























# ADS AD TO AT P CA CO SOUN





www.aduni.edu.pe

















# QUÍMICA

# ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DEL ÁTOMO Semana 5

www.aduni.edu.pe

## ADUNI



#### I. OBJETIVOS

Los estudiantes, al término de la sesión de clase serán capaces de:

1. Comprender el concepto de orbital.

2. Conocer la importancia de los números cuánticos en la descripción de las regiones energéticas de la zona extranuclear.

3. Interpretar adecuadamente la notación de un subnivel y su relación con la energía relativa.



# ADUNI



## II. INTRODUCCIÓN



La existencia del átomo, no fue muy acogida al inicio por muchos científicos, pero dicha opinión cambiaría ante la recurrente cantidad de pruebas experimentales que validaban su existencia.

La primera partícula descubierta del átomo fue el electrón ( por J. Thomson en 1897) y esta partícula tan interesante será responsable de explicar muchos fenómenos físicos y químicos como:

¿La corriente eléctrica consta de partículas o no?



Al encender los juegos pirotécnicos ¿Por qué se forman las luces de colores?



Los electrones involucrados en estos fenómenos, se ubican en la zona extranuclear.

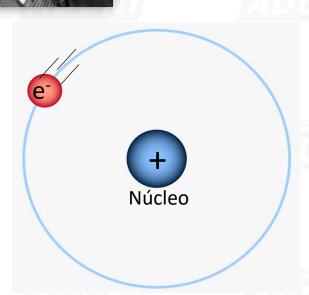
### **ANTECEDENTES HISTÓRICOS**







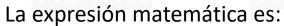
En 1913 el físico danés Niels Bohr defendió un modelo del átomo de hidrógeno, como se ve:

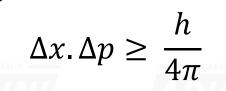


**NOTA:** El electrón se mueve en una órbita o trayectoria circunferencial.

#### PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

En 1927 el físico alemán Werner Heisenberg formuló que **es imposible determinar simultáneamente con exactitud** la posición (x) y la cantidad de movimiento p (p=m.v) de una partícula pequeña que se mueve a muy alta velocidad como el electrón.







 $\Delta x$ : la incertidumbre en la posición de la partícula.

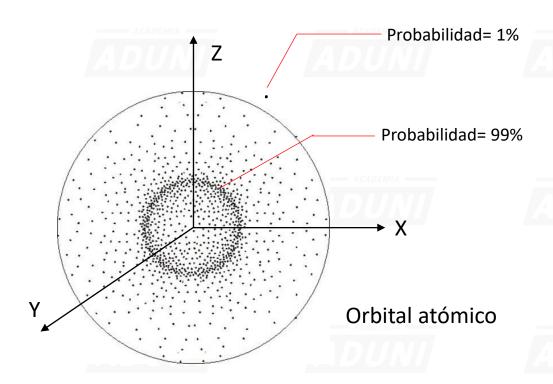
 $\Delta p$ : la incertidumbre en la cantidad de movimiento de la partícula.

h: constante de Max Planck (6,63x10<sup>-34</sup> J.s).

Heisenberg descarta el modelo de electrones moviéndose circunferencialmente alrededor del núcleo, de Niels Bohr.

#### ORBITAL ATÓMICO O NUBE ELECTRÓNICA

El principio de Heisenberg deja inaccesible el poder conocer la trayectoria exacta del electrón, por tanto se hace necesario definir una región energética de mayor probabilidad de encontrar al electrón, denominada **orbital**.



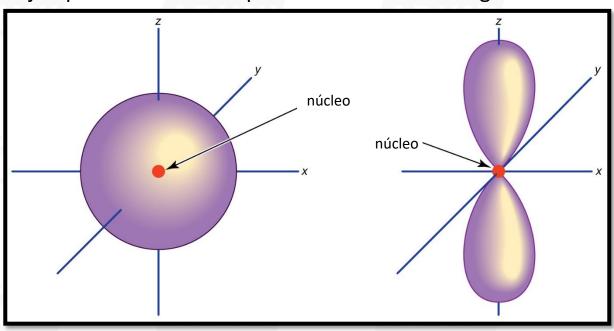




#### **NOTA:**

- Orbital también se abrevia como Región Espacial Energética de Máxima Probabilidad Electrónica (REEMPE).
- Los orbitales presentan diferentes tamaños, formas geométricas y orientación.

Ejemplo: dos orbitales que difieren en la forma geométrica.



Forma esférica

Forma dilobular

#### **ANALOGÍA 1.**

Si la zona extranuclear fuera similar a una piscigranja donde hay peces que nadan muy veloces, similar a los electrones, intentar atraparlos con la mano directo es imposible, pero lanzar una cubeta atada a una cuerda hace mas fácil atraparlos. Al lograrlo, la cubeta seria una región de mayor probabilidad (orbital) del pez.

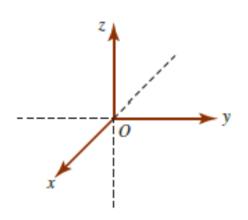
### **ANALOGÍA 2.**

De todo el espacio de la cancha de fútbol, un jugador delantero la mayor parte del tiempo se ubica en una región cercana al arco del equipo rival; esperando el pase del balón para así concretar el gol.





**Erwin Schrödinger** 



# ADUNI



#### **ECUACIÓN DE ONDA**

En 1928 el físico austriaco Erwin Schrödinger desarrolló una ecuación matemática muy compleja **para el átomo de hidrógeno** llamada ecuación de onda. Para ello consideró al orbital como función de onda de un electrón ( $\psi$ ) y el cuadrado de la función de onda ( $\psi^2$ ) define la distribución de la densidad electrónica en el espacio alrededor del núcleo.

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

Donde:

x,y,z: representan los ejes coordenados en el espacio tridimensional.

Ψ: función de onda del electrón.

 $\delta$ : símbolo de derivada parcial

m: masa de un electrón.

V: energía potencial de un electrón.

E: energía total de un electrón.

La resolución de esta ecuación permitirá obtener información importante del electrón.



## III. NÚMEROS CUÁNTICOS

Al resolver la ecuación de Schrödinger se describirá con gran precisión el estado particular de un electrón en el átomo, a través de tres números cuánticos: n,  $\ell$ , y m $_{\ell}$ 

n

 $m_{\ell}$ 

N.C principal N.C secundario N.C magnético

Más adelante el **físico Paul Dirac** reformulará la ecuación de Schrödinger y obtendrá así el cuarto número cuántico denominado **spin magnético**  $(m_s)$ .

N.C spin magnético







#### **ANALOGÍA:**

Cada lugar de asiento en el cine esta descrito por un código (empleando letras y números)

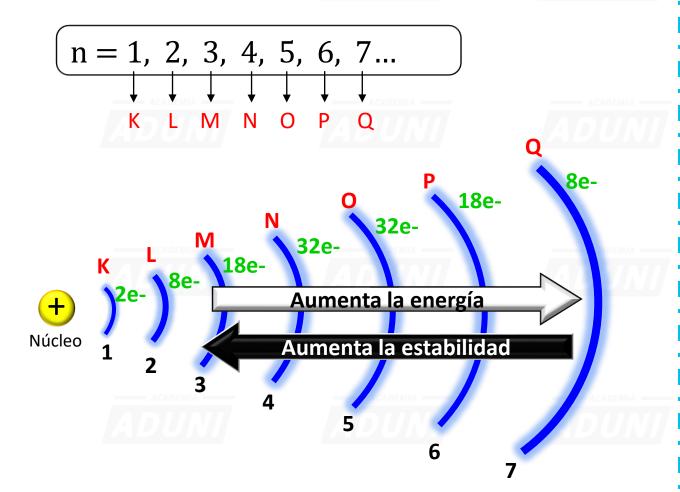


#### **ANALOGÍA:**

Cada vehículo perdido será posible de ser hallado por medio de su código de placa (secuencia de letras y números)

## **NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL (n)**

- Indica el nivel o capa de energía que ocupa el electrón.
- Valores permitidos para n:







#### **SE CUMPLE:**

✓ Teóricamente, para un nivel (n)

$$\#$$
 electrones  $(m\acute{a}x.) = 2n^2$ 

Nivel (n)	# electrones (máx.)		
n= 1	2(1) <sup>2</sup> = 2 e-		
n= 2	2(2) <sup>2</sup> = 8 e-		
n= 3	2(3) <sup>2</sup> = 18 e-		

✓ La energía y estabilidad tienen relación inversa.

Ejemplo:



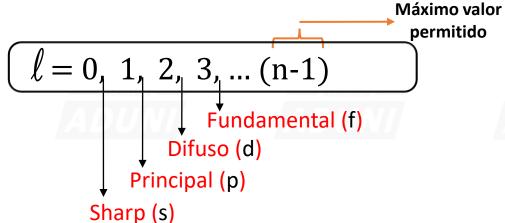
- A 20°C (baja energía)
- Alta estabilidad



- A 400°C (alta energía)
- Baja estabilidad

## NÚMERO CUÁNTICO SECUNDARIO O AZIMUTAL ( // )

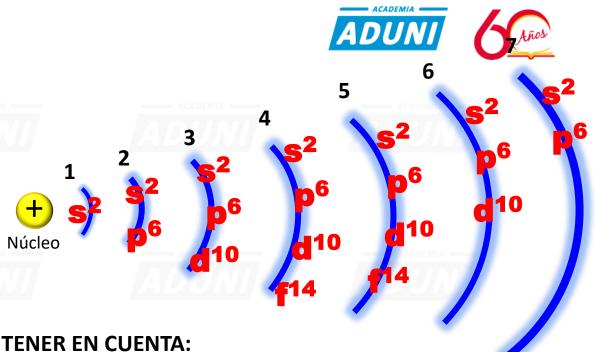
- Indica el subnivel o subcapa de energía que ocupa el electrón.
- Valores permitidos para  $\ell$ :



Recuerda los subniveles con la frase:

Sopa de fideos





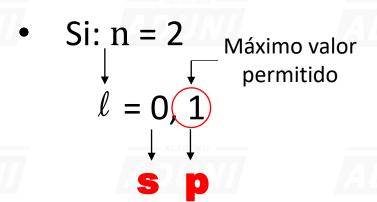
Teóricamente, para un subnivel ( $\ell$ )

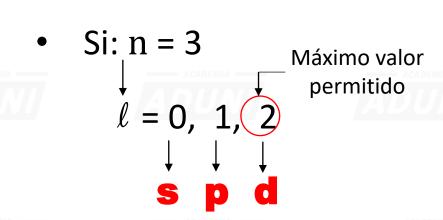
# electrones (máx.) = 
$$2(2 \ell+1)$$

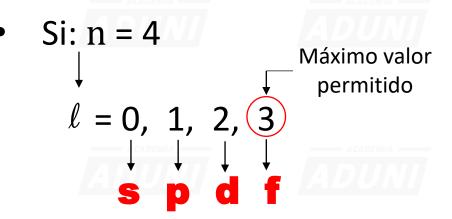
# electrones (máx.)			
2(2x0 +1) = <mark>2 e</mark> -			
2(2x1+1) = <mark>6 e</mark> -			
2(2x2+1) = 10 e-			
2(2x3+1) = 14 e-			

# **ADUNI**

#### **EJEMPLOS**







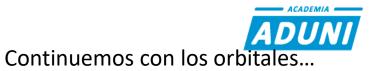
Se cumple:

## NÚMERO CUÁNTICO MAGNÉTICO ( $m_\ell$ )

- Indica el orbital donde se encuentra el electrón dentro de un subnivel de energía.
- Valores permitidos para:

$$m_{\ell} = -\ell.....10....+\ell$$

Subnivel ( $\ell$ )	# orbitales máx. = 2ℓ + 1			
<b>sharp</b> ( <i>ℓ</i> =0 )	Forma esférica $oldsymbol{m}_\ell = oldsymbol{0}$			
principal (ℓ = 1)	Forma dilobular $m_\ell = -1$ $m_\ell = 0$ $m_\ell = +1$			





## Subnivel (ℓ) # orbitales máx. = 2 $\ell$ + 1 difuso Forma tetralobular $(\ell = 2)$ $m_\ell = -1$ $m_\ell = -2$ $m_{\ell} = 0$ $m_\ell = +1$ $m_{\ell} = +2$

El subnivel fundamental (f) presenta siete orbitales de forma multilobular o compleja.

# Considerando el cuarto nivel de energía (n=4):

n	Q	Subnivel	<b>#Orbitales por subnivel</b>	#e- máximos por subnivel
	0	Sharp (s)	$\frac{1}{s}$	$s^2$
	1	Principal (p)	$\frac{1}{p_x}$ $\frac{1}{p_y}$ $\frac{1}{p_z}$	$p^6$
4	2	Difuso ( <mark>d</mark> )	$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	$d^{10}$
	3	Fundamental (f)	11 11 11 11 11 11	$f^{14}$









ACADEMIA — ACADEMIA

Si cada orbital se llena con dos electrones entonces, el subnivel Sharp, (s), se llenará con 2 e<sup>-</sup>, el subnivel principal, (p), se llenará con 6 e<sup>-</sup>, el subnivel difuso, (d), se llenará con 10 e<sup>-</sup>, y el subnivel fundamental, (f), se llenará con 14 e<sup>-</sup>.







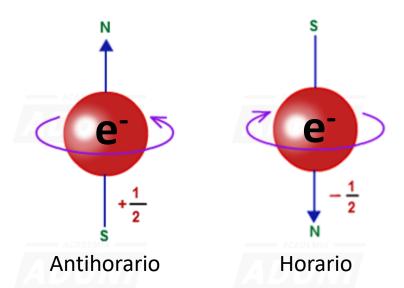




## **NÚMERO CUÁNTICO DE SPIN MAGNÉTICO (m<sub>s</sub>)**

- Indica el sentido de rotación o giro del electrón alrededor de su propio eje imaginario.
- Valores permitidos para m<sub>s</sub>:

$$m_s = +\frac{1}{2}$$
  $m_s = -\frac{1}{2}$ 

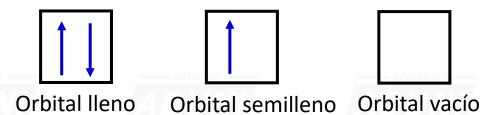




Años

**IMPORTANTE:** Todo orbital contendrá máximo dos electrones de giros opuestos o spin antiparalelo.

• El orbital puede presentar tres casos:



El giro del electrón se asemeja al movimiento rotatorio de un Spinner



#### **EJERCICIO**

Indique la alternativa que presenta un conjunto de números cuánticos permitidos para un electrón.

A) 
$$(3, 3, +1, -1/2)$$

B) 
$$(3, 2, 0, +3/2)$$

C) 
$$(4, 2, -1, -1/2)$$

D) 
$$(2, 1, +2, +1/2)$$

#### **RESOLUCIÓN**

A) 
$$n$$
 $\ell$ 
 $m_{\ell}$ 
 $m_s$ 
 $-1/2$ 

Si:  $n = 3$ 
 $\ell$ 
 $\ell = 0, 1, 2$ 
 $m_{\ell}$ 
 $m_s$ 
 $m_s$ 

La proposición dice  $\ell$  =3 ( ES INCORRECTO)





B) 
$$n$$
  $\ell$   $m_l$   $m_s$  3 2 0 +3/2

La proposición dice que  $m_s=+3/2$  (ES INCORRECTO)

C) 
$$\mathbf{n}$$
  $\boldsymbol{\ell}$   $\mathbf{m}_{\ell}$   $\mathbf{m}_{s}$ 

Si:  $\mathbf{n} = 4$ 

$$\mathbf{\ell} = 0, 1, 2$$

$$\mathbf{m}_{\ell} = -2, -1, 0, +1, +2$$

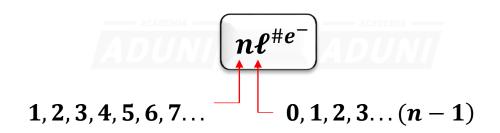
Finalmente esta permitido que:  $m_s = -1/2$  ( ES CORRECTO)

D) n 
$$\ell$$
  $m_{\ell}$   $m_{s}$ 
2 1 +2 +1/2
Si:  $n = 2$  Máximo valor permitido
$$\ell = 0, 1$$
 CLAVE: C

La proposición dice  $m_{\ell} = +2$  (ES INCORRECTO)

## REPRESENTACIÓN DE UN SUBNIVEL DE ENERGÍA

Un subnivel de energía queda representado mediante los números cuánticos principal, (n), y secundario,  $(\ell)$ .



3d<sup>5</sup>: En el tercer nivel de energía, el subnivel "d" posee 5 electrones.

 $3d_{xy}^2$ : En el tercer nivel de energía, el subnivel "d" en su orbital  $d_{xy}$  posee 2 electrones.





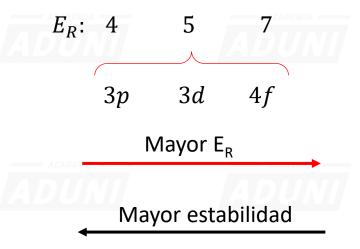
## **ENERGÍA RELATIVA (E<sub>R</sub>)**

Expresa el contenido o estado energético de un subnivel o de un orbital.

$$E_R = n + \ell$$

#### **EJEMPLO**

Determinemos la  $E_R$  de los siguientes subniveles.



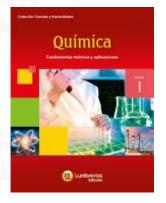
## IV. BIBLIOGRAFÍA





- Química, colección compendios académicos UNI. Lumbreras editores
- Química, fundamentos teóricos y aplicaciones; 2019 Lumbreras editores.
- Química, fundamentos teóricos y aplicaciones.
- Fundamentos de química, Ralph A. Burns; 2003; PEARSON
- Química, segunda edición Timberlake; 2008, PEARSON
- Química un proyecto de la ACS; Editorial Reverte; 2005























































www.aduni.edu.pe





