

# Resumen Química I

## 1 Clase 1

### 1.1 Naturaleza ondulatoria de la luz

La luz que vemos con nuestros ojos, la luz visible, es un tipo de **radiación electromagnética** (es la emisión y transmisión de energía de forma de **ondas electromagnéticas**)

#### 1.1.1 Ondas

Una onda es una alteración vibracional mediante la cual se transmite la energía.

- **Longitud de onda:** ( $\lambda$ , lambda) es la longitud entre puntos iguales de ondas sucesivas. (m, cm, o nm)
- **Amplitud:** es la longitud vertical desde la línea media de una onda a su cresta o a su valle.
- **Frecuencia:** ( $f$  o  $\nu$ ) es el número de ondas que pasan por un punto particular en un segundo. (Hz)

La **rapidez** es otra de las propiedades importantes de una onda, que depende del tipo de onda y del medio en el cual viaja (por ejemplo, aire, agua o vacío). En general la rapidez de una onda está dada por

$$v = \lambda \cdot f \quad (1)$$

#### 1.1.2 Ondas electromagnéticas

Una **onda electromagnética** es una alteración energética compuesta por un componente de campo eléctrico y un componente de campo magnético. Dado que la rapidez o velocidad de una onda es el producto de la longitud ( $\lambda$ ) por su frecuencia ( $f$ ). Para una onda electromagnética se cumple

$$c = \lambda \cdot f \quad (2)$$

Las ondas electromagnéticas viajan en el vacío a una velocidad constante de  $3.00 \times 10^8$  m/s. Velocidad también conocida como **velocidad de la luz**

### 1.2 El espectro electromagnético

La radiación electromagnética es la emisión y transmisión de energía en forma de **Ondas electromagnéticas**. El espectro electromagnético muestra los **diferentes tipos de radiación electromagnética**. De mayor a menor frecuencia (menor a mayor  $\lambda$ ) van en el siguiente orden: Rayos gamma, Rayos X, Ultravioleta, Luz visible, Infrarrojo, Microondas, Ondas de radio. Notemos que la luz visible va de 400nm (rojo) a 700nm (azul). Para calcular la frecuencia o longitud de onda se utiliza la ecuación ??, ya que el valor de la velocidad es igual si se está en el vacío.

### 1.3 Radiación de cuerpo oscuro

La cantidad de energía radiante de cierta longitud de onda emitida por un objeto depende de su temperatura. Antes no se entendía la relación entre la temperatura, la intensidad y la longitud de onda de la radiación emitida.

## 1.4 Teoría cuántica de Planck

La teoría de Planck propone que la radiación electromagnética solo puede ser liberada (o absorbida) por los átomos en "paquetes" discretos de tamaño mínimo o **cuanto** (que significa cantidad fija). En general, la energía ( $E$ ), de un solo cuanto es igual a una constante ( $h$ ) multiplicada por su frecuencia ( $f$ )

$$E = h \cdot f \quad (3)$$

$E$ : energía de un solo cuanto.  $h$ : **Constante de Planck**  $= 6.63 \times 10^{-34} J \cdot s$ . Dado que  $f = \frac{c}{\lambda}$ , entonces:

$$E = h \frac{c}{\lambda} \quad (4)$$

## 1.5 Efecto fotoeléctrico

El **efecto fotoeléctrico** es el fenómeno en el que los electrones son expulsados desde la superficie de ciertos metales que se han expuesto a la luz de al menos una determinada frecuencia mínima (frecuencia umbral). Quien dio explicación a este fenómeno fue Albert Einstein, lo que le valió un premio nobel en 1921. Los electrones de mantienen unidos en el metal por fuerzas de atracción y para emitirlos, se necesita que un fotón tenga una energía suficientemente alta para sacarlos (frecuencia umbral de la luz), la que está dada por la ecuación de Planck. Si se hace incidir en el metal luz con una frecuencia mayor a la umbral, los electrones no sólo serán emitidos, también adquirirán cierta energía cinética ( $E_c$ ).

En la ecuación  $E_c$  es la energía cinética del electrón emitido y  $W$  es la función del trabajo, que es una medida de cuán fuerte están unidos los electrones en el metal.

## 2 Clase 2

### 2.1 Espectro de líneas de absorción y emisión

Un **espectro** es la separación de la radiación electromagnética en sus diferentes componentes de longitud de onda diferente. Los **espectros de emisión**, son los espectros continuos o de líneas de radiación emitida por las sustancias. Los **espectros de absorción**, son creados por la absorción selectiva de radiación por las sustancias. Los elementos absorben energía de la misma longitud de onda a la que emiten.

### 2.2 La ecuación de Rydberg

**Johann Balmer** planteó una ecuación empírica que explicaba las líneas observables del espectro del hidrógeno

$$f = 3.29 \times 10^{15} s^{-1} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (5)$$

**Johannes Rydberg** propuso una ecuación general que explicaba todas las líneas espectrales del hidrógeno.

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (6)$$

$\lambda$ : longitud de onda.  $R_H$ : constante de Rydberg ( $1.096776 \times 10^7 m^{-1}$ ).  $n_{i(\text{inicial})}$  y  $n_{f(\text{final})}$ : enteros positivos donde  $n_2 > n_1$ .

### 2.3 El modelo atómico de Bohr

- Los  $e^-$  giran alrededor del núcleo del átomo con energía constante.
- Las órbitas son circulares y están cuantizadas en energía.
- Las órbitas cercanas al núcleo son de menor energía y las más lejanas de mayor energía.
- Si un  $e^-$  absorbe energía, este se puede promover a un nivel de mayor energía (estado excitado).

- Cuando el  $e^-$  regresa a un nivel menor de energía, emite energía (fotones).

Energía de la transición electrónica (**importante**)

$$E = hf = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (7)$$

$R_H = 2.18 \times 10^{-18} J$ .  $n$  = número cuántico principal

La transición de un  $e^-$  entre niveles de energía involucra la emisión o absorción de un fotón de frecuencia  $f$  y energía  $hf$ .

### 2.3.1 Limitaciones del modelo atómico de Bohr

1. Los electrones sólo existen en ciertos niveles discretos de energía descritos con números cuánticos.
2. El movimiento de un electrón de un nivel a otro involucra la absorción o liberación de energía.

**Limitaciones:**

- El modelo de Bohr ofrece una explicación al espectro de líneas del átomo de hidrógeno. Sin embargo, **no puede explicar los espectros de otros átomos**, o sólo lo hace de manera muy limitada.
- El modelo de Bohr **ignora las propiedades ondulatorias** del electrón.

## 3 Clase 3

### 3.1 Postulado de Broglie

"Si las ondas luminosas se comportan como una corriente de partículas (fotones), quizá partículas como los electrones tengan propiedades ondulatorias". Propuso que los electrones, al igual que los fotones (cuantos de energía) se comportan como partículas (masa) y ondas (energía). Los electrones se comportan como ondas estacionarias que ondulan en posiciones fijas.

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (8)$$

$\lambda$  : la longitud de onda asociada a la partícula (**normalmente hay que transformar a nanómetros**).  
 $m$  : masa de la partícula.  $v$  : rapidez de la partícula.

**Lester y Clinton Davisson** (físicos americanos) demostraron que los electrones poseen propiedades ondulatorias. Al dirigir un rayo de electrones sobre una delgada lámina de oro.

### 3.2 Principio de incertidumbre de Heisenberg

La naturaleza dual de la materia impone una limitación fundamental a la precisión con que podemos conocer un tanto la posición, como la trayectoria (momentum) de cualquier objeto. "Es imposible conocer con certeza el momento  $p$  (definido como la masa por la rapidez) y la posición de una partícula simultáneamente"

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi} \quad (9)$$

$\Delta x$  : incertidumbre en la posición.  $\Delta p = mv$  : incertidumbre en el momento.

### 3.3 La ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger involucra el comportamiento de una **partícula**, en términos de la **masa (m)**, y el de **onda** en términos de una **función de onda** ( $\Psi$ , psi) que depende de la ubicación del sistema en el espacio.

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E - V)\Psi = 0 \quad (10)$$

La función de onda ( $\Psi$ ) en sí misma no tiene un significado físico directo, el cuadrado de ella ( $\Psi^2$ ) representa la probabilidad de encontrar al electrón en una cierta región del espacio.

### 3.4 Orbitales atómicos y números cuánticos

La ecuación de Schrödinger produce un conjunto de funciones, que representan zonas del espacio tridimensional donde hay mayor probabilidad de encontrar al electrón. Estas funciones de onda se denominan **orbitales**. Un **orbital atómico** se considera como la función de onda del electrón de un átomo. En la ecuación de Schrödinger los orbitales atómicos están descritos por un conjunto de números llamados **números cuánticos**. Son parámetros numéricos que derivan de la ecuación de Schrödinger y describen la distribución de los electrones en el átomo. Se necesitan **4 números cuánticos** para describir los orbitales atómicos:

- Número cuántico principal ( $n$ )
- Número cuántico de momento angular ( $l$ )
- Número cuántico magnético ( $m_l$ )
- Número cuántico de spin electrónico ( $m_s$ )

#### 3.4.1 Número cuántico principal

- Puede tomar **solo** valores enteros (1, 2, 3, etc.). Cada valor de  $n$  designa un nivel o capa.
- Determina la **energía** del electrón. Cuanto mayor sea el valor de  $n$ , mayor la energía del electrón.
- Es una medida del tamaño del orbital y se relaciona con la **distancia promedio** del electrón al núcleo en determinado orbital.
- A mayor valor de  $n$ , mayor es la distancia respecto al núcleo, por lo tanto el orbital es más grande.

#### 3.4.2 Número cuántico de momento angular

Este número expresa la **forma** de los orbitales. Los valores de  $l$  dependen del valor del número cuántico principal  $n$ , según  $l = n - 1$ .

#### 3.4.3 Número cuántico magnético

- Describe la **orientación** del orbital en el espacio.
- Indica el número de orbitales presentes en un subnivel con cierto valor de  $l$ .
- Depende del valor de  $l$  según  $m_l = 2l + 1$
- su valor varía desde  $-l$  hasta  $+l$ , pasando por 0.

#### 3.4.4 Número cuántico de spin electrónico

Representa el giro del electrón sobre su propio eje (espín) y puede tener dos valores de  $+\frac{1}{2}$  ó  $-\frac{1}{2}$ .

### 3.5 Forma y orientación de los orbitales atómicos

#### 3.5.1 Orbitales s

Los orbitales s son esféricos

#### 3.5.2 Orbitales p

Están conformados por 2 segmentos lobulares, los orbitales p son perpendiculares entre sí, con orientaciones  $(p_x, p_y, p_z)$ . Estos 3 orbitales tienen el mismo tamaño, forma y energía, sólo cambia su orientación. Los orbitales p comienzan con el número cuántico principal  $n = 2$ , ya que para  $n = 2$ ,  $l = 1$ .

### 3.5.3 Orbitales d

En total hay 5 orbitales d para un valor determinado de  $l$ . Estos orbitales comienzan con el número cuántico principal  $n = 3$ , ya que para  $n = 3$ ,  $l = 2$ .

### 3.5.4 Orbitales f

Hay 7 orbitales f para un valor determinado de  $l$ . Estos orbitales comienzan con el número cuántico principal  $n = 4$ , ya que para  $n = 4$ ,  $l = 3$ .

Figure 1: Resumen de orbitales atómicos

$n$	$\ell$ 0 a (n-1)	Número de orientaciones posibles $m_\ell = 2\ell + 1$	Orientaciones del orbital	Nombre de orbitales atómicos
1	0	1	0	1s
2	0 1	1 3	0 -1, 0, 1	2s 2px, 2py, 2pz
3	0 1 2	1 3 5	0 -1, 0, 1 -2, -1, 0, 1, 2	3s 3px, 3py, 3pz 3dxy, 3dyz, 3dxz, 3dx <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> , 3dz <sup>2</sup>
4	0 1 2 3	1 3 5 7	0 -1, 0, 1 -2, -1, 0, 1, 2 -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4s 4px, 4py, 4pz 4dxy, 4dyz, 4dxz, 4dx <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> , 4dz <sup>2</sup> (fz <sup>3</sup> , fxz <sup>2</sup> , fyz <sup>2</sup> , fx(x <sup>2</sup> -3y <sup>2</sup> ), fy(y <sup>2</sup> -3x <sup>2</sup> ), fxzy, fz(x <sup>2</sup> -3y <sup>2</sup> ))

## 4 Clase 4

### 4.1 Configuración electrónica

### 4.2 Principio de exclusión de Pauli

El principio de exclusión de Pauli establece que no es posible que dos electrones de un átomo tengan los mismos cuatro números cuánticos.

### 4.3 Regla de Hund

La regla de Hund establece que la distribución electrónica más estable en los subniveles es la que tiene el mayor número de espines paralelos.

### 4.4 Principio de Aufbau

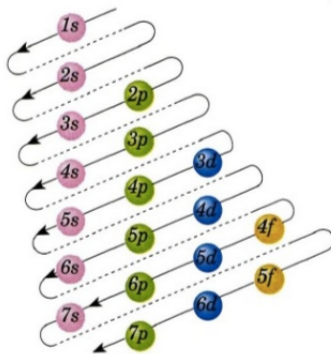
El principio de Aufbau (construcción en alemán) establece que cuando los protones se incorporan al núcleo de uno en uno para construir los elementos, los electrones se suman de la misma forma a los orbitales atómicos.

### 4.5 Como realizar una configuración electrónica

1. Determinar el número de electrones que tiene el átomo, para un átomo neutro es igual a **Z**.

2. Ubicar los electrones en cada uno de los niveles y subniveles de energía, comenzando por el más cercano al núcleo ( $n = 1$ ), según la regla de las diagonales.

Figure 2: Diagrama de las diagonales



#### 4.6 Configuraciones abreviadas

Al escribir la configuración electrónica abreviada de un elemento, la configuración electrónica del gas noble de número atómico más cercano pero menor, se representa con su símbolo químico encerrado en corchetes.

5 Clase 5

6 Clase 6

7 Clase 7