). En consecuencia, el nivel energético de origen se desdobla en tres, cinco o siete niveles energéticos donde solamente hay uno sin campo magnético.

Es necesario un nuevo número cuántico para dar cabida a este hecho: el **número cuántico magnético m**, que depende del valor de l , y toma valores entre $-l$ y $+l$ pasando por 0. Está relacionado con la orientación espacial de las órbitas.

Fíjate en la imagen: la parte A corresponde al espectro de emisión sin campo magnético, mientras que la parte derecha se ha realizado con campo magnético. Donde hay tres niveles con la misma energía (se llaman **degenerados**), se desdoblan en tres niveles de energía diferente, que dan lugar a tres líneas espectrales. Como las energías de esos niveles son muy parecidas, las tres diferencias de energías también lo son, y las tres líneas espectrales están muy juntas en el registro espectral.

Por último, observa en C que todos los niveles se desdoblan en dos. Este hecho está relacionado con una propiedad del electrón llamada **spin**.

Los números cuánticos

La situación y energía del electrón en el átomo de hidrógeno viene determinada por tres números cuánticos:

- **n**, número cuántico **principal**, que toma valores enteros 1, 2, 3, etc.
- **l**, número cuántico **secundario**, que para cada valor de n toma valores desde 0 hasta n-1.
- **m**, número cuántico **magnético**, que para cada valor de l toma valores -l, ..., 0, ..., +l.

3. Mecánica cuántica ondulatoria

A pesar de las sucesivas correcciones del modelo atómico de Bohr, éste se manifestaba insuficiente para dar una explicación de todos los fenómenos y experiencias a escala atómica, además de no ser aplicable a átomos con más de un electrón.

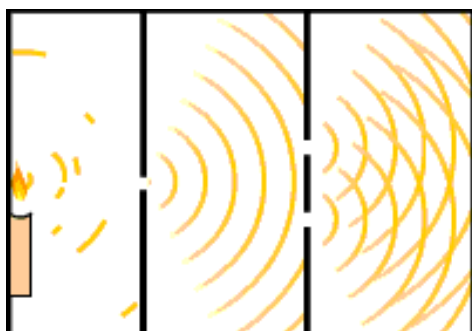
La necesidad de introducir, de forma un tanto arbitraria, nuevos números cuánticos para poder explicar los nuevos hechos experimentales mediante la teoría original de Bohr es consecuencia del hecho de que ésta es una aplicación de las ideas cuánticas a la mecánica clásica. Es decir, los principios y leyes de la escala macroscópica se aplican a escala microscópica con algunas correcciones, cuando lo que se ha de cambiar es el planteamiento del problema, **un nuevo "punto de vista" bajo el cual observar el fenómeno.**

Junto con la ecuación de Planck, dos ideas surgidas después de 1920 dieron origen a un nuevo planteamiento para elaborar un modelo de átomo, la **mecánica cuántica ondulatoria**:

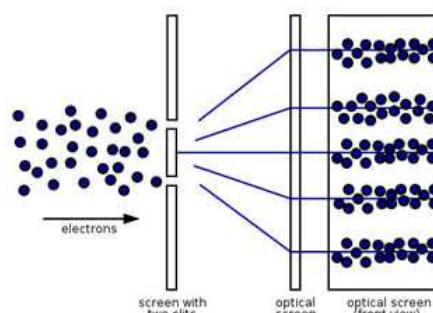
- La **dualidad onda-corpúsculo** de **De Broglie**.
- El **principio de incertidumbre** de **Heisenberg**.

3.1 Hipótesis de De Broglie

En 1923, De Broglie lanzó la hipótesis de que la materia en general también presenta el doble comportamiento que presentaba la luz, esa dualidad onda-corpúsculo. No se quedó en el planteamiento cualitativo, extraordinariamente atrevido, sino que lo reflejó en la expresión $\lambda = h/mv$, en la que m es la masa de la partícula, v la velocidad con la que se mueve y λ la longitud de onda asociada a su movimiento. Esta hipótesis fue comprobada experimentalmente por Davidson y Germer en 1927, que observaron que una corriente de electrones se difractaba, fenómeno típicamente ondulatorio.



Fíjate en las imágenes. A la izquierda se ve la experiencia de las dos rendijas de Young con una fuente de luz, de manera que interfieren los dos haces de luz. A la derecha se observa el comportamiento ondulatorio de una corriente



de electrones que pasa a través de dos rendijas, dando lugar a bandas de interferencia en la pantalla en la que inciden los electrones.

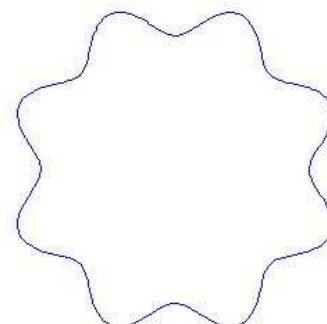
En el caso de un electrón que se mueva a una velocidad que sea la décima parte de la de la luz, su onda asociada tiene una λ de 0,242 angstroms, del orden del tamaño de la zona en la que se mueve el electrón del átomo de hidrógeno. Solamente tienes que sustituir en la expresión de De Broglie los valores de la masa del electrón ($9,1 \cdot 10^{-31}$ kg), la constante de Planck ($6,62 \cdot 10^{-34}$ Js) y la velocidad de la luz ($3 \cdot 10^8$ m/s).

La hipótesis de De Broglie y el modelo de Bohr

Si consideras un electrón que gira en una órbita circular, como proponía Bohr, pero tienes en cuenta su naturaleza ondulatoria -la onda asociada a su movimiento-, la longitud de la trayectoria circular debe ser un múltiplo entero de la longitud de onda para que la órbita sea estable, como puedes ver en la imagen.

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{mv} \qquad mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

Fíjate en que la conclusión que se alcanza es precisamente el segundo postulado de Bohr.



3.2 Principio de incertidumbre de Heisenberg

Enunciado por Heisenberg en 1927, el principio de **incertidumbre** o de **indeterminación** afirma que no se puede conocer a la vez y con total exactitud la posición de una partícula en movimiento y cualquier magnitud relacionada con su velocidad (velocidad, energía cinética ó momento lineal mv). El producto de los errores cometidos en el caso de posición y velocidad es de:

$$\Delta x \Delta v \geq \frac{h}{4\pi m}$$

El carácter ondulatorio del electrón viene asociado cualitativamente a la idea de una cierta deslocalización que impide situar al electrón en un punto determinado, e introduce un grado de indeterminación en el movimiento que puede seguir el electrón, que, en consecuencia, carece de una trayectoria absolutamente determinada.

Una forma de interpretar esta indeterminación es que es una consecuencia del mismo proceso de medida, que, como toda interacción, perturba aquello que se observa, y que solamente **se manifiesta en partículas de masa muy pequeña que se mueven a altas velocidades**.

De forma simplificada, es imposible "ver" un electrón, porque habría que "iluminarlo", de manera que el electrón absorbería la radiación incidente, incrementaría enormemente su energía cinética y cambiaría su posición, con lo que no podríamos saber dónde estaba. Naturalmente, este hecho es inapreciable en la vida ordinaria (¡tu posición no cambia porque estés expuesto a la luz del sol!).

La consecuencia más importante es que hay que **modificar el concepto de órbita** del modelo de Bohr-Sommerfeld, ya que en una órbita se sabe con total exactitud dónde está el electrón -su radio de giro- y la energía que tiene.

La mecánica cuántica propone el **concepto de orbital**, relacionándolo con la zona del espacio en la que es muy probable encontrar al electrón, por lo que se habla de "nube" electrónica. Es decir, no hay total seguridad sobre su situación, manteniéndose un cierto grado de "incertidumbre".

Al sustituir el valor de la masa del electrón en el principio de incertidumbre, se obtiene que $\Delta x \Delta v \geq 5,76 \cdot 10^{-5}$. Es decir, un error en la posición del orden de 1 angstrom (10^{-10} m), que supone prácticamente el desconocimiento de la situación del electrón, ya que el tamaño del átomo de hidrógeno es de ese orden, lleva a un error en la velocidad de $5,76 \cdot 10^5$ m/s. Considerando que la velocidad media del electrón es del orden de $3 \cdot 10^6$ m/s (la centésima parte de la velocidad de la luz), el error en la velocidad es del orden del 20%.

4. Orbitales atómicos

El desarrollo de la mecánica cuántica ondulatoria lo realizaron Heisenberg, Dirac y Schrödinger hacia 1927. Su planteamiento excede con mucho los límites del Bachillerato, por lo que solamente vas a ver algunas de las ideas de partida, así como las conclusiones más importantes necesarias para estudiar la estructura electrónica de los átomos.

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

Ψ : función de onda

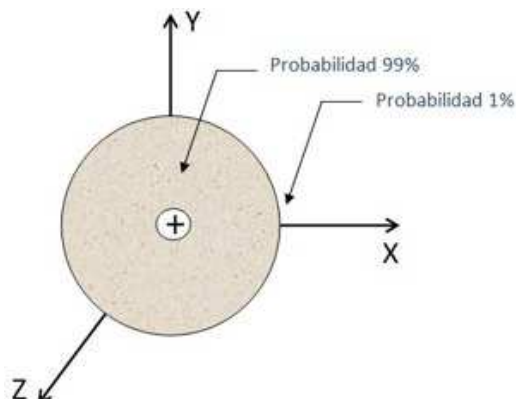
m : masa del electrón

h : constante de Planck

E : energía total del electrón (dependen de sus coordenadas x, y, z)

V : energía potencial del electrón (dependen de sus coordenadas x, y, z)

- Se aplica al átomo de hidrógeno, con un solo electrón, y se basa en la **resolución de una ecuación** que proporciona como resultados las funciones de onda, llamadas funciones orbitales, que representan los posibles estados del electrón en el átomo. A la vez, se obtiene la energía del electrón en cada una de esos estados. En la imagen puedes ver la **ecuación de onda de Schrödinger**, en la que m es la masa del electrón y h la constante de Planck.
- Las **funciones orbitales** se suelen llamar orbitales, y son funciones matemáticas ondulatorias muy complejas.
- Dependen del valor de **tres números**, llamados **números cuánticos**, que tienen exactamente los mismos nombres y valores que los obtenidos aplicando el modelo de Bohr. Aparecen al resolver la ecuación de onda, no de forma arbitraria como sucede en el modelo de Bohr.
- El **significado físico** lo proporciona el cuadrado de Ψ . Para cada punto del espacio, indica la probabilidad de que un electrón se encuentre en ese punto. Por tanto, **se sustituye el concepto de trayectoria definida por una partícula por el de probabilidad de localizarla en una determinada región del espacio**.



Concepto de orbital o función orbital

Se entiende por **orbital** la función matemática que describe cada uno de los **posibles estados del electrón en un átomo**, caracterizados por los valores de los números cuánticos $\Psi(n, l, m)$. Para tener una idea visual de su significado, también se suele llamar orbital a la **zona del espacio en la que es muy probable encontrar un electrón**. Se delimita por una superficie dentro de la cual hay un 95% o 99% de probabilidad de encontrar al electrón. Dependiendo de cuál sea el orbital, tiene formas y tamaños diferentes.

¿Orbitales vacíos?

Aunque se dice habitualmente que un orbital está vacío, **la terminología no es correcta**. La situación de un electrón en un átomo queda descrita mediante una función orbital (un orbital): si no hay electrón, no hay orbital. Por tanto, no es lo más adecuado representar los orbitales mediante cajas, vacías o con electrones, pero se utiliza con frecuencia, ya que permite visualizar de una forma sencilla la situación de los electrones en los átomos.

4.1 Números cuánticos y orbitales

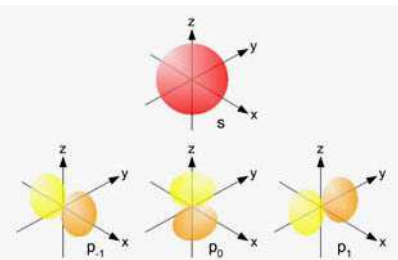
Los orbitales se nombran indicando el valor de n y una letra dependiendo del valor de l (**s** si $l=0$; **p** si $l=1$; **d** si $l=2$ y **f** si $l=3$). En la tabla adjunta se detallan los nombres de todos los orbitales posibles hasta $n=4$. En el caso de los orbitales p , se indica con un subíndice la orientación, x , y ó z (no es necesario que sepas los nombres exactos de los orbitales d ó f).

n	l	m	orbital
1	0	0	1s
2	0	0	2s
	1	-1, 0, 1	2p (2p _y , 2p _z , 2p _x)
3	0	0	3s
	1	-1, 0, 1	3p (3p _y , 3p _z , 3p _x)
	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d
4	0	0	4s
	1	-1, 0, 1	4p (4p _y , 4p _z , 4p _x)
	2	-2, -1, 0, 1, 2	4d
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f

Características físicas de los orbitales

Las características de los orbitales en los que se encuentran los últimos electrones determinan las propiedades de los átomos y, en definitiva, de las sustancias: reactividad, tipo de enlace, geometría molecular, etc. Por esa razón, es muy importante que compares y diferencies las características físicas de los orbitales, de acuerdo con la tabla siguiente. Ten en cuenta que el "tamaño" de un orbital debes entenderlo como el volumen encerrado por la superficie límite dentro de la cual hay una probabilidad determinada de encontrar al electrón que se encuentra en ese estado.

n	Tamaño y energía Al aumentar n , el orbital es más grande y tiene más energía
l	Forma y energía s : esférico; p : doble lóbulo; d : cuatro lóbulos; f : ocho lóbulos Al aumentar l la energía aumenta un poco
m	Orientación p _x , p _y , p _z : orientados según los respectivos ejes



En la imagen puedes ver los diferentes tipos de orbitales para $n=2$: un orbital s y tres orbitales p . Los tres orbitales p con igual n tienen la misma energía, y se dice que están **degenerados**. Lo mismo sucede con los cinco orbitales d y los siete orbitales f .

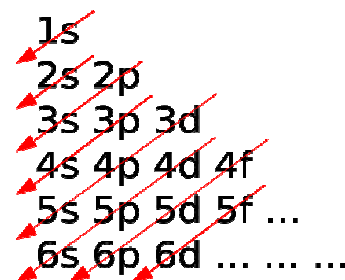
5. Configuraciones electrónicas

El átomo de hidrógeno tiene un único electrón. ¿Qué orbital describirá su situación en el átomo? ¿Qué sucederá en el caso del helio, que tiene dos electrones? Y al continuar el proceso, pasando de un elemento químico al siguiente, que tiene un electrón más, ¿cómo se van modificando las estructuras electrónicas?

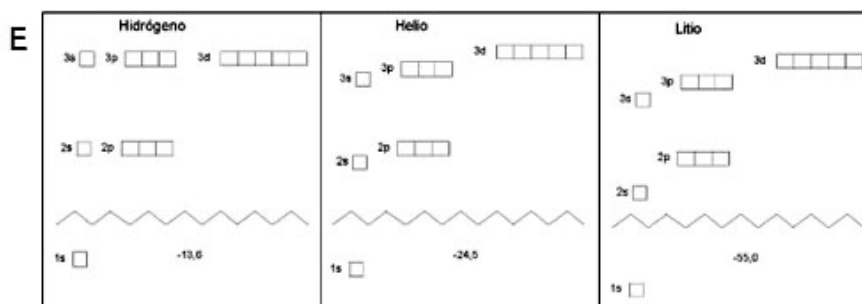
En primer lugar, se sigue el **principio de mínima energía**. El **estado fundamental** de un átomo es el de menor energía, aquél en que los electrones están en los orbitales de menor energía posible. Si un átomo absorbe energía, el electrón más externo, que está más débilmente ligado al núcleo, pasa a un orbital de mayor energía; se trata de un **estado excitado**.

El conjunto de orbitales que tienen energías parecidas se llama **capa**. Cada capa se caracteriza por el número cuántico principal n de los orbitales que la forman.

¿Cuál es la secuencia de energía de los diferentes orbitales? Para recordarla, en la imagen de la derecha puedes ver el diagrama de Möeller, que indica la **secuencia de ocupación de orbitales**, en el orden que marca la flecha.



1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d



De momento, fíjate en la secuencia de niveles de energía. El orbital 4s tiene menor energía que el 3d, y por esa razón se colocan en él los electrones antes que en el 3d.

Alteraciones de ese tipo se producen después: tras el 4p se

llena el 5s, luego el 4d, etc. Se debe a las interacciones entre todos los electrones que hay en los átomos polielectrónicos.

Como verás más adelante, la forma más sencilla de recordar la secuencia energética es utilizar la tabla periódica, así que no es necesario que uses el diagrama de Möeller.

La **diferencia de energía entre capas electrónicas va disminuyendo**: de la primera a la segunda es muy grande, pero se hace menor de la segunda a la tercera, todavía menor de la tercera a la cuarta, etc.

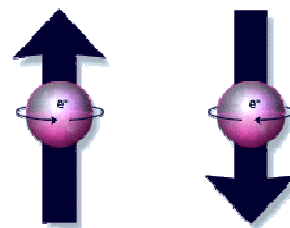
Además, **la energía de los niveles va siendo menor conforme aumenta el número atómico del elemento**, ya que hay más protones en el núcleo para atraer los electrones (la energía del orbital 1s del H es de -13.5 eV, mientras que la del mismo orbital del litio es -55 eV). También cambian las diferencias energéticas entre niveles, lo que permite explicar que las transiciones energéticas, y, por tanto los espectros, sean diferentes para cada elemento químico.

5.1 Principios de Pauli y de Hund

El número cuántico de spin

Para describir la situación de los electrones en el átomo hace falta utilizar un número cuántico más s , llamado de **spin**. Está relacionado con una propiedad del electrón que puede tener dos valores, $+1/2$ ó $-1/2$.

Todavía se piensa que tiene que ver con el giro del electrón sobre sí mismo como una peonza (de ahí viene el nombre). En la imagen se ven los dos sentidos de giro del electrón, en el sentido de las agujas del reloj o al revés, pero no está demostrado que ese hecho realmente se produzca (¿se ha "visto" alguna vez un electrón?).



La situación del electrón en el átomo

Para describir la situación de un electrón en un átomo hay que utilizar cuatro números cuánticos: tres referidos al orbital (n , l y m) y uno referido al propio electrón (s).

Como ya has visto, para determinar la situación de todos los electrones de un átomo hay que tener en cuenta el **principio de mínima energía**, relacionado con la energía de los orbitales. Además, hay que tener en cuenta otros dos principios, que tienen que ver son el spin de los electrones.

Principio de exclusión de Pauli

En un átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales. Como un orbital que caracterizado por tres números cuánticos y el cuarto es el de spin, en un orbital concreto puede haber dos electrones, uno de spin $+1/2$ y otro de spin $-1/2$. Un tercer electrón tendría spin $+1/2$ o $-1/2$, y coincidirían sus cuatro números cuánticos con los de uno de los dos electrones anteriores.

Esa es la consecuencia práctica: **en un orbital puede haber dos electrones como máximo**.

Principio de máxima multiplicidad de Hund

La multiplicidad es una medida del número de **electrones desapareados** que hay en un átomo (electrones solos en un orbital; es decir, orbitales semillenos). Tiene comprobación experimental mediante la medida de las propiedades magnéticas de los átomos.

Los **orbitales degenerados** de un átomo (los tres orbitales $2p$, por ejemplo) en primer lugar se semillenan, colocándose un electrón en cada uno de los orbitales p_x , p_y y p_z , y después se termina de llenar cada uno de ellos. De esta forma se alcanza una **multiplicidad máxima** en cada caso.

Para escribir estructuras electrónicas

1. Se llenan los orbitales de menor energía posible (principio de mínima energía).
2. En cada orbital solamente pueden situarse dos electrones (principio de exclusión de Pauli).
3. Los orbitales degenerados (p , d , f) primero se semillenan y después se terminan de llenar (principio de máxima multiplicidad de Hund).

5.2 Estructuras electrónicas de los átomos

Escribir la estructura electrónica del litio, que tiene 3 electrones, es muy sencillo. Pero la del cesio, que tiene 55, seguro que resulta mucho más complicada de escribir. Para simplificar, cuando los orbitales degenerados están llenos, no se detallan (se escribe $2p^6$). Y cuando hay un solo electrón en el orbital no es necesario detallarlo ($2s$ equivale a $2s^1$).

Si te fijas en las estructuras electrónicas, verás que cuando se pasa de un gas noble al elemento siguiente, añadiendo un electrón y un protón, el nuevo electrón tiene un número cuántico principal una unidad mayor que el último electrón del gas noble: está situado en la capa siguiente. Luego los gases nobles tienen la capa más externa completa (además, fíjate en que el número de la capa más externa ocupada coincide con el número cuántico principal).

Pero, y sobre todo, se tiene en cuenta que las propiedades de los elementos dependen de la configuración electrónica en la capa más externa. Por tanto, esa es la única que se detalla, y **para indicar las capas interiores se escribe entre corchetes el símbolo del gas noble que tiene todas las capas interiores completas**.

De esta forma, la estructura del cesio se escribe $[\text{Xe}] 6s$, ya que el xenon tiene completas las cinco primeras capas electrónicas, mientras que el cesio tiene un único electrón en la sexta. Los gases nobles, elementos que tienen la capa completa, son He (1^a), Ne (2^a), Ar (3^a), Kr (4^a), Xe (5^a) y Rn (6^a).

Estructuras electrónicas teóricas y reales

Cuando los últimos electrones están en orbitales de tipos d ó f, en algunos casos se dan estructuras electrónicas que no coinciden con las que se obtienen aplicando los principios que ya conoces. No va a suponer ninguna dificultad, porque solamente vas a trabajar con elementos cuyo último electrón está en orbitales de tipo s ó p (elementos llamados representativos).

6. El sistema periódico y su evolución

Después de haber establecido la estructura electrónica de los átomos, el paso siguiente es relacionarla con las propiedades de los elementos.

La Tabla Periódica es una ordenación bidimensional que refleja esa relación. Es la tabla de datos fundamental de la Química, y es muy importante que sepas utilizarla porque, independientemente de si conoces o no un elemento, puedes ser capaz de predecir algunas de sus propiedades de forma muy sencilla: los iones que formará, el tipo de sustancias a que dará lugar, etc. Son las llamadas **propiedades periódicas**.

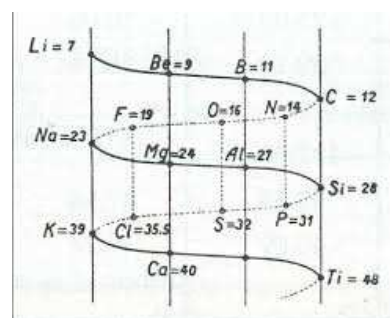
¡Cada vez es más difícil encontrar nuevos elementos! En 2010 se conocían 114 elementos, el último de ellos sintetizado en laboratorio en 2009, aunque hay noticias de que se han obtenido algunos átomos del elemento 116. Solamente se consigue de vez en cuando en centros de investigación que disponen de aceleradores de partículas y tras procesos muy laboriosos (el laboratorio de Darmstadt, en Alemania, destaca por haberse descubierto en él los últimos elementos). Hasta hay quien dedica una canción a un nuevo elemento: el "Eminemium".

Piensa en que en 1250 se conocían apenas 10 elementos y que hubo que esperar hasta 1669 para conocer 14. En 1771 se llegó a los 20, y a 62 en 1868. En 1935, en pleno desarrollo de la mecánica cuántica ondulatoria, se alcanzaban los 88, y los 109 en 2006. Los últimos elementos se obtienen en cantidades muy pequeñas y pueden transcurrir años hasta que se reconocen definitivamente como nuevos elementos químicos.

Ordenaciones periódicas

Con la aplicación de las técnicas experimentales, en el siglo XIX se constató que había elementos químicos que tenían propiedades parecidas. De esta forma, comenzaron a proponerse ordenaciones de elementos que tenían propiedades similares.

En las **triadas de Dobereiner** había grupos de tres elementos de forma que el de en medio tenía una masa relativa promedio de la masa de los otros dos; el **caracol telúrico de Chancourtois** era un cilindro con los elementos ordenados siguiendo una espiral, y los elementos con propiedades parecidas estaban en la misma vertical; y las **octavas de Newlands** eran grupos de ocho elementos que se colocaban uno encima de otro, y los elementos con propiedades parecidas también quedaban uno encima de otro.



En 1869, El alemán Lothar Meyer y el ruso Dimitri Mendeleiev establecieron una **ordenación de elementos por orden creciente de masa atómica**, de manera que **los elementos que estaban en la misma columna tenían propiedades físicas y químicas parecidas**. Pero fue Mendeleiev el que publicó antes sus resultados y el que se ha llevado el reconocimiento universal.

En la imagen tienes esa primera ordenación, que es relativamente parecida a la tabla periódica que se utiliza en la actualidad.

Observa que hay dos elementos, de masas atómicas 68 y 70, que se indican con un interrogante. Eran elementos desconocidos entonces, pero que se descubrieron pocos años después. Observa la tabla y fíjate en la precisión de las previsiones de Mendeleiev, basadas en la repetición periódica de las propiedades.

ОПЫТЪ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВЪ.

ОСНОВАННОЙ НА ИХЪ АТОМНОМЪ ВѢСѢ И ХИМИЧЕСКОМЪ СХОДСТВѢ.

	Ti = 50	Zr = 90	? = 180.		
	V = 51	Nb = 94	Ta = 182.		
	Cr = 52	Mo = 96	W = 186.		
	Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4.		
	Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198.		
	Ni = Co = 59	Pd = 106,8	Os = 199.		
H = 1	Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200.		
Be = 9,4	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112		
B = 11	Al = 27,1	? = 68	U = 116	Lu = 197?	
C = 12	Si = 28	? = 70	Sn = 118		
N = 14	P = 31	As = 75	Sb = 122	Bi = 210?	
O = 16	S = 32	Se = 79,4	Te = 128?		
F = 19	Cl = 35,5	Br = 80	I = 127		
Li = 7	Na = 23	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133	Tl = 204.
		Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137	Pb = 207.
		? = 45	Ce = 92		
		?Er = 56	La = 94		
		?Yt = 60	Di = 95		
		?In = 75,5	Th = 118?		

Д. Менделѣевъ

Propiedad	Ekasilicio	Germanio
Masa atómica	72	72,6
Densidad	5,5	5,36
Color	Gris	Gris
Punto de fusión	Alto	998 °C
Acción del aire	Al calentar da un polvo blanco	Al calentar da un polvo blanco
Fórmula del óxido	XO ₂	GeO ₂
Propiedades del cloruro	XCl ₄ , densidad 1,9 g/cm ³	GeCl ₄ , densidad 1,88 g/cm ³

Éste fue su gran éxito y la razón por la que se le considera el padre de la tabla periódica.

Sin embargo, la **tabla actual** es diferente. Propuesta ya en el siglo XX, se debe a **Werner y Paneth**, tiene 18 columnas y 7 filas y los **elementos ordenados por orden creciente de número atómico**. La ordenación resultante difiere poco de la de Mendeleiev: hay tres parejas de elementos en los que un elemento está precedido por otro de masa atómica mayor, como es el caso del telurio, de masa relativa 127,6 y el yodo, de masa relativa 126,9.

Criterio de ordenación de elementos

El criterio de ordenación de elementos en la tabla periódica actual es el **orden creciente de número atómico**, de izquierda a derecha y de arriba a abajo de manera que en la misma columna (grupo o familia) queden dispuestos los elementos con propiedades químicas parecidas.

Hay tres elementos descubiertos por españoles

En 1748 Antonio de Ulloa descubrió el platino en Colombia; en 1783 los hermanos Elhúyar aislaron el wolframio en Méjico, y en 1801 Antonio José del Rio descubrió en Méjico el vanadio (aunque recibió este nombre 30 años después).

7. El sistema periódico actual

En primer lugar, es importante que reconozcas la forma y distribución de la tabla. Puedes imprimir la tabla siguiente para tenerla a mano cuando la necesites, o pulsar sobre ella para verla ampliada con todo detalle.



Tabla Periódica de los Elementos

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B	VIII B	IX B	X B	XIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1 H 1,00784	2 He 4,002602											3 B 10,811	4 C 12,0107	5 N 14,00643	6 O 15,999	7 F 18,9984032	8 Ne 20,1797
3 Li 6,941	4 Be 9,012182											13 Al 26,981538	14 Si 28,0855	15 P 30,973761998	16 S 32,06	17 Cl 35,453	18 Ar 39,948
11 Na 22,98976928	12 Mg 24,304	21 Sc 44,955910	22 Ti 47,867	23 V 50,9415	24 Cr 51,9961	25 Mn 54,938045	26 Fe 55,845	27 Co 58,933200	28 Ni 58,6934	29 Cu 63,546	30 Zn 65,409	31 Ga 69,723	32 Ge 72,64	33 As 74,92160	34 Se 78,96	35 Br 79,904	36 Kr 83,798
19 K 39,0983	20 Ca 40,078	39 Y 88,90585	40 Zr 91,224	41 Nb 92,90638	42 Mo 95,94	43 Tc 98	44 Ru 101,07	45 Rh 102,90550	46 Pd 106,42	47 Ag 107,8682	48 Cd 112,411	49 In 114,818	50 Sn 118,710	51 Sb 121,760	52 Te 127,60	53 I 126,90447	54 Xe 131,293
37 Rb 85,4678	38 Sr 87,62	72 Hf 178,49	73 Ta 180,9479	74 W 183,84	75 Re 186,207	76 Os 190,23	77 Ir 192,217	78 Pt 195,078	79 Au 196,96655	80 Hg 200,59	81 Tl 204,3833	82 Pb 207,2	83 Bi 208,98038	84 Po 209	85 At 210	86 Rn 222	
55 Cs 132,90545	56 Ba 137,327	57 to 71										113 Nh 284	114 Fl 289	115 Mc 288	116 Lv 293	117 Ts 294	118 Og 294
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 to 103										119 Uue (289)	120 Uuq (292)	121 Uup (293)	122 Uuh (294)	123 Uus (297)	124 Uuo (299)
Atomic masses in parentheses are those of the most stable or common isotope.																	
<p>Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-118 are the Latin equivalents of those numbers.</p>																	

Características de la tabla

- Las columnas se llaman **grupos**. La tabla actual consta de 18 grupos. Reciben este nombre por agrupar elementos de propiedades químicas similares.
- Las filas de la tabla se llaman **periodos**. Hay 7 periodos. Dentro de cada uno de ellos, los elementos están ordenados por número atómico creciente de izquierda a derecha.
- Hay dos filas de 14 elementos fuera de la tabla. En realidad, deberían estar situadas a la derecha del bario y el radio, pero se colocan fuera porque la tabla quedaría demasiado alargada, y su manejo resultaría incómodo.

Grupos cuyo nombre debes saber

1. Alcalinos.
2. Alcalinotérreos.
17. Halógenos.
18. Gases nobles.

También **es importante que sepas los elementos del segundo periodo**: Li, Be, B, C, N, O, F y Ne, ya que te permitirán situar al resto de los elementos de sus respectivos grupos.

7.1 Estructuras electrónicas y sistema periódico

Grupos, periodos y configuración electrónica

Dentro de un mismo grupo todos los elementos tienen la misma configuración electrónica en su última capa (conocida como capa de valencia), en la que tienen tantos electrones como el número del grupo en que se encuentran.

En los elementos de un mismo periodo el último electrón está situado en la misma capa, que corresponde al número de periodo. Puedes comprobarlo utilizando cualquiera de los simuladores disponibles.

Zonas de la tabla

Por último, vas a aprender cómo sabiendo dónde está un elemento en la tabla puedes escribir su configuración electrónica, y cómo sabiendo ésta puedes situar al elemento en la tabla.

Utilizando de nuevo el simulador, ve recorriendo los elementos de la tabla en orden creciente de número atómico: desde el Hidrógeno al Helio, siguiendo por el Li, Be, B, etc (al terminar un periodo, pasas al primer elemento del siguiente). De esa forma, vas añadiendo un electrón cada vez que pasas al elemento siguiente (el electrón diferenciador). ¡Fíjate en las estructuras electrónicas!

En la imagen siguiente se reflejan las conclusiones que puedes obtener:

1. La zona amarilla es la zona s, porque los elementos situados en ella tienen su último electrón en un orbital s, que está precisamente en la capa dada por el periodo (en el Li en la segunda capa, 2s, por estar el Li en el segundo periodo; en el K en el 3s, etc). Se indica **ns**, donde n es el número del periodo.

- En la zona verde el último electrón está en un orbital p, caracterizado por el número del periodo. Se indica **np**, donde n es el número del periodo.
- En la zona azul el último electrón está en un orbital d, caracterizado por el número anterior al periodo en el que se encuentra el elemento. Por eso se indica **(n-1)d**.
- Finalmente, la zona marrón se indica **(n-2)f** ya que el último electrón está en un orbital f, pero dos unidades inferior al número del periodo.

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Periodo																		
1	H 1s ¹																	He 1s ²
2	Li 2s ¹	Be 2s ²											B 2p ¹	C 2p ²	N 2p ³	O 2p ⁴	F 2p ⁵	Ne 2p ⁶
3	Na 3s ¹	Mg 3s ²											Al 3p ¹	Si 3p ²	P 3p ³	S 3p ⁴	Cl 3p ⁵	Ar 3p ⁶
4	K 4s ¹	Ca 4s ²	Sc 3d ¹	Ti 3d ²	V 3d ³	Cr 3d ⁴	Mn 3d ⁵	Fe 3d ⁶	Co 3d ⁷	Ni 3d ⁸	Cu 3d ⁹	Zn 3d ¹⁰	Ga 4p ¹	Ge 4p ²	As 4p ³	Se 4p ⁴	Br 4p ⁵	Kr 4p ⁶
5	Rb 5s ¹	Sr 5s ²	Y 4d ¹	Zr 4d ²	Nb 4d ³	Mo 4d ⁴	Tc 4d ⁵	Ru 4d ⁶	Rh 4d ⁷	Pd 4d ⁸	Ag 4d ⁹	Cd 4d ¹⁰	In 5p ¹	Sn 5p ²	Sb 5p ³	Te 5p ⁴	I 5p ⁵	Xe 5p ⁶
6	Cs 6s ¹	Ba 6s ²	*	Hf 5d ²	Ta 5d ³	W 5d ⁴	Re 5d ⁵	Os 5d ⁶	Ir 5d ⁷	Pt 5d ⁸	Au 5d ⁹	Hg 5d ¹⁰	Tl 6p ¹	Pb 6p ²	Bi 6p ³	Po 6p ⁴	At 6p ⁵	Rn 6p ⁶
7	Fr 7s ¹	Ra 7s ²	**	Rf 6d ²	Db 6d ³	Sg 6d ⁴	Bh 6d ⁵	Hs 6d ⁶	Mt 6d ⁷	Ds 6d ⁸	Rg 6d ⁹	Cn 6d ¹⁰	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lantánidos	*	La 5d ¹	Ce 4f ¹	Pr 4f ²	Nd 4f ³	Pm 4f ⁴	Sm 4f ⁵	Eu 4f ⁶	Gd 4f ⁷	Tb 4f ⁸	Dy 4f ⁹	Ho 4f ¹⁰	Er 4f ¹¹	Tm 4f ¹²	Yb 4f ¹³	Lu 4f ¹⁴		
Actinidos	**	Ac 6d ¹	Th 5f ¹	Pa 5f ²	U 5f ³	Np 5f ⁴	Pu 5f ⁵	Am 5f ⁶	Cm 5f ⁷	Bk 5f ⁸	Cf 5f ⁹	Es 5f ¹⁰	Fm 5f ¹¹	Md 5f ¹²	No 5f ¹³	Lr 5f ¹⁴		
		subnivel ns	subnivel np	subnivel (n-1)d	subnivel (n-2)f													

Es importante que utilices el simulador hasta que tengas claras las zonas de la tabla. De todos modos, en este curso solamente vas a trabajar de forma general con elementos situados en las zonas s y p, llamados elementos representativos.

El hidrógeno y el helio

Fíjate en que el H tiene un electrón en la capa más externa (estructura 1s), lo mismo que los alcalinos (Li: 2s; Na: 3s; K: 4s; etc). Pero también le falta un electrón para completar la capa más externa, como le sucede a los halógenos (F, Cl, Br y I). Es decir, está en el grupo 1, pero, teniendo en cuenta su estructura electrónica, podría estar en el 17. Por ejemplo, tiene tendencia a perder un electrón, formando el ión H⁺, como los alcalinos, pero forma moléculas biatómicas dando lugar a la sustancia gaseosa H₂, como los halógenos.

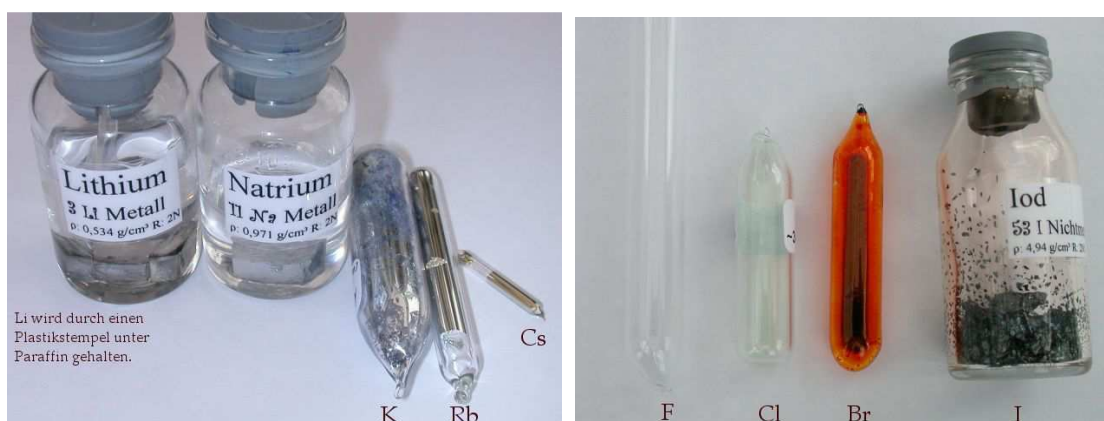
Algo parecido sucede con el helio, que está en el grupo 18 pero podría estar en el 2. Sus propiedades son las características de los gases nobles, y no se parece en nada a los alcalinotérreos. En ambos casos, los elementos se sitúan en el grupo con el que tienen las semejanzas más relevantes.

8. Variación de las propiedades de los elementos

El agrupamiento de los elementos según los valores de sus propiedades experimentales fue el primer criterio de ordenación: densidad, reactividad, puntos de cambio de estado, fórmula del óxido formado,

Vas a analizar solamente algunas propiedades, precisamente las más relevantes a la hora de justificar y hacer previsiones sobre la forma de unirse los átomos de los diferentes elementos y sobre el tipo de sustancias formadas.

Por ejemplo, el sodio y el cloro son dos elementos extraordinariamente reactivos. ¿Cómo puedes justificarlo basándote en sus estructuras electrónicas? ¿Sucede lo mismo con el resto de los alcalinos y de los halógenos? Observa en las imágenes cómo se conservan los alcalinos para que no reaccionen: litio y sodio sumergidos en un líquido inerte, y el resto en ampollas herméticas. Los halógenos se encuentran formando moléculas biatómicas, dado lugar a las sustancias gaseosas flúor y cloro, líquida el bromo y sólida el yodo.



La estructura electrónica de los gases nobles

En química, el término **noble indica no reactivo**. Los gases nobles son gases inertes, no reactivos. Parece ser que tener la capa más externa completa indica estabilidad, situación de energía mínima.

En general, los átomos tienen tendencia a adquirir estructura electrónica de gas noble, ganando, perdiendo o compartiendo electrones: es la conocida **regla del octete** (los elementos de los periodos 2º y 3º tienen ocho electrones en la última capa).

8.1 Radio atómico

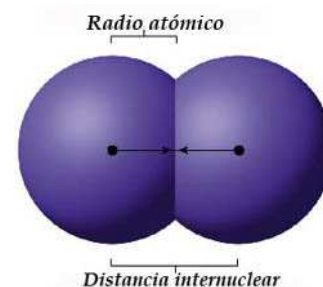
¿Pero se puede hablar del radio de los átomos? Ya has visto que no, de acuerdo con el principio de indeterminación: siempre hay una cierta probabilidad de que el último electrón de un átomo se encuentre fuera de la zona límite del 95%, que es la que se representa habitualmente.

Para disponer de una medida del tamaño de los átomos, se hace la suposición de que cuando se unen dos átomos compartiendo electrones (mediante enlace covalente), son dos esferas que

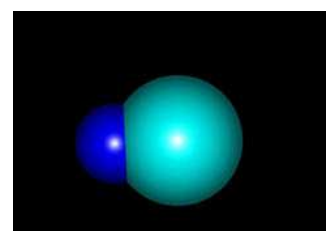
quedan superpuestas en parte. Así, cuando se mide la distancia de enlace entre dos átomos de hidrógeno en la molécula de hidrógeno, ese valor es el doble del **radio atómico**.

El radio atómico se define como **la mitad de la distancia entre dos núcleos del elemento unidos por enlace covalente**.

En realidad, un átomo libre es más grande que el mismo átomo unido, ya que sus electrones están más "concentrados" en el espacio cuando están unidos a otro átomo. Por ejemplo, el radio atómico del hidrógeno es de 0,30 angstroms, cuando la distancia a la que es más probable que se encuentre el electrón en el átomo de hidrógeno sin enlazar es de 0,53 angstroms.



Utilizando este método, el radio atómico del H es de 0,30 angstroms y el del Cl de 0,99. Si el método es coherente, la distancia experimental de enlace en el HCl debe ser de $0,30 + 0,99 = 1,29$ angstroms: la coincidencia de valores es prácticamente total, ya que el valor experimental es de 1,27 angstroms.

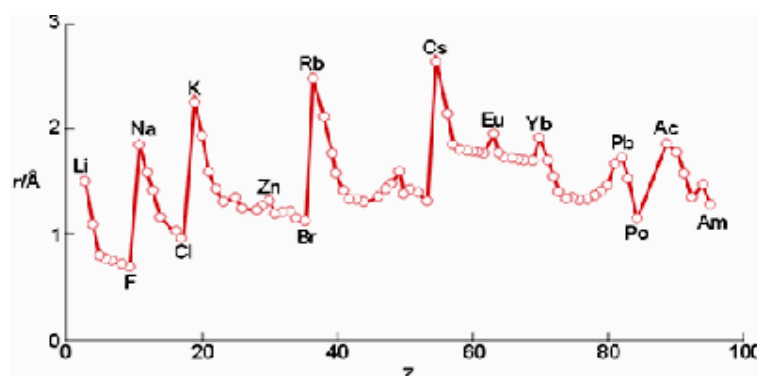


De una forma similar se puede definir el radio de los átomos en los metales, a partir de las distancias entre los átomos en las redes metálicas.

Observa la imagen siguiente. ¿Por qué aumenta la secuencia de radios atómicos de Li, Na, K, Rb y Cs? Todos los elementos alcalinos tienen un electrón en la capa más externa, pero en el litio es la segunda, en el sodio la tercera, en el potasio la cuarta, y así sucesivamente. Como la estructura electrónica es la misma pero en una capa cada vez de mayor tamaño (aumenta el número cuántico principal $n!$), el átomo va siendo cada vez más grande.

Li	Be	B	C	N	O	F
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At

¿Y qué sucede en los periodos? Fíjate en que el tamaño disminuye al ir de litio a flúor, y de sodio a cloro, de potasio a bromo, etc. El electrón que diferencia un átomo de otro (berilio de litio, magnesio de sodio, etc) se coloca en la misma capa, y para justificar la disminución experimental de tamaño se supone que **aumenta la carga nuclear efectiva**, con lo que se produce un efecto de contracción de la nube electrónica.



La atracción de los electrones por el núcleo queda determinada por la carga nuclear efectiva. Su valor depende de los electrones que hay en las capas internas, completas, y en la última capa.

Hay que tener en cuenta que al ir colocándose los electrones en orbitales de la misma capa, quedan más atraídos que si se colocasen en una capa más externa; es decir, aumenta la carga nuclear efectiva.

Variación del tamaño de los átomos

Grupos: al bajar en un grupo, la estructura electrónica es la misma pero en una capa más externa, por lo que los electrones están menos atraídos y el tamaño es mayor.

Periodos: al ir hacia la derecha, aumenta la carga nuclear efectiva y el tamaño disminuye.

8.2 Radio iónico

Hay elementos que forman iones positivos (cationes), perdiendo electrones, mientras que otros los ganan, formando iones negativos (aniones).

En ambos casos, varía la relación entre protones y electrones; es decir, varía la **carga nuclear efectiva**. Por ejemplo, el sodio tiene la estructura electrónica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, con once electrones en total. Forma el ión Na^+ al perder un electrón: la carga nuclear efectiva pasa de ser $11p/11e$ a ser de $11p/10e$, con lo que los electrones están más atraídos, quedan más cerca del núcleo y el tamaño disminuye.

Al formarse un catión siempre se produce este efecto de aumento de carga nuclear efectiva y disminución de tamaño.

Li 123	Li^+ 60	Be 90	Be^{2+} 31	O 70	O^{2-} 140	F 68	F^- 136
Na 154	Na^+ 95	Mg 136	Mg^{2+} 65	S 102	S^{2-} 190	Cl 99	Cl^- 181
K 203	K^+ 133	Ca 174	Ca^{2+} 99	Se 116	Se^{2-} 202	Br 114	Br^- 187
Rb 216	Rb^+ 148	Sr 191	Sr^{2+} 113	Te 136	Te^{2-} 222	I 133	I^- 212
r_{cov}	r_{ion}	r_{cov}	r_{ion}	r_{cov}	r_{ion}	r_{cov}	r_{ion}
Radios expresados en pm							

En el caso de los elementos alcalinos, al perder el único electrón que tienen en la capa más externa **queda como última capa ocupada la capa anterior**, con lo que el tamaño se hace aún menor. Lo mismo sucede con los alcalinotérreos al perder los dos electrones que tienen en su última capa.

¿Qué sucede con los aniones? Cuando un átomo gana electrones, la carga nuclear efectiva disminuye, con lo que el tamaño siempre aumenta, y más cuantos más electrones gana, como puedes ver en la imagen.

8.3 Energía de ionización

La energía de ionización (E_I) es la **energía que hay que suministrar a un átomo neutro, gaseoso y en estado fundamental para arrancarle el electrón más externo, que está más débilmente retenido, y convertirlo en un catión monopositivo gaseoso.**

Se puede expresar así: $A(g) + E_I \rightarrow A^+(g) + e^-$

La energía de ionización es igual a la energía con que el núcleo atómico mantiene unido al electrón: es la energía necesaria para ionizar al átomo.

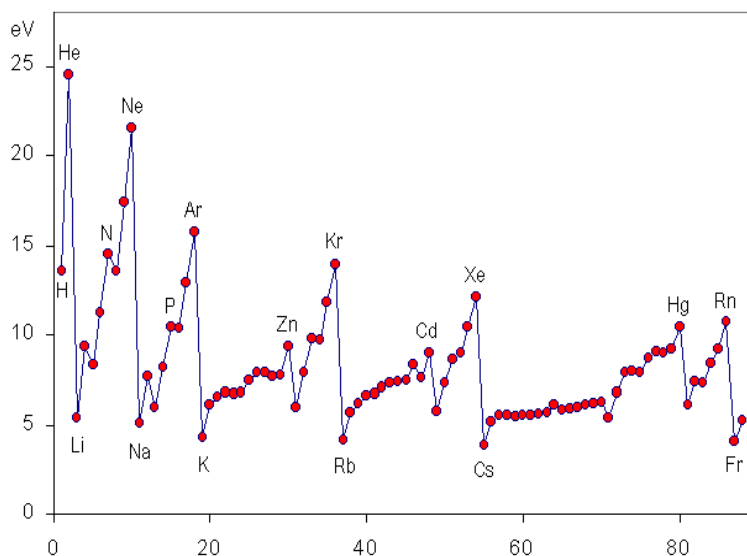
Al ser la energía de ionización una medida cuantitativa de la energía de unión del electrón en el átomo, la variación de esta magnitud ayuda a comprender las diferencias cualitativas entre estructuras electrónicas.

La magnitud de la energía de ionización depende de tres factores fundamentales: estructura electrónica de la última capa, radio atómico y carga nuclear. El factor determinante es la configuración electrónica de la última capa, puesto que cuanto más estable sea, es decir, cuanto más se parezca a la de estructura completa, estructura de gas noble, mayor será la energía necesaria para arrancar un electrón.

¿Cómo evoluciona esta magnitud en la tabla periódica?

Ya has visto que en los grupos el tamaño de los átomos se hace mayor conforme se baja en la tabla; por tanto, el último electrón está más lejos, y será más fácil arrancarlo.

Sin embargo, el tamaño va disminuyendo conforme se avanza en los periodos, por lo que la energía de ionización debe aumentar.



Otra forma de interpretarlo es considerar que los elementos de la parte izquierda de la tabla tienen pocos electrones en la capa más externa, por lo que será fácil que los pierdan para quedarse con la estructura del gas noble que cierra el periodo anterior: su E_I será baja.

Por el contrario, los elementos de la derecha tendrán tendencia a ganar electrones para completar esa capa, adquiriendo la estructura del gas noble que cierra el periodo. Por tanto, su E_I será alta.

Energías de ionización sucesivas

Una vez que se ha arrancado un electrón y se ha formado un ión positivo, se puede volver a comunicar energía para arrancar un segundo electrón: es la segunda E_I . De forma similar se pueden medir las E_I sucesivas tercera, cuarta, quinta, etc. Fíjate en la secuencia de valores para los doce primeros elementos.

Energía de ionización sucesivas / kJ mol^{-1}

Z	Elemento	Primera	Segunda	Tercera	Cuarta	Quinta	Sexta
1	H	1 312					
2	He	2 373	5 248				
3	Li	520	7 300	11 808			
4	Be	899	1 757	14 850	20 992		
5	B	801	2 430	3 660	25 000	32 800	
6	C	1 086	2 350	4 620	6 220	38 000	47 232
7	N	1 400	2 860	4 580	7 500	9 400	53 000
8	O	1 314	3 390	5 300	7 470	11 000	13 000
9	F	1 680	3 370	6 050	8 400	11 000	15 200
10	Ne	2 080	3 950	6 120	9 370	12 200	15 000
11	Na	496	4 560	6 900	9 540	13 400	16 600
12	Mg	738	1 450	7 730	10 500	13 600	18 000

Las E_i sucesivas son cada vez mayores, ya que van quedando menos electrones, con lo que aumenta la carga nuclear efectiva. En algunos casos, el aumento es muy significativo: en el litio la segunda es unas 14 veces la primera, mientras que la tercera es vez y media la segunda; en el berilio, la tercera es unas 9 veces la primera, mientras que la segunda y la cuarta son entre 1,5 y 2 veces la anterior. Observa en qué momento se produce ese notable incremento de E_i en boro, carbono, nitrógeno, sodio y magnesio.

¿Cómo se interpretan esos resultados experimentales? Son una prueba del **número de electrones que tiene cada átomo en la capa más externa**: al arrancar un electrón de una capa interior, como es apreciablemente más estable hay que comunicar mucha más energía para conseguirlo.

La energía de ionización en los elementos del segundo periodo

Observa la secuencia de energías de ionización de los elementos del segundo periodo, utilizando tanto la tabla como la gráfica anteriores. Verás que sube de Li (520) a Be (899), baja en el B (801), aumentando en C (1086) y en N (1400); baja otra vez en O (1314), y aumenta en F (1680) y Ne (2080).

Se interpreta como una prueba del principio de máxima multiplicidad de Hund.

8.4 Electronegatividad y carácter metálico

La electronegatividad es un concepto químico más que una propiedad de los elementos aunque, por supuesto, el valor de dicha magnitud depende de su comportamiento químico.

La electronegatividad (E_N) mide la **mayor o menor atracción** -y, por tanto, desplazamiento- **que un átomo ejerce sobre el par de electrones de un enlace con otro átomo**.

Su valor se realiza a partir de una escala. La escala que más se utiliza es la de Pauling, en la que, de forma arbitraria, el F tiene E_N 4,0 y el Cs 0,7.

Ésta es la propiedad relevante en relación con la capacidad de combinación de los átomos y el tipo de enlace que forman.

Fíjate en la imagen para deducir cómo evoluciona la E_N . El color rojo indica valores altos de la propiedad, y el amarillo valores bajos. El color gris indica que no hay datos: como los gases nobles no forman enlaces, no se puede determinar E_N para ellos.

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Periodo																		
1	H 2.1																	He
2	Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.00	Ne
3	Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	Ar
4	K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.4	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	Kr
5	Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	Xe
6	Cs 0.7	Ba 0.9	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.70	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	Rn
7	Fr 0.7	Ra 0.7	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lantánidos	*	La 1.10	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.10	Gd 1.10	Tb 1.10	Dy 1.10	Ho 1.10	Er 1.10	Tm 1.10	Yb 1.10	Lu 1.27		
Actínidos	**	Ac 1.10	Th 1.30	Pa 1.40	U 1.40	Np 1.40	Pu 1.22	Am 1.30	Cm 1.30	Bk 1.30	Cf 1.30	Es 1.30	Fm 1.30	Md 1.30	No 1.30		Lr	

Variación de la electronegatividad

La electronegatividad es **máxima para los elementos con gran tendencia a captar electrones**, situados en la parte derecha de la tabla, y mayor cuanto menor es la capa en la que se encuentran, debido a su cercanía al núcleo. Es **mínima en los elementos con tendencia a perder electrones**, situados a la izquierda de la tabla, y menor cuanto más grande es la capa en la que están los electrones más externos, ya que la atracción nuclear es menor.

Los metales

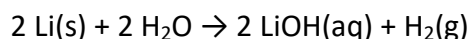
Son los elementos que tienen tendencia a perder electrones, formando iones positivos. Ese proceso se llama oxidación. Por el contrario, los no metales ganan electrones, reduciéndose.

La mayor parte de los elementos conocidos son metales, y se conocen desde la antigüedad: hierro, cobre, oro, plata, etc.

¿Dónde están los metales en la tabla periódica? En la parte izquierda, mientras que los no metales se encuentran a la derecha. Los gases nobles no tienen carácter metálico o no metálico.

Los elementos son más reactivos cuanto más metálicos o más no metálicos son, ya que entonces tienen más tendencia a transferir electrones, oxidándose en unos casos y reduciéndose en otros.

Fíjate en la violencia de la reacción del litio con agua, formándose hidróxido de litio en disolución y desprendiéndose hidrógeno según indica la ecuación del proceso



Carácter metálico y electronegatividad

Los **metales** son elementos con **electronegatividad baja**, mientras que los **no metales** tienen **electronegatividad alta**.

Semimetales

Hay un conjunto de elementos que tienen electronegatividades intermedias y que presentan características tanto de metales como de no metales. Estos elementos se conocen como semimetales o metaloides (en rojo en la tabla de la imagen).

El más típico es el silicio, que tiene una conductividad de la corriente eléctrica próxima a la de los metales (toda la moderna tecnología electrónica se basa en circuitos integrados de silicio). Aunque no hay un consenso generalizado sobre cuáles son los semimetales, en la imagen puedes ver una de las clasificaciones más habituales.

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Período 1	H																	He
Período 2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Período 3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
Período 4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Período 5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Período 6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Período 7	Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lantánidos	*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
Actínidos	**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		
	Metales			Semimetales				No metales					Gases nobles					

8.5 Número de oxidación

Los átomos tienden a combinarse formando sustancias simples (formadas por átomos iguales) o compuestas (en las que hay átomos o iones de elementos diferentes). Esa capacidad de combinación ha venido medida tradicionalmente por la valencia, que se indicaba en números romanos: valencia II significaba que los átomos del elemento formaban dos enlaces.

Actualmente, se utiliza el número de oxidación. Si en la sustancia hay iones monoatómicos (Fe^{2+} , O^{2-}), el número de oxidación es la carga real de cada ión, pudiendo ser positiva o negativa, según pierda o gane electrones al formarse la sustancia. En el ejemplo anterior, el hierro tiene un número de oxidación de +2, mientras que el del oxígeno es -2.

Si no se forman iones, el número de oxidación es la carga que tendría cada uno de los átomos unidos si se hubiesen formado iones. Su signo depende de las electronegatividades relativas de los átomos unidos: el más electronegativo tiene número de oxidación negativo, porque atrae más a los electrones de enlace. Por ejemplo, en el H_2O el número de oxidación del H es +1 y el del O es -2 (aunque no son iones que tengan esa carga).

Números de oxidación más habituales

El número de oxidación de un elemento en una sustancia depende de la estructura electrónica de sus átomos

Fíjate en los alcalinos: como has visto, tienen tendencia perder un electrón, para quedarse con su capa más externa completa, formando iones monopositivos. Por tanto su número de oxidación es +1. Por la misma razón, en todos los alcalinotérreos es +2.

En los halógenos, el número de oxidación debe ser -1, ya que ganan un electrón para completar su capa electrónica más externa. Sin embargo, fíjate en que en cloro, bromo y yodo se indica también +1, +3, +5 y +7. Al estudiar el enlace químico sabrás la razón.

