

Tema: Átomo y Enlaces

Modelo atómico de Dalton: primer modelo atómico motivado por experimentos y resultados científicos (leyes ponderales, ley de conservación de la masa de Lavoisier y la existencia de muchos compuestos químicos a partir de varios elementos). Sus hipótesis son: los átomos son entidades indestructibles e indivisibles de la materia, átomos del mismo tipo de elemento son iguales en propiedades y características, átomos diferentes son diferentes en propiedades y características, la unión de dos o más átomos forman los diferentes compuestos.

Elemento: sustancia pura que no puede dividirse en otras más simples o sencillas por medios convencionales (a baja energía). Se clasifican según la tabla periódica.

Compuesto (molécula): sustancia pura formada por la unión de dos o más átomos del mismo o distintos elementos. Hay un número enorme de compuestos químicos. Se clasifican según sean inorgánicos y orgánicos. Se “formulan” mediante las reglas de la IUPAC de 2005 actualmente.

Modelo de Thomson (experimento de los rayos catódicos): J.J. Thomson, sometiendo un gas de un elemento a baja presión y un voltaje elevado, observó la emisión de una radiación corpuscular que se denominó rayos catódicos. Los rayos catódicos estaban formados por partículas cargadas procedentes del interior de los átomos. Además debían poseer masa no nula (movían unas aspas o veleta) y carga negativa (debido a cómo se desviaban según un campo magnético). El modelo atómico de Dalton debía ser incorrecto al no predecir estas partículas subatómicas, que Thomson llamó electrones y que estaban asociadas a los fenómenos ya conocidos de electricidad. Thomson propone el modelo del pastel con pasas (plum cake model). El átomo es una masa fluida positiva en la que se encuentran incrustados los electrones a modo de pasas en un pastel. La carga total del átomo es cero porque la carga de todos los electrones es la misma que la carga de la masa positiva.

Experimento de Rutherford (Geiger y Marsden) o de la lámina de oro. Bombardeando una delgada lámina de oro con partículas alfa (partículas cargadas positivas con mucha energía y masa, posteriormente identificadas como núcleos de átomos de helio ionizado), se observaron los siguientes hechos:

- La mayoría de partículas alfa pasaban desviándose poco o nada.
- Algunas partículas alfa se desviaban en ángulos menores de 90° .
- Algunas partículas alfa se desviaban con ángulos oblicuos en hacia atrás.
- Una vez de cada 100000, aproximadamente, las partículas alfa se desviaban con ángulos casi de 180° .

Interpretación del experimento de Rutherford: el modelo atómico de Thomson no es correcto. Nuevo modelo atómico: modelo nuclear (de Rutherford) basado en las siguientes hipótesis

- El átomo es esencialmente espacio vacío, por eso apenas se desviaban las partículas alfa en el experimento de Rutherford.
- Casi toda la masa y toda la carga positiva del átomo está concentrada en una región muy pequeña del átomo, llamada núcleo. El tamaño del núcleo es unas 100000 veces más pequeño que el tamaño del átomo, por eso no todas las partículas alfa rebotaban o se desviaban mucho, en general.
- Los electrones orbitan el núcleo como en un Sistema Solar. Su carga equilibra la carga del núcleo, por lo que el átomo sigue siendo eléctricamente neutro (a no ser que pierda o gane electrones, y entonces se dice que se convierte en un **ión**).
- Las dos partes de las que forma el átomo se llaman genéricamente **núcleo** y **corteza**. En experimentos posteriores se demostraría que el núcleo estaba formado no sólo por **protones** (partículas propuestas por Rutherford) sino también por **neutrones**. La corteza está formada por electrones.

Curiosidad: hoy conocemos más partículas subatómicas además de protones, neutrones y electrones. Por ejemplo, los quarks (up, down, charm, strange, top, bottom), bosones W y Z, el bosón de Higgs, fotones, y los leptones (muones, tauones, y neutrinos), además de diversas combinaciones de éstos como piones y otros hadrones (mesones y bariones), o también sus antipartículas. La teoría más elaborada de la estructura subatómica se llama Mecánica Cuántica, que en su versión relativista se llama Teoría Cuántica de Campos (QFT, Quantum Field Theory). La Teoría de Cuántica de Campos más avanzada, que explica todo salvo la gravedad a escala subatómica, se denomina Modelo Estándar (Standard Model, en inglés).

Números importantes en un átomo:

- **Número atómico (Z).** Es el número de protones de un átomo.
- **Número másico (A).** Es el número de protones más el número de neutrones. $A = Z + N$. Se llama másico porque suele ser similar a la masa del átomo.
- **Número de electrones.** Si el átomo es neutro, el número de electrones coincide con el de protones. Si el átomo pierde o gana electrones se convierte en unión positivo o negativo, respectivamente. Los iones positivos se llaman **cationes**. Los iones negativos se llaman **aniones**.

Un elemento se representa con el símbolo: A_ZX

Un ión de un elemento se representa con el símbolo: ${}^A_ZX^{n\pm}$, donde el + indica la carga del átomo si es catión, y el - indica la carga del átomo si es anión.

La masa atómica de un elemento se mide en unidades de masa atómica (u), o u.m.a., cuya equivalencia es

$$1u = 1.66 \cdot 10^{-27}kg = 1g/mol$$

que es la doceava parte de la masa del átomo de carbono-12, o equivalentemente, la masa del protón.

Dos átomos se dice que son **isótopos** si tienen el mismo número atómico (Z, número de protones) y diferente número másico (A), es decir, si tienen diferente número N, de neutrones.

El modelo de Bohr fue el primer modelo que, aplicado al átomo de hidrógeno, explicaba su espectro (o líneas espectrales discretas). En este modelo la clave es que los electrones no pueden tener cualquier órbita, sólo unas determinadas por una serie de números enteros. El átomo está formado por capas. Los niveles de energía: $n=1,2,3,\dots$ especifican las órbitas del electrón. Cuando el electrón pasa de un nivel o capa a otra, se emite como luz la diferencia de energía entre esos niveles.

Niveles y subniveles electrónicos. Configuración electrónica. Para colocar los electrones en las capas y subcapas correspondientes se usa el diagrama de Möller, también llamado regla de Madelung, regla de Janet o regla de Klechkowski. Para los cuatro primeros niveles, este diagrama da:

1s
2s 2p
3s 3p 3d
4s 4p 4d 4f

El orden de llenado con electrones de estas capas y subcapas es: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, ... **Peligro:** existen excepciones a este ordenamiento.

En cada nivel caben $2n^2$ electrones, mientras que en cada subnivel caben $2(2l + 1)$, donde l es el número cuántico secundario, que toma valores $0, 1, 2, \dots, (n-1)$. Si el subnivel es “tipo s”, caben 2 electrones, si es “tipo p”, 6, si es “tipo d”, 10, y si es “tipo f” 14. Esos 4 subniveles son precisamente los que dan estructura y forma a la Tabla Periódica moderna, junto a los niveles de energía (períodos).

Se llama **enlace químico** a la unión de dos o más átomos para formar un sistema estable que minimice la energía que los átomos tendrían (y que es menor que la que tendrían los átomos separados).

La energía desprendida en el proceso de enlace químico se llama **energía de enlace**.

Moléculas: agrupaciones estables de átomos. Un conjunto de átomos que se repiten con un patrón ordenado y repetitivo por el espacio, de forma periódica, se denomina CRISTAL.

Regla del octete u octeto: cuando los átomos se unen tienden a ganar o perder electrones para lograr configuraciones electrónicas de mayor estabilidad. Cuando un átomo tiene 8 electrones en su última capa (capa más externa, también llamada capa de valencia), se denomina octete u octeto. La configuración de un octeto es ns^2np^6 . Los gases nobles, salvo el helio, tienen configuración de octeto.

Tipos de enlace químico: iónico, covalente y metálico.

Enlace metálico: producida por el solapamiento de los átomos de forma que los electrones se comparten en forma de “nube” (modelo del gas electrónico o de Drude y Lorentz). Los compuestos con enlace metálico son exclusivamente los metales, forman una red, llamada red metálica (estructura ordenada tridimensional) y los electrones de todos los átomos se mueven libremente por dicha red. La propiedades de este tipo de enlace metálico son:

- Son sólidos a temperatura ambiente generalmente (salvo el galio, el mercurio y el francio, que funden a aproximadamente 30°C). Por tanto, generalmente tienen temperaturas de fusión elevadas.
- Son buenos conductores del calor y la electricidad.
- Son dúctiles (se pueden hacer hilos con estos compuestos) y maleables (se pueden hacer láminas con estos compuestos).
- Son tenaces.
- Presentan efecto fotoeléctrico, piezoeléctrico, termoeléctrico y termoiónico.

Enlace iónico: se forma entre átomos cargados (iones) positiva y negativamente, mediante fuerzas de atracción eléctricas. Como regla heurística o aproximada, se puede decir que un compuesto es iónico si está formado por un elemento del grupo 1 ó 2 del Sistema Periódico con uno del grupo 16 ó 17. Forman también redes cristalinas (de tipo iónico). Las propiedades de estos enlaces son:

- Son sólidos a temperatura ambiente. Tienen temperaturas de fusión elevadas.
- En estado sólido no son buenos conductores de la electricidad, pero sí disueltos o fundidos.
- Son duros pero frágiles.
- Se disuelven en agua fácilmente, y en disolventes polares (aquellos que tienen una estructura molecular capaz de generar dipolos eléctricos).
- Son compuestos iónicos generalmente los óxidos de alcalinos y alcalino-térreos, las sales binarias formadas entre los grupos 1 y 2 con los del 16 y 17, y los hidruros metálicos.

Enlace covalente: se forma mediante la compartición de electrones. Se produce generalmente entre no-metales. Cada par de electrones compartido genera un enlace. El enlace puede ser simple, doble y triple. Suelen representarse mediante estructuras simbólicas llamadas estructuras de Lewis. Hay dos tipos de compuestos covalentes, llamados sustancias moleculares y cristales covalentes.

Las propiedades de las sustancias moleculares covalentes son:

- Las fuerzas que mantienen unidos a los átomos son fuertes en comparación a las fuerzas intermoleculares (débiles). La mayoría son gases (tienen temperaturas de fusión bajas) aunque hay algunos líquidos (H_2O , Br_2) y algún sólido (I_2).
- La mayoría son insolubles en agua y disolventes polares, y son malos conductores de la electricidad.
- Generalmente son elementos moleculares no metálicos, óxidos no metálicos e hidruros no metálicos.

Las propiedades de los cristales covalentes son:

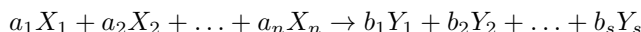
- Tienen elevadas temperaturas de fusión.
- Son muy duros y difíciles de rayar.
- Son insolubles en casi todos los tipos de disolventes.
- No conducen la electricidad (salvo algunos como el grafito, el grafeno,...)
- Ejemplos: SiC, BN, C(diamante), C(grafito), cuarzo (SiO_2),...

Tema Cálculos Químicos y Estequiometría

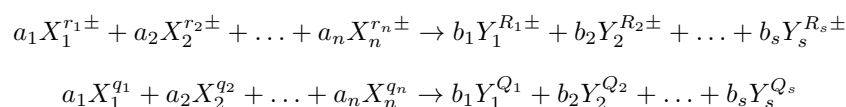
Reacción química: es toda transformación de unas sustancias o especies químicas llamadas REACTIVOS en otras sustancias o especies químicas llamadas PRODUCTOS:

Reactivos \rightarrow Productos

o bien



Para una reacción química en la que las especies estén eléctricamente cargadas, se tiene la expresión general



Leyes importantes de las reacciones químicas: **ley de conservación de la masa** (Lavoisier) y leyes ponderales (Proust, Gay-Lussac, ...). En las reacciones químicas también se conserva la carga eléctrica.

La ley de conservación de la masa de las reacciones químicas, o de Lavoisier, indica que la masa total de los reactivos es igual a la masa total de los productos. Matemáticamente

$$\sum M(\text{reactivos}) = \sum M(\text{productos})$$

o bien

$$\sum_{i=1}^n M(X_i) = \sum_{j=1}^s M(Y_j)$$
$$M(X_1) + M(X_2) + \dots + M(X_n) = M(Y_1) + M(Y_2) + \dots + M(Y_s)$$

La ley de conservación de la carga eléctrica de las reacciones químicas indica que la carga eléctrica total de los reactivos es igual a la carga eléctrica total de los productos. Matemáticamente

$$\sum q(\text{reactivos}) = \sum Q(\text{productos})$$

o bien

$$\sum_{i=1}^n q(X_i) = \sum_{j=1}^s Q(Y_j)$$
$$q(X_1) + q(X_2) + \dots + q(X_n) = Q(Y_1) + Q(Y_2) + \dots + Q(Y_s)$$
$$q_1 + q_2 + \dots + q_n = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_s$$

En una reacción química con varios números cuánticos, bajo ciertas simetrías S_i , se conservan ciertas cargas (masa, carga eléctrica, carga de color, ...) con lo que hay igual carga de tipo Q. Toda reacción química puede entenderse con un proceso de transferencia de cierto tipo de cargas entre diferentes tipos de sustancias u objetos elementales/compuestos.

Leyes importantes de los gases:

Ley de Boyle-Mariotte: a temperatura constante (**proceso isotérmico**), presión y volumen son inversamente proporcionales y su producto permanece constante

$$PV = \text{constante} \quad \text{o bien} \quad P_1V_1 = P_2V_2$$

Ley de Charles: a presión constante (**proceso isobárico**), volumen y temperatura son directamente proporcionales y su cociente permanece constante

$$\frac{V}{T} = \text{constante} \quad \text{o bien} \quad \frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

Ley de Gay-Lussac: a volumen constante (**proceso isócoro**), presión y temperatura son directamente proporcionales y su cociente permanece constante

$$\frac{P}{T} = \text{constante} \quad \text{o bien} \quad \frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

Ley de Avogadro o de los volúmenes de combinación: en las reacciones gaseosas, los volúmenes de reactivos y productos de cualquier gas ideal, medidos en las mismas condiciones de presión y temperatura (es decir, a presión y temperatura constantes), contienen el mismo número de partículas/moléculas/moles, es decir, volumen y número de moléculas/átomos/partículas o moles son directamente proporcionales (el cociente de volumen con número de moles o moléculas permanece constante)

$$V/n = \text{constante}, \quad V/N = \text{constante}, \quad V_1/n_1 = V_2/n_2, \quad V_1/N_1 = V_2/N_2$$

Ley de Clapeyron o ley general de los gases ideales: a una determinada cantidad de sustancia gaseosa ideal dada fija, el cociente entre el producto de la presión por el volumen entre la temperatura permanece constante, es decir,

$$\frac{PV}{T} = \text{constante}, \quad \text{o bien} \quad \frac{P_1V_1}{T_1} = \frac{P_2V_2}{T_2}$$

Ecuación de estado del gas ideal. Es una relación de tipo ecuación que se deriva de las leyes anteriores:

$$PV=nRT$$

P es presión en atmósferas, V es el volumen en litros, n es el número de moles, T es temperatura absoluta (en kelvin, como en las otras leyes), y R es una constante llamada constante del gas ideal y que vale

$$R=0.082\text{atmL/Kmol}=0.082\text{atmLK}^{-1}\text{mol}^{-1} = 8.31\text{J/Kmol}$$

Regla mnemotécnica: **PaVo=RaTón**

Regla mnemotécnica(II): **P**ues **V**vale=**no** **R**ecuerdo **T**odo

Regla mnemotécnica(III): inventar una frase divertida que use las letras de la ecuación $PV=nRT$, en ese orden.

Consecuencia de la ecuación del gas ideal: 1 mol de gas ideal en condiciones normales de presión y temperatura ocupa 22.4L aproximadamente. Condiciones normales se abrevia como c.n. y equivalen a tener $P = 1\text{atm}$ y $T = 0^\circ\text{C} = 273\text{K}$. También existen las condiciones estándar, que equivalen a tener $P = 1\text{atm}$ y $T = 25^\circ\text{C} = 298\text{K}$.

Curiosidad: a una temperatura de 293K, 1 mol de gas ideal ocupan aproximadamente 24L, y hay aproximadamente una densidad molar de 42mol/m^3 , es decir, a presión atmosférica y 20 grados centígrados, un gas ideal tiene una densidad molar de 42 moles/metro cúbico.

Un **gas ideal** es un gas que sigue las hipótesis básicas de la teoría cinética, es decir, ocupa poco volumen (molecularmente) en comparación al volumen del recipiente que lo contiene, sus interacciones moleculares son débiles, y la energía por partícula está distribuida uniformemente por molécula, de forma que está directamente relacionada la energía cinética de sus moléculas con la temperatura.

Hipótesis de Avogadro: volúmenes iguales de gases diferentes, contienen en mismo número de moléculas si se miden en las mismas condiciones de presión y temperatura.

La **masa atómica** (M_a) de un elemento es la masa expresada en u.m.a.(u) o equivalentemente en g/mol. La masa molecular (MM) es la suma de las masas de todos los átomos de la molécula o compuesto, expresada en u o g/mol.

Mol (unidad fundamental de cantidad de sustancia en el S.I., generalmente representado con la letra n): es la cantidad de sustancia que contiene tantas unidades elementales (partículas, átomos, moléculas, iones, . . .) como átomos hay en 12 g (equivalentemente 0.012kg) de carbono-12 ($^{12}_6C$). En 1 mol hay exactamente una cantidad igual al número de Avogadro (N_A) objetos. El número de Avogadro vale aproximadamente:

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$$

Formas de calcular los moles (2 ecuaciones muy útiles y usadas en Química/Física):

$$n = \frac{m(g)}{MM}$$

$$n = \frac{N}{N_A}$$

Curiosidad: el inverso de una u.m.a. expresada en gramos coincide con el valor del N_A , es decir,

$$1/u = 1/1.66 \cdot 10^{-24} = N_A$$

Comentario: En las leyes de los gases, hay que usar temperaturas absolutas, en grados kelvin (K), la presión en atmósferas y n en moles, para $R=0.082\text{atmL/Kmol}$.

Densidad: es una magnitud que mide cuánto ocupa en volumen una determinada cantidad de masa. Matemáticamente

$$d = \frac{m}{V}$$

Unidades en el S.I. de la densidad kg/m^3 , y todas las proporcionales como $g/cm^3, \dots$

Disoluciones: mezclas homogéneas formadas por un soluto y un disolvente. El soluto es el componente en menor cantidad.

Formas de medir las concentraciones en las disoluciones (la concentración mide la cantidad de soluto que hay en cierta cantidad, volumen o masa, de disolución):

Tanto por ciento en masa

$$C(\%, m) = \frac{m(g)\text{soluto}}{m(g)\text{disolución}} \cdot 100$$

Tanto por ciento en volumen

$$C(\%, V) = \frac{V(L)\text{soluto}}{V(L)\text{disolución}} \cdot 100$$

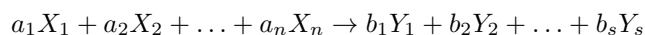
Gramos por litro

$$C(g/L) = \frac{m(g)\text{soluto}}{V(L)\text{disolución}}$$

Molaridad

$$\text{Molaridad} = M = \frac{n(\text{soluto})}{V(L)\text{disolución}}$$

Ajustar una ecuación o reacción química es lograr que haya el mismo número de átomos de cada tipo en los reactivos y productos. Para ello, se deben introducir unos números llamados coeficientes estequiométricos, en las reacciones que preceden a la fórmula de cada compuesto. Así, en la reacción general



los coeficientes a_1, a_2, \dots y b_1, b_2, \dots son los coeficientes estequiométricos.

Interpretación de los coeficientes estequiométricos: indican la cantidad de átomos, moléculas, iones,...de cada tipo de reactivo que se requieren para que tenga lugar, y la cantidad de átomos, moléculas, iones,...de cada tipo de producto que se producen. El reactivo que está en menor cantidad se llama **REACTIVO LIMITANTE**. Los cálculos químicos deben realizarse con reactivo limitante (si lo hay de forma clara). Si nos dan las masas atómicas, y conocemos las masas moleculares, mediante proporciones y factores de conversión, podemos calcular no solamente los moles y número de moléculas, sino también cantidades de masa y cantidades de volúmenes en gases (usando la ecuación de estado del gas ideal).

Fórmula empírica: es una fórmula que sólo indica la proporción de moles de átomos en una molécula pero no su cantidad.

Fórmula molecular: es una fórmula que indica la proporción de átomos y su masa, de forma que sabemos cuántos átomos hay de cada tipo exactamente. Para conocer la fórmula molecular es imprescindible saber la masa molecular del compuesto, no sólo la denominada composición centesimal (porcentaje de masa de cada átomo en el compuesto).

Pasos para calcular la fórmula molecular:

- 1) A partir de la composición centesimal, calcular la masa de cada átomo en gramos de la sustancia dada.
- 2) Dividir la masa obtenida de cada átomo entre la masa atómica de cada átomo para hallar los moles de cada átomo.
- 3) Dividir los números obtenidos en el paso 2) entre el número más pequeño, redondeando a números enteros (con cuidado, si es .4, .5, .6 conviene dejarlos sin redondear).
- 4) Usando la masa molecular que nos den, determinar el número de veces que se repite cada número hallado en el paso 3).
- 5) Escribir la fórmula molecular final.

Para resolver cualquier problema de estequiometría, disoluciones y reacciones hay que tener ajustada siempre las reacciones químicas correspondientes o tener claro los datos dados de cada magnitud química, así como su significado e interpretación.

FACTORES DE CONVERSIÓN DE ALGUNAS UNIDADES

Presión:

$$1atm = 760mmHg = 760Torr = 1013mb = 101300Pa = 1.013 \cdot 10^5 Pa = 101.3kPa$$

Temperatura:

$$T(K) = T(^{\circ}C) + 273$$

Relación grados Fahrenheit y grados Celsius (no es necesario saberla):

$$\frac{T(^{\circ}C)}{100} = \frac{T(^{\circ}F) - 32}{180}$$