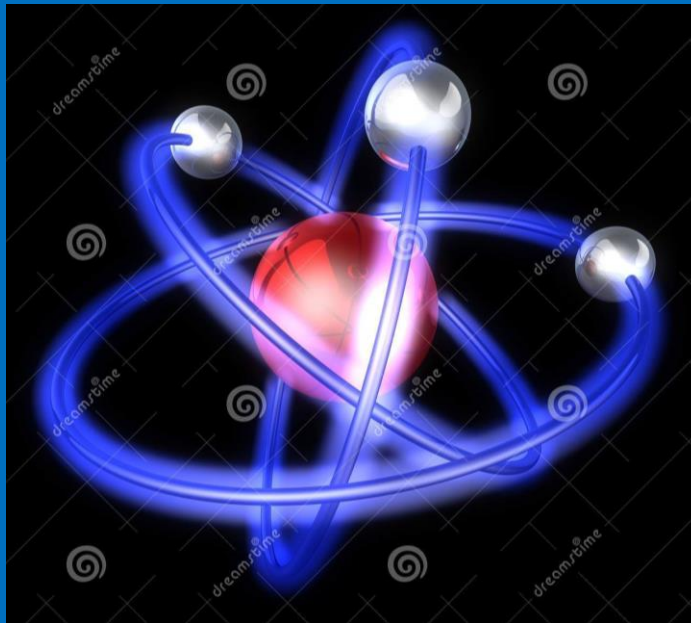


PERIFERIA ATÓMICA

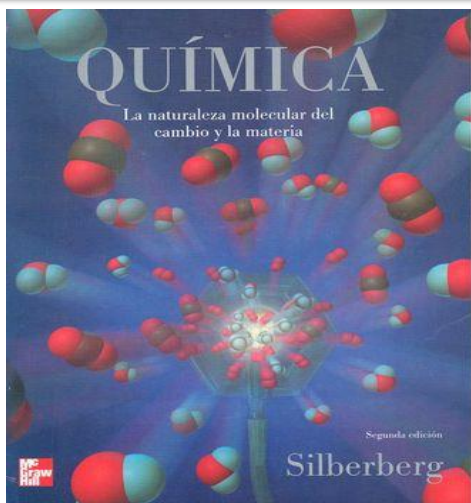


Dra. Ximena Camacho Damata

27 de Marzo de 2020

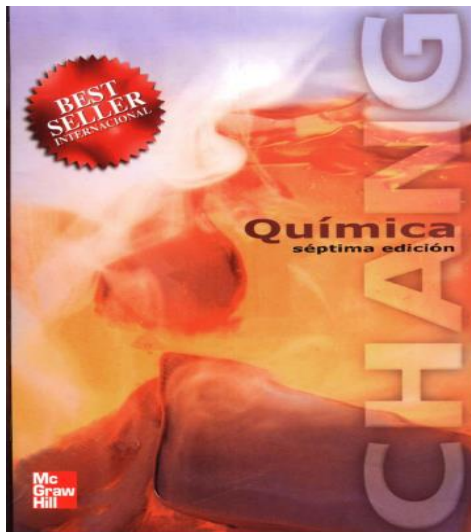
Curso de Química I
Facultad de Ciencias, Universidad de la República (UdelaR)

Bibliografía



Capítulos 2, 7 y 8

Teoría Cuántica y Estructura Atómica.



Capítulos 2 y 7

Teoría Cuántica y Estructura electrónica de los átomos.



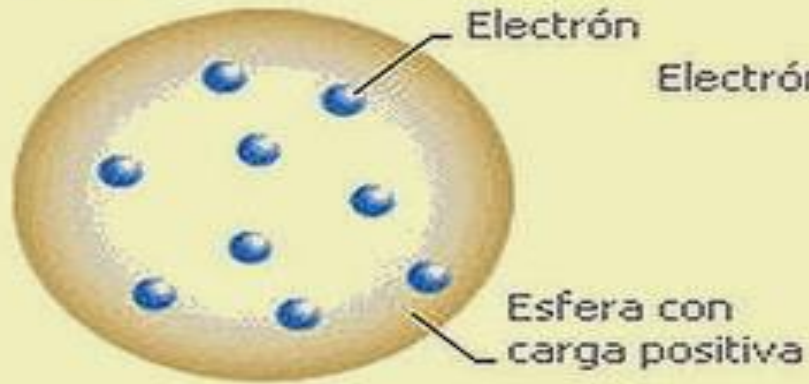
<https://biblo.timbo.org.uy/opac/#indice>

Registrarse: 15 días de préstamo

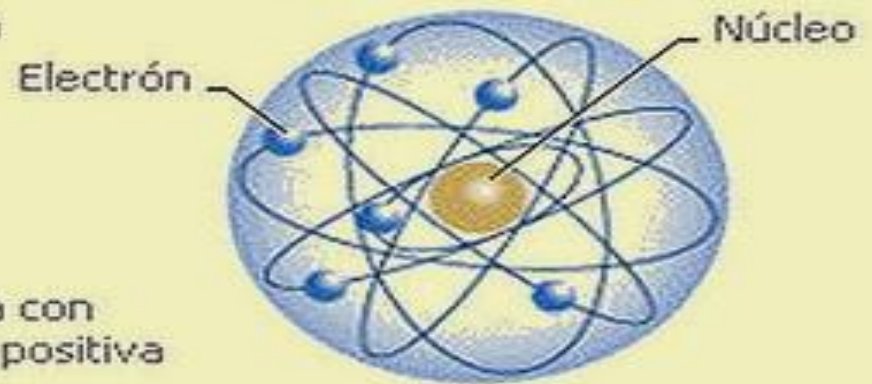
ANII AGENCIA NACIONAL DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN

Átomo

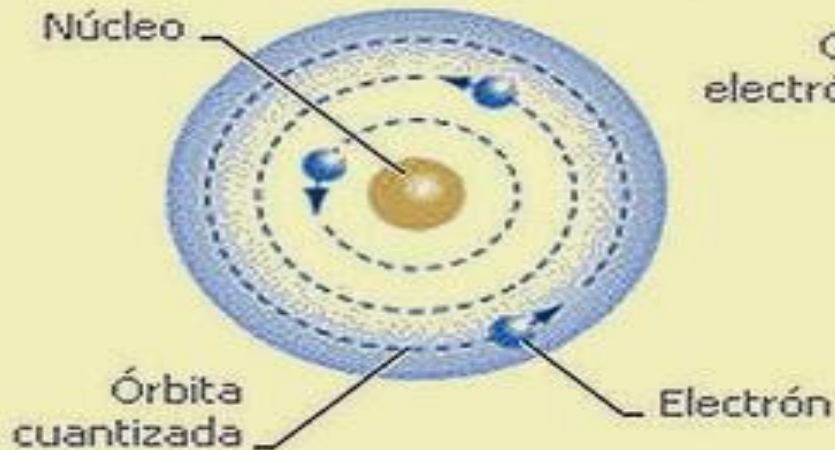
Átomo de Thomson (1898)



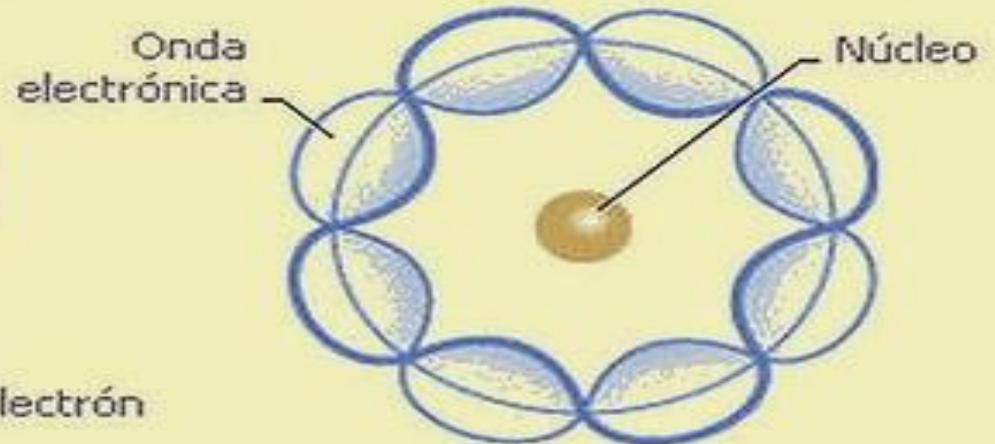
Átomo de Rutherford (1911)



Átomo de Bohr (1913)



Átomo de Schrödinger (1926)



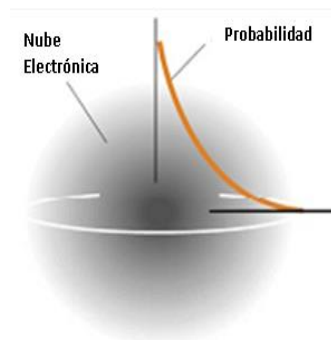
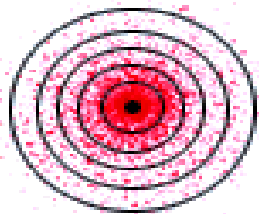
Modelo mecánico-cuántico del átomo de Hidrógeno: Ecuación de Schrödinger:

- **ÁTOMO:** “Posee ciertas cantidades de energías permitidas debido al movimiento ondulatorio permitido del electrón, cuya localización exacta es imposible conocer”.

$$H. \psi = E. \psi$$

FUNCIÓN DE ONDA: sin significado físico

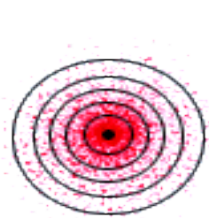
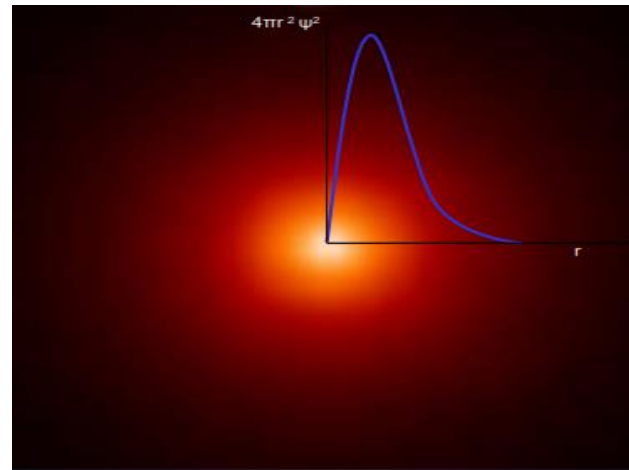
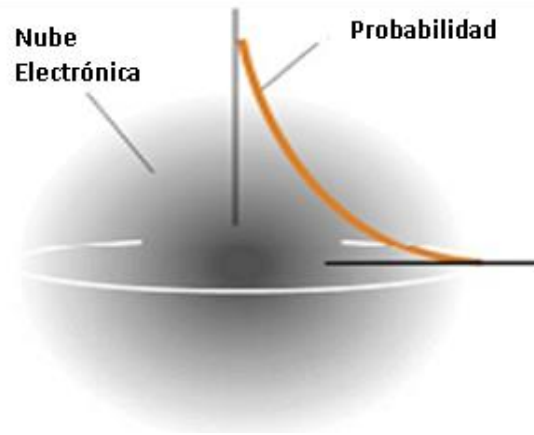
Cada solución se asocia a una función de onda: **ORBITAL ATÓMICO**



Distribución de probabilidad (ψ^2)

Diagrama de densidad de probabilidad electrónica: NUBE ELECTRÓNICA (zona donde la probabilidad de encontrar al electrón es máxima (90 %)).

Orbital Atómico



Orbital Atómico: Números cuánticos

□ **Número cuántico Principal (n):**

✓ $n = 1, 2, 3, \dots$

✓ **Nivel Principal de ENERGÍA** (o capa que ocupa el electrón) del Orbital ($a > n, > \text{nivel de E}$).

✓ Indica el **Tamaño** relativo de un orbital y por lo tanto la **DISTANCIA** relativa desde el núcleo hasta el pico máx. en la curva de distribución de probabilidad radial.

Orbital Atómico: Números cuánticos

□ Número cuántico de momento angular (l):

✓ $l = 0, 1, 2, \dots (n - 1)$

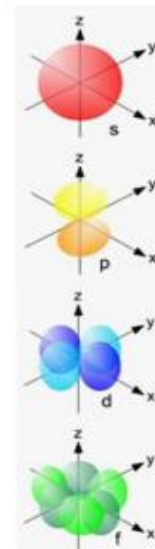
✓ Indica la **FORMA** del orbital y el **SUB-Nivel** (sub-capas) de Energía.

$l = 0$, subnivel s

$l = 1$, subnivel p

$l = 2$, subnivel d

$l = 3$, subnivel f



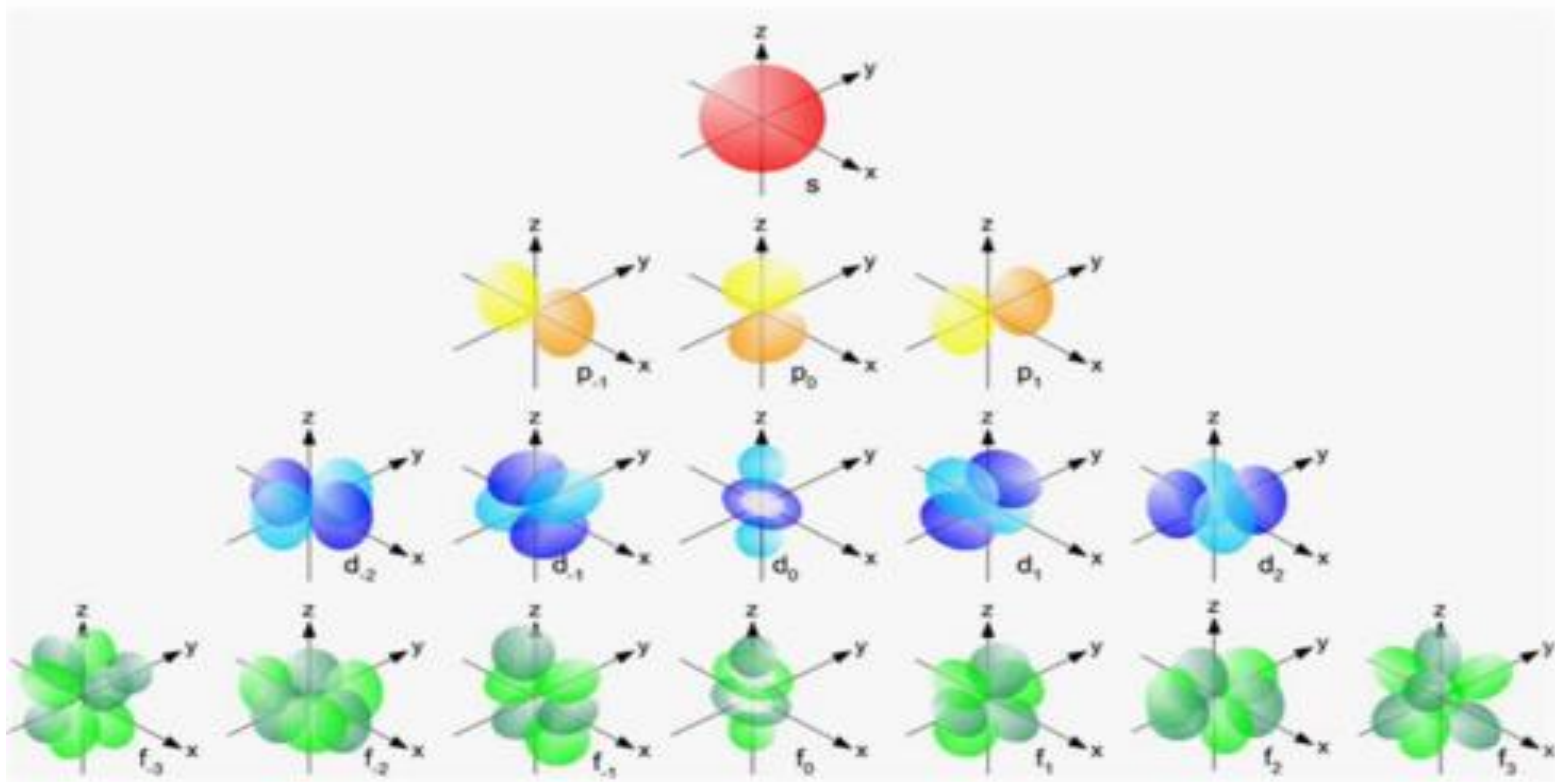
Orbital Atómico: Números cuánticos

□ **Número cuántico magnético (m_l):**

- ✓ $m_l = -l \dots 0 \dots +l$.
- ✓ Para cierto valor de l existen $(2l + 1)$ valores enteros de m_l
- ✓ Define la **Orientación** del orbital en el espacio alrededor del núcleo.
- ✓ **Define la cantidad de orbitales.**

Orbital Atómico: Números cuánticos

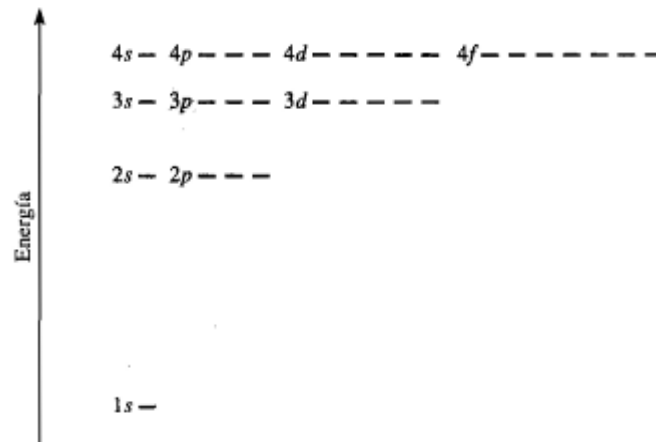
- **Según número cuántico magnético (m_l):** Define la cantidad de orbitales



Forma y Energía de los orbitales

	$s (l=0)$	$p (l=1)$			$d (l=2)$					$f (l=3)$						
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=\pm 3$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_z^3	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_z(x^2-y^2)$	$f_x(x^2-3y^2)$	$f_y(3x^2-y^2)$
n=1	•															
n=2	•															
n=3	•															
n=4																

Niveles de
Energía del
átomo de H



Ejemplo

- Cuál es el número total de orbitales asociados con el número cuántico principal $n = 3$?

Para $n = 3$:

l puede tomar valores: 0, 1 y 2.

Existen:

1 orbital 3s ($n = 3, l = 0, m_l = 0$)

3 orbitales 3p ($n=3, l = 1$ y $m_l = -1; 0$ y $+1$)

5 orbitales 3d ($n=3, l = 2$ y $m_l = -2; -1; 0; +1$ y $+2$)

Por lo tanto, N° total de orbitales: $1+3+5 = 9$

Átomos polielectrónicos

Al igual que el modelo de Bohr, la ecuación de Schrödinger no da soluciones exactas para átomos polielectrónicos. Pero, a diferencia del modelo de Bohr, da excelentes soluciones aproximadas.

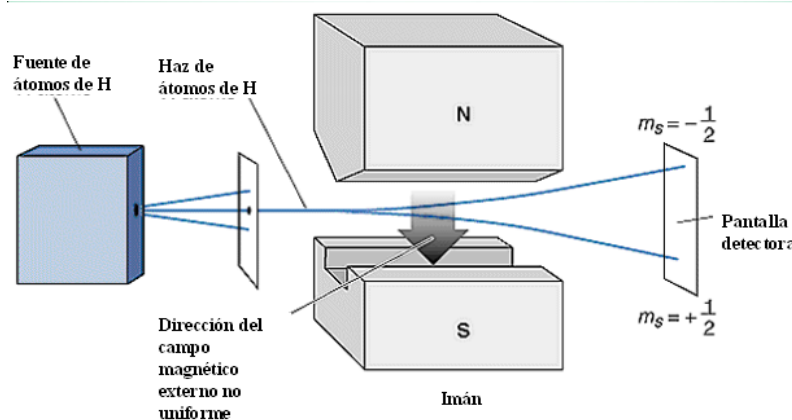
Átomos polieletrónicos

La existencia de más de un electrón en un átomo requiere considerar:

1. La necesidad de un 4^{to} número cuántico.
2. Un límite en el N^o de electrones permitidos en un orbital.
3. Un conjunto más complejo de orbitales en los niveles de energía.

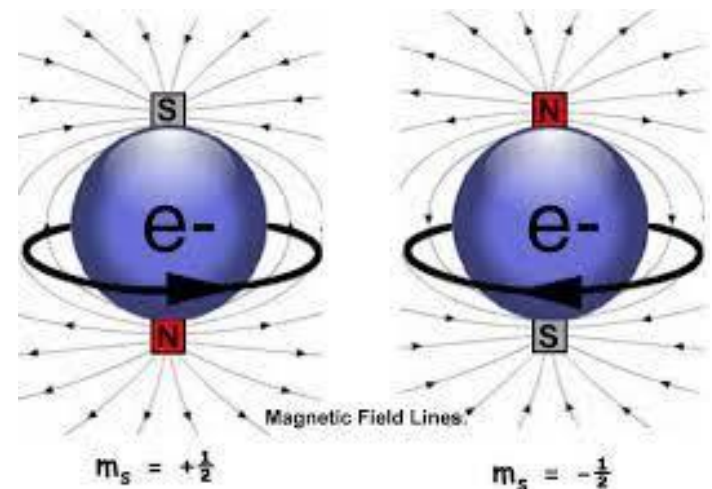
Número cuántico de espín del electrón

- Describe una propiedad intrínseca del electrón: *spín* (m_s)



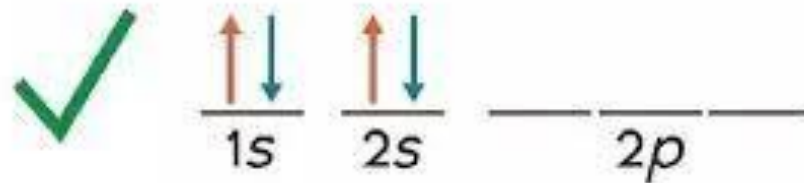
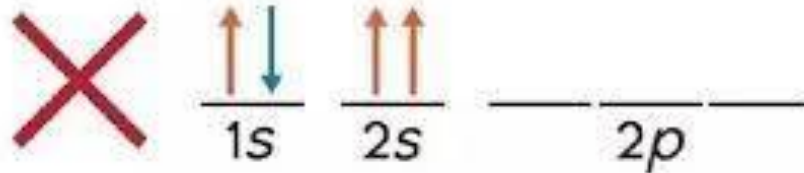
$$m_s = \pm 1/2$$

Indica la dirección del giro del electrón en su eje por la orientación del campo magnético que éste produce.



Principio de exclusión de Pauli

- 2 electrones en el mismo átomo no pueden tener los mismos cuatro números cuánticos.
- Un orbital atómico puede tener un máximo de 2 electrones con espines opuestos.



Valores permisibles de los números cuánticos hasta $n = 4$

n	l	m_l	m_s	Capacidad electrónica del subnivel = $4l + 2$	Capacidad electrónica del nivel de energía = $2n^2$
1 (K)	0 (1s)	0	+1/2, -1/2	2	2
2 (L)	0 (2s)	0	+1/2, -1/2	2	8
	1 (2p)	-1, 0, +1	$\pm 1/2$ para cada valor de m_l	6	
3 (M)	0 (3s)	0	+1/2, -1/2	2	18
	1 (3p)	-1, 0, +1	$\pm 1/2$ para cada valor de m_l	6	
	2 (3d)	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm 1/2$ para cada valor de m_l	10	
4 (N)	0 (4s)	0	+1/2, -1/2	2	32
	1 (4p)	-1, 0, +1	$\pm 1/2$ para cada valor de m_l	6	
	2 (4d)	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm 1/2$ para cada valor de m_l	10	
	3 (4f)	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$\pm 1/2$ para cada valor de m_l	14	

Efectos electroestáticos y la división de los niveles de Energía

1) Atracciones núcleo-electrón:

Efecto de la Carga nuclear (Z):

Si comparo el átomo de H (Z=1) con el ion He⁺ (Z=2): ambos tienen un electrón en orbital 1s, pero el electrón del ion He⁺ es atraído más fuertemente, lo que hace difícil removerlo y su orbital es más estable (menor energía).

Una carga nuclear alta (Z) disminuye la energía orbital por el incremento de las atracciones núcleo-electrón.

2) Repulsiones electrón-electrón.

Efecto Pantalla: un electrón adicional en el mismo nivel de energía reduce la carga nuclear a una carga nuclear efectiva:

$$Z_{\text{efec}} = Z - \sigma$$

(σ : Cte. de Apantallamiento: N^o de electrones entre el núcleo y el electrón considerado)

Asimismo, los electrones internos protegen a los externos más efectivamente que los del mismo subnivel.

Efectos electroestáticos y la división de los niveles de Energía

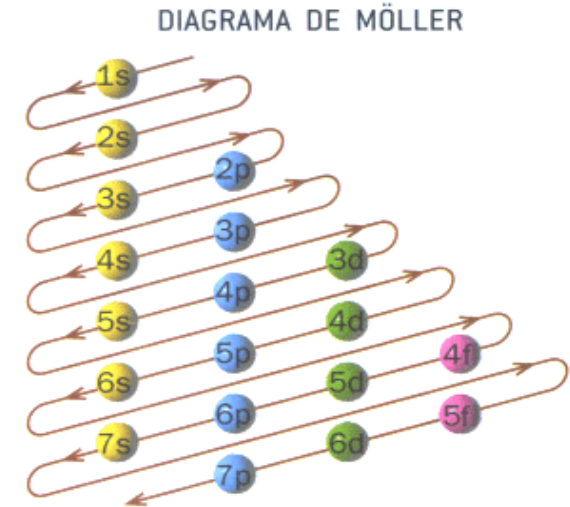
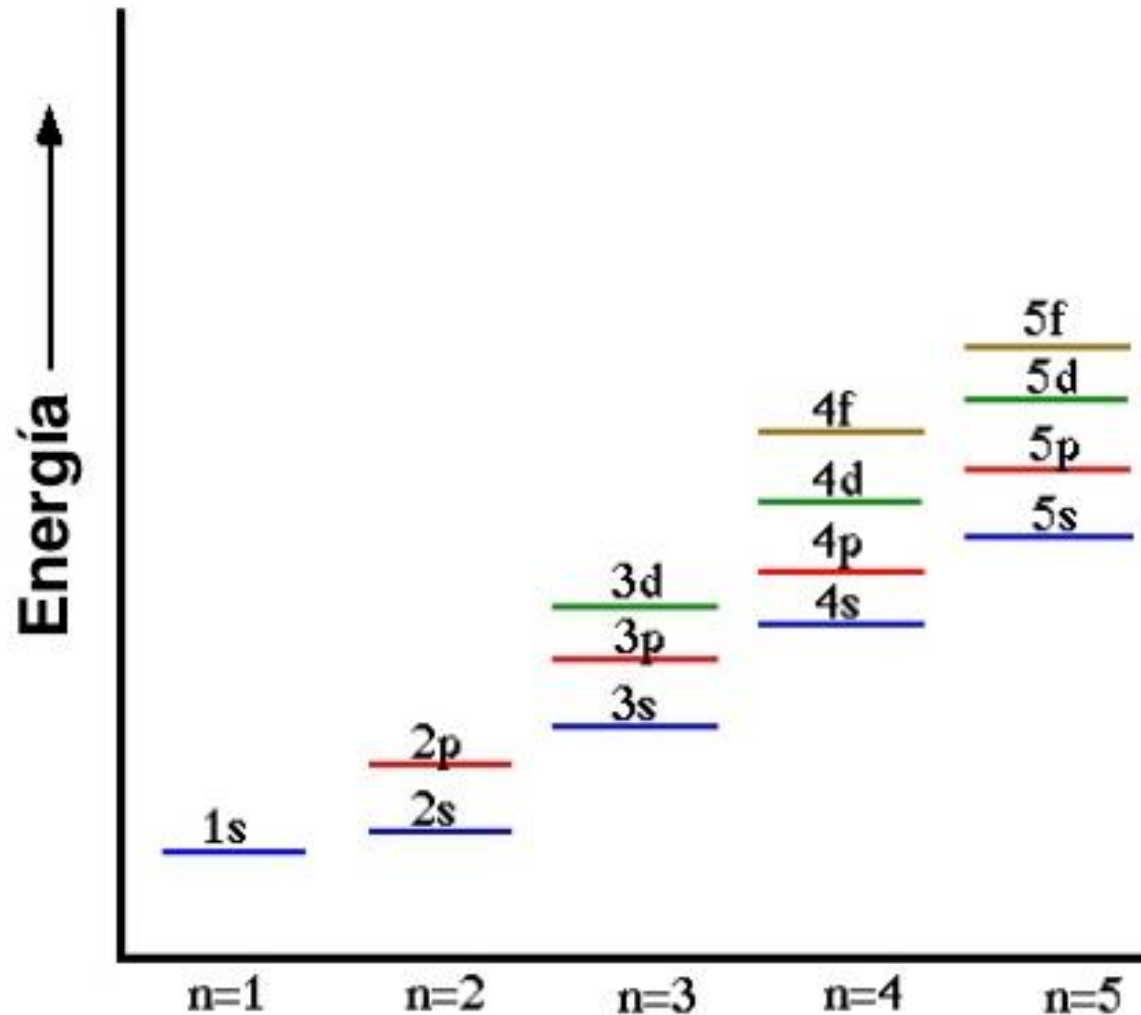
3) Forma del Orbital:

Efecto de Penetración:

Las diferencias en la distribución de probabilidad radial permiten diferencias en la penetración según:

$$ns < np < nd < nf \dots$$

Orden de llenado de subniveles de energía



Ejemplo

- **Comparación de las configuraciones electrónicas:**

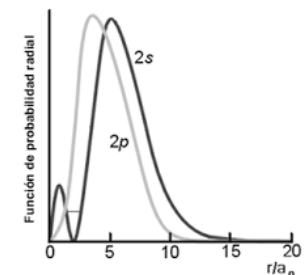
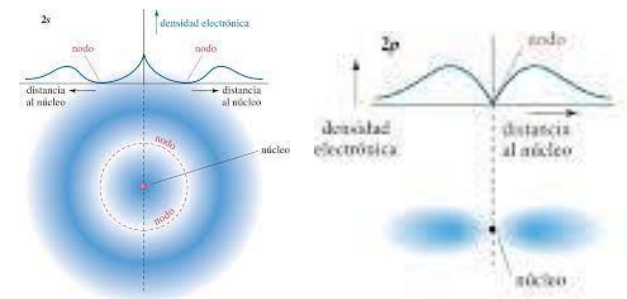
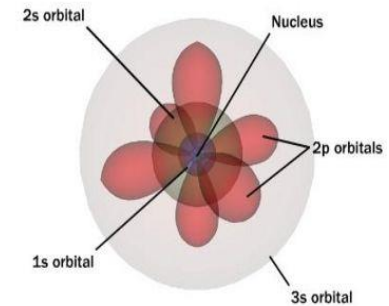


Porque el orbital 2s se encuentra en un nivel de energía menor que el orbital 2p?

Los orbitales **2s y 2p son más grandes que el 1s**, por lo cual si un electrón este situado en estos orbitales pasará más tiempo alejado del núcleo que un electrón en orbital 1s.

Por ello el electrón en orbital 2s o 2p está “apantallado” de la fuerza de atracción del núcleo por los electrones 1s; disminuyendo la atracción electrostática entre los protones del núcleo y el electrón del orbital 2s o 2p.

Además, la **densidad cerca del núcleo es mayor para un electrón en 2s que para uno en 2p** (por lo que un electrón en 2s pasa más tiempo cerca del núcleo que un electrón en 2p. **Por esto, se dice que el orbital 2s es “más penetrante” que el orbital 2p.**

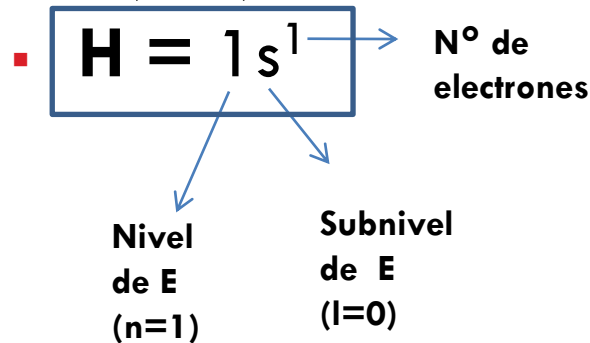


Configuración electrónica

□ Período 1 y 2:

Principio de AUFBAU: Cuando 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.

- **H (Z=1):** $n=1, l=0, m_l=0, m_s=+1/2$



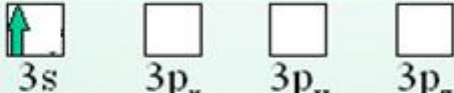
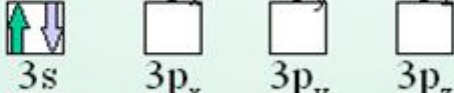
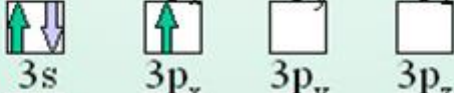





Regla de HUND: La distribución electrónica más estable en los subniveles es la que tiene el mayor n° de electrones no apareados con espines paralelos.

OJO!!!

Elemento	No. atómico	Diagrama de orbital 1s 2s 2p _x 2p _y 2p _z	Configuración electrónica
Hidrógeno	1	paramagnético	1s ¹
Helio	2	diamagnético	1s ²
Litio	3	paramagnético	1s ² 2s ¹
Berilio	4	diamagnético	1s ² 2s ²
Boro	5	diamagnético	1s ² 2s ² 2p ¹
Carbono	6	diamagnético	1s ² 2s ² 2p ²
Nitrógeno	7	diamagnético	1s ² 2s ² 2p ³
Oxígeno	8	diamagnético	1s ² 2s ² 2p ⁴
Flúor	9	diamagnético	1s ² 2s ² 2p ⁵
Neón	10	diamagnético	1s ² 2s ² 2p ⁶

Configuración electrónica

- **Período 3:** Se llenan en el orden 3s y 3p según nivel de E

Número atómico	Elemento	Diagrama de orbital de caja (3s v 3p)				Configuración electrónica condensada
11	Na					[Ne] 3s ¹
12	Mg					[Ne] 3s ²
13	Al					[Ne] 3s ² 3p ¹
14	Si					[Ne] 3s ² 3p ²
15	P					[Ne] 3s ² 3p ³
16	S					[Ne] 3s ² 3p ⁴
17	Cl					[Ne] 3s ² 3p ⁵
18	Ar					[Ne] 3s ² 3p ⁶

Configuración electrónica

- **Periodo 4 y 5:** aparecen orbitales $(n-1)d$ de las series de transición

n=4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
n=5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe



- **Periodo 6 y 7:** aparecen orbitales $(n-2)f$ de las series de elementos de transición interna (lantánidos y actínidos).

n=6	55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
n=7	87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt									

Bloque f

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Configuración electrónica

- Configuraciones electrónicas dentro de un grupo en la tabla:
Configuraciones electrónicas externas similares: **Comportamiento químico similar.**

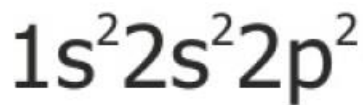
GRUPOS	CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA	FAMILIA
Grupo IA	ns^1	Metales Alcalinos
Grupo IIA	ns^2	Metales Alcalinotérreos
Grupo IIIA	$ns^2 np^1$	Del Boro
Grupo IVA	$ns^2 np^2$	Del Carbono
Grupo VA	$ns^2 np^3$	Del Nitrógeno
Grupo VIA	$ns^2 np^4$	Del Oxígeno o de los Calcógenos
Grupo VIIA	$ns^2 np^5$	De los Halógenos
Grupo VIIIA	$ns^2 np^6$	De los Gases Nobles

En un grupo, similitudes en el comportamiento químico reflejan similitudes en la distribución de los electrones en los orbitales más altos de energía.

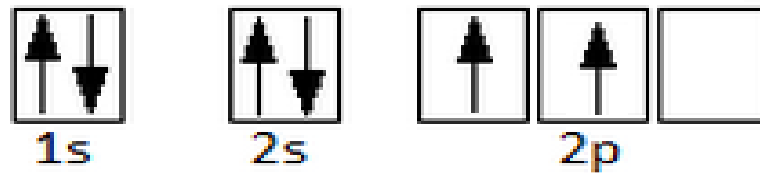
Configuración electrónica basal y excitada

- **Basal:** Configuración electrónica mas estable, aquella en que los electrones están distribuidos con la menor energía posible.
- **Excitada:** Configuración electrónica tras absorber energía se promueve uno o varios electrones a niveles mas altos de energía.

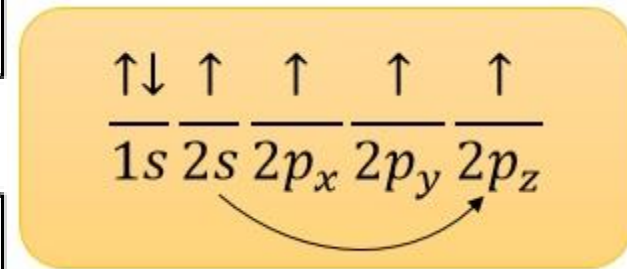
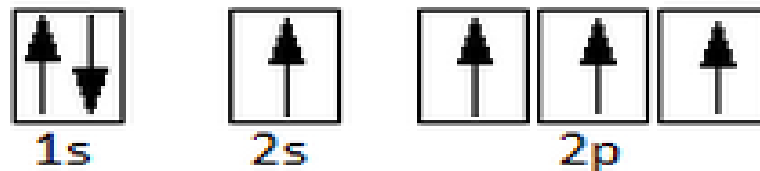
Para el átomo de Carbono ($Z = 6$)



Estado fundamental del carbono



Estado excitado del carbono

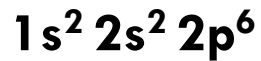


Ejemplos

- Escriba la configuración electrónica del azufre en su estado fundamental.

Azufre (S, Z=16), electrones = 16

Uso 10 electrones para completar 1^{er} y 2^{do} período:



Quedan 6 electrones:

Lleno el orbital 3s con 2 electrones y lleno parcialmente los orbitales 3p con 4 electrones:



1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H Hydrogen 1.008																	2 He Helium 4.0026
3 Li Lithium 6.94	4 Be Beryllium 9.0122											5 B Boron 10.81	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.998	10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.99	12 Mg Magnesium 24.305											13 Al Aluminum 26.981	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.06	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.956	22 Ti Titanium 47.887	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.63	33 As Arsenic 74.9216	34 Se Selenium 78.9718	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium 98	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.86	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.76	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90	54 Xe Xenon 131.29
55 Cs Cesium 132.90	56 Ba Barium 137.327	57-71 Lanthanides	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.94	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.222	78 Pt Platinum 195.084	79 Au Gold 196.967	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.38	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98	84 Po Polonium 209	85 At Astatine 210	86 Rn Radon 222
87 Fr Francium 223	88 Ra Radium 226	89-103 Actinides	104 Rf Rutherfordium 261	105 Db Dubnium 262	106 Sg Seaborgium 263	107 Bh Bohrium 264	108 Hs Hassium 265	109 Mt Meitnerium 266	110 Ds Darmstadtium 267	111 Rg Roentgenium 268	112 Cn Copernicium 269	113 Nh Nihonium 270	114 Fl Flerovium 271	115 Mc Moscovium 272	116 Lv Livermorium 273	117 Ts Tennessine 274	118 Og Oganesson 276
89 La Lanthanum 138.90	90 Ce Cerium 140.12	91 Pr Praseodymium 140.908	92 Nd Neodymium 144.242	93 Pm Promethium 145	94 Sm Samarium 150.36	95 Eu Europium 151.964	96 Gd Gadolinium 157.25	97 Tb Terbium 158.925	98 Dy Dysprosium 162.50	99 Ho Holmium 164.93	100 Er Erbium 167.259	101 Tm Thulium 168.93	102 Yb Ytterbium 173.054	103 Lu Lutetium 174.967			
105 Ac Actinium 227	106 Th Thorium 232.03	107 Pa Protactinium 231.04	108 U Uranium 238.03	109 Np Neptunium 237	110 Pu Plutonium 244	111 Am Americium 243	112 Cm Curium 247	113 Bk Berkelium 247	114 Cf Californium 251	115 Es Einsteinium 252	116 Fm Fermium 257	117 Md Mendelevium 258	118 No Nobelium 259	119 Lr Lawrencium 260			

Ejemplos

- Escriba la configuración electrónica de Fe^{2+} y de F^- en estado fundamental.

Fe^{2+} :

Para Fe ($Z = 26$): $[\text{Ar}]4s^23d^6$

Es un catión: Pierde 2 electrones del bloque s

$[\text{Fe}^{2+}]$: $[\text{Ar}]3d^6$

F^- :

Para F ($Z = 9$): $[\text{He}]2s^22p^5$

Es un anión: gana 1 electrón

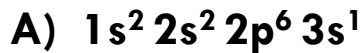
$[\text{F}^-]$: $[\text{Ne}]$

The image shows a periodic table of elements. The element Iron (Fe) is highlighted with a blue circle in the 4th period, 8th group. The element Fluorine (F) is highlighted with a blue circle in the 2nd period, 17th group. The table includes element symbols, names, and atomic numbers.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
H 1.008																	He 4.0026		
Li 6.94	Be 9.012											B 10.81	C 12.011	N 14.007	O 15.999	F 18.998	Ne 20.1797		
Na 22.990	Mg 24.305											Al 26.982	Si 28.086	P 30.974	S 32.06	Cl 35.45	Ar 39.948		
K 39.0983	Ca 40.078	Sc 44.956	Ti 47.887	V 50.942	Cr 51.9961	Mn 54.938	Fe 55.845	Co 58.933	Ni 58.6934	Cu 63.546	Zn 65.38	Ga 69.723	Ge 72.63	As 74.922	Se 78.9718	Br 79.904	Kr 83.798		
Rb 85.4678	Sr 87.62	Y 88.9058	Zr 91.224	Nb 92.906	Mo 95.94	Tc 98	Ru 101.07	Rh 102.905	Pd 106.42	Ag 107.868	Cd 112.414	In 114.818	Sn 118.710	Sb 121.760	Te 127.60	I 126.905	Xe 131.29		
Cs 132.905	Ba 137.327	[37-71]	Hf 178.49	Ta 180.948	W 183.84	Re 186.207	Os 190.23	Ir 192.222	Pt 195.084	Au 196.967	Hg 200.59	Tl 204.38	Pb 207.2	Bi 208.98	Po [209]	At [210]	Rn [222]		
Fr [223]	Ra [226]	[89-103]	Rf [261]	Db [262]	Sg [263]	Bh [264]	Hs [265]	Mt [266]	Ds [267]	Rg [268]	Cn [269]	Nh [270]	Fl [271]	Mc [272]	Lv [273]	Ts [274]	Og [284]		
La 138.905	Ce 140.12	Pr 140.908	Nd 144.24	Pm [145]	Sm 150.36	Eu 151.964	Gd 157.25	Tb 158.925	Dy 162.50	Ho 164.930	Er 167.258	Tm 168.930	Yb 173.054	Lu 174.967					
Ac [227]	Th [232]	Pa [231]	U [238]	Np [237]	Pu [244]	Am [243]	Cm [247]	Bk [247]	Cf [251]	Bk [251]	Es [252]	Fm [257]	Md [258]	No [259]	Lr [260]				

Ejemplos

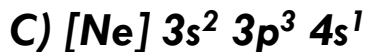
- Señale en cada una de las configuraciones electrónicas siguientes cuál corresponde a átomos en estado fundamental, excitados o es imposible.



Sodio (Na; Z = 11) en Estado fundamental.



Esta configuración es imposible puesto que en el nivel $n = 2$ **NO PUEDEN EXISTIR ORBITALES "d"**.



La configuración electrónica $[Ne] 3s^2 3p^4$ sería el Azufre (S; Z = 16), por lo cual esta configuración corresponde al **S excitado**.

Configuración electrónica

Grupos →

Períodos ↓

Bloque s												No Metales y Metaloides		Bloque p						
1s	1 H	Metales Alcalinos y Alcalinotérreos										1s	2 He							
2s	3 Li	4 Be	Metales de Transición										2p	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3s	11 Na	12 Mg	Bloque d										3p	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4s	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	3d	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	4p	34 Se	35 Br	36 Kr
5s	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	4d	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	5p	52 Te	53 I	54 Xe
6s	55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	5d	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	6p	84 Po	85 At	86 Rn
7s	87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	6d	108 Hs	109 Mt										
Bloque f																				
Elementos de transición interna (Lantánidos y Actínidos)																				
4f	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu						
5f	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr						



Entorno
Virtual de
Aprendizaje

MUCHAS GRACIAS

Tarea 1: Comienza 20/03 Hora 20