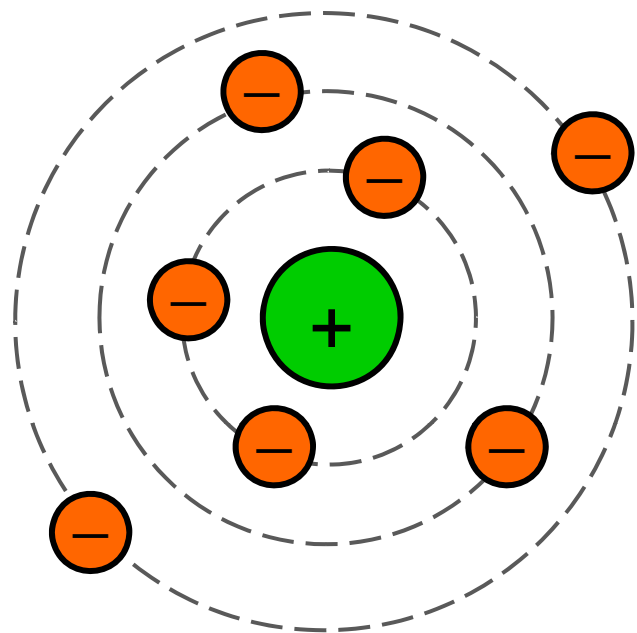


Tema 0

INTRODUCCIÓN

- Estructura del átomo
- Modelos atómicos clásicos
- Teoría cuántica
- Modelo atómico de Bohr
- Mecánica cuántica
- Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos
- Orbitales atómicos hidrogenoides
- Espín del electrón
- Átomos polielectrónicos
- Configuraciones electrónicas
- Diamagnetismo/paramagnetismo
- Tabla Periódica y propiedades periódicas
- Concepto de mol
- Fórmula empírica y fórmula molecular
- Masa atómica, masa molecular y masa molar
- Reacciones químicas. Ecuación química
- Estequiometría. Grado de avance
- Reactivo limitante
- Rendimiento de la reacción

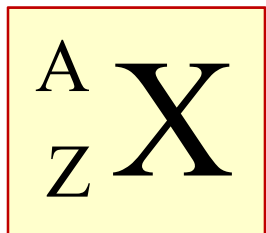
Estructura del átomo: *partículas subatómicas*



- **PROTONES**
 - **NEUTRONES**
 - **ELECTRONES**
- } *núcleo*

	Carga eléctrica	Masa
PROTÓN	$+ 1.602176487 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	$1.672621637 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
NEUTRÓN	0	$1.674 927293 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
ELECTRÓN	$- 1.602176487 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	$9.109382914 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

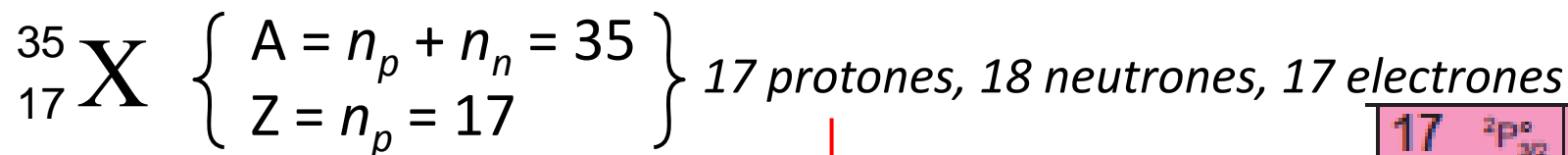
Estructura del átomo: *partículas subatómicas*



- **X**: *símbolo del elemento químico*
- **A**: *número másico* = n° protones + n° neutrones
- **Z**: *número atómico* = n° protones

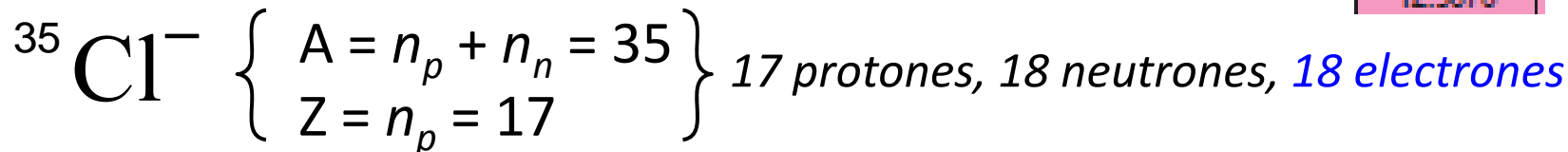
■ **Átomo neutro**: n° electrones = n° protones

■ Ejemplo:



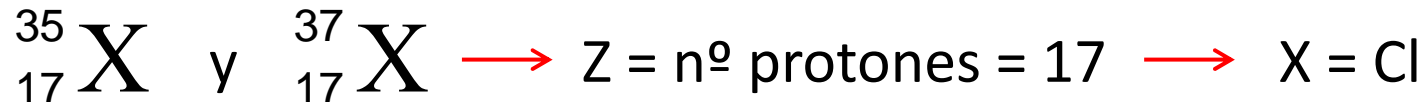
17	${}^2p_{32}$
Cl	
Chlorine	
35.453	
[Ne]3s ² 3p ⁵	
12.9676	

■ Ejemplo:



Estructura del átomo: *isótopos*

- El nº de protones en un núcleo determina el elemento químico a que corresponde un átomo. Ejemplo:

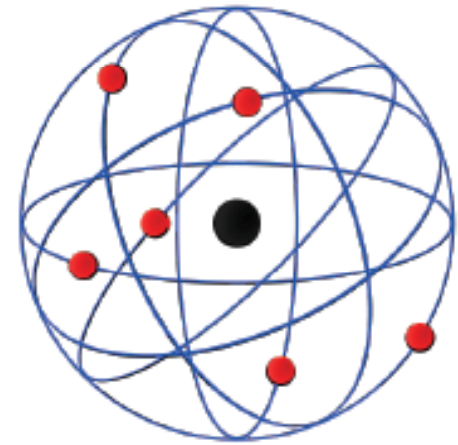


- Isótopos:** átomos que tienen el mismo número atómico (Z) pero diferentes números másicos (A), es decir, tienen el mismo número de protones pero distinto número de neutrones.
- Ejemplos:

	${}_{1}^{1}\text{H}$ (H, 99.99%)	${}_{1}^{2}\text{H}$ (D, 0.01%)	${}_{1}^{3}\text{H}$ (T)	${}_{6}^{12}\text{C}$ (98.93%)	${}_{6}^{13}\text{C}$ (1.07%)	${}_{6}^{14}\text{C}$
Protones = Z	1	1	1	6	6	6
Neutrones = A - Z	0	1	2	6	7	8
Electrones	1	1	1	6	6	6

Modelos atómicos clásicos

- **Rutherford y Chadwick** → el átomo está formado por un núcleo (protones y neutrones) y electrones en torno a él.
- De acuerdo con la física clásica, si los electrones están en movimiento alrededor del núcleo, deberían acelerarse continuamente, perdiendo energía hasta colapsar con el núcleo.
- Bohr resolvió este dilema utilizando la hipótesis cuántica de Planck.



Teoría cuántica

- **Planck** → *cuantización de la energía*: la energía es discontinua (cuantos de energía). La energía de un cuanto de radiación electromagnética es proporcional a la frecuencia de la radiación:

Ecuación de Planck: $E = h \nu$ ($h = 6.62607 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$)
↑ constante de Planck

- **Einstein** → *interpretación corpuscular de la radiación*: la radiación electromagnética tienen propiedades corpusculares; las “partículas” de luz (fotones) tienen una energía dada por la ecuación de Planck.
- **De Broglie** → *dualidad onda-partícula*: las partículas pequeñas de materia pueden mostrar propiedades de ondas, cuya longitud de onda es inversamente proporcional a su momento lineal:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

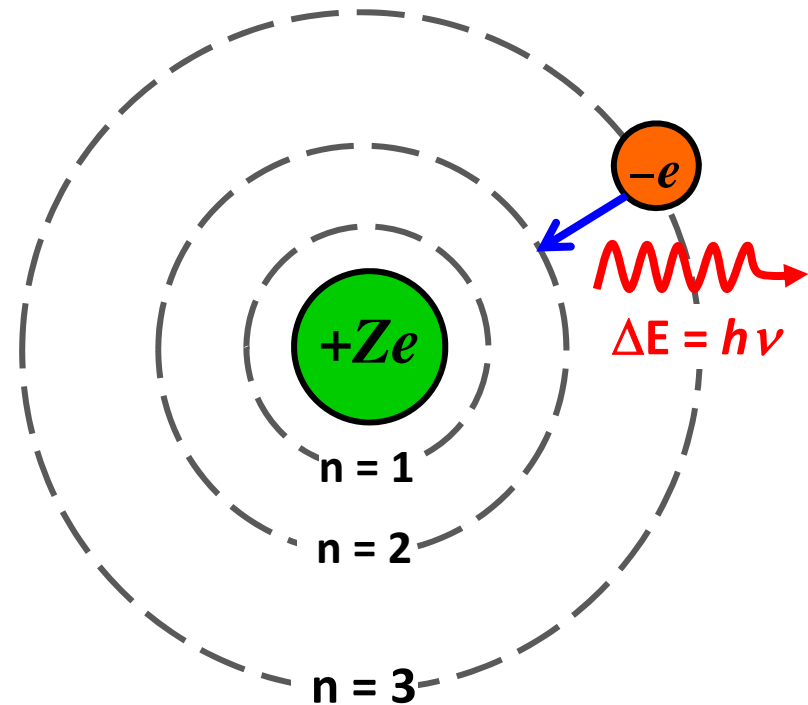
Modelo atómico de Bohr

■ Bohr → *cuantización del momento angular orbital*:

- El electrón se mueve en órbitas circulares alrededor del núcleo (órbitas clásicas), pero solo hay un conjunto de órbitas permitidas, que son aquellas que cumplen:

$$L = n\hbar = n\frac{h}{2\pi} \quad \left\{ \begin{array}{l} L \rightarrow \text{momento angular orbital} \\ n = 1, 2, 3, \dots \end{array} \right.$$

- Los electrones pueden saltar de una órbita a otra, emitiendo o absorbiendo cantidades de energía discretas y fijas (cuantos): $\Delta E = h\nu$



Modelo atómico de Bohr

■ Átomos hidrogenoides (un electrón):

■ Energía: $E_n = \frac{-Z^2 R_H}{n^2}$ ($R_H = 2.179 \cdot 10^{-18} \text{ J} \rightarrow$ constante de Rydberg)

$n = 1 \rightarrow$ *estado fundamental*

$n = 2, 3, \dots \rightarrow$ *estados excitados*

■ Limitaciones del modelo de Bohr:

- No justifica el postulado de cuantización del momento angular.
- No permite explicar espectros de átomos con más de un electrón.

Mecánica cuántica

- **Thomson y Davidsson** → *dualidad onda-partícula del electrón*: el electrón es una onda.
- **Schrödinger** → *ecuación de onda para el movimiento del electrón*: el electrón puede ser descrito mediante una ecuación matemática denominada **función de onda, ψ** , que se obtiene resolviendo una ecuación de ondas, llamada **ecuación de Schrödinger**.

$$-\frac{\hbar}{2m_e} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 y} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 z} \right) + V\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \psi = \psi(x, y, z, t)$$

- En el caso de estados que no varían con el tiempo (estacionarios):

$$\underbrace{-\frac{\hbar}{2m_e} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 y} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 z} \right) + V\psi}_{\hat{H}\psi} = E\psi \quad \psi = \psi(x, y, z)$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Ecuación Schrödinger independiente del tiempo

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

- Las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno proporcionan las funciones de onda para el electrón en el átomo de hidrógeno. Estas funciones se denominan **orbitales** y pueden escribirse como:

$$\Psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\phi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$$

función radial *función angular*

- Cada orbital tiene 3 **números cuánticos** que lo definen:

$n \rightarrow n^\circ$ cuántico principal

$\ell \rightarrow n^\circ$ cuántico angular

$m_\ell \rightarrow n^\circ$ cuántico magnético

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$m_\ell = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \dots, \ell-1, +\ell$$

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

- Todos los orbitales con el mismo valor de n se encuentran en la misma *capa electrónica principal o nivel principal*.

$n = 1 \rightarrow$ primera capa; $n = 2 \rightarrow$ segunda capa, ...

- Todos los orbitales con el mismo valor de ℓ se encuentran en la misma *subcapa o subnivel*. Las subcapas se nombran según el valor de ℓ :

$\ell = 0 \rightarrow$ orbital *s*

$\ell = 1 \rightarrow$ orbital *p*

$\ell = 2 \rightarrow$ orbital *d*

$\ell = 3 \rightarrow$ orbital *f*

...

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

- Los orbitales se suelen representar indicando el número de capa, el símbolo de la subcapa y el valor de m_ℓ como subíndice.

Ejemplo: $n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0 \rightarrow$ orbital 1s

$n = 2, \ell = 1, m_\ell = +1 \rightarrow$ orbital $2p_{+1}$

$n = 5, \ell = 3, m_\ell = -2 \rightarrow$ orbital $5f_{-2}$

- Energía:

$$E_n (\text{J}) = \frac{-2.178 \cdot 10^{-18}}{n^2}$$

- Todos los orbitales con el mismo valor de n tienen la misma energía; se dice que están *degenerados*.

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

n	ℓ	m_ℓ	símbolo
1 <i>(primera capa)</i>	0 <i>(orbital s)</i>	0	1s
2 <i>(segunda capa)</i>	0 <i>(orbital s)</i>	0	2s
	1 <i>(orbital p)</i>	-1	$2p_{-1} = 2p_x$
		0	$2p_0 = 2p_y$
		1	$2p_{+1} = 2p_z$

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

n	ℓ	m_ℓ	símbolo
3 (tercera capa)	0 (orbital s)	0	3s
	1 (orbital p)	-1	$3p_{-1} = 3p_x$
		0	$3p_0 = 3p_y$
		1	$3p_{+1} = 3p_z$
	2 (orbital d)	-2	$3d_{-2} = 3d_{xy}$
		-1	$3d_{-1} = 3d_{xz}$
		0	$3d_0 = 3d_{yz}$
		1	$3d_{+1} = 3d_{x^2-y^2}$
		2	$3d_{+2} = 3d_{z^2}$

Orbitales atómicos hidrogenoides

- Orbitales del átomo de hidrógeno:

$$\Psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\phi) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{función radial}}}{R_{n,\ell}(r)} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{función angular}}}{Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)}$$

- *Ejemplo:* $\Psi_{1s} = \left(\frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}} \right) \times \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \right) = \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi a_0^3}}$ ($a_0 = 0.529 \text{ \AA}$, radio de Bohr)

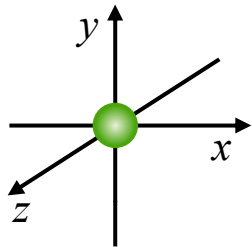
- La función de onda por sí misma no tiene significado físico. Sin embargo, el cuadrado de la función de onda, Ψ^2 , es una magnitud que puede relacionarse con la *probabilidad de encontrar al electrón* en un determinado volumen (*densidad electrónica*).

- *Ejemplo:* $(\Psi_{1s})^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 e^{-2r/a_0}$

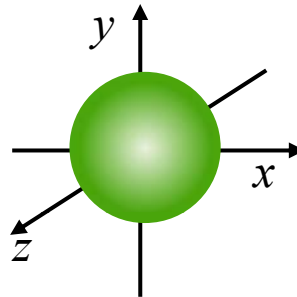
Orbitales atómicos hidrogenoides

Densidad electrónica en el átomo de hidrógeno

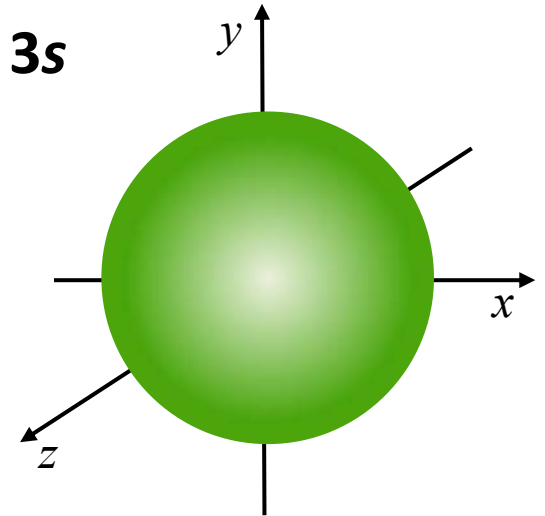
1s



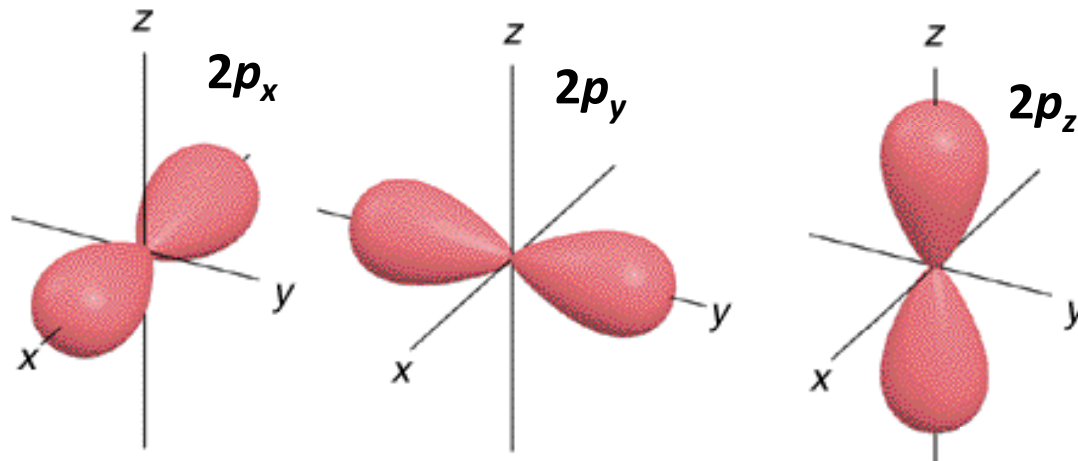
2s



3s

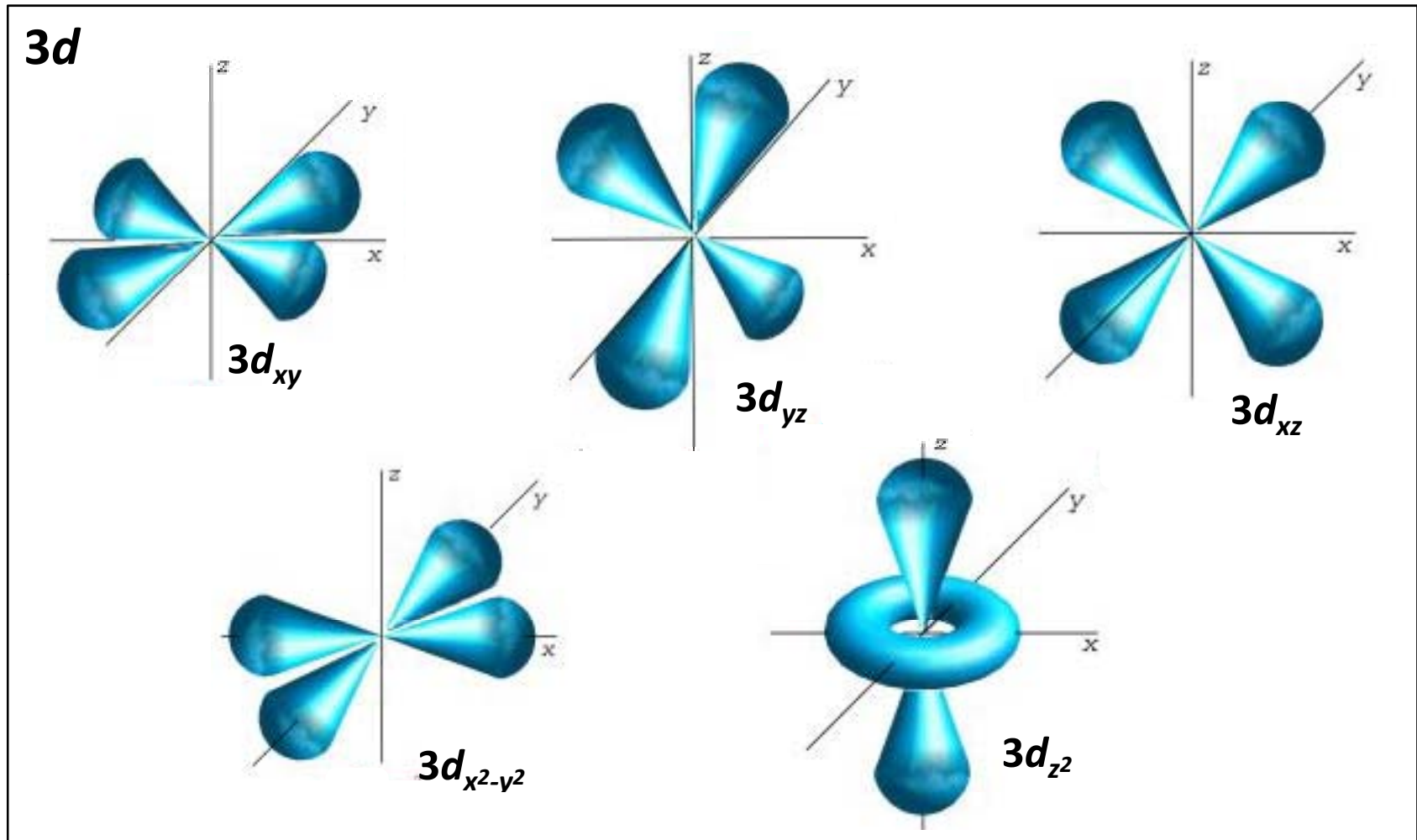


2p



Orbitales atómicos hidrogenoides

Densidad electrónica en el átomo de hidrógeno



Espín del electrón

- Además de los 3 números cuánticos n , ℓ y m_ℓ , hay otro llamado **número cuántico de espín, m_s** , que está relacionado con la orientación del electrón en un campo magnético.
- El número cuántico de espín puede tomar dos valores, que son independientes de los otros 3 números cuánticos:

$$\begin{array}{l} m_s = +\frac{1}{2} \text{ espín } \alpha (\uparrow) \\ m_s = -\frac{1}{2} \text{ espín } \beta (\downarrow) \end{array}$$

- **Estructura electrónica del átomo de hidrógeno**: el electrón en el estado fundamental se encuentra en el nivel de energía más bajo:

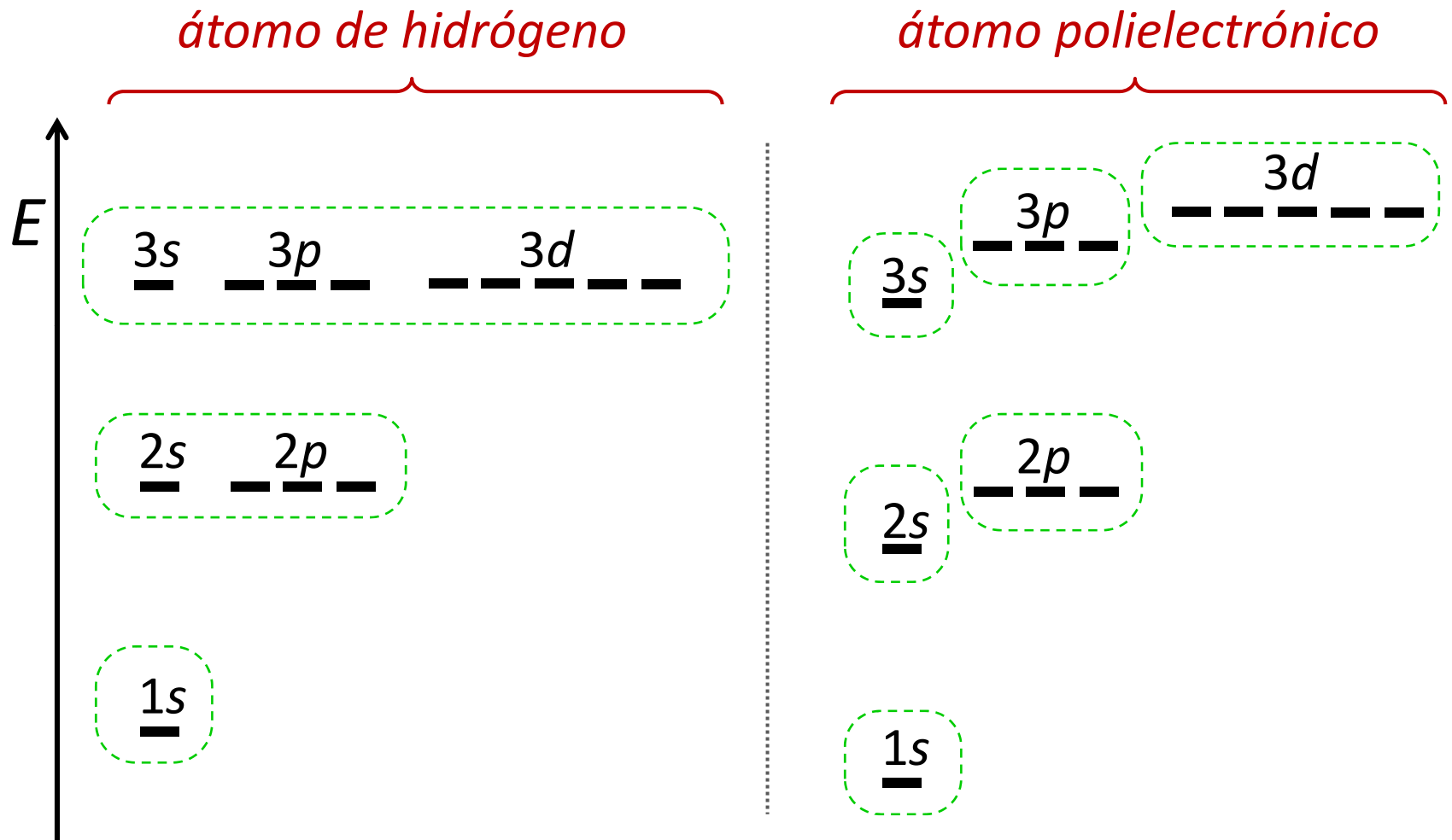
$$n = 1; \quad \ell = 0; \quad m_\ell = 0; \quad m_s = +\frac{1}{2} \text{ o } -\frac{1}{2}$$

$1s^1$

Átomos polielectrónicos

- La ecuación de Schrödinger para átomos con más de un electrón es mucho más compleja de resolver debido a las repulsiones interelectrónicas.
- Se utilizan **soluciones aproximadas** que se obtienen representando la contribución de cada electrón mediante una función parecida a los orbitales del hidrógeno.
- La parte angular de los orbitales de átomos polielectrónicos es similar a las de los orbitales hidrogenoides, pero no la parte radial.
- En átomos polielectrónicos, los orbitales con el mismo n° cuántico n y valores diferentes de ℓ *no son degenerados*.

Átomos polielectrónicos



Configuraciones electrónicas

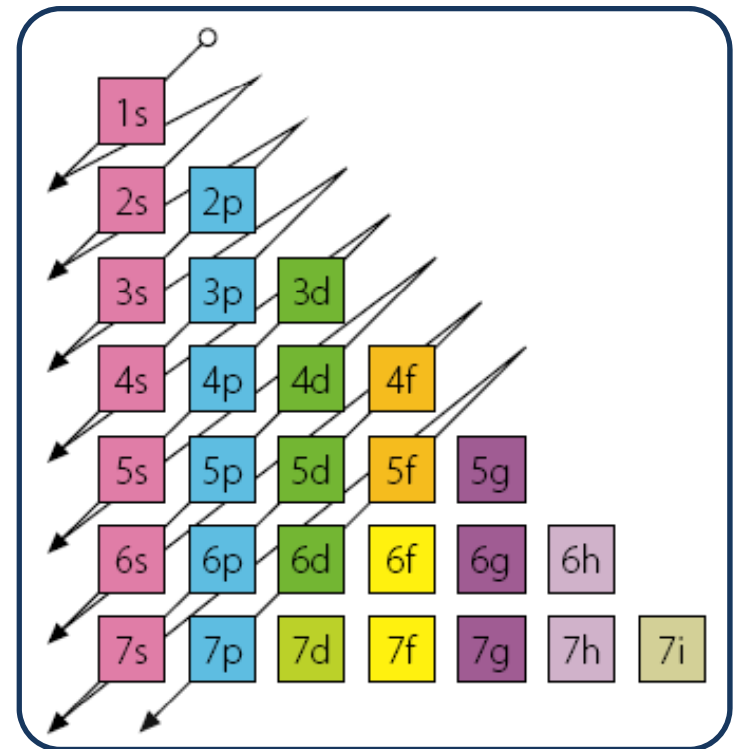
- **Configuración electrónica:** distribución de los electrones en los diferentes orbitales en las capas principales y subcapas.
- **Reglas para el llenado de orbitales:**
 - 1) Mínima energía:** los electrones ocupan los orbitales de forma que se minimice la energía del átomo.
 - 2) Principio de Exclusión de Pauli:** dos electrones de un átomo no pueden tener los 4 números cuánticos iguales.
 - 3) Regla de Hund:** cuando hay orbitales degenerados, los electrones ocupan en primer lugar estos orbitales de forma desapareada.

Configuraciones electrónicas

- El orden de energías de los orbitales se realizó experimentalmente y es el siguiente (excepto para algunas pocas excepciones):

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p \dots$$

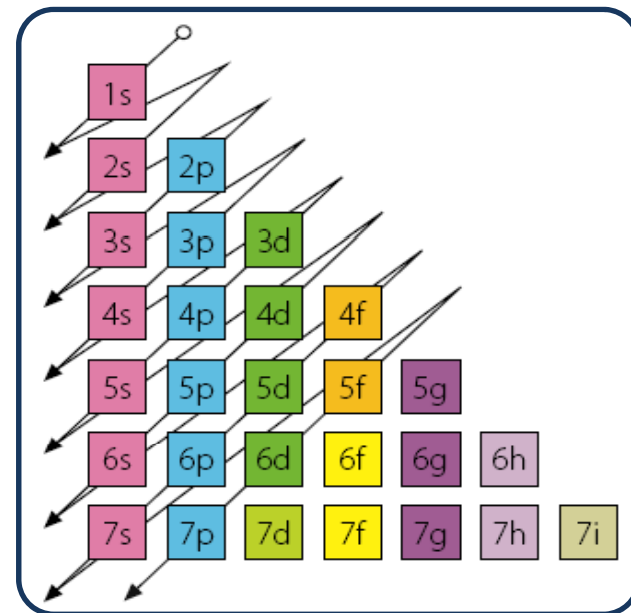
- En general, el orbital de menor energía es aquel de menor valor de la $(n + \ell)$; en caso de igualdad, es más estable el de menor n .
- Una forma simple de recordar el orden energético para el llenado es utilizar el siguiente diagrama:



Configuraciones electrónicas

- Utilizamos el **Principio Aufbau** (*construcción progresiva*) para asignar las configuraciones electrónicas a los elementos por orden creciente de su número atómico.

- H (1 electrón): $1s \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$
 - He (2 electrones): $1s^2 \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$
 - Li (3 electrones): $1s^2 2s \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array}$
 - Be (4 electrones): $1s^2 2s^2 \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array}$
 - B (5 electrones): $1s^2 2s^2 2p \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \uparrow\downarrow \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}$
- ↙ *electrones internos* *electrones de valencia*



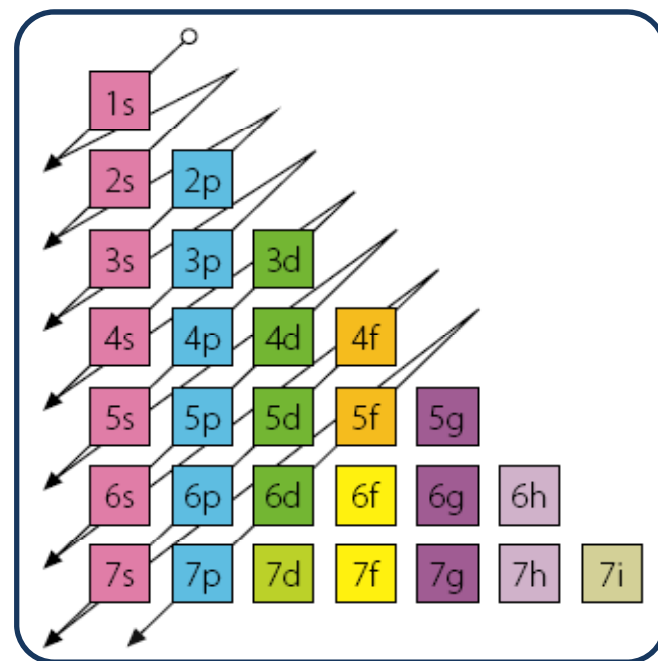
Configuraciones electrónicas

- C (6 electrones): $1s^2 2s^2 2p^2 \rightarrow$

1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
↑↓	↑↓	↑	↑	
- N (7 electrones): $1s^2 2s^2 2p^3 \rightarrow$

1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
↑↓	↑↓	↑	↑	↑
- O (8 electrones): $1s^2 2s^2 2p^4 \rightarrow$

1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑
- ...
- Ne (10 electrones): $1s^2 2s^2 2p^6$
- Na (11 electrones): $1s^2 2s^2 2p^6 3s = [\text{Ne}]3s$
- ...

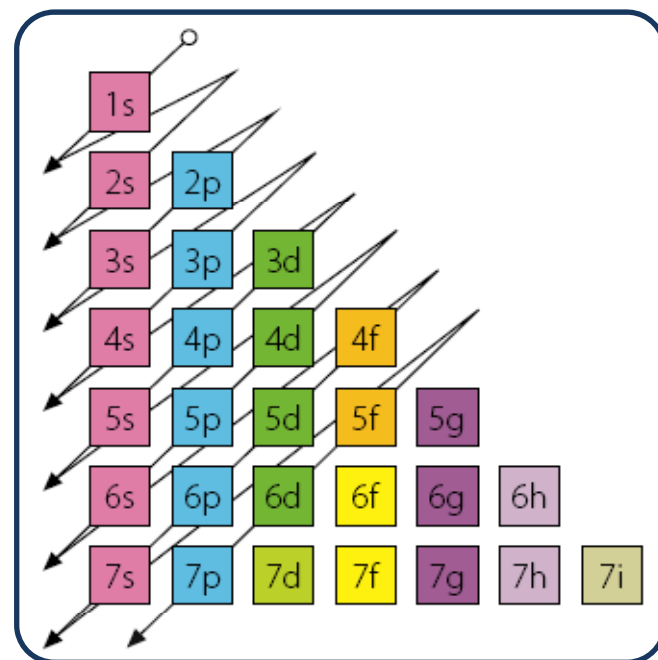


Configuraciones electrónicas

- Na^+ (10 electrones): $1s^2 2s^2 2p^6 = [\text{Ne}]$
- F^- (10 electrones): $1s^2 2s^2 2p^6 = [\text{Ne}]$

■ Excepciones:

- Cr (24 electrones): $[\text{Ar}] 4s 3d^5$
- Cu (29 electrones): $[\text{Ar}] 4s 3d^{10}$
- ...



Diamagnetismo / paramagnetismo

- Un electrón es una carga eléctrica en movimiento que induce un campo magnético.
- En un átomo o ion **diamagnético** todos los electrones están *apareados* y los efectos magnéticos individuales se cancelan.
- Un átomo o ion **paramagnético** tiene electrones *desapareados* y los efectos magnéticos individuales no se cancelan. Los electrones desapareados inducen un campo magnético que hace que el átomo o ion sea atraído por un campo magnético externo.

Ejemplos:

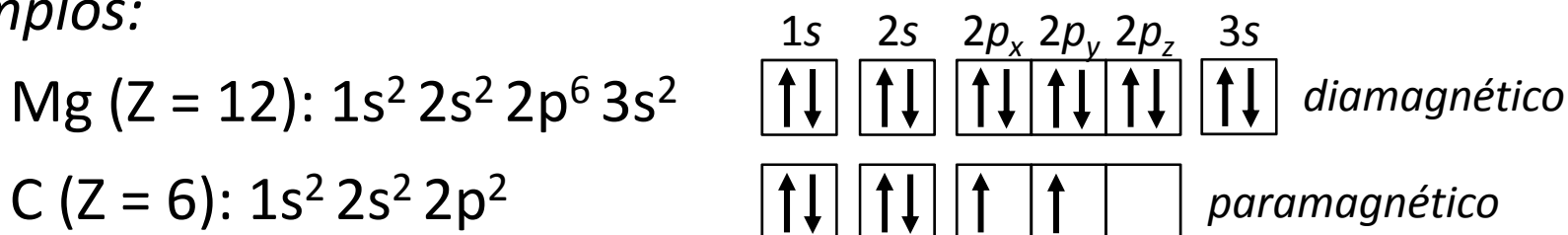


Tabla Periódica y propiedades periódicas

grupos principales **GRUPOS**

elementos de transición

PERIODOS

PERIODIC TABLE
Atomic Properties of the Elements

NIST
National Institute of Standards and Technology
Technology Administration, U.S. Department of Commerce

Frequently used fundamental physical constants
For the most accurate values of these and other constants, visit physics.nist.gov/constants
1 second = 0 192 631 770 periods of radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of ¹³³Cs

speed of light in vacuum c 299 792 458 m s⁻¹ (exact)
Planck constant h 6.626 070 15 × 10⁻³⁴ J s (exact)
elementary charge e 1.602 176 634 × 10⁻¹⁹ C
electron mass m_e 9.109 383 56 × 10⁻³¹ kg
proton mass m_p 1.672 621 9 × 10⁻²⁷ kg
fine-structure constant α 1/137.036
Rydberg constant R_∞ 10 973 732 m⁻¹
 $R_\infty c$ 3.289 842 × 10¹⁵ Hz
 $R_\infty hc$ 13.6057 eV
Boltzmann constant k 1.3807 × 10⁻²³ J K⁻¹

Solids
 Liquids
 Gases
 Artificially Prepared

Group 1 IA	2 IIA	3 IIIB										4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII	9 VIII	10 VIII	11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA																																																																
1 H Hydrogen 1.00784 1s 13.5984	2 He Helium 4.002602 1s ² 24.5874	3 Li Lithium 6.941 1s ² 2s ¹ 5.3917	4 Be Beryllium 9.012182 1s ² 2s ² 9.3227	11 Na Sodium 22.989770 [Ne]3s ¹	12 Mg Magnesium 24.3050 [Ne]3s ² 7.6462	19 K Potassium 39.0983 [Ar]4s ¹ 4.3407	20 Ca Calcium 40.078 [Ar]4s ² 6.1132	21 Sc Scandium 44.955910 [Ar]3d ¹ 4s ² 6.5615	22 Ti Titanium 50.9415 [Ar]3d ² 4s ² 6.8281	23 V Vanadium 50.9415 [Ar]3d ³ 4s ² 6.7462	24 Cr Chromium 51.9961 [Ar]3d ⁵ 4s ¹ 6.7665	25 Mn Manganese 54.938045 [Ar]3d ⁵ 4s ² 7.4340	26 Fe Iron 55.845 [Ar]3d ⁶ 4s ² 7.9024	27 Co Cobalt 58.933200 [Ar]3d ⁷ 4s ² 7.8610	28 Ni Nickel 58.6934 [Ar]3d ⁸ 4s ² 7.6398	29 Cu Copper 63.546 [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ 7.7254	30 Zn Zinc 65.409 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 9.3942	31 Ga Gallium 69.723 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5.9993	32 Ge Germanium 72.64 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 7.8994	33 As Arsenic 74.92160 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ 5.7886	34 Se Selenium 78.96 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ 5.7524	35 Br Bromine 79.904 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ 11.8138	36 Kr Krypton 83.798 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ 13.9996	37 Rb Rubidium 85.4678 [Kr]5s ¹ 4.7171	38 Sr Strontium 87.62 [Kr]5s ² 6.6949	39 Y Yttrium 88.90585 [Kr]4d ¹ 5s ² 6.2173	40 Zr Zirconium 91.224 [Kr]4d ² 5s ² 6.6339	41 Nb Niobium 92.90638 [Kr]4d ⁴ 5s ¹ 6.7589	42 Mo Molybdenum 95.94 [Kr]4d ⁵ 5s ¹ 7.0924	43 Tc Technetium 98 [Kr]4d ⁵ 5s ² 7.28	44 Ru Ruthenium 101.07 [Kr]4d ⁷ 5s ¹ 7.3605	45 Rh Rhodium 102.90550 [Kr]4d ⁸ 5s ¹ 7.4589	46 Pd Palladium 106.42 [Kr]4d ¹⁰ 5s ⁰ 8.3369	47 Ag Silver 107.8682 [Kr]4d ¹⁰ 5s ¹ 7.5782	48 Cd Cadmium 112.411 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 8.9938	49 In Indium 114.818 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹ 5.7864	50 Sn Tin 118.710 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ² 7.3439	51 Sb Antimony 121.760 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³ 8.6084	52 Te Tellurium 127.60 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴ 9.0096	53 I Iodine 126.90447 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵ 10.4513	54 Xe Xenon 131.29 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶ 12.1298	55 Cs Cesium 132.90545 [Xe]6s ¹ 3.6599	56 Ba Barium 137.327 [Xe]6s ² 6.2117	72 Hf Hafnium 178.49 [Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ² 6.6251	73 Ta Tantalum 180.9479 [Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 7.4496	74 W Tungsten 183.84 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ² 7.8640	75 Re Rhenium 186.207 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ² 7.8336	76 Os Osmium 190.23 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ² 8.4302	77 Ir Iridium 192.22 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ² 8.9676	78 Pt Platinum 195.078 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹ 8.9506	79 Au Gold 196.96655 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹ 9.2266	80 Hg Mercury 200.59 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 16.4376	81 Tl Thallium 204.3833 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹ 6.1002	82 Pb Lead 207.2 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ² 7.4167	83 Bi Bismuth 208.98038 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³ 7.2056	84 Po Polonium (209) [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴ 8.414	85 At Astatine (210) [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵ 8.414	86 Rn Radon (222) [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶ 10.7486	87 Fr Francium (223) [Rn]7s ¹ 4.0727	88 Ra Radium (226) [Rn]7s ² 5.2764	57 La Lanthanum 138.9055 [Xe]5d ¹ 6s ² 5.5769	58 Ce Cerium 140.116 [Xe]4f ¹ 5d ¹ 6s ² 5.5387	59 Pr Praseodymium 140.90765 [Xe]4f ³ 6s ² 5.473	60 Nd Neodymium 144.24 [Xe]4f ⁴ 6s ² 5.5250	61 Pm Promethium (145) [Xe]4f ⁵ 6s ² 5.52	62 Sm Samarium 150.36 [Xe]4f ⁶ 6s ² 5.6437	63 Eu Europium 151.964 [Xe]4f ⁷ 6s ² 5.6704	64 Gd Gadolinium 157.25 [Xe]4f ⁷ 5d ¹ 6s ² 6.1498	65 Tb Terbium 158.92534 [Xe]4f ⁹ 6s ² 5.9389	66 Dy Dysprosium 162.500 [Xe]4f ¹⁰ 6s ² 6.0215	67 Ho Holmium 164.93032 [Xe]4f ¹¹ 6s ² 6.0215	68 Er Erbium 167.259 [Xe]4f ¹² 6s ² 6.1077	69 Tm Thulium 168.93421 [Xe]4f ¹³ 6s ² 6.2542	70 Yb Ytterbium 173.04 [Xe]4f ¹⁴ 6s ² 6.2542	71 Lu Lutetium 174.967 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ² 6.2542	89 Ac Actinium (227) [Rn]7s ² 7p ¹ 5.17	90 Th Thorium 232.0381 [Rn]7s ² 7p ² 6.3067	91 Pa Protactinium 231.03689 [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 5.89	92 U Uranium 238.02891 [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.1941	93 Np Neptunium (237) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.2657	94 Pu Plutonium (244) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.12650	95 Am Americium (243) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 5.9738	96 Cm Curium (247) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 5.9914	97 Bk Berkelium (247) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.1979	98 Cf Californium (251) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.2817	99 Es Einsteinium (252) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.42	100 Fm Fermium (257) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.50	101 Md Mendelevium (258) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.58	102 No Nobelium (259) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 6.65	103 Lr Lawrencium (262) [Rn]7s ² 7p ² 6d ¹ 7s ¹ 4.97

Atomic Number Ground-state Level
 Symbol Name
 Atomic Weight Ground-state Configuration Ionization Energy (eV)

58 ¹G₄
Ce
 Cerium
 140.116
 [Xe]4f¹5d¹6s²
 5.5387

57 ²D_{3/2} 58 ¹G₄ 59 ²F_{5/2} 60 ¹I_{3/2} 61 ⁴F_{3/2} 62 ²F_{5/2} 63 ⁴G_{7/2} 64 ²D_{3/2} 65 ⁴F_{7/2} 66 ²I_{3/2} 67 ⁴F_{7/2} 68 ²H_{3/2} 69 ⁴F_{7/2} 70 ¹S_{1/2} 71 ²D_{3/2}

Lanthanides
 Actinides

→ Lantánidos
 → Actínidos

¹Based upon ¹²C. () indicates the mass number of the most stable isotope.
 For a description of the data, visit physics.nist.gov/data
 NIST SP 966 (September 2003)

Tabla Periódica y propiedades periódicas

alcalinos: ns¹

alcalinotérreos : ns²

gases nobles: ns²np⁶

halógenos: ns²np⁵

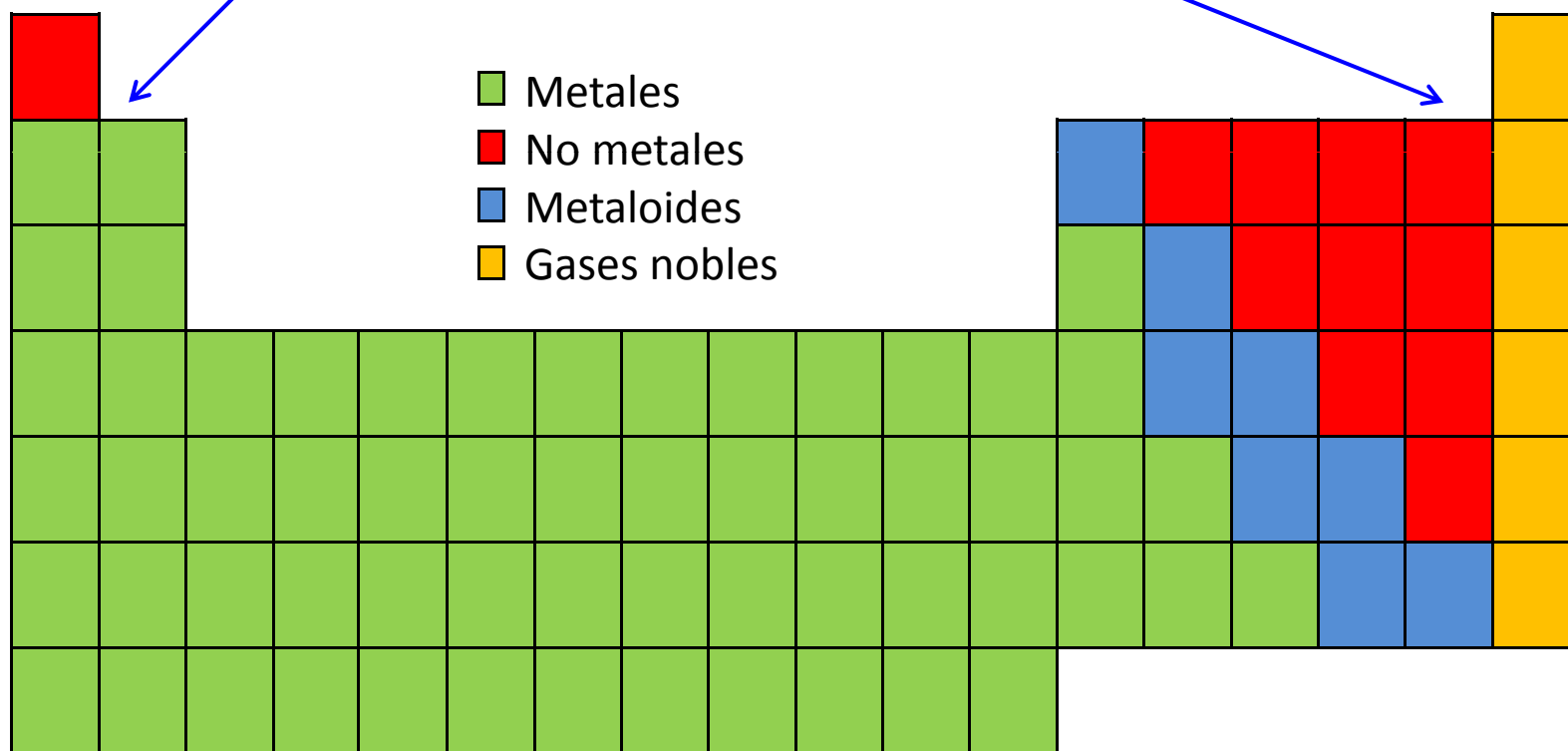


Tabla Periódica y propiedades periódicas

■ Algunas propiedades periódicas:

- Radio atómico
- Energía de ionización
- Afinidad electrónica

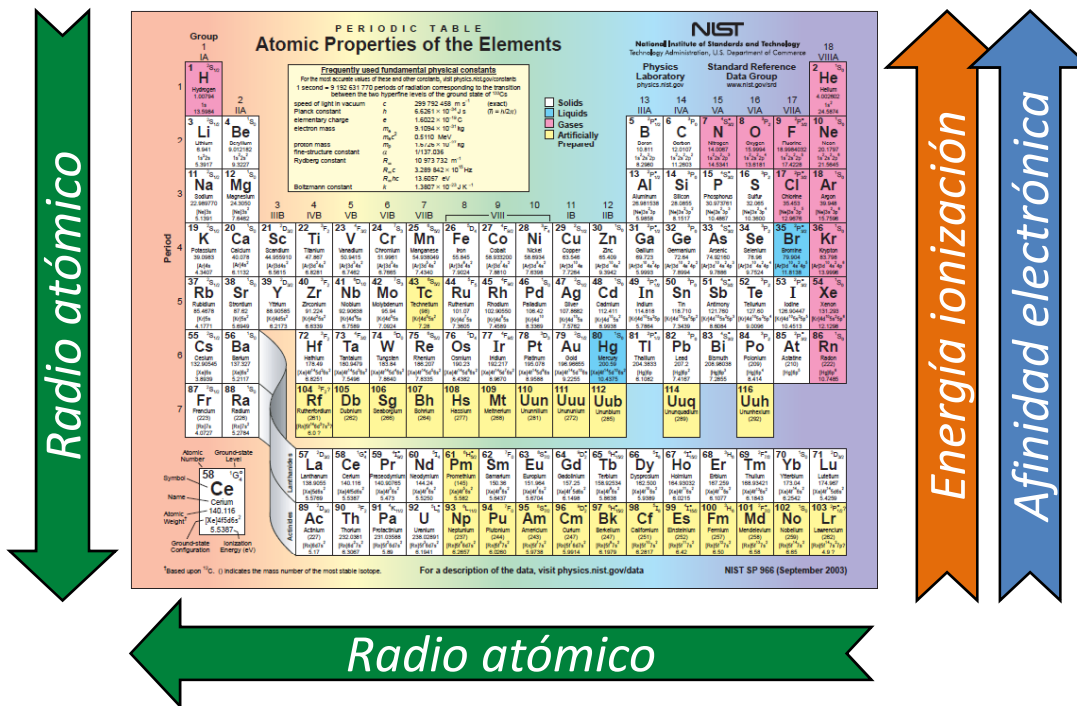


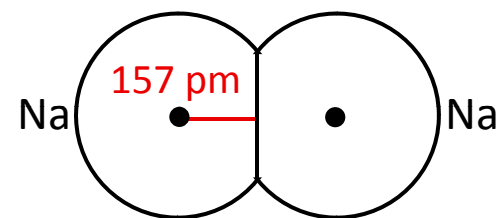
Tabla Periódica y propiedades periódicas

RADIO ATÓMICO

- Lo único que se puede medir es la distancia entre los núcleos de átomos adyacentes (*distancia internuclear*).

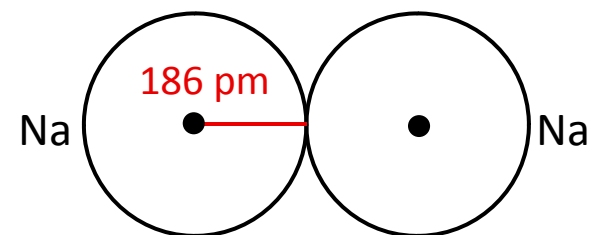
- Radio covalente:** mitad de la distancia entre los núcleos de dos átomos idénticos unidos por un *enlace covalente simple*.

Ejemplo: molécula $\text{Na}_2(g)$



- Radio metálico:** mitad de la distancia entre los núcleos de dos átomos contiguos del *metal sólido cristalino*.

Ejemplo: $\text{Na}(s)$



- Radio iónico:** radio del ion en una *red cristalina* (iones unidos por un enlace iónico)

Ejemplo: NaCl

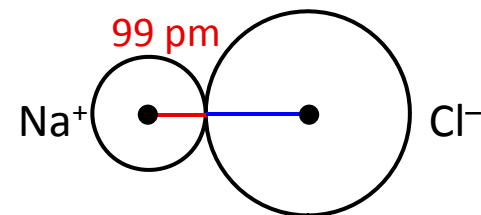


Tabla Periódica y propiedades periódicas

- El radio atómico está relacionado con la **carga nuclear efectiva** (apantallada) que experimentan los electrones de la capa más externa del átomo.
- **Reglas generales:**
 - Cuantas más capas electrónicas tenga el átomo, mayor será su tamaño.
 - El radio atómico disminuye de izquierda a derecha a lo largo de un periodo de elementos (*excepción elementos de transición*).

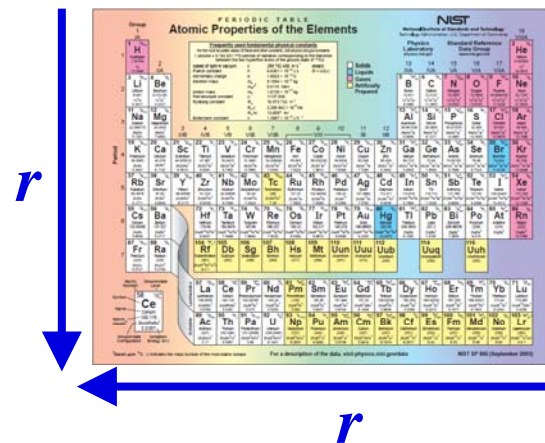
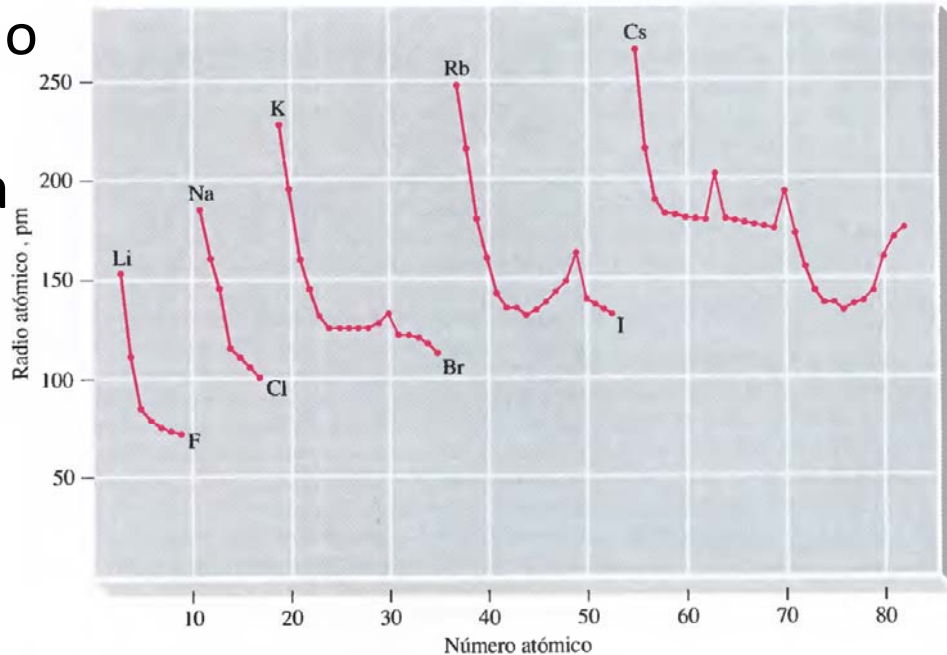


Tabla Periódica y propiedades periódicas

Radio iónico: *cationes*

- Los cationes son más pequeños que los átomos de los que proceden (*misma carga nuclear y menor carga electrónica*).

Ejemplo: $r(\text{Na}^+) = 99 \text{ pm}$; $r(\text{Na}) = 186 \text{ pm}$ $\rightarrow r(\text{Na}^+) < r(\text{Na})$

- Para un elemento dado, el radio es menor cuanto mayor es la carga del catión (*misma carga nuclear y menor carga electrónica*).

Ejemplo: $r(\text{Mg}^{2+}) < r(\text{Mg}^+) < r(\text{Mg})$

- En cationes con el mismo número de electrones (isoelectrónicos), el radio disminuye al aumentar el número atómico (*mayor carga nuclear y misma carga electrónica*).

Ejemplo: $r(\text{Na}^+) > r(\text{Mg}^{2+})$

Tabla Periódica y propiedades periódicas

Radio iónico: *aniones*

- Los aniones tienen mayor radio que los átomos de los que proceden (*misma carga nuclear y mayor carga electrónica*).
- Para un elemento dado, el radio es mayor cuanto mayor es la carga del anión (*misma carga nuclear y mayor carga electrónica*).
- El radio de los aniones isoelectrónicos disminuye al aumentar el número atómico (*mayor carga nuclear y misma carga electrónica*).

Tabla Periódica y propiedades periódicas

ENERGÍA DE IONIZACIÓN

- **Energía de ionización atómica:** mínima energía que debe absorber un átomo o ion atómico en estado gaseoso para perder un electrón.
 - **Primera energía de ionización:** energía de ionización correspondiente al átomo neutro.
 - **Segunda, tercera, ... energías de ionización:** energías de ionización correspondientes a los cationes monovalentes, divalentes, ...

■ Ejemplo: *energías de ionización del fósforo*

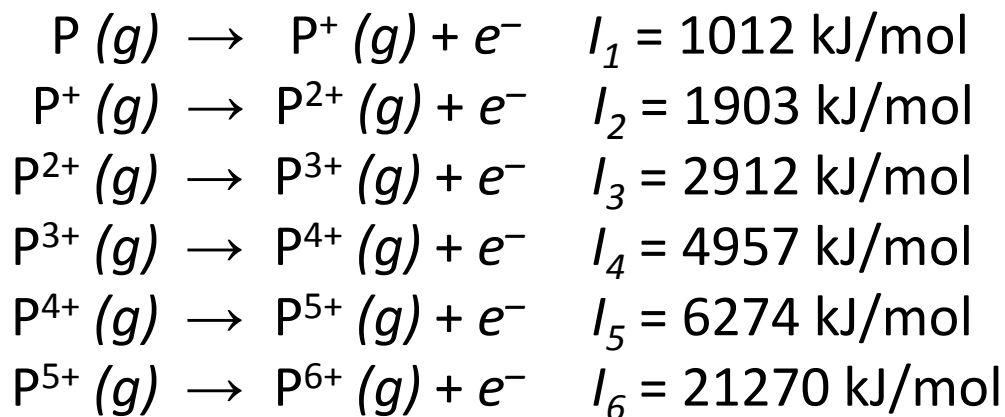


Tabla Periódica y propiedades periódicas

Primera energía de ionización atómica

- En general, cuanto más alejado está un electrón del núcleo, más fácil resulta alejarlo de éste. Por tanto, las energías de ionización disminuyen al aumentar los radios atómicos.

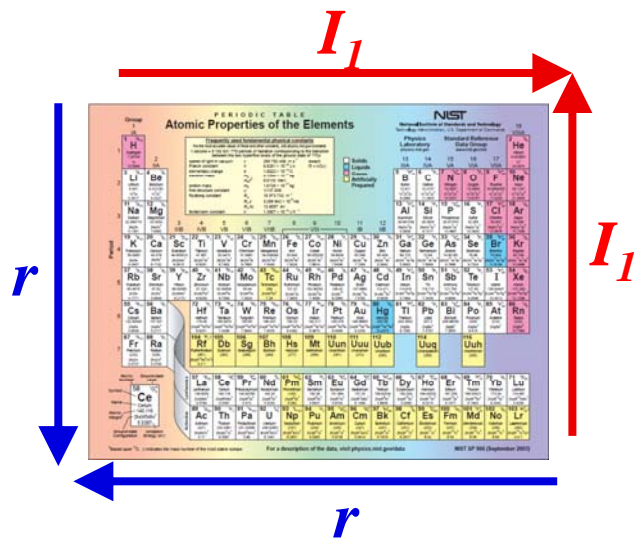
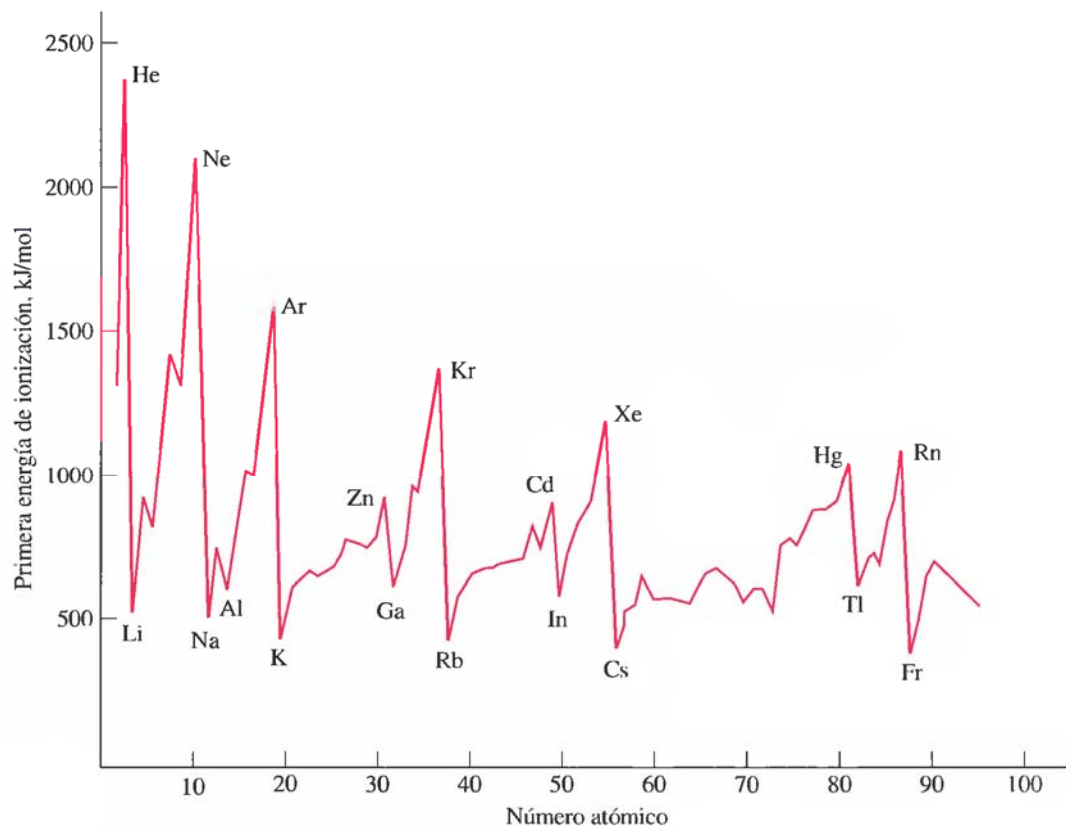


Tabla Periódica y propiedades periódicas

Segunda, tercera, ... energías de ionización atómica

- En general, $I_1 < I_2 < I_3 < \dots$, excepto cuando la ionización supone romper la subcapa de gas noble.

Ejemplo: Mg^{2+} : $1s^2 2s^2 2p^6$

	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
I_1	495,8	737,7	577,6	786,5	1012	999,6	1251,1	1520,5
I_2	4562	1451	1817	1577	1903	2251	2297	2666
I_3		7733	2745	3232	2912	3361	3822	3931
I_4			11580	4356	4957	4564	5158	5771
I_5				16090	6274	7013	6542	7238
I_6					21270	8496	9362	8781
I_7						27110	11020	12000

Tabla Periódica y propiedades periódicas

AFINIDAD ELECTRÓNICA

- **Afinidad electrónica:** es la energía que acompaña a la captura de un electrón por un átomo en estado gaseoso para formar un anión.

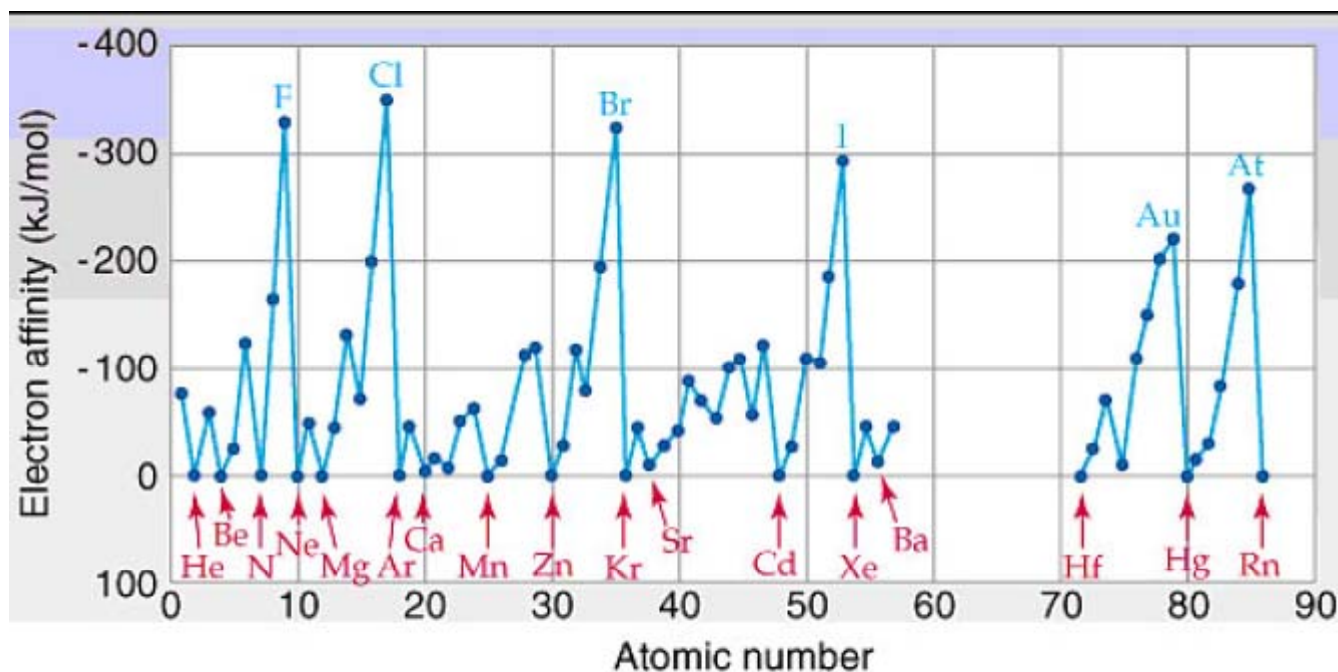
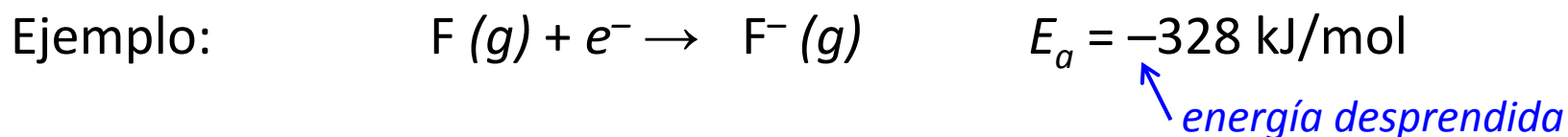
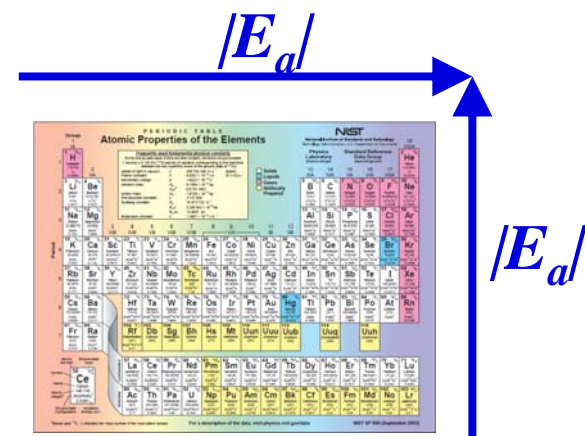


Tabla Periódica y propiedades periódicas

- Los halógenos tienen valores elevados (negativos) de la afinidad electrónica.
- Los gases nobles no tienen tendencia a ganar un electrón ($E_a > 0$).
- **Reglas generales:**
 - La afinidad electrónica aumenta (en valor absoluto) de izquierda a derecha
 - La afinidad electrónica tiende a disminuir (en valor absoluto) según se avanza hacia la parte inferior de un grupo.
 - Hay muchas excepciones, sobre todo en átomos pequeños, en los que el electrón adicional puede sufrir repulsiones que hacen disminuir la estabilidad.



Concepto de mol. Constante de Avogadro.

- **Mol**: es la unidad de cantidad de materia en el Sistema Internacional.
- El número de entidades elementales (átomos, moléculas, ...) que hay en un mol es una constante universal conocida como **constante de Avogadro**:

$$N_A = 6.02214199 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

- Un **compuesto molecular** está formado por unidades discretas llamadas **moléculas**, que consisten en un número pequeño de átomos no metálicos unidos mediante un enlace covalente.

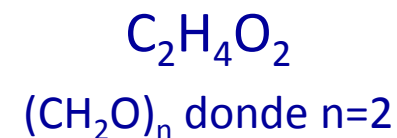
Fórmula empírica y fórmula molecular

- Un **compuesto molecular** está formado por unidades discretas llamadas **moléculas**: número pequeño de átomos no metálicos unidos mediante un enlace covalente. Se representan mediante una **fórmula química**: representación simbólica que indica los elementos presentes y el número de átomos de cada elemento.

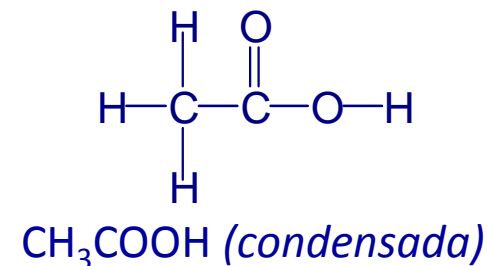
- **Fórmula empírica**: los subíndices solo reflejan la proporción relativa de los distintos tipos de átomos.



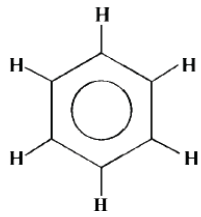
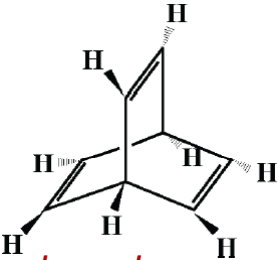
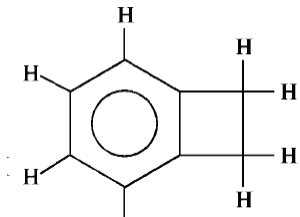
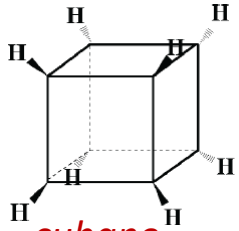
- **Fórmula molecular**: los subíndices representan el número de átomos de cada tipo presentes en una molécula. La fórmula molecular es un “múltiplo” de la fórmula empírica.



- **Fórmula estructural**: muestra el orden en que se unen los átomos en la molécula y los tipos de enlace.



Fórmula empírica y fórmula molecular

Fórmula empírica	Fórmula molecular	Fórmula estructural	
CH	C_2H_2	$H-C\equiv C-H$ <i>acetileno</i>	
	C_6H_6	 <i>benceno</i>	
	C_8H_8	 <i>barreleno</i>	 <i>benzociclobuteno</i>
		 <i>cubano</i>	

Masa atómica, masa molecular y masa molar

- No se puede determinar la masa de un átomo sumando las de sus partículas subatómicas, ya que cuando se forma el núcleo una pequeña cantidad de la masa original se convierte en energía (*defecto de masa*).
- Se toma como referencia el isótopo ^{12}C y el resto de masas isotópicas se determinan en relación a él.
 - La **unidad de masa atómica (uma)** es un doceavo de la masa del isótopo ^{12}C . Por tanto: Isótopo $^{12}\text{C} \rightarrow 12$ uma.
 - $\text{Masa}(^{16}\text{O}) = 1.33291 \text{ masa}(^{12}\text{C}) = 15.9949$ uma

Masa atómica, masa molecular y masa molar

- La **masa atómica** de un elemento es la media de las masas isotópicas, ponderada de acuerdo a la abundancia en la naturaleza de los isótopos del elemento.

$$\text{masa atómica de un elemento} = \left(\begin{array}{c} \text{abundancia} \\ \text{del isótopo 1} \end{array} \right) \times \left(\begin{array}{c} \text{masa del} \\ \text{isótopo 1} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{abundancia} \\ \text{del isótopo 2} \end{array} \right) \times \left(\begin{array}{c} \text{masa del} \\ \text{isótopo 2} \end{array} \right) + \dots$$

- Ejemplo:

^{12}C : *abundancia* = 98.93 %; *masa* = 12 uma

^{13}C : *abundancia* = 1.07 %; *masa* = 13.00335 uma

$$m_{\text{atómica}}(\text{C}) = 0.9893 \times 12 + 0.0107 \times 13.00335 = 12.0107 \text{ uma}$$

Masa atómica, masa molecular y masa molar

- **Masa molecular:** es la masa de una molécula (en uma). Se obtiene sumando las masa atómicas de todos los átomos que forman la molécula.

Ejemplo:

$$\begin{aligned}m_{\text{molecular}}(\text{H}_2\text{O}) &= 2 \times m_{\text{atómica}}(\text{H}) + m_{\text{atómica}}(\text{O}) \\ &= 2 \times 1.00794 + 15.9994 = 18.01528 \text{ uma}\end{aligned}$$

- Conociendo la fórmula química de un compuesto, es posible determinar su **composición centesimal en masa**, es decir, la proporción en masa de cada elemento.

Ejemplo: H₂O

$$\% \text{ H} = \frac{2 \times 1.00794}{18.01528} \times 100 = 11.19 \%$$

$$\% \text{ O} = \frac{15.9994}{18.01528} \times 100 = 88.81 \%$$

Masa atómica, masa molecular y masa molar

- La **masa molar** de una sustancia (átomo, molécula, ...) es la masa de un mol de dicha sustancia (átomo, molécula, ...).
- El valor numérico de la masa molar (g/mol) coincide con el valor numérico de la masa atómica o molecular (uma).

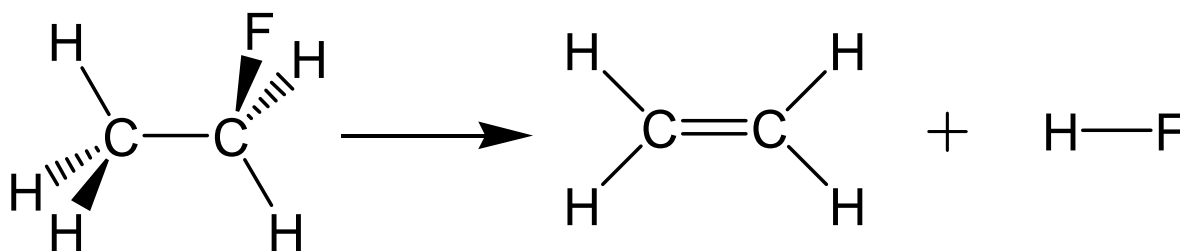
Ejemplo: oxígeno atómico (O) y oxígeno molecular (O₂)

Átomo O	Molécula O ₂
$m_{\text{atómica}}(\text{O}) = 15.9994 \text{ uma}$	$m_{\text{molecular}}(\text{O}_2) = 2 \cdot 15.9994 \text{ uma} = 31.9988 \text{ uma}$
$m_{\text{molar}}(\text{O}) = 15.9994 \text{ g/mol}$	$m_{\text{molar}}(\text{O}_2) = 31.9988 \text{ g/mol}$

Reacciones químicas

- Una **reacción química** es un proceso en el que uno o varios compuestos (*reactivos*) se transforman en otros diferentes (*productos*).

- Ejemplo:



Ecuaciones químicas

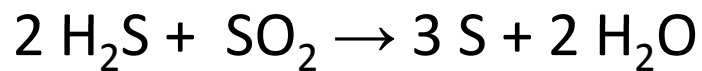
- Una **ecuación química o ecuación estequiométrica** es la representación simbólica de una reacción química.
 - Las moléculas se representan mediante sus fórmulas moleculares.
 - Los reactivos aparecen a la izquierda de la expresión y los productos a la derecha, separados por una flecha (simple o doble).
 - Las fórmulas aparecen precedidas de números llamados *coeficientes estequiométricos*, necesarios para que la ecuación química refleje la **ley de conservación de la materia** y la **ley de conservación de la carga**.



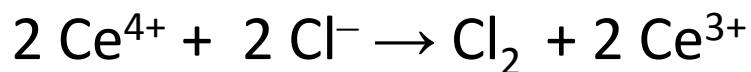
Ajuste de una ecuación química

- **Materia:** todos los átomos que aparecen en los reactivos deben aparecer en las mismas cantidades en los productos.
- **Carga:** la suma de las cargas de los reactivos debe ser igual a la suma de las cargas de los productos.

- *Ejemplos:*



	<i>reactivos</i>	<i>productos</i>
H:	4	4
S:	3	3
O:	2	2
carga:	0	0

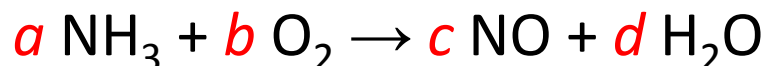


Ce:	2	2
Cl:	2	2
carga:	$4 \cdot 2 - 2 = +6$	$2 \cdot 3 = +6$

Ajuste de una ecuación química

- La forma más general de ajustar una ecuación química consiste en resolver el sistema de ecuaciones lineal resultante de la aplicación de las leyes de conservación de materia y carga, donde las incógnitas son los coeficientes estequiométricos.

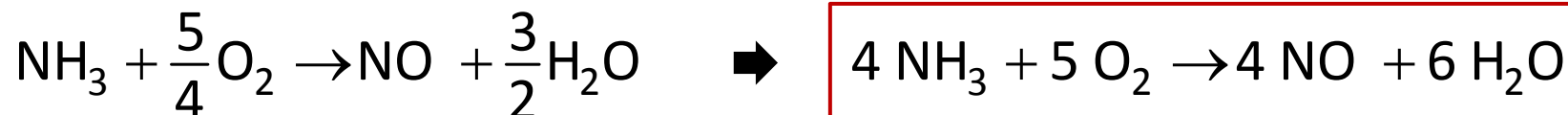
Ejemplo 1



- Ley de conservación de la materia $\left\{ \begin{array}{l} \text{N: } a = c \\ \text{H: } 3a = 2d \\ \text{O: } 2b = c + d \end{array} \right.$

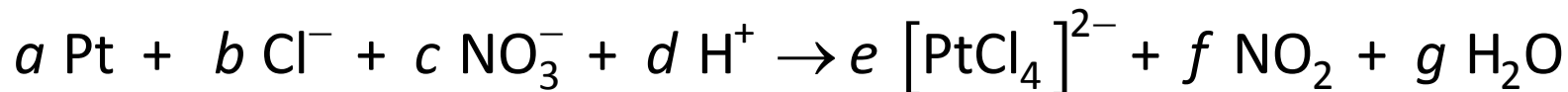
- Damos el valor arbitrario $a = 1$ y determinamos el resto en función de este valor.

$$a = 1; b = 5/4; c = 1; d = 3/2$$

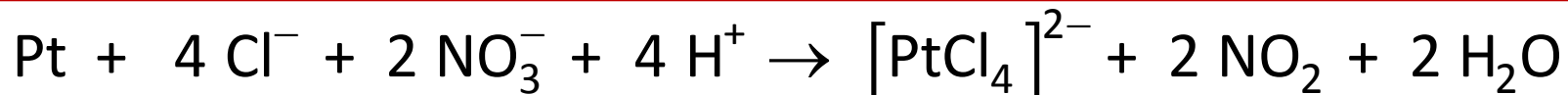


Ajuste de una ecuación química

Ejemplo 2



$$\left. \begin{array}{l} \text{Pt:} \quad a = e \\ \text{Cl}^-: \quad b = 4e \\ \text{N:} \quad c = f \\ \text{O:} \quad 3c = 2f + g \\ \text{H:} \quad d = 2g \\ \text{carga:} \quad -b - c + d = -2e \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{si } a = 1: \\ b = 4; c = 2; d = 4; \\ e = 1; f = 2; g = 2 \end{array}$$



Composición de un sistema reactivo

- La composición de un sistema reactivo varía en el tiempo.
- En un sistema reactivo cerrado (que no pierde ni gana materia), la composición viene determinada por la **estequiometría**. Por tanto, conociendo la ecuación química y la composición en un instante, es posible determinar la composición en otro instante.



- Las variaciones de las cantidades de cada especie respecto de una de ellas, por ejemplo A, vienen dadas por:

$$\Delta n_B = \frac{b}{a} \Delta n_A \quad \Delta n_C = -\frac{c}{a} \Delta n_A \quad \Delta n_D = -\frac{d}{a} \Delta n_A$$

donde $\Delta n_i^0 = n_i^0 - n_i$ $\left\{ \begin{array}{l} n_i^0 \rightarrow n_i^0 \text{ moles en el instante } t_0 \\ n_i \rightarrow n_i \text{ moles en el instante } t \end{array} \right.$

Grado de avance de una reacción

- Se define el **grado de avance de una reacción** como:

$$\xi = \frac{\Delta n_i}{\nu_i} = \frac{n_i - n_i^0}{\nu_i}$$

donde ν_i es el coeficiente estequiométrico de la especie i , con signo negativo si es reactivo y con signo positivo si es producto



$$\xi = \frac{\Delta n_A}{-a} = \frac{\Delta n_B}{-b} = \frac{\Delta n_C}{c} = \frac{\Delta n_D}{d}$$

- La composición del sistema en un instante determinado puede expresarse en función del grado de avance:

$$\Delta n_i = n_i^0 - n_i = \nu_i \cdot \xi \quad \rightarrow \quad n_i = n_i^0 + \nu_i \cdot \xi$$

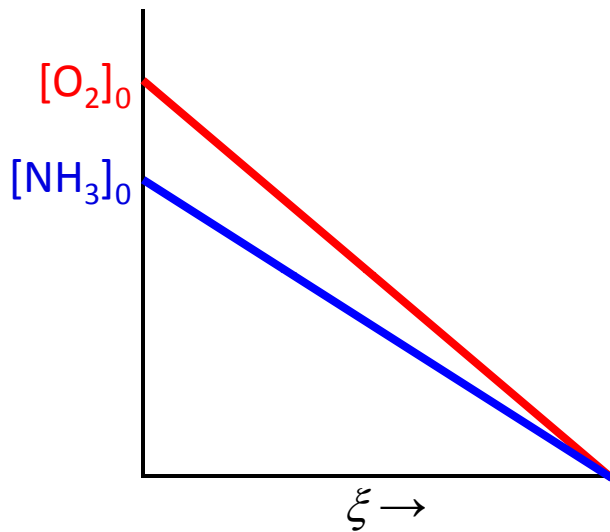
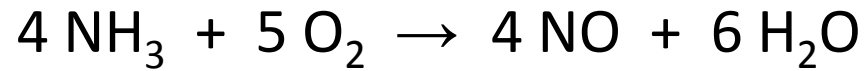
$$n_A = n_A^0 - a \cdot \xi \quad n_B = n_B^0 - b \cdot \xi$$

$$n_C = n_C^0 + c \cdot \xi \quad n_D = n_D^0 + d \cdot \xi$$

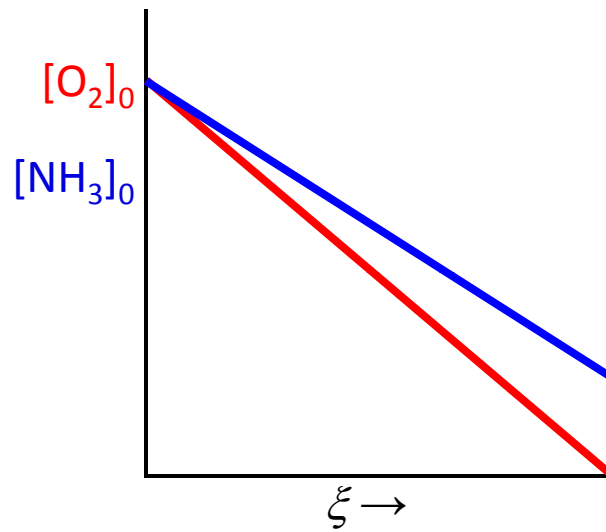
Terminación de una reacción química

- El final de una reacción química puede producirse por agotamiento de uno, varios o todos los reactivos, o bien porque el sistema alcance una situación de equilibrio.
- Si el final se produce por agotamiento de algún reactivo, se dice que la reacción es **completa**:
 - Si se acaban todos los reactivos se dice que la reacción es ***completa en condiciones estequiométricas***.
 - Si no se agotan todos los reactivos se dice que la reacción es ***completa en condiciones no estequiométricas***. El reactivo que se acaba en primer lugar recibe el nombre de **reactivo limitante**.
- Si el sistema alcanza una situación de equilibrio se dice que la reacción es **incompleta**.

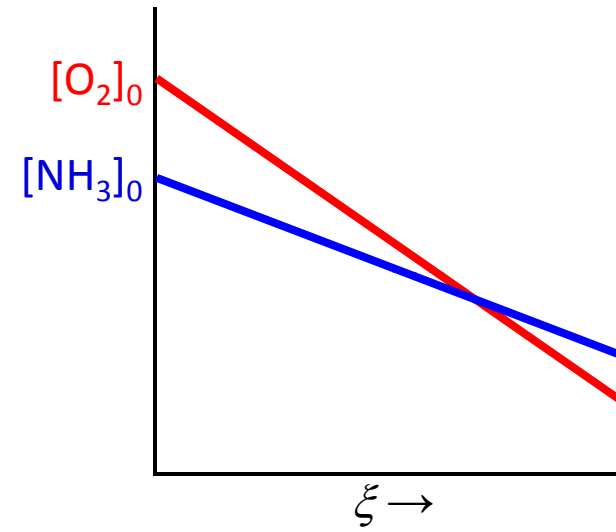
Terminación de una reacción química



Completa en condiciones estequiométricas



Completa en condiciones no estequiométricas



Incompleta (equilibrio)



REACTIVO LIMITANTE

Reactivo limitante

- El reactivo limitante viene determinado por la composición inicial del sistema y por la estequiometría de la reacción.
- El reactivo limitante es aquel que tenga el menor valor de ξ_i^∞ .

$$\xi_i^\infty = \frac{\Delta n_i^\infty}{\nu_i} = \frac{n_i^\infty - n_i^0}{\nu_i} = \frac{0 - n_i^0}{\nu_i} = \frac{-n_i^0}{\nu_i}$$

- Ejemplo: $4 \text{NH}_3 + 5 \text{O}_2 \rightarrow 4 \text{NO} + 6 \text{H}_2\text{O}$
inicial: 3 moles 6 moles

$$\xi^\infty(\text{NH}_3) = \frac{-3}{-4} = \frac{3}{4} = 0.75$$

$$\xi^\infty(\text{O}_2) = \frac{-6}{-5} = \frac{6}{5} = 1.2$$

} NH₃ es el reactivo limitante
O₂ está en exceso

Rendimiento de una reacción

- En algunas reacciones, las cantidades de productos que se calculan pueden no coincidir con las que realmente se obtienen debido a que se puede perder algo de producto al manipularlo o bien los reactivos pueden participar en otras reacciones secundarias, etc. En estos casos, el rendimiento de la reacción no es del 100%.
- El *rendimiento de una reacción* es la relación entre la cantidad de producto que realmente se obtiene en una reacción y la cantidad de producto esperada teóricamente (calculada a partir de las cantidades iniciales de reactivos), expresada en %.

$$\text{Rendimiento (\%)} = \frac{\text{cantidad de producto real}}{\text{cantidad de producto teórica}} \times 100$$

Rendimiento de una reacción

- *Ejemplo:* en un proceso de obtención de formaldehído, CH_2O , a partir de metanol, según la reacción:



se producen 25.7 g de CH_2O , por cada mol de metanol que reacciona. ¿Cuál es el rendimiento de la reacción?

- Por cada mol de CH_3OH que reacciona debería formarse un mol de CH_2O , es decir, $12.0107 + 2 \cdot 1.00794 + 15.9994 = 30.02598$ g de CH_2O

- $\text{Rendimiento} = \frac{25.7}{30.02598} \times 100 = 85.6 \%$