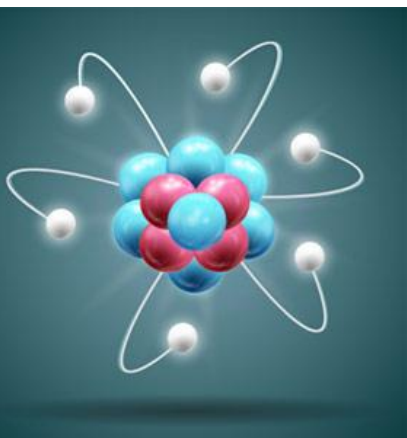
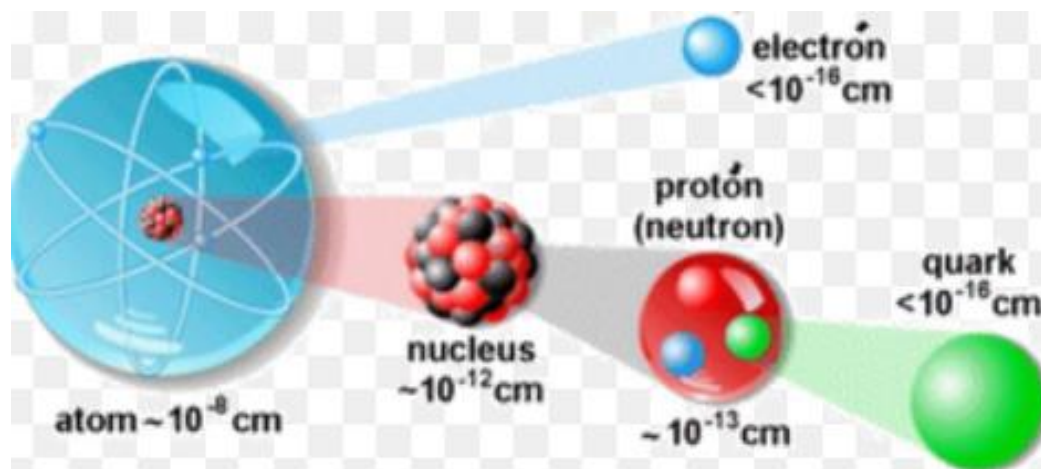
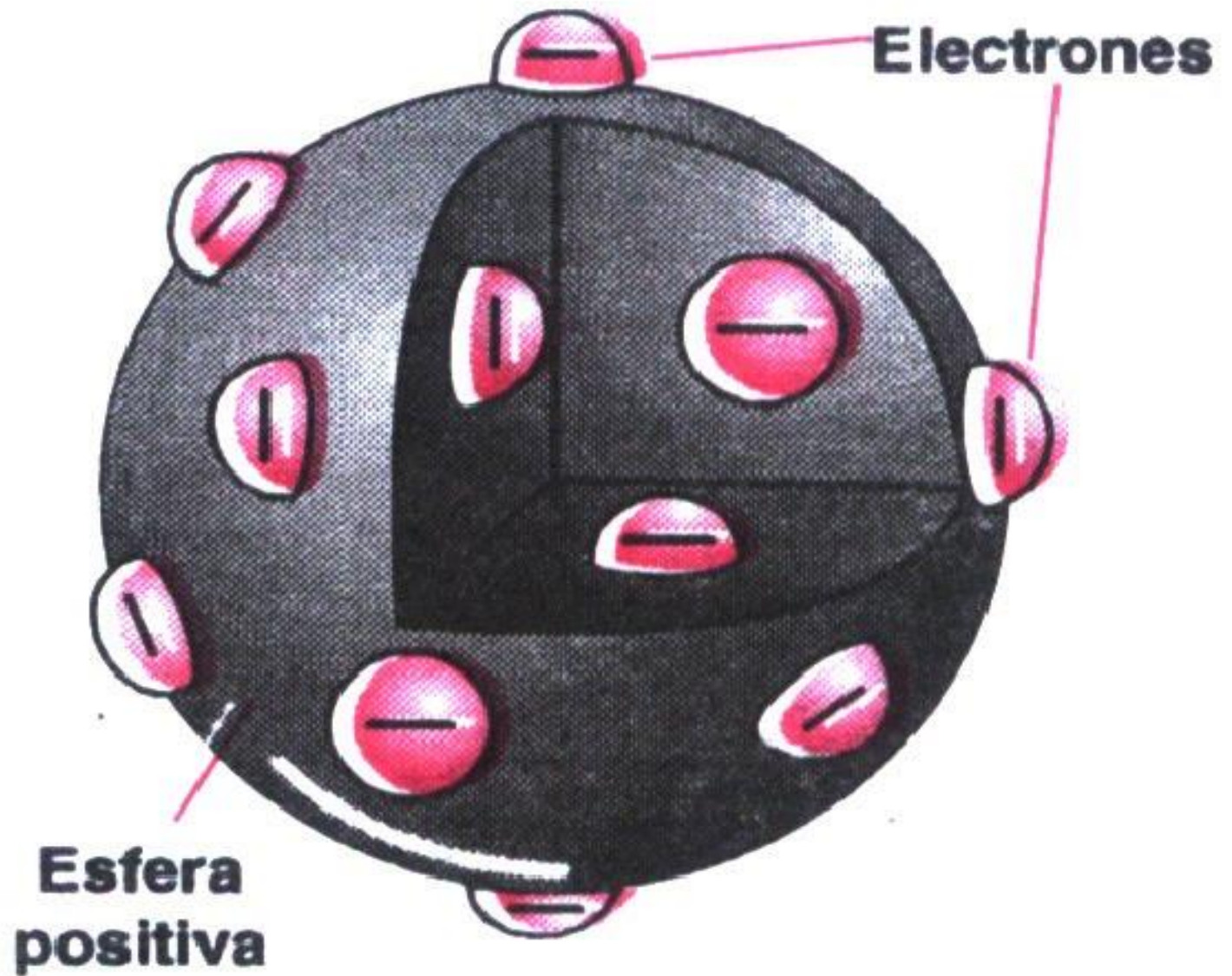


2018
Prof. María Luján Ferreira
Química IS



Estructura Atómica

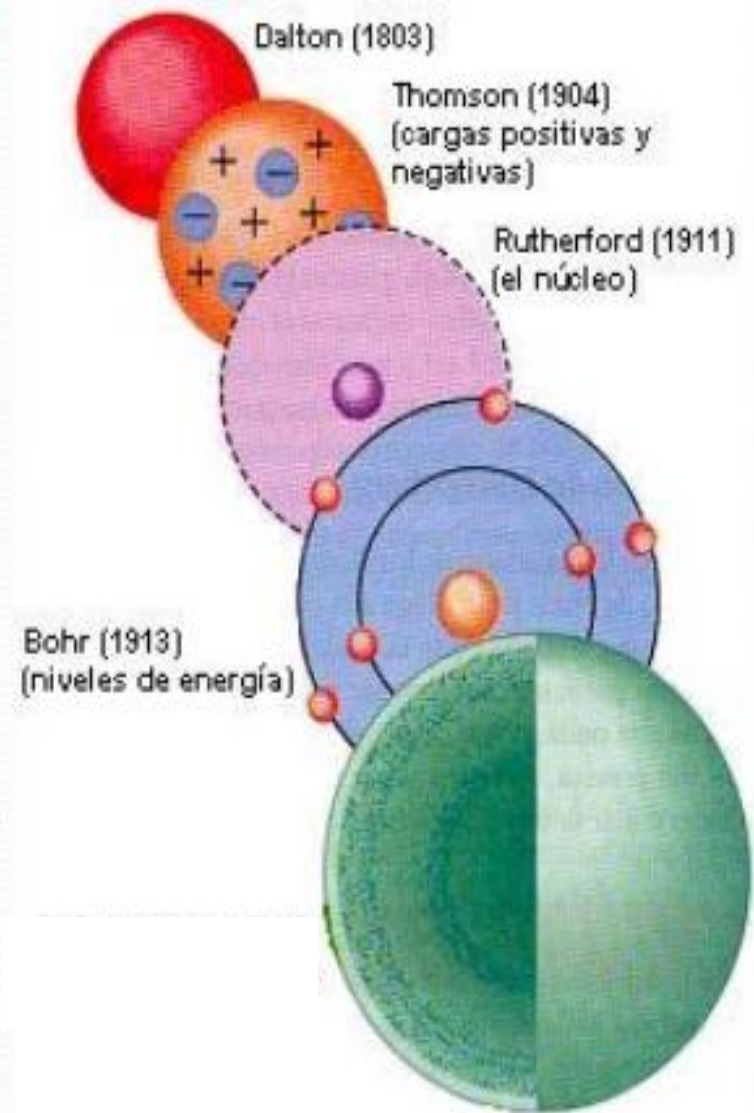




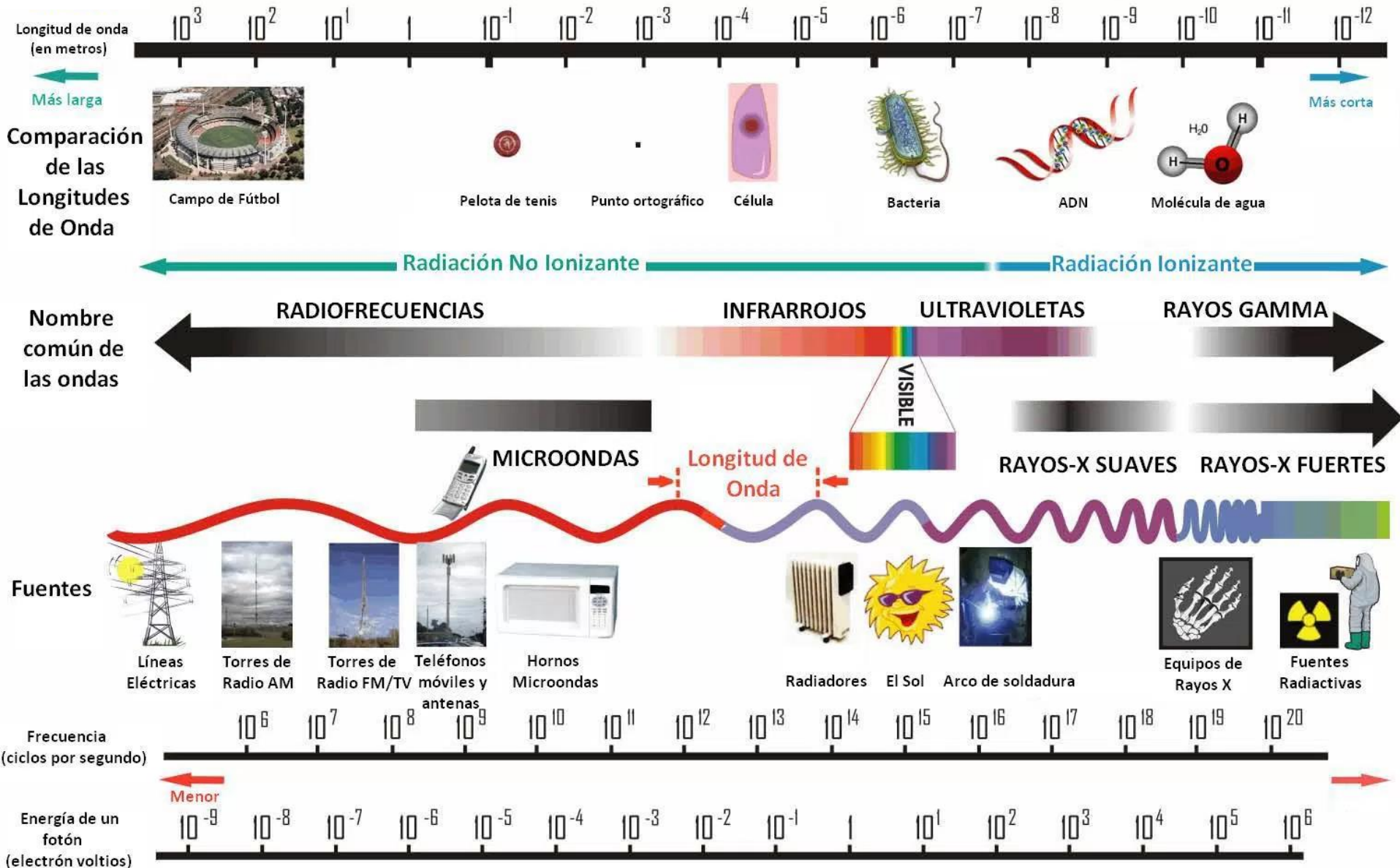
Modelo atómico de Thomson

Modelos atómicos

- Teoría atómica de Dalton
- Modelo atómico de Thomson
- Modelo atómico de Rutherford
- Teoría Cuántica
- Modelo atómico de Bohr
- Modelo atómico de Schrodinger



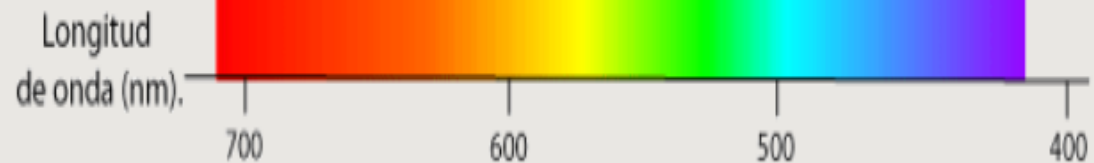
EL ESPECTRO ELECTROMAGNÉTICO



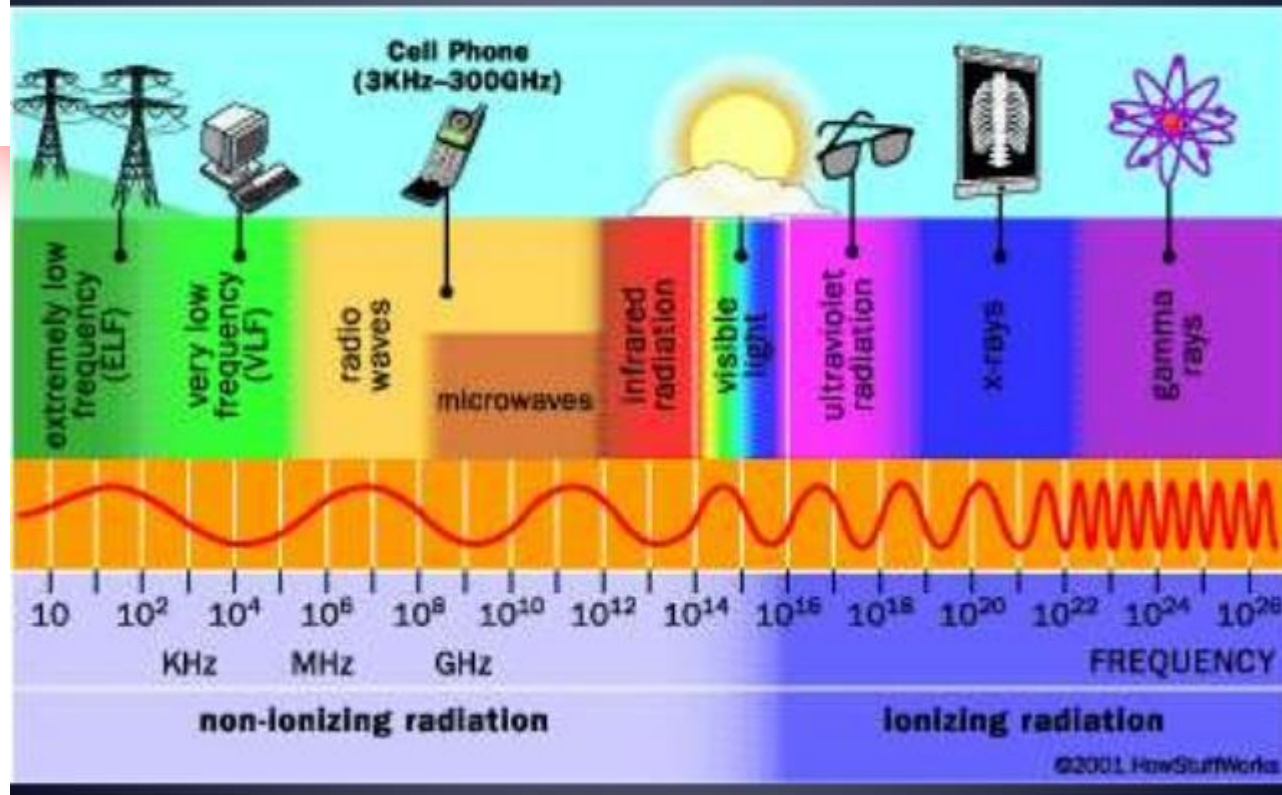
Espectro electromagnético



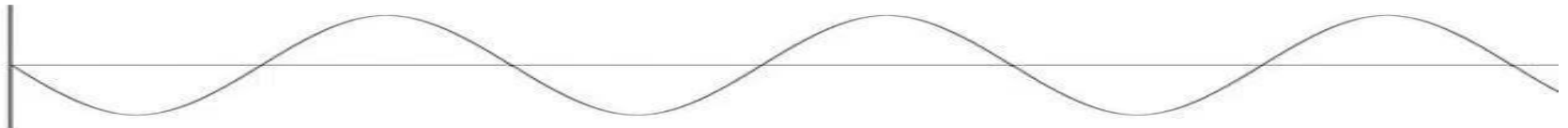
Espectro visible



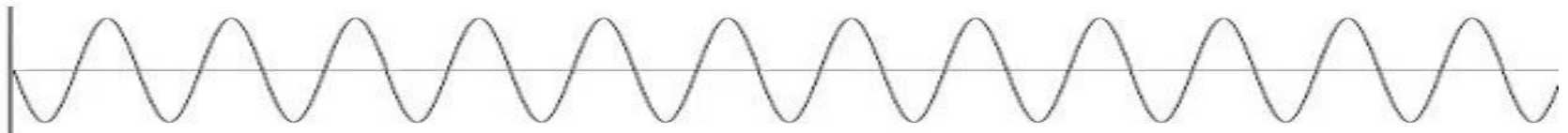
FRECUENCIAS



Onda de frecuencia baja



Onda de frecuencia alta



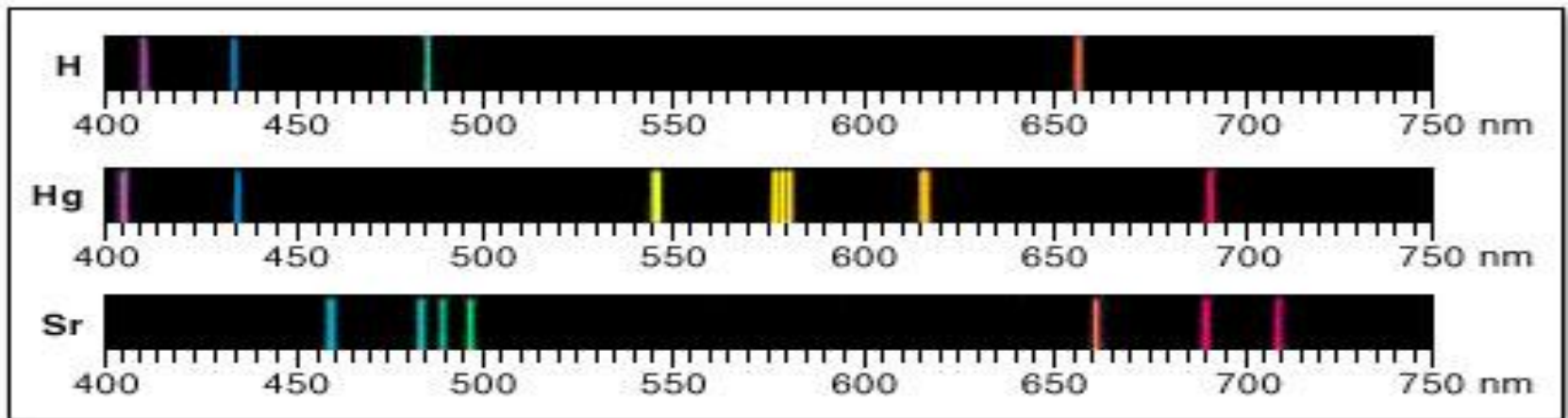
Determinar las frecuencias de las radiaciones electromagnéticas de las longitudes de onda siguientes: 1 Å; 5000 Å; 4,4 μm; 89 m; 562 nm

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

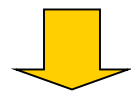
Esta es la relación entre **frecuencia** y **longitud de onda** (λ , lambda). La constante de proporcionalidad entre ambas variables es la velocidad de propagación de la onda, que en el caso de la radiación electromagnética es la **velocidad de la luz**, cuyo valor es muy aproximadamente igual a $3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$.

Los espectros atómicos

- Los átomos emiten (o absorben) luz discontinua (sólo de algunas frecuencias o longitudes de onda λ)
- Los espectros atómicos son discontinuos

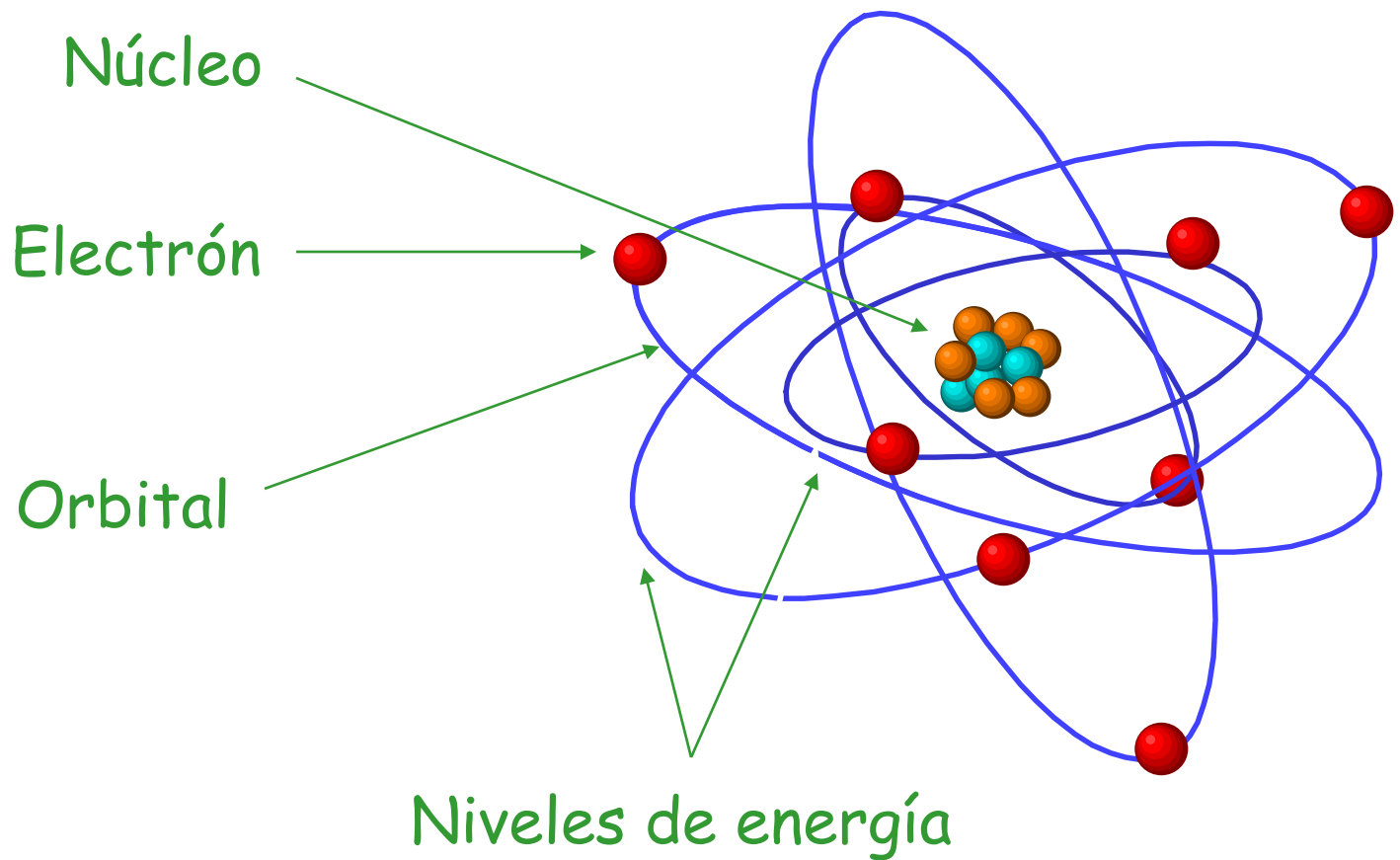


- El modelo atómico de Rutherford tampoco explica la discontinuidad de los espectros atómicos

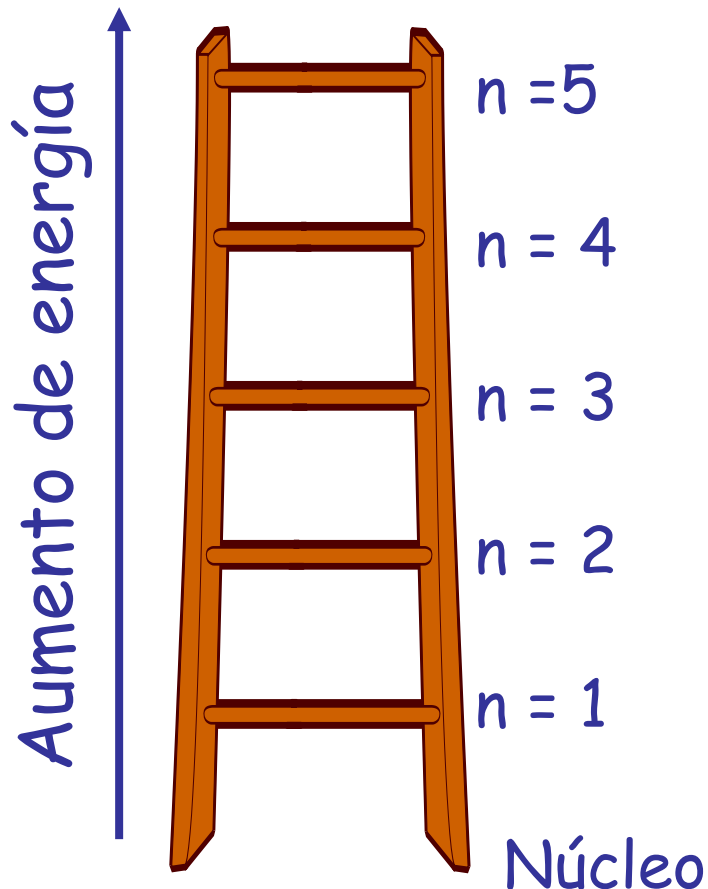


NECESARIO NUEVO
MODELO ATÓMICO

Modelo de Bohr



Modelo de Bohr: cuantización de r y E



- El número cuántico n está asociado con r de la órbita. A menor n , menor radio. También con la **energía** (mayor n , mayor energía)
- $n = 1$ es el **estado basal o fundamental**
- $n > 1$ es **un estado excitado**

Limitaciones del modelo de Bohr

- Explica sólo el espectro del átomo de H
- No funciona para átomos polielectrónicos (atracciones e-núcleo y repulsiones e-e)
- Los electrones **no** "viajan" en **órbitas fijas** (r definidos)



Nuevo modelo atómico

Dualidad onda-partícula

- 1924 Louis De Broglie: *los electrones pueden tener propiedades ondulatorias:*

$$\lambda = h/mv$$

- 1927 Heisenberg: *es imposible conocer simultáneamente la posición exacta y el momento (velocidad) de dicha partícula*

Modelo mecánico-cuántico del átomo

- Naturaleza dual de la materia y la energía - mecánica cuántica
- 1926, Schrodinger propone una ecuación (base del modelo atómico actual)

Operador
hamiltoniano

$$H\Psi = E\Psi$$

Función de onda

Energía

Orbital atómico

- La función de onda (Ψ) es una función matemática sin significado físico en la mecánica clásica \rightarrow describe el movimiento del electrón en función del tiempo y de su posición.
- Concepto de **densidad electrónica**: probabilidad de encontrar al electrón en una cierta región del átomo (relacionada con Ψ^2)
- La zona del espacio en la cual es mas probable encontrar al electrón la denominamos **orbital atómico**.

Los números cuánticos

➤ Cuatro números cuánticos:

- **Número cuántico principal (n):** entero positivo (1, 2, 3, ...).
- Define el **tamaño** del orbital y su **energía**.
- **Número cuántico del momento angular (l):** entero (0, 1, 2, ..., $n-1$). Define la **forma** del orbital.
- Los posibles valores de l se designan con una letra:

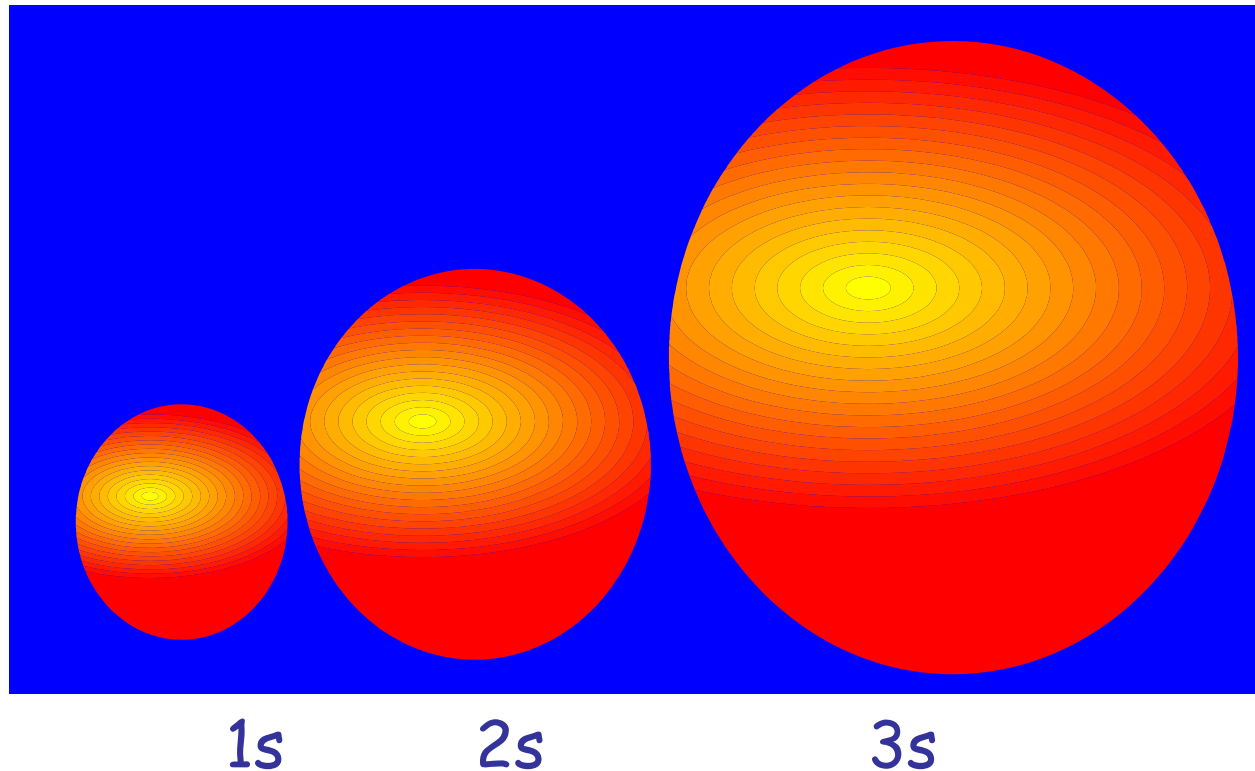
l	0	1	2	3	4	5
Nombres orbital		p	d	f	g	h

Niveles y subniveles

- Número cuántico del momento magnético (m_l): entero $(-l, \dots, 0, \dots, +l)$. Define la orientación del orbital en el espacio
- Número cuántico del espín (m_s): $+1/2$ o $-1/2$. Define la orientación del electrón en presencia de un campo magnético
- El conjunto de orbitales que tienen el mismo valor de n forman un nivel o capa
- Los orbitales que tienen los mismos valores de n y l se conocen como subnivel
- Los orbitales que tienen la misma energía se denominan degenerados

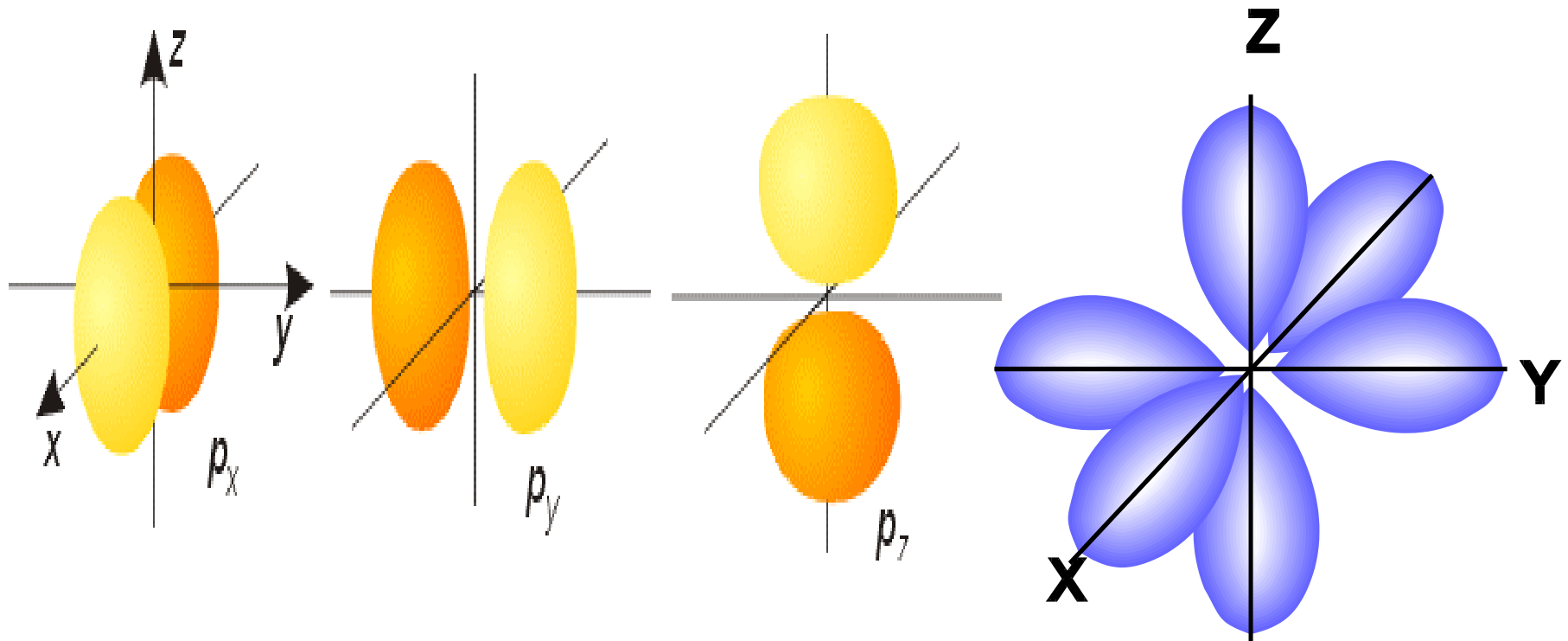
Orbitales s

- Todos los orbitales con $l = 0$ son orbitales s y tienen forma esférica



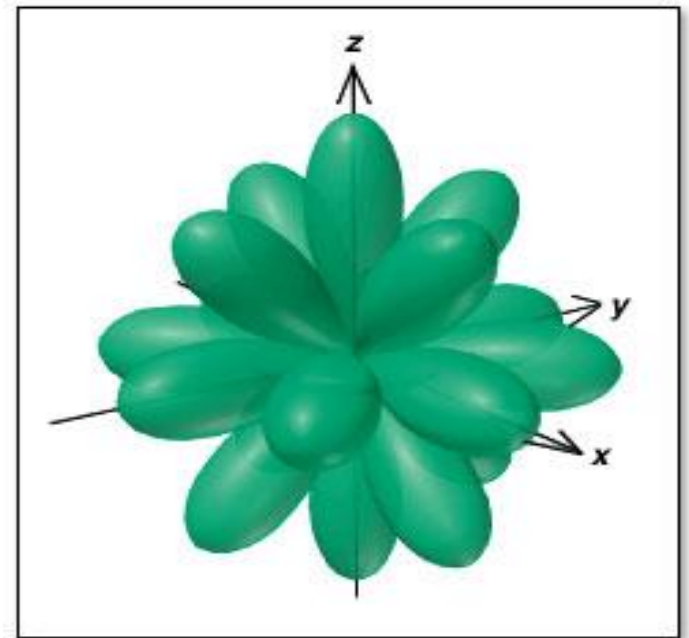
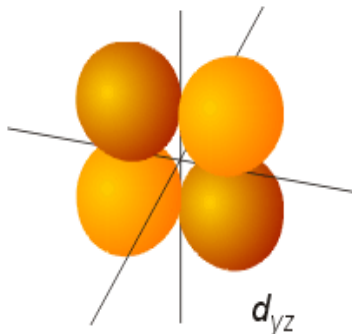
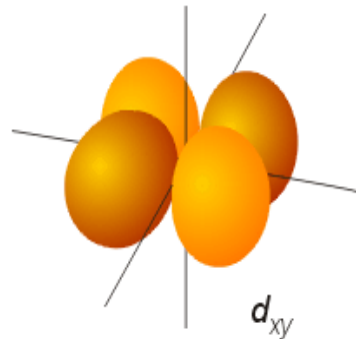
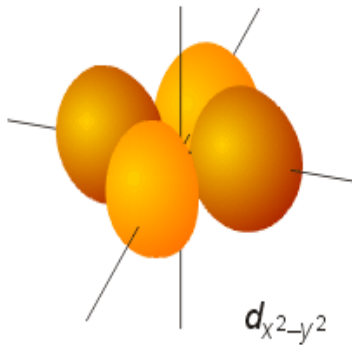
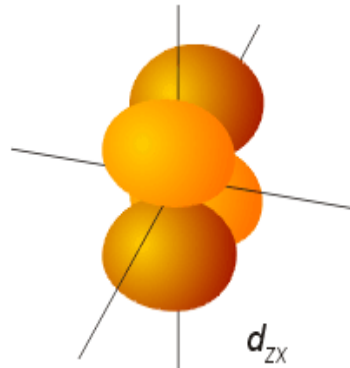
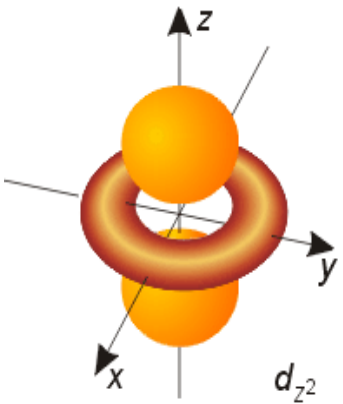
Orbitales p

- Todos los orbitales con $l = 1$ son orbitales p
- Comienzan en el segundo nivel de energía ($n = 2$)
- 3 orbitales ($m_l = -1, 0, +1$), 3 orientaciones distintas



Orbitales d

- $l = 2$ describe orbitales d
- Comienzan en el tercer nivel de energía ($n = 3$)
- 5 orbitales
($m_l = -2, -1, 0, +1, +2$),
5 orientaciones distintas



Energía de los orbitales en el H

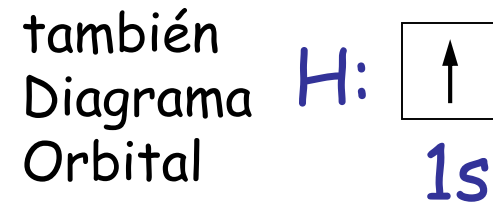
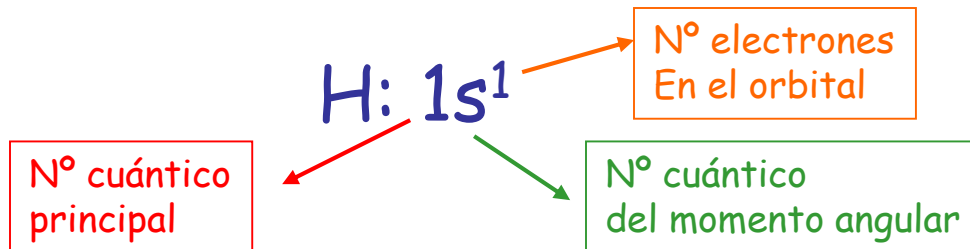
- átomo de H energía (E) $\rightarrow n$. Aumenta n y aumenta E :
 $1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s = 4p = 4d = 4f < \dots$
- El electrón en $n = 1 \rightarrow$ estado fundamental (o de menor energía)
- El electrón en $n > 1 \rightarrow$ estado excitado
- En el átomo de H los orbitales del nivel $n = 2$ ($2s$ y $2p$) tienen igual energía y los subniveles s , p y d del nivel 3 tienen igual energía.
- No sucede lo mismo en un átomo polielectrónico

Átomos polieletrónicos

- Soluciones aproximadas:
 - Los orbitales atómicos son semejantes a los del hidrógeno
 - Se emplean los mismos números cuánticos (n , l , m_l) para describir orbitales
- Sistemas con más de 1 electrón, hay que tener en cuenta:
 - Cuarto número cuántico (m_s)
 - Limitar nº electrones por orbital (P. Exclusión Pauli)
 - Conjunto de niveles de energía más complejo

Configuración electrónica

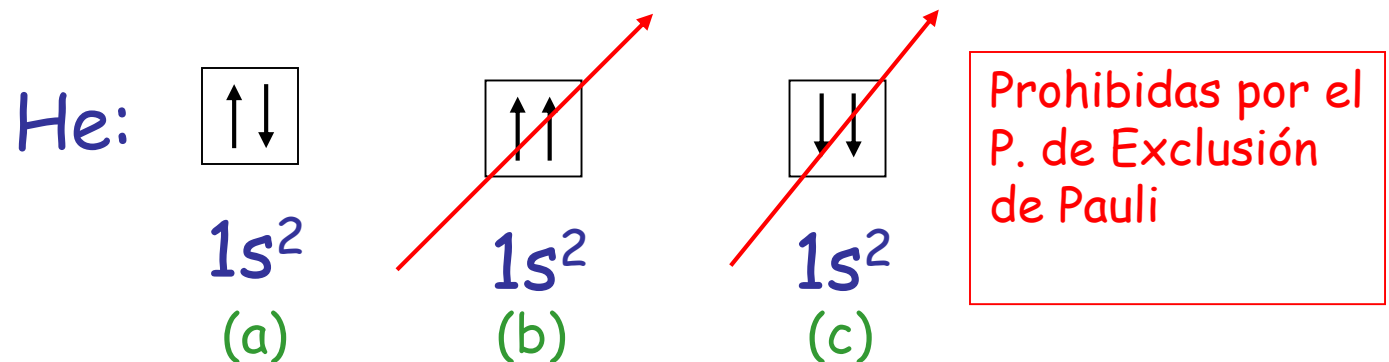
- Combinación de 4 números cuánticos (n , l , m_l , m_s) identifican a cada electrón en un orbital.
 - ¿cuáles son los números cuánticos que identifican a un electrón en el orbital $1s$?
 $n = 1$; $l = 0$; $m_l = 0$; $m_s = \pm \frac{1}{2}$
2 posibles combinaciones: $(1, 0, 0, +1/2)$ y $(1, 0, 0, -1/2)$
- Configuración electrónica: distribución de los electrones en los distintos orbitales atómicos, en orden de energía creciente.
- Átomo de H- sistema más simple:



Principio de exclusión de Pauli

- Necesario para determinar configuraciones electrónicas de átomos polielectrónicos: "dos electrones de un átomo no pueden tener los 4 números cuánticos iguales"
- Ejemplo: configuración electrónica del He ($Z = 2$)

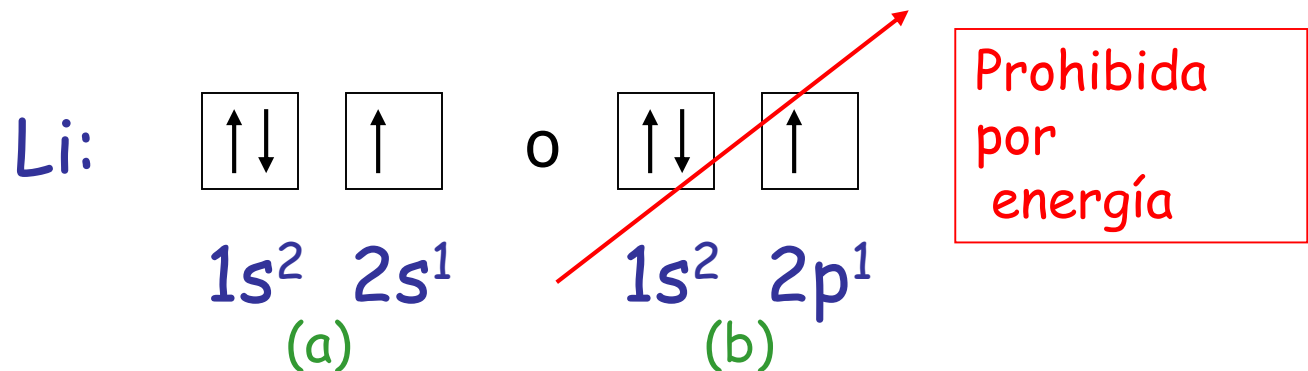
Existen 3 formas de distribuir los dos electrones en el orbital $1s$:



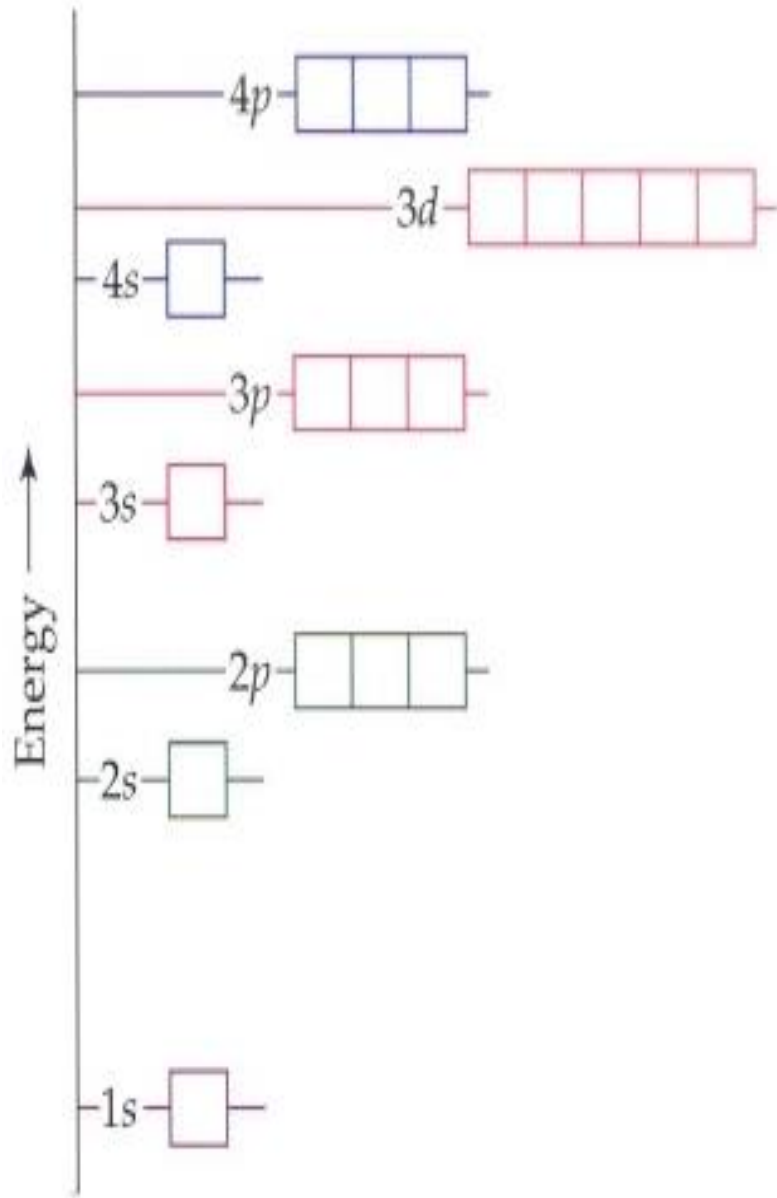
He: $1s^2$ "uno s dos"

Energía de los orbitales en el átomo polielectrónico

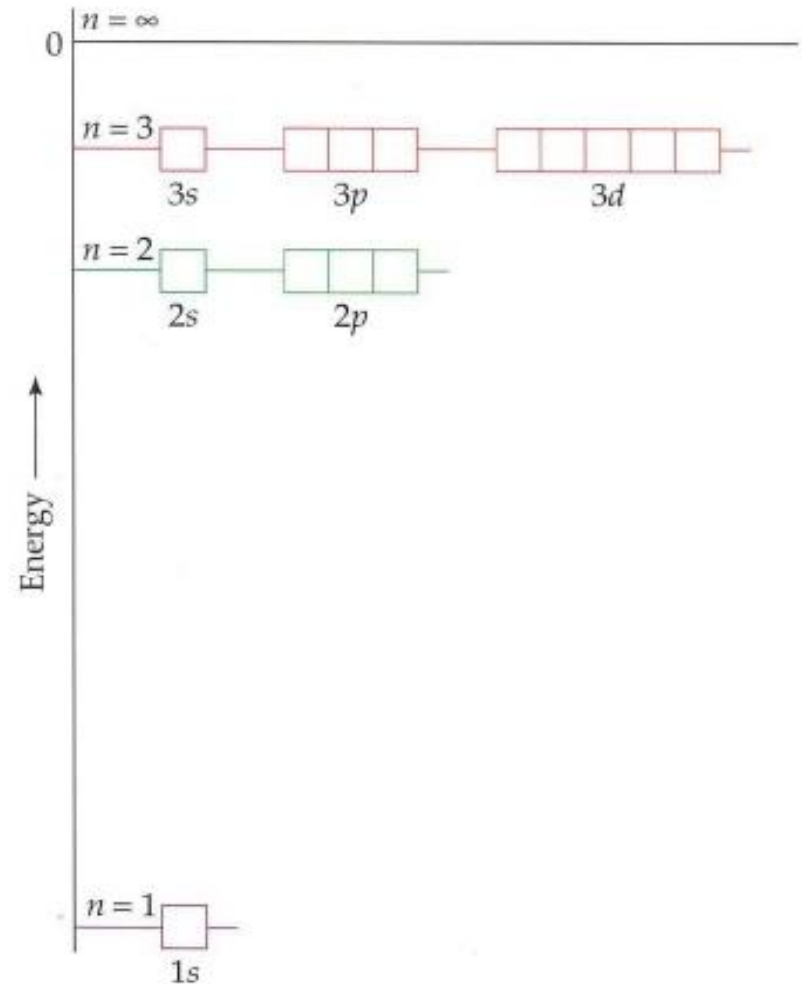
- En el átomo de hidrógeno $E(2s) = E(2p)$: $E \rightarrow n$.
- En un átomo polielectrónico $E \rightarrow n$ y l
- Configuración electrónica del Li ($Z = 3$):



Orbitales y energía



Átomo polielectrónico



Átomo de Hidrógeno

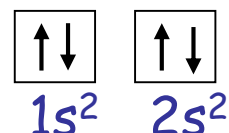
Regla de Hund

- Regla de Hund: "la distribución electrónica más estable es aquella que tiene el mayor número de electrones con espines paralelos"

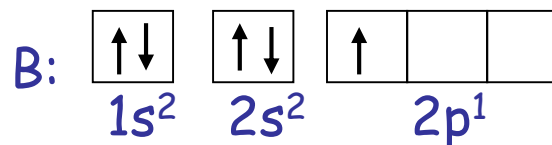
- Be ($Z = 4$) y B ($Z = 5$):

➤ Be: $1s^2 2s^2$

Be:



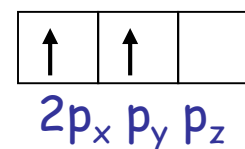
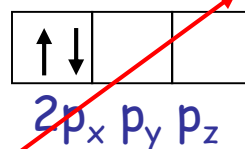
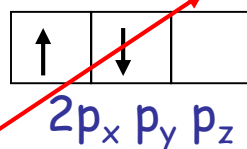
➤ B: $1s^2 2s^2 2p^1$



- C ($Z = 6$):

➤ C: $1s^2 2s^2 2p^2$

Tres posibilidades de colocar el 6º electrón:

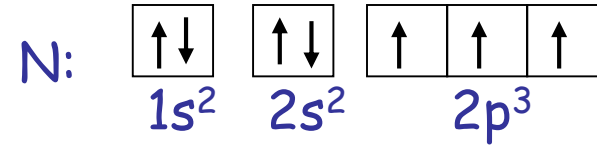


Prohibidas por
Regla de Hund

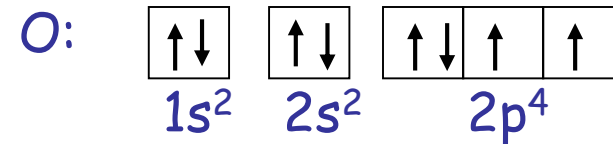
Regla de Hund

➤ N ($Z = 7$), O ($Z = 8$), F ($Z = 9$) y Ne ($Z = 10$):

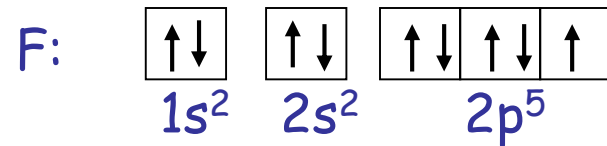
➤ N: $1s^2 2s^2 2p^3$



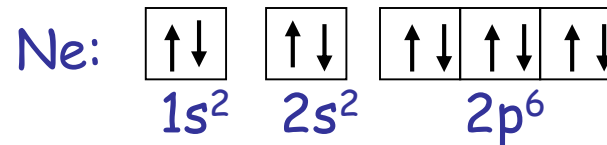
➤ O: $1s^2 2s^2 2p^4$



➤ F: $1s^2 2s^2 2p^5$

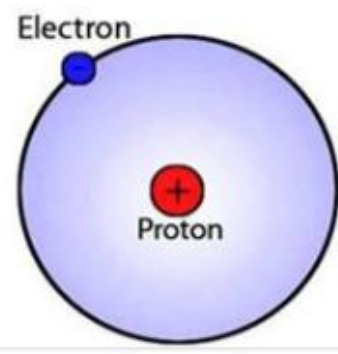
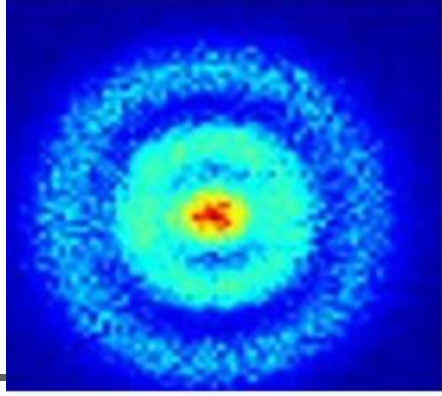
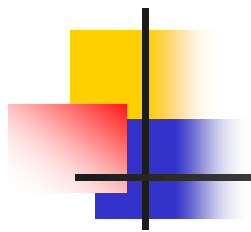


➤ Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$



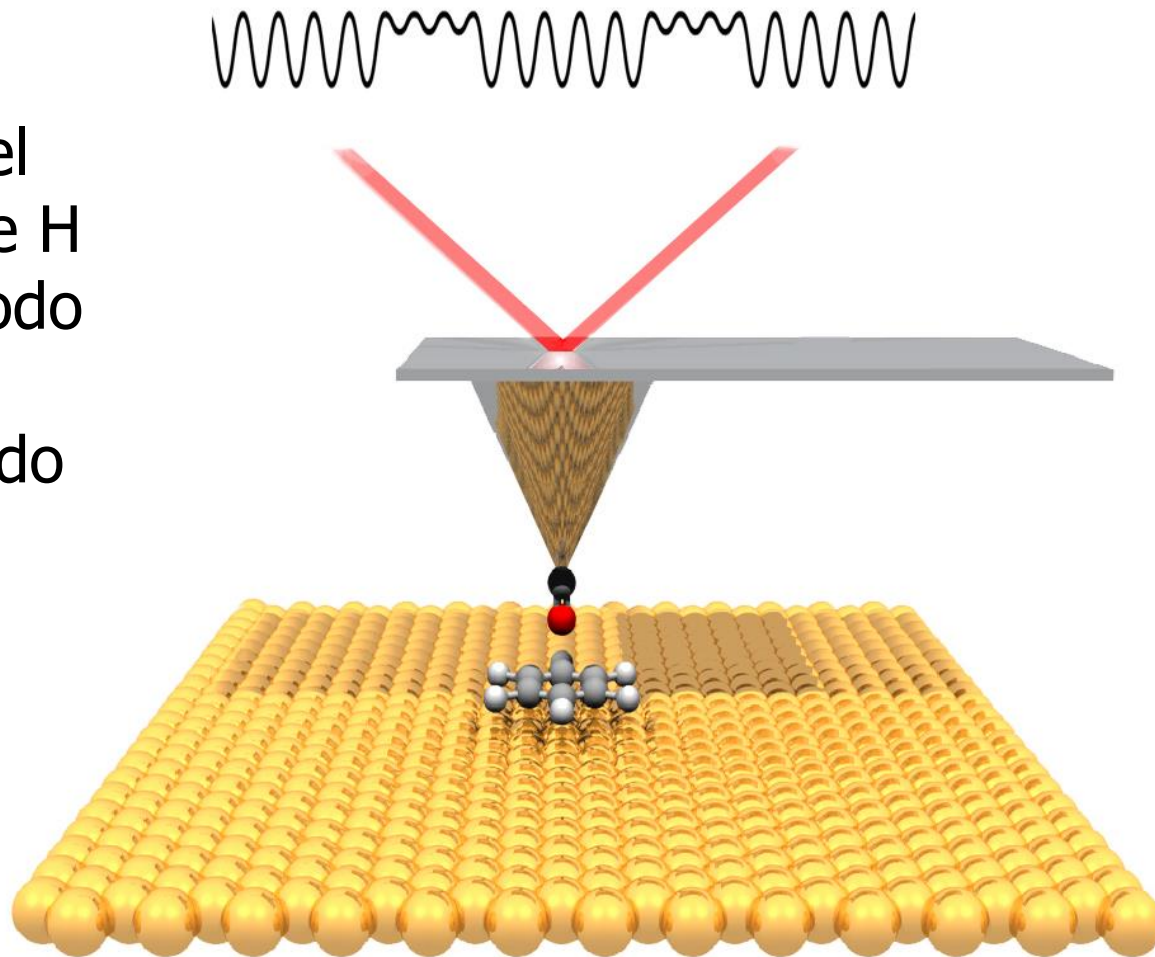
El principio de construcción

- Principio de construcción (aufbau): "los electrones se suman de a uno en uno en los orbitales para construir la configuración electrónica de los elementos"
- Configuraciones en el estado fundamental
- Reglas:
 - Orbitales se llenan de menor a mayor valor de n
 - Cada orbital se ocupa con un máximo de dos electrones con sus espines apareados (Pauli)
 - Para orbitales degenerados, cada electrón ocupará un orbital diferente antes de aparearse (regla de Hund)



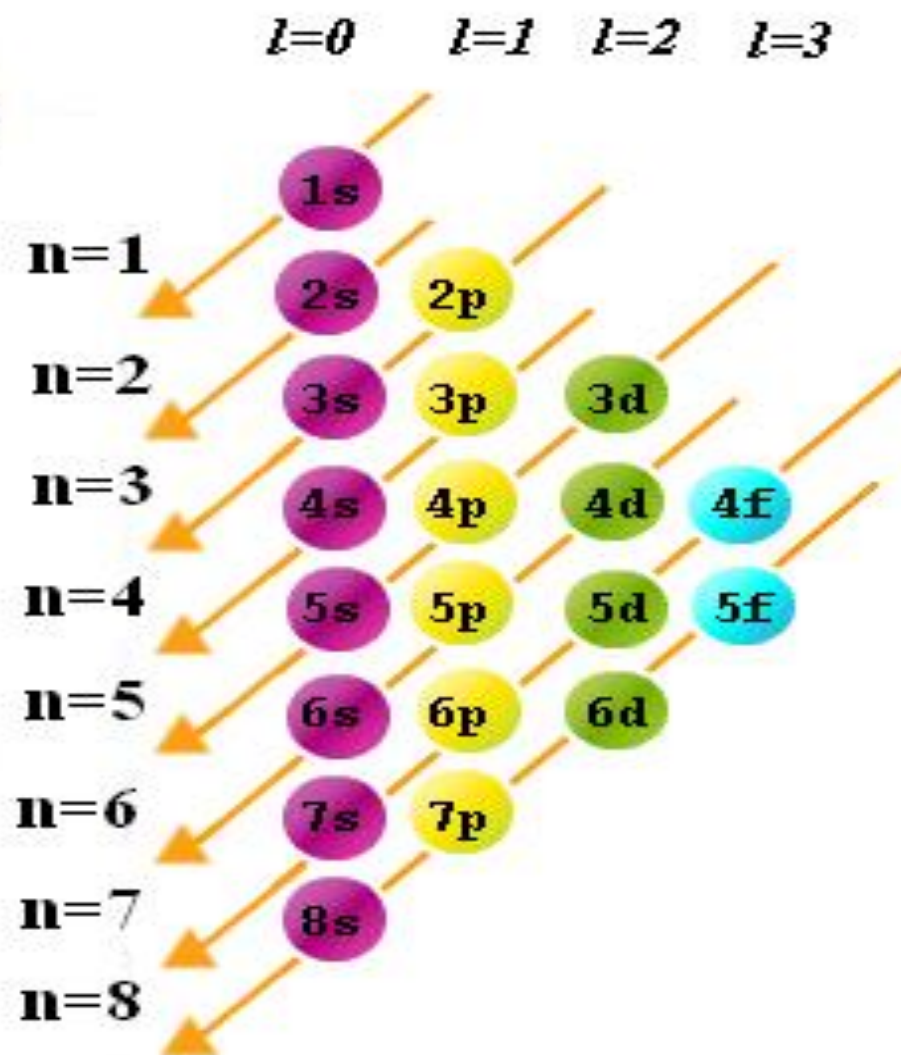
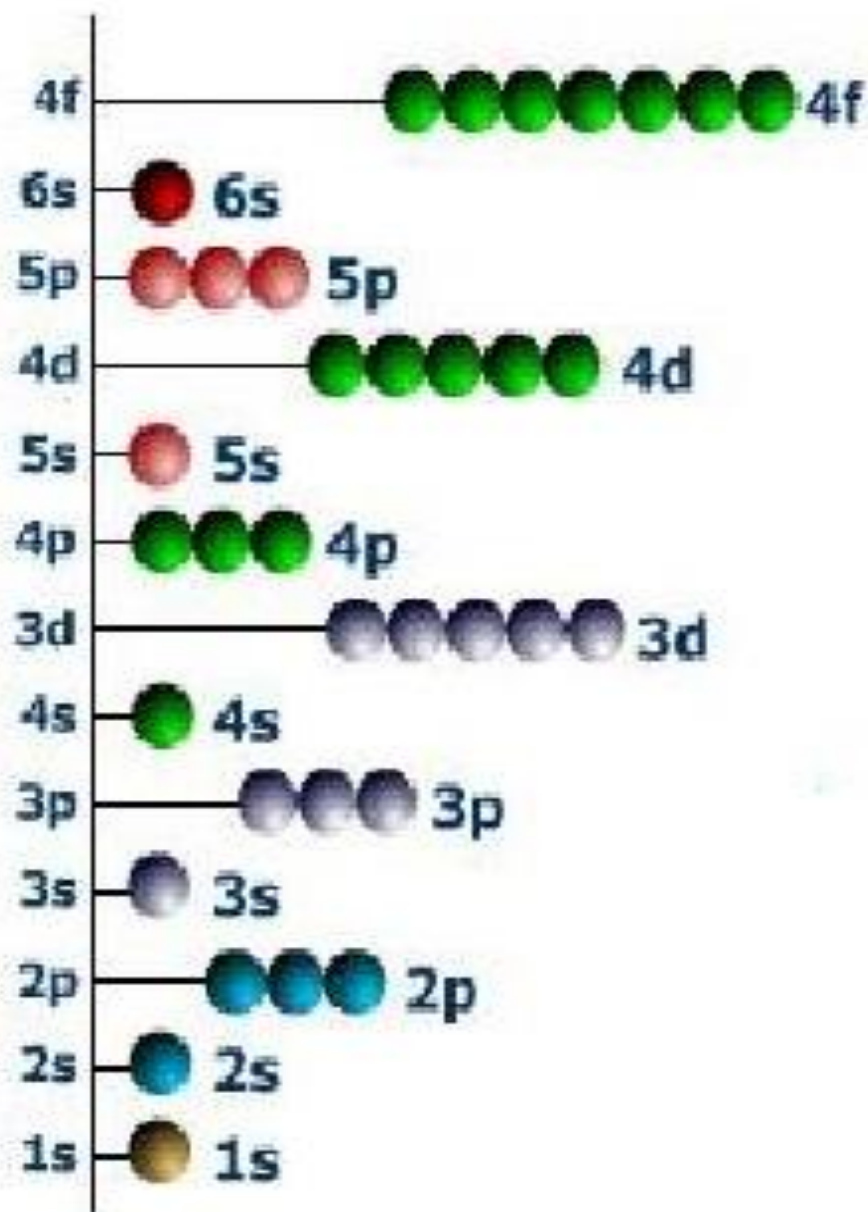
IBM

Foto del
átomo de H
con método
Ultra
sofisticado



Configuraciones electrónicas y la tabla periódica

- La Tabla Periódica puede utilizarse como guía para las configuraciones electrónicas
- El número del período coincide con el valor de n
- grupos 1 y 2 \rightarrow orbitales de tipo s
- grupos 13 al 18 \rightarrow orbitales de tipo p
- grupos 3 al 12 \rightarrow orbitales de tipo d
- Lantánidos y Actínidos \rightarrow orbitales f



Configuraciones electrónicas y la tabla periódica

