

Material complementario PRÁCTICO 2

Algunos datos sobre las partículas atómicas ...

Masa de las diferentes partículas		Carga eléctrica de las diferentes partículas	
protón:	1.0073 u	protón:	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C (+ 1)}$
electrón:	$5.486 \times 10^{-4} \text{ u}$	electrón:	$-1.602 \times 10^{-19} \text{ C (- 1)}$
neutrón:	1.0087 u	neutrón:	elemento neutro

Unidad de masa atómica: **u**, $1 \text{ u} = 1.66053 \times 10^{-24} \text{ g}$

Una carga electrónica $\equiv 1.602 \times 10^{-19} \text{ C (e)}$

Prefijos de Unidades

p	n	μ	m	c	d	k	M	G
pico-	nano-	micro-	mili-	centi-	deci-	kilo-	mega-	giga-
10^{-12}	10^{-9}	10^{-6}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	10^3	10^6	10^9

Algunas Conversiones...

- De Longitud $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$
- Unidad de Energía
 - Unidad SI: Joule, J
 - 1 cal = 4.184 J
 - 1 eV = $1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$

Naturaleza ondulatoria de la luz

Velocidad de la luz (c) = $2.99792458 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

$$c = v \times \lambda \quad \text{o} \quad v = c / \lambda$$

v – frecuencia, número de ciclos que una onda experimenta por segundo

λ – longitud de onda, es la distancia entre cualquier punto sobre una onda y el punto correspondiente en la onda siguiente

Cuantización de la energía (Planck)

$$E = n \cdot h \cdot v$$

n es un número entero positivo, denominado número cuantico.

h = constante de Planck = $6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

$\Delta E_{\text{átomo}} = E_{\text{radiación emitida (o absorbida)}} = \Delta \cdot n \cdot h \cdot v$

Espectros atómicos

Estados de energía del átomo de hidrógeno y átomos hidrogenoides

$$E = h \cdot v = \frac{h \cdot c}{\lambda} = R_H (Z^2) \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

R_H : $-2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$

$n_1 = n_{\text{final}}$
 $n_2 = n_{\text{inicial}}$

Radio de Bohr:

$$r = a_0 \cdot n^2 / Z$$

a_0 = radio de Bohr = 5.29×10^{-11} m

Dualidad Onda Partícula y Principio de Incertidumbre

Louis De Broglie $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$ Werner Heisenberg $\Delta x \cdot \Delta p = \Delta x \cdot m \cdot \Delta v \geq h/4\pi$

Modelo atómico actual ...

En 1926 Erwin Schrödinger formula la llamada ecuación de onda de Schrödinger, que describe el comportamiento y la energía de las partículas submicroscópicas. Es una función que incorpora tanto el carácter de partícula (en función de la masa) como el carácter de onda en términos de una función de onda φ .

Cada solución de la ecuación de Schrödinger se asocia con una función de onda dada llamada orbital atómico. El orbital no tiene significado físico, sin embargo el cuadrado de la función de onda φ^2 expresa la probabilidad de que un electrón se encuentre en un punto en particular dentro del átomo.

Mientras que el modelo de Bohr utilizaba un número cuántico (n) para definir una órbita el modelo de Schrödinger utiliza tres números cuánticos para especificar un orbital: n , l y m_l .

Número cuántico principal "n"

- Toma valores enteros: 1,2,3,..., ∞
- A mayor n , más lejos se encuentra del núcleo la región de mayor densidad electrónica.
- A mayor n , el electrón tiene mayor energía y se encuentra menos "ligado" al núcleo.

Número cuántico del momento angular ó azimutal "l"

- Depende de n y toma valores enteros de 0 a ($n-1$). Así para $n = 1$ sólo hay un valor de l posible: 0. Para $n=2$ hay dos valores de l : 0 y 1. Para $n=3$ hay tres valores posibles: 0, 1 y 2.
- Generalmente el valor de l se representa por una letra en vez de por su valor numérico:

l	0	1	2	3
nombre del orbital	s	p	d	f

- Define la forma del orbital

El número cuántico magnético "m_l"

- El valor del número cuántico magnético depende de l . Toma valores enteros entre $-l$ y $+l$, incluyendo el 0. Para cierto valor l hay $(2l+1)$ valores de m_l
- Describe la orientación del orbital en el espacio.

Ejemplo: Veamos los diferentes orbitales que podemos tener para $n=3$. Tendremos entonces tres valores de l : 0,1 y 2. Los valores de m_l para cada valor de l se compilan en la tabla siguiente: (los orbitales que comparten los valores de n y l se dicen que pertenecen al mismo subnivel y todos los orbitales con el mismo n formarían un nivel)

l (define la forma)	Subnivel	m_l (define orientación)	Nº de orbitales en el subnivel
0	3s	0	1
1	3p	-1,0,1	3
2	3d	-2,-1,0,1,2	5

Número cuántico de spin (m_s):

- Informa el sentido del giro del electrón en un orbital.
- Su valor es +1/2 o -1/2

En resumen, cada electrón de un átomo es descrito por un conjunto de 4 números cuánticos: los primeros 3 describen su orbital y el cuarto describe el giro.

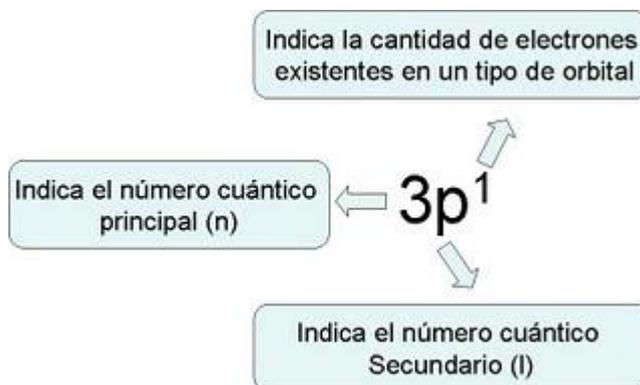
Principio de exclusión de Pauli

El principio de exclusión de Pauli dice que dos electrones en un mismo átomo no pueden tener los mismos 4 números cuánticos. Como consecuencia un orbital puede contener un máximo de dos electrones que deben tener espines opuestos.

Configuración Electrónica

Para átomos polielectrónicos en su estado basal, los electrones ocupan los orbitales de menor energía. Para representar la ocupación de los orbitales por los electrones es posible utilizar dos formas: la configuración electrónica y el diagrama de orbitales.

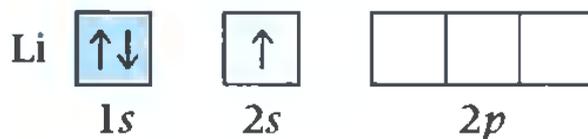
En una configuración electrónica, un electrón puede ser representado como se muestra a continuación



En el ejemplo se hace referencia a un electrón que se encuentra en un nivel de energía $n = 3$, en un subnivel p o $l=1$ y se lee "tres p uno".

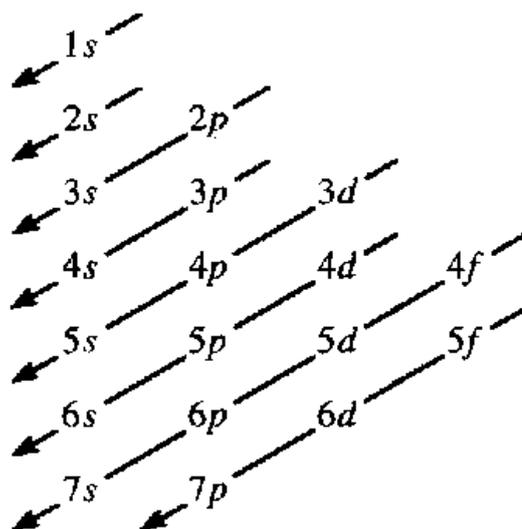
Un diagrama de orbitales se representa al orbital como una casilla y se representa al electrón dibujando una flecha dentro de la casilla, y se diferenciará el espín del mismo según el sentido de la flecha sea hacia arriba o hacia abajo.

A continuación se muestra el diagrama de orbitales para el átomo de Litio ($Z=3$, 3 electrones)



Para el llenado de orbitales es necesario tener presente el principio de exclusión de Pauli y que la energía de cada nivel y subnivel aumenta de izquierda a derecha teniendo en cuenta **la regla de la lluvia o diagrama de Möller**

Diagrama de Möller o "regla de la lluvia"



Los electrones se dispondrán en el orbital de menor energía disponible y en caso de llenado de orbitales con igual energía seguir la **regla de Hund** que dice **que la configuración de menor energía es aquella que tiene el número máximo de electrones no apareados o con espines paralelos.**