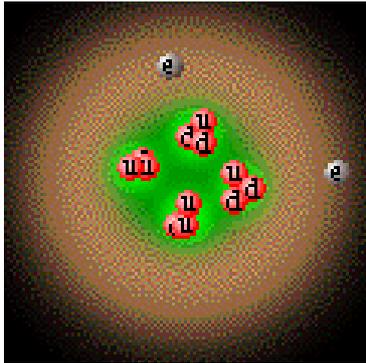


2.1.- ESTRUCTURA DEL ÁTOMO

El **átomo** está formado por un núcleo, que contiene neutrones y protones, el que a su vez está rodeado por electrones.

La carga eléctrica de un átomo es nula.

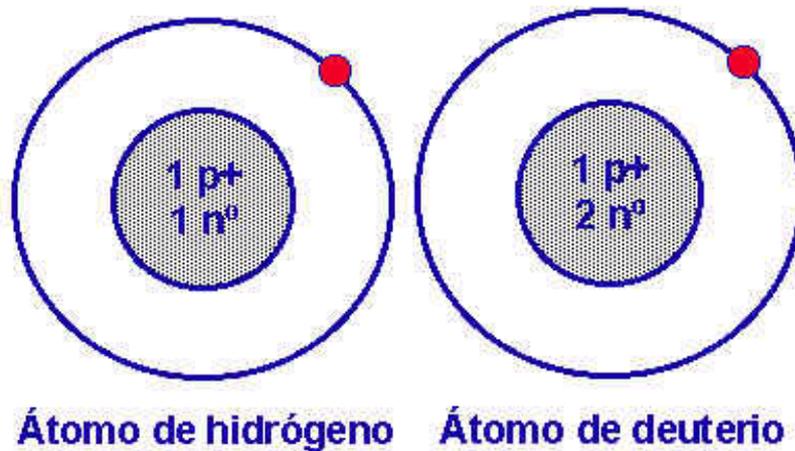


Número atómico es el número de electrones o protones de un átomo.

Masa atómica (peso atómico) M , es la masa de una cantidad de átomos igual al número de Avogadro, $N_A=6.023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ (el cual es el número de átomos o moléculas en un mol o molécula gramo), la cual se expresa en unidades de g/mol. Una unidad alterna es la unidad de masa atómica **uma**, que es la masa de un

átomo tomando como referencia a la del isótopo natural de carbono más ligero C^{12} .

Por ejemplo un mol de hierro contiene átomos y tiene una masa de 55.847 g, es decir 55.847 uma.



Isótopo.-Es el átomo de un mismo elemento pero con diferente masa atómica por tener diferente número de neutrones pero igual número atómico.

2.2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DEL ÁTOMO

Cada electrón de un átomo posee una energía en particular; en un átomo no existen más de dos electrones con una misma energía.

Números Cuánticos.- denotan el nivel de energía al cual corresponde cada electrón. Se han definido cuatro números cuánticos, que son:

1) Número cuántico principal n .- se refiere a la capa cuántica a la cual pertenece el electrón. Se le asignan valores enteros 1, 2, 3, 4,..., pero también se le asignan letras: si $n = 1$ se le llama K, $n = 2$ es L y así sucesivamente.

2) Número cuántico acimutal l .- este número cuántico denota el momento angular del electrón, tomando los siguientes valores: si $n = 1 \rightarrow l = 0$, si $n = 2 \rightarrow l = 0$ y 1, mientras que si $n = 4 \rightarrow l = 0, 1, 2, 3$.

3) Número cuántico magnético m .- este número cuántico determina las posibles orientaciones cuantizadas espaciales del momento angular orbital y pueden considerarse como un desdoblamiento de cada subcapa en niveles más finos, que difieren ligeramente entre sí en energía. Los valores de este número están determinados por los valores de l , y oscilan desde $-l \rightarrow 0 \rightarrow +l$, es decir, un total de $(2l+1)$ valores de m por cada uno de l .

4) Número cuántico de spin s .- se refiere a la rotación que puede tener un electrón alrededor de su propio eje. Tal spin contribuirá al momento angular del electrón y modificará así las relaciones de energía. Este número tiene solamente dos valores $s = +1/2$ o $s = -1/2$, dependiendo de si el electrón gira sobre sí mismo en una u otra dirección.

Resumen de Números Cuánticos

1) Principal: $n = 1, 2, 3, 4, \dots$; si $n = 1 \rightarrow K$, $n = 2 \rightarrow L, \dots$

2) Acimutal: $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$

3) Magnético: $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

4) Spin: $s = +1/2$ o $s = -1/2$, para cada valor de l .

Al especificar sus cuatro números, la "dirección" de un electrón particular en un átomo dado se define completamente; es decir, los cuatro números cuánticos sitúan a cada electrón en el nivel de energía (n), la subcapa (l), la sub-subcapa (m) y la dirección de su spin (s).

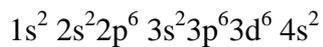
Principio de exclusión de Pauli.- en un átomo estable no más de dos electrones son capaces de ocupar el mismo nivel de energía.

Aunque existan dos electrones que posean la misma energía no pueden tener sus cuatro números cuánticos iguales.

Este principio es fundamental ya que ayuda considerablemente en la deducción de la distribución de los electrones en los átomos de los diversos elementos.

Con la finalidad representar la estructura electrónica de un átomo se utiliza una notación abreviada que contiene el valor del número cuántico principal, una letra que representa el número cuántico acimutal y un superíndice que indica el número de electrones en cada orbital.

La notación abreviada del hierro es:



Patrón utilizado para la asignación de electrones a los niveles de energía.

	<i>l</i> = 0 (s)	<i>l</i> = 1 (p)	<i>l</i> = 2 (d)	<i>l</i> = 3 (f)	<i>l</i> = 4 (g)	<i>l</i> = 5 (h)
<i>n</i> = 1 (K)	2					
<i>n</i> = 2 (L)	2	6				
<i>n</i> = 3 (M)	2	6	10			
<i>n</i> = 4 (N)	2	6	10	14		
<i>n</i> = 5 (O)	2	6	10	14	18	
<i>n</i> = 6 (P)	2	6	10	14	18	22

Nota: 2, 6, 10, 14, ..., se refieren al número de electrones en cada nivel de energía.

2.3. DESVIACIONES DE LAS ESTRUCTURAS ELECTRÓNICAS ESPERADAS

Esto ocurre particularmente en elementos con un número atómico grande en los que los niveles d y f se empiezan a llenar. Un ejemplo de esto es el hierro, número atómico 26.

Su estructura esperada sería: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8$

Pero su estructura real es: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

El nivel 3d sin llenar (con 6 electrones) es lo que causa el comportamiento magnético del hierro.

Valencia.- capacidad de un elemento para combinarse químicamente con otros elementos, y se determina por el número de electrones en los niveles combinados sp más externos.



2.4. ENLACE

Cuando átomos con orbitales incompletos están en un estado inestable e interaccionan con otros átomos de manera controlada, tal que comparten o intercambian electrones entre ellos para lograr un estado estable de los orbitales incompletos, se forma así un enlace.

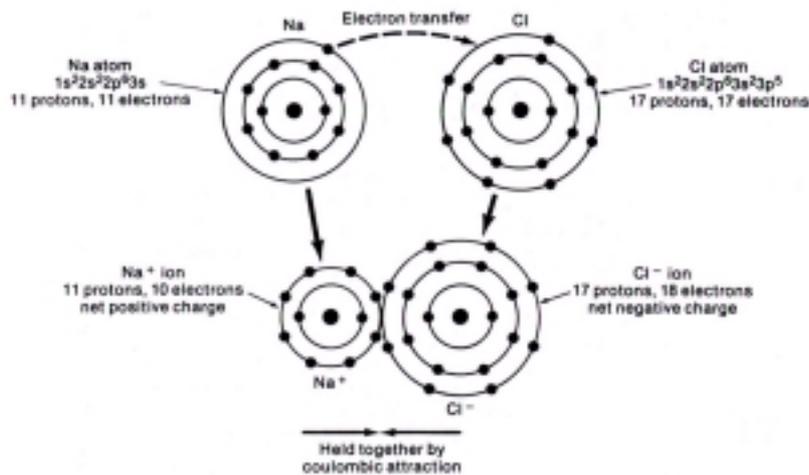
Enlace Metálico

Este tipo de enlace se denomina también enlace electrónico por el hecho de que los electrones de valencia (electrones de niveles incompletos) son compartidos libremente por todos los átomos en la estructura. La mayoría de los metales puros tienen estructuras compactas, las que pueden tener muchos planos de deslizamiento. Esto se refleja en las altas ductilidades que se pueden obtener (40 a 60%). Cuando se trabaja con aleaciones la diferencia en tamaño entre átomos causa alteraciones en el deslizamiento por lo que la ductilidad decrece (5 a 20%). Otra cualidad importante del enlace metálico es que permite una fácil conducción de la electricidad.



Enlace Iónico

Éste ocurre cuando un átomo cede uno o más electrones a otro u otros átomos, de tal manera que la neutralidad electrostática se mantiene y cada átomo logra su estabilidad, por ejemplo el NaCl. La estructura cristalina de un compuesto con enlaces iónicos está determinada por el número de átomos de cada elemento requeridos para lograr la neutralidad eléctrica y el empaquetamiento óptimo, basado en el tamaño relativo de los iones.



El tamaño del ión se denomina radio iónico y depende en cierto grado de los iones que lo rodean.

La mayoría de los cristales iónicos tienen estructuras compactas.

El enlace iónico está asociado con los electrones del orbital s (el cual tiene una distribución de probabilidad esférica), por lo que sería un enlace no direccional si fuera puramente iónico. Sin embargo, hay una tendencia hacia una concentración de electrones entre los centros de los átomos, lo que produce cierto grado de carácter no-iónico.

El grado de carácter iónico puede estimarse usando la escala de electronegatividad.

A mayor diferencia de electronegatividad entre los átomos de un compuesto mayor es el carácter iónico.

El tamaño relativo de los iones puede ser una buena referencia para determinar el número de coordinación de éstos dentro de una red cristalina.

$$A/X = 0.155 - 0.225 [n] = 3$$

$$A/X = 0.225 - 0.414 [n] = 4$$

$$A/X = 0.414 - 0.732 [n] = 6$$

$$A/X > 0.732 [n] = 8$$

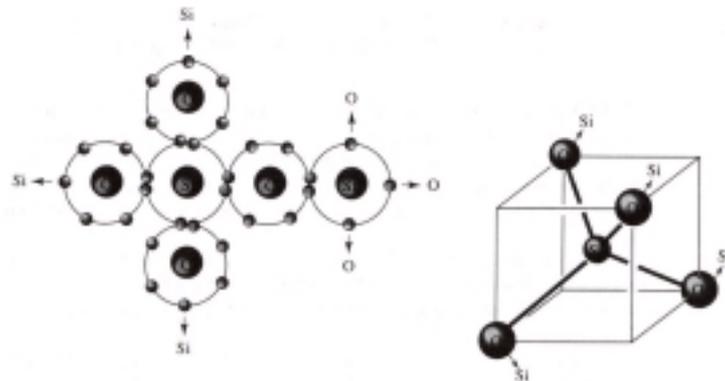
Los compuestos formados con elementos de los grupos IA (Li, Na, K, Rb, Cs y Fr) y VIIA (F, Cl, Br, I, At) son altamente iónicos, pero tienen una resistencia relativamente baja, punto de fusión bajo y dureza baja; en cambio los compuestos formados con elementos con una carga mayor (o valencia), tal como Mg^{2+} , Al^{3+} y Zr^{4+} tienen enlaces más fuertes y por consiguiente mayor resistencia, altos puntos de fusión y durezas mayores.

Características de los cerámicos iónicos:

1. Un átomo es el donador y otro el receptor de electrones de manera que se logra la neutralidad eléctrica.
2. La estructura está determinada por el tamaño de los átomos o iones y de su carga, con una tendencia a formar estructuras compactas.
3. El enlace es no-direccional.
4. Estos materiales son transparentes a la luz de longitud de onda visible.
5. Absorben luz infrarroja.
6. Tienen conductividad eléctrica baja a temperatura baja.
7. Muestran conductividad iónica a alta temperatura.
8. Enlaces de iones metálicos con aniones del grupo VIIA son altamente iónicos.
9. Compuestos con elementos del grupo VIA son menos iónicos.
10. La fuerza de los enlaces iónicos se incrementa con la carga; muchos óxidos formados con iones con carga múltiple son duros y funden a temperatura alta.

Enlace Covalente

Éste ocurre cuando uno o más átomos comparten electrones de tal manera que logran su estabilidad. Al contrario del enlace metálico y iónico, el enlace covalente es direccional. Cada enlace covalente consiste de un par de electrones compartidos entre dos átomos, tal que la distribución de probabilidad se asemeja a una campana. El enlace entre átomos de carbono para producir diamante es un buen ejemplo de esto.

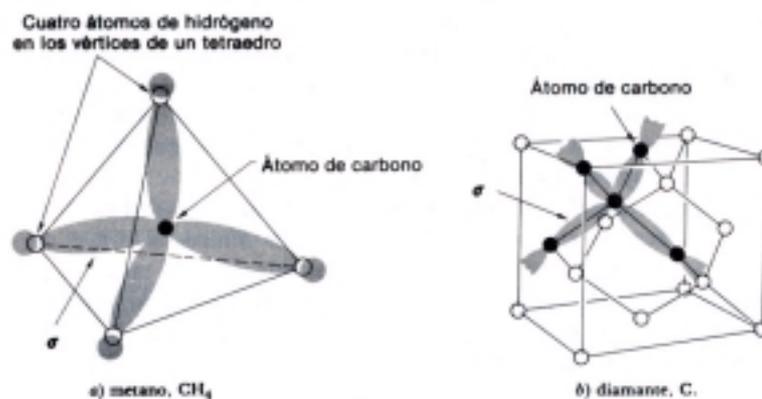


La periodicidad continua del enlace covalente entre átomos de carbono resulta en una dureza alta, punto de fusión alto y conductividad eléctrica baja a temperatura baja. El carburo de silicio se comporta de forma similar.

Los cerámicos con enlaces covalentes generalmente son duros y resistentes y tienen un punto de fusión alto. Sin embargo, estas no son características generales de todos los materiales que desarrollan enlaces covalentes.

La mayoría de los compuestos orgánicos tienen enlaces covalentes pero tienen dureza y punto de fusión bajos. El factor decisivo es la fuerza del enlace y la naturaleza de la estructura.

El metano (CH_4) forma una unidad estructural tetrahédrica como el diamante, pero los electrones de valencia del carbono y los cuatro de los átomos de hidrógeno se "complementan" dentro de éste, por lo que no se forma una estructura periódica.



Los gases diatómicos (H_2 , O_2 , N_2) son otro ejemplo de enlace covalente. Donde cada hidrógeno comparte un electrón para formar H_2 , el oxígeno dos para formar O_2 , y el nitrógeno tres para formar N_2 . La molécula de N_2 es tan estable que se utiliza para sustituir al He o Ar en algunos procesos.

Los materiales con enlace covalente tienen estructuras que son no compactas.

Cerámicos con enlaces covalentes típicamente muestran expansiones térmicas pequeñas, debido a que el "crecimiento térmico" de los átomos individuales es absorbido por el espacio vacío de la estructura.

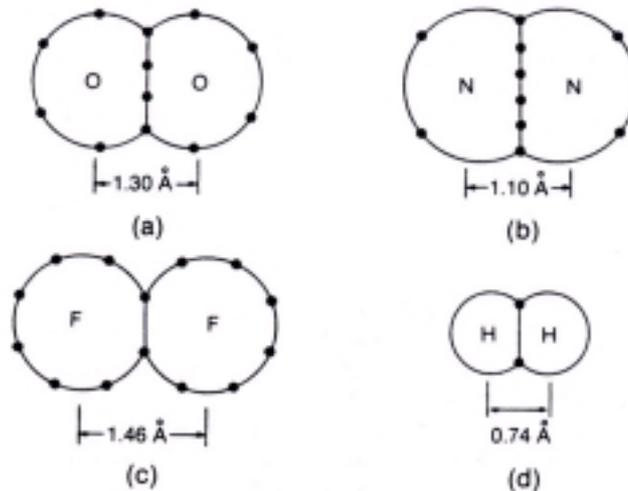
Un enlace covalente ocurre entre dos átomos de electronegatividad similar que no tengan una configuración de gas inerte.

Característica de los cerámicos covalentes:

1. Los electrones son compartidos para llenar los orbitales exteriores y así lograr neutralidad eléctrica.
2. Átomos de electronegatividad similar forman enlaces covalentes.
3. El enlace es altamente direccional.

4. Las estructuras son no compactas.

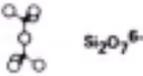
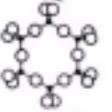
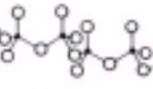
5. Estos materiales por lo general muestran una expansión térmica baja, ductilidad pobre y conductividad eléctrica y térmica bajas.



Combinación de enlace covalente y iónico.- muchos materiales tienen una combinación de enlace covalente y iónico, ejemplo de esto es el yeso, en el que el oxígeno se une covalentemente al azufre para formar el SO_4^{2-} , el cual a su vez se une iónicamente con el calcio para formar el CaSO_4

Un tipo similar de enlace se observa en muchos silicatos. La estructura de los silicatos se basa en las diferentes maneras en que los tetraedros de SiO_4^{4-} se unen. Los tetraedros se unen compartiendo las esquinas, lo que resulta en diferentes estructuras: marco, cadena, anillo y capas. Esto es análogo a la polimerización en materiales orgánicos.

También puede existir una mezcla de enlace metálico y iónico, lo cual ocurre cuando existe una diferencia importante en electronegatividad entre los dos metales, como en la formación de un compuesto intermetálico, por ejemplo el AlLi .

Bonding of Silicate Structures			
Bonding of tetrahedra	Structure classification	Schematic	Examples
Independent tetrahedra	Orthosilicates	 SiO_4^{4-}	Zircon (ZrSiO_4), mullite (Al_2SiO_5), forsterite (Mg_2SiO_4), kyanite (Al_2SiO_5)
Two tetrahedra with one corner shared	Pyrosilicates	 $\text{Si}_2\text{O}_7^{6-}$	Ackermanite ($\text{Ca}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$)
Two corners shared to form ring or chain structures	Metasilicates	 $\text{Si}_6\text{O}_{18}^{12-}$  $(\text{SiO}_3)_n^{2n-}$	Spodumene [$\text{LiAl}(\text{SiO}_3)_2$], wollastonite (CaSiO_3), beryl ($\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$), asbestos [$\text{Mg}_3\text{Si}_2\text{O}_{10}(\text{OH})_2$]
Three corners shared	Layer silicates	See Ref. 2, pp. 75–79	Kaolinite clay [$\text{Al}_2(\text{Si}_2\text{O}_5)(\text{OH})_4$], mica (muscovite var.) [$\text{KAl}_3(\text{OH})_2(\text{AlSi}_3\text{O}_{10})$], talc [$\text{Mg}_3(\text{Si}_3\text{O}_{10})(\text{OH})_2$]
Four corners shared	Framework silicates	See Ref. 2, pp. 71–74, for SiO_2 and derivatives	Quartz, cristobalite, tridymite (SiO_2), feldspars (albite var.) ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$), zeolites (mordenite var.) [$(\text{Ca}, \text{Na})\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{20} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$]

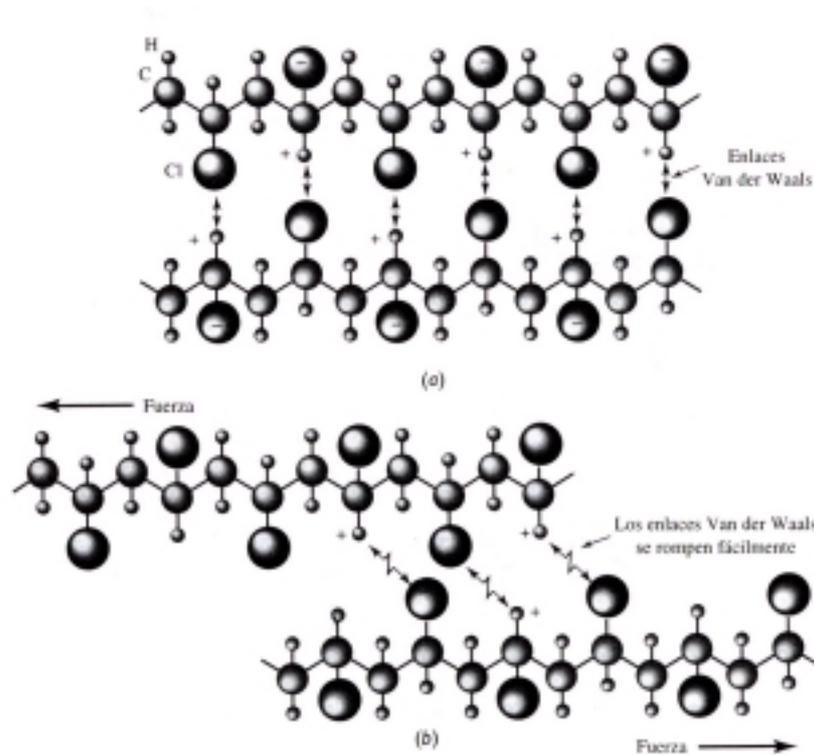
Enlaces de Van der Waals

Este tipo de enlace es más débil y es referido como un enlace secundario, sin embargo, tiene un efecto importante sobre las propiedades de los materiales.

Las fuerzas de Van der Waals son muy importantes en estructuras en capas, como son las arcillas, grafito y nitruro de boro hexagonal. Estas fuerzas mantienen las capas unidas. Todas estas estructuras tienen un fácil deslizamiento entre capas, por lo que pueden utilizarse como materiales de baja fricción y superficies autolubrificables en sellos, así como lubricantes sólidos y recubrimientos en capa delgada.

A pesar de que este tipo de fuerzas son débiles, son suficientes para causar absorción de moléculas en la superficie de los sólidos. Su mayor aplicación se da en la modificación de las propiedades rheológicas de suspensiones.

En los polímeros los enlaces de Van de Waals mantienen las cadenas de éstos fuertemente unidas. La deformación plástica de un polímero, principalmente un termoplástico, ocurre por el rompimiento de estos enlaces, lo que permite el deslizamiento de una cadena sobre otra.

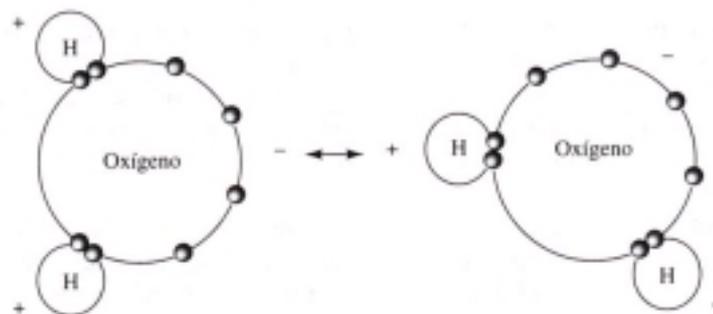


Los diferentes tipos de enlace de Van der Waals son:

Dispersión.- es la formación de dipolos debidos a la fluctuación eléctrica dentro de moléculas. Un ejemplo es la condensación de gases nobles a bajas temperaturas.

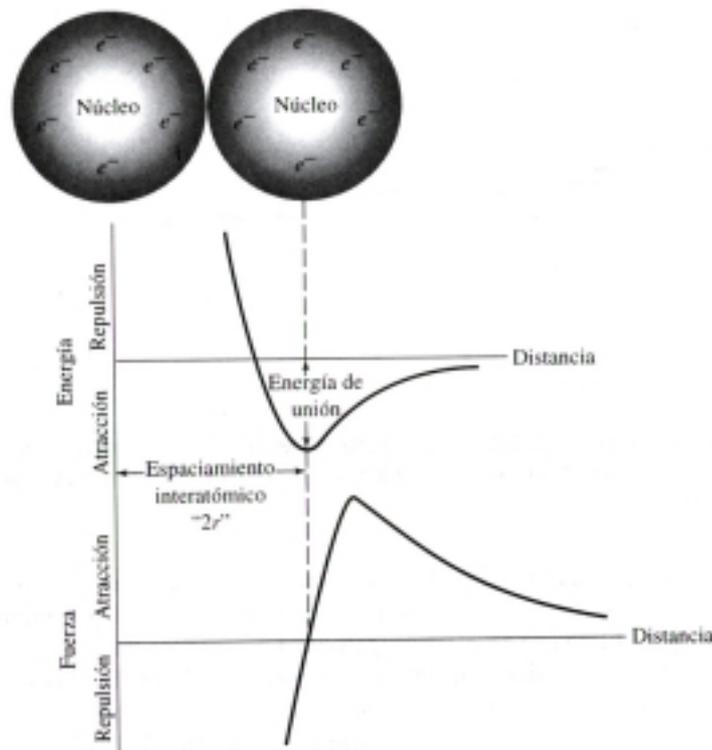
Polarización Molecular.- es la formación de un dipolo en moléculas asimétricas. El ácido fluorhídrico es un ejemplo de este tipo de enlace; la parte de la molécula donde se encuentra el fluor será negativa mientras la del hidrógeno será positiva.

Puente de hidrógeno.- el núcleo de hidrógeno de una molécula (parte positiva del dipolo) es atraída a los electrones no compartidos de una molécula vecina. En general este tipo de enlace ocurre en moléculas que contienen hidrógeno como H_2O y NH_3 .



2.5. ESPACIAMIENTO INTERATÓMICO Y ENERGÍA DE ENLACE

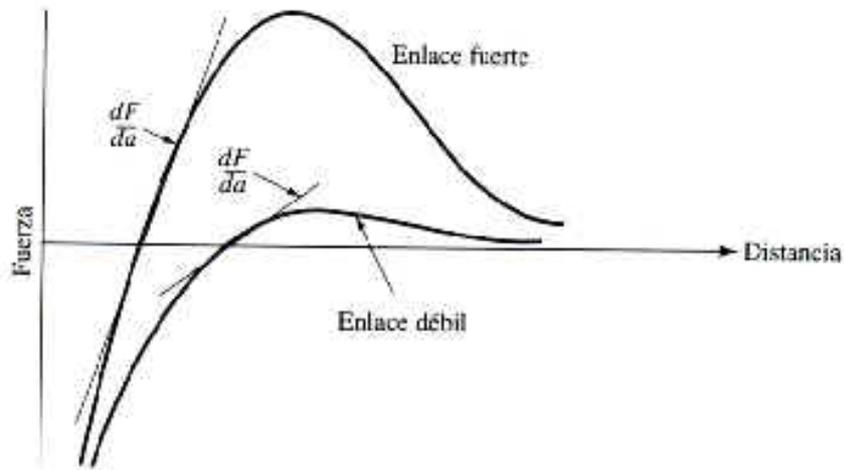
Espaciamento interatómico.- es la distancia de equilibrio entre átomos que se debe a un equilibrio entre las fuerzas de repulsión y atracción. El espaciamento de equilibrio ocurre cuando la energía total de un par de átomos llega a un mínimo o cuando la fuerza neta (para atraer o repeler) es nula.



El espaciamento interatómico entre los átomos de un metal sólido se asume igual al diámetro atómico. Note que esto no se aplica a sólidos con enlaces iónicos.

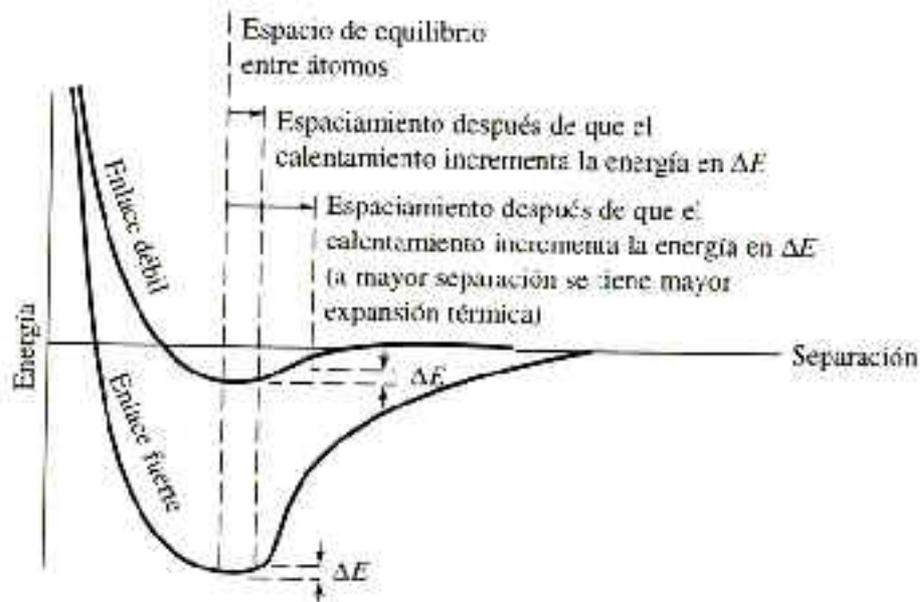
Energía de enlace.- es la energía requerida para crear o romper un enlace.

Materiales con enlaces de una energía elevada tendrán una resistencia alta y una temperatura de fusión elevada.



Existen otras propiedades que se pueden relacionar con las curvas fuerza-distancia y energía-separación.

El módulo de Young se puede correlacionar con la curva fuerza-distancia. Un enlace fuerte resulta en un módulo alto. Una expansión térmica baja está asociada con un enlace fuerte y un mínimo de energía de unión grande.



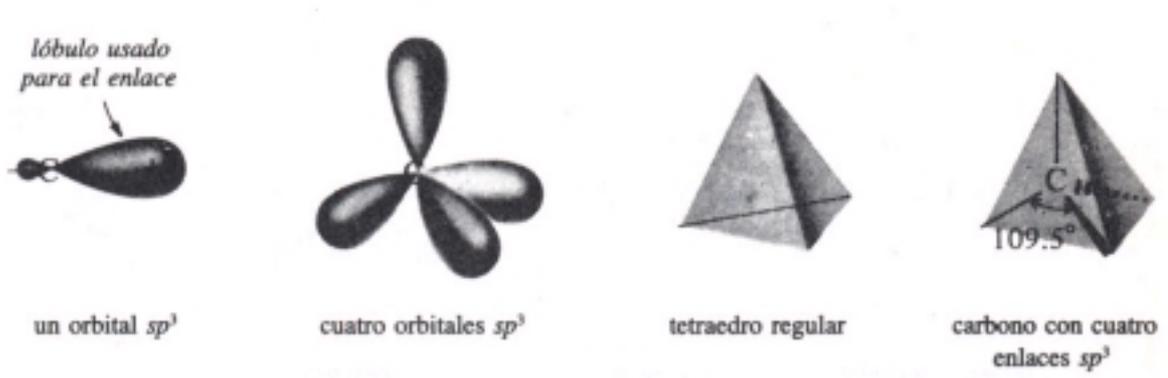
2.6. EL CASO DEL CARBONO

El carbono es un elemento interesante ya que forma parte de una gran variedad de compuestos orgánicos e inorgánicos. La importancia del carbono radica en los diferentes tipos de enlaces, de carácter covalente, que puede formar con otros átomos de carbono o elementos.

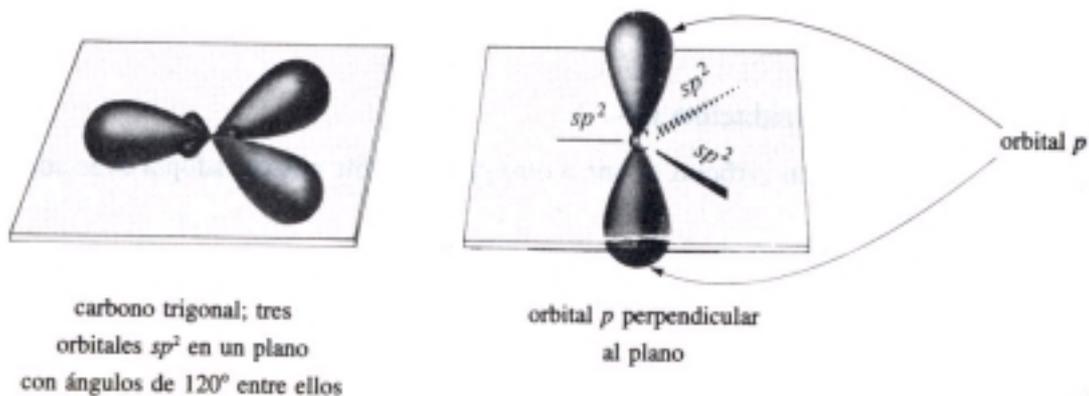
El carbono tiene dos electrones en el orbital 1s que, al estar lleno, no pueden ser usados para formar enlaces. Son los cuatro electrones del segundo nivel energético (2s y 2p) los que se usan para tal finalidad.

En el nivel 2 de un átomo hay cuatro: un orbital 2s y tres 2p. Sin embargo, el carbono no los usa en su estado original para formar enlaces, sino que los combina o hibridiza en cualquiera de las tres siguientes maneras:

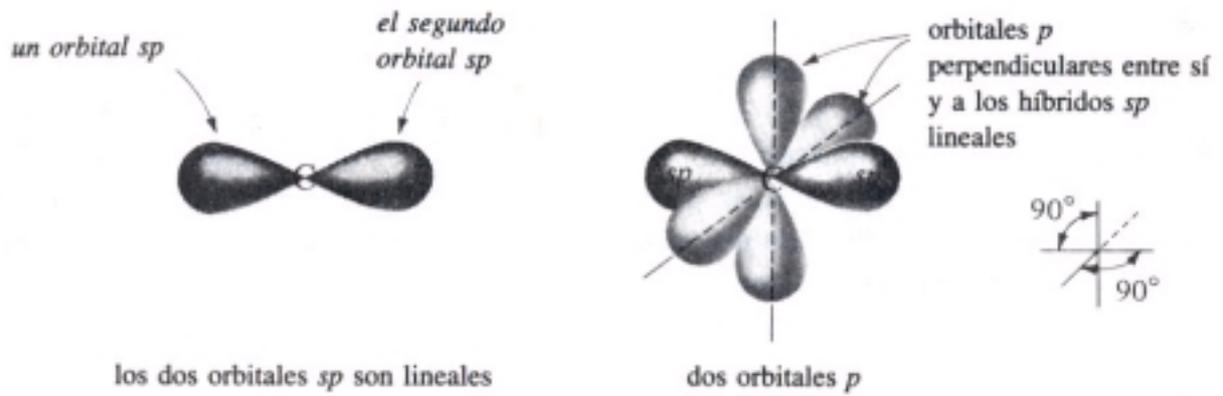
1) Hibridación sp^3 .- utilizada cuando el carbono forma cuatro enlaces simples.



2) Hibridación sp^2 .- utilizada cuando el carbono forma un enlace doble.



3) Hibridación **sp**.- utilizada cuando el carbono forma un enlace triple o enlaces dobles acumulados (dos dobles enlaces en un mismo átomo de carbono).



La hibridación da lugar a enlaces más fuertes, debido al mayor grado de superposición orbital, resultando de ello moléculas más estables y con menor contenido energético