

INDICE

Objetivo 3

UNIDAD I – Teoría Cuántica y Estructura Atómica 4

- Base experimental de la Teoría Cuántica
- Radiación del Cuerpo Negro y Teoría de Planck
- Efecto Fotoeléctrico
- Espectros de Emisión
- Teoría Atómica de Bohr
- Aplicación de la Teoría de Bohr: Teoría Atómica de Sommerfield
- Estructura Atómica
- Principios de Dualidad (comportamiento del electrón: partícula-onda). Postulado De Broglie
- Principios de Incertidumbre de Heisenberg
- Ecuación de Onda de Schrödinger
- Significado Físico de la Función
- Solución de la Ecuación de Onda y su Significado Físico: orbitales s, p, d, f
- Teoría Cuántica y Configuración Electrónica
- Distribución Electrónica en Sistemas Polielectrónicos
- Niveles de Energía de los Orbitales
- Principio de Exclusión de Pauli
- Principio Aufbau o de Construcción
- Principio de Máxima Multiplicidad de Hund
- Configuración Electrónica de los Elementos

Bibliografía

OBJETIVO

Relacionara y utilizara las bases de la química moderna en su aplicación para el conocimiento de la estructura atómica: Orbitales Atómicos, Configuración Electrónica, Orbitales, Etc.

Conocerá los acontecimientos históricos más relevantes de la teoría cuántica.

Diferenciara el número atómico de la masa

Atómica, como otros conceptos.

Representara la configuración electrónica de los átomos utilizando los números cuanticos.

BASE EXPERIMENTAL DE LA TEORÍA CUANTICA

Número Atómico.– Número de electrones que es igual a su número de protones del elemento.

Número de Masa.– Es la suma de protones y neutrones que contiene el núcleo.

Isótopo.– Es el elemento que tiene igual número atómico que otro con distinto número de neutrones y por lo tanto diferente número de masa.

Masa Atómica.- Es la suma promedio de los isótopos que existen en la naturaleza comparado con el carbono 12 (C^{12}). Es la suma promedio de los isótopos.

Masa Formula.- Es la suma de la masa atómica de todos los átomos presentes en la formula.

Masa Molecular.- La suma de las masas atómicas de todos los átomos que forman una molécula y se expresa en U. M. A..

Negro de Carbono ó Negro de Humo.- producto del carbono derivado del petróleo y se asemeja a lo que es el cuerpo negro. Ejemplo: Las llantas de los carros.

CARACTERÍSTICAS DEL ATOMO

Son las unidades más pequeñas de un elemento químico. En la filosofía de la antigua Grecia, la palabra **átomo** se empleaba para referirse a la parte de materia más pequeña que podía concebirse. Esa **partícula fundamental**, se consideraba indestructible. De hecho, átomo significa en griego no divisible. Los químicos se dieron cuenta muy pronto de que todos los líquidos, gases y sólidos se pueden descomponer en sus constituyentes últimos, o elementos. La curiosidad acerca del tamaño y masa del átomo atrajo a cientos de científicos durante un largo periodo en el que la falta de instrumentos y técnicas apropiadas impidió obtener respuestas satisfactorias. Posteriormente se diseñaron numerosos experimentos ingeniosos para determinar el tamaño y masa de los diferentes átomos. El átomo más ligero, es el de hidrógeno, tiene un diámetro de aproximadamente 10^{-10} m ($0,0000000001$ m) y una masa alrededor de $1,7 \times 10^{-27}$ kg. Un átomo es tan pequeño que una sola gota de agua contiene más de mil trillones de átomos.

BASE EXPERIMENTAL DE LA TEORÍA CUÁNTICA APLICADA A LA ESTRUCTURA ATÓMICA

¿Cómo pueden encontrarse los electrones en los átomos de forma que absorban y emitan energía como cuantos?. Para resolver esta pregunta, Bohr sugirió que los electrones deben hallarse en órbitas de cierto tamaño, moviéndose a cierta velocidad. Entonces, los electrones deben tener cierta energía. Si el electrón absorbe energía, se moverá en un orbital de mayor energía y más alejada del núcleo. Si pierde energía, el electrón se moverá en otra órbita más cercana al núcleo. La teoría cuántica indujo la idea de que los electrones en las orbitas, tienen una cantidad de energía (se dice que los electrones se encuentran en ciertos niveles de energía). Bohr aplicó estas ideas al átomo de hidrógeno y calculó matemáticamente cuál sería la frecuencia de la radiación emitida por el hidrógeno, desafortunadamente, esa teoría no funcionó también con elementos cuyos átomos son más complejos que los del hidrógeno. Como resultado del trabajo teórico y experimental, se ha llegado a desarrollar una representación de la estructura atómica, que explica en forma satisfactoria los fenómenos químicos. Más que describir al electrón como si se encontrase en un orbital perfectamente definido, **la nueva teoría cuántica** sugiere que existen en regiones que se conocen como capas. Cada capa tiene la capacidad para contener a más de un electrón, aun cuando existe un límite superior, dependiendo de la capa que se esté considerando. A diferencia de la órbita, una capa tiene una ubicación menos definida alrededor del núcleo.

CUERPO NEGRO Y TEORÍA DE PLANCK

El físico alemán **Max Karl Ernst Ludwig Planck** en 1900, dice que la interacción entre la materia y la radiación, no se verifica de manera continua, sino por pequeñas pulsadas llamados **cuantos** (radiaciones electromagnéticas emitidas en unidades discretas de energía), como resultado de los estudios de la radiación del **cuerpo negro** (cuerpo o superficie ideal, que absorbe toda la energía radiante sin reflejar ninguna). Planck diseñó una fórmula matemática que describiera las curvas reales con exactitud, para demostrar que no todas las formas de radiación electromagnética estaban constituidas por ondas, después, dedujo una hipótesis física que pudiera explicar la fórmula. Su hipótesis fue que la energía sólo es radiada en cuantos cuya energía es $h\nu$,

donde ν es la frecuencia de la radiación y h es el '**cuanto de acción**', ahora conocido como **constante de Planck**. Según Planck, la energía de un cuanto de luz (**fotón**), es igual a la frecuencia de la luz multiplicada por una constante. La primera medida fiable de la constante de Planck (1916) se debió al físico estadounidense **Robert Millikan**. El valor actualmente aceptado es $h = 6,626 \times 10^{-34}$ julios·segundo.

ECUACIÓN DE PLANCK $E = h \nu$

La energía es directamente proporcional a la frecuencia.

EFECTO FOTOELÉCTRICO

Formación y liberación de partículas eléctricamente cargadas que se produce en la materia cuando es irradiada con luz u otra radiación electromagnética. Esto sucede cuando se agrega suficiente energía para vencer las fuerzas de atracción que existen en las superficies del metal y se emiten electrones por la acción de los rayos ultravioleta ó de los rayos X produciéndose otro efecto de luz relacionado con la electricidad. En el efecto fotoeléctrico externo se liberan electrones en la superficie de un conductor metálico al absorber energía de la luz que incide sobre dicha superficie. Este efecto se emplea en la **célula fotoeléctrica**, donde los electrones liberados por un polo de la célula, el **fotocátodo**, se mueven hacia el otro polo, el ánodo, bajo la influencia de un campo eléctrico (experimento en 1887 del efecto fotoeléctrico externo, a medida que la luz que incide sobre un metal se hace más intensa, en el metal se liberarán electrones con una energía cada vez mayor). Cuando un electrón libre del metal es golpeado por un fotón, absorbe la energía del mismo. Si el fotón tiene la suficiente energía, el electrón es expulsado del metal. El término **efecto fotoeléctrico** también puede referirse a otros **tres procesos**: la fotoionización, la fotoconducción y el efecto fotovoltaico. La fotoionización es la ionización de un gas por la luz u otra radiación electromagnética. Para ello, los fotones tienen que poseer la suficiente energía para separar uno o más electrones externos de los átomos de gas. En la fotoconducción, los electrones de materiales cristalinos absorben energía de los fotones y llegan así a la gama de niveles de energía en la que pueden desplazarse libremente y conducir electricidad. En el efecto fotovoltaico, los fotones crean pares electrón–hueco en materiales semiconductores.

ESPECTROS DE EMISIÓN

Cuando la energía se introduce calentando el elemento a una temperatura elevada, por radiación o por energía eléctrica, los átomos absorben energía. Cuando la fuente de energía se elimina, los átomos emiten la energía que absorbieron. En algunos casos, la emisión ocurre mientras la fuente de energía todavía se encuentra presente, como en el caso de la luz emitida cuando se aplica un voltaje elevado a electrodos de carbón, produciendo un arco eléctrico. Una forma familiar de esta radiación es la luz, que emite un elemento que se conoce como **espectro**. El instrumento que se utiliza en **espectroscopia**, llamado **espectroscopio**, separa la luz en sus longitudes de onda componentes. Entonces, las diferentes longitudes de onda se enfocan como líneas sobre una pantalla o película. Se ha establecido, que cada elemento absorbe y emite, únicamente ciertas longitudes de onda. Un ejemplo familiar de emisión de color particular o longitud de onda de luz es la luz roja del neón.

SERIES ESPECTRALES

Bohr obtuvo una fórmula general para la radiación emitida por el átomo de hidrógeno, que no sólo proporcionaba las longitudes de onda de las líneas de Balmer, sino que predecía correctamente otras **series de líneas** que se observaron posteriormente en la zona ultravioleta e infrarroja del espectro del hidrógeno.

TEORÍA ATÓMICA DE BOHR.

El trabajo de Bohr, giró sobre el modelo nuclear del átomo de Rutherford, en el que el átomo se ve como un núcleo compacto rodeado por un enjambre de electrones más ligeros. El modelo de Bohr establece que un

átomo emite radiación electromagnética sólo cuando un electrón del átomo salta de un nivel cuántico a otro (**átomo excitado**).

Niels Bohr impulso los conceptos de:

- Los electrones se encuentran en capas y que los de la última capa determinan las propiedades químicas de un átomo.
- Los electrones giran alrededor del núcleo en estado físico y de determinada energía, por lo cual, al desplazarse a través de una órbita, no emiten ni absorben energía.
- Un electrón puede saltar de un nivel de energía a otro, siempre y cuando absorba o desprenda la energía necesaria.

TEORÍA ATÓMICA DE SOMMERFIELD

En 1916, **Arnold Sommerfield** expuso ciertas modificaciones a la teoría de Bohr diciendo que los electrones podían viajar en órbitas elípticas y circulares. En su teoría, introdujo un parámetro (l) $l = n - 1$, agregado al parámetro señalado por Bohr (n). En el modelo atómico de Sommerfield (n) es igual a 1, 2, 3, etc., y la estructura l indica el grado en la que la circunferencia sufre desviaciones. Los valores de n y l están íntimamente relacionados.

Reydborg estableció una regla con la cual determina el número de electrones que hay en un orbital $2n^2$, pero después del cuarto nivel ya no se cumple la regla ni tampoco con los polielectrónicos. En el último orbital solo pueden haber como máximo 8 electrones.

$$\text{Nivel } n = 1 \quad 2(1)^2 = 2$$

$$\text{Nivel } n = 2 \quad 2(2)^2 = 8$$

$$\text{Nivel } n = 3 \quad 2(3)^2 = 18$$

$$\text{Nivel } n = 4 \quad 2(4)^2 = 32$$

El estado energético de un electrón queda definido por dos números, n y l . Los **términos espectrales** s, p, d, f que provienen del espectro del hidrógeno. También sugirió que los electrones en los metales se encuentran en una disposición cuántica en la que los niveles de baja energía disponibles para los electrones se hallan casi completamente ocupados.

PRINCIPIO O TEORÍA DE LA DUALIDAD

El físico francés **Louis de Broglie** en 1924, considero, que la luz no solo es un efecto corpuscular sino también ondulatorio. La dualidad onda-corpúsculo es la posesión de propiedades tanto ondulatorias como corpusculares por parte de los objetos subatómicos. **La teoría de la dualidad de la materia** considera que la materia tiene un comportamiento corpúsculo-onda ó partícula-onda.

$$\lambda = \text{longitud de onda} \quad h = \text{constante de Planck}$$

$$m = \text{masa del electrón} \quad v = \text{velocidad de la partícula-onda}$$

PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG

El físico alemán **Werner Heisenberg** en 1926, expuso que es imposible conocer con precisión y simultáneamente la posición y velocidad del electrón, ya que al determinar la velocidad se altera el valor real

de su posición.

ECUACIÓN DE ONDA DE SCHRÖDINGER

El físico austriaco **Erwin Schrödinger** en 1927, establece la relación entre la energía de un electrón y la distribución de este en el espacio de acuerdo con sus propiedades ondulatorias. Propuso una ecuación que no señala órbitas discretas, sino la onda asociada al electrón. Su ecuación es:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \psi = 0$$

= Derivación parcial de la función de onda

ψ = (psi) Amplitud de la función de onda del electrón

E = Energía total del sistema

V = Energía potencial del sistema

m = Masa del electrón

$\hbar$ = Constante de Planck

(x, y, z) = Coordenadas cartesianas

Al resolver la ecuación de Schrödinger se encontró solución a los siguientes números cuánticos, con excepción del cuarto parámetro que fue agregado por **Dirac**:

Núm. Cuánt. Principal (n).-Define el tamaño de la nube electrónica.

Núm. Cuánt. Secundario ó azimutal (l).-Determina la forma del orbital.

Núm. Cuánt. Magnético (m).-Señala las orientaciones del orbital.

Núm. Cuánt. Spin (s).- Indica el giro del electrón y la posición.

Si l = 0, n=1 su orbital es s, m es igual 0 y s es igual a +½, -½ con 2 e- como máximo.

Si l = 0,1, n=2 su orbital es p, es igual -1,0,+1 y s es igual a +½,-½ con 6 e- como máximo.

Si l = 0,1,2, n=3 su orbital es d, es igual -2,-1,0,1,2 y s es igual a +½,-½ con 10 e- como máximo.

Si l = 0,1,2,3, n=4 su orbital es f, es igual -3,-2,-1,0,1,2,3 y s es igual a +½,-½ con 14 e- como máximo.

Cuando n=5,6,7 son los mismos orbitales que n=4.

TEORÍA CUANTICA Y CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

La **teoría** física basada en la utilización del concepto de unidad cuántica para describir las propiedades dinámicas de las partículas subatómicas y las interacciones entre la materia y la radiación y la configuración electrónica es la distribución de los electrones en el átomo, según su número cuántico y atómico, y por tanto,

es la más probable de los electrones en torno al núcleo. Otra definición podría ser la organización de los electrones en un átomo, que determina las propiedades químicas del mismo.

22Ti ---1s², 2s², 2p⁶, 3s², 3p⁶, 4s², 3d²

SISTEMAS POLIELECTRÓNICOS

El problema de sistemas polielectrónicos es sin lugar a dudas de envergadura, y precisa de a lo menos de un manejo formal de la teoría de momentum angular. Así por ejemplo para ilustrar la naturaleza del problema consideremos un sistema del tipo He (Z=2), sistema que presenta dos electrones. Para un sistema de tres partículas, a saber un núcleo y dos electrones, la función clásica de hamilton es expresable de la forma siguiente:

PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI

En un orbital existen como máximo dos electrones, debido a que no pueden existir, en un átomo, dos electrones que tengan sus cuatro números cuánticos iguales. La consecuencia de esto es que en un orbital sólo puede haber 2 electrones con spines diferentes.

PRINCIPIO DE AUFBAU Ó DE CONSTRUCCIÓN ESTABLE

Los electrones buscan un lugar entrando en el átomo, en los distintos orbitales de energía, ocupando primero los de menor energía, dependiendo esta energía de los menores valores de (n + l). Los orbitales menos energéticos son los de menor valor de n+l. Si los orbitales tienen el mismo valor de n+l, tendrá menos energía los de menor valor de n. Para saber el orden de energía de los orbitales se usa el diagrama de Mouller. De acuerdo con estas reglas el orden es el siguiente:

1s², 2s², 2p⁶, 3s², 3p⁶, 4s², 3d¹⁰, 4p⁶, 5s², 4d¹⁰, 5p⁶, 6s², 4f¹⁴, 5d¹⁰, 6p⁶, 7s², 5f¹⁴, 6d¹⁰, 7p⁶, 6f¹⁴, 7d¹⁰, 7f¹⁴

1s

2s 2p

3s 3p 3d

4s 4p 4d 4f

5s 5p 5d 5f

6s 6p 6f

7s

Configuración abreviada con **KERNEL**:

35Br -- **18Ar**, 4s², 3d¹⁰, 4p⁵

PRINCIPIO DE MÁXIMA MULTIPLICIDAD DE HUND

Un segundo electrón no entra en un orbital que esté ocupado por otro mientras que haya otro orbital desocupado de la misma energía (o sea, igual los valores de n y l), Ni puede existir apareamiento electrónico

en orbitales iguales, mientras no exista un electrón por lo menos en cada orientación.

CONCLUSIÓN

Este trabajo sirvió para conocer un poco acerca de las bases de la Teoría Cuántica, la estructura y características del átomo.

También nos mostró que es el cuerpo negro, que es un efecto fotoeléctrico y sus espectros de emisión y series espectrales.

Se nos da a conocer la teoría de Bohr, Sommerfield, Schrödinger, el principio de dualidad, la teoría de Heisenberg, el principio de Pauli, Aufbau, Hund y también los sistemas polieléctricos.

Se nos enseña a usar la configuración electrónica extensa y abreviada.

Se nos dieron a conocer todos los números cuánticos y su descripción de cada uno de ellos.

BIBLIOGRAFÍA

QUÍMICA 1

ARTURO MORALES RODRÍGUEZ

SECRETARIA DE EDUCACIÓN Y CULTURA

ENCICLOPEDIA ENCARTA

EDICION BASICA 2002

QUÍMICA AVANZADA 1

L. RIVERA

EDIT. PORRUA

E

r

h

mV

=

+

+

+

$(E - \nu) = 0$

ATOMO

NUCLEO

CORTEZA ó ENVOLTURA

PROTON (p^+) RUTHERFORD (1919)

NEUTRON (n^0) CHADWICK (1939)

ELECTRÓN (e^-) MILLIKAN (1906)

.....

Q

7

N

4

M

3

L

2

K

1





4



5

6

6

7

7

7

8

8

8

9

9

9

9

9

9

9

10

