

Modelo atómico de la materia

Contenidos

Antecedentes:

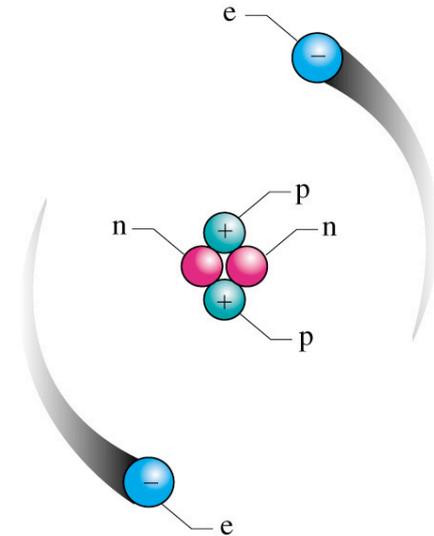
El átomo nuclear: Constituyentes del nucleo

Antecedentes de la Mecanica Cuantica

- Principio de Dualidad Onda-Partícula.
- Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

Formulación de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger.

- Funciones de onda del átomo de H. Números Cuánticos.
- Orbitales Atómicos. Principio de Exclusión de Pauli.
- Atomos Polieletrónicos. Configuraciones Electrónicas.



Modelo atómico de la materia

Contenidos

Antecedentes:

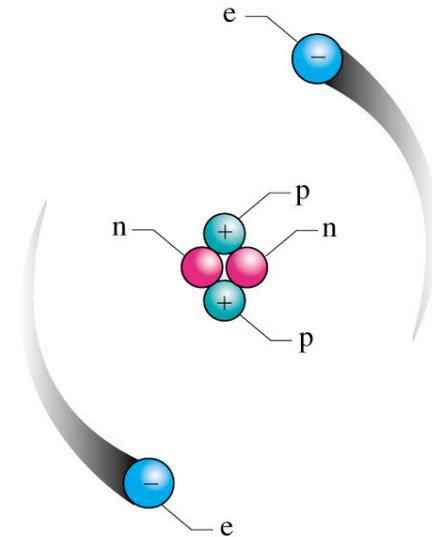
El átomo nuclear: Constituyentes del núcleo

Antecedentes de la Mecánica Cuántica

- Principio de Dualidad Onda-Partícula.
- Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

Formulación de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger.

- Funciones de onda del átomo de H. Números Cuánticos.
- Orbitales Atómicos. Principio de Exclusión de Pauli.
- Átomos Polielectrónicos. Configuraciones Electrónicas.



Antecedentes: Estequiometría y Ecuaciones Químicas

Considerar la materia formada por unidades más pequeñas llamadas

átomos es la base de la Química.



Lavoisier 1774: Ley de conservación de la masa.

La masa total de las sustancias presentes después de una reacción química es la misma que la masa total de las sustancias antes de la reacción.



Proust 1799: Ley de la composición constante.

Todas las muestras de un compuesto tienen la misma composición: las mismas proporciones en masa de los elementos constituyentes.



Dalton 1803-1888: Teoría atómica.

En Química el *átomo* y la *molécula* son unidades básicas, es fundamental medir su *número*.

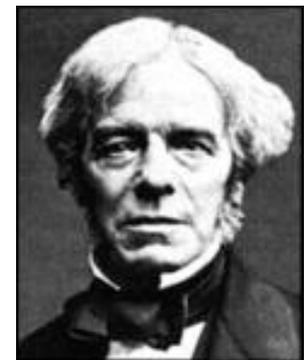
MOL: es una medida del número de moléculas (átomos) de cualquier sistema



Un mol es la cantidad (masa) de sustancia que contiene el número de Avogadro (N_A) de moléculas (átomos).

El N_A es el número de átomos de carbono que hay en exactamente 12 gramos de ^{12}C .

*La masa de un elemento (compuesto) que contiene el N_A de átomos (moléculas) se denomina **peso atómico (molecular)**.*



Faraday: Naturaleza eléctrica de la materia

La materia esta formada por partículas con carga

Diferentes modelos de átomo

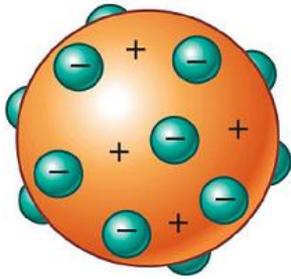
Modelo de Átomo Continuo de Thomson

Modelo de Átomo Nuclear de Rutherford

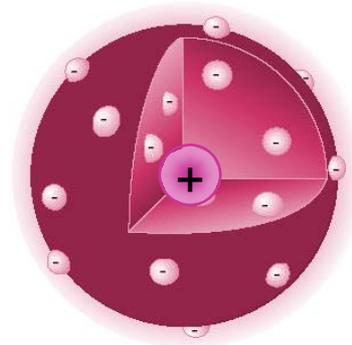
Modelo de Átomo de Bohr

A partir de estas partículas elementales surgen diferentes modelos para explicar la estructura del átomo

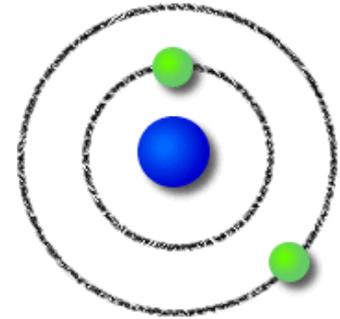
Modelos atómicos



Thomson
(“pudding”)



Rutherford
(nuclear)



Böhr
(órbita)

La Teoría de Bóhr postula:

1.- Los electrones describen **órbitas circulares y estacionarias** en torno al núcleo, en las que ni absorbe ni emite energía.



2.- Sólo son posibles aquellas órbitas cuyo **momento angular sea un múltiplo** entero de la constante $h/2\pi$ (h =cte. de Planck)



3.- Cuando el electrón pasa de un nivel de energía superior a otro inferior emite la **diferencia de energía** entre ambos en forma de **radiación electromagnética** y viceversa. \longrightarrow

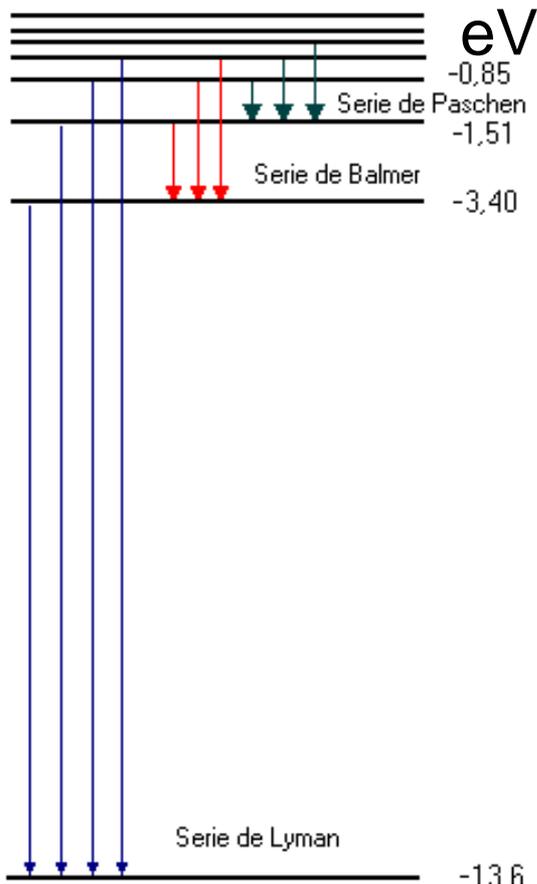


Cuando el electrón está en la órbita $n = 1$

Estado fundamental

Si absorbe energía pasa a $n = 2,3\dots$

Estados excitados



Transiciones electrónicas de un estado energético a otro dan lugar a **líneas en el espectro** cuya posición puede calcularse perfectamente

En el espectro de H, cuando la transición de energía es al estado fundamental se produce la **serie Lyman** y cuando es a los excitados, las demás series.

¿ Qué sabemos hoy día ?

Los átomos están formados por un **núcleo** y **electrones**, pero los estados de los electrones hay que describirlos con modelos sofisticados.

Cada núcleo contiene igual número de **protones** que **electrones** tiene el átomo neutro.

El **protón** tiene la misma carga pero de signo contrario que el electrón.

El número de protones del núcleo (Z) determina la identidad (elemento) del átomo

Z = número atómico.

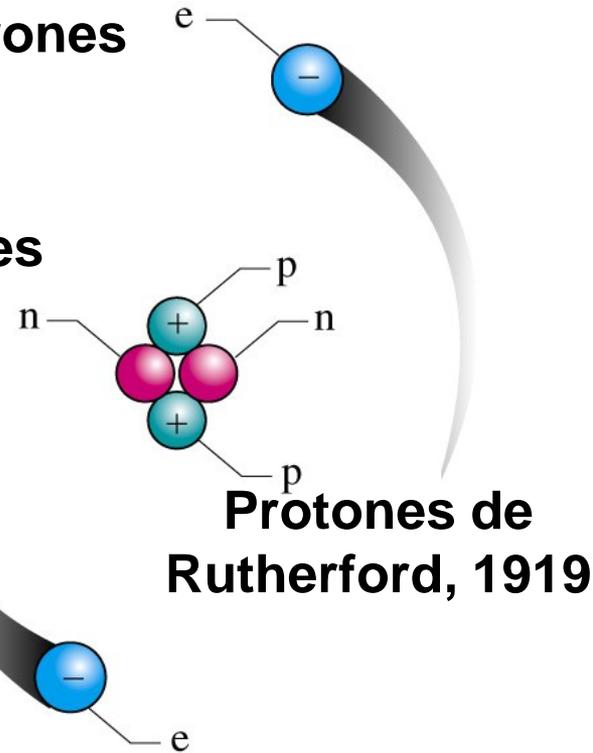
El átomo nuclear

Además de protones el núcleo tiene (en general) **neutrones**

Partículas sin carga con masa ligeramente

superior a la del protón.

**Neutrones de James
Chadwick, 1932**



**Protones de
Rutherford, 1919**

El número de protones (Z) y

neutrones (N) determina la masa atómica.

Número másico: $A = Z + N$

Partícula	Masa		Carga	
	kg	uma	Culombios	(e)
Electrón	$9,109 \times 10^{-31}$	0,000548	$-1,602 \times 10^{-19}$	-1
Protón	$1,673 \times 10^{-27}$	1,00073	$+1,602 \times 10^{-19}$	+1
Neutrón	$1,675 \times 10^{-27}$	1,00087	0	0

Números atómicos y números de masa

Para representar la composición de cualquier átomo particular, empleamos el siguiente simbolismo:



Isótopos: Átomos con igual Z

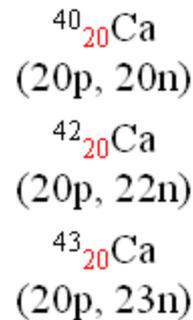
Isobaros: Átomos con igual A

Isotonos: Átomos con igual N

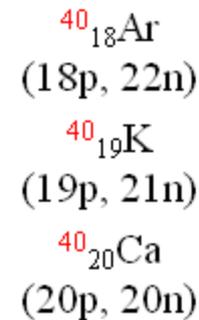
A = número de masa

Z = número atómico

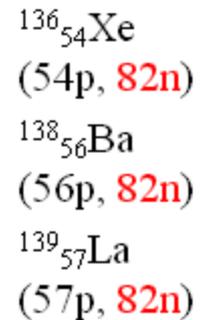
Isótopos



Isóbaros

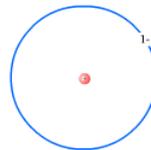


Isotonos

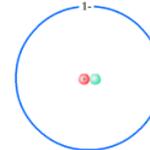


Isótopos del hidrógeno

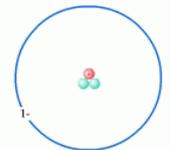
Click an isotope button.



Click an isotope button.



Click an isotope button.



Modelo atómico de la materia

Contenidos

Antecedentes:

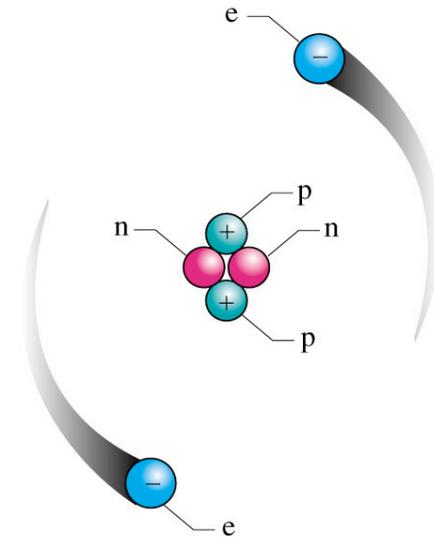
El átomo nuclear: Constituyentes del núcleo

Antecedentes de la Mecánica Cuántica

- Principio de Dualidad Onda-Partícula.
- Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

Formulación de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger.

- Funciones de onda del átomo de H. Números Cuánticos.
- Orbitales Atómicos. Principio de Exclusión de Pauli.
- Átomos Polielectrónicos. Configuraciones Electrónicas.



Principio de Dualidad Onda-Partícula.

¿Cómo describía la Física los fenómenos a principio del siglo XX?

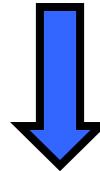
Mecánica Clásica
(partículas)

Teoría ondulatoria
(ondas)

Fenómenos Inexplicables

Radiación sólido caliente (Planck)

Efecto fotoeléctrico (Einstein)



La luz presenta propiedades de partícula (materia)

NATURALEZA CORPUSCULAR DE LAS ONDAS

Ondas de materia de De Broglie



¿ Presentará la Materia propiedades Ondulatorias ?

De Broglie (1924) postuló:

*Toda **partícula en movimiento** lleva asociada una **onda** cuya longitud de onda viene dada por*

$$E = mc^2$$

$$h\nu = mc^2$$

$$h\nu/c = mc = p$$

$$p = h/\lambda$$

$$\lambda = h/p = h/mv$$

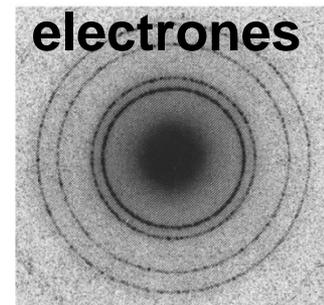
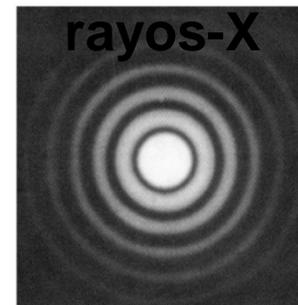
NATURALEZA ONDULATORIA DE LA MATERIA

$$\lambda = h/p = h/mv$$

$h =$ cte. de Planck

Predicción: los electrones deben producir fenómenos típicos de las ondas: reflexión, interferencia, difracción

Comprobación: difracción de e^- sobre cristal de Cu (1927)



Difracción sobre Cu

**NATURALEZA
CORPUSCULAR DE
LAS ONDAS**



**NATURALEZA
ONDULATORIA
DE LA MATERIA**



Principio de Dualidad Onda-Partícula

Sólo las partículas de masa muy pequeña (subatómicas) manifestarán propiedades ondulatorias notables.

Debido a la naturaleza dual de las partículas subatómicas la aplicación de los conceptos de posición y velocidad (o momento) tienen limitaciones:

Principio de Incertidumbre de Heisenberg

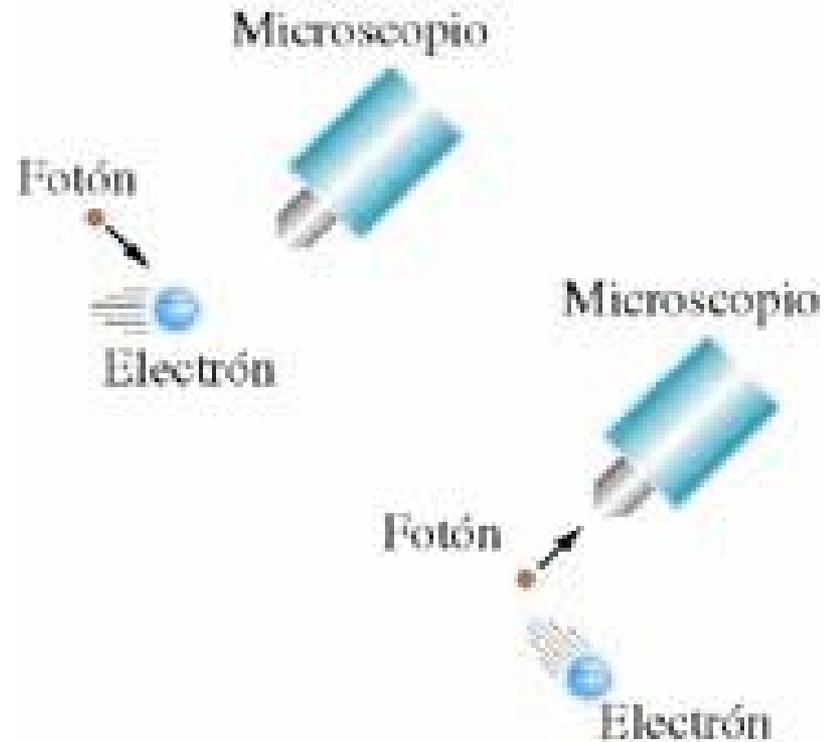
Principio de incertidumbre (Heisenberg)

NO es posible determinar simultáneamente con exactitud el momento y la posición de una partícula:

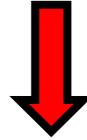
$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

Δp =incertidumbre en el momento

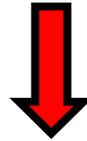
Δx =incertidumbre en la posición



Aplicación del Principio de Incertidumbre al átomo



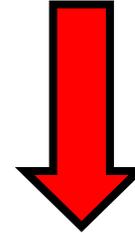
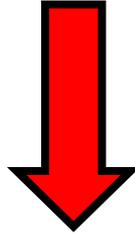
NO es posible conocer simultáneamente el momento y la posición del electrón



El electrón NO puede describir órbitas definidas en torno al núcleo (átomo de Bohr)

**Principio de
Dualidad Onda-
Partícula**

**Principio de
incertidumbre**



**Fundamentos de la Mecánica Cuántica
(Ondulatoria)**

Modelo atómico de la materia

Contenidos

Antecedentes:

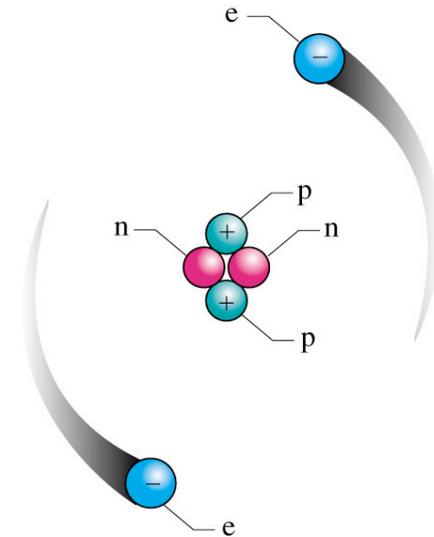
El átomo nuclear: Constituyentes del nucleo

Antecedentes de la Mecanica Cuantica

- Principio de Dualidad Onda-Partícula.
- Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

Formulación de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger.

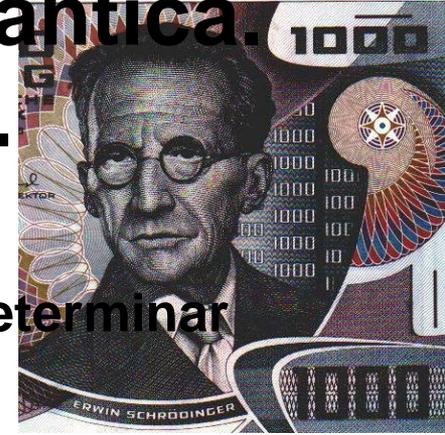
- Funciones de onda del átomo de H. Números Cuánticos.
- Orbitales Atómicos. Principio de Exclusión de Pauli.
- Atomos Polieletrónicos. Configuraciones Electrónicas.



Formulación de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger.

Nueva formulación de la Física

Ecuación que describe el comportamiento y permite determinar la energía de las partículas subatómicas.



Si planteamos y resolvemos la ecuación para un sistema, sabremos TODO sobre dicho sistema.

Ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

operador Hamiltoniano
(depende del sistema)

energía de cada estado permitido

funciones de onda permitidas

(describen los estados permitidos del sistema)



Hamilton Newton

Ej. Atomo:

Para partículas (p.ej. electrones) con **energía cinética** (movimiento en tres dimensiones) y **potencial** (atracción del núcleo atómico) la forma de la Ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi = E\psi$$

**Término cinético
del Hamiltoniano**

**Término potencial
del Hamiltoniano**

¿Qué información se obtiene al resolver la Ec.Schrödinger?

- 1.- **Estados permitidos** a los electrones en los átomos, descrito cada uno por una función de onda ψ
- 2.- **Energías permitidas** para los electrones E

La cuantización de la energía surge al confinar una partícula (electrón) en un espacio reducido (átomo).

Cuanto más pequeño sea ese espacio mayor es la separación entre niveles.

¿Por qué no se colapsan los átomos?

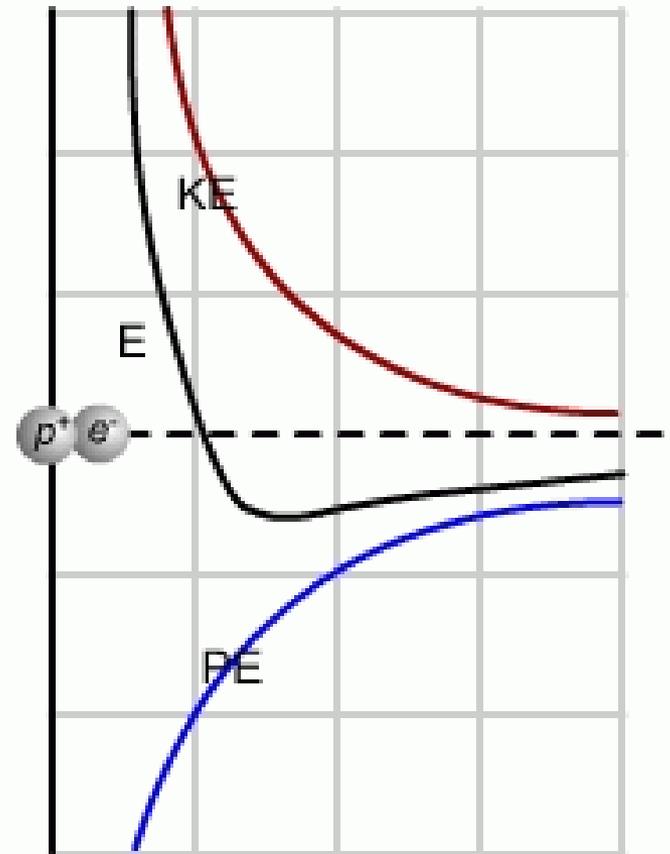
La energía TOTAL de un átomo hidrogenoide es la suma de:

KE = Energía cinética del electrón

PE = Energía potencial

La energía cinética de la onda del electrón es positiva y aumenta al acercarse al núcleo, la energía potencial es negativa.

El átomo es estable cuando la energía total es menor que la del núcleo y electrón separados.



Existe un mínimo de energía a la distancia de equilibrio núcleo-electrón.

¿ Qué es ψ ?

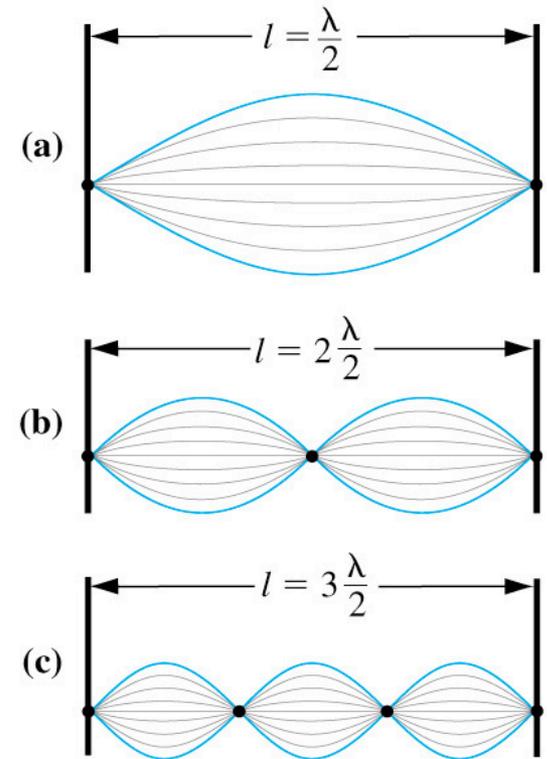
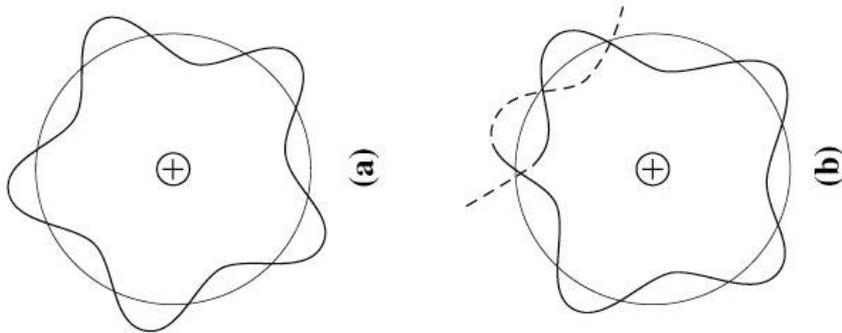
ψ no tiene significado físico real, son funciones de onda estacionarias

Ondas estacionarias y Funciones de onda

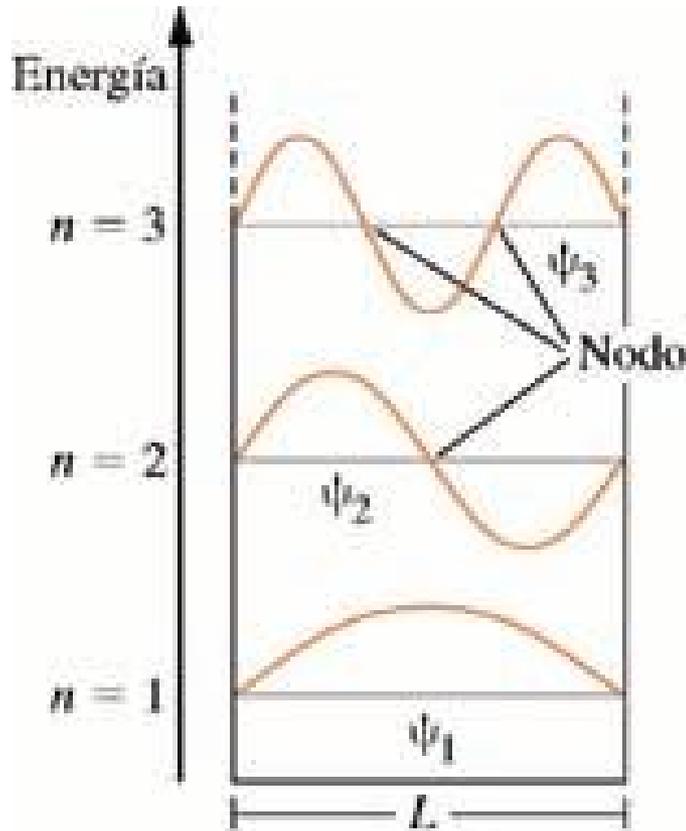
Ondas estacionarias:

Son ondas cuyos nodos y máximos no se desplazan con el tiempo.

$$\lambda = \frac{2L}{n}, n = 1, 2, 3...$$



Funciones de onda, ψ , (psi): son funciones matemáticas que representan ondas estacionarias dentro de los límites del sistema, que describen los estados posibles del mismo.



Las funciones de onda pueden presentar regiones en las que son positivas y otras en las que son negativas. Esto es importante en la formación de enlaces.

También hay puntos en los que se anulan (**nodos**).

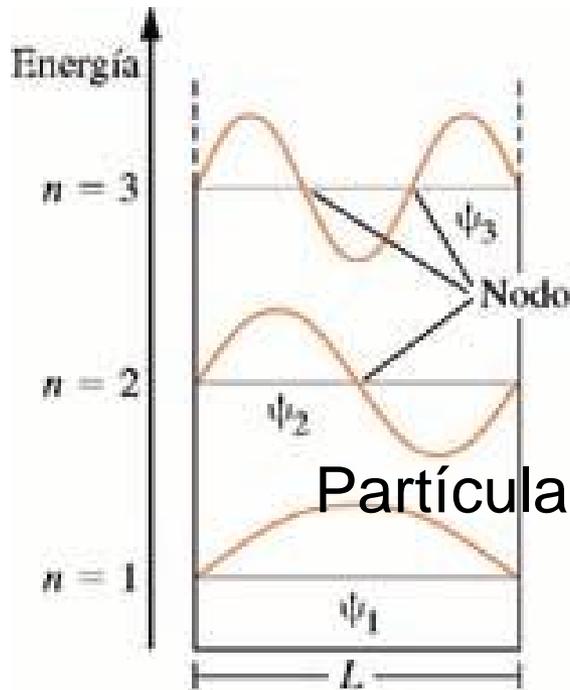
Partícula confinada en una "caja".

$$\leftarrow \psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi}{L} x$$

Las funciones de onda

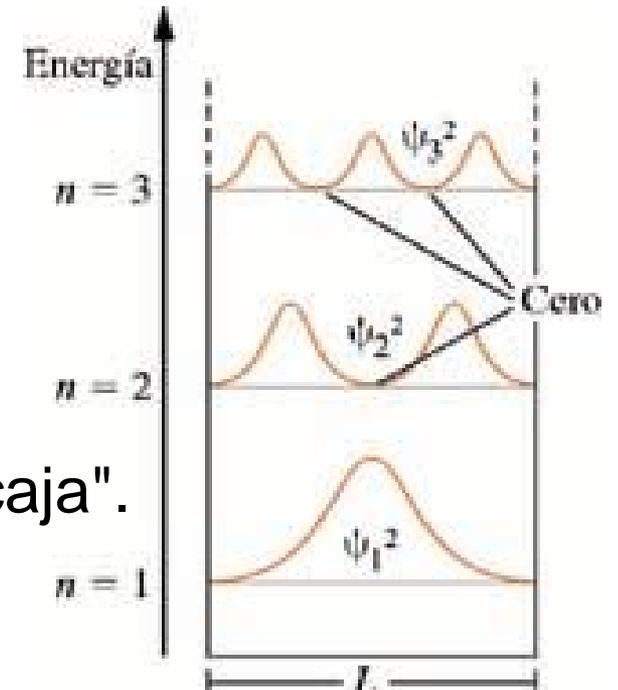
ψ^2 **SI tiene significado físico:** mide la **probabilidad** de encontrar la partícula (electrón) en cada punto del espacio



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \frac{n\pi}{L} x$$

Las funciones de onda

Partícula confinada en una "caja".

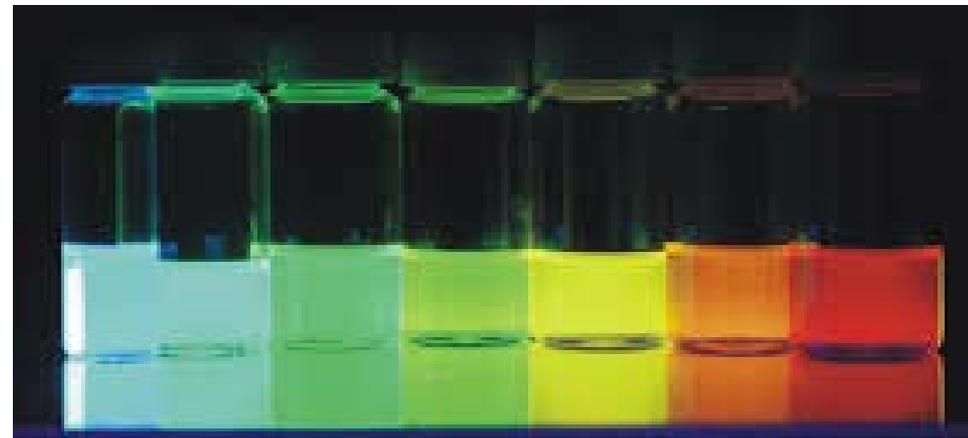
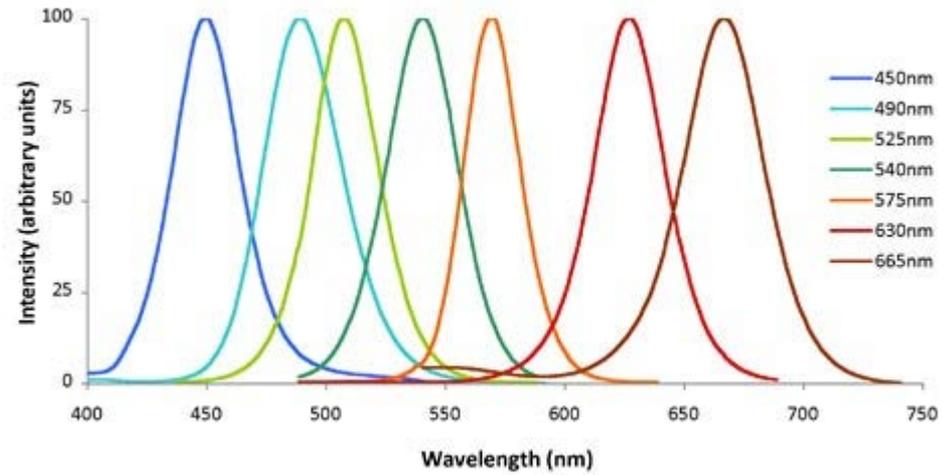
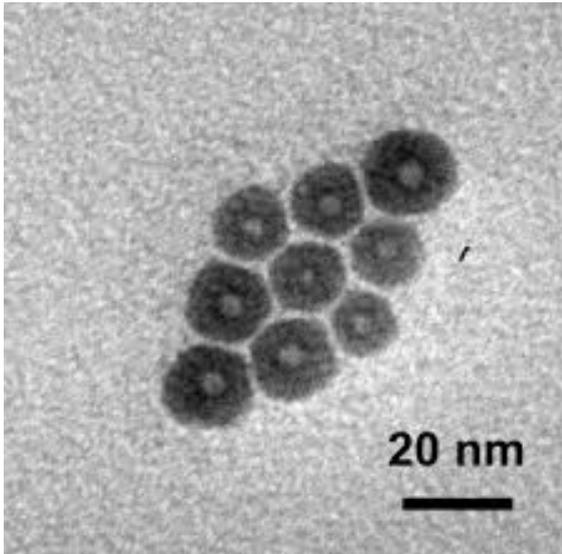


$$\psi_n^2(x) = \frac{2}{L} \operatorname{sen}^2 \left(\frac{n\pi}{L} x \right)$$

Las probabilidades

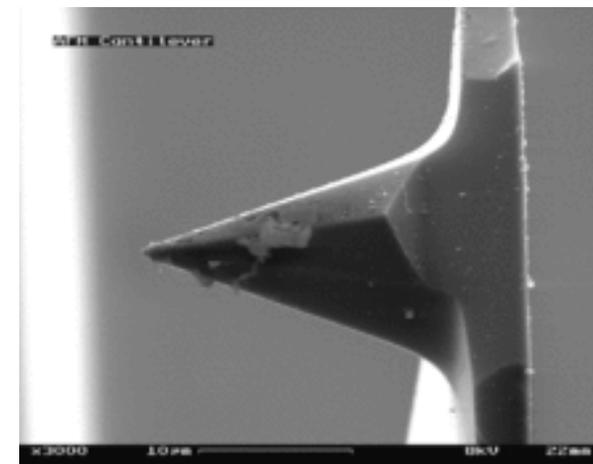
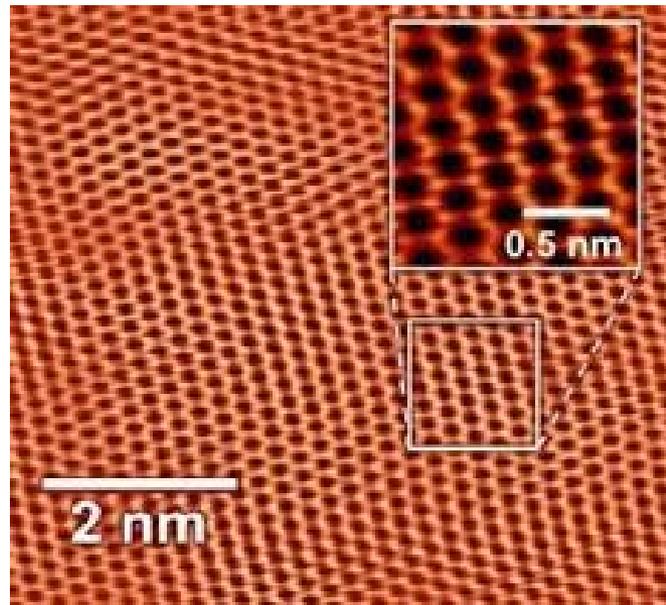
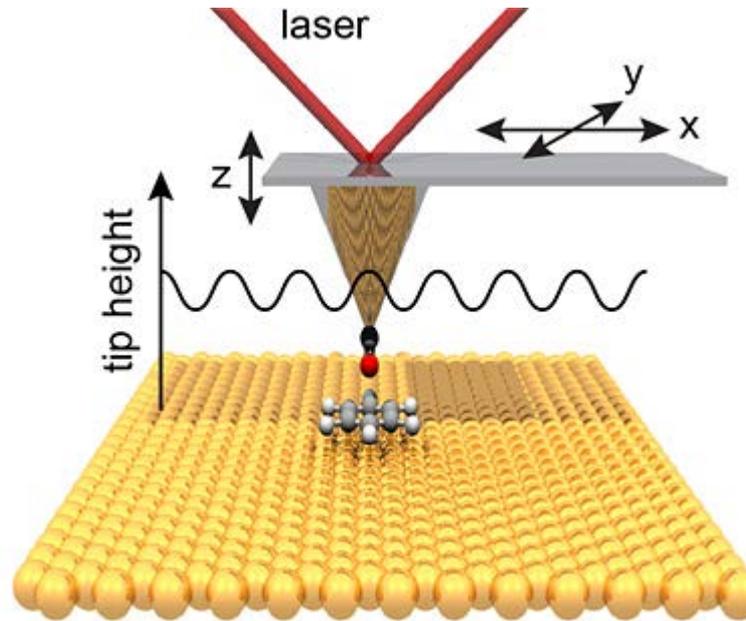
Orbital Atómico: Región del espacio en torno al núcleo que acumula una **alta probabilidad** (90%-95%) de **contener al electrón**.

QUANTUM DOTS



2.3 → 5.5
Size (nanometers)

MICROSCOPIO DE EFECTO TUNEL (AFM)



Funciones de onda del átomo de hidrógeno. Números Cuánticos.

Schrödinger, 1927

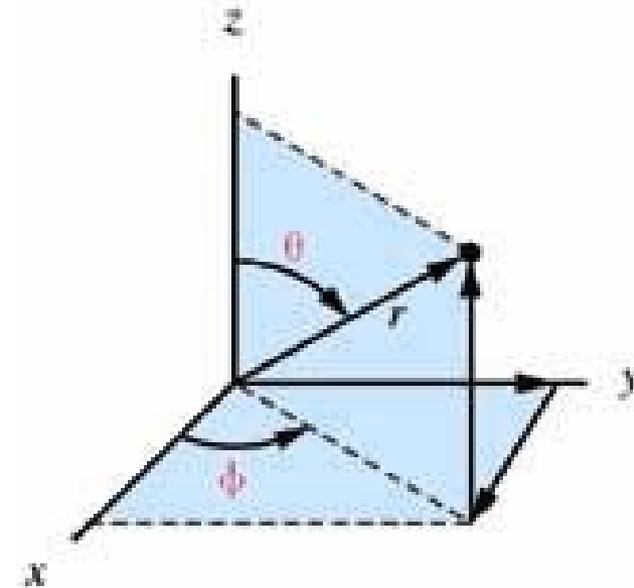
$$\mathbf{E}\psi = \mathcal{H}\psi$$

$$\mathcal{H}(x,y,z) \text{ o } \mathcal{H}(r,\theta,\varphi)$$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) Y(\theta,\varphi)$$

$R(r)$ es la función de onda radial.

$Y(\theta,\varphi)$ es la función de onda angular



Coordenadas polares esféricas

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$

$$x = r \text{ sen } \theta \text{ cos } \phi$$

$$y = r \text{ sen } \theta \text{ sen } \phi$$

$$z = r \text{ cos } \theta$$

La CUANTIZACIÓN de la ENERGIA (y otras magnitudes) surge de un modo natural al resolver la ecuación de Schrödinger.

(Bohr lo introdujo como postulado sin explicación).

¿Qué son los números cuánticos?

Unos parámetros numéricos que determinan la forma matemática de las funciones de onda de un sistema (átomo).

Para cada conjunto de números cuánticos permitido la función de onda tendrá una expresión concreta.

Los números cuánticos determinan:

- 1.- Niveles energéticos posibles de los electrones.
- 2.- “Forma” de los Orbitales Atómicos.
- 3.- Momento Angular y Magnético.

Parte angular $Y(\theta, \phi)$	Parte radial $R_{n, \ell}(r)$
$Y(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$R(1s) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$
$Y(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$	$R(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma)e^{-\sigma/2}$
$Y(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$	$R(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2)e^{-\sigma/2}$
$Y(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$	$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$
$Y(d_{z^2}) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (4 - \sigma)e^{-\sigma/2}$
$Y(d_{x^2-y^2}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$	$R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$
$Y(d_{xy}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$	
$Y(d_{xz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$	
$Y(d_{yz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$	

$$\sigma = \frac{2Zr}{na_0}$$

Los números cuánticos permiten describir

la estructura electrónica (“ordenamiento” electrónico) de los átomos.

¿Cuántos números cuánticos existen?

n	l	m_l	m_s
principal	momento angular	magnético	spin

n : número cuántico principal

Determina el nivel de energía en que se encuentra el electrón.

Toma cualquier valor entero positivo distinto de cero; $n = 1, 2, 3, 4, 5...$

l : número cuántico de momento angular (o azimutal)

Determina el momento angular del electrón (y su energía cinética angular).

Los valores de l están limitados por el de n : $l = 0, 1, 2, \dots, (n-2), (n-1)$

l condiciona la “forma” de los O.A. que reciben su nomenclatura según su valor.

l	0	1	2	3	4	5
OA	s	p	d	f	g	h

m_l : número cuántico magnético

Determina el momento magnético originado por el movimiento del electrón en torno al núcleo y la orientación espacial de los orbitales atómicos.

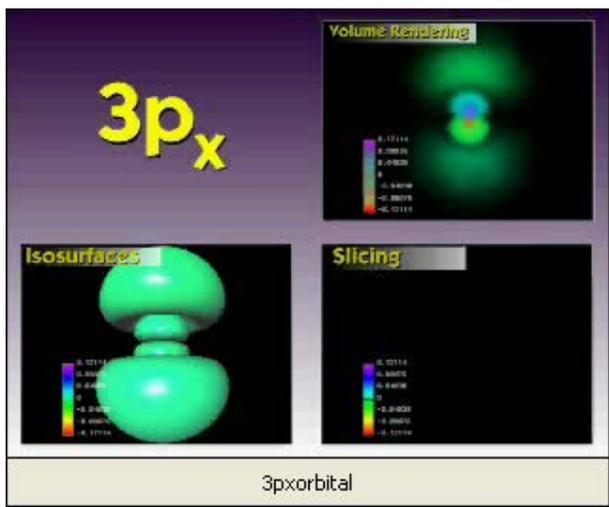
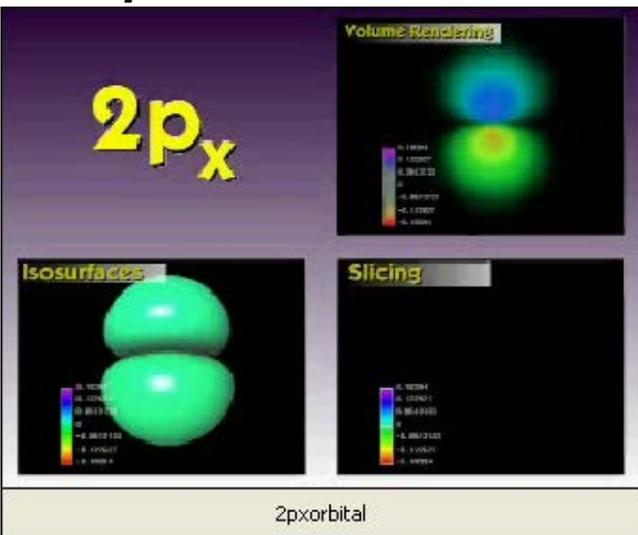
Toma valores enteros, incluido el cero, entre $-l$ y $+l$; en total $2l+1$ valores:

$$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l$$

Ejemplo:

$l = 0$	$m_l = 0$;	1 orbital s
$l = 1$	$m_l = -1, 0, 1$	3 orbitales p
$l = 2$	$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$	5 orbitales d
$l = 3$	$m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	7 orbitales f

n, l y m_l describen un determinado **Orbital Atómico**



⊙ Select a value for the principal quantum number, n .

$n =$

Click to show possible values of l .

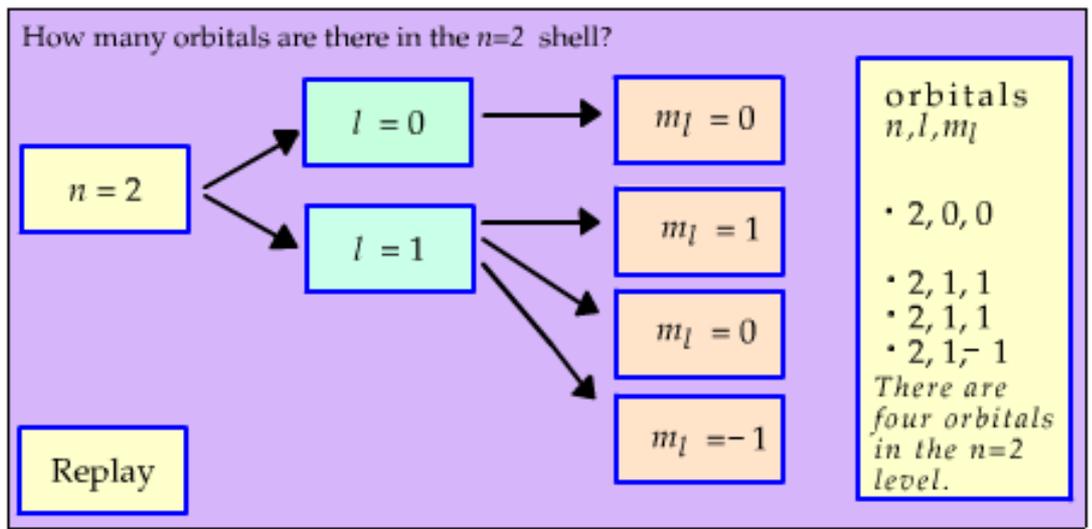
$l = 0, 1, 2, 3$

Click to show possible values of m_l .

$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$

Start over.

Valores permitidos de n , l y m_l Número de orbitales para $n=2$

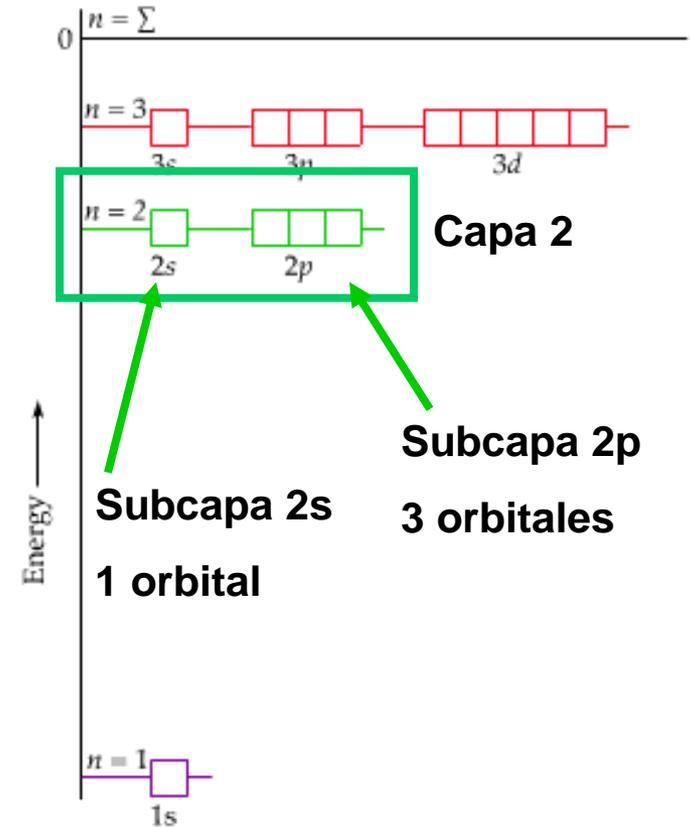


Capas y subcapas en átomos hidrogenoides

En el átomo de **H** y **especies hidrogenoides** (formadas por un núcleo y un único electrón) la energía del electrón sólo depende de n .

$$E_n \propto \frac{-Z^2}{n^2}$$

Cada valor $n = 1, 2, 3 \dots$ determina una capa; que puede tener distintas subcapas (de igual energía) para valores distintos de $l = 0, 1, 2 \dots (n-1)$.
Cada subcapa contiene $2l+1$ orbitales.

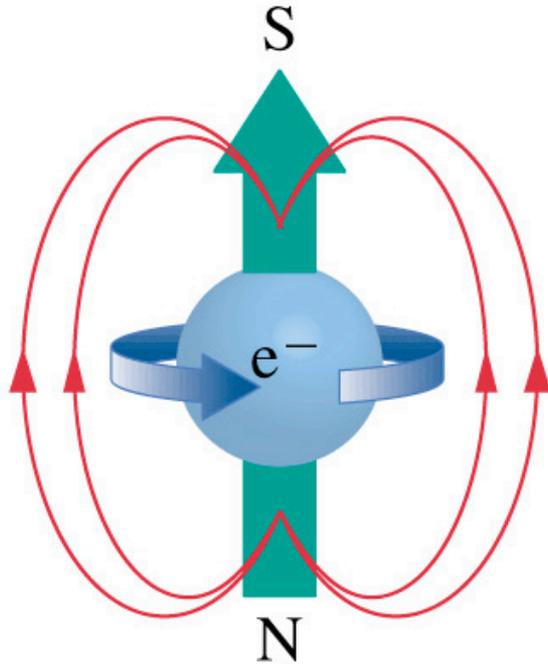


m_s : número cuántico de spin electrónico

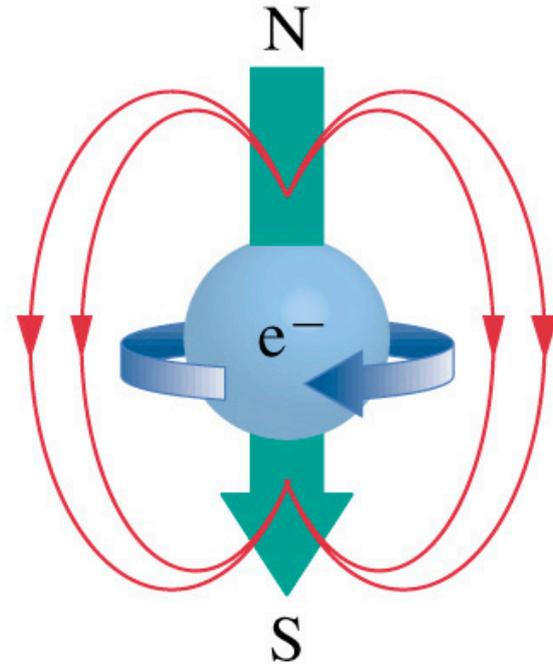
Los electrones tienen un movimiento de giro sobre su propio eje; m_s hace referencia al sentido de ese giro:

Toma dos valores $+\frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$



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



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

Cualquier combinación permitida de los cuatro números cuánticos describe un **Estado Electrónico**

Ej: $n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = +1/2;$ $(2, 1, -1, +1/2)$

Diferentes estados electrónicos a los que le corresponda igual contenido energético (igual nivel de energía) se llaman **estados degenerados**

Ej: $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = +1/2;$ $(1, 0, 0, +1/2)$
 $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = -1/2;$ $(1, 0, 0, -1/2)$

El estado electrónico de más baja energía se llama **estado fundamental**

Otros estados de más alta energía se denominan **estados excitados**

Orbitales Atómicos y Principio de Exclusión de Pauli.

Orbital Atómico: Región del espacio en torno al núcleo que acumula una **alta probabilidad** (90%-95%) de **contener al electrón**.



¿Cuántos electrones pueden ocupar un mismo Orbital Atómico?

Principio de exclusión de Pauli

En un átomo no pueden existir dos electrones que tengan los cuatro números cuánticos iguales.

n , l y m_l determinan un determinado **orbital atómico**;

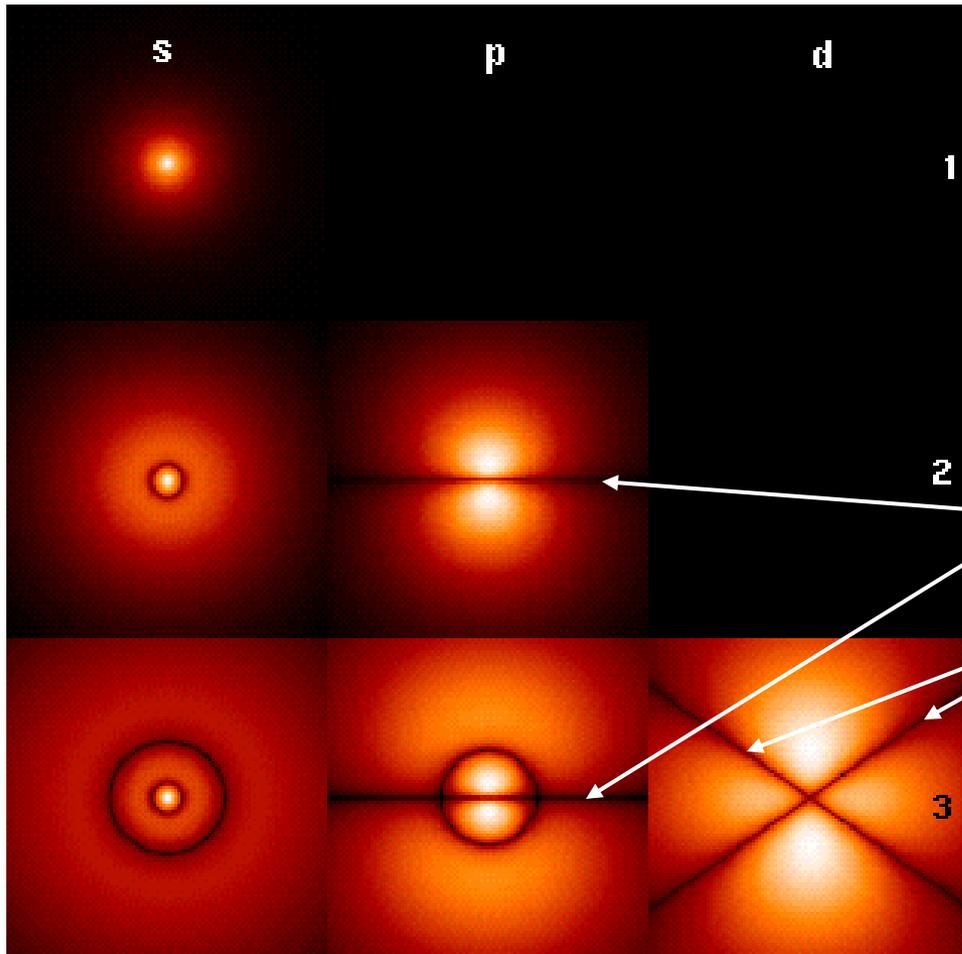
luego cada orbital atómico puede acomodar **dos electrones**:

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

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

Estos dos electrones se dice que están **apareados**.

Tipos de Orbitales Atómicos



Los símbolos s, p, d, f, etc... están relacionados con el número de **nodos angulares**:

s: no tiene nodos angulares

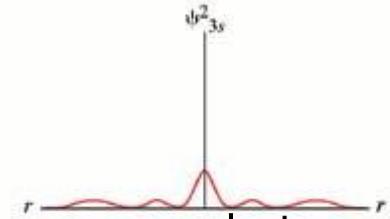
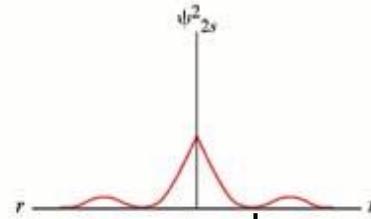
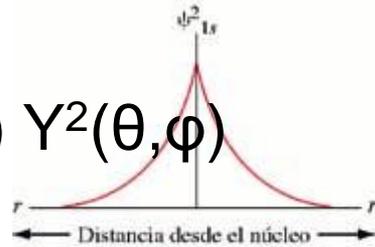
p: un nodo

d: dos nodos

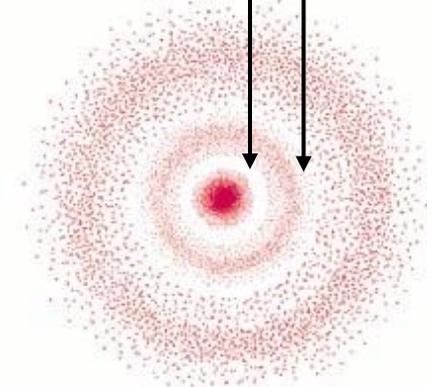
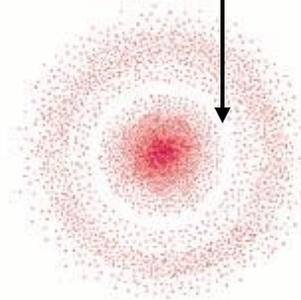
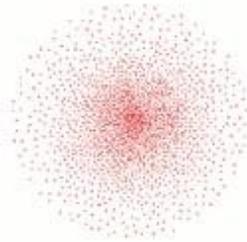
f: tres nodos

Orbitales s

$$\psi^2(r, \theta, \phi) = R^2(r) Y^2(\theta, \phi)$$



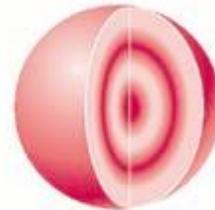
Probabilidad



1 nodo
radial

2 nodos radiales

Orbital



(a) 1s

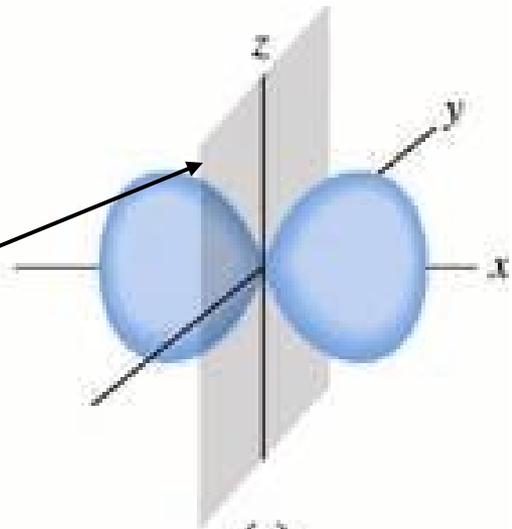
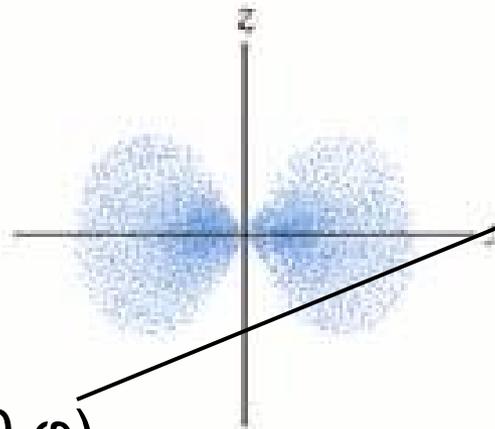
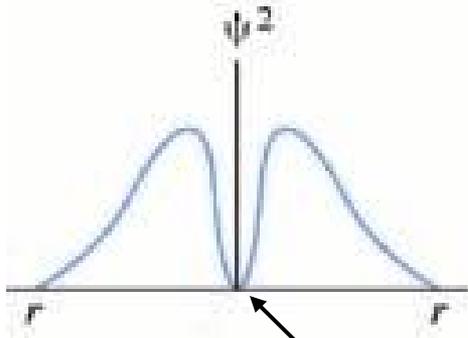
(b) 2s

(c) 3s

Orbitales p

Probabilidad

Orbital



$$\psi^2(r, \theta, \varphi) = R^2(r) Y^2(\theta, \varphi)$$

(a)

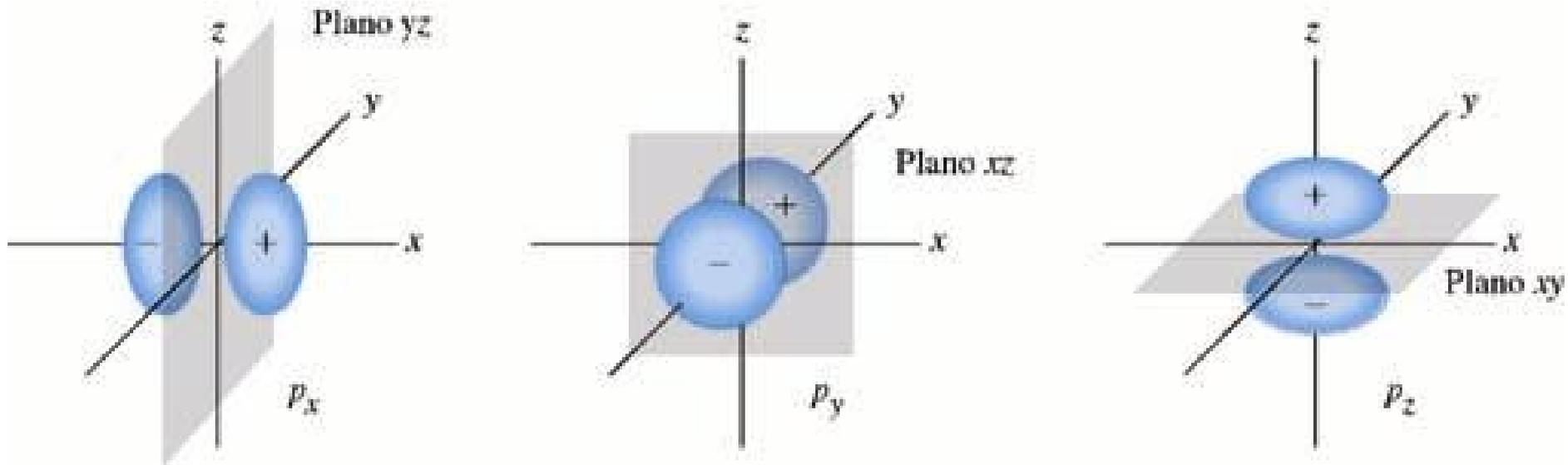
(b)

(c)

Orbital 2p

Los orbitales 2p no tienen nodos radiales, pero los 3p, 4p, etc... SI los tienen

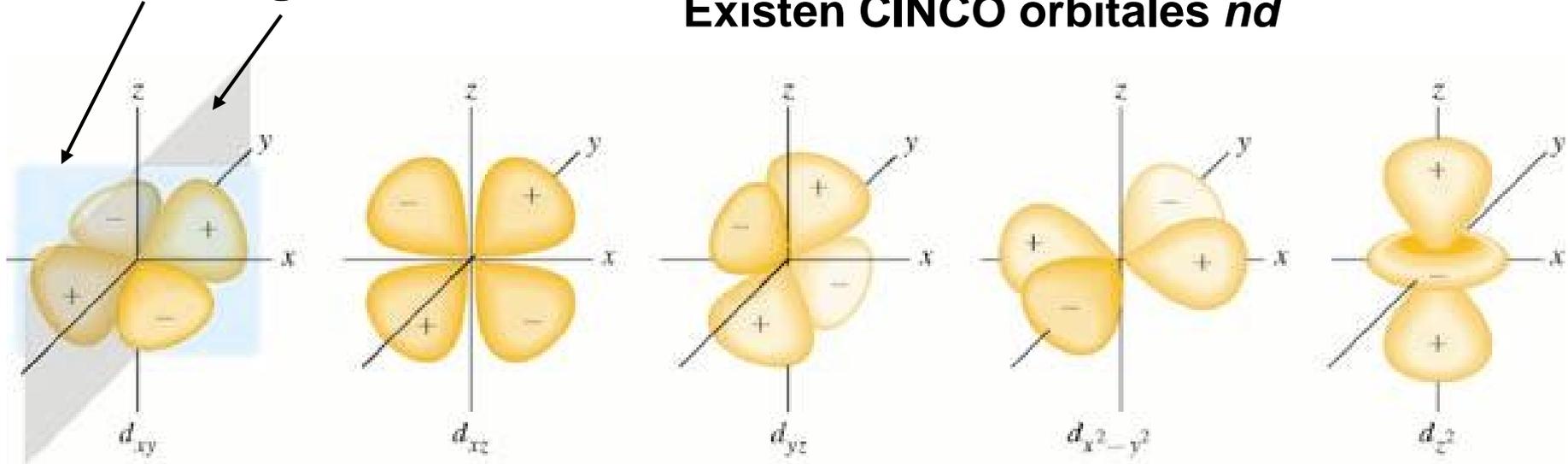
Orbitales p



Existen TRES orbitales np dirigidos sobre los tres ejes de coordenadas x , y , z lo que les da nombre (p_x , p_y , p_z).

Orbitales d

Nodos angulares



Los orbitales 3d no tienen nodos radiales los 4d, 5d, etc... Si los tienen.

En general un orbital tiene: **$n-1$ nodos** de los cuales

l nodos angulares

$n-l-1$ nodos radiales

Átomos Polieletrónicos. Configuraciones Electrónicas.

La ecuación de Schrödinger sólo tiene solución exacta (matemática) para especies hidrogenoides.

En **átomos polieletrónicos** la **repulsión entre los electrones impide** una **solución exacta**.

Se usan **soluciones aproximadas** que consisten en **describir cada electrón con una función de onda tipo hidrogenoide**.

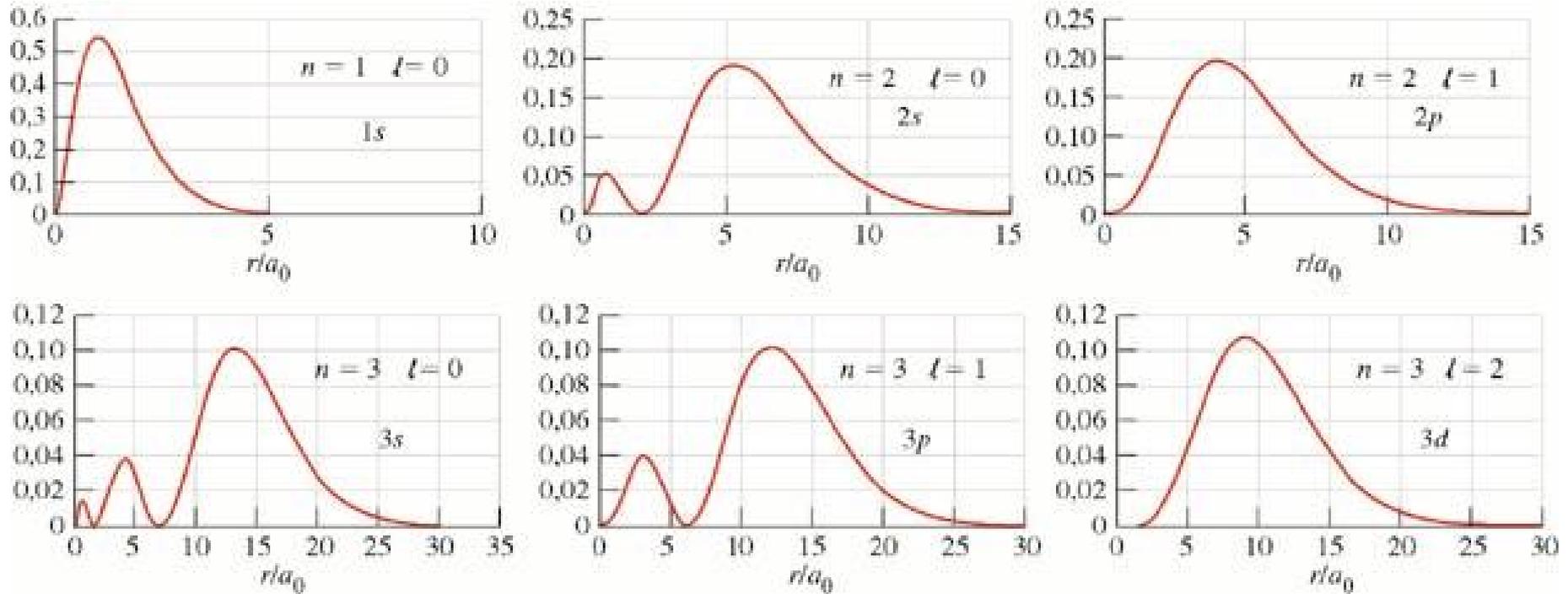
Ej: átomo Li:
$$E_{(\text{litio})} \Psi_{(\text{litio})} = \mathcal{H} \Psi_{(\text{litio})}$$
$$\Psi_{(\text{litio})} = \psi_{1s}^*(1) \psi_{1s}^*(2) \psi_{2s}^*(3)$$

donde: $\psi_{1s}^*(1)$, $\psi_{1s}^*(2)$ y $\psi_{2s}^*(3)$ son funciones de onda tipo hidrógeno para describir los tres electrones del átomo de litio.

La parte angular (“forma”) de estas **funciones** es igual que las hidrogenoides; la parte radial es diferente porque **se usa para cada electrón la carga nuclear que efectivamente “ve” ese electrón (Z_{ef} o Z^*)**.

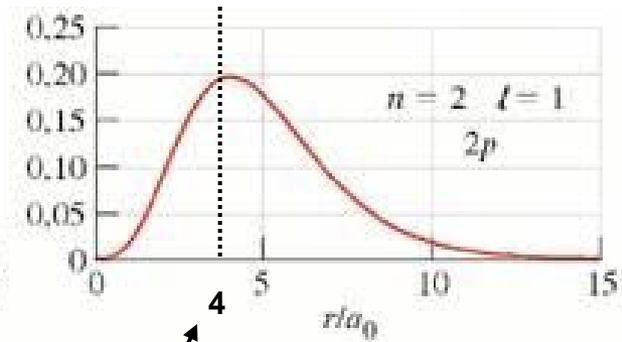
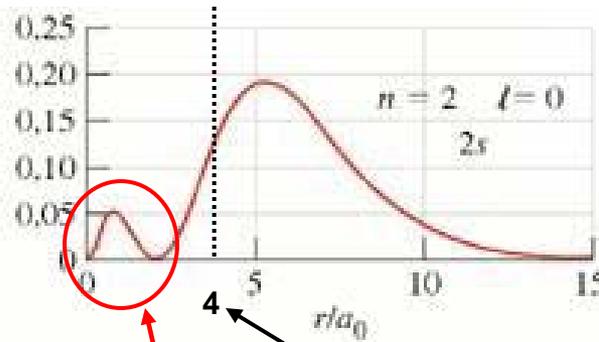
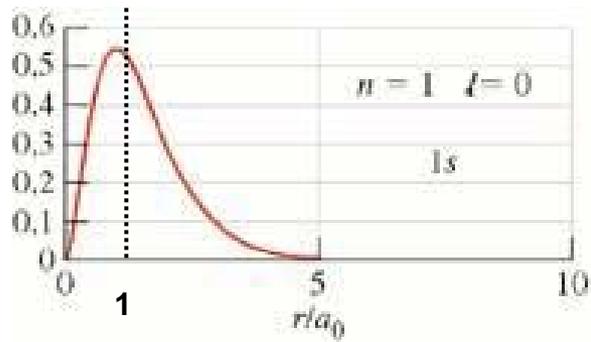
Distribución radial de probabilidad, penetración y apantallamiento.

La probabilidad de encontrar un electrón a una distancia r del núcleo (independiente de la dirección) se denomina función de distribución radial de probabilidad: $4\pi r^2 R^2(r)$



Función de distribución radial de probabilidad para varios orbitales.

La energía de un electrón en un orbital depende de su distancia al núcleo



En las especies monoeléctricas (**hidrogenoides**) la energía de un orbital sólo depende del valor medio de la distancia al núcleo.

Los orbitales con el mismo n tienen el mismo valor medio y la misma energía.

En átomos polielectrónicos la distribución radial de probabilidad (no sólo su valor medio) determina la energía.

Orbitales con mayor **capacidad de penetración** tienen menos energía:

$$E_{2s} < E_{2p}$$

Los electrones en orbitales con mayor capacidad de penetración “sienten” efectivamente más carga nuclear que aquellos en orbitales menos penetrantes.

A su vez le “apantallan” la carga del núcleo a los orbitales menos penetrantes.

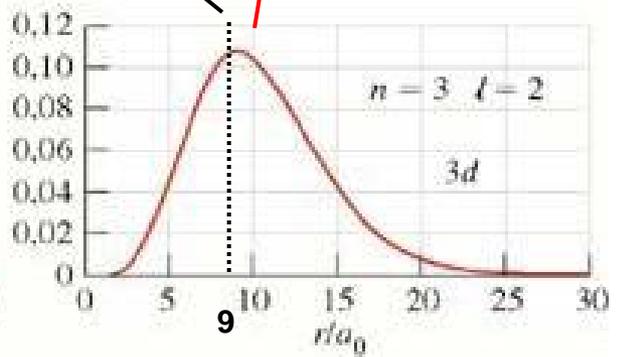
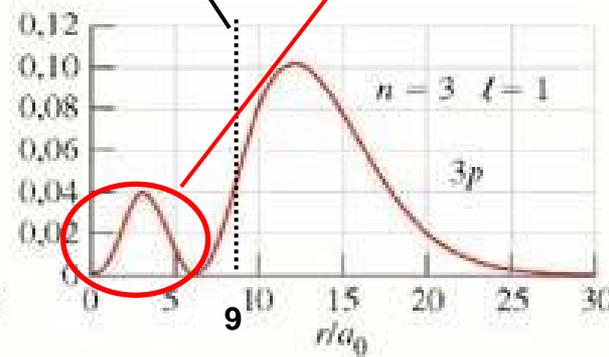
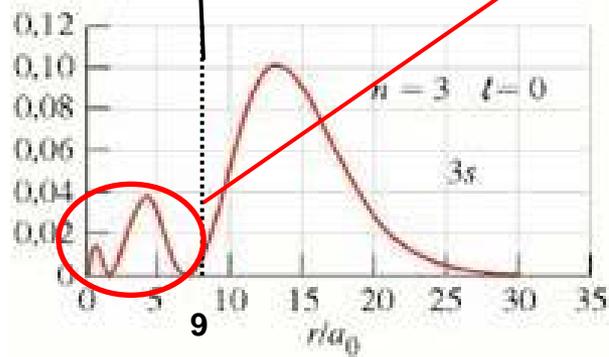
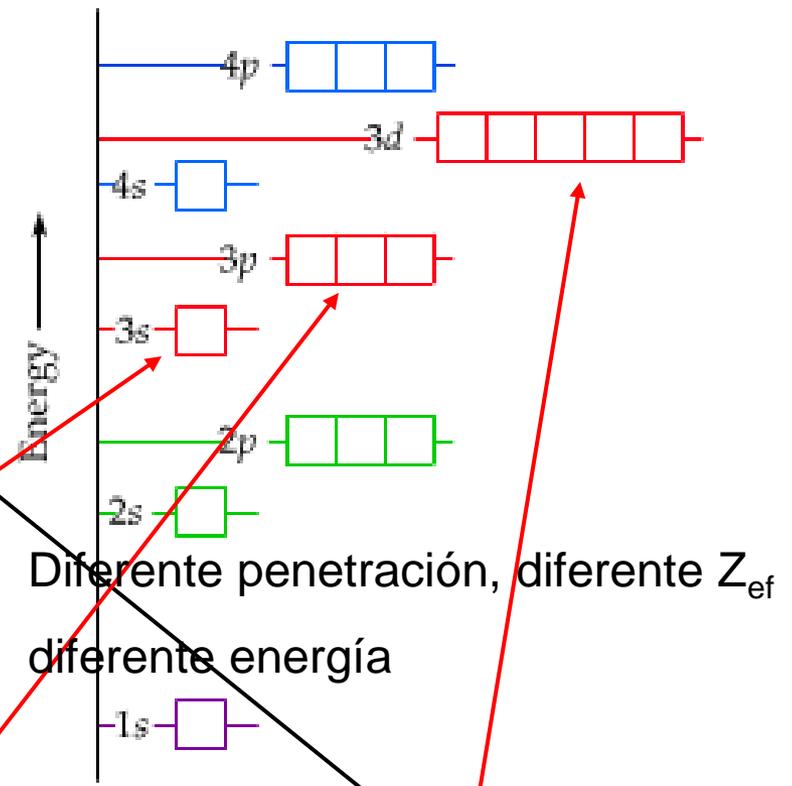
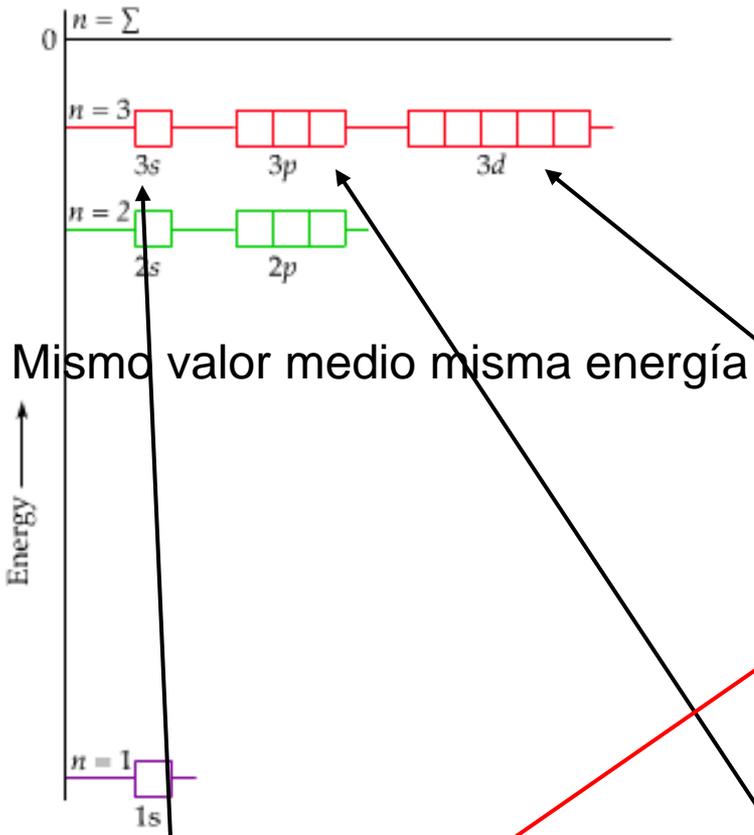
Se define la **carga nuclear efectiva** (Z_{ef} o Z^*) que experimenta un electrón en un orbital determinado de un átomo como la fracción de la carga nuclear que efectivamente experimenta el electrón como consecuencia del apantallamiento que le hacen el resto de los electrones del átomo.

La **energía** de un orbital de un átomo polielectrónico viene determinada por Z_{ef}

$$E_n \propto \frac{-Z_{ef}^2}{n^2}$$

Hidrogenoide

Polielectrónico



Configuraciones electrónicas

Construir la configuración electrónica de un átomo supone construir una función de onda que describa todos los electrones del átomo a partir de funciones de onda hidrogenoides:

$$\text{Ej: átomo F (1s}^2 \text{ 2s}^2 \text{ 2p}^5\text{):} \quad E_{(F)}\Psi_{(F)} = \mathcal{H}\Psi_{(F)}$$

$$\Psi_{(F)} = \psi^*_{1s}(1) \psi^*_{1s}(2) \psi^*_{2s}(3) \psi^*_{2s}(4) \psi^*_{2p}(5) \dots \psi^*_{2p}(9)$$

donde: $\psi^*_{1s}(1)$, $\psi^*_{1s}(2)$ $\psi^*_{2p}(9)$ son funciones de onda tipo hidrógeno para describir los tres electrones del átomo de litio.

Reglas para construir las configuraciones electrónicas

Principio aufbau: Los electrones ocupan los orbitales de forma que se minimice la energía del átomo.

Principio de exclusión de Pauli: Dos electrones de un átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales.

Regla de Hund: Los electrones ocupan los orbitales degenerados de forma que se consiga el máximo desapareamiento.

1s Principio aufbau

2s 2p

3s 3p 3d

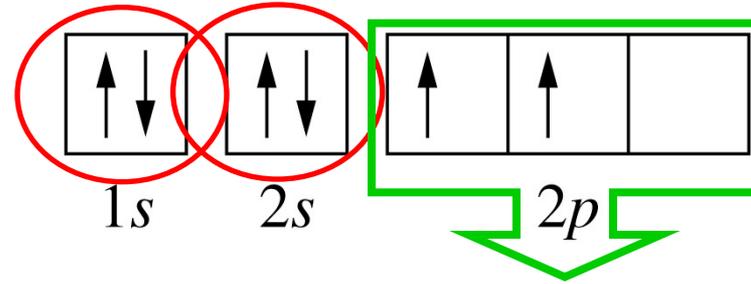
4s 4p 4d 4f

5s 5p 5d 5f

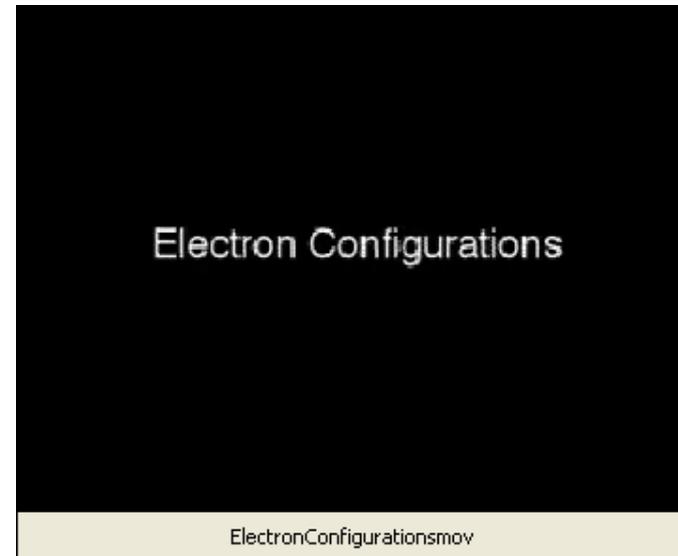
6s 6p 6d

7s 7p

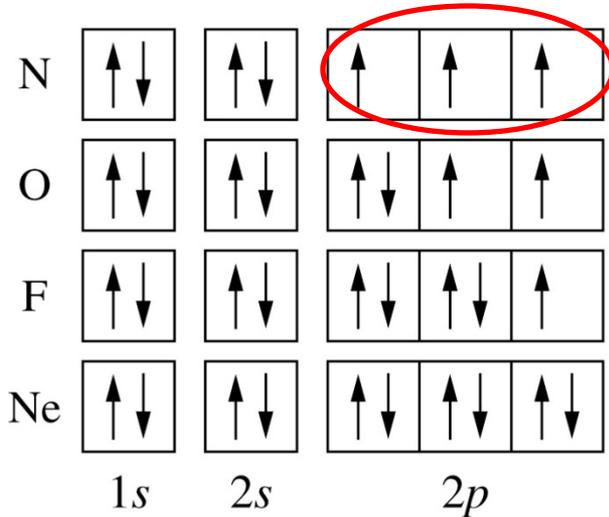
Principio de exclusión de Pauli



Regla de Hund

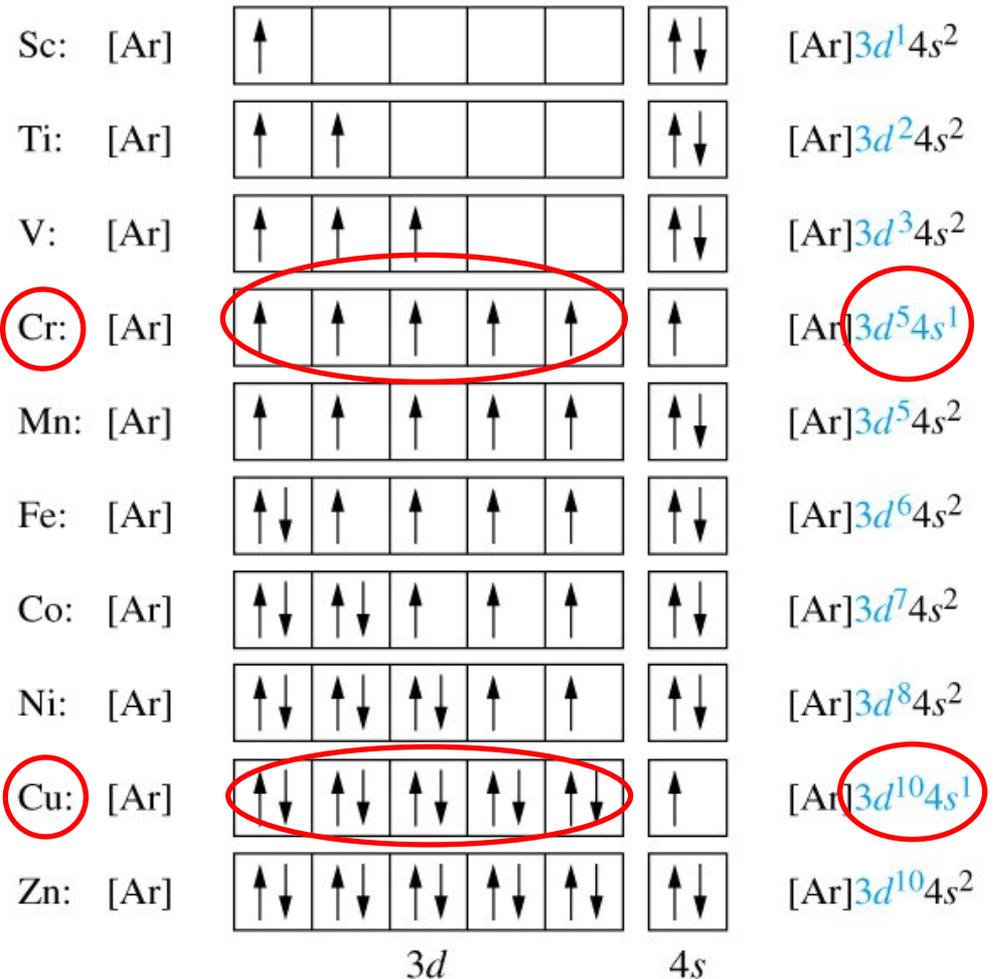


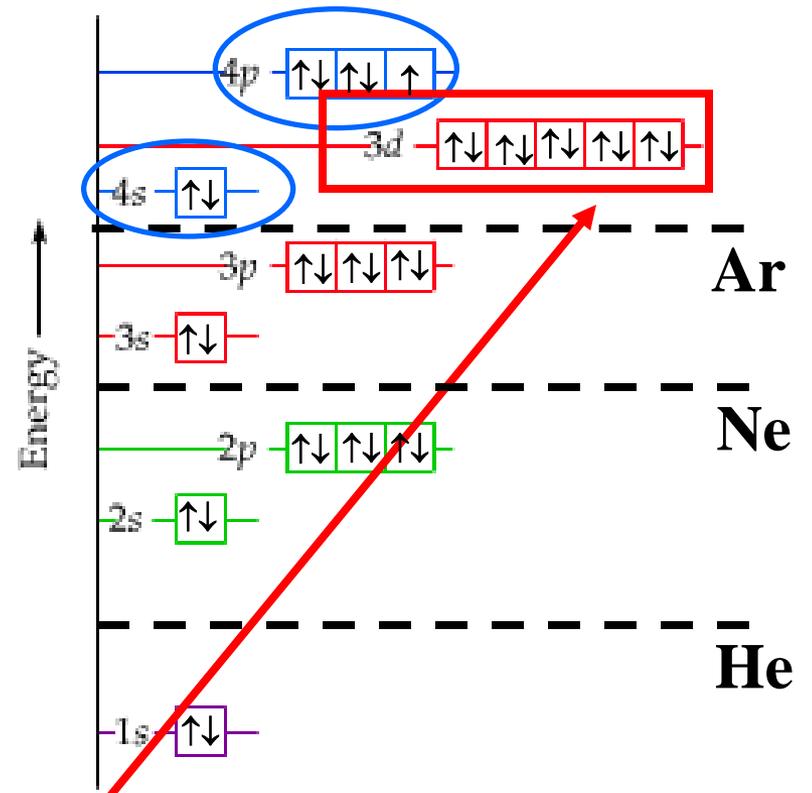
Configuraciones electrónicas



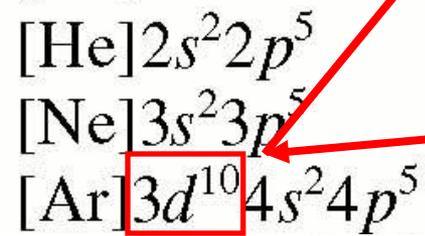
Capas o subcapas llenas o semillenas suponen una estabilización adicional:

Anomalías en configuración electrónica o en propiedades físicas (ionización, radio, etc..)





F
Cl
Br



¡Atención!

¿ Qué debes haber aprendido ?

- (1) **Significado físico de la Ecuación de Schrödinger: qué es el Hamiltoniano de un sistema, funciones de onda (estados) y energías propias asociadas.**
- (2) **Origen de la cuantización. Significado de Ψ , Ψ^2 y números cuánticos.**
- (3) **Forma del Hamiltoniano y las funciones de onda de átomos hidrogenoides: parte radial y parte angular. Coordenadas polares vs cartesianas.**
- (4) **Números cuánticos para átomos hidrogenoides: magnitudes que cuantizan. Discernir las combinaciones de números cuánticos con sentido físico (permitidas). Orbital Atómico: números cuánticos que lo definen.**
- (5) **Spin electrónico: número cuántico asociado. Fermiones y bosones.**
- (6) **Estados electrónicos: definición, estado fundamental y excitado.**
- (7) **A conocer los tipos de OAs: forma y orientación, concepto de nodo (radial y angular).**
- (8) **Principio de Exclusión de Pauli para fermiones (como el electrón).**
- (9) **Capas y subcapas en átomos hidrogenoides: cuantización de la energía sólo por n.**

¿ Qué debes haber aprendido ?

- (10) Átomos polielectrónicos: significado de las configuraciones electrónicas. Carga nuclear efectiva para un orbital.**
- (11) Función de distribución radial de la probabilidad: valor medio de la distancia electrón-núcleo (sólo depende de n) y distribución de la probabilidad electrónica (depende de l y m_l). Penetración, apantallamiento y carga nuclear efectiva.**
- (12) La energía de un orbital en un átomo hidrogenoide sólo depende del valor medio de la distancia pero para uno polielectrónico depende de la forma de la distribución: las subcapas en los primeros tienen la misma energía, pero no en átomos polielectrónicos.**
- (13) A construir configuraciones electrónicas: principio de aufbau, principio de Pauli y regla de Hund. Excepciones relacionadas con formación de capas o subcapas llenas o semillenas.**