

## **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?*

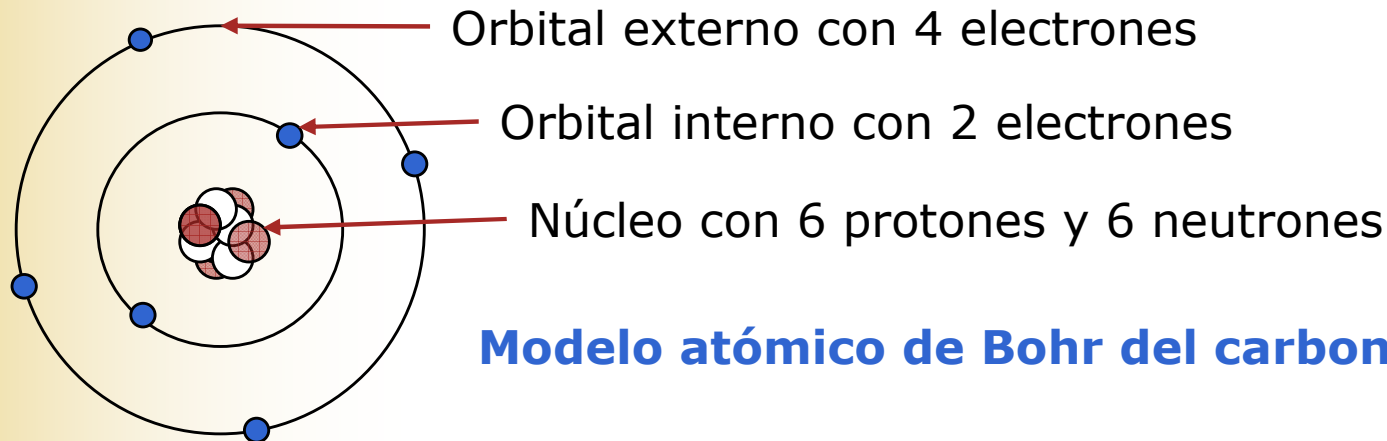
**2.2** TABLA PERIÓDICA

**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*



- **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<sup>o</sup> 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<sup>o</sup> N<sup>o</sup> 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.
- $m_l$**  3<sup>er</sup> N<sup>o</sup> Cuántico (magnético). Determina el n<sup>o</sup> 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:  $\pm 1/2$

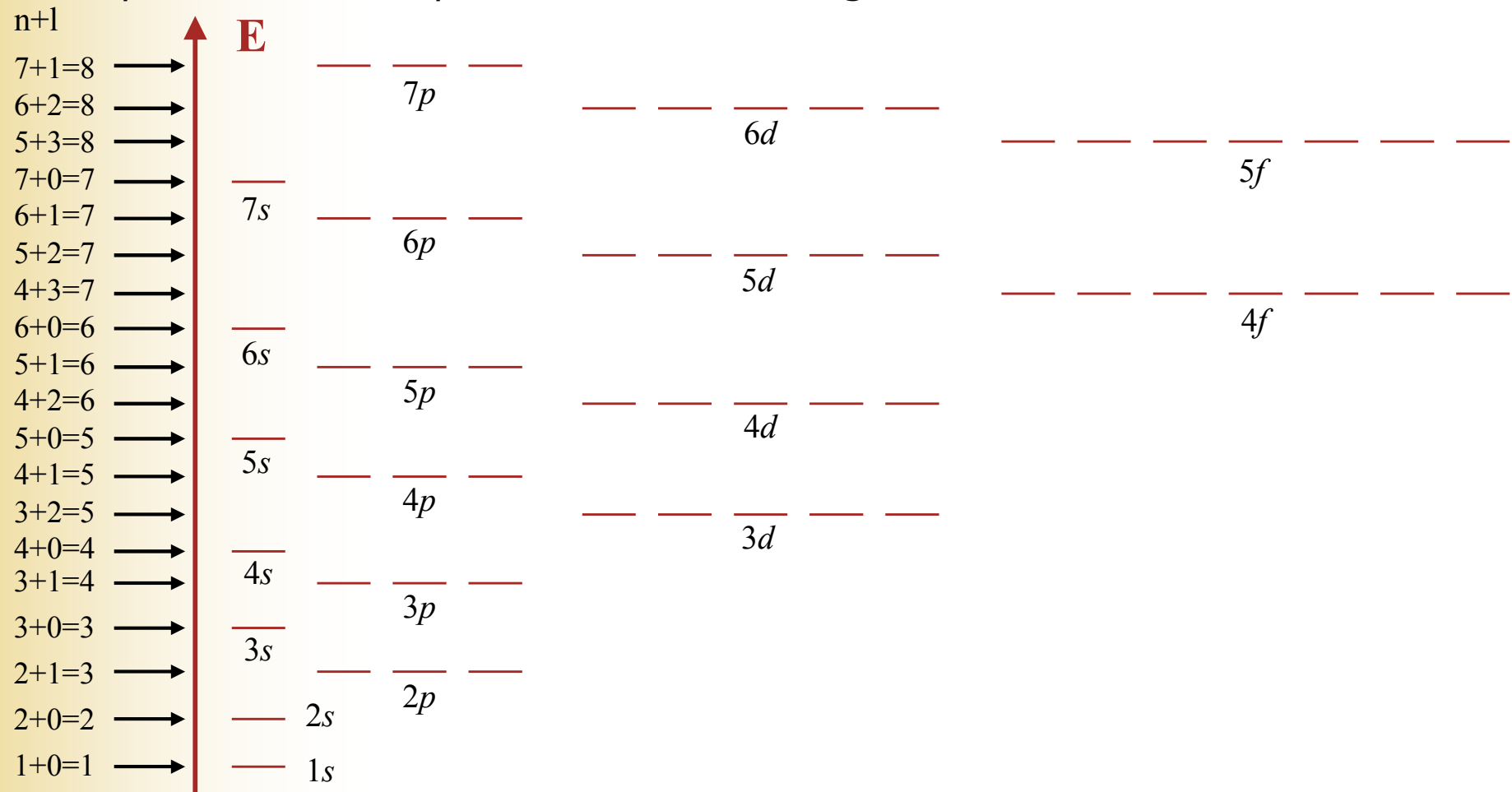
## 2.1 EST. ATÓMICA (III) - Niveles electrónicos de energía

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

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

## 2.3 REACTIVIDAD Y ENLACE ATÓMICO

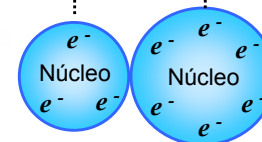
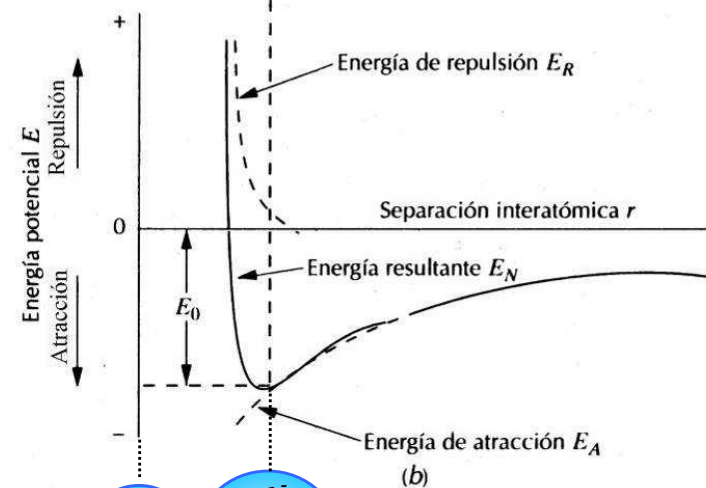
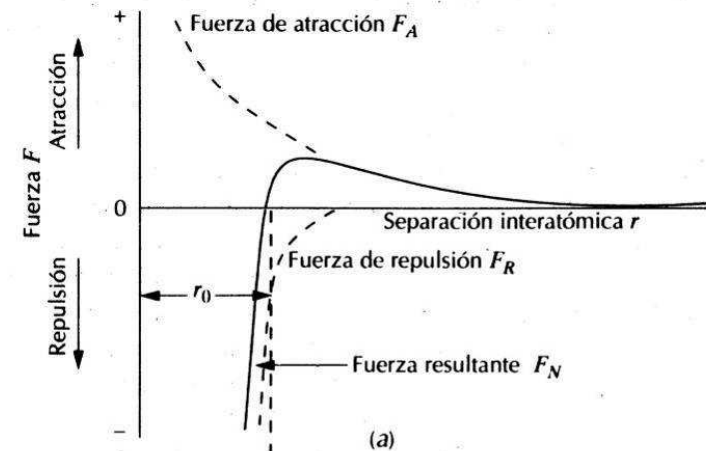
Para entender cómo los átomos se mantienen enlazados se estudia la dependencia de la Fuerza y Energía con la separación interatómica para la interacción entre dos átomos aislados

**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)



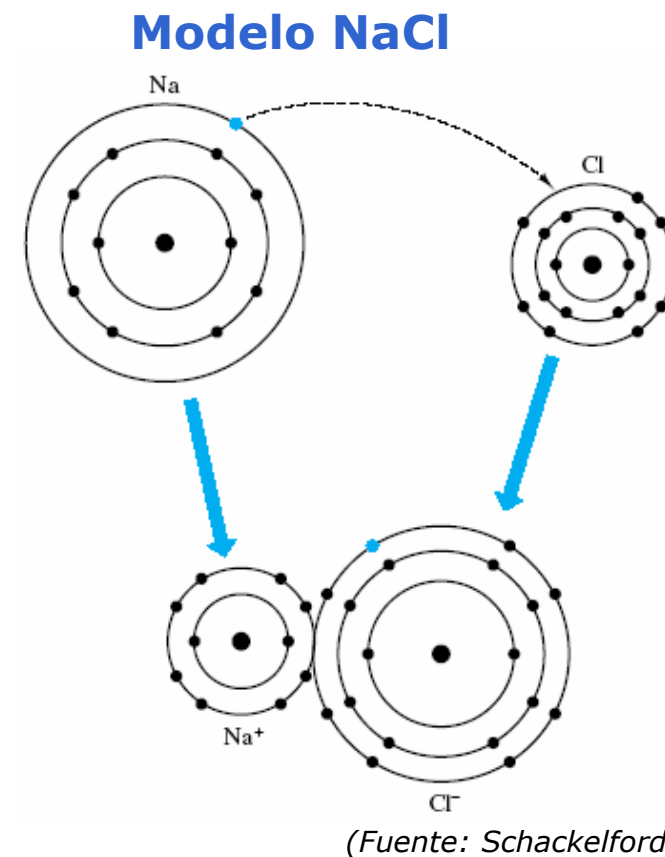
## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (I)

### 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  
 $1\text{eV}=1.602\times 10^{-19}\text{ J}$



## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (II)

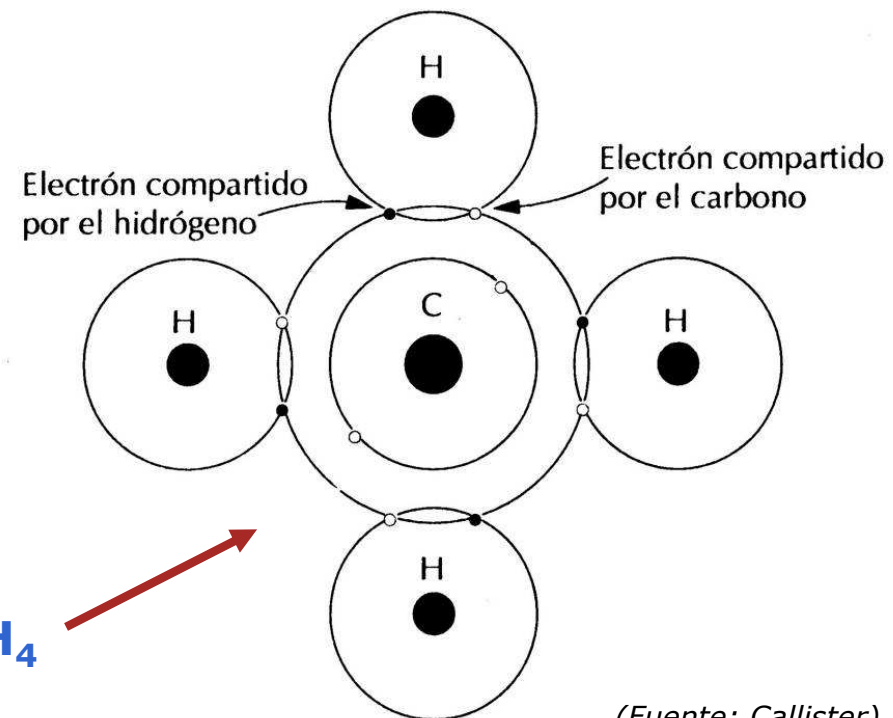
### Enlace covalente

- 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)

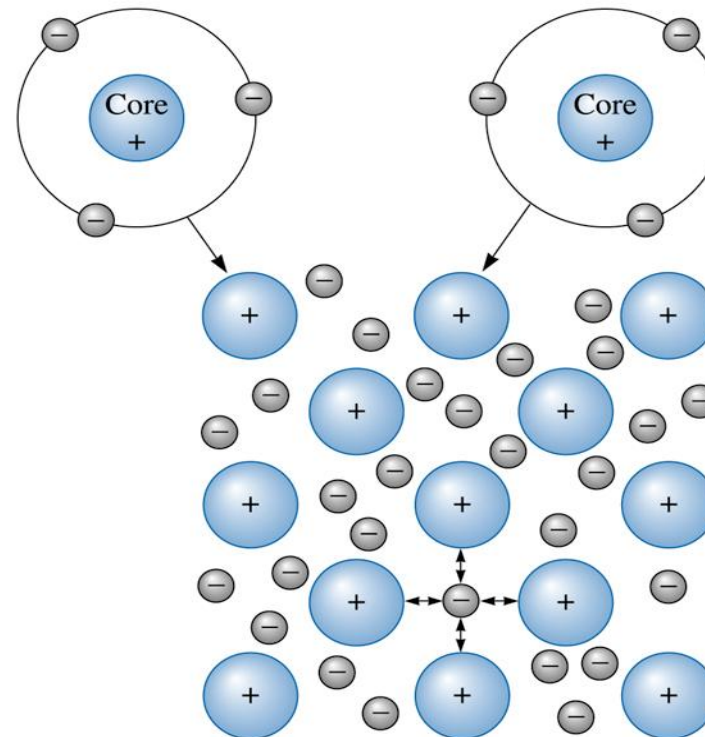
### Enlace metálico

- 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

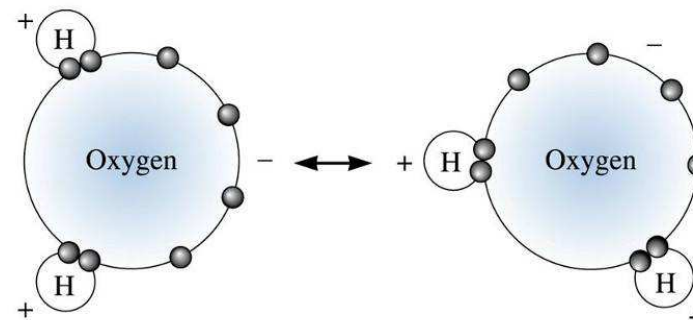
- Debido a la atracción entre cargas eléctricas opuestas, pero SIN transferencia de  $e^-$
- Surgen a partir de DIPOLOS o asimetrías de carga + y - en átomos y/o moléculas
- Presente en casi todos los materiales, es evidente en gases nobles (conf. Estable) y en moléculas con enlace covalente
- Puente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

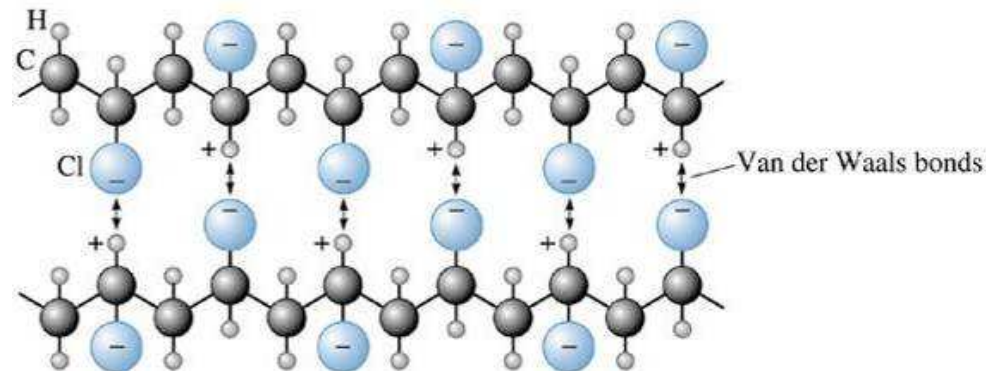
## 2.5 INFLUENCIA DEL TIPO DE ENLACE EN LAS PROPIEDADES

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

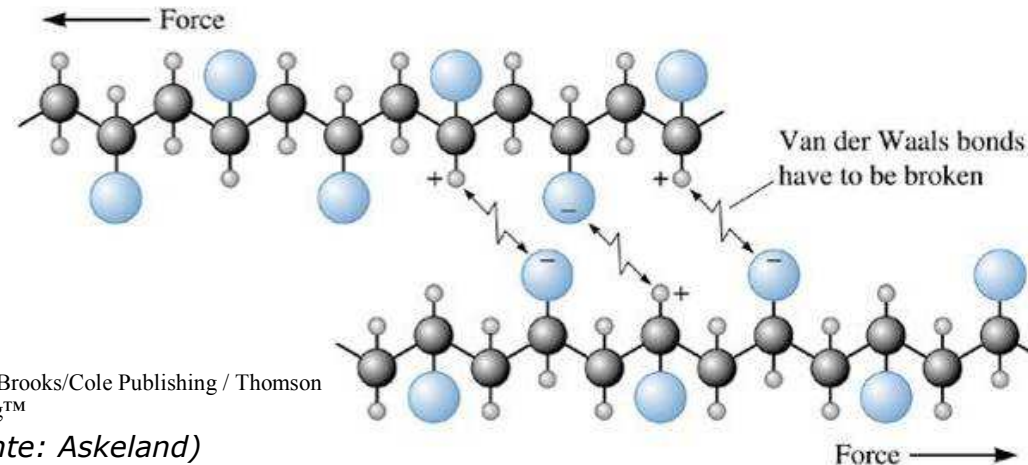
## 2.4 TIPOS DE ENLACE ATÓMICO (V) - Ejemplo del PVC

- 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)