

## **TEMA 2. ESTRUCTURA ATÓMICA Y ENLACE**

- *Los materiales están constituidos por átomos*
- *La estructura atómica y el enlace entre los átomos condicionan fuertemente las propiedades del material*

### ***ESTRUCTURA DEL TEMA***

**2.1** ESTRUCTURA ATÓMICA. NIVELES DE ENERGÍA  
*¿Cómo son los átomos?*

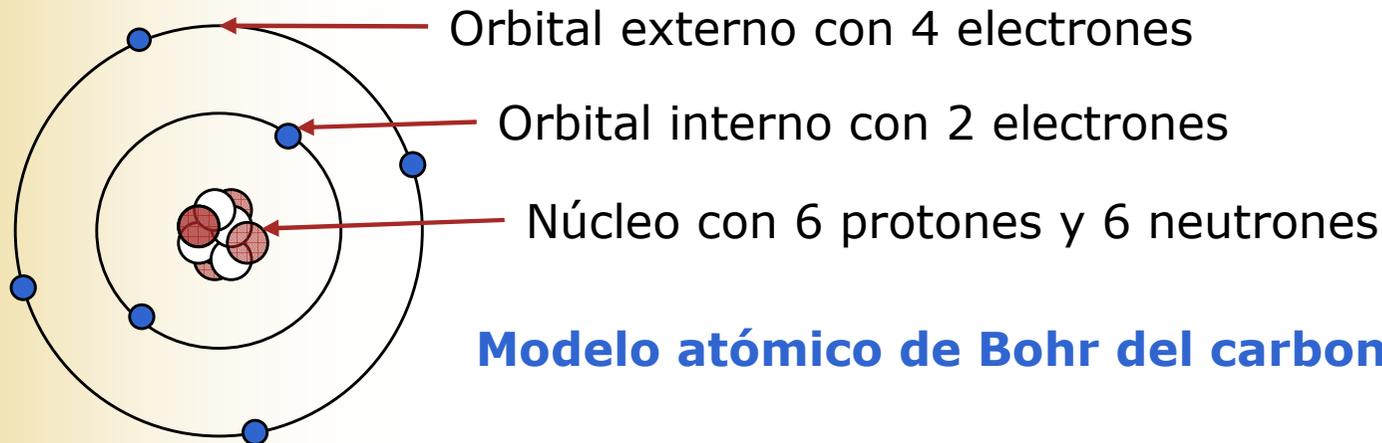
**2.2** TABLA PERIÓDICA

**2.3** REACTIVIDAD Y ENLACE ATÓMICO  
*¿Cómo se mantienen unidos los átomos?*

**2.4** TIPOS DE ENLACE ATÓMICO

**2.5** INFLUENCIA DEL TIPO DE ENLACE EN LA ESTRUCTURA Y LAS PROPIEDADES

## 2.1 ESTRUCTURA ATÓMICA (I) - *Conceptos fundamentales*



**Modelo atómico de Bohr del carbono C<sup>12</sup>**

- **Nº atómico Z.**- nº de protones del núcleo
  - **Masa atómica A.**- suma masas protones + neutrones
  - **Isótopos.**- Átomos con igual Z y diferente A
  - **Unidad de Masa Atómica UMA.**- Doceava parte de la masa atómica del carbono C<sup>12</sup>,  $1.66 \times 10^{-24}$  g
  - **Peso atómico o molecular**
    - uma/átomo
    - masa/mol
  - **1 Mol** =  $6,023 \times 10^{23}$  (**nº de Avogadro**) átomos o moléculas
- Masa del electrón =  $9.11 \times 10^{-28}$  g      Carga elemental e =  $1.602 \times 10^{-19}$  C

## 2.1 EST. ATÓMICA (II) - Niveles electrónicos de energía

- Los electrones giran alrededor del núcleo en orbitales DISCRETOS, a los que corresponde unos valores específicos de energía → está CUANTIFICADA.
- Con mayor precisión, en lugar de orbitales se habla de PROBABILIDADES (o distribución de probabilidades) de encontrar al electrón en torno al núcleo.
- Se toma como origen de energía  $E=0$  al electrón libre, de forma que el orbital más cercano al núcleo es el de menor energía (más negativa).
- **Energía de enlace.** - *La que habría que proporcionarle al electrón para desligarlo del núcleo y dejarlo libre.*
- Los niveles de energía permitidos para cada electrón vienen determinados por cuatro parámetros denominados: **Números Cuánticos**

- $n$**  N° Cuántico Principal o *nivel*. Coincide con los orbitales de Bohr.  
Se designan por letras: **K, L, M, N, O** para  $n = 1, 2, 3, 4, 5$
- $l$**  2° N° Cuántico (*acimutal*). Especifica el *subnivel*.  
Toma valores enteros desde 0 hasta  $n-1$ .  
Se representa por las letras **s, p, d y f** para  $l=0, 1, 2$  y 3 resp.
- $m_l$**  3er N° Cuántico (magnético). Determina el n° de estados de energía para cada subnivel. Toma valores enteros desde  $-l$  hasta  $+l$   
 $s \rightarrow m_l = 0$        $p \rightarrow m_l = -1, 0, +1$        $d \rightarrow m_l = -2, -1, 0, +1, +2$
- $m_s$**  momento de spin. Asociado al spin del electrón, tiene dos valores:  $\pm 1/2$

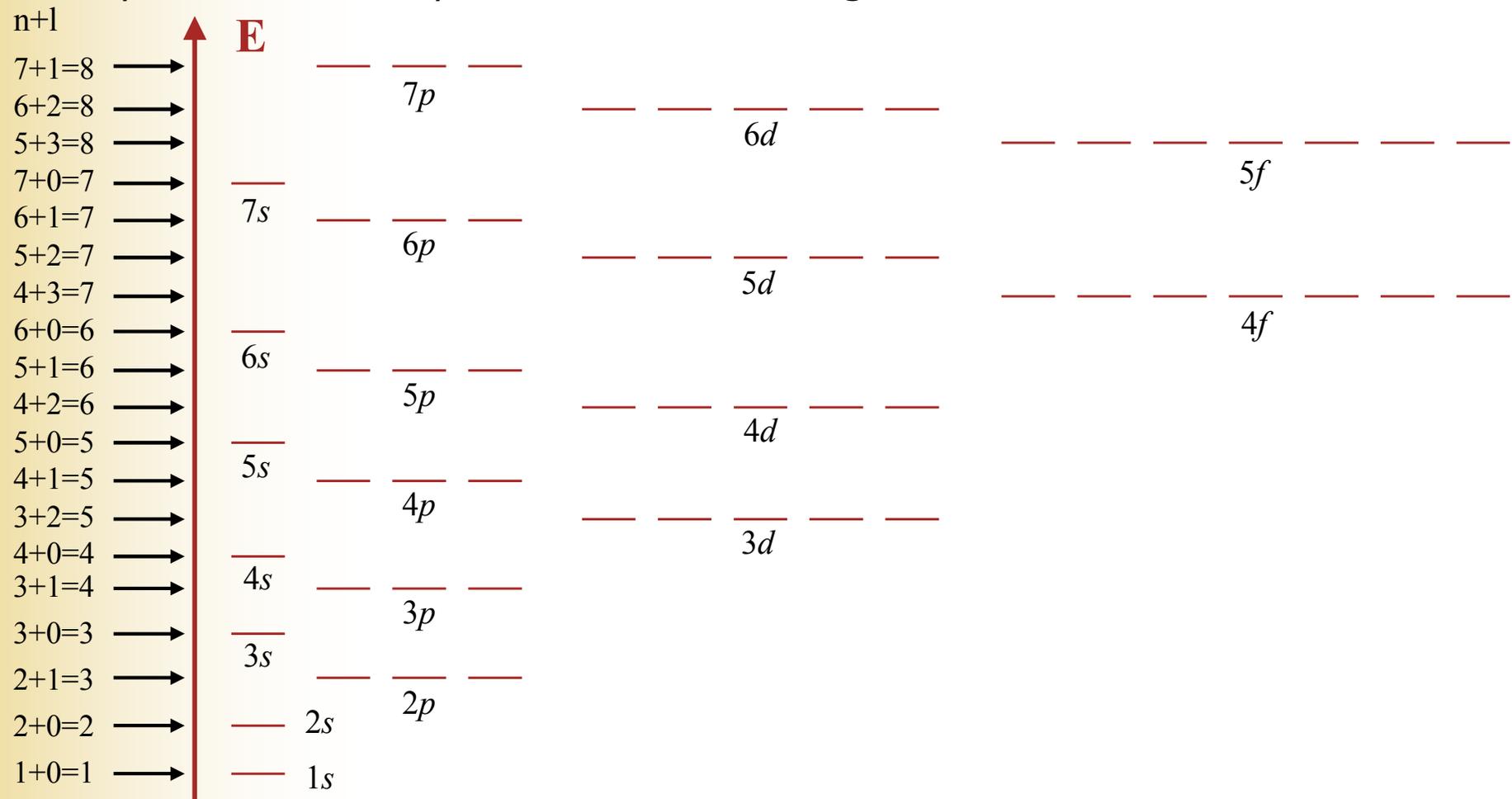
## 2.1 EST. ATÓMICA (III) - Niveles electrónicos de energía

N° Cuántico principal $n$	Nivel	Subnivel	N° de estados	N° máximo de e <sup>-</sup>	
				Por subnivel	Por nivel
1	<i>K</i>	<i>s</i>	1	2	2
2	<i>L</i>	<i>s</i>	1	2	8
		<i>p</i>	3	6	
3	<i>M</i>	<i>s</i>	1	2	18
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
4	<i>N</i>	<i>s</i>	1	2	32
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	7	14	

## 2.1 EST. ATÓMICA (IV) - Niveles electrónicos de energía

- Niveles de energía de los orbitales.- Viene determinado por los N<sup>os</sup> Cuánticos  $n$  y  $l$ .
- *Regla de  $n+l$* : los niveles de energía van en el orden que señala la suma  $n+l$ ; si dos niveles tienen el mismo valor  $n+l$ , la menor energía corresponde al de menor  $n$

*Representación esquemática de las energías relativas de los orbitales*



## 2.1 EST. ATÓMICA (V) – Configuración electrónica

### ¿Cómo se distribuyen los electrones en los niveles electrónicos?

- **Principio de exclusión de Pauli.** - Cada estado electrónico puede contener no más de dos electrones, que deben tener spines opuestos. Así pues, no pueden existir dos electrones en un mismo átomo con los cuatro  $n^{os}$  cuánticos iguales
- Los electrones tienden a ocupar los estados de menor energía
- **ESTADO FUNDAMENTAL.** - Cuando todos los electrones del átomo ocupan los estados de menor energía posible
- La configuración electrónica de un átomo representa cómo esos estados están ocupados, siguiendo la notación:  $n l^{n^o} e^-$
- **ELECTRONES DE VALENCIA.** - Los que ocupan las capas más externas

### Ejemplos

Z	Elemento	Conf. Electrónica	e <sup>-</sup> de valencia
1	H	$1s^1$	1
2	He	$1s^2$	2
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	1
13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	3

## 2.2 TABLA PERIÓDICA

1 <b>H</b> Hidrógeno 1.00794																	2 <b>He</b> Helio 4.002602
3 <b>Li</b> Litio 6.941	4 <b>Be</b> Berilio 9.012182											5 <b>B</b> Boro 10.811	6 <b>C</b> Carbono 12.0107	7 <b>N</b> Nitrógeno 14.00674	8 <b>O</b> Oxígeno 15.9994	9 <b>F</b> Flúor 18.9984032	10 <b>Ne</b> Neón 20.1797
11 <b>Na</b> Sodio 22.989770	12 <b>Mg</b> Magnesio 24.3050											13 <b>Al</b> Aluminio 26.981538	14 <b>Si</b> Silicio 28.0855	15 <b>P</b> Fósforo 30.973762	16 <b>S</b> Azufre 32.066	17 <b>Cl</b> Cloro 35.4527	18 <b>Ar</b> Argón 39.948
19 <b>K</b> Potasio 39.0983	20 <b>Ca</b> Calcio 40.078	21 <b>Sc</b> Escandio 44.955910	22 <b>Ti</b> Titanio 47.867	23 <b>V</b> Vanadio 50.9415	24 <b>Cr</b> Cromo 51.9961	25 <b>Mn</b> Manganeso 54.938049	26 <b>Fe</b> Hierro 55.845	27 <b>Co</b> Cobalto 58.933200	28 <b>Ni</b> Níquel 58.6934	29 <b>Cu</b> Cobre 63.546	30 <b>Zn</b> Cinc 65.39	31 <b>Ga</b> Galio 69.723	32 <b>Ge</b> Germanio 72.61	33 <b>As</b> Arsénico 74.92160	34 <b>Se</b> Selenio 78.96	35 <b>Br</b> Bromo 79.904	36 <b>Kr</b> Kriptón 83.80
37 <b>Rb</b> Rubidio 85.4678	38 <b>Sr</b> Estroncio 87.62	39 <b>Y</b> Ytrio 88.90585	40 <b>Zr</b> Circonio 91.224	41 <b>Nb</b> Niobio 92.90638	42 <b>Mo</b> Molibdeno 95.94	43 <b>Tc</b> Tecnecio (98)	44 <b>Ru</b> Rutenio 101.07	45 <b>Rh</b> Rodio 102.90550	46 <b>Pd</b> Paladio 106.42	47 <b>Ag</b> Plata 107.8682	48 <b>Cd</b> Cadmio 112.411	49 <b>In</b> Indio 114.818	50 <b>Sn</b> Estaño 118.710	51 <b>Sb</b> Antimonio 121.760	52 <b>Te</b> Teluro 127.60	53 <b>I</b> Yodo 126.90447	54 <b>Xe</b> Xenón 131.29
55 <b>Cs</b> Cesio 132.90545	56 <b>Ba</b> Bario 137.327	57 <b>La</b> Lantano 138.9055	72 <b>Hf</b> Hafnio 178.49	73 <b>Ta</b> Tántalo 180.9479	74 <b>W</b> Volframio 183.84	75 <b>Re</b> Renio 186.207	76 <b>Os</b> Osmio 190.23	77 <b>Ir</b> Iridio 192.217	78 <b>Pt</b> Platino 195.078	79 <b>Au</b> Oro 196.96655	80 <b>Hg</b> Mercurio 200.59	81 <b>Tl</b> Talio 204.3833	82 <b>Pb</b> Plomo 207.2	83 <b>Bi</b> Bismuto 208.98038	84 <b>Po</b> Polonio (210)	85 <b>At</b> Astatido (210)	86 <b>Rn</b> Radón (222)
87 <b>Fr</b> Francio (223)	88 <b>Ra</b> Radio (226)	89 <b>Ac</b> Actinio (227)	104 <b>Rf</b> Rutherfordio (261)	105 <b>Db</b> Dubnio (262)	106 <b>Sg</b> Seaborgio (266)	107 <b>Bh</b> Bohrio (264)	108 <b>Hs</b> Hassio (269)	109 <b>Mt</b> Meitnerio (268)									

58 <b>Ce</b> Cerio 140.116	59 <b>Pr</b> Praseodimio 140.90765	60 <b>Nd</b> Neodimio 144.24	61 <b>Pm</b> Prometio (145)	62 <b>Sm</b> Samario 150.36	63 <b>Eu</b> Europio 151.964	64 <b>Gd</b> Gadolinio 157.25	65 <b>Tb</b> Terbio 158.92534	66 <b>Dy</b> Disprobio 162.50	67 <b>Ho</b> Holmio 164.93032	68 <b>Er</b> Erbio 167.26	69 <b>Tm</b> Tulio 168.93421	70 <b>Yb</b> Yterbio 173.04	71 <b>Lu</b> Lutecio 174.967
90 <b>Th</b> Torio 232.0381	91 <b>Pa</b> Protoactinio 231.03588	92 <b>U</b> Uranio 238.0289	93 <b>Np</b> Neptunio (237)	94 <b>Pu</b> Plutonio (244)	95 <b>Am</b> Americio (243)	96 <b>Cm</b> Curio (247)	97 <b>Bk</b> Berkelio (247)	98 <b>Cf</b> Californio (251)	99 <b>Es</b> Einstenio (252)	100 <b>Fm</b> Fermio (257)	101 <b>Md</b> Mendelevio (258)	102 <b>No</b> Nobelio (259)	103 <b>Lr</b> Laurencio (262)

## 2.3 REACTIVIDAD Y ENLACE ATÓMICO

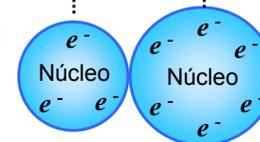
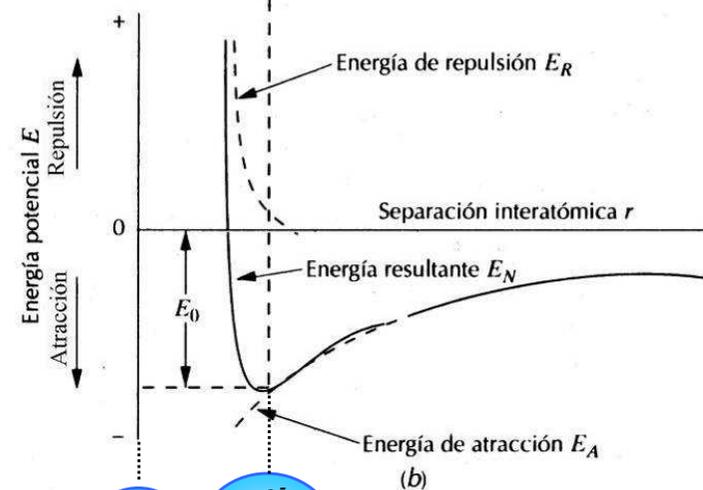
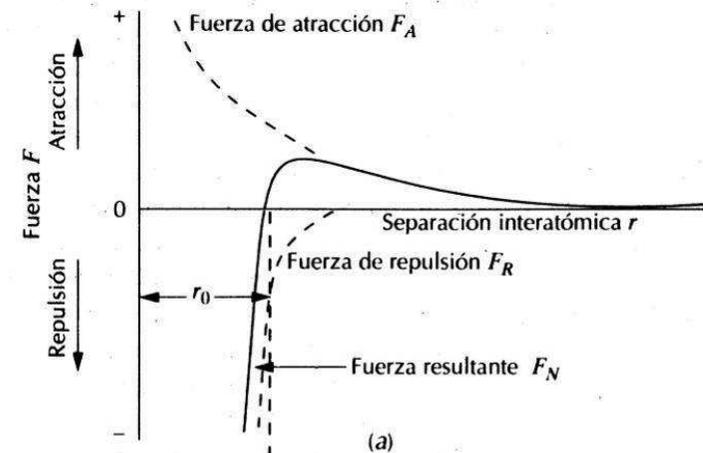
Para entender cómo los átomos se mantienen enlazados se estudia la dependencia de la Fuerza y Energía con la separación interatómica para la interacción entre dos átomos aislados

**Energía de enlace.-** Representa la energía necesaria para separar dos átomos una distancia infinita.

Da cuenta de la fortaleza del enlace  
La **temp. de fusión** da cuenta de la magnitud de la energía de enlace

**Enlaces primarios** (químicos) en sólidos: iónico, covalente y metálico

**Enlaces secundarios** (físicos):  
Fuerzas de Van der Waals,  
Puente de hidrógeno,...



(Fuente: Callister)

## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (I)

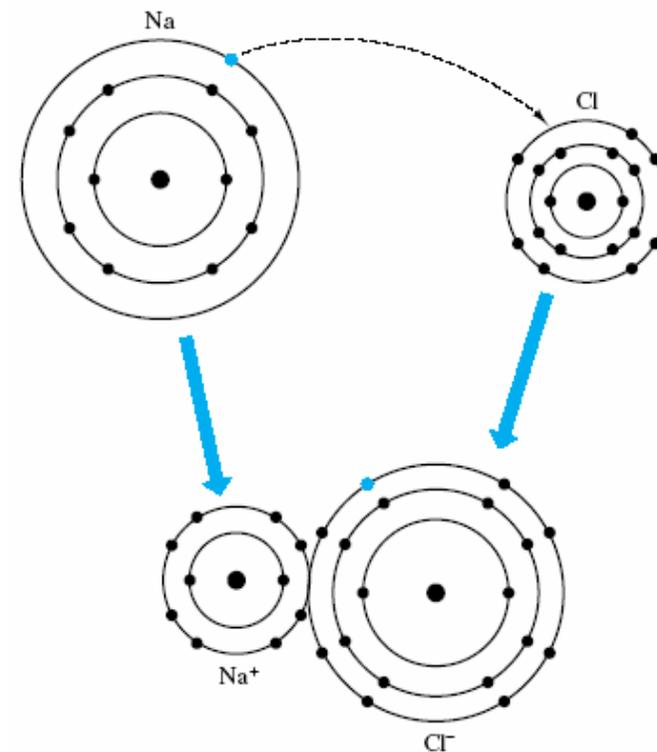
### Enlace iónico

- Típico entre elementos metálicos y no metálicos
- Los átomos metálicos CEDEN fácilmente sus electrones de valencia a átomos no metálicos, adquiriendo ambos la configuración electrónica del estado fundamental

#### **CARACTERÍSTICAS:**

- NO Direccional  
*no depende de la orientación*
- Energías de enlace 3-8 eV/átomo  
 $1\text{eV}=1.602\times 10^{-19}\text{ J}$

#### Modelo NaCl



(Fuente: Schackelford)

## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (II)

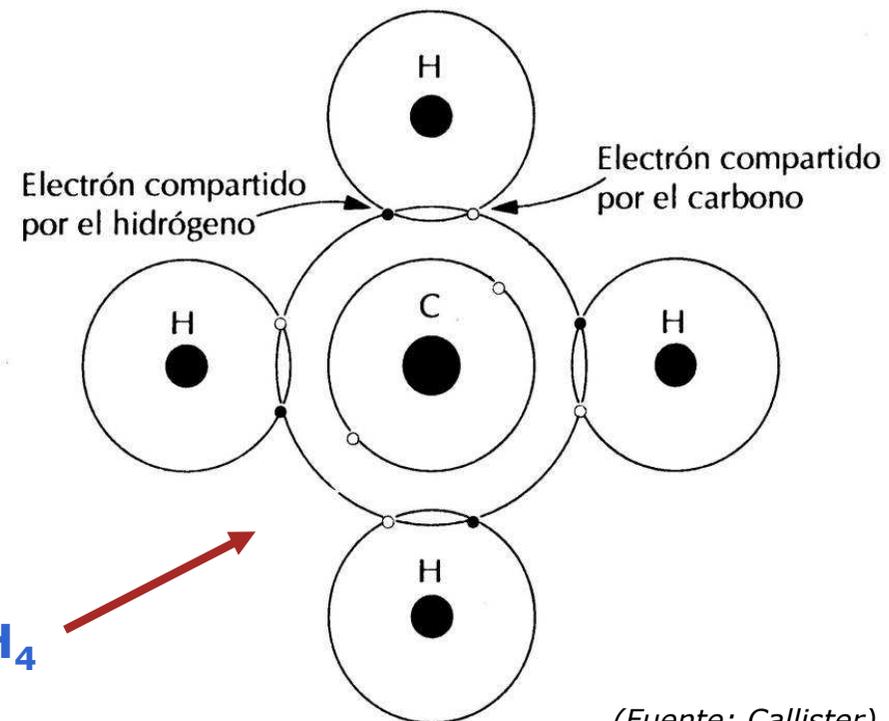
### Enlace covalente

- Los átomos adyacentes COMPARTEN electrones, al menos uno por átomo, que se consideran pertenecen a ambos, adquiriendo ambos la configuración electrónica del estado fundamental

#### CARACTERÍSTICAS:

- Direccional – alta dependencia de la orientación
- Energías de enlace variables:  
desde C-diamante 7.4 eV/at;  
 $T_f > 3550^\circ\text{C}$   
a bismuto (Bi)  $T_f = 270^\circ\text{C}$

Modelo molécula  $\text{CH}_4$



## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (III)

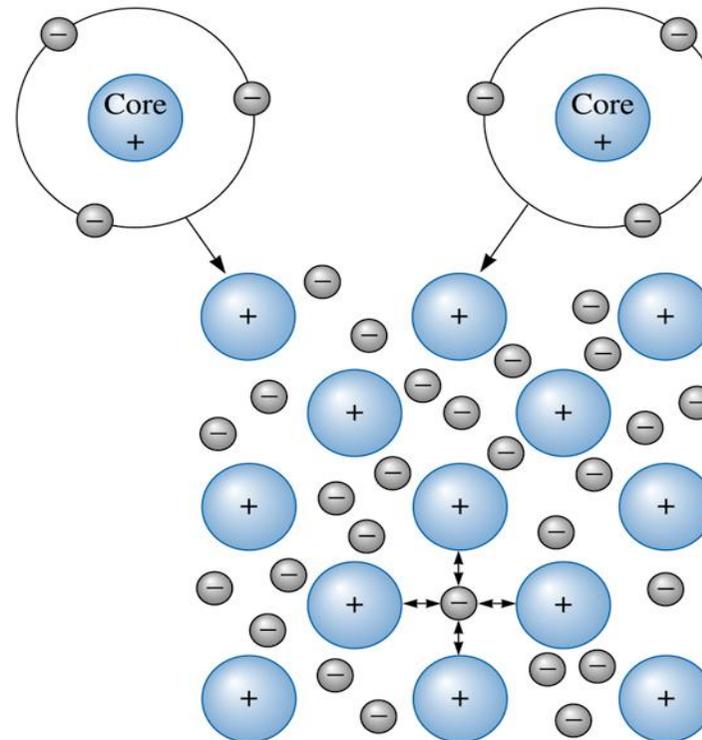
### Enlace metálico

- Los electrones de valencia de los átomos metálicos no están unidos a ningún átomo en particular. Se encuentran virtualmente LIBRES, formando un *mar* o *nube* de electrones

#### CARACTERÍSTICAS:

- NO Direccional  
*no depende de la orientación*
- Energías de enlace variables,  
desde tungsteno (W) 8.8 eV/at  
 $T_f = 3410^\circ\text{C}$   
a mercurio (Hg) 0.7 eV/at;  
 $T_f = -39^\circ\text{C}$

© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™



(Fuente: Askeland)

## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (IV)

### Enlaces secundarios o Van der Waals

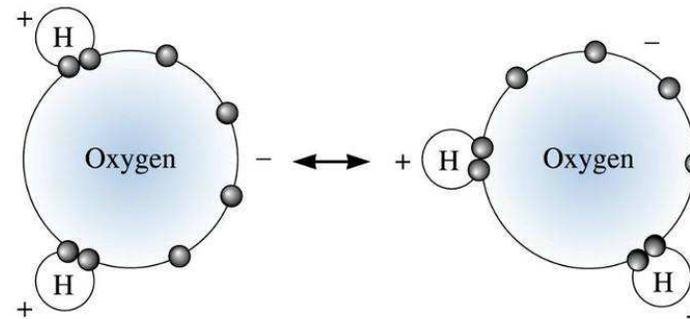
- Debido a la atracción entre cargas eléctricas opuestas, pero SIN transferencia de  $e^-$
- Surgen a partir de DIPOLOS o asimetrías de carga + y - en átomos y/o moléculas
- Presente en casi todos los materiales, es evidente en gases nobles (conf. Estable) y en moléculas con enlace covalente
- Puente de Hidrógeno.- Enlace entre moléculas que tienen H

#### CARACTERÍSTICAS:

- Energías de enlace muy débiles  $\approx 0.1$  eV/at

#### Ej. Polarización $H_2O$

(Fuente: Askeland)



© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

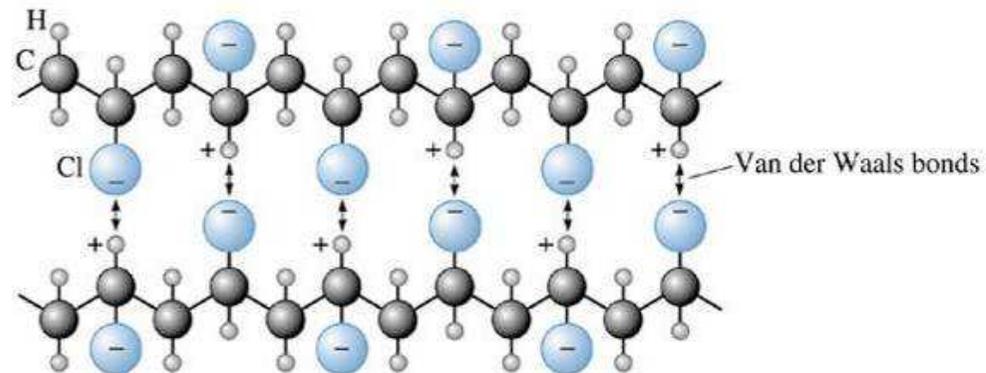
## 2.5 INFLUENCIA DEL TIPO DE ENLACE EN LAS PROPIEDADES

PROPIEDAD	Tipo de enlace		
	IÓNICO	COVALENTE	METÁLICO
CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA Y TÉRMICA	BAJA <i>Aislantes</i>	Variable	ALTA <i>Conductores</i>
MECÁNICAS	<i>Duros y Frágiles</i>	Variable	<i>Dúctiles</i>

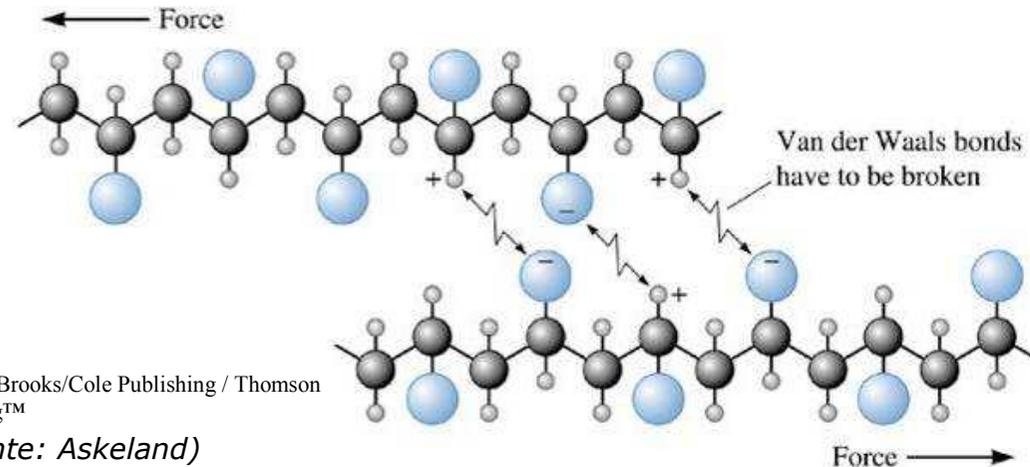
## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (V) - Ejemplo del PVC

- a) Los átomos de H, C y Cl están unidos por enlace covalente en la cadena

Las cadenas están unidas mediante enlaces Van der Waals entre los átomos Cl (-) y H  $\oplus$ , aumentando la rigidez del PVC



- b) Al aplicar una fuerza, los enlaces Van der Waals se rompen y las cadenas deslizan entre ellas



© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

(Fuente: Askeland)