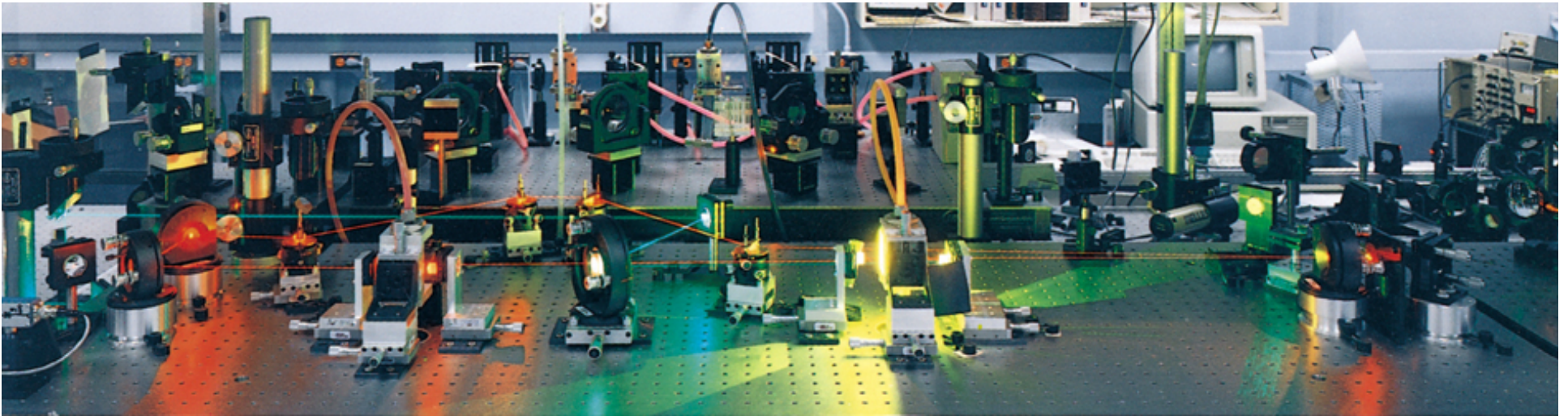
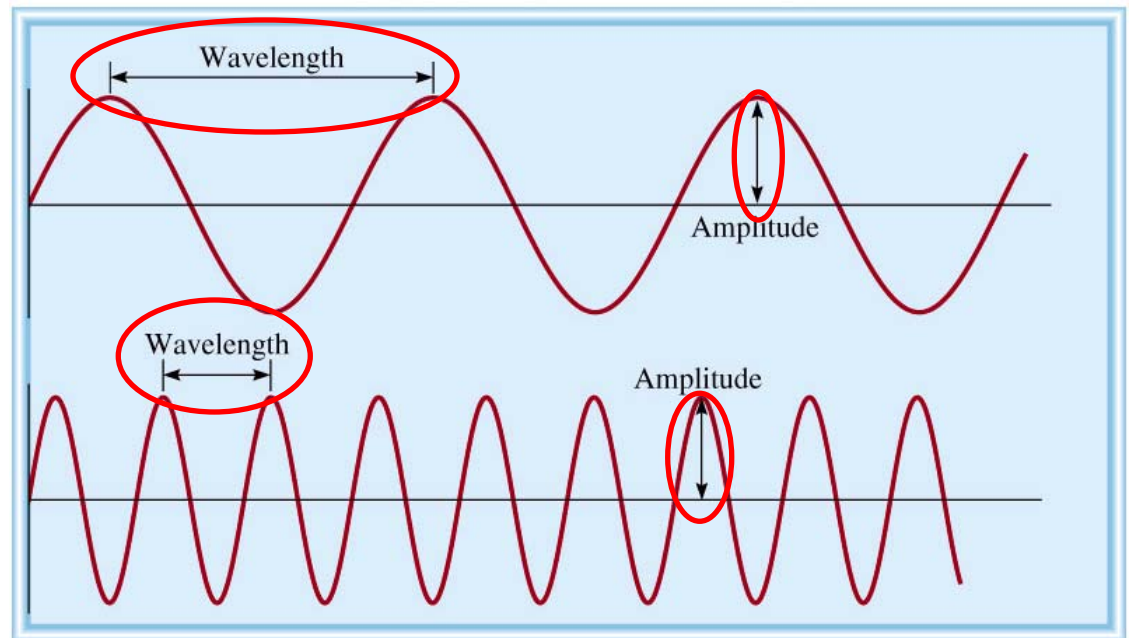
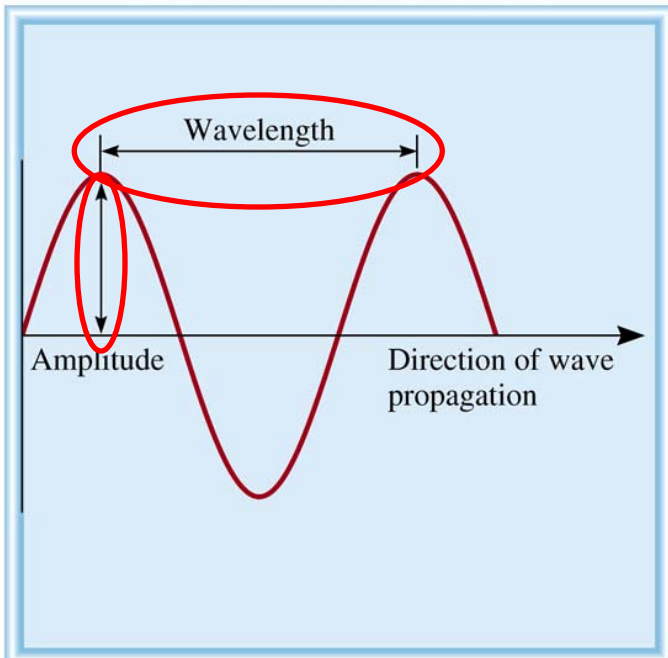




Teoría cuántica y la estructura electrónica de los átomos

Capítulo 7

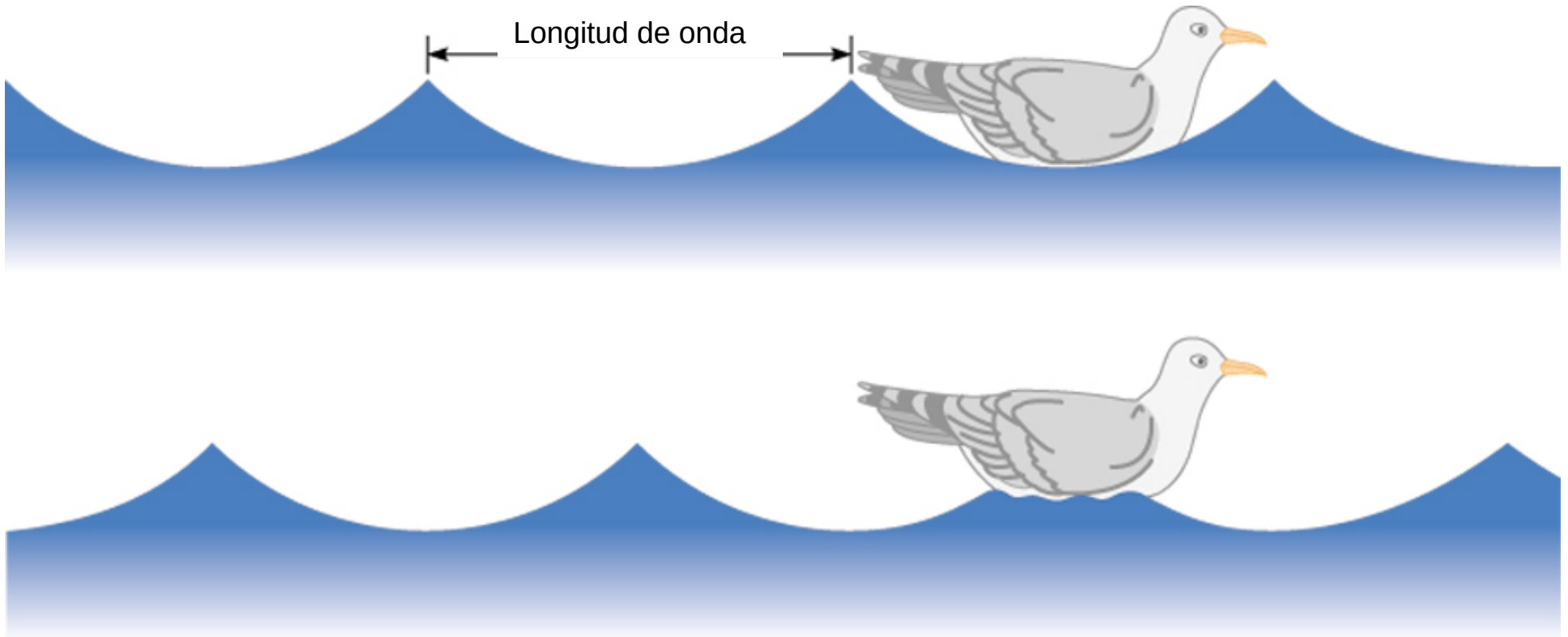
Propiedades de las ondas



Longitud de onda (λ) es la distancia que existe entre dos puntos idénticos en una serie de ondas.

Amplitud: Distancia vertical desde el punto medio de la curva hasta una cresta (punto máximo) o un valle (punto mínimo).

Propiedades de las ondas

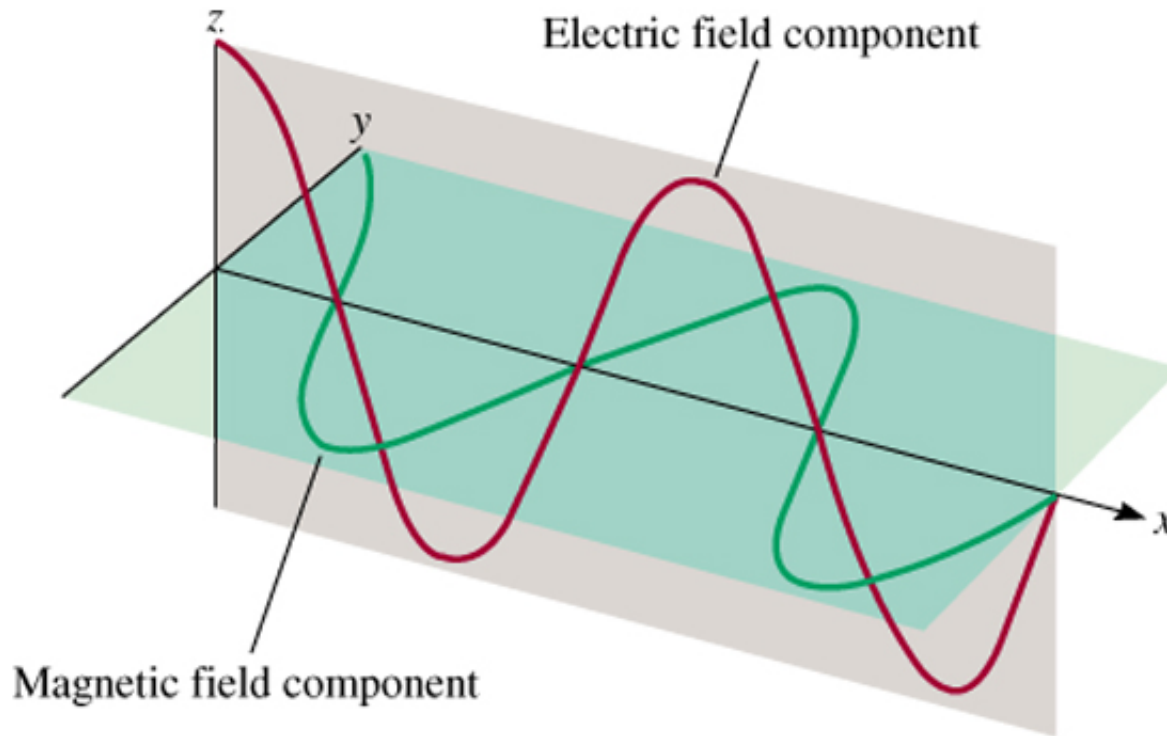


La **frecuencia** (ν) es el número de ondas que pasan por un determinado punto en un intervalo de 1 segundo.

(Hertz = 1 ciclo/seg).

$$\text{Velocidad} = \lambda \times \nu$$

Maxwell (1873), estableció que **la luz está formada por ondas electromagnéticas**



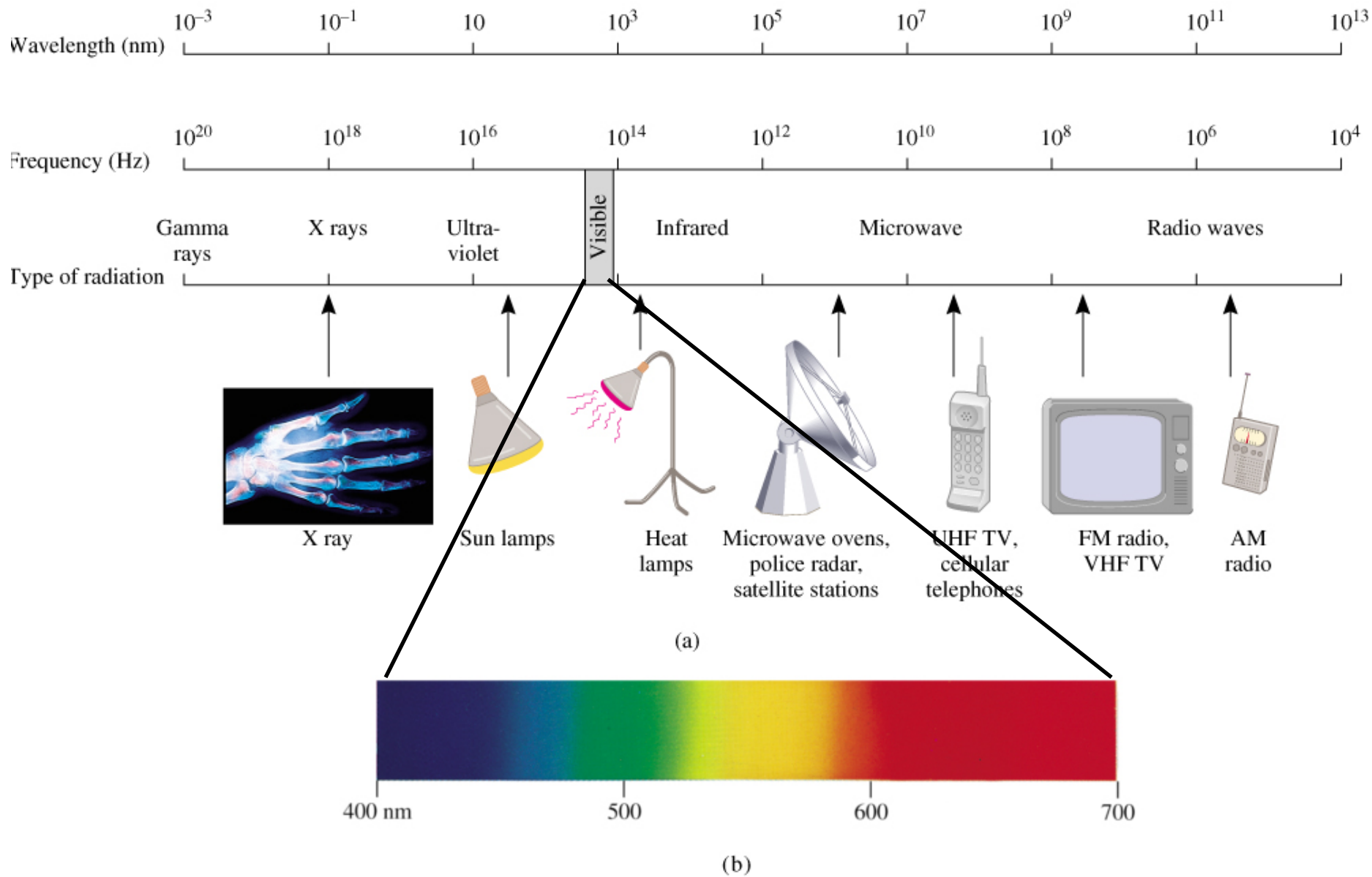
Radiación electromagnética

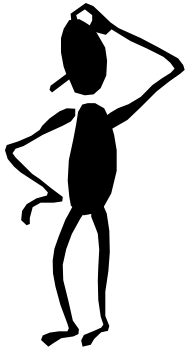
Emisión y transmisión de energía por medio de ondas electromagnéticas.

Velocidad de la luz (en el vacío) = 3.00×10^8 m/s

Toda radiación electromagnética

$$\lambda \times \nu = c$$





Un fotón tiene una frecuencia de 6.0×10^4 Hz.
Determine la longitud de onda del fotón. ¿Se encuentra esta frecuencia dentro de la región visible?

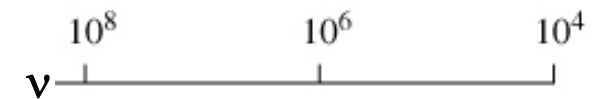
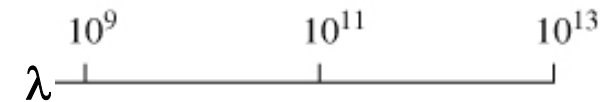
$$\lambda \times \nu = c$$

$$\lambda = c/\nu$$

$$\lambda = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s} / 6.0 \times 10^4 \text{ Hz}$$

$$\lambda = 5.0 \times 10^3 \text{ m}$$

$$\lambda = 5.0 \times 10^{12} \text{ nm}$$



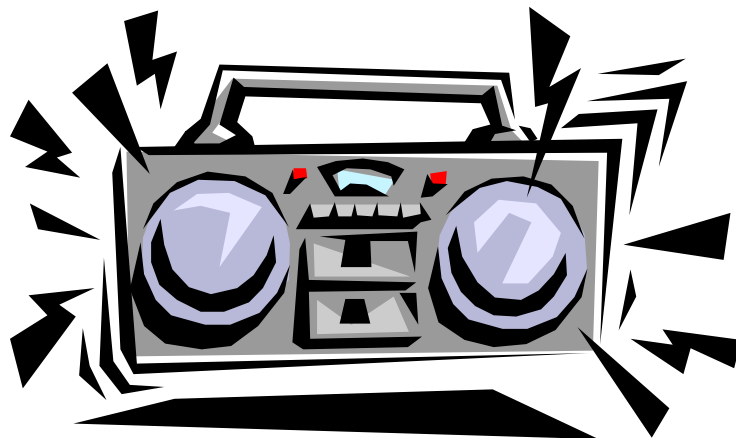
Radio waves



FM radio,
VHF TV



AM
radio

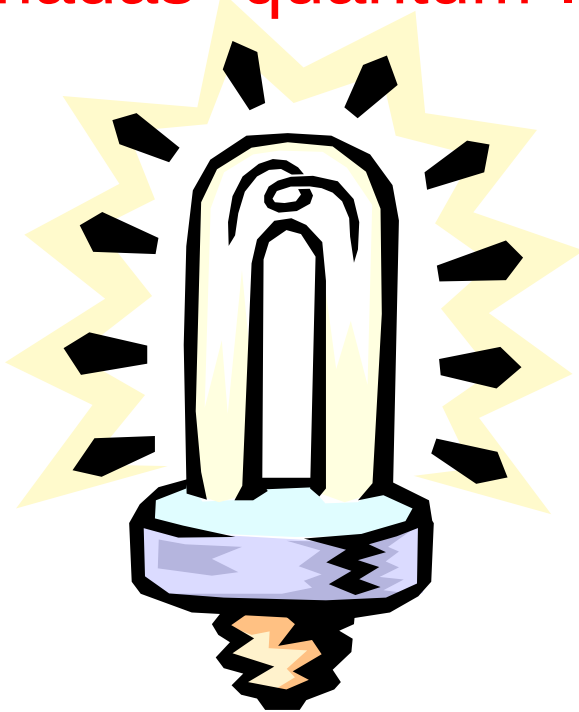


Onda de radio

Misterio #1, “Problema del cuerpo oscuro”

Resuelto por Planck en el año 1900

La energía y la luz son emitidas o absorbidas en múltiples unidades llamadas “quantum”.



$$E = h \times \nu$$

Constante de Plank (h)

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

Misterio #2, “Efecto fotoeléctrico” Resuelto por Einstein en 1905

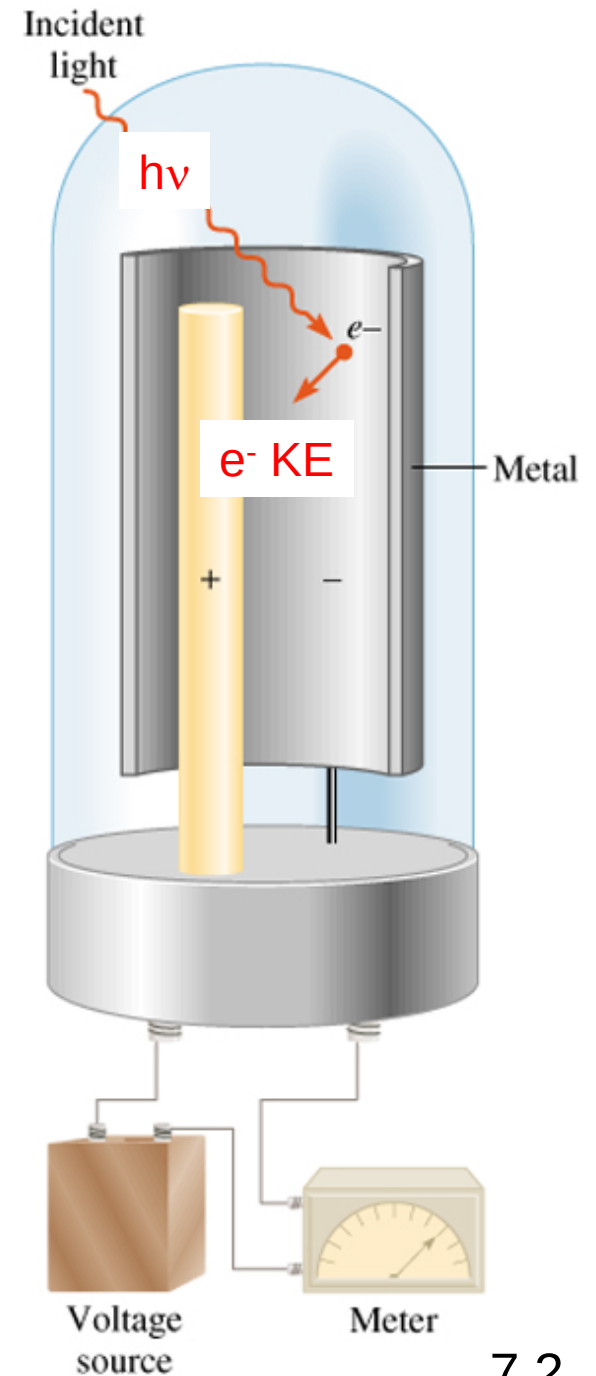
La luz tiene:

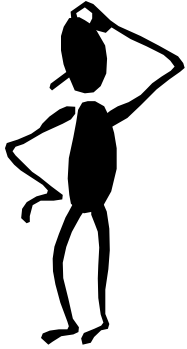
1. Naturaleza de onda
2. Naturaleza de partícula

Un **fotón** es una “partícula” de luz

$$h\nu = KE + BE$$

$$KE = h\nu - BE$$





Cuando una muestra de cobre es bombardeada con electrones, se producen rayos X. Calcule la energía que contienen los electrones si se sabe que la longitud de onda de los rayos X es 0.154 nm.

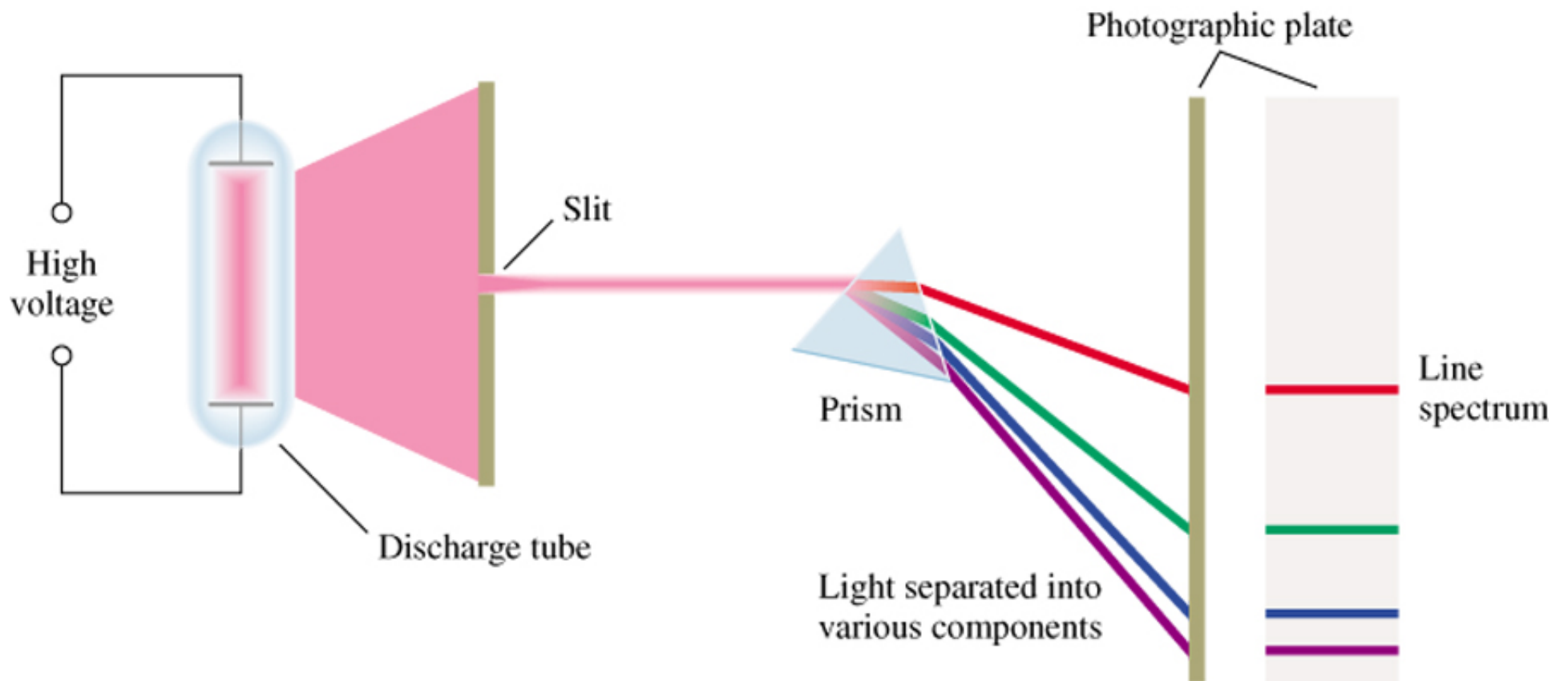
$$E = h \times \nu$$

$$E = h \times c / \lambda$$

$$E = 6.63 \times 10^{-34} \text{ (J}\cdot\cancel{\text{s}}) \times 3.00 \times 10^8 \text{ (}\cancel{\text{m}}/\cancel{\text{s}}) / 0.154 \times 10^{-9} \text{ (}\cancel{\text{m}})$$

$$E = 1.29 \times 10^{-15} \text{ J}$$

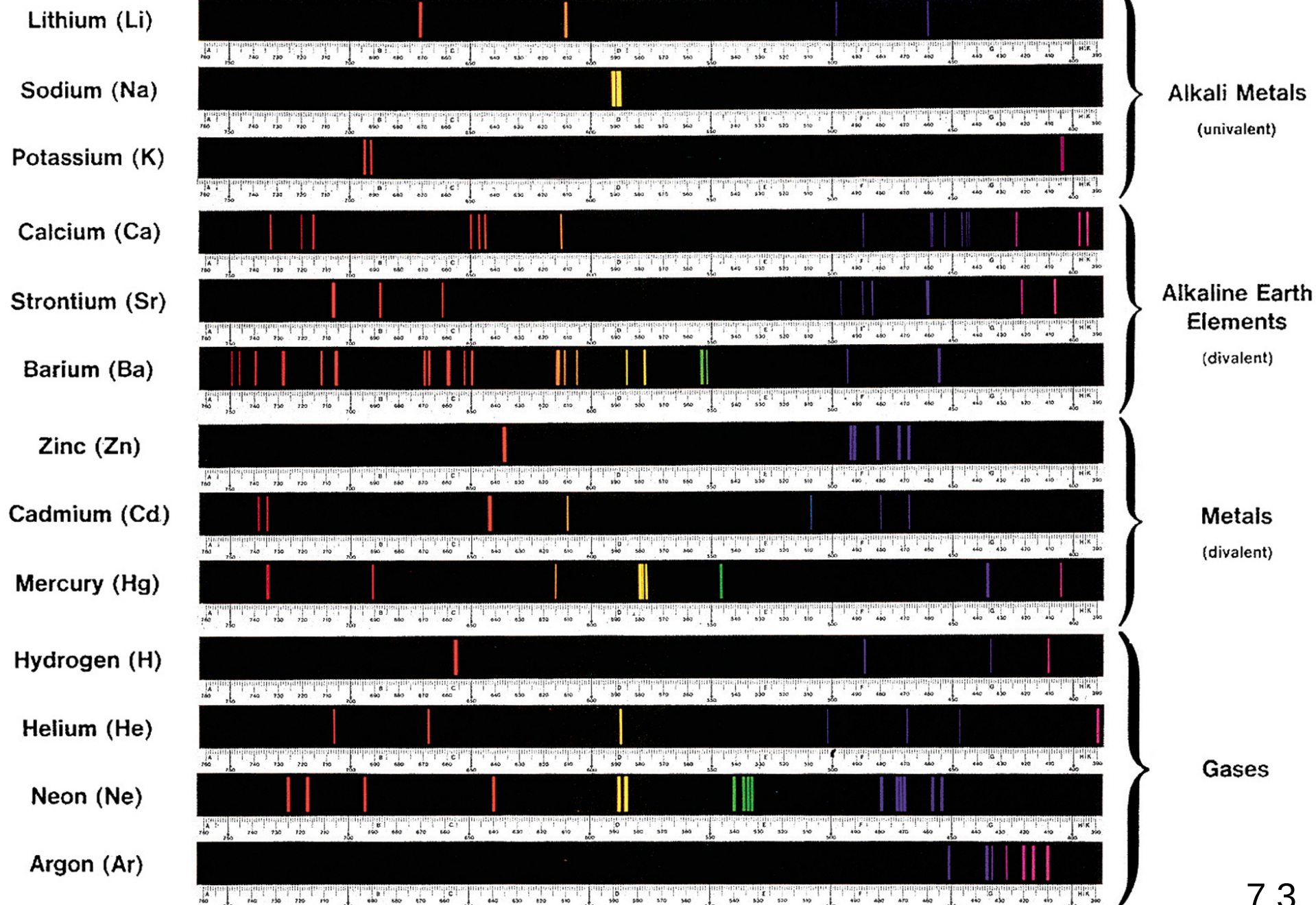




Espectro de los átomos de hidrógeno



Bright-line Spectra



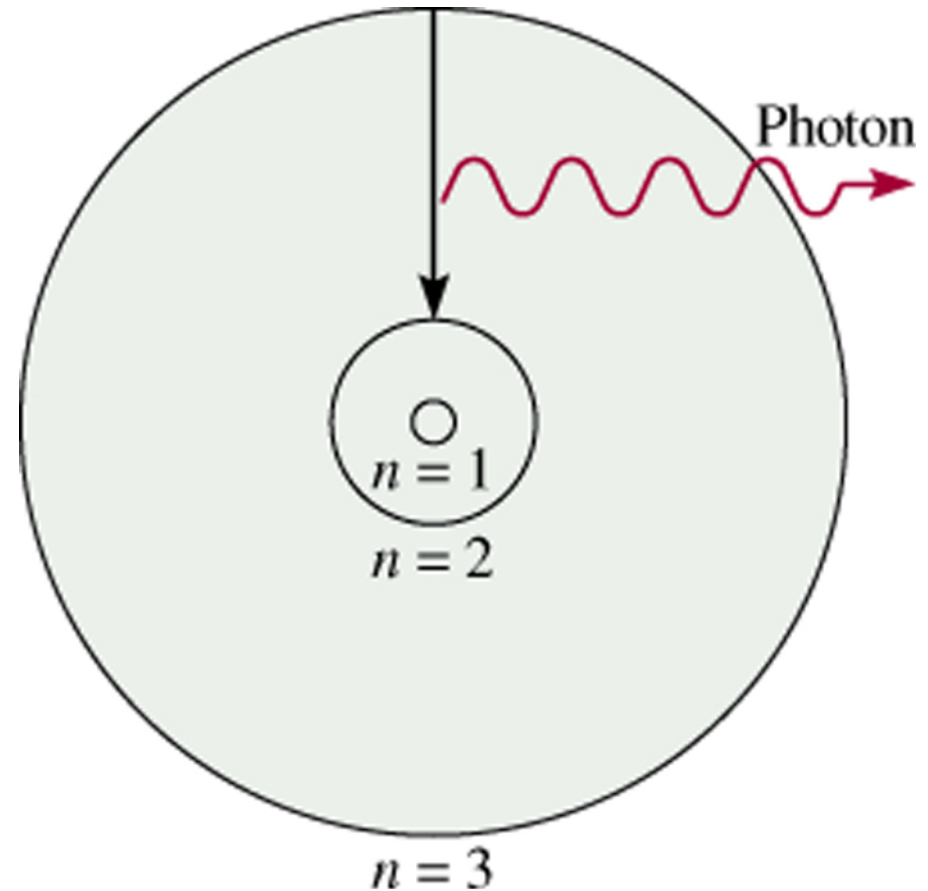
Modelo atómico de Bohr (1913)

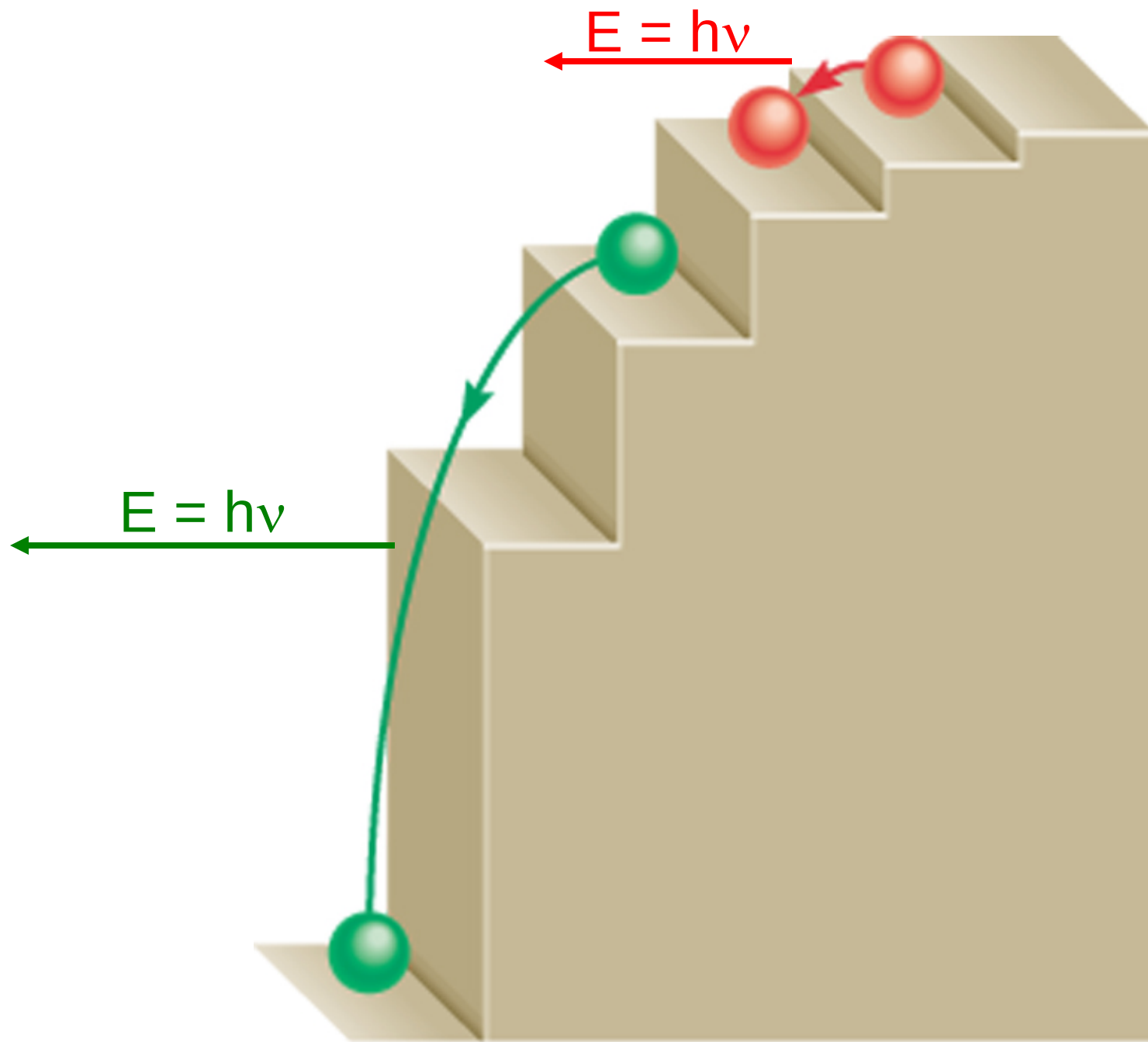
1. Los electrones (e^-) sólo pueden tener valores específicos de energía
2. Cuando existe una emisión de luz, los electrones se mueven de un nivel de energía mayor a otro menor.

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

n (Número cuántico) = 1,2,3,...

R_H (Constante de Rydberg) = $2.18 \times 10^{-18} \text{J}$





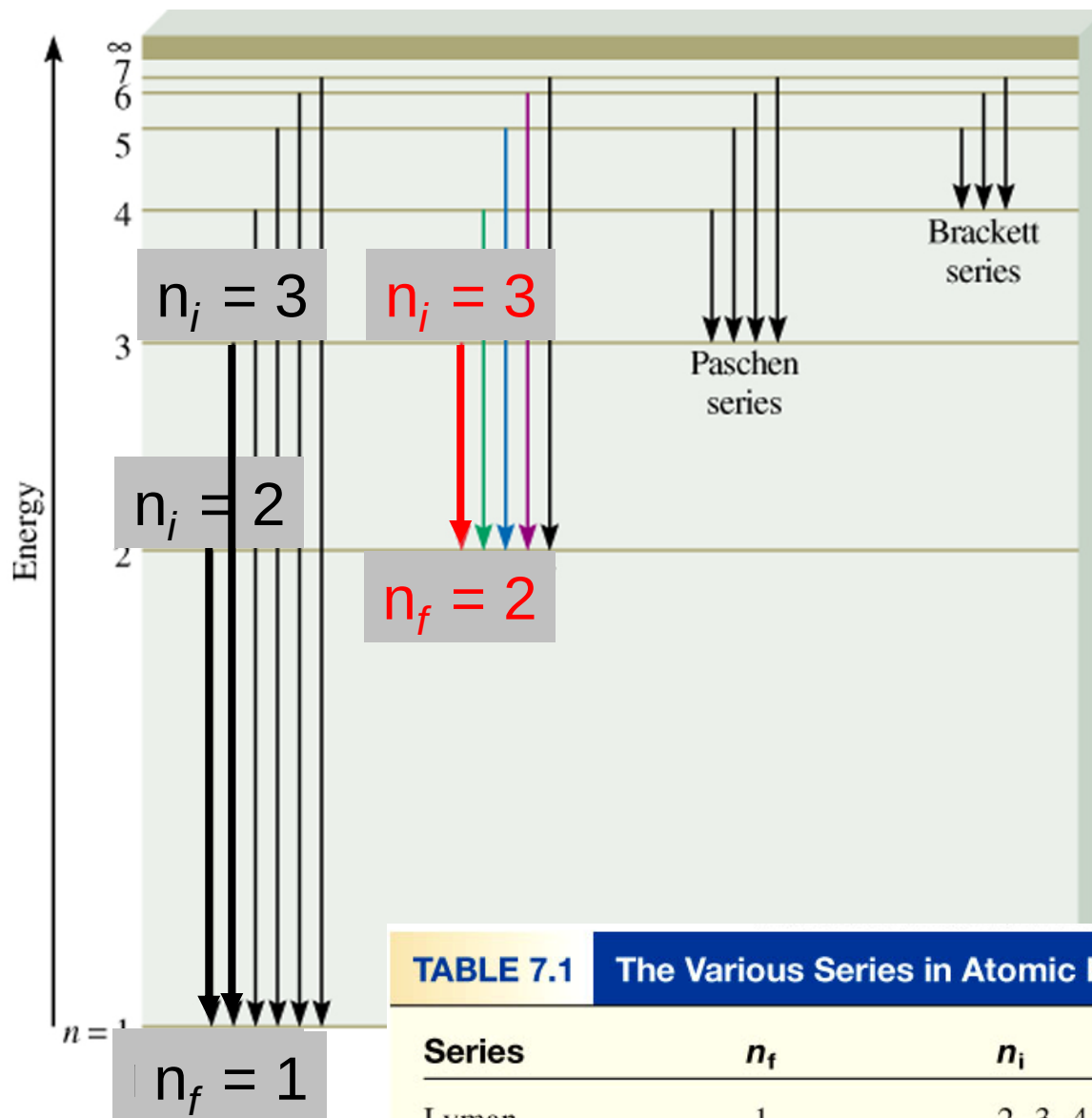


TABLE 7.1 The Various Series in Atomic Hydrogen Emission Spectrum

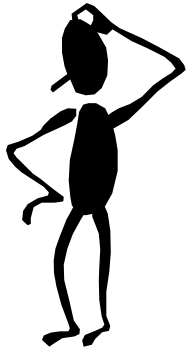
Series	n_f	n_i	Spectrum Region
Lyman	1	2, 3, 4, ...	Ultraviolet
Balmer	2	3, 4, 5, ...	Visible and ultraviolet
Paschen	3	4, 5, 6, ...	Infrared
Brackett	4	5, 6, 7, ...	Infrared

$$E_{\text{fotón}} = \Delta E = E_f - E_i$$

$$E_f = -R_H \left(\frac{1}{n_f^2} \right)$$

$$E_i = -R_H \left(\frac{1}{n_i^2} \right)$$

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



Calcule la longitud de onda de un fotón emitido por un átomo de hidrógeno cuando el electrón cambia del 5° al 3^{er} nivel de energía.

$$E_{\text{fotón}} = \Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

$$E_{\text{fotón}} = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \times (1/25 - 1/9)$$

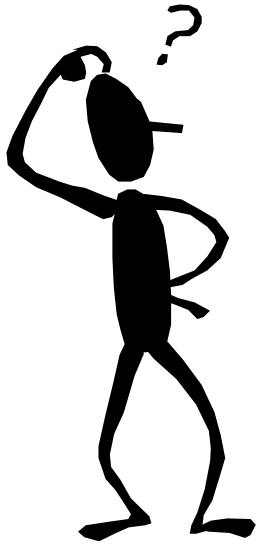
$$E_{\text{fotón}} = \Delta E = -1.55 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$E_{\text{fotón}} = h \times c / \lambda$$

$$\lambda = h \times c / E_{\text{fotón}}$$

$$\lambda = 6.63 \times 10^{-34} \text{ (J}\cdot\text{s)} \times 3.00 \times 10^8 \text{ (m/s)} / 1.55 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\lambda = 1280 \text{ nm}$$



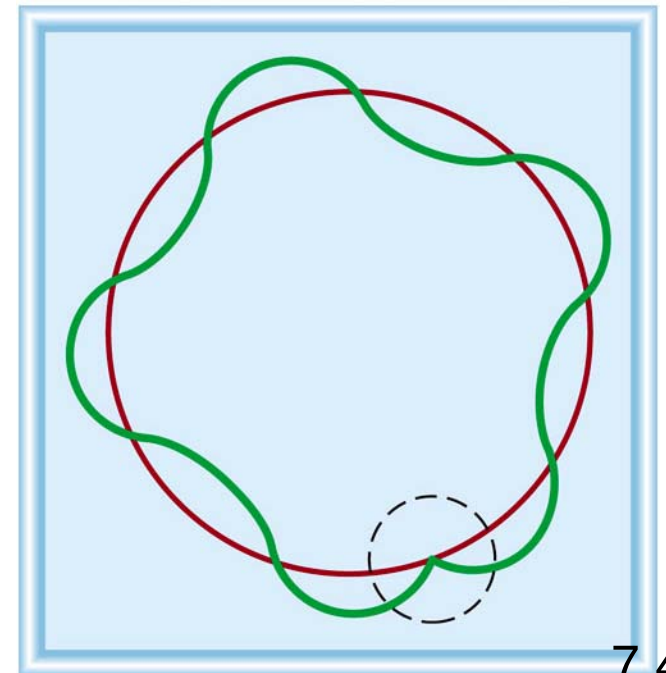
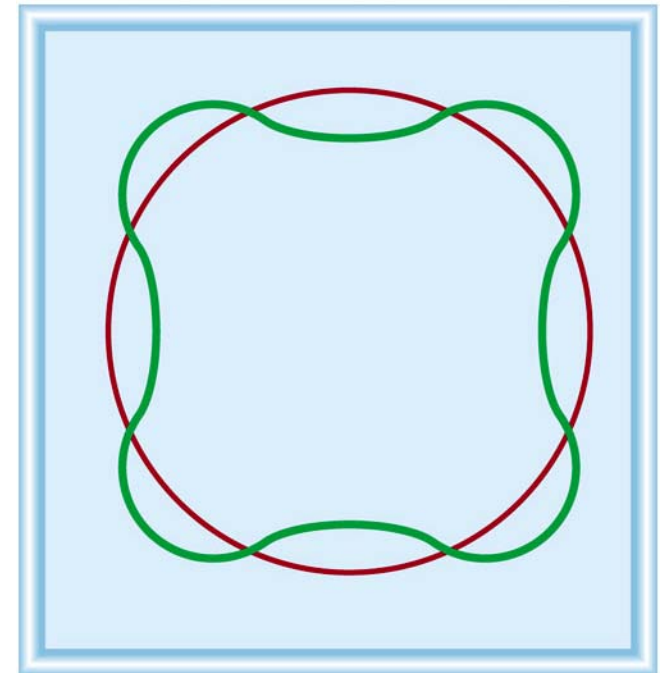
¿Porqué la energía de los electrones es cuantizada?

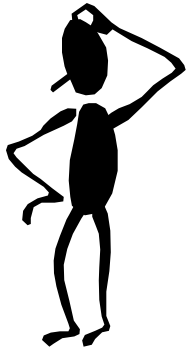
De Broglie (1924) descubrió que **los electrones (e^-), son partículas pero también son ondas.**

$$2\pi r = n\lambda \quad \lambda = \frac{h}{mu}$$

u = velocidad de e^-

m = masa de e^-



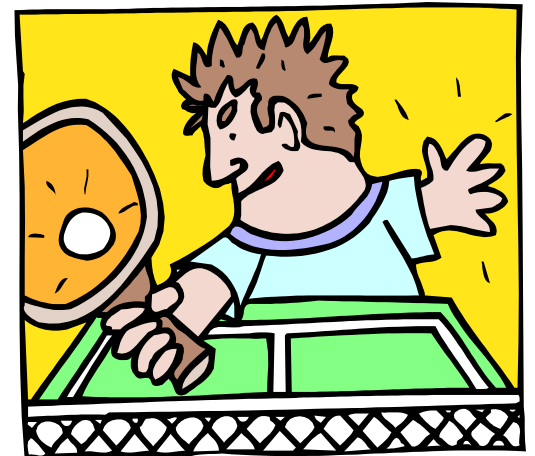


¿Cuál es la longitud de onda de De Broglie (en nm) de una pelota de ping-pong de 2.5 gramos de masa que tiene una velocidad constante de 15.6 m/s?

$$\lambda = h/mu \quad h \text{ en J}\cdot\text{s} \quad m \text{ en kg} \quad u \text{ en (m/s)}$$

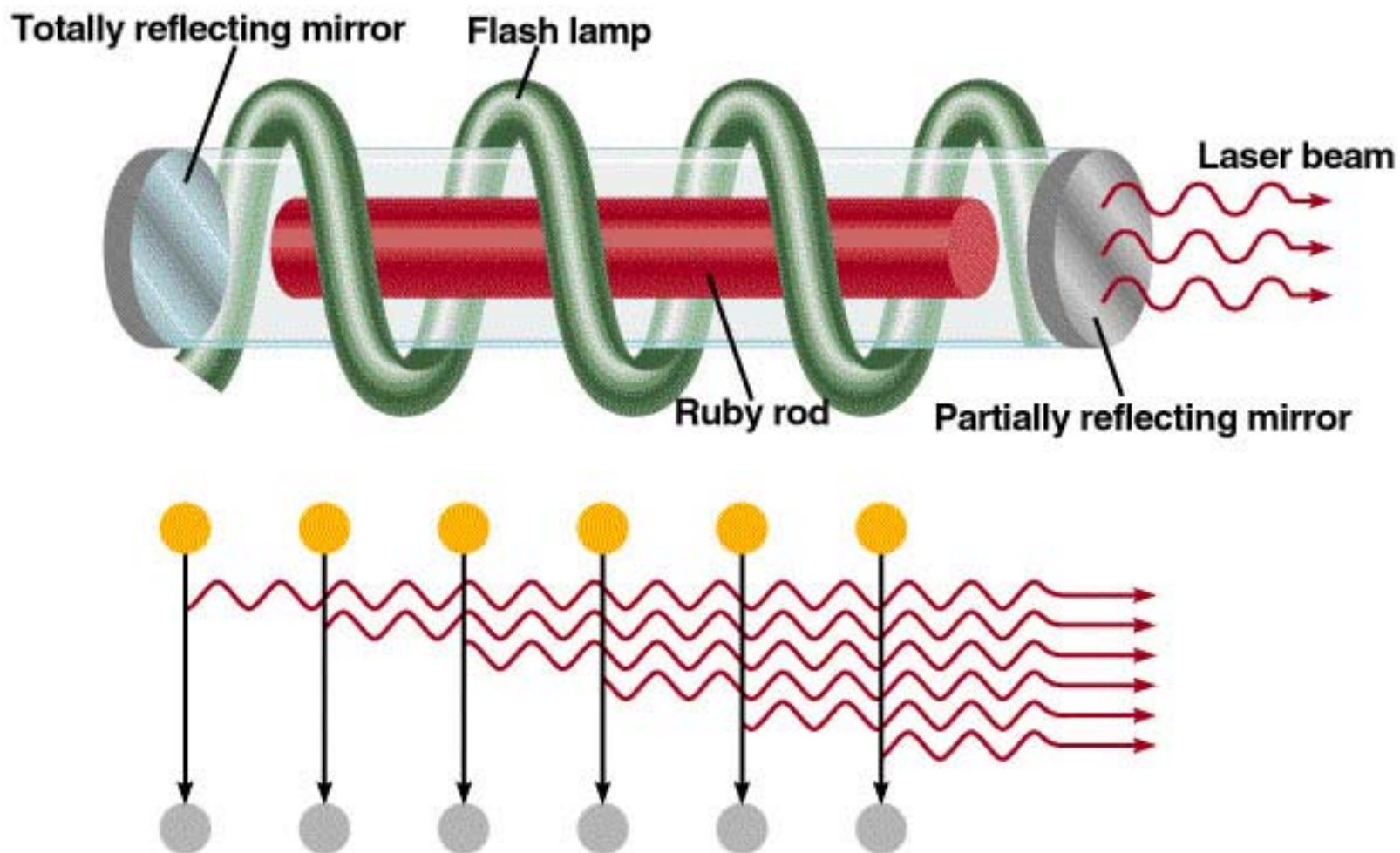
$$\lambda = 6.63 \times 10^{-34} / (2.5 \times 10^{-3} \times 15.6)$$

$$\lambda = 1.7 \times 10^{-32} \text{ m} = 1.7 \times 10^{-23} \text{ nm}$$



La química en acción:

El láser – una luz espléndida



La luz de un láser es: 1) intensa, 2) monoenergética, y 3) coherente

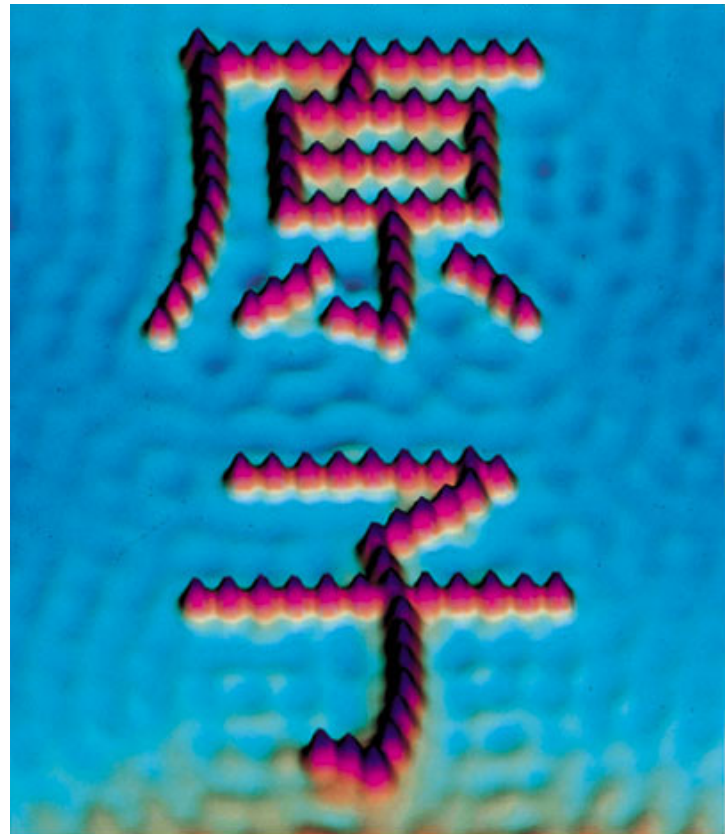
La química en acción: El microscopio electrónico

$$\lambda_e = 0.004 \text{ nm}$$

**Electron Micrograph of
Red Blood Cells**



**Átomos de hierro sobre una
superficie de cobre**



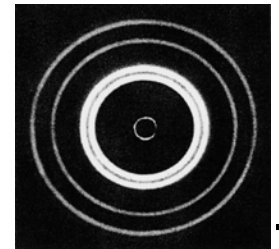
Ecuación de onda de Schrödinger

En 1926, Schrödinger descubrió una ecuación que describía la naturaleza de partícula y de onda de un electrón.

La ecuación de onda (Ψ) nos dice:

1. La energía de un e^- con base en un Ψ dado
2. La probabilidad de encontrar un e^- en un espacio definido

Dicha ecuación solo puede ser utilizada de forma exacta con un átomo de hidrógeno. Por otra parte, dicha ecuación aproxima los resultados de partículas con muchos electrones.



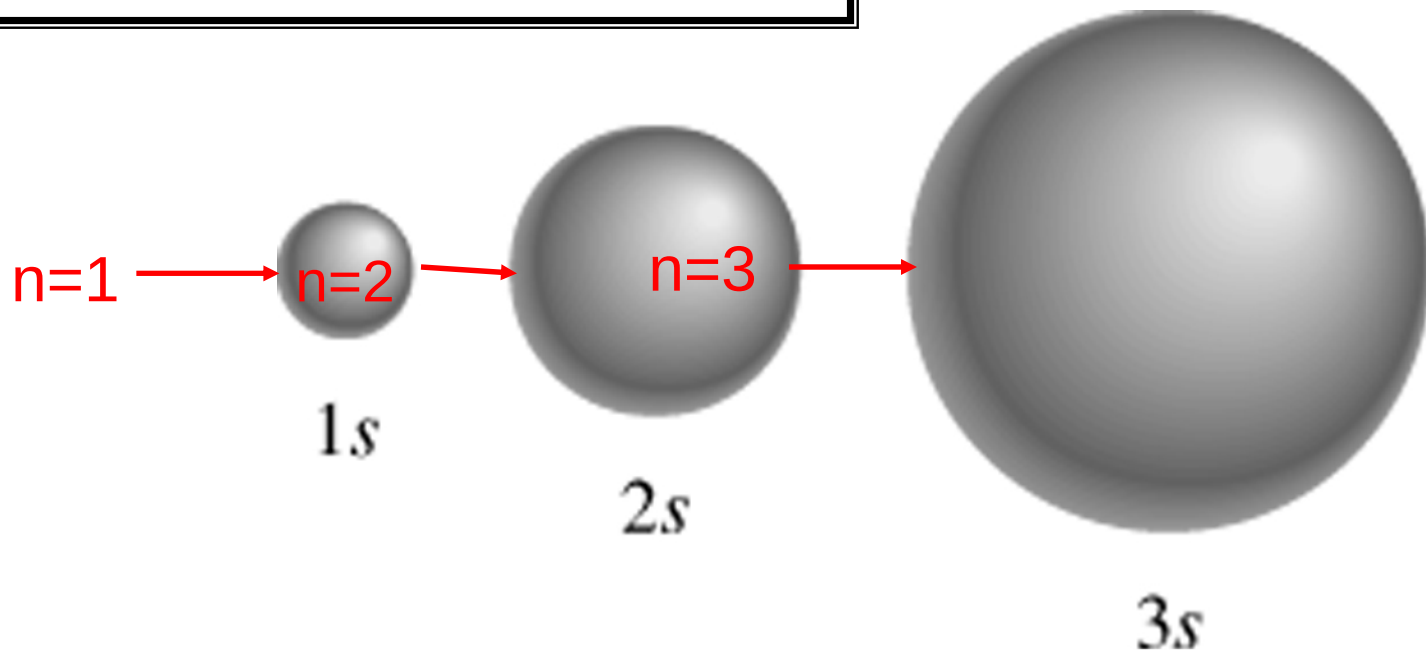
Ecuación de onda de Schrödinger

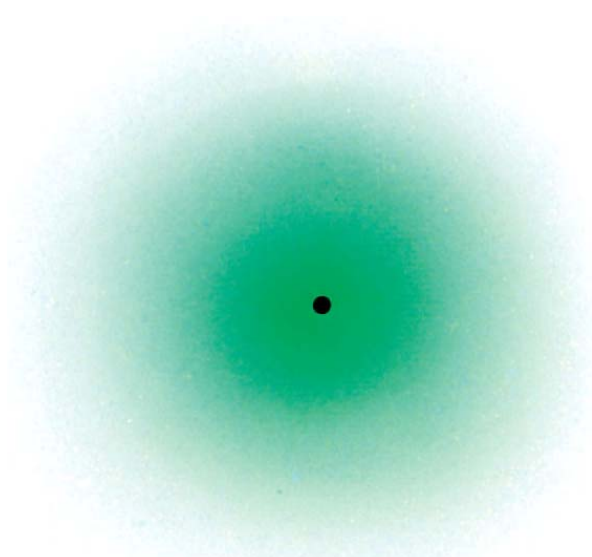
$$\Psi = \text{fn}(\mathbf{n}, l, m_l, m_s)$$

Número cuántico principal $\mathbf{n}$

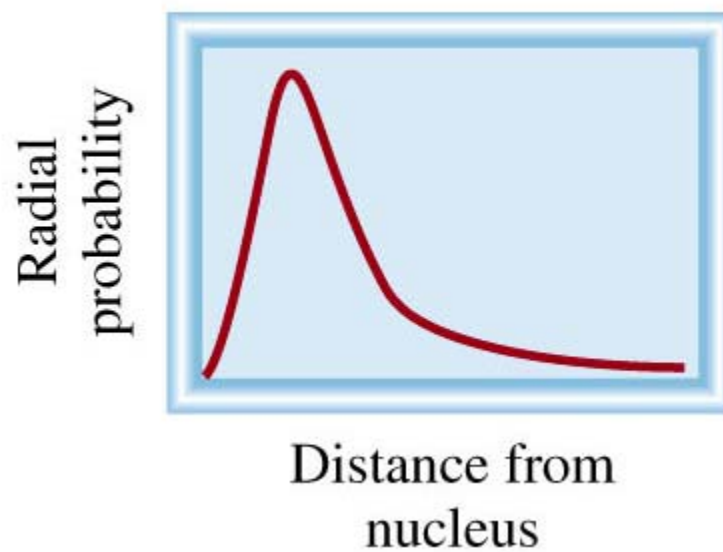
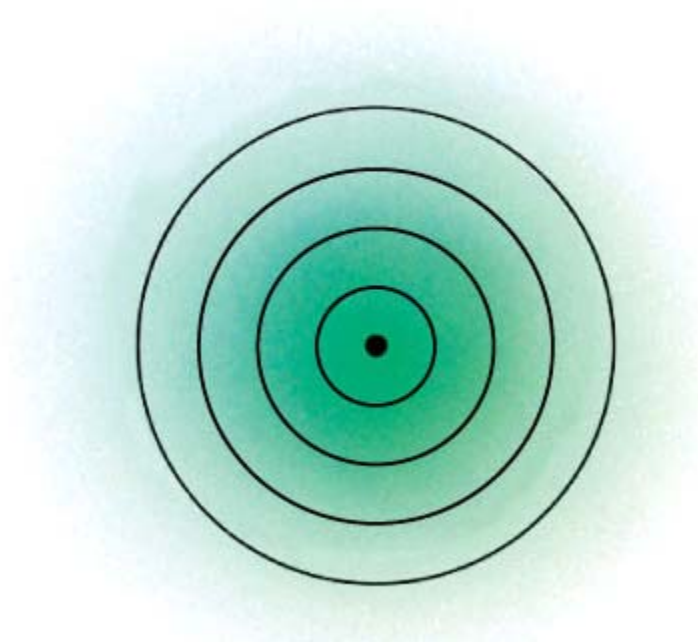
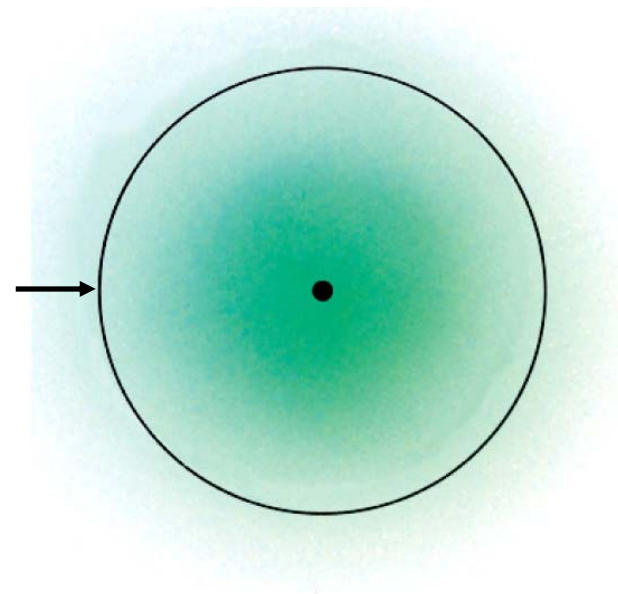
$$\mathbf{n} = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Distancia desde e^- hasta el núcleo





El 90% de los e^-
se encuentran en
el primer orbital



Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$$

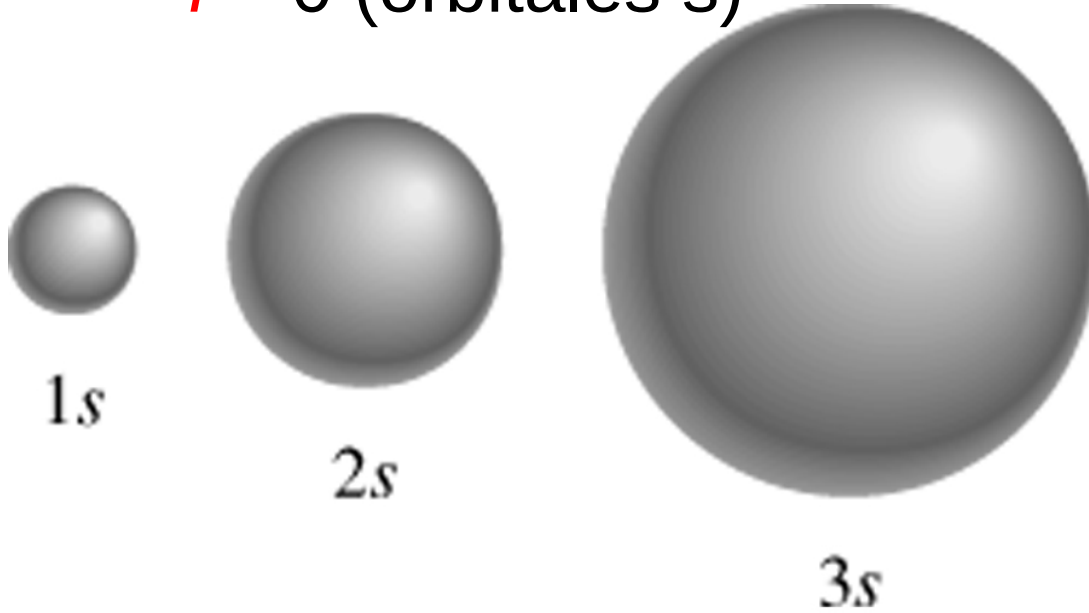
Número cuántico del momento angular l

Dado un valor n , $l = 0, 1, 2, 3, \dots n-1$

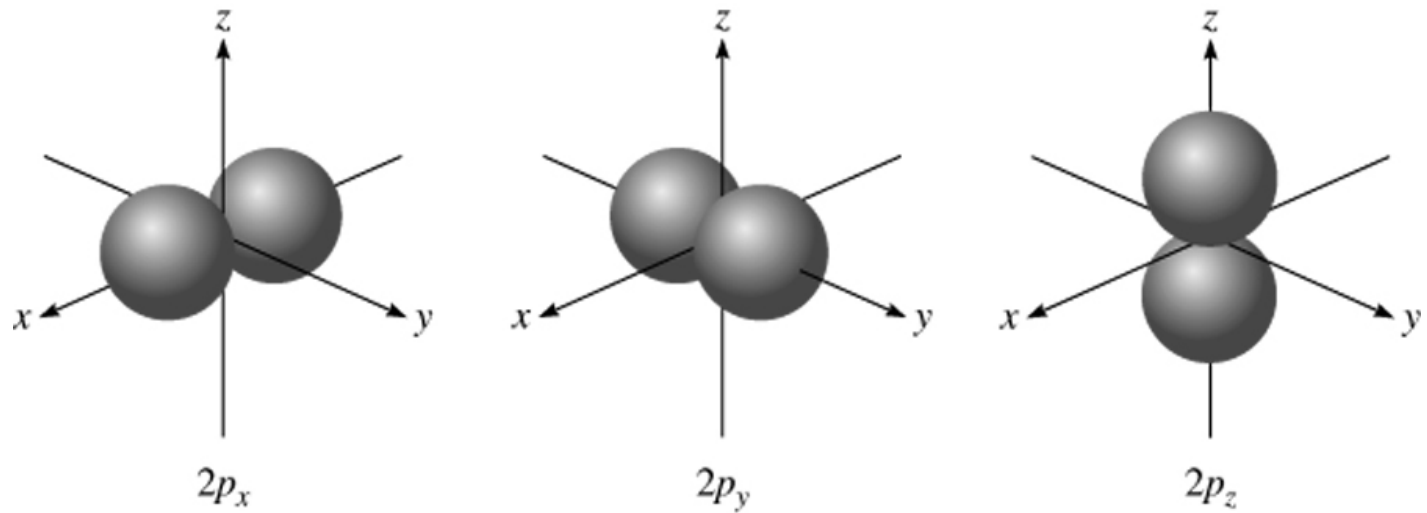
$n = 1, l = 0$	$l = 0$	orbital s
$n = 2, l = 0, 1$	$l = 1$	orbital p
$n = 3, l = 0, 1, 2$	$l = 2$	orbital d
	$l = 3$	orbital f

“volumen” de espacio que ocupan los e^-

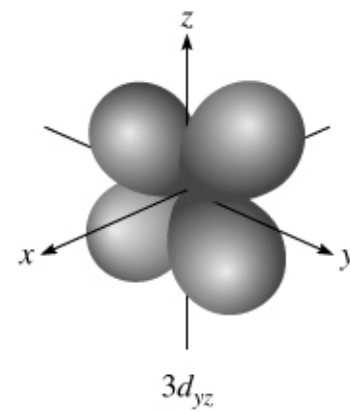
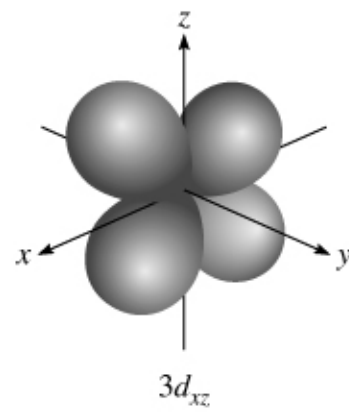
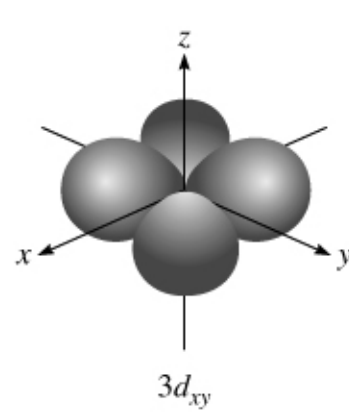
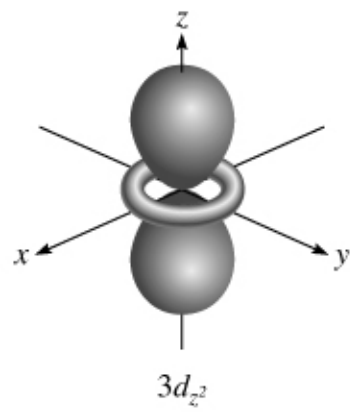
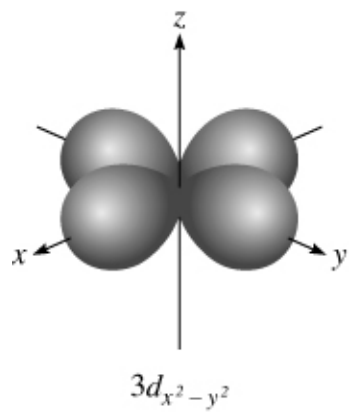
$l = 0$ (orbitales s)



$l = 1$ (orbitales p)



$l = 2$ (orbitales d)



Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$$

Número cuántico magnético m_l

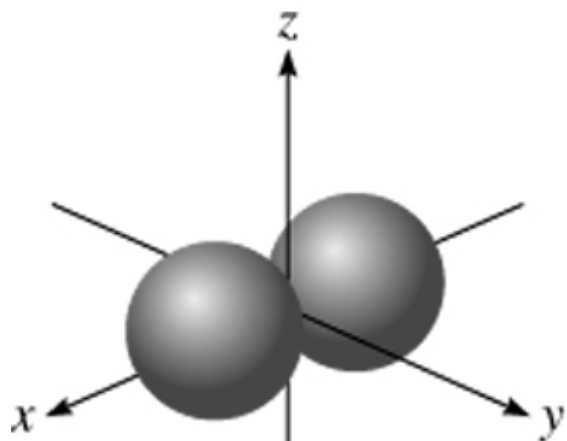
Dado un valor de l

$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

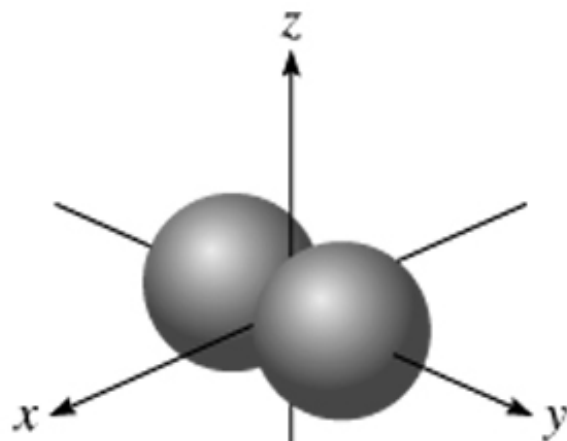
Si $l = 1$ (orbital p), $m_l = -1, 0, \text{ o } 1$

Si $l = 2$ (orbital d), $m_l = -2, -1, 0, 1, \text{ o } 2$

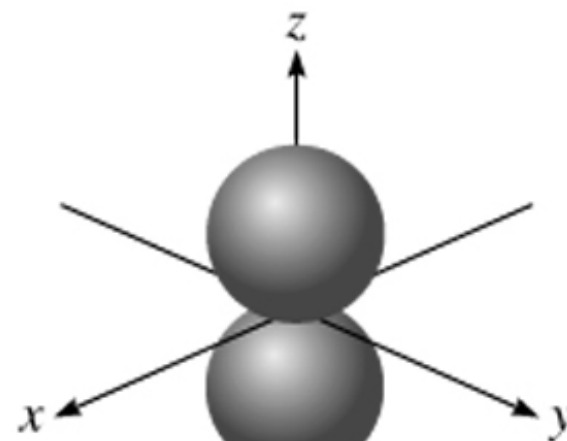
Orientación del orbital en el espacio



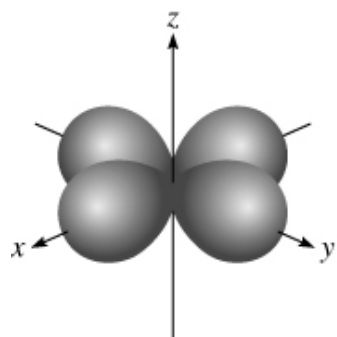
$$m_l = -1$$

 $2p_x$


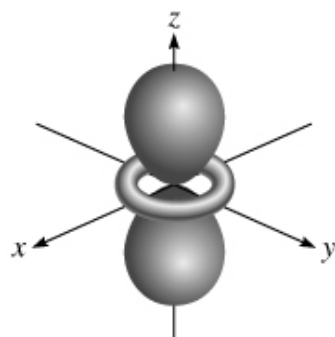
$$m_l = 0$$

 $2p_y$


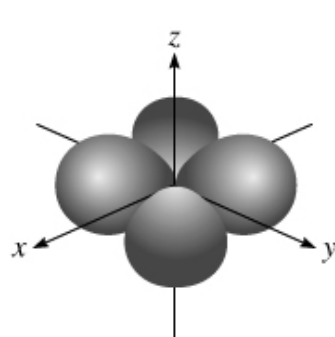
$$m_l = 1$$

 $2p_z$

 $3d_{x^2-y^2}$

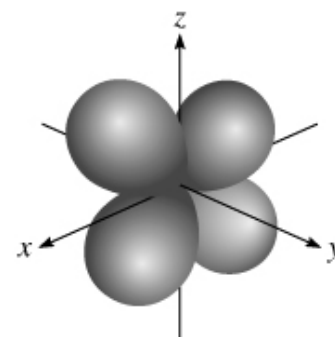
$$m_l = -2$$


 $3d_{z^2}$

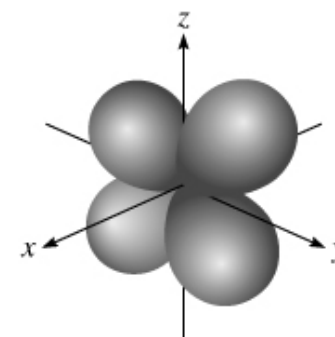
$$m_l = -1$$


 $3d_{xy}$

$$m_l = 0$$


 $3d_{xz}$

$$m_l = 1$$


 $3d_{yz}$

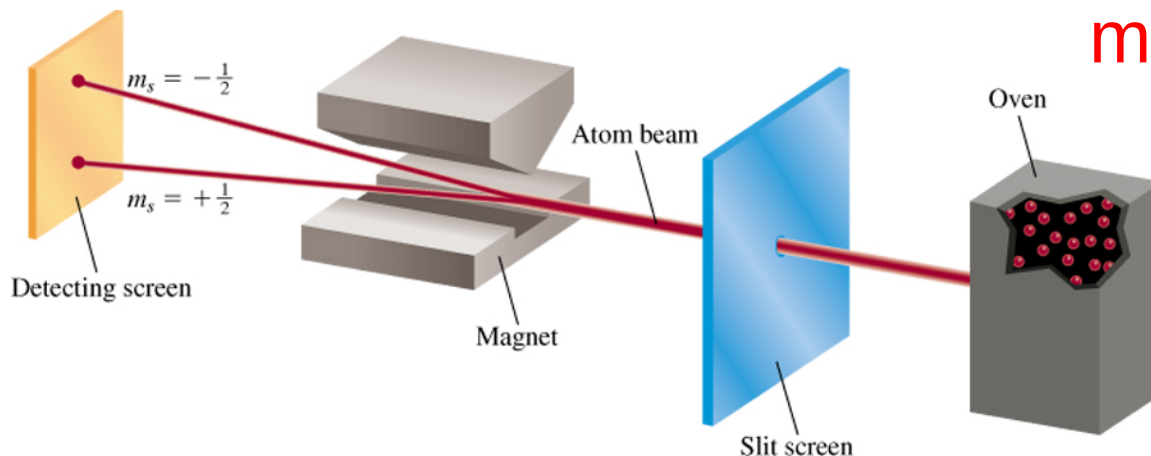
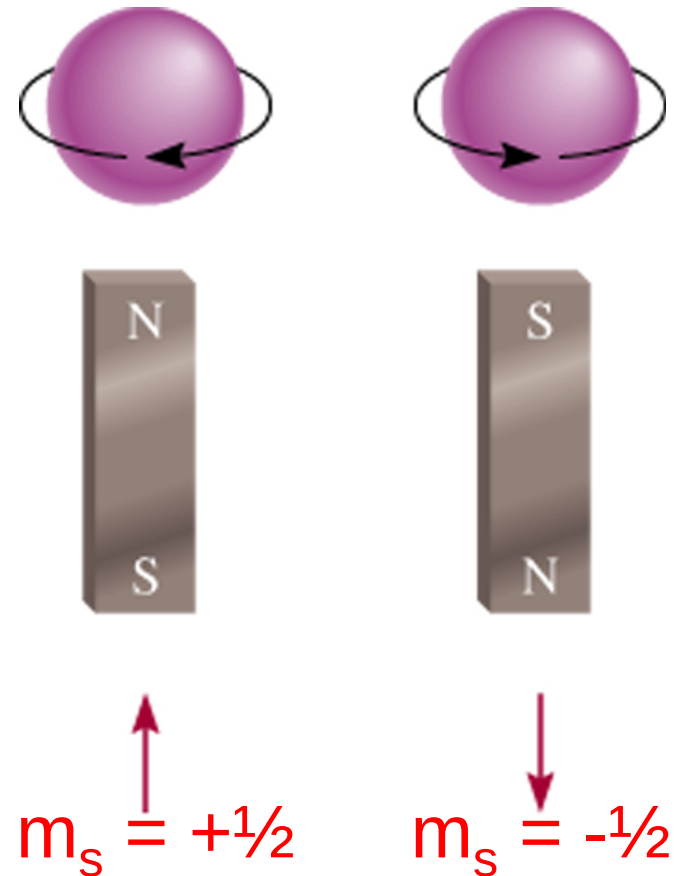
$$m_l = 2$$

Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$$

número cuántico de giro (spin) m_s

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



Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$$

La cantidad de energía contenida en un e⁻ en un átomo, puede ser descrita por su única función de onda, Ψ .

Principio de exclusión de Pauli – cada electrón en un átomo tiene sus propios números cuánticos, y no pueden existir dos e⁻ en el mismo átomo con los mismos valores



Cada asiento está identificado (E, R12, S8). En cada asiento sólo puede haber una persona a la vez.

TABLE 7.2**Relation Between Quantum Numbers and Atomic Orbitals**

n	ℓ	m_ℓ	Number of Orbitals	Atomic Orbital Designations
1	0	0	1	$1s$
2	0	0	1	$2s$
	1	$-1, 0, 1$	3	$2p_x, 2p_y, 2p_z$
3	0	0	1	$3s$
	1	$-1, 0, 1$	3	$3p_x, 3p_y, 3p_z$
	2	$-2, -1, 0, 1, 2$	5	$3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz},$ $3d_{x^2-y^2}, 3d_{z^2}$
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.

Ecuación de onda de Schrodinger

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$$

Nivel – electrones con el mismo valor de n

Subnivel – electrones con el mismo valor de n **y** l

Orbital – electrones con el mismo valor de n , l , **y** m_l



¿Cuántos electrones pueden existir en un orbital?

Si n , l , u m_l están definidas, entonces $m_s = \frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$

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

Un orbital puede contener 2 electrones



¿Cuántos orbitales “2p” hay en un átomo?

$n=2$



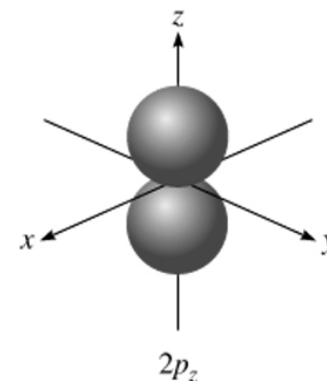
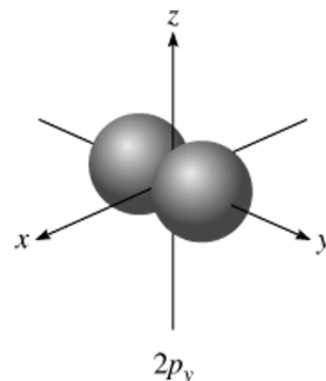
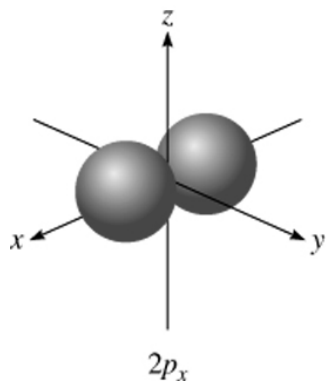
2p



$l=1$

Si $l = 1$, entonces $m_l = -1, 0, \text{ o } +1$

3 orbitales



¿Cuántos electrones pueden existir en el tercer subnivel?

$n=3$



3d



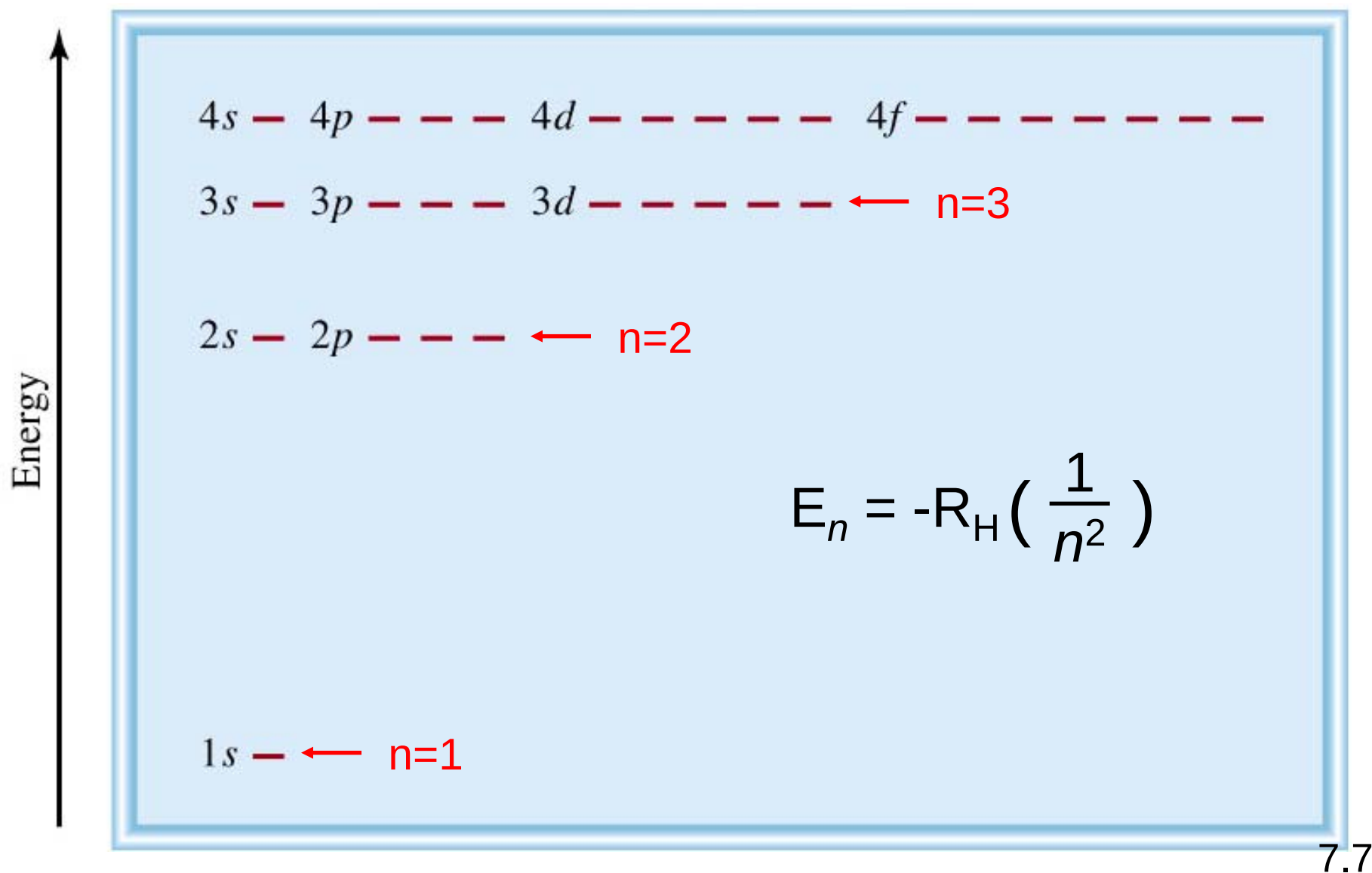
$l=2$

Si $l = 2$, entonces $m_l = -2, -1, 0, +1, \text{ or } +2$

5 orbitales que pueden contener un máximo de 10 e^-

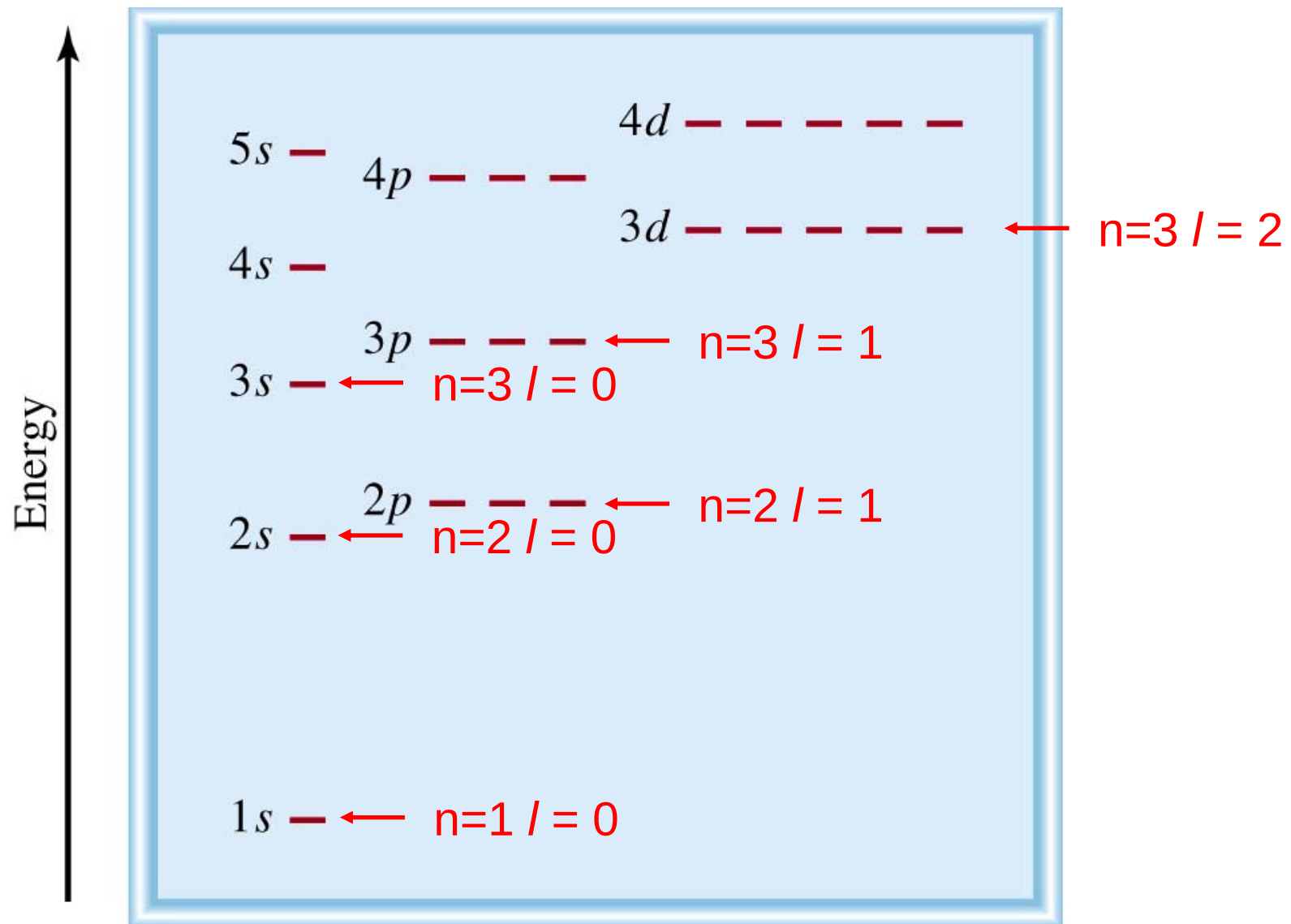
Energía en los orbitales con un solo electrón

La energía de un electrón es proporcional al número cuántico ***n***



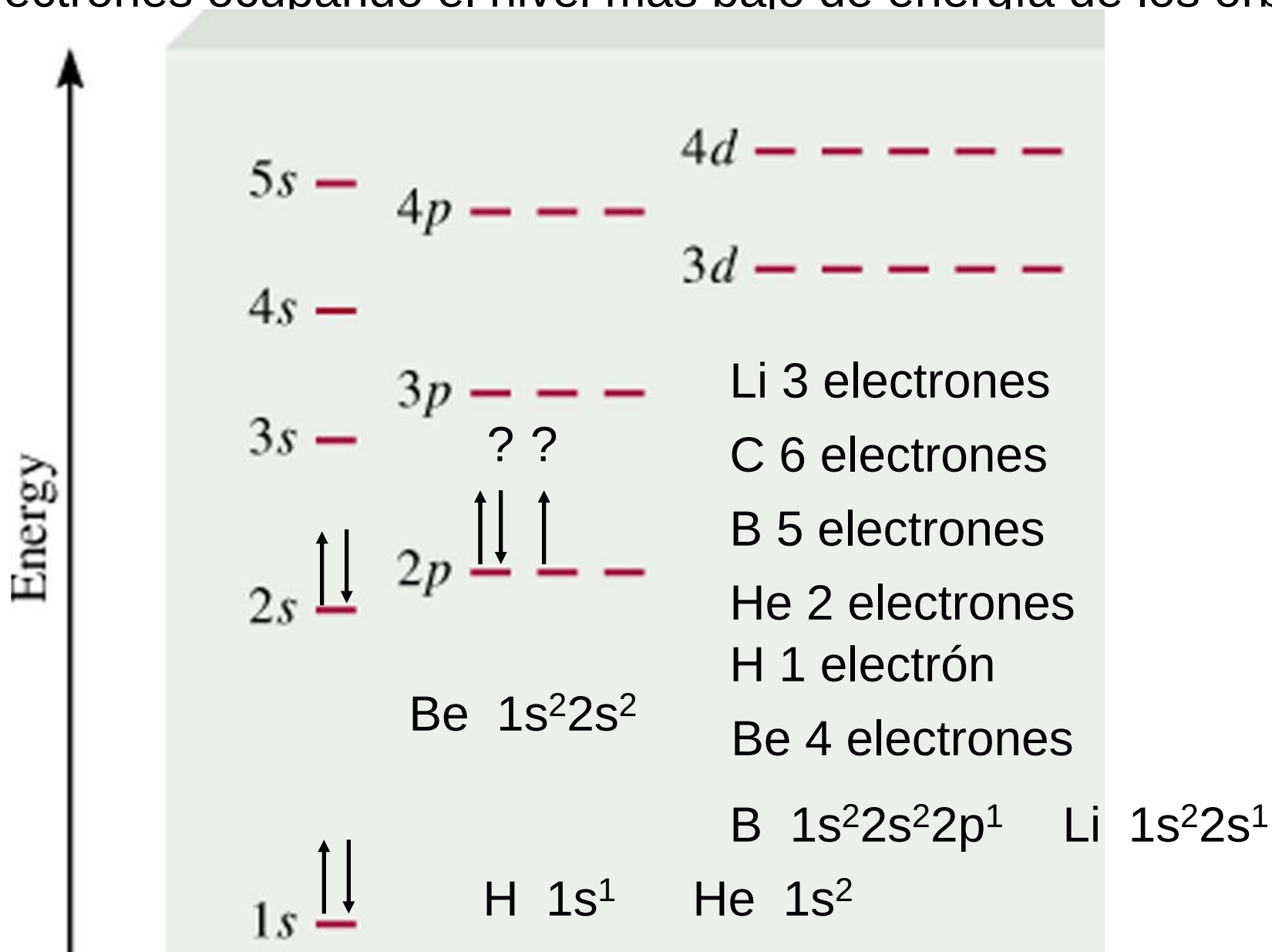
Energía en orbitales con varios electrones

La energía depende de $n + l$



Principio de *Aufbau*

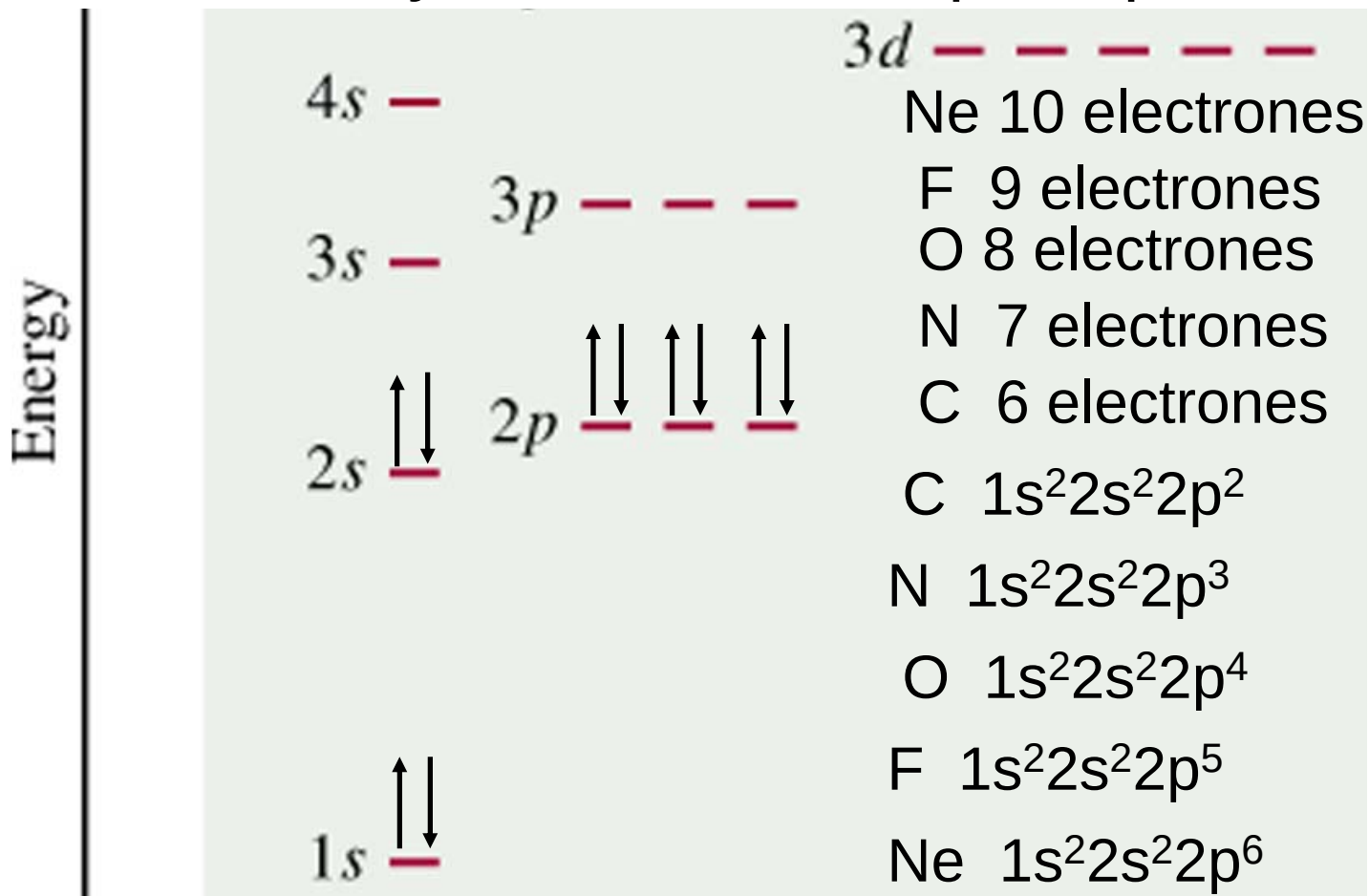
Electrones ocupando el nivel más bajo de energía de los orbitales



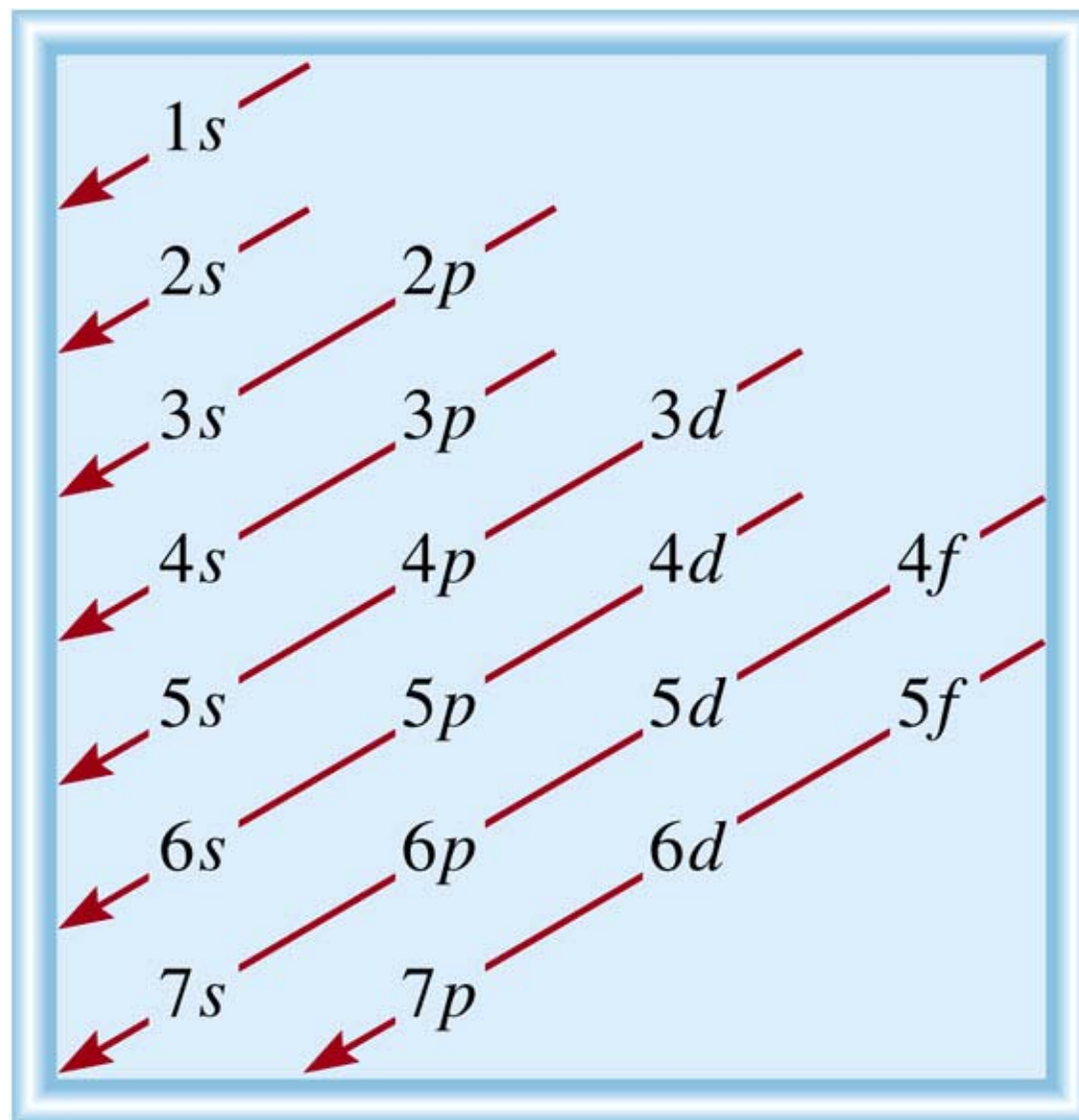


Regla de Hund

El arreglo más estable de electrones en los subniveles se logra cuando se tiene el mayor número de “spins” paralelos.



Orden que siguen los electrones al llenar los orbitales



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

La configuración electrónica explica cómo los electrones se distribuyen entre los diversos orbitales en un átomo.

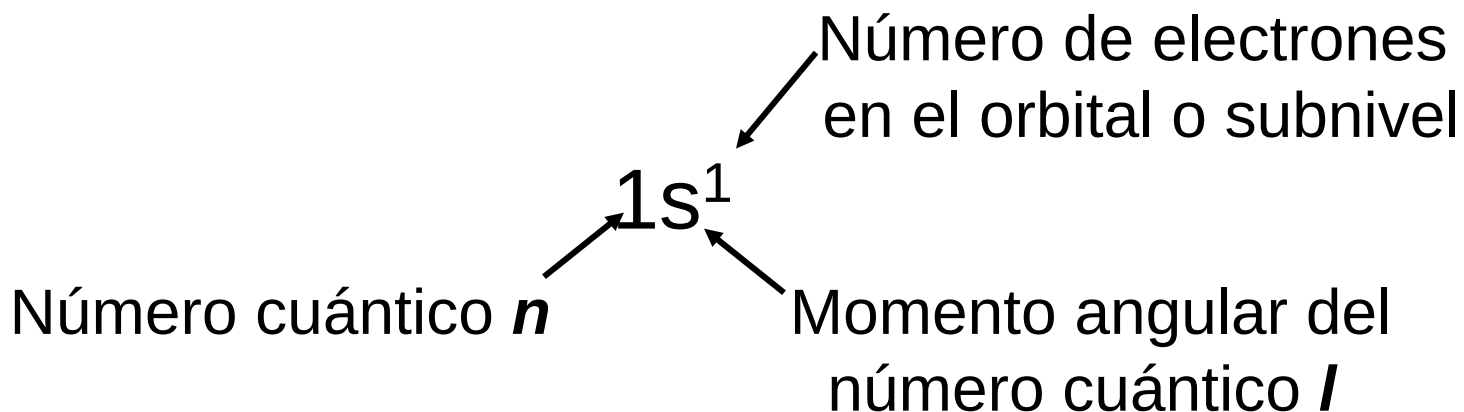
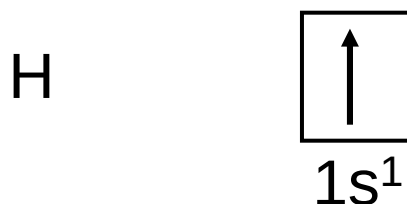
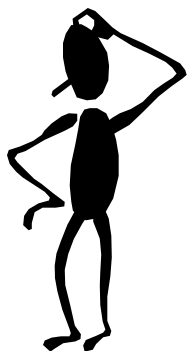


Diagrama de un orbital





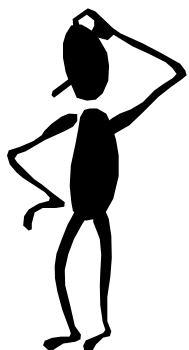
¿Cuál es la configuración electrónica del Mg?

Mg 12 electrones

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ $2 + 2 + 6 + 2 = 12$ electrones

Abreviándolo... [Ne] $3s^2$ [Ne] $1s^2 2s^2 2p^6$



¿Cuál es el número cuántico del último electrón para el Cl?

Cl 17 electrones $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ $2 + 2 + 6 + 2 + 5 = 17$ electrones

Último electrón en el orbital 3p

$n = 3$ $l = 1$ $m_l = -1, 0, \text{ or } +1$ $m_s = \frac{1}{2} \text{ or } -\frac{1}{2}$

Último subnivel de energía para los elementos

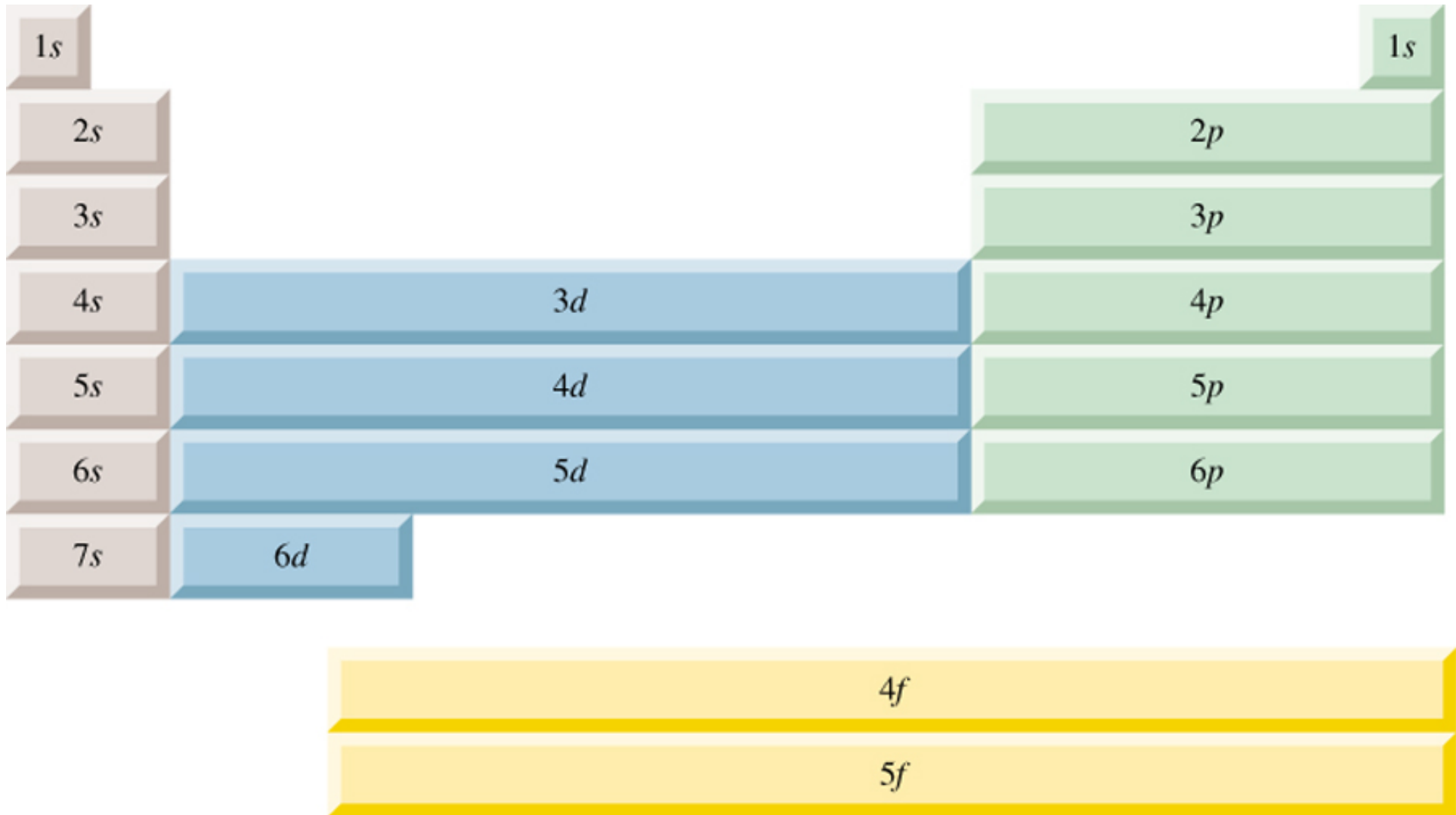


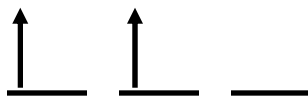
TABLE 7.3 The Ground-State Electron Configurations of the Elements*

Atomic Number	Symbol	Electron Configuration	Atomic Number	Symbol	Electron Configuration	Atomic Number	Symbol	Electron Configuration
1	H	$1s^1$	38	Sr	$[\text{Kr}]5s^2$	75	Re	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^5$
2	He	$1s^2$	39	Y	$[\text{Kr}]5s^2 4d^1$	76	Os	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^6$
3	Li	$[\text{He}]2s^1$	40	Zr	$[\text{Kr}]5s^2 4d^2$	77	Ir	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^7$
4	Be	$[\text{He}]2s^2$	41	Nb	$[\text{Kr}]5s^1 4d^4$	78	Pt	$[\text{Xe}]6s^1 4f^{14} 5d^9$
5	B	$[\text{He}]2s^2 2p^1$	42	Mo	$[\text{Kr}]5s^1 4d^5$	79	Au	$[\text{Xe}]6s^1 4f^{14} 5d^{10}$
6	C	$[\text{He}]2s^2 2p^2$	43	Tc	$[\text{Kr}]5s^2 4d^5$	80	Hg	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10}$
7	N	$[\text{He}]2s^2 2p^3$	44	Ru	$[\text{Kr}]5s^1 4d^7$	81	Tl	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^1$
8	O	$[\text{He}]2s^2 2p^4$	45	Rh	$[\text{Kr}]5s^1 4d^8$	82	Pb	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$
9	F	$[\text{He}]2s^2 2p^5$	46	Pd	$[\text{Kr}]4d^{10}$	83	Bi	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$
10	Ne	$[\text{He}]2s^2 2p^6$	47	Ag	$[\text{Kr}]5s^1 4d^{10}$	84	Po	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^4$
11	Na	$[\text{Ne}]3s^1$	48	Cd	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10}$	85	At	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^5$
12	Mg	$[\text{Ne}]3s^2$	49	In	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10} 5p^1$	86	Rn	$[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$
13	Al	$[\text{Ne}]3s^2 3p^1$	50	Sn	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10} 5p^2$	87	Fr	$[\text{Rn}]7s^1$
14	Si	$[\text{Ne}]3s^2 3p^2$	51	Sb	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10} 5p^3$	88	Ra	$[\text{Rn}]7s^2$
15	P	$[\text{Ne}]3s^2 3p^3$	52	Te	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10} 5p^4$	89	Ac	$[\text{Rn}]7s^2 6d^1$
16	S	$[\text{Ne}]3s^2 3p^4$	53	I	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10} 5p^5$	90	Th	$[\text{Rn}]7s^2 6d^2$
17	Cl	$[\text{Ne}]3s^2 3p^5$	54	Xe	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10} 5p^6$	91	Pa	$[\text{Rn}]7s^2 5f^2 6d^1$
18	Ar	$[\text{Ne}]3s^2 3p^6$	55	Cs	$[\text{Xe}]6s^1$	92	U	$[\text{Rn}]7s^2 5f^3 6d^1$
19	K	$[\text{Ar}]4s^1$	56	Ba	$[\text{Xe}]6s^2$	93	Np	$[\text{Rn}]7s^2 5f^4 6d^1$
20	Ca	$[\text{Ar}]4s^2$	57	La	$[\text{Xe}]6s^2 5d^1$	94	Pu	$[\text{Rn}]7s^2 5f^6$

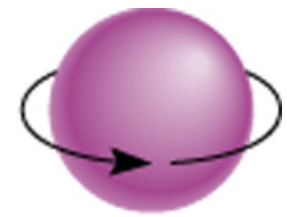
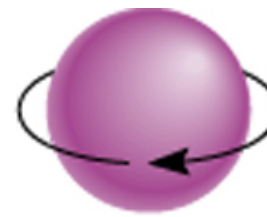


Paramagnético

Nivel semivació

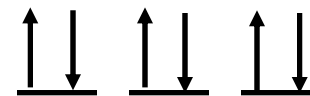


2p



Diamagnético

Nivel lleno



2p

Misterio de la química: El Helio

En 1898, Pierre Janssen descubrió una anomalía en el espectro solar conocido en esa época, el cual no concordaba con las líneas de emisión estudiadas en ese entonces.

Ese nuevo elemento fue llamado Helio

En 1895, William Ramsey descubrió el mismo elemento a partir de un trozo de uranio.

