

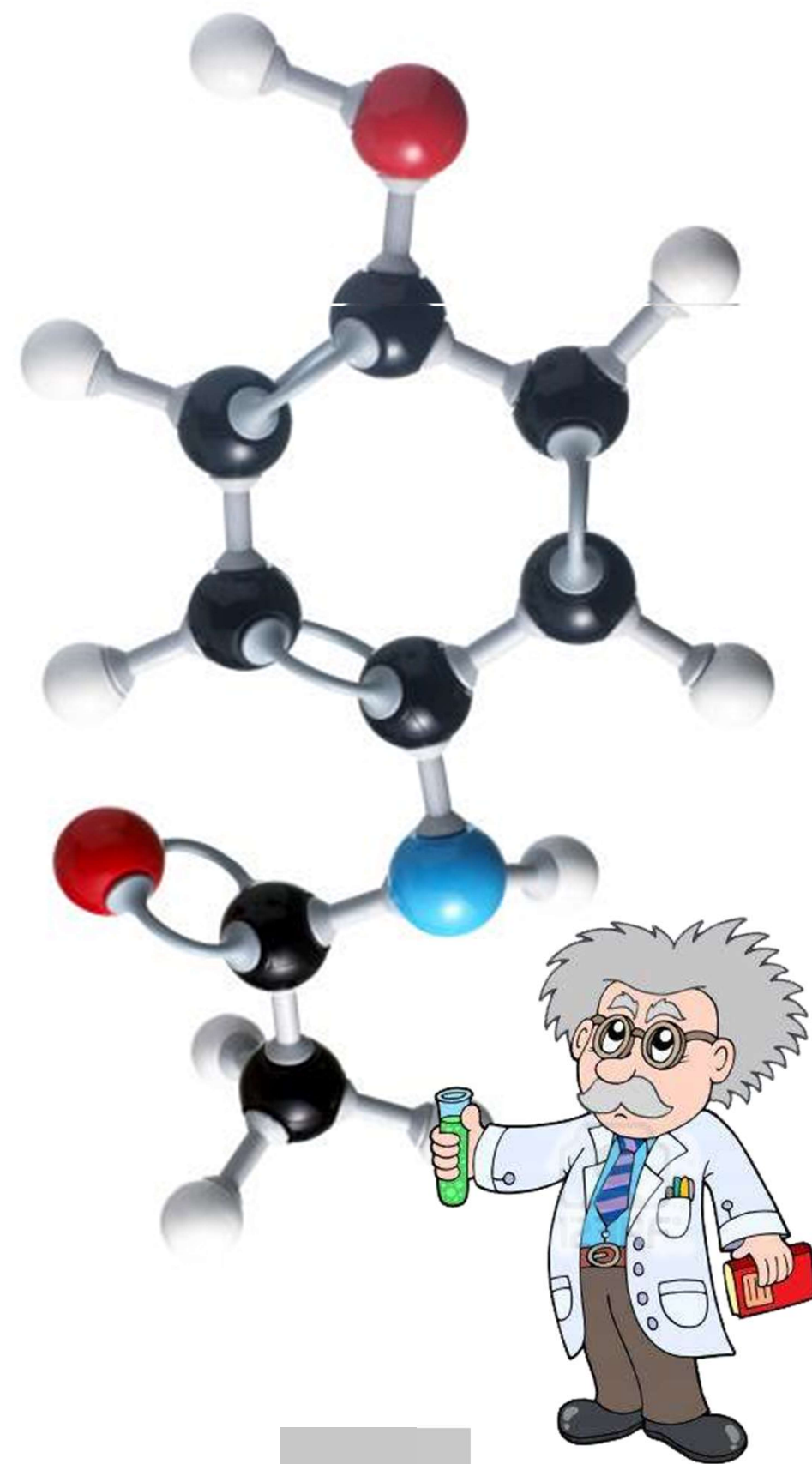
UADE
UNA GRAN UNIVERSIDAD

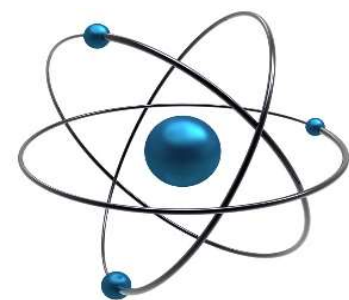


Tema N° 3
Química General
Modelos Atómicos

Ing. Yanina Fernández

Departamento de Biotecnología y Tecnología Alimentaria
Facultad de Ingeniería y Ciencias Exactas
Universidad Argentina de la Empresa





Tema Nº 2 – Estructura de la materia
Química General

Modelos Atómicos
Evolución de la teoría atómica

LOS CUANTOS

1900

Teoría Cuántica de Planck

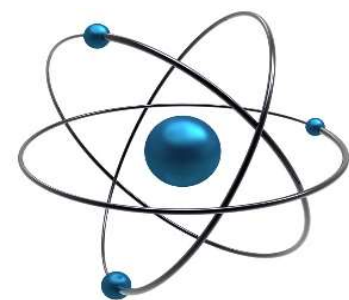
Estudia la radiación que emiten los sólidos a distintas temperaturas.

Descubre que los átomos y moléculas emiten y absorben energía sólo **en cantidades discretas (CUANTOS)**

PAQUETES O
CÚMULOS

Mínima cantidad de energía que se puede emitir o absorber en forma de radiación electromagnética

Planck no pudo determinar por qué sucede así.



Tema Nº 2 – Estructura de la materia
Química General

Modelos Atómicos
Evolución de la teoría atómica

LA PROPUESTA DE BOHR

1913

Niveles de energía

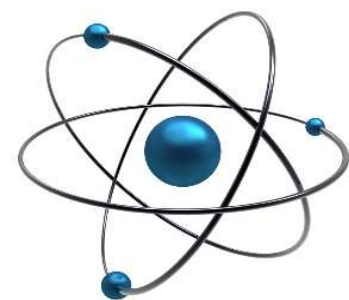
Estudia el espectro de emisión del H_2



Y postula que el electrón sólo puede ocupar **CIERTAS ÓRBITAS
DE ENERGÍA ESPECÍFICAS**



LOS CUANTOS



Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos

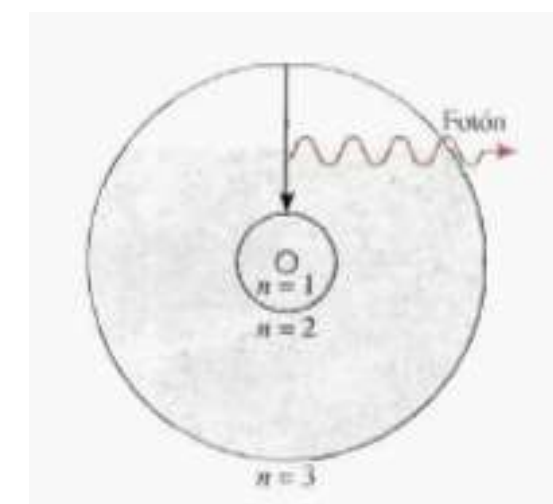
Evolución de la teoría atómica

LA PROPUESTA DE BOHR

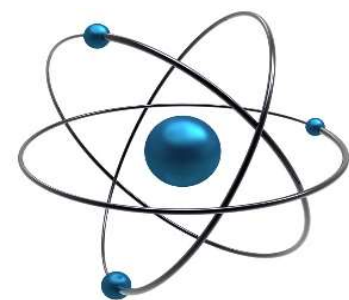
Un átomo de H energizado emite una radiación.

Bohr la atribuye a la caída de un electrón de una órbita con energía superior a una de inferior energía. El átomo emite UN CUANTO de energía o FOTÓN

Energía del electrón	
Menos energía	Más cerca del núcleo
Más energía	Más alejado del núcleo



**Emisión H según
teoría Bohr**



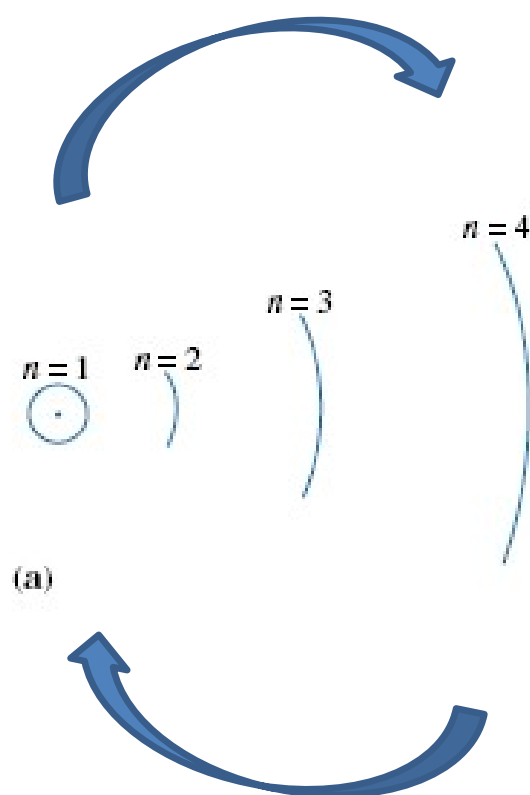
Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

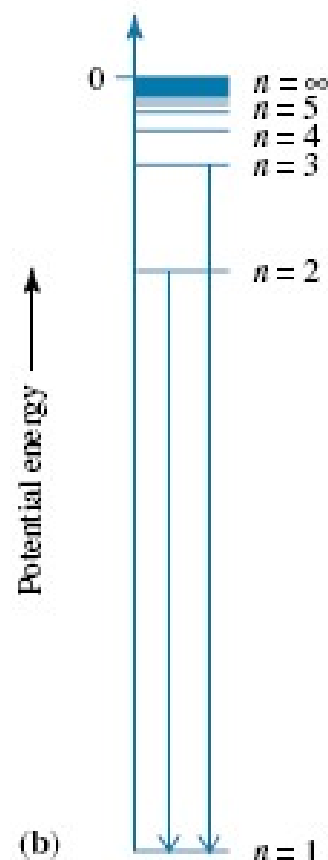
Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica

Hay que darle energía



Emite energía (fotón)

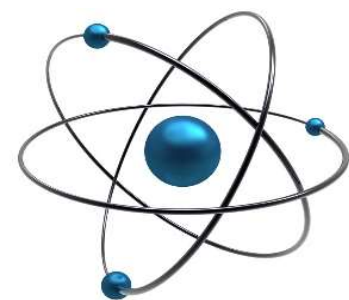


Estados cuantizados de un electrón

Fundamental	Excitado
Estado de menor energía posible	Tiene más energía que el estado fundamental

La cantidad de energía es **DISCRETA** y depende de la distancia entre las órbitas o niveles.

Cada órbita tiene una **longitud de onda** y una **frecuencia ESPECÍFICA**



Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica



LA LEY DE BROGLIE

1924

Niveles de energía

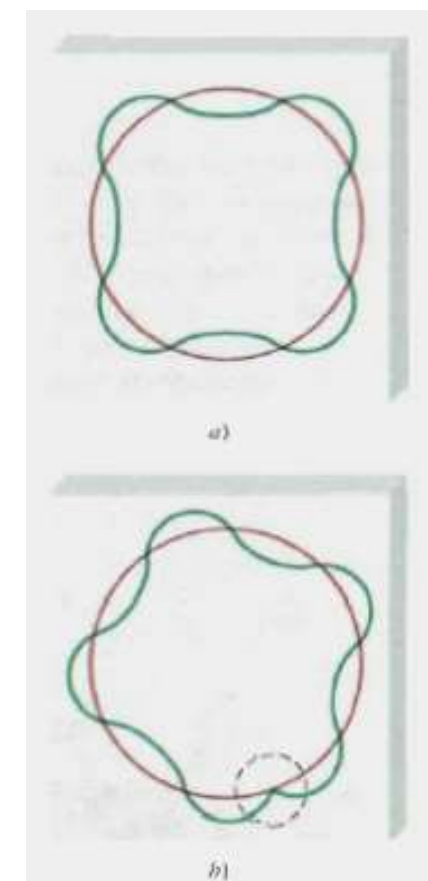
Compara al electrón con una onda estacionaria

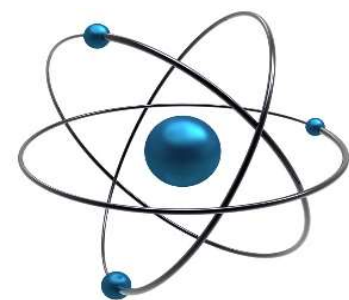


Si el electrón del átomo se comporta como una onda fija, su longitud de onda debe ajustarse EXACTAMENTE a la circunferencia de la órbita



LOS ELECTRONES SON PARTÍCULAS Y SON ONDAS Y SE COMPORTAN COMO AMBAS





Tema Nº 2 – Estructura de la materia
Química General

Modelos Atómicos
Evolución de la teoría atómica

MODELO ATÓMICO PROBABILÍSTICO DE SCHRODINGER

1926

Mecánica cuántica:

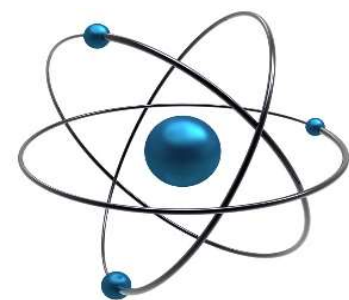
↙
No se puede saber en qué parte puntual del átomo está el electrón. Sí se puede definir la la **PROBABILIDAD** de encontrar un electrón en cierta región del átomo

↘
DENSIDAD ELECTRÓNICA

Se mantiene el concepto de niveles de energía de Bohr y estos niveles de energía se dividen en **SUBNIVELES**

↓
ORBITALES

↓
Zona alrededor del núcleo donde es más probable encontrar el electrón



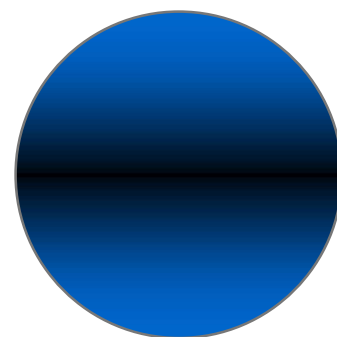
Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

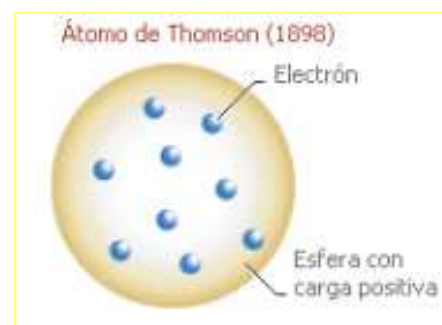
Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica - Resumen

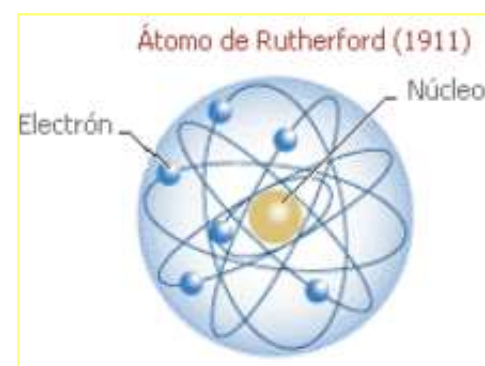
El profesor y químico JOHN DALTON, estableció que los elementos están formados por átomos y éstos son iguales para cada elemento



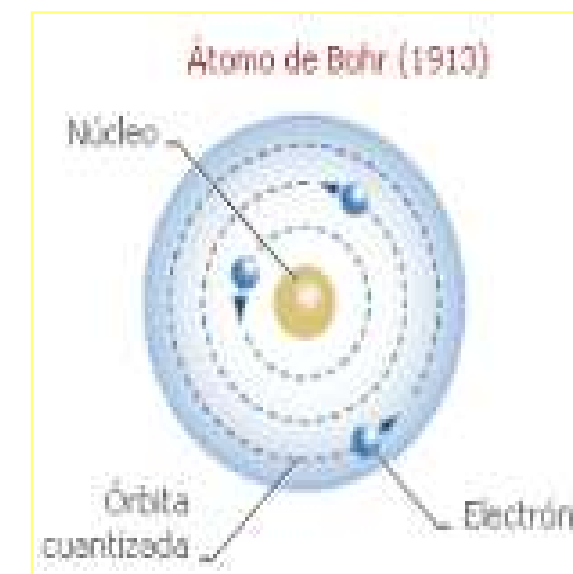
El físico británico JOSEPH THOMSON observó que los átomos contenían cargas positivas y negativas



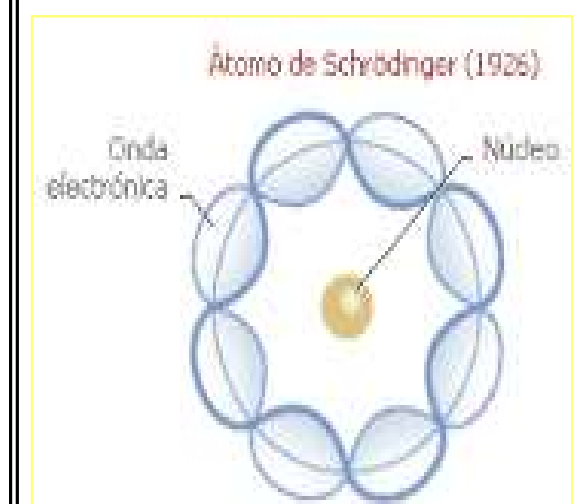
ERNEST RUTHERFORD representó al átomo como un sistema solar en miniatura, en el cual los electrones (negativos) giraban alrededor del núcleo (positivo)

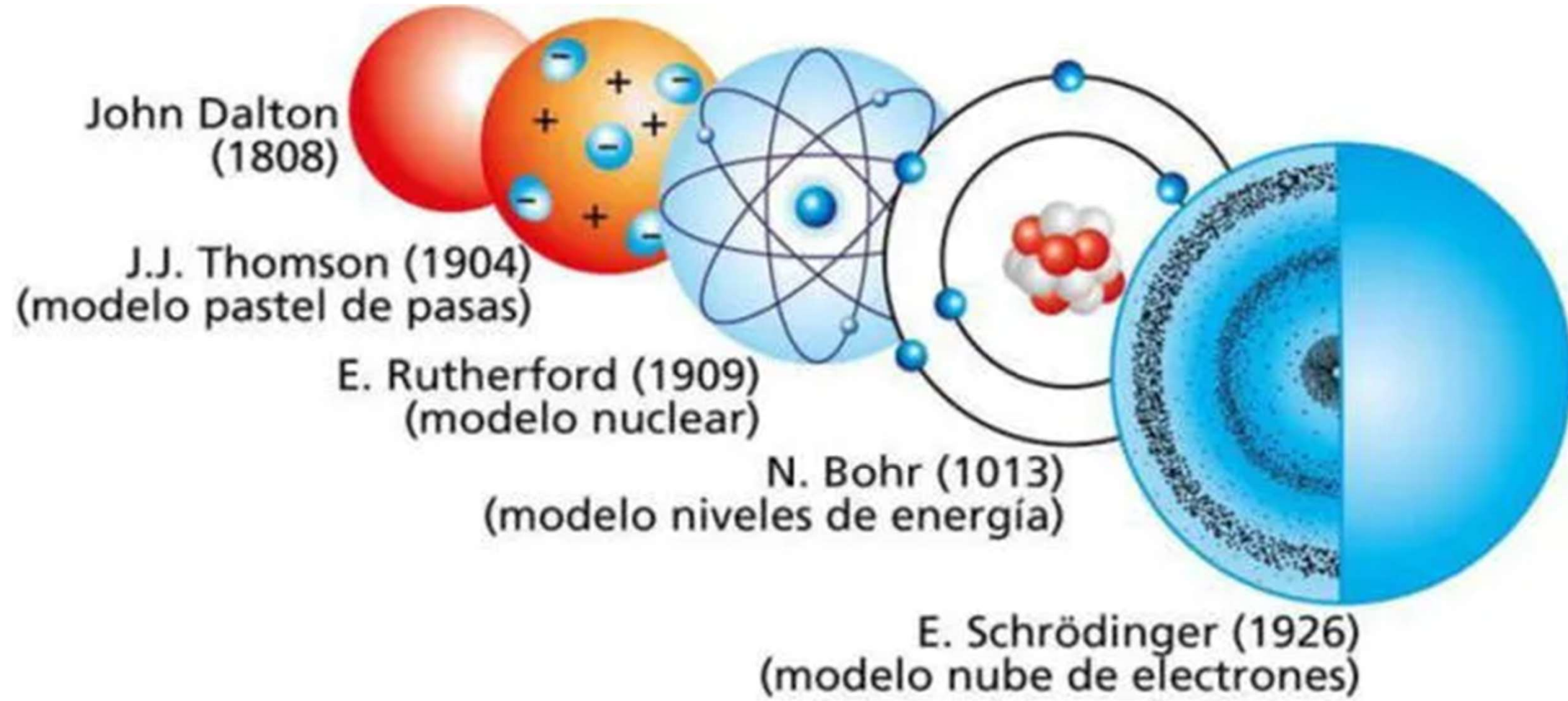


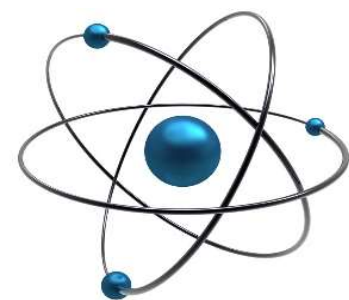
El físico danés NIELS BOHR (1913) postuló que los electrones están dispuestos en capas definidas, o niveles cuánticos, a una distancia considerable del núcleo, con movimientos definidos por determinadas órbitas



El modelo probabilístico de SCHRÖDINGER (1926) abandonó la idea de órbitas precisas y las sustituyó por regiones en el espacio (orbitales), donde es más probable que se encuentren los electrones





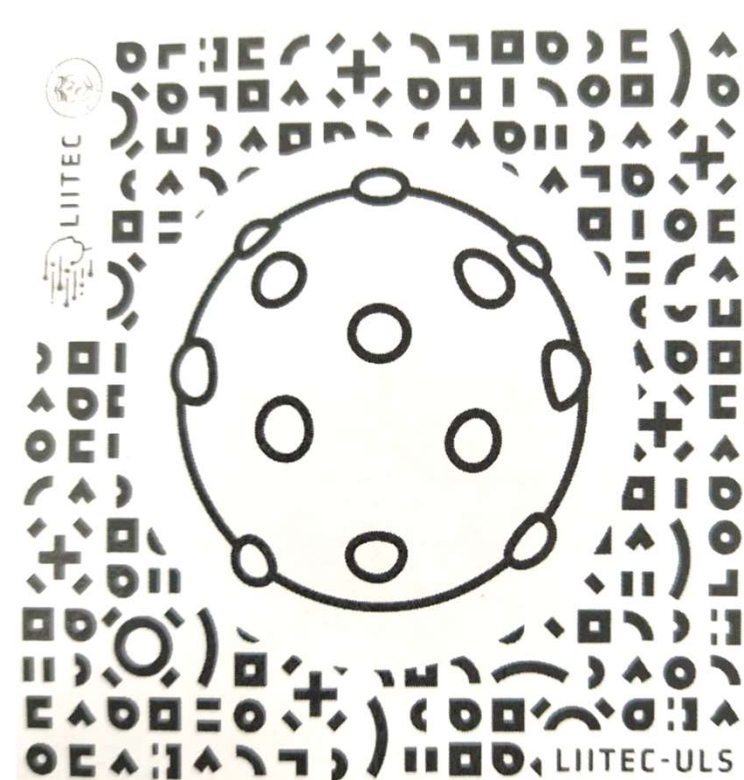


Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

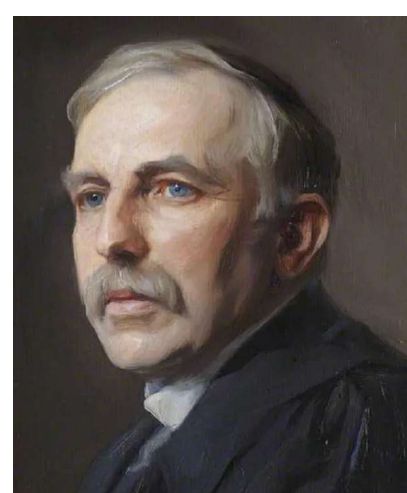
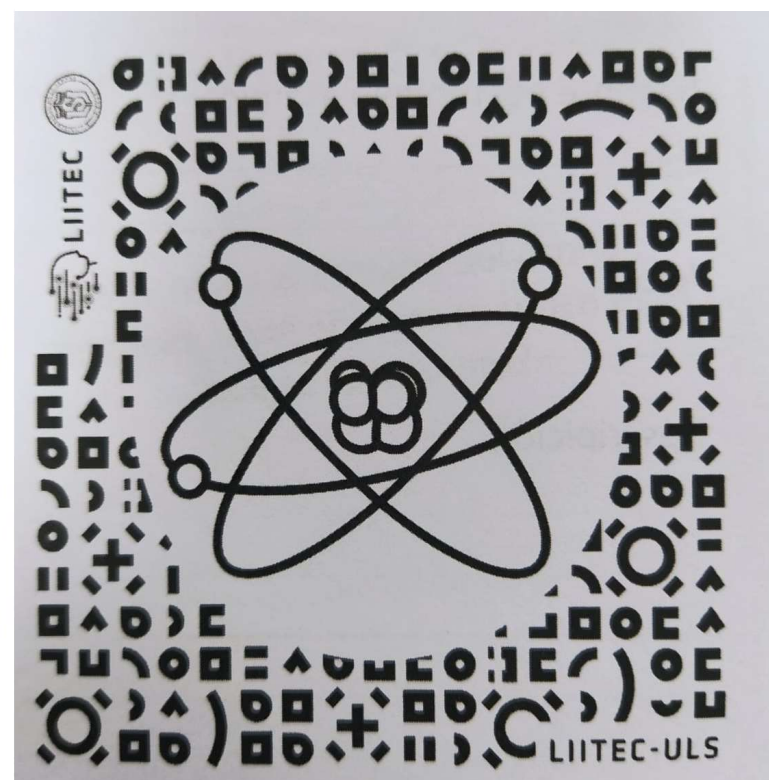
Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica - Resumen



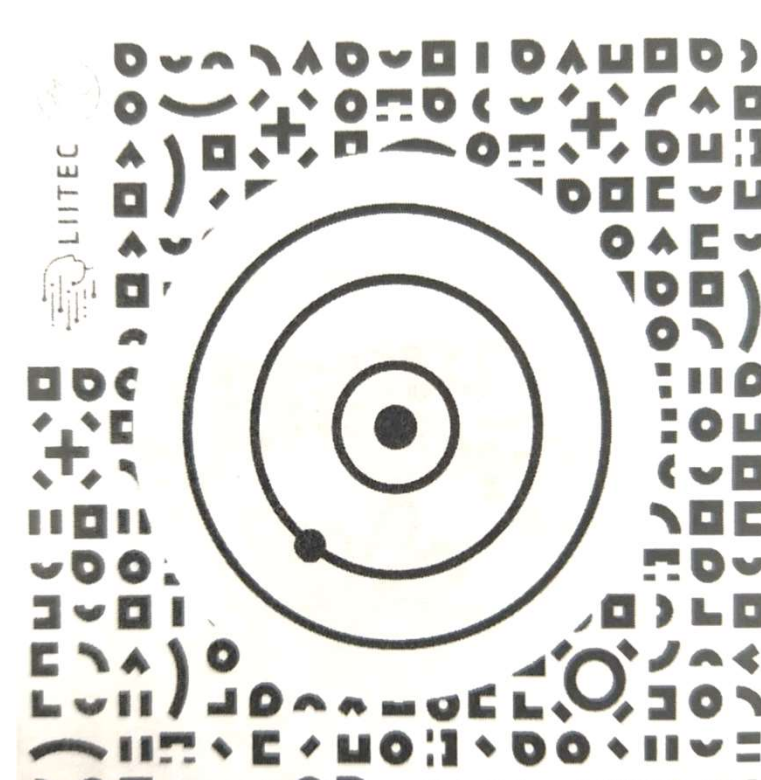
Thomson

1897



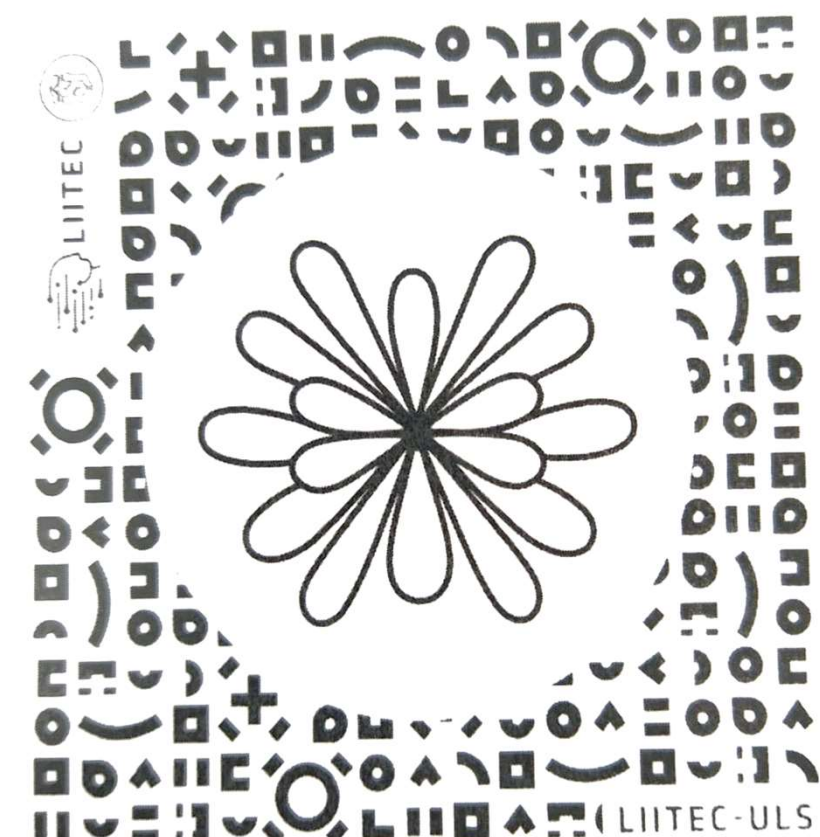
Rutherford

1911



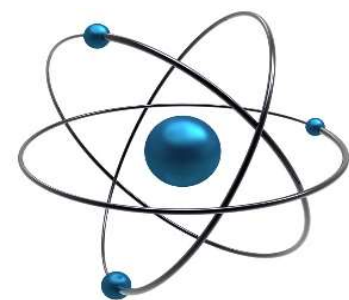
Bohr

1913



Schrödinger

1925



Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

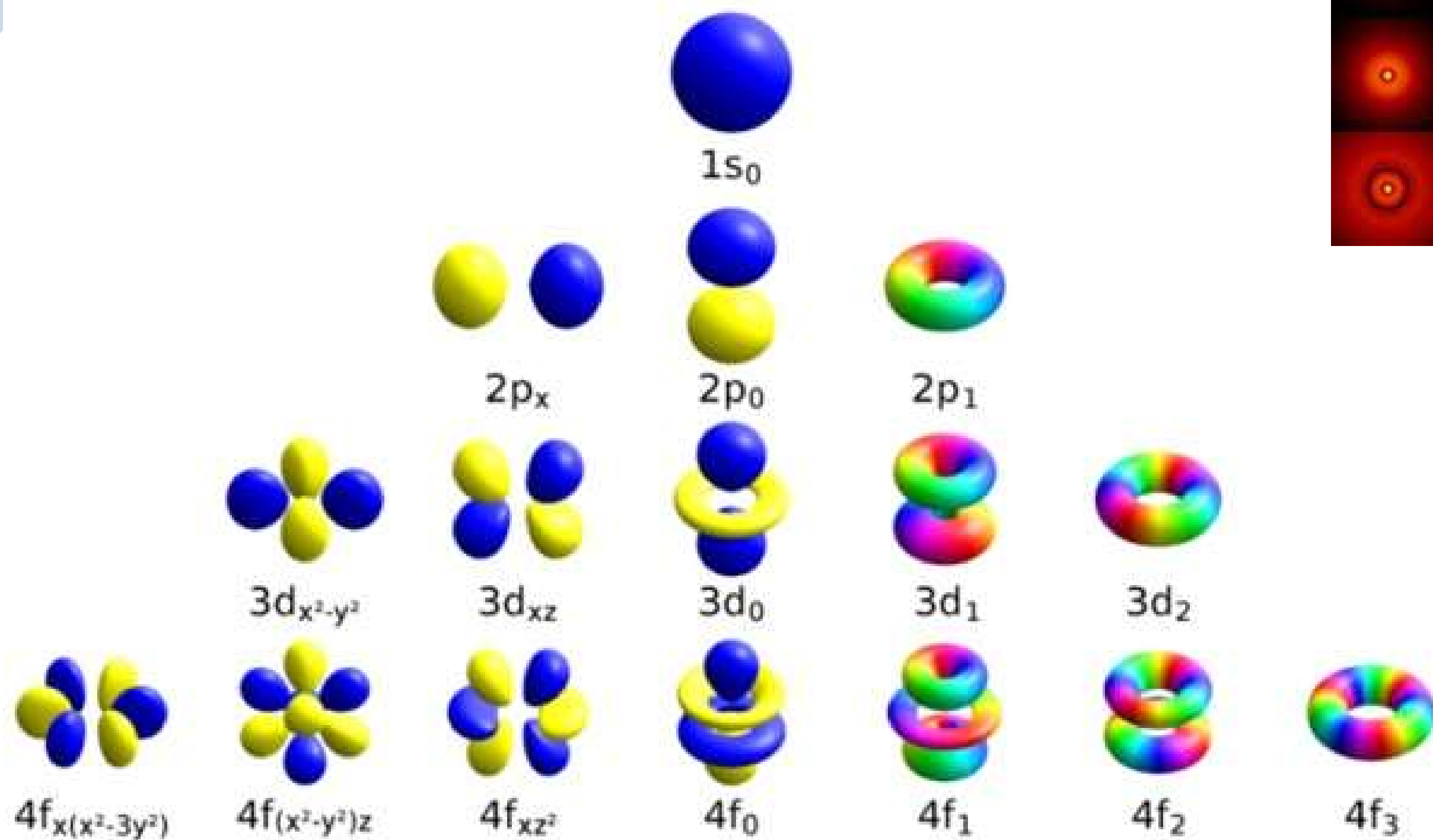
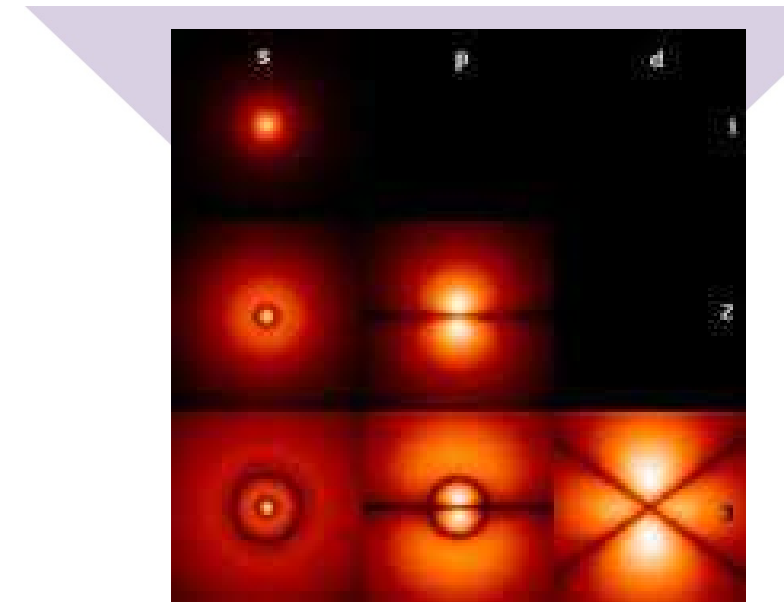
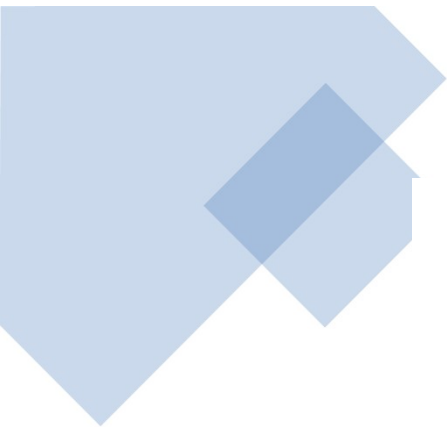
Modelos Atómicos

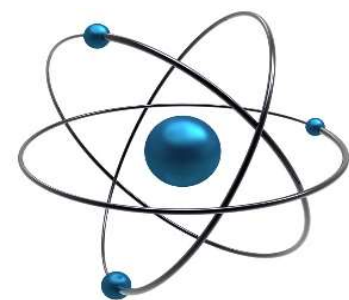
Evolución de la teoría atómica

Los números cuánticos

Para identificar cada electrón se recurre a un conjunto de números que indican nivel, subnivel, orbital y electrón; éstos se conocen como **números cuánticos**.

- **Número cuántico principal (n)**, que determina la energía asociada con el electrón y expresa de alguna manera la distancia media del electrón al núcleo.
- **Número cuántico angular (l)**, llamado también azimutal o de impulso, que determina el número y la forma de los subniveles.
- **Número cuántico magnético (m_l)**, que expresa la orientación que toma cada uno de los subniveles por acción de un campo magnético.
- **Número cuántico de espín (m_s)**, que indica el sentido de rotación del electrón respecto de su propio eje.





Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica

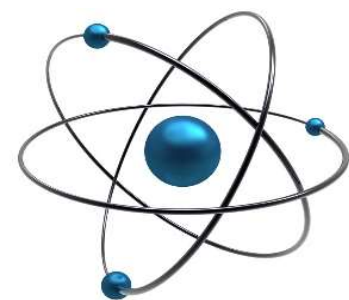
Número cuántico principal (n)

- Toma valores enteros positivos: 1, 2, 3,.....
- A mayor “n” más lejos se encuentra del núcleo la región de mayor densidad electrónico
- **A mayor “n” el electrón tiene mayor energía y se encuentra menos “atado” al núcleo**

Número cuántico angular (l)

- Depende de “n” y toma valores enteros positivos de 0 a (n – 1). Así para n = 1 sólo hay un valor posible de l: 0. Para n = 2 hay dos valores posibles para l: 0 y 1, etc.
- El valor de l es representado por una letra
- **Define la forma del orbital**

<i>l</i>	0	1	2	3	4
nombre del orbital	s	p	d	f	g



Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica

Número cuántico magnético (m_l)

- Depende de l y toma valores entre $-l$ y $+l$, incluyendo el 0

Para el subnivel $l = 1$ existen tres valores posibles de m , que son 1, 0 y +1; ello significa que el subnivel p posee tres orbitales.

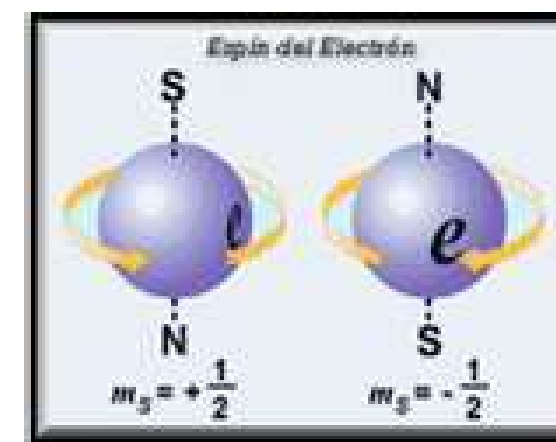
Para el subnivel $l = 2$ existen cinco valores posibles de m , que son -2, -1, 0, +1 y +2; ello significa que el subnivel d posee cinco orbitales.

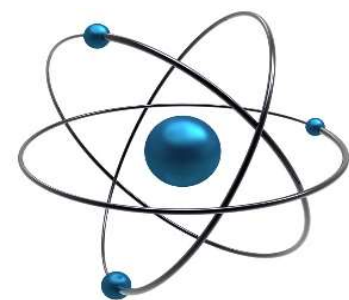
Para el subnivel $l = 3$ existen siete valores posibles de m , que son -3, -2, -1, 0, +1, +2 y +3; ello significa que el subnivel f posee siete orbitales.

- Describe la orientación en el espacio del orbital

Número cuántico de espín (m_s)

solamente son posibles dos sentidos de giro respecto de su eje, por lo que se describen como $-\frac{1}{2}$ y $+\frac{1}{2}$





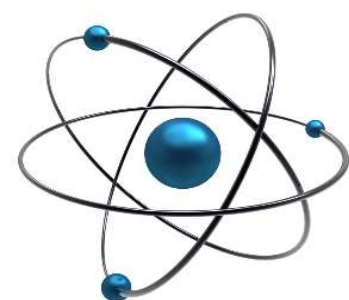
Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica

nivel n	subnivel l	orbital m_l	notación del subnivel	número de orbitales por subnivel
1	0	0	1s	1
2	0	0	2s	1
	1	-1, 0, +1	2p	3
3	0	0	3s	1
	1	-1, 0, +1	3p	3
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5
4	0	0	4s	1
	1	-1, 0, +1	4p	3
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7

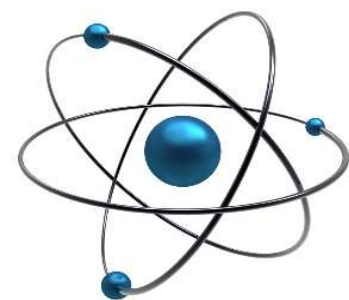


Modelos Atómicos

Evolución de la teoría atómica

TABLE 5-4 *Permissible Values of the Quantum Numbers Through $n = 4$*

n	ℓ	m_ℓ	m_s	Electron Capacity of Subshell = $4\ell + 2$	Electron Capacity of Shell = $2n^2$
1	0 (1s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	2
2	0 (2s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	8
	1 (2p)	-1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ for each value of m_ℓ	6	
3	0 (3s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	18
	1 (3p)	-1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ for each value of m_ℓ	6	
	2 (3d)	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm\frac{1}{2}$ for each value of m_ℓ	10	
4	0 (4s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	32
	1 (4p)	-1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ for each value of m_ℓ	6	
	2 (4d)	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm\frac{1}{2}$ for each value of m_ℓ	10	
	3 (4f)	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$\pm\frac{1}{2}$ for each value of m_ℓ	14	



Tema Nº 2 – Estructura de la materia

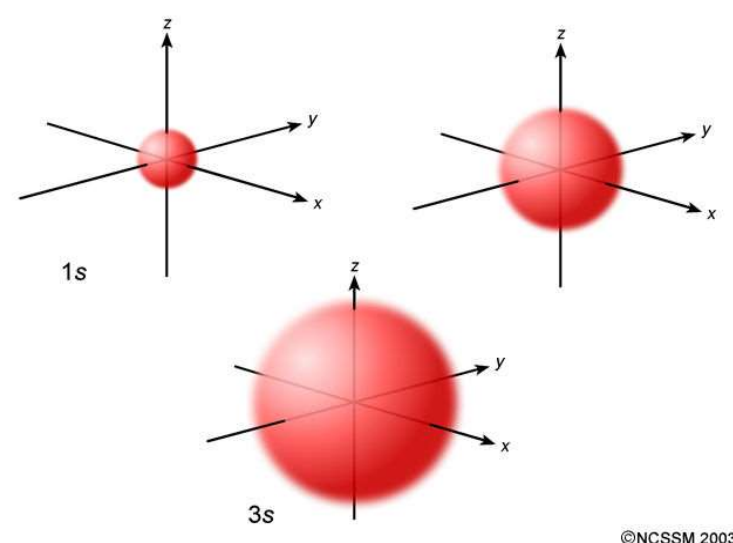
Química General

Modelos Atómicos

Forma de los orbitales

ORBITALES s

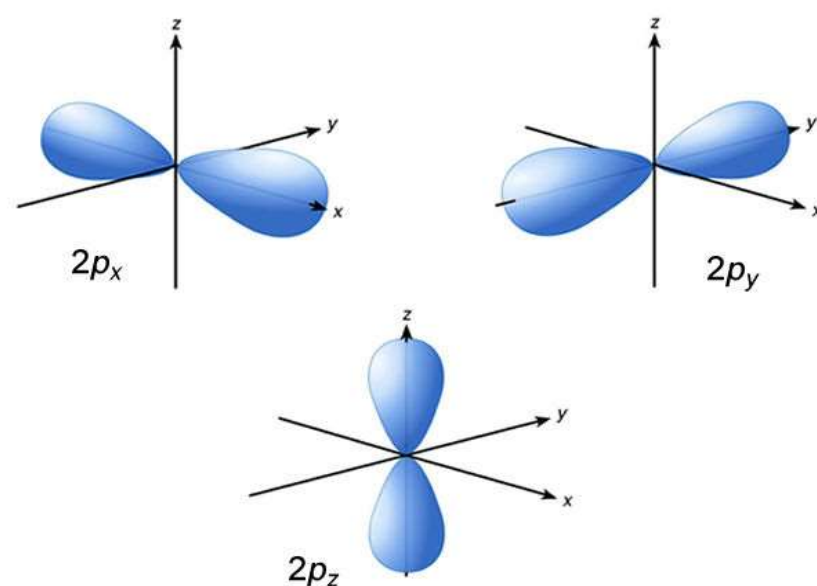
la distribución de probabilidades tiene simetría esférica con centro en el núcleo. A mayor valor de n corresponde una esfera de mayor radio, lo que significa mayor distancia entre los electrones y el núcleo. ($l=0$; $m_l=0$)



©NCSSM 2003

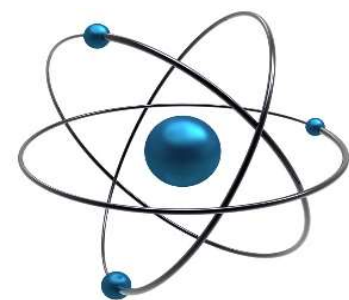
ORBITALES p

la distribución de probabilidades tiene tres configuraciones posibles, cada una de ellas lo hace en dirección de uno de los ejes coordenados (en el espacio), con origen en el núcleo y presenta un máximo en sentido negativo y otro en sentido positivo. **Un electrón p se mueve más alejado del núcleo que uno s del mismo nivel de energía.**



©NCSSM 2003

$$2p_x (l=1; m_l=-1) \quad 2p_y (l=1; m_l=0) \quad 2p_z (l=1; m_l=1)$$

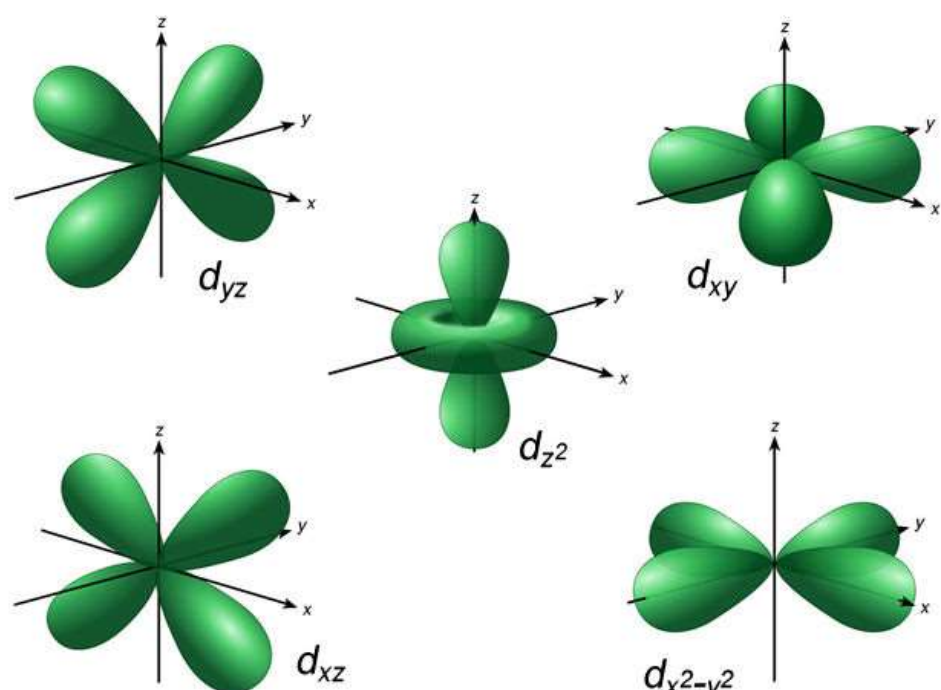


Tema Nº 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos

Forma de los orbitales



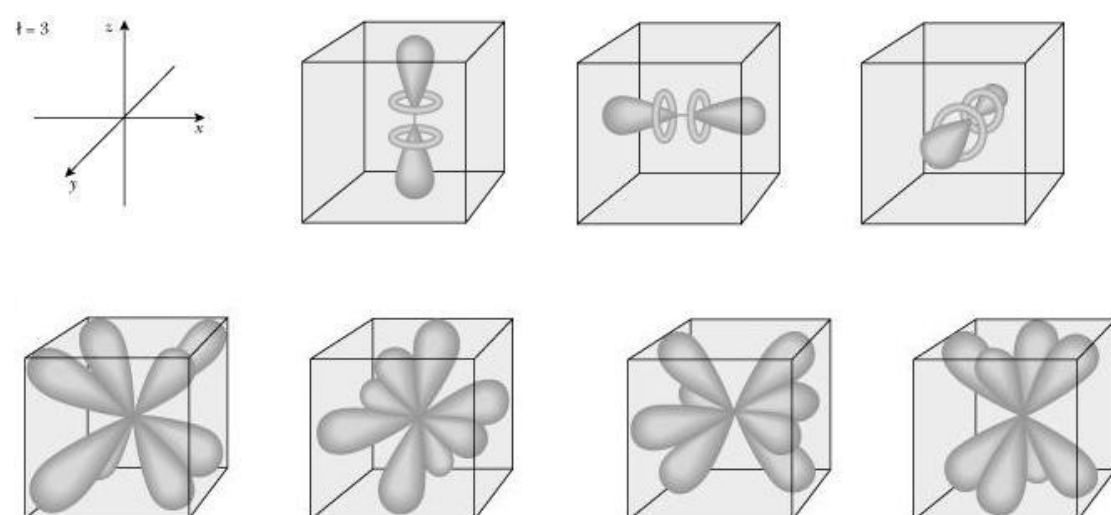
©NCSSM 2003

ORBITALES d

están orientados en cinco direcciones, con simetría respecto del núcleo y su representación es un poco más compleja.

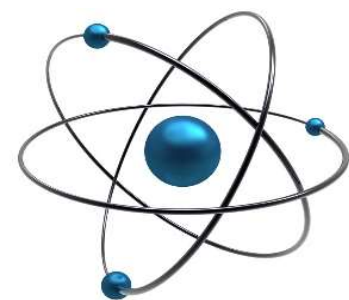
$$l=2;$$

$m_l = -2$ para xy ; -1 para xz ; 0 para yz ; 1 para x^2y^2 ; 2 para z^2



ORBITALES f

están orientados en siete direcciones y por su elevada complejidad no son generalmente tratados.

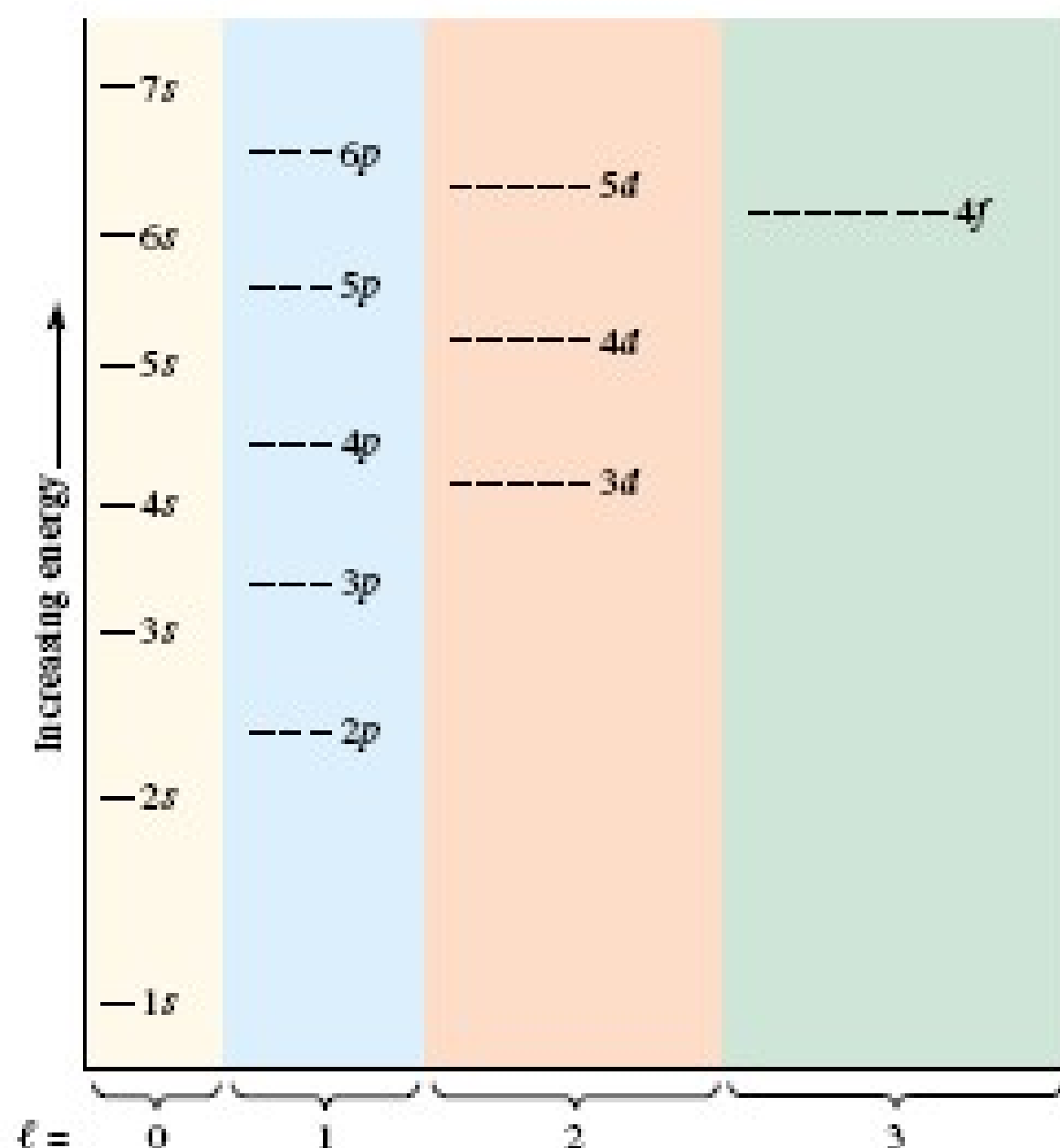


Tema Nº 2 – Estructura de la materia

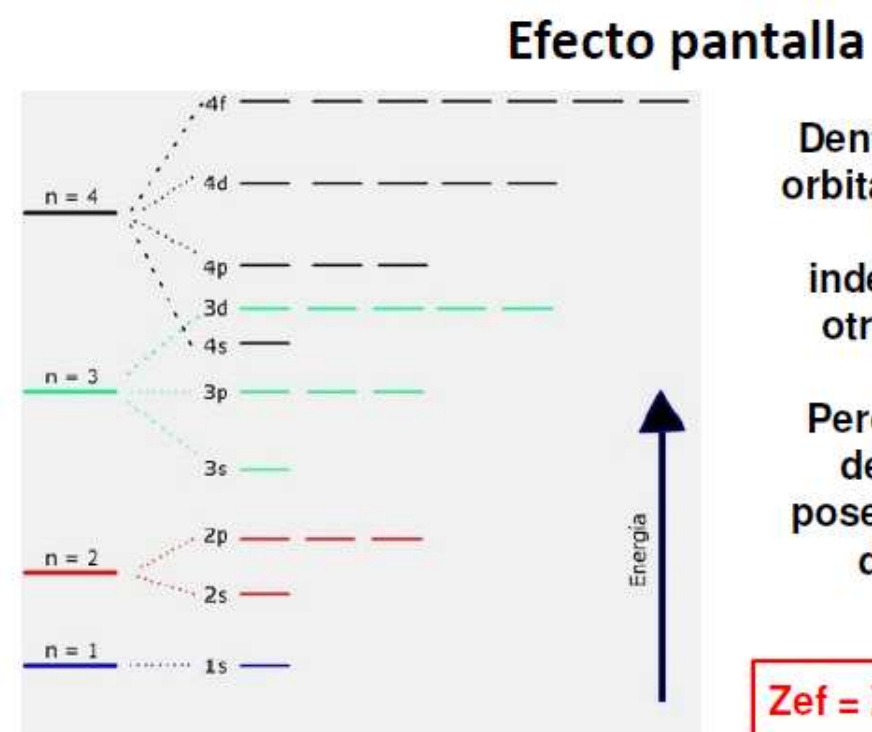
Química General

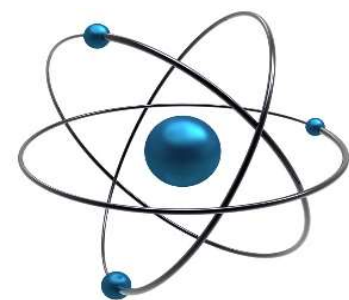
Modelos Atómicos

Configuración electrónica



Orden de llenado de orbitales (**Principio de Aufbau**). Las energías relativas son diferentes para cada elemento.





Tema Nº 2 – Estructura de la materia

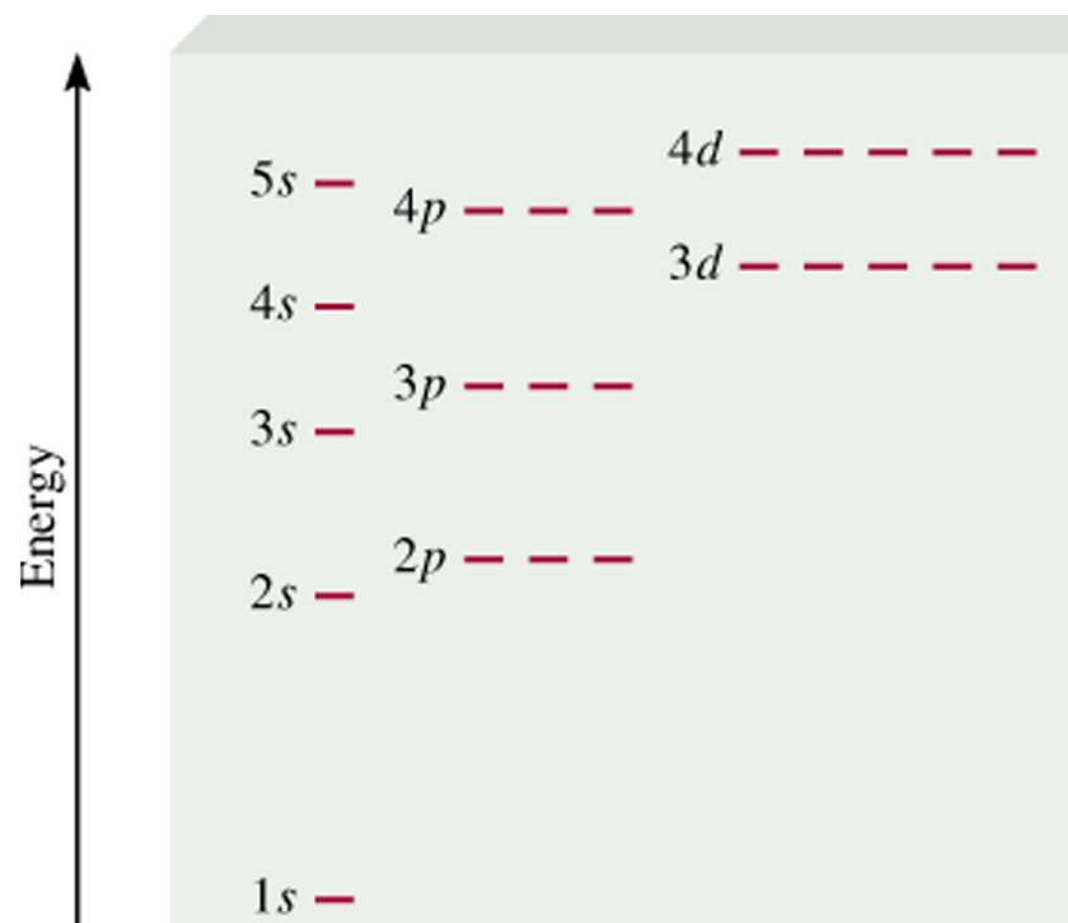
Química General

Modelos Atómicos

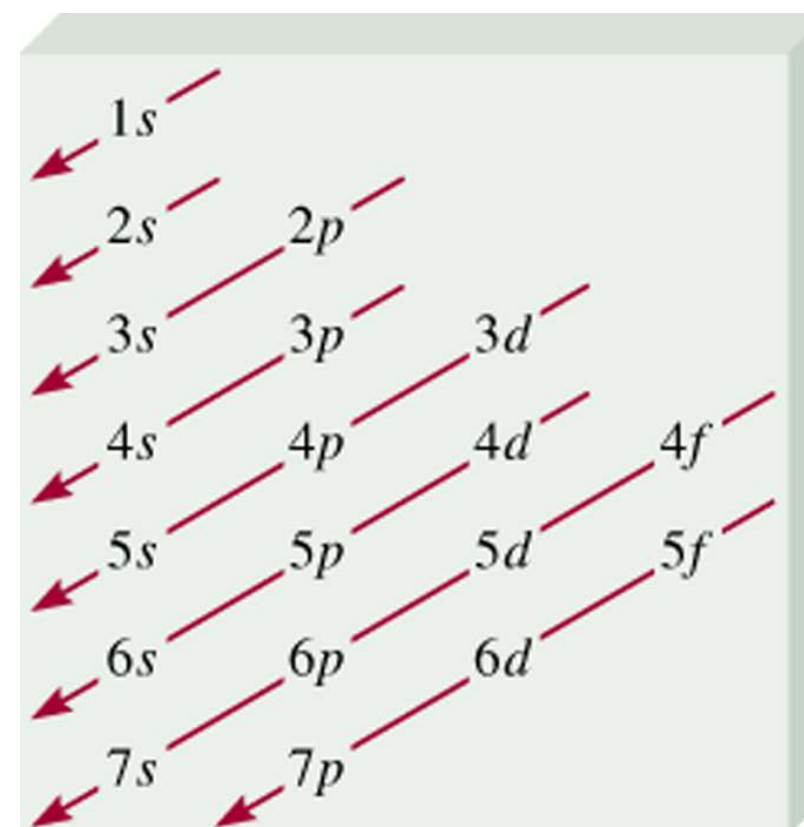
Configuración electrónica

Se conoce como **configuración electrónica** la forma en que se distribuyen los electrones del átomo de un elemento.

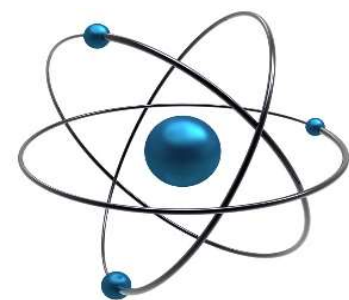
Para esquematizar la configuración electrónica es necesario ajustarse a algunas reglas, que se detallan a continuación.



El orden de (llenando) de orbitales en un átomo polielectrónico



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



Tema Nº 2 – Estructura de la materia
Química General

Modelos Atómicos
Configuración electrónica

Principio de exclusión de Pauli

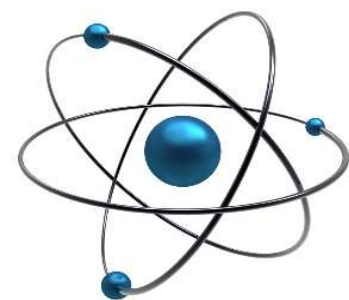
No es posible que dos electrones de un átomo tengan los mismos 4 números cuánticos. Sólo 2 electrones pueden coexistir en el mismo orbital atómico y deben tener espines opuestos

Sustancias paramagnéticas

contienen electrones no apareados y son atraídas hacia un campo magnético

Sustancias diamagnéticas

contienen electrones apareados y son débilmente repelidas por un campo magnético



Tema Nº 2 – Estructura de la materia

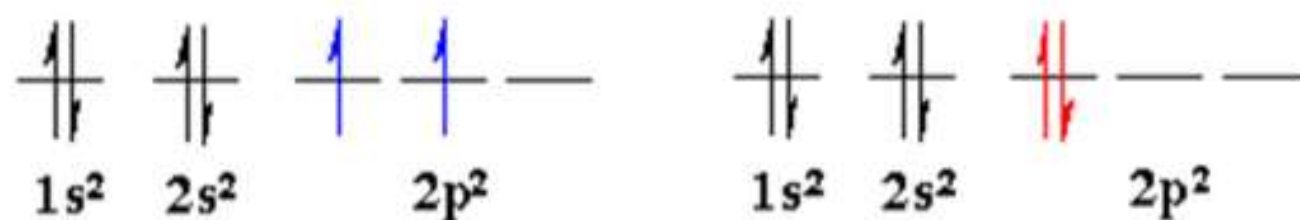
Química General

Modelos Atómicos

Configuración electrónica

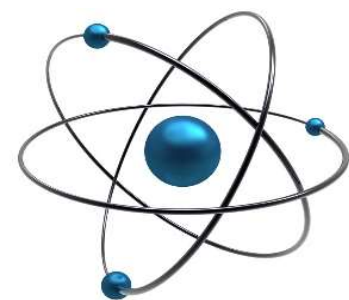
Regla de Hund

“La distribución mas estable de e- en los subniveles es aquella que tenga mayor numero de espines paralelos”



Los electrones ocupan sucesivamente cada orbital del nivel desocupado y solamente después que cada orbital posee un electrón se lleva a cabo el apareamiento.

Átomo	Z	Configuración electrónica	
Li	3	1s ² 2s ¹	$\uparrow\downarrow$ \uparrow
Be	4	1s ² 2s ²	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
B	5	1s ² 2s ² 2p ¹	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \square \square
C	6	1s ² 2s ² 2p ²	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \square
N	7	1s ² 2s ² 2p ³	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \uparrow
O	8	1s ² 2s ² 2p ⁴	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow
F	9	1s ² 2s ² 2p ⁵	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow
Ne	10	1s ² 2s ² 2p ⁶	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$



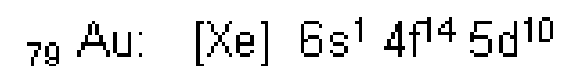
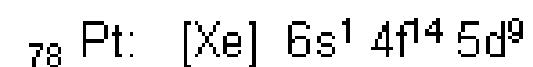
Tema N° 2 – Estructura de la materia

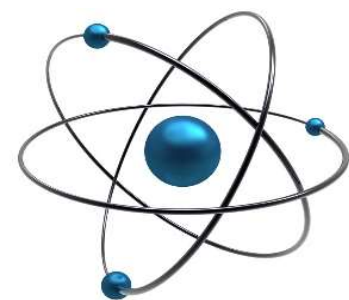
Química General

Modelos Atómicos

Configuración electrónica

Se hace necesario aclarar que en llenado de electrones en subniveles d y f no se sigue en todos los casos la regla de F. Hund. Las principales excepciones se encuentran en los siguientes elementos:



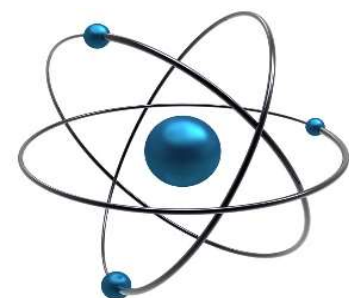


Tema N° 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos Configuración electrónica

	Orbital Notation			Simplified Notation	
	<u>1s</u>				
${}_1\text{H}$	\uparrow			$1s^1$	
${}_2\text{He}$	$\uparrow\downarrow$			$1s^2$	
	<u>1s</u>	<u>2s</u>	<u>2p</u>	Simplified Notation	
${}_3\text{Li}$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow		$1s^2 2s^1$	or $[\text{He}] 2s^1$
${}_4\text{Be}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$1s^2 2s^2$	$[\text{He}] 2s^2$
${}_5\text{B}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow — —	$1s^2 2s^2 2p^1$	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$
${}_6\text{C}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow —	$1s^2 2s^2 2p^2$	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$
${}_7\text{N}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow	$1s^2 2s^2 2p^3$	$[\text{He}] 2s^2 2p^3$
${}_8\text{O}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	$1s^2 2s^2 2p^4$	$[\text{He}] 2s^2 2p^4$
${}_9\text{F}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow	$1s^2 2s^2 2p^5$	$[\text{He}] 2s^2 2p^5$
${}_{10}\text{Ne}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$1s^2 2s^2 2p^6$	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$



Tema N° 2 – Estructura de la materia

Química General

Modelos Atómicos

Configuración electrónica

	Orbital Notation		Simplified Notation
	3s	3p	
11Na	[Ne] \uparrow		[Ne] 3s ¹
12Mg	[Ne] $\uparrow\downarrow$		[Ne] 3s ²
13Al	[Ne] $\uparrow\downarrow$	\uparrow — —	[Ne] 3s ² 3p ¹
14Si	[Ne] $\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow —	[Ne] 3s ² 3p ²
15P	[Ne] $\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow	[Ne] 3s ² 3p ³
16S	[Ne] $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	[Ne] 3s ² 3p ⁴
17Cl	[Ne] $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow	[Ne] 3s ² 3p ⁵
18Ar	[Ne] $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	[Ne] 3s ² 3p ⁶

	Orbital Notation			Simplified Notation
	3d	4s	4p	
19K	[Ar]	\uparrow		[Ar] 4s ¹
20Ca	[Ar]	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 4s ²
21Sc	[Ar] \uparrow — — —	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ¹ 4s ²
22Ti	[Ar] \uparrow \uparrow — —	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ² 4s ²
23V	[Ar] \uparrow \uparrow \uparrow —	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ³ 4s ²
24Cr	[Ar] \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow	\uparrow		[Ar] 3d ⁵ 4s ¹
25Mn	[Ar] \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁵ 4s ²
26Fe	[Ar] $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁶ 4s ²
27Co	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁷ 4s ²
28Ni	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁸ 4s ²
29Cu	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	\uparrow		[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹
30Zn	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²
31Ga	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow — —	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹
32Ge	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow —	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²
33As	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³
34Se	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴
35Br	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵
36Kr	[Ar] $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶