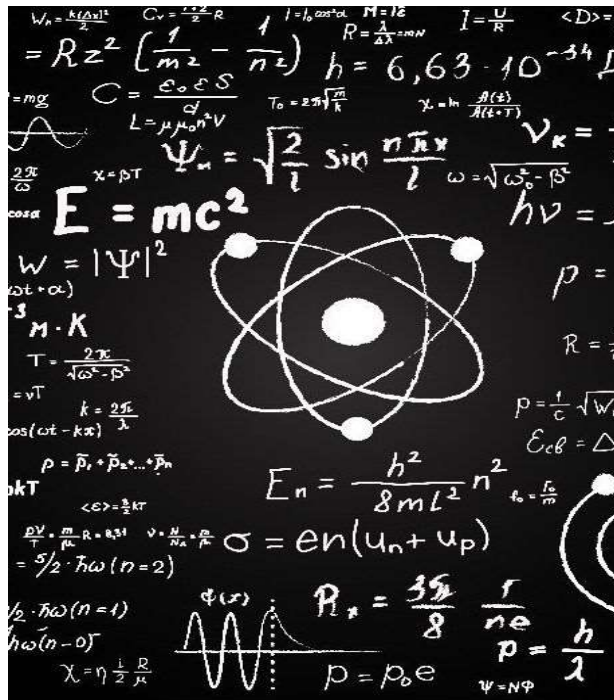


Tema 2. Estructura del átomo.

- ✓ Principales partículas subatómicas.
- ✓ Introducción a la Mecánica Cuántica.
- ✓ La ecuación de Schrödinger.
- ✓ Números cuánticos y orbitales atómicos.
- ✓ Descripción mecanocuántica del átomo de hidrógeno.
- ✓ Átomos multielectrónicos. Niveles de energía de los orbitales. Configuración electrónica.

Dedicación aproximada: 3 horas de Teoría y 1 horas de Problemas.

Objetivos del tema



Conocer las ideas básicas sobre cómo es el átomo

Estudiar la distribución de los electrones el átomo tal y como se entiende en la actualidad

Introducir los números cuánticos como forma de definir los orbitales en que se mueven los electrones

Modelos atómicos



ESCUELA UNIVERSITARIA POLITÉCNICA
DE SEVILLA

Átomo: Partícula más pequeña de un elemento que conserva sus propiedades químicas.

¿Cómo es un átomo?. Diferentes modelos sobre la constitución del átomo a lo largo de la historia

Modelo Rutherford, 1911

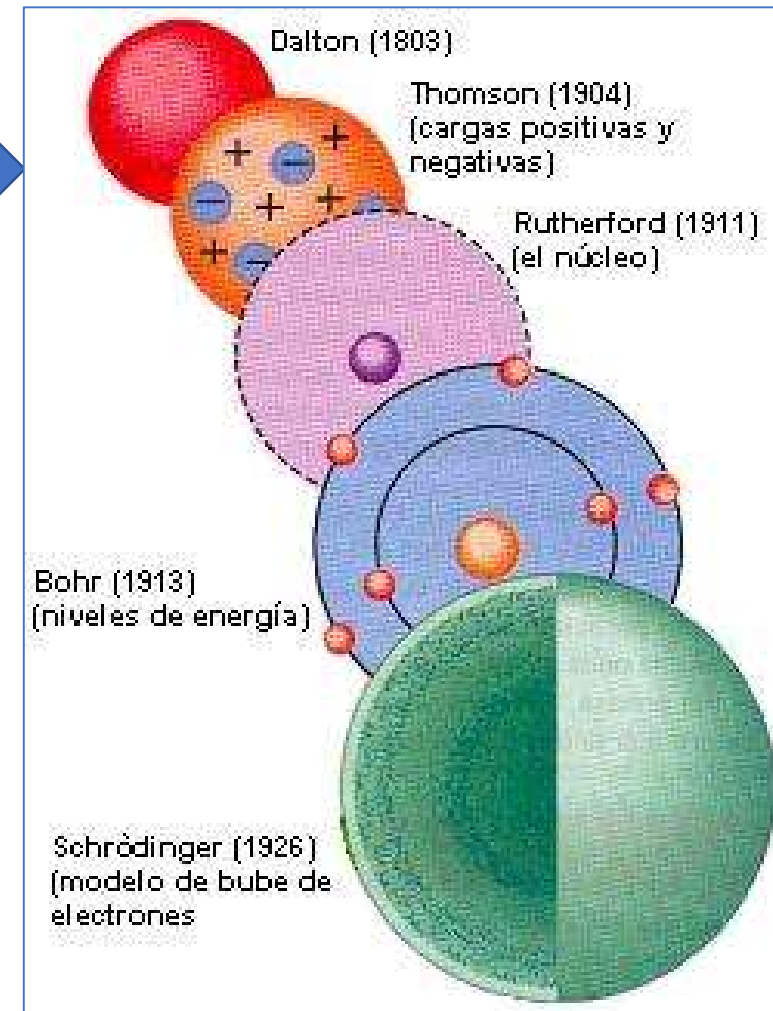
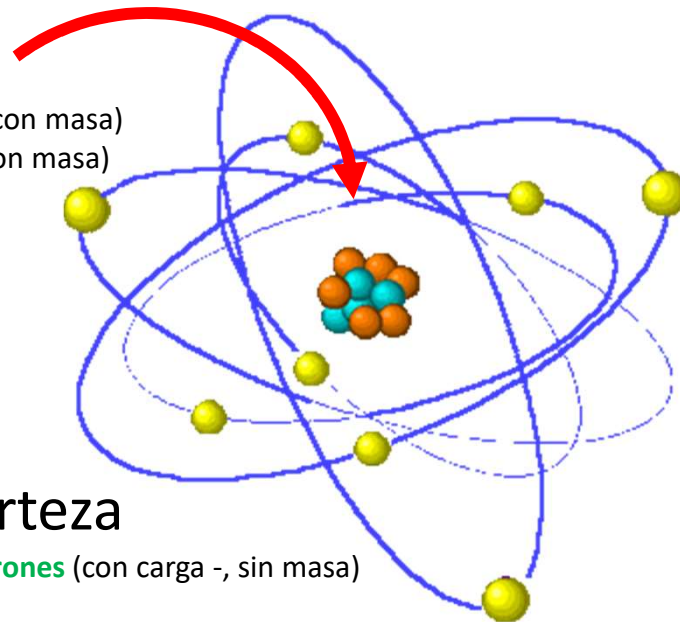
Núcleo

Protones (con carga +, con masa)

Neutrones (sin carga, con masa)

Corteza

Electrones (con carga -, sin masa)



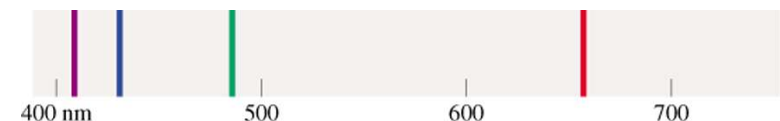
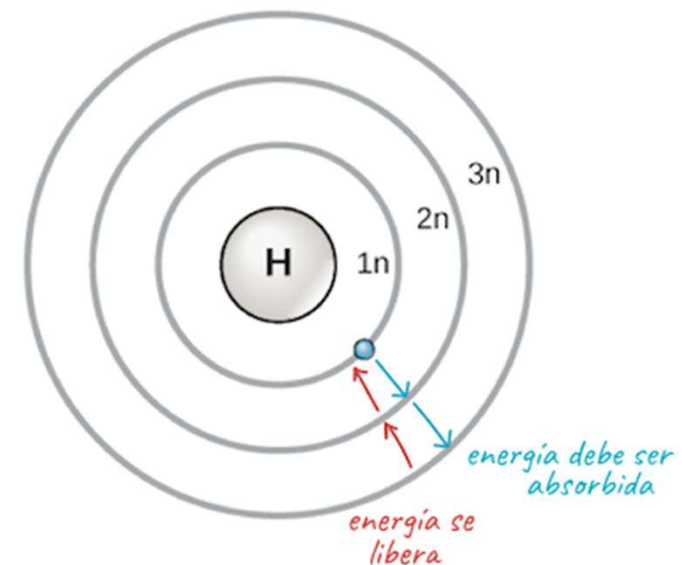
MODELO DE BOHR PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO (Distribución de electrones)

Bohr en 1913 combinó el modelo de Rutherford con la teoría cuántica de Planck ($E = h \cdot \gamma$) y propuso un nuevo modelo que sirvió para interpretar el espectro del átomo de hidrógeno.

Modelo Bohr

- El electrón se mueve en una **órbita circular** alrededor del núcleo.
- Sólo puede moverse en un número fijo de órbitas permitidas (estados estacionarios).
- Un electrón en una órbita tiene una **energía constante y característica**.
- Un electrón puede **saltar de una órbita a otra** intercambiando una cantidad de energía fija.

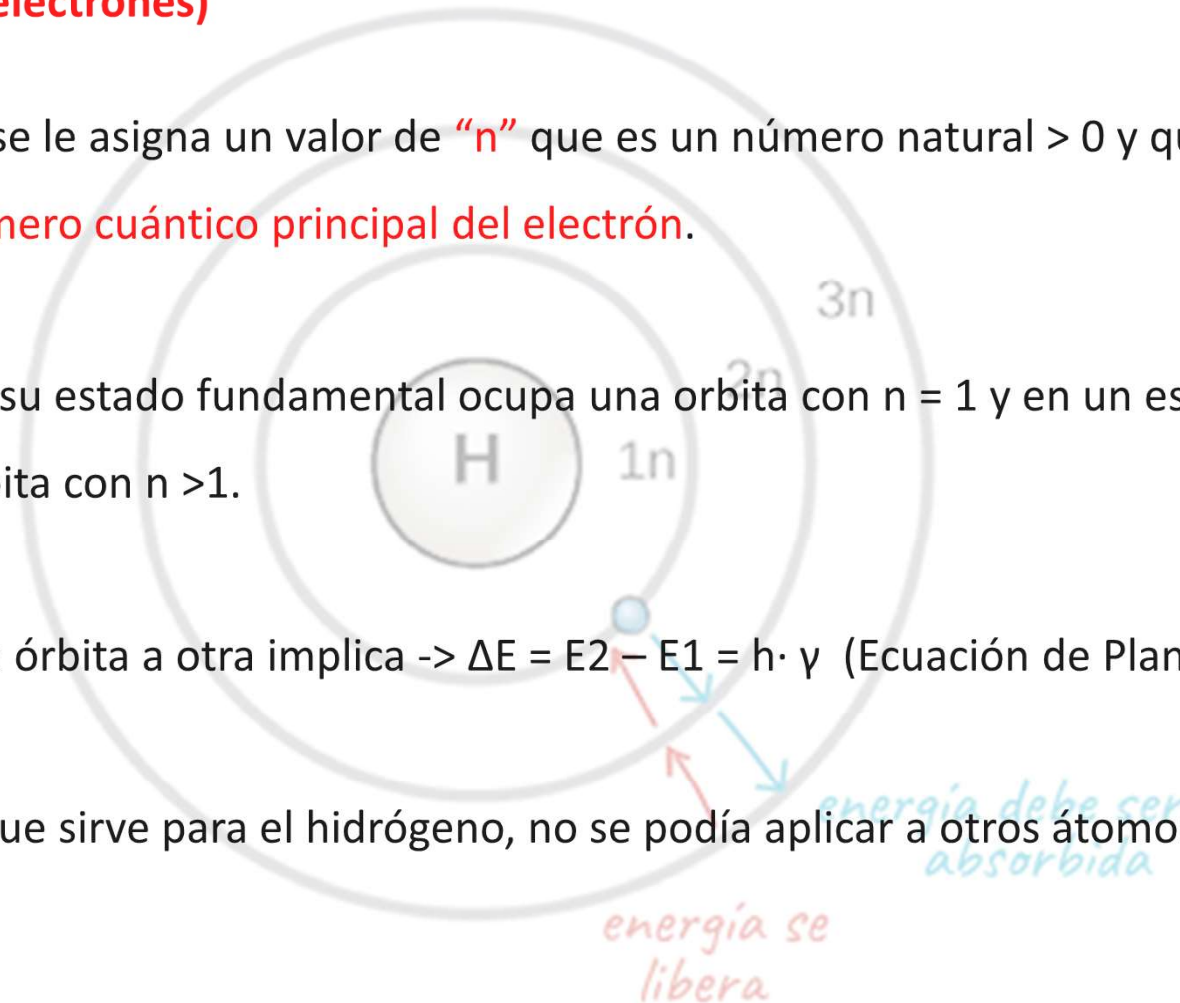
$$\Delta E = E_2 - E_1$$



Espectro de emisión de líneas de los átomos de hidrógeno

MODELO DE BOHR PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO (Distribución de electrones)

- A cada órbita se le asigna un valor de “n” que es un número natural > 0 y que se denomina **número cuántico principal del electrón**.
- El electrón en su estado fundamental ocupa una órbita con $n = 1$ y en un estado excitado ocupa una órbita con $n > 1$.
- El paso de una órbita a otra implica $\rightarrow \Delta E = E_2 - E_1 = h \cdot \gamma$ (Ecuación de Planck)
- Este modelo que sirve para el hidrógeno, no se podía aplicar a otros átomos.



1925, W. Heisenberg y E. Schrödinger

Desarrollan una teoría matemática que permite predecir y explicar los espectros de los átomos multielectrónicos: **mecánica cuántica**.

Principios importantes:

- ***Dualidad Onda-Partícula (de Broglie)*** : El electrón posee propiedades de onda y de partícula.
- ***Principio de incertidumbre de Heisenberg***: No podemos hablar de trayectorias definidas de los electrones sino de probabilidad de que un electrón se encuentre en un instante dado en una región del espacio: **orbital**.

✓ La ecuación de Schrödinger.

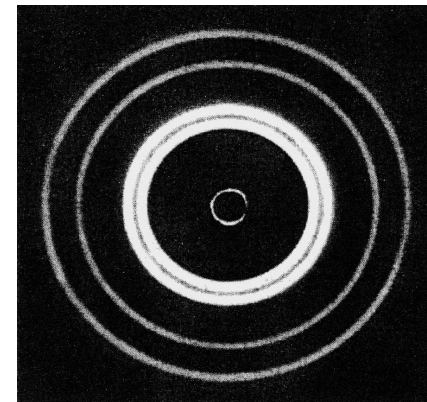
En 1926 Schrödinger formuló una **ecuación que describe el comportamiento y la energía de las partículas subatómicas**

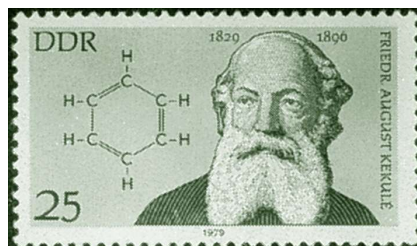
La ecuación de Schrödinger:

1. **Especifica los posibles estados de energía que puede ocupar el electrón del átomo de hidrógeno.**
2. **Identifica las respectivas funciones de onda (Ψ).**

La ecuación de Schrödinger funciona bien para el átomo de hidrógeno, **pero no se resuelve con exactitud para átomos que tengan más de un electrón!**

$$\Psi = \Psi(n, l, m_l, m_s)$$





Orbitales atómicos. Números cuánticos

Objetivos:

- Según el modelo de la mecánica cuántica, explicar cómo es el movimiento de los electrones en un átomo.
- Describir la información que dan los números cuánticos que se usan para definir un orbital.
- Establecer el uso de un cuarto parámetro (número cuántico) para determinar de definir el movimiento de un electrón.

En un átomo los electrones se pueden mover en numerosos orbitales. Cada uno se caracteriza por los valores de tres números cuánticos: n , l y m_l .

Número cuántico principal (n)

- Puede ser cualquier número natural mayor que cero (1,2,3...). Cada valor designa un **nivel o capa**. Todos los electrones que se mueven en orbitales con el mismo valor de n decimos que están en la misma capa.
- Es el principal factor que determina **la energía del electrón**. Cuanto mayor sea n mayor es la energía.
- Es una **medida del tamaño del orbital y de la distancia del electrón al núcleo**: cuanto mayor es n , mayor distancia y mayor es el tamaño del orbital.

Número cuántico del momento angular (l)

- Cada valor de l corresponde a un tipo de orbital con **forma diferente**.
- **Su valor depende del número cuántico n** , pudiendo variar desde 0 hasta $n-1$, por lo tanto:
 - $n = 1 \rightarrow l = 0$
 - $n = 2 \rightarrow l = 0, 1$
- Es una **medida del tamaño del orbital y de la distancia del electrón al núcleo**: cuanto mayor es n , mayor distancia y mayor es el tamaño del orbital.

Valor de l	Nombre
0	s
1	p
2	d
3	f

Número cuántico del momento magnético (m_l)

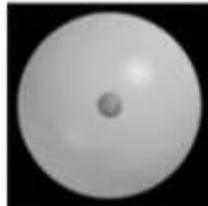
- Se relaciona con **la orientación espacial de los orbitales**.
- Los orbitales con el mismo **valor de subcapa (valor de l)** sólo difieren por su orientación en el espacio, **no por su energía**.
- Su valor varía **desde $-l$ hasta $+l$** , pasando por el valor 0.

Orbitales atómicos. Números cuánticos

En un átomo los electrones se pueden mover en numerosos orbitales. Cada uno se caracteriza por los valores de tres números cuánticos: n , l y m_l .

$n = 1$	$\rightarrow l = 0 \rightarrow m_l = 0$	(1 orientación)
$n = 2$	$\rightarrow l = 0 \rightarrow m_l = 0$ $\rightarrow l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1$	(1 orientación) (3 orientaciones)
$n = 3$	$\rightarrow l = 0 \rightarrow m_l = 0$ $\rightarrow l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1$ $\rightarrow l = 2 \rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2$	(1 orientación) (3 orientaciones) (5 orientaciones)

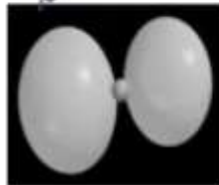
orbital "s"



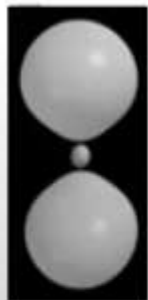
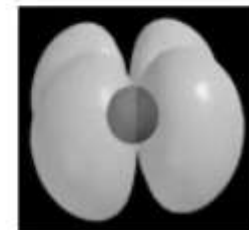
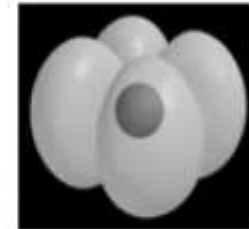
Formas de los orbitales atómicos.

Si $l = 0$ orbital tipo **s** $m_l = 0$
(1 orbital tipo **s esférico**, el centro en el núcleo).

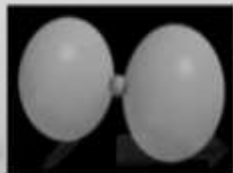
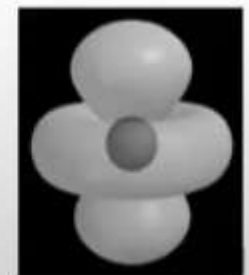
orbitales
"p"



Si $l = 1 \rightarrow$ orbital tipo **p**. $m_l = -1, 0, 1$
(3 orbitales tipo **p lobulares**, perpendiculares entre sí, p_x , p_y y p_z).



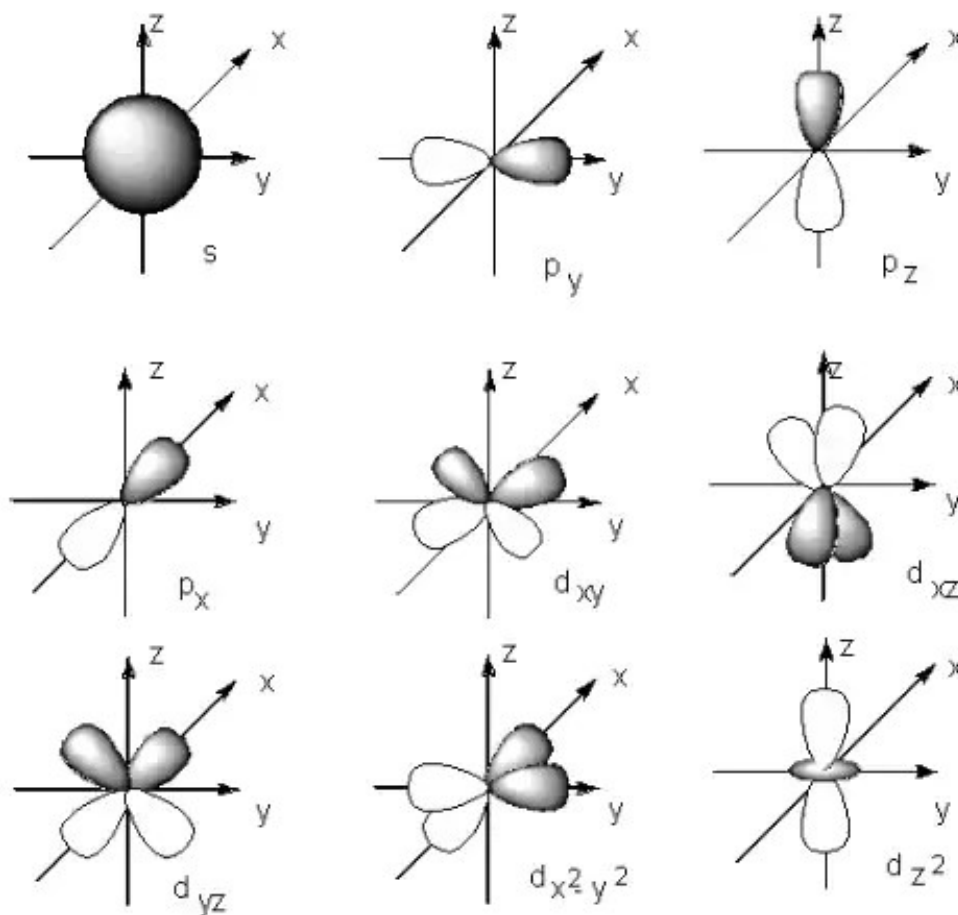
Si $l = 2 \rightarrow$ orbital **d**. $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$.
(5 orbitales tipo d, d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2})



Si $l = 3 \rightarrow$ orbital **f** $m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$
(7 orbitales tipo f).

Ejemplo
de
orbitales
"d"

The figure below shows the shapes of s, p and d orbitals.



Nombre de los orbitales atómicos

NÚMEROS CUANTICOS			ORBITALES	
n	l	m_l	Tipo	Nombres
1	0	0	s	1s
2	0	0	s	2s
	1	-1, 0, +1	p	2p _y , 2p _z , 2p _x
3	0	0	s	3s
	1	-1, 0, +1	p	3p _y , 3p _z , 3p _x
	2	-2, -1, 0, +1, +2	d	3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{z²} , 3d _{xz} , 3d _{x²-y²}

El **número máximo de orbitales** permitidos en cada nivel “n” se puede obtener por la fórmula **n^2** .

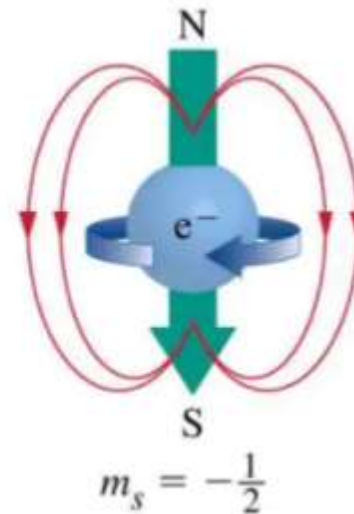
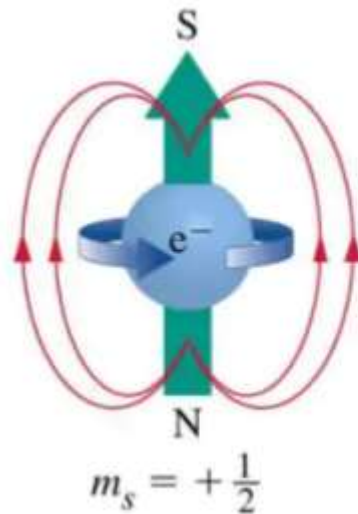
Número cuántico de espín (m_s)

- **Antecedentes:**

- El electrón se comporta como si tuviera un giro sobre su propio eje (espín)
- Cuando se coloca un átomo con un electrón en un campo magnético, el espín tiene dos orientaciones posibles: alineado u opuesto a las líneas de campo.
- En cada orbital se pueden mover dos electrones si estos adquieren orientaciones de espín opuestas.

- **Conclusiones:**

- Es necesario asociar **un cuarto número cuántico** al electrón para poder describir en que situación se encuentra el electrón en el orbital.
- Este número cuántico sólo puede tener dos valores posibles: **+1/2 y -1/2**.



Número de electrones por nivel

Subnivel (l)	Orbitales	Número de orbitales	Número máximo de electrones
s (l = 0)	$\frac{\uparrow\downarrow}{0}$	1	2
p (l = 1)	$\frac{\uparrow\downarrow}{-1} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{0} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{+1}$	3	6
d (l = 2)	$\frac{\uparrow\downarrow}{-2} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{-1} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{0} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{+1} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{+2}$	5	10
f (l = 3)	$\frac{\uparrow\downarrow}{-3} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{-2} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{-1} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{0} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{+1} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{+2} \quad \frac{\uparrow\downarrow}{+3}$	7	14

Número máximo de electrones permitidos en cada nivel tipo de orbital.

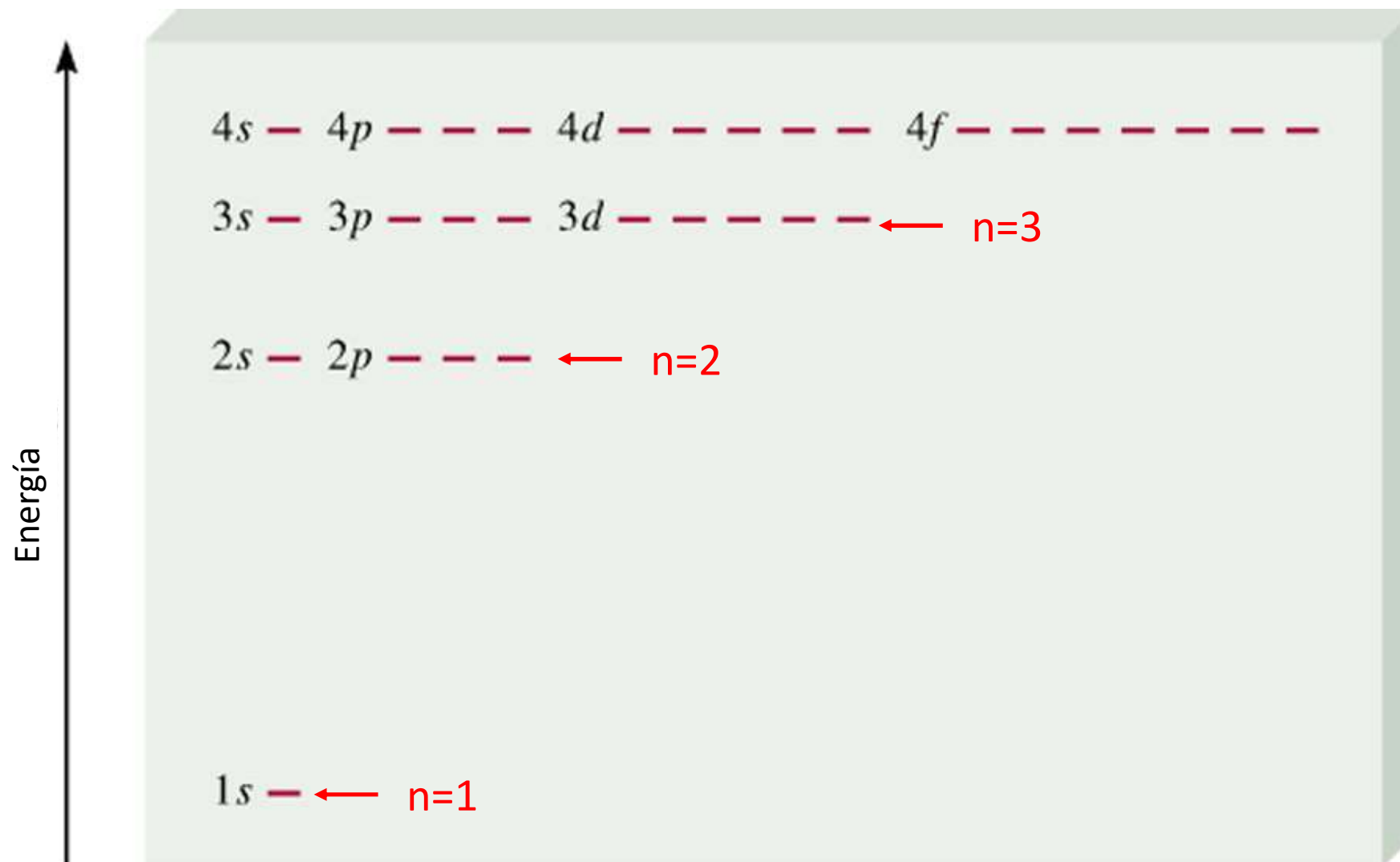
El **número máximo de electrones** permitidos en cada nivel "n" se puede obtener por la fórmula **$2n^2$** .

Nivel (n)	Orbitales	Número máximo de e ⁻ en el subnivel	Capacidad máxima de e ⁻ para el nivel
1	1s	2	2
2	2s 2p 2p 2p	2 6	8
3	3s 3p 3p 3p 3d 3d 3d 3d 3d	2 6 10	18
4	4s 4p 4p 4p 4d 4d 4d 4d 4d 4f 4f 4f 4f 4f 4f 4f	2 6 10 14	32



Niveles de energía de los orbitales de un átomo con un único electrón

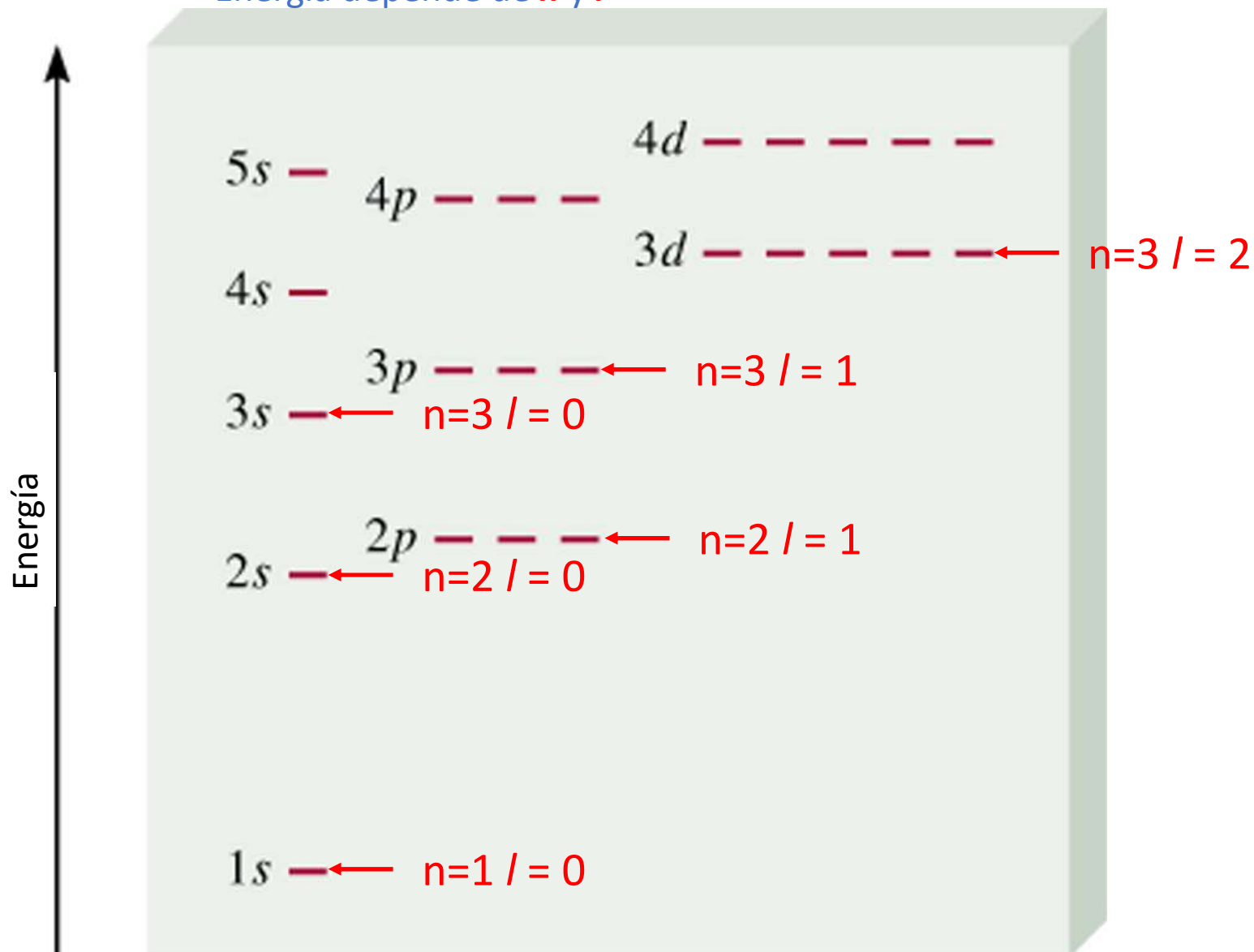
Energía depende sólo del número cuántico principal n



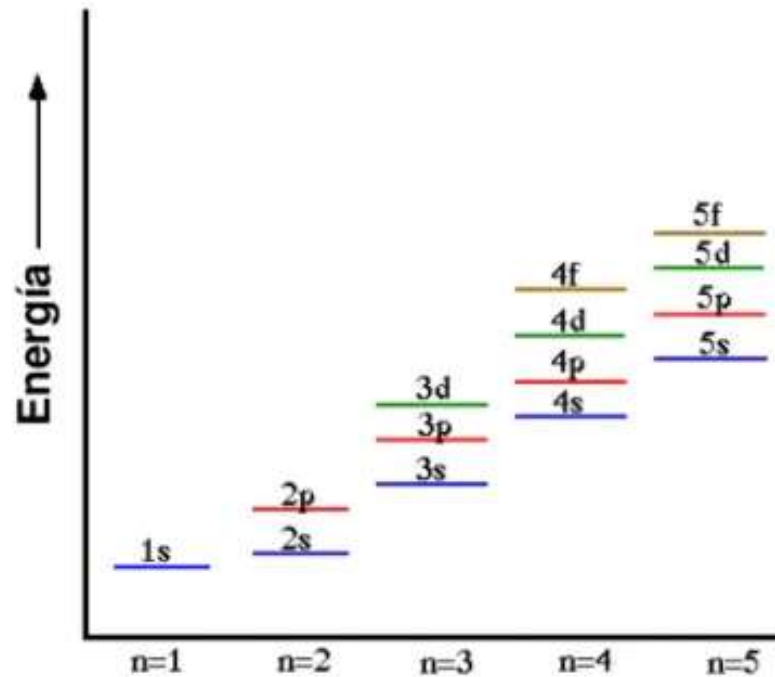


Niveles de energía de los orbitales de un átomo polielectrónico

Energía depende de n y l



Energía de los orbitales atómicos



Segunda derivada con respecto a x

Función de onda de Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

Posición

Energía

Energía potencial

ψ : función de onda

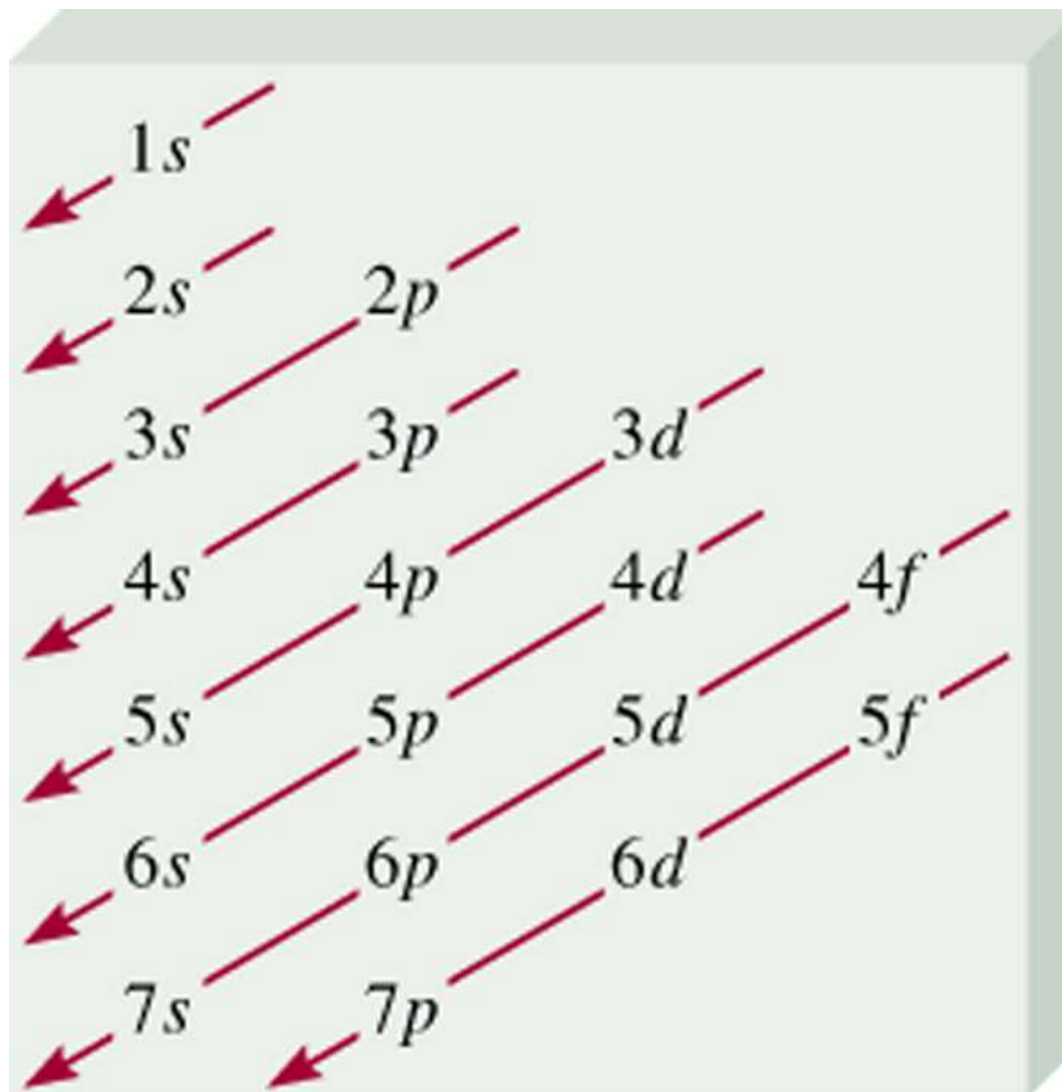
m : masa del electrón

h : constante de Planck

E : energía total del electrón (dependen de sus coordenadas x, y, z)

V : energía potencial del electrón (dependen de sus coordenadas x, y, z)

Orden de llenado de los subniveles atómicos en un átomo polielectrónico



$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s$$

Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = \Psi(n, l, m_l, m_s)$$

Nivel – electrones con el mismo valor de n

Subnivel – electrones con los mismos valores de n **y** l

Orbital – electrones con los mismos valores de n , l **y** m_l



¿Cuántos electrones puede contener un orbital?

Si n , l y m_l son fijos, entonces $m_s = \frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$

$$\Psi = (n, l, m_l, \frac{1}{2}) \quad \text{ó} \quad \Psi = (n, l, m_l, -\frac{1}{2})$$

Un orbital puede contener 2 electrones

Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = \Psi(n, l, m_l, m_s)$$

La existencia (y energía) de un electrón en un átomo se describe por su función de onda **única**, Ψ .

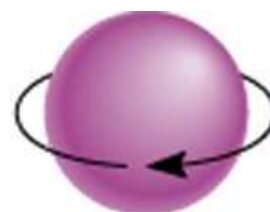
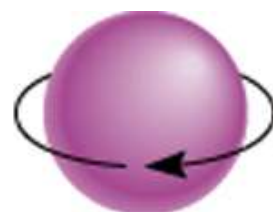
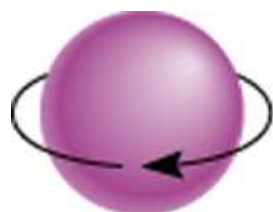
Principio de exclusión de Pauli - no es posible que dos electrones de un átomo tenga los mismos cuatro números cuánticos.



Cada lugar está identificado de forma única (E, R12, S8)
Cada lugar puede ocuparse por sólo un individuo a la vez



ESCUELA UNIVERSITARIA POLITÉCNICA
DE SEVILLA

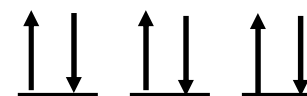


Paramagnético

Diamagnético

electrones desapareados

electrones apareados



2p

2p

Ejemplo: Estructura atómica y orbitales atómicos en un átomo de C

ATOMO DE CARBONO

Z = Número Atómico = N° de Protones = N° de electrones

6

$1s^2 2s^2 2p^2$ Configuración electrónica

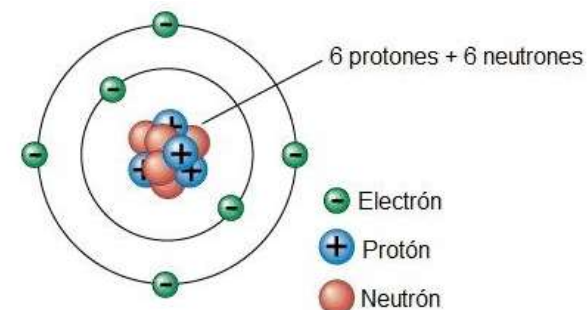
Punto de Ebullición °C 4.830

Punto de Fusión °C 3.727

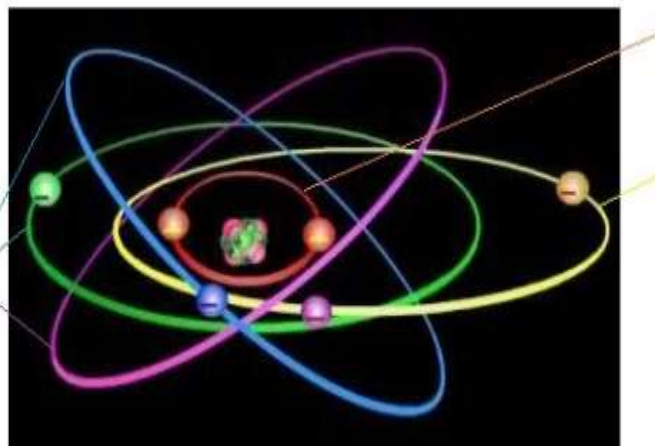
Densidad 2.26

C Símbolo Químico

12.011 Masa Atómica = suma de las masas de todos los protones y neutrones que lo componen.



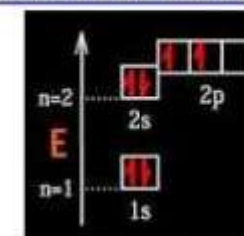
Nivel 2, subnivel p
podrían situarse hasta 6
electrones



Nivel 1, subnivel s
Podrían situarse 2
electrones

Nivel 2, subnivel s
Podrían situarse 2
electrones

NIVELES DE ENERGÍA



Configuración
electrónica