



ESTRUCTURA ATÓMICA- ENLACE

INTRODUCCIÓN A LA CIENCIA DE MATERIALES TIM50

2023



Docente y bibliografía

- Docente: Mariana Silva
- Mail: msilva@fing.edu.uy
- EVA: dentro de Estructura atómica y enlace
- BIBLIOGRAFÍA BÁSICA: “Introducción al a ciencia e ingeniería de los materiales”. W. Callister. Capítulo 2

Objetivo del tema

Entender como está compuesta la materia y cuales son los enlaces químicos que existen, para luego estudiar como impacta esto en los distintos tipos materiales

Estructura atómica

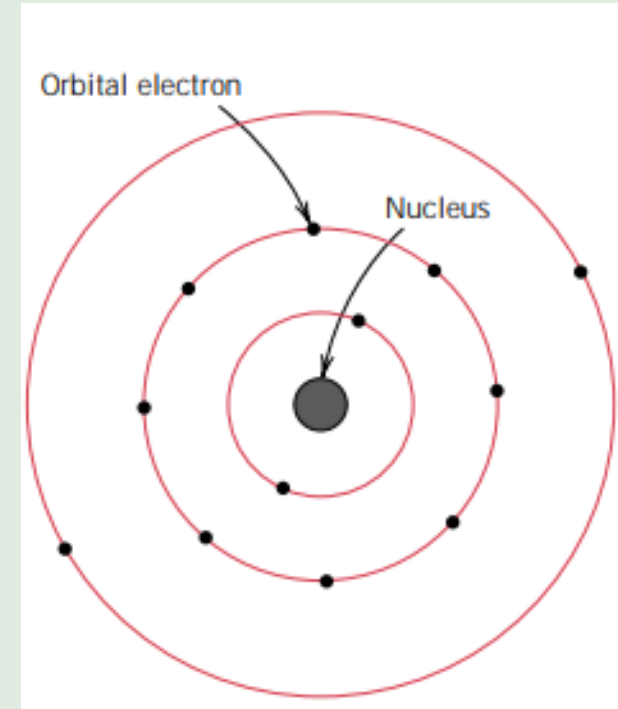
¿Por qué estudiar la estructura de la materia?

Partículas atómicas:

- protones (+)
- neutrones
- electrones (-)

Modelos atómicos:

- Modelo de Bohr (mecánica cuántica)
- Modelo de la mecánica ondulatoria



Estructura atómica

Cada elemento químico se caracteriza por el número de protones del núcleo o **número atómico (Z)**. Si el átomo es eléctricamente neutro, entonces el número de electrones coincide con el de protones.

masa atómica o número másico del isótopo más estable	55.845	26	número atómico
energía de ionización en kJ/mol	762.5	1.83	electronegatividad
símbolo químico	Fe	+6 +5 +4 +3 +2 +1 0	estados de oxidación más comunes están en negro
nombre	Hierro		
configuración electrónica	[Ar] 3d ⁶ 4s ²		

Todos los átomos de un mismo elemento tienen la misma cantidad de protones, pero la cantidad de neutrones puede variar, dando lugar a los isótopos.

Electrones de valencia

- Son aquellos electrones que ocupan los niveles más altos de energía.
- Son los que están mas alejados del núcleo
- **Son los que participan en los enlaces**
- Algunos átomos poseen configuraciones electrónicas estables: tienen sus niveles de energía más externos completamente ocupados. Ej: gases nobles
- Algunos átomos que no tienen los niveles de valencia llenos, adquieren configuración electrónica estable ionizándose

Para pensar

- Por qué durante la soldadura se controla la atmósfera inmediata a la zona a soldar? Con qué tipo de gases se realiza?

Composición de la materia

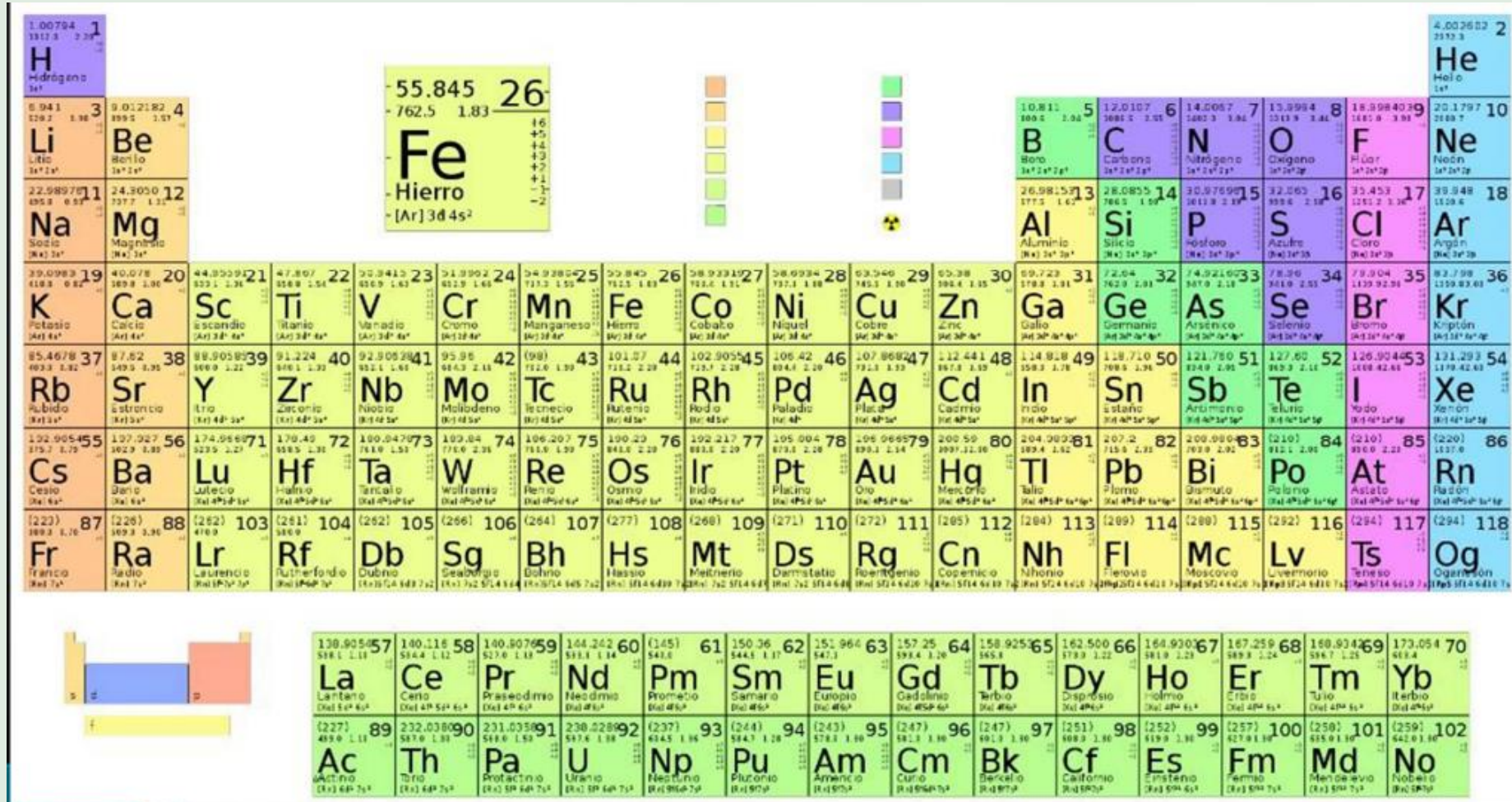


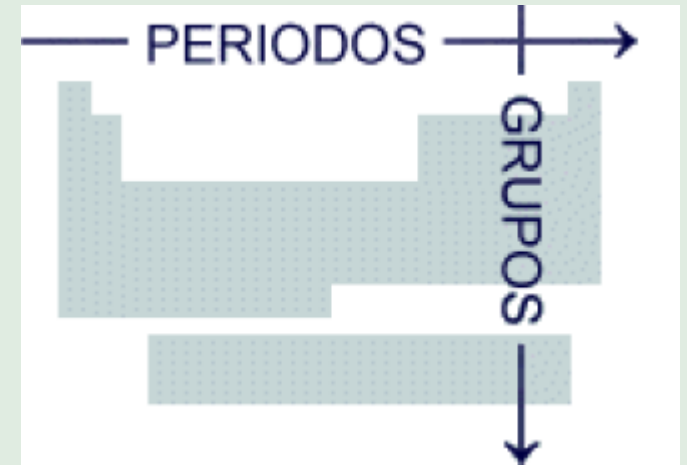
Tabla periódica

Los elementos están clasificados según la configuración electrónica, en orden de número atómico creciente.

Esta organizada en períodos (horizontales) y grupos (verticales).

Los elementos de un mismo grupo tienen configuración similar de sus electrones de valencia

Dado que las propiedades químicas dependen profundamente de las interacciones de los electrones que están ubicados en los niveles más externos, los elementos de un mismo grupo tienen propiedades químicas similares.



Clasificación de los elementos:

- metales
- no metales
- metaloides o intermedios

Key

- 29 ← Atomic number
- Cu ← Symbol
- 63.54 ← Atomic weight

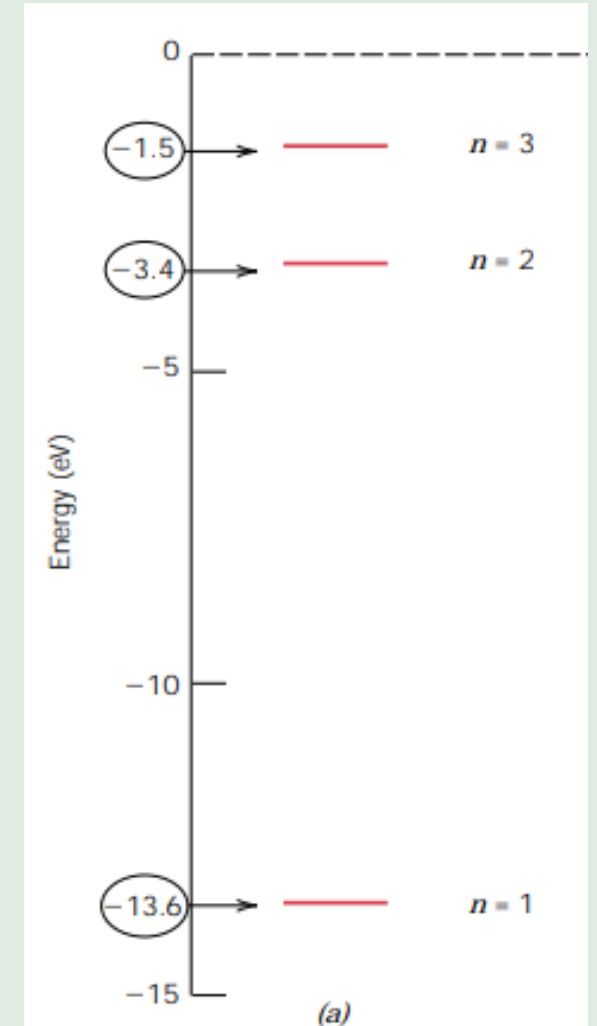
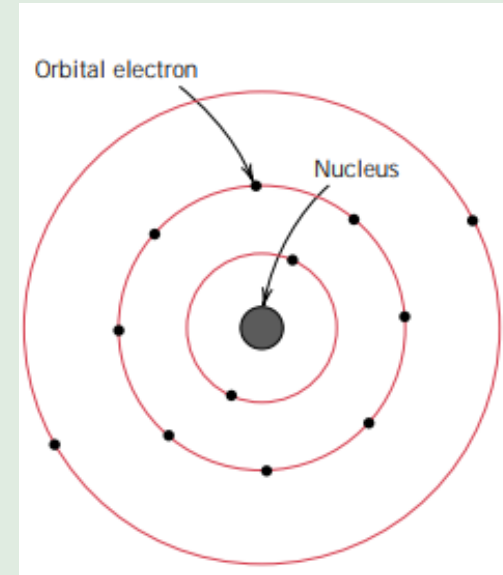
Metal
 Nonmetal
 Intermediate

IA												IIIA					IVA	VA	VIA	VIIA	0
1 H 1.0080	IIA											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.183				
3 Li 6.939	4 Be 9.0122											13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.064	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948				
11 Na 22.990	12 Mg 24.312	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII			IB	II B	29 Cu 63.54	30 Zn 65.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.91	36 Kr 83.80		
19 K 39.102	20 Ca 40.08	21 Sc 44.956	22 Ti 47.90	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.847	27 Co 58.933	28 Ni 58.71	29 Cu 63.54	30 Zn 65.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.91	36 Kr 83.80				
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (99)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.40	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30				
55 Cs 132.91	56 Ba 137.34	Rare earth series	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.09	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.19	83 Bi 208.98	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn (222)				
87 Fr (223)	88 Ra (226)	Actinide series																			
Rare earth series		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.35	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97					
Actinide series		89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa (231)	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (249)	99 Es (254)	100 Fm (253)	101 Md (256)	102 No (254)	103 Lw (257)					

Modelo de Bohr

Los electrones giran alrededor de núcleo en orbitales discretos.

La energía de los electrones está cuantizada: los electrones solo pueden tener determinados niveles de energía



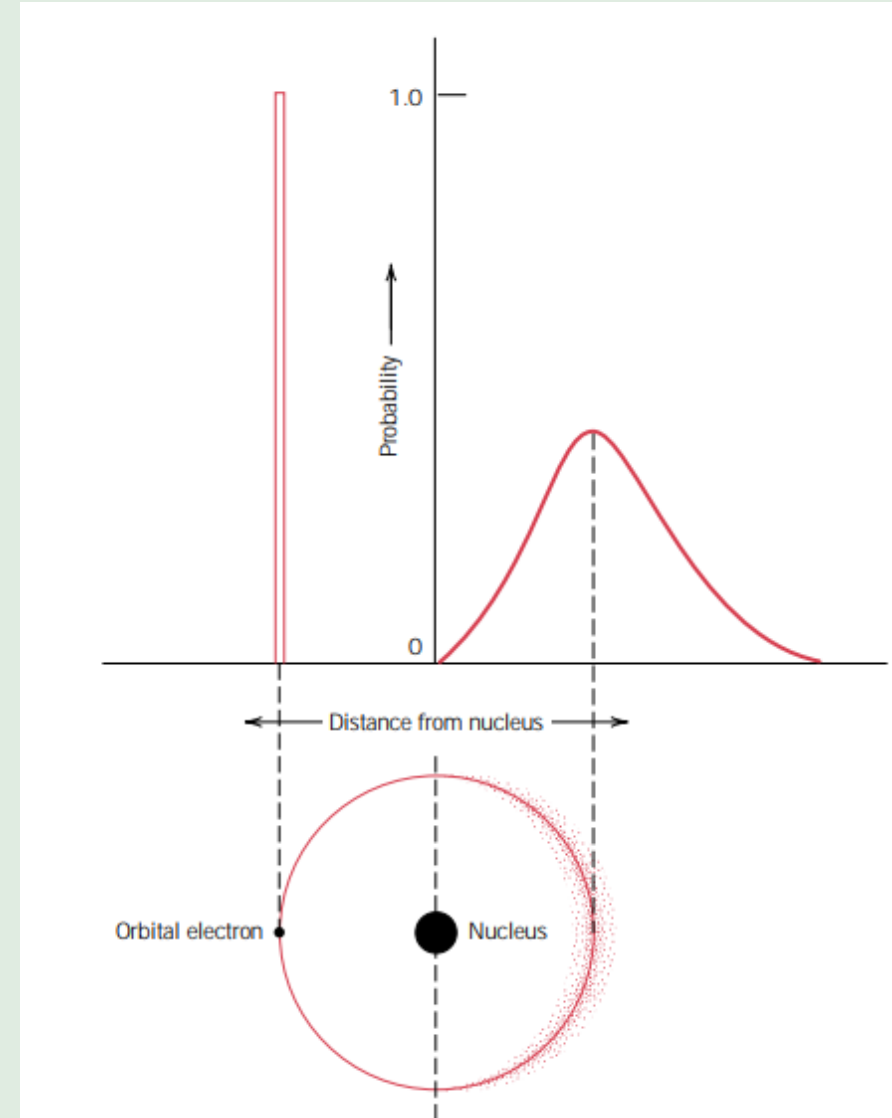
Modelo de la mecánica ondulatoria

Modelo del electrón: dualidad onda-partícula.

El movimiento de los electrones se describe mediante los principios matemáticos que describen el movimiento de las ondas.

Los electrones no se mueven en orbitales discretos. La posición de un electrón se considera como la “probabilidad de encontrarlo en una zona alrededor del núcleo”.

La posición del electrón se describe como una distribución de probabilidades



Modelo de la mecánica ondulatoria _ números cuánticos

Cada electrón está definido por 4 números cuánticos: n , l , m_l , m_s .

El tamaño, forma y orientación espacial de la densidad de probabilidades de un electrón está definido por n , l , m_l

n : número cuántico principal. Toma valores enteros (asociado al modelo de Bohr)

l : segundo número cuántico. Se representa por una letra minúscula (s, p, d, f). Define el subnivel de energía

Modelo de la mecánica ondulatoria _ números cuánticos

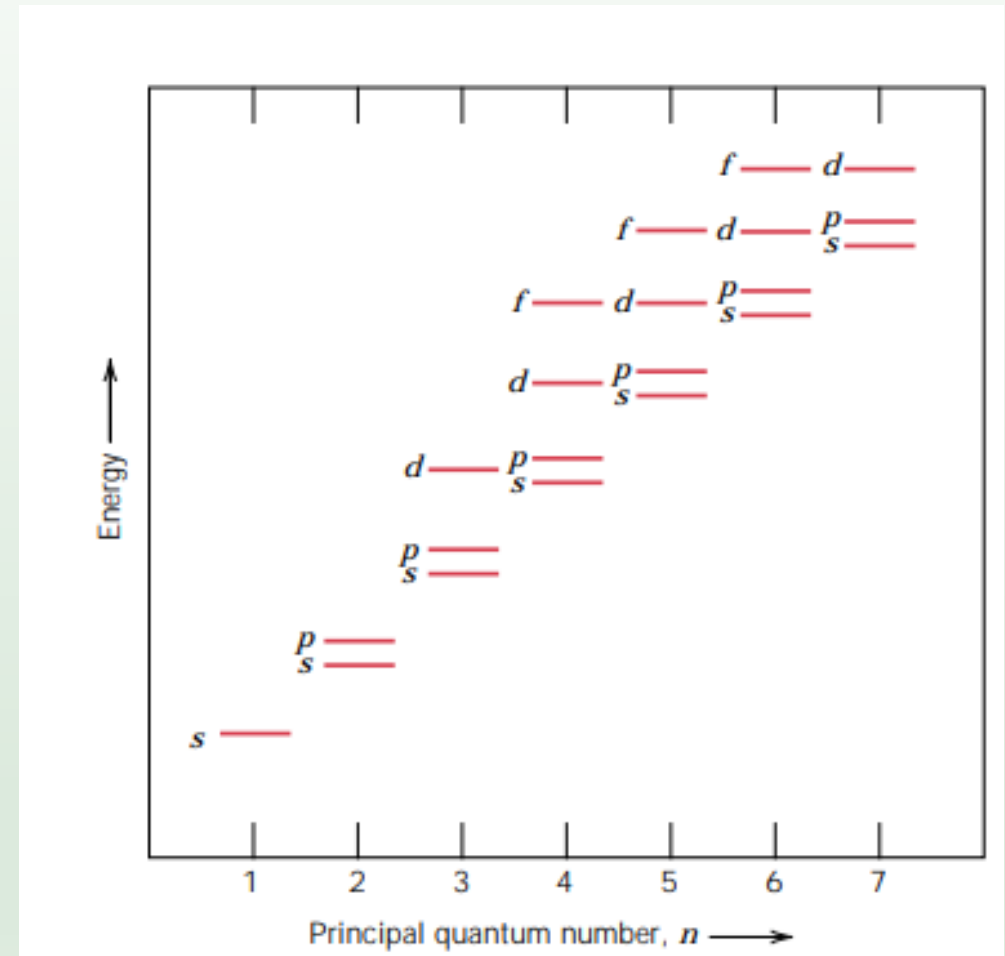
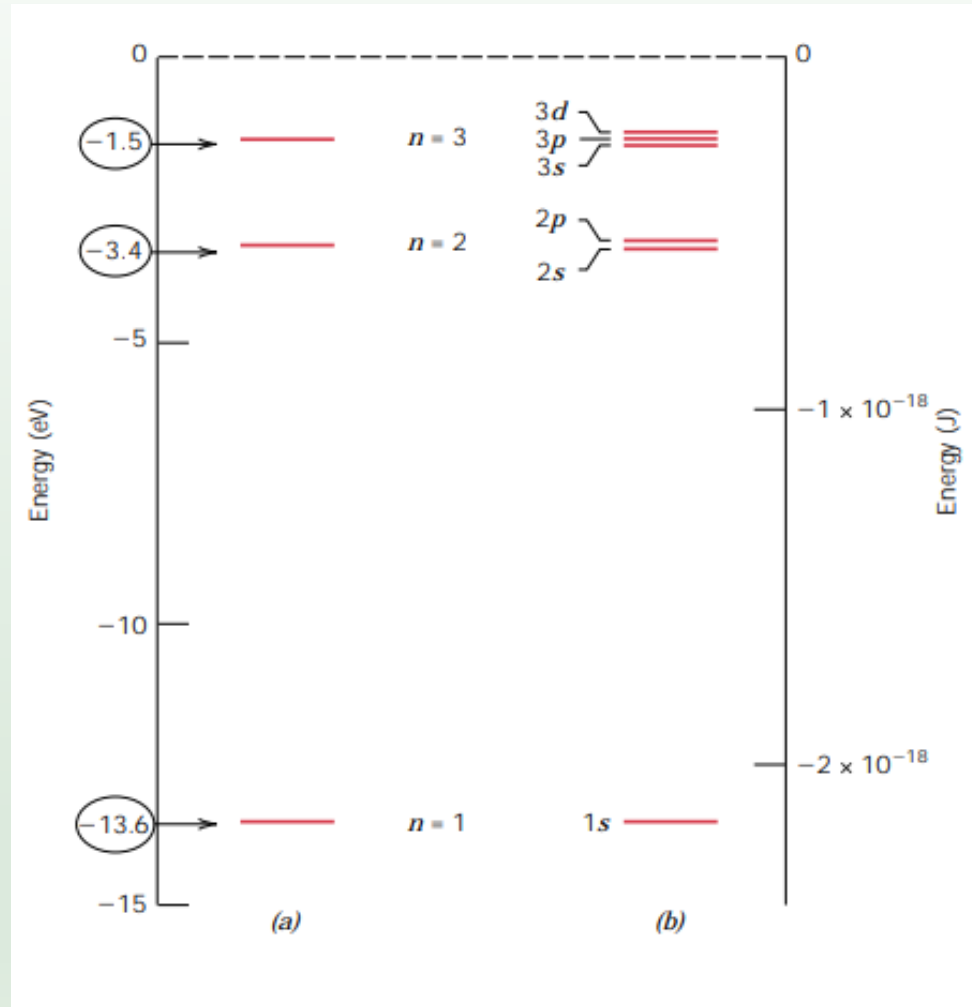
m_l : tercer número cuántico. Define el número de orbitales para cada subnivel

s	1
p	3
d	5
f	7

m_s : cuarto número cuántico. Asociado a un momento de spin, que puede estar orientado hacia arriba o hacia abajo. Tiene 2 valores posibles: $-1/2$, $+1/2$

Principio de exclusión de Pauli: indica que cada estado electrónico puede albergar solo 2 electrones con spines opuestos

Números cuánticos



Analizar: número de electrones permitidos por nivel

Número cuántico principal n	Subnivel (s)	Tercer número cuántico (ml)	Electrones por subnivel	Electrones por nivel

Configuración electrónica

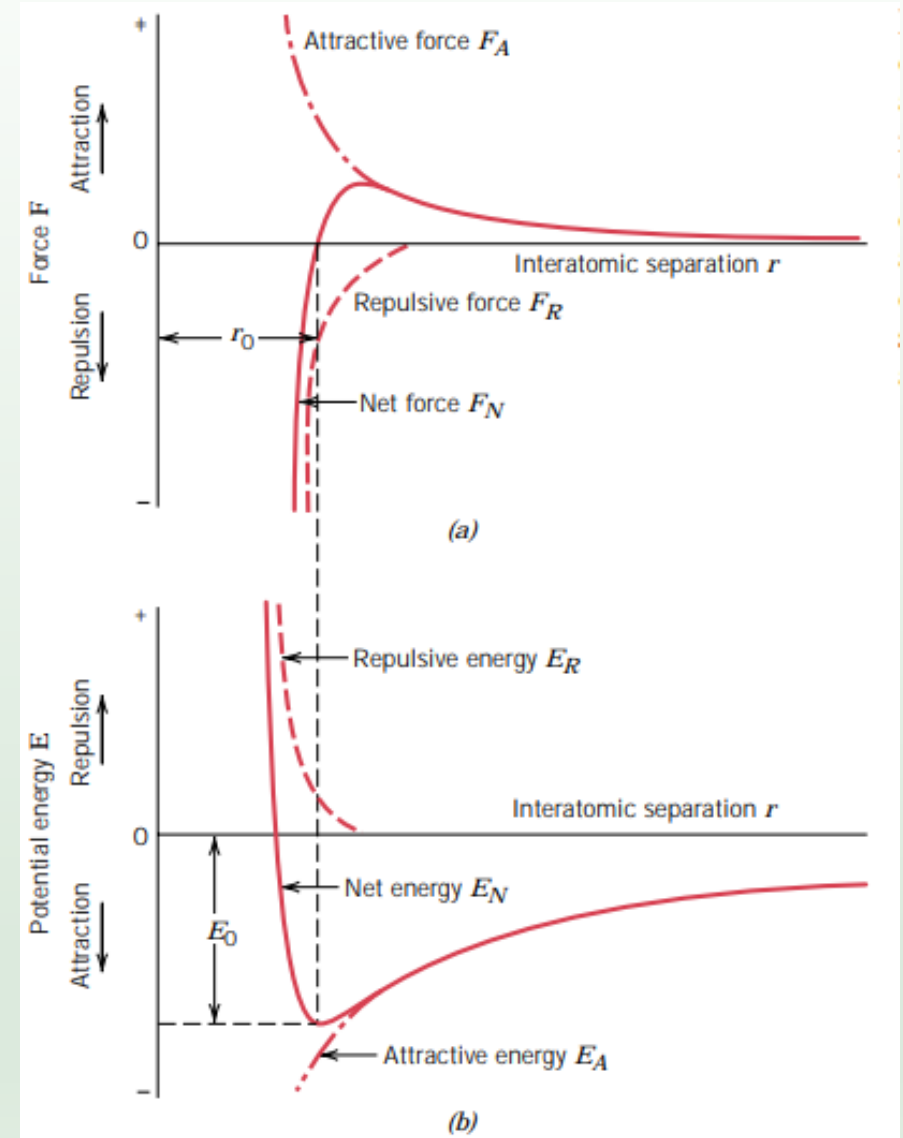
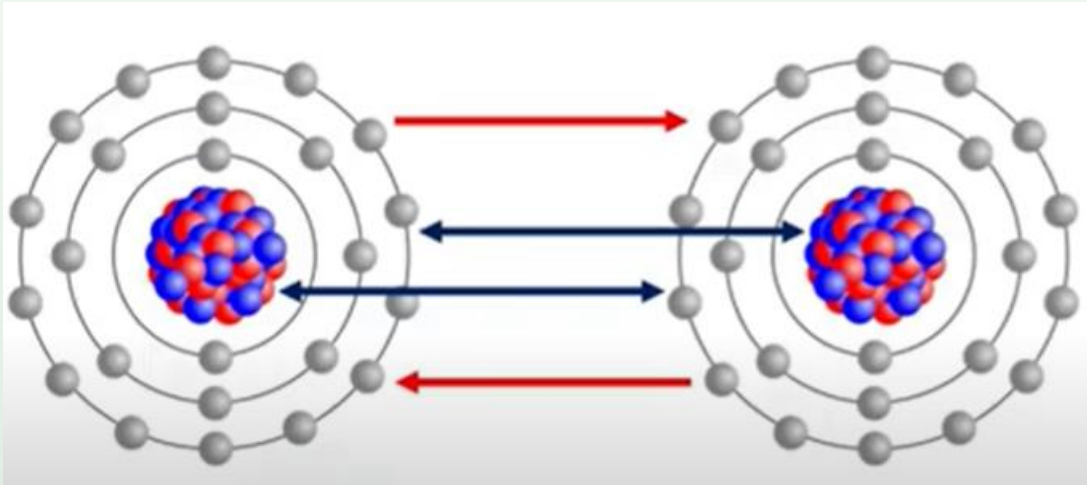
No todos los estados posibles están llenos de electrones

Los electrones ocupan primero los orbitales de los estados energéticos más bajos

Escribir configuración electrónica de:

- H
- C
- Fe

Fuerzas y energías de enlace



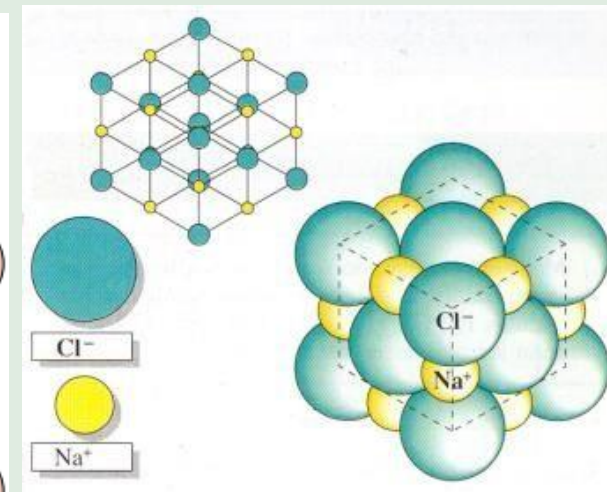
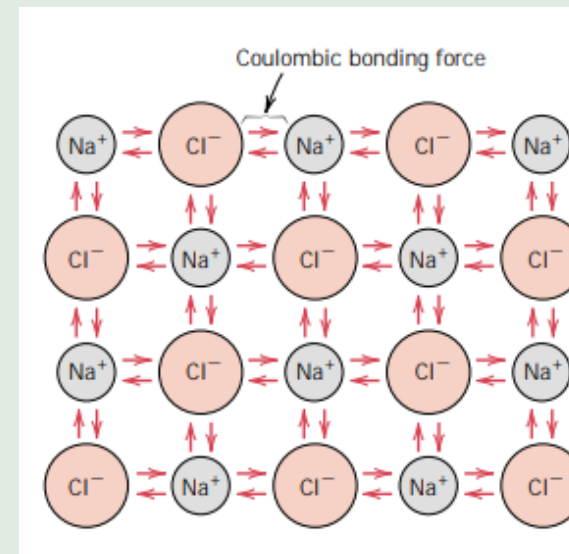
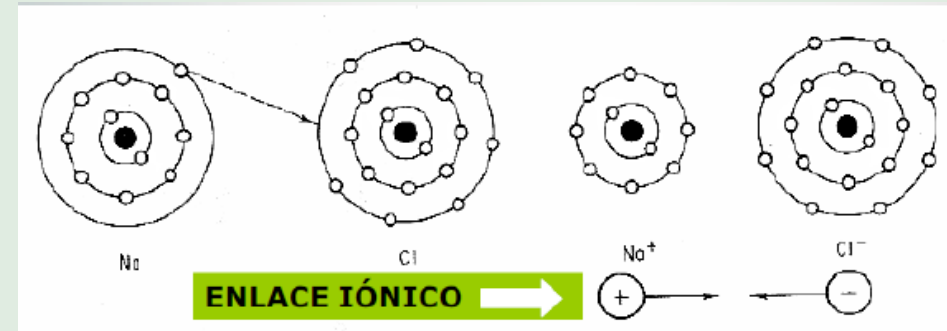
Enlaces primarios: ENLACE IÓNICO

Es un enlace formado por un metal y un no metal.

El elemento metálico cede sus electrones de valencia al no metal.

Así el elemento que cede los electrones se convierte en un ión con carga positiva (catión) y el elemento que acepta los electrones se convierte en un ión con carga negativa (anión).

Como resultado, los iones se atraen debido a la atracción electrostática



Enlaces primarios: ENLACE IÓNICO

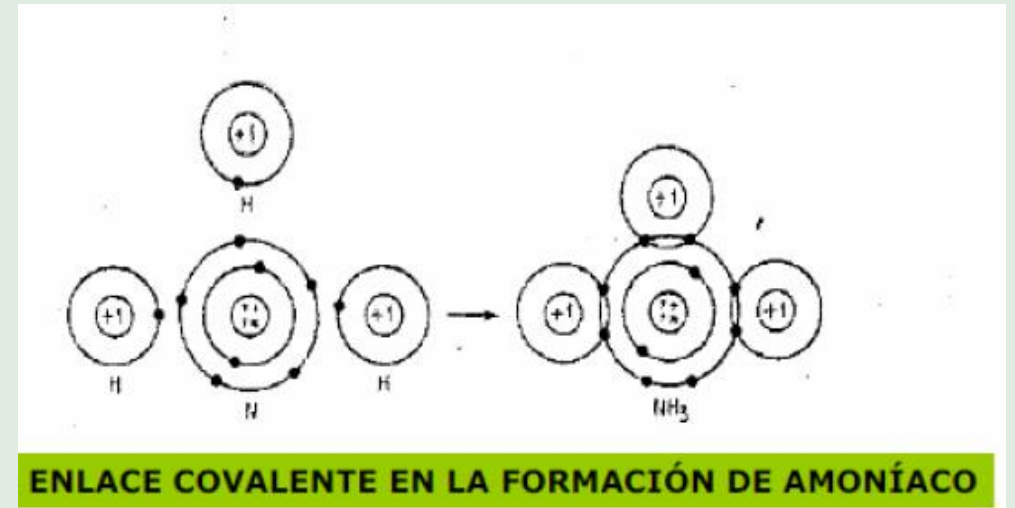
<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol (kcal/mol)</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800

Es un enlace no direccional

Los materiales iónicos se caracterizan por la dureza, fragilidad, y por ser aislantes térmicos y eléctricos.

Enlaces primarios: ENLACE COVALENTE

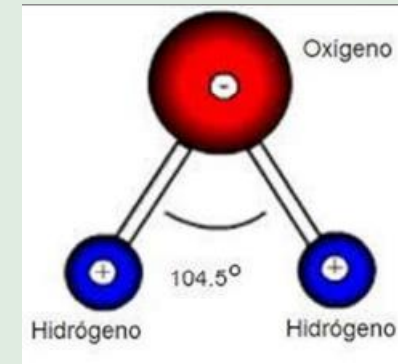
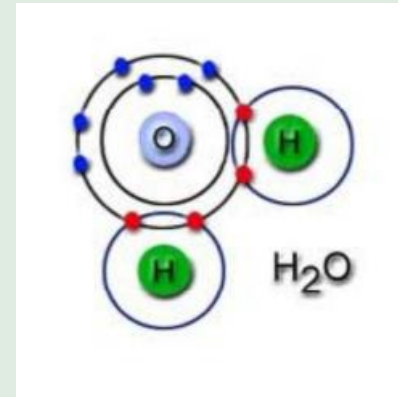
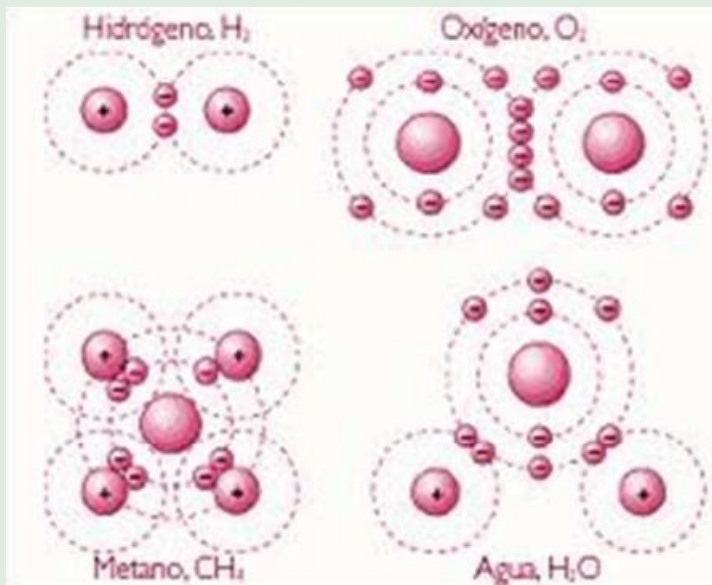
- Los elementos participan compartiendo electrones de valencia para alcanzar así estructuras más estables.
- Los electrones compartidos se consideran que pertenecen a ambos átomos
- Pueden ser muy fuertes o débiles



<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol (kcal/mol)</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550

Enlaces primarios: ENLACE COVALENTE

- Es un enlace direccional

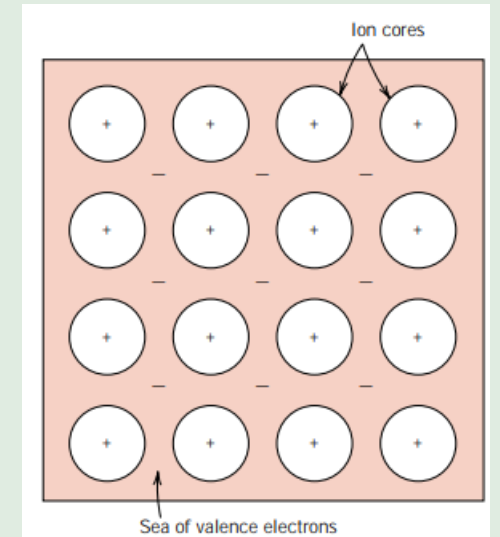


Enlaces primarios: ENLACE METÁLICO

El núcleo junto con los electrones que no son de valencia, forman cationes. Los electrones libres funcionan como elemento de unión entre los iones cargados positivamente; contrarrestan las fuerzas de repulsión generadas entre los cationes

Los electrones de valencia del sólido no pertenecen a ningún átomo en particular, sino que son capaces de circular a través de todo el metal, formando una nube de electrones.

¿Qué propiedades le confiera la “nube de electrones”?

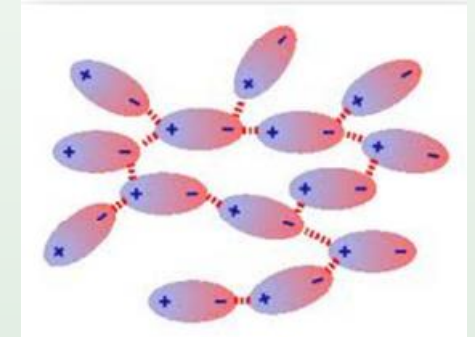
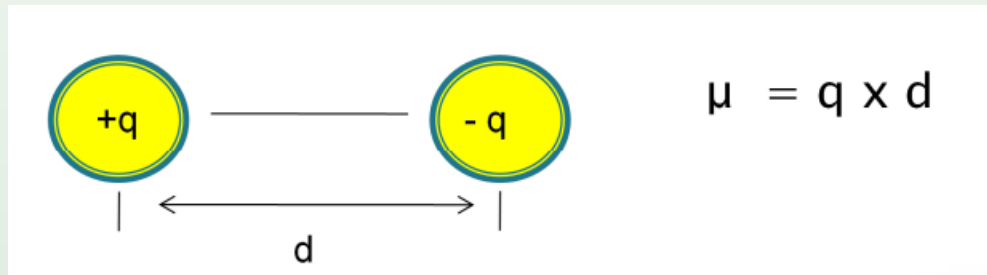


Enlaces primarios: ENLACE METÁLICO

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol (kcal/mol)</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	-39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410

Enlaces débiles: ENLACE POR DIPOLOS

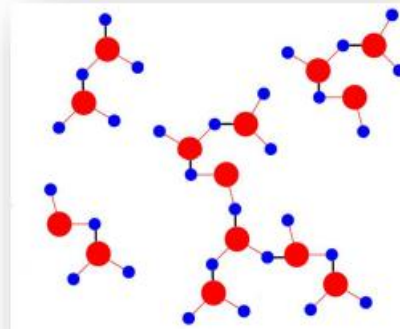
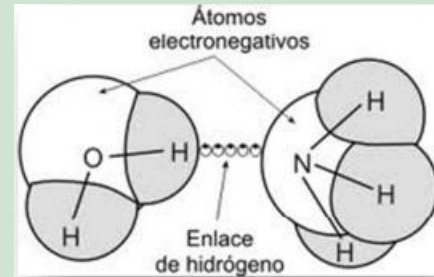
Dipolo o momento dipolar se define como el valor de la carga por el producto de la distancia que separa una carga positiva de una negativa.



Los dipolos pueden ser inducidos o permanentes (Van der Waals)

Enlaces débiles: PUENTE DE HIDRÓGENO

Es un caso particular del anterior,
donde participa un átomo de
hidrógeno



Energía de enlace

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol (kcal/mol)</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	-39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7 (1.8)	0.08	-189
	Cl ₂	31 (7.4)	0.32	-101
Hydrogen	NH ₃	35 (8.4)	0.36	-78
	H ₂ O	51 (12.2)	0.52	0