

Tema 2.1.- El átomo.

2.2 Evolución del modelo atómico:

2.2.- Modelo mecánico cuántico ondulatorio

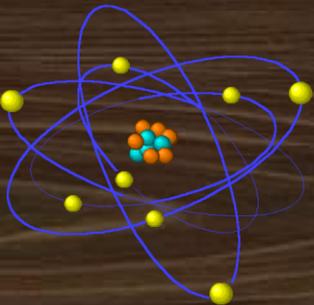
2.2.1.- Números cuánticos

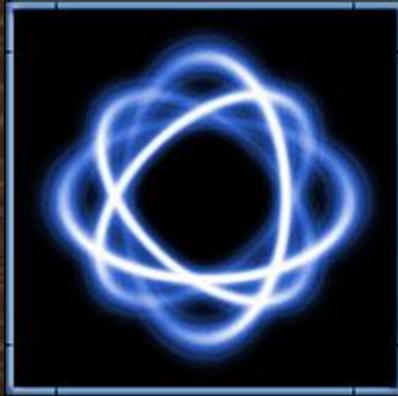
2.3.- Configuración electrónica

2.3.1.- normal, su desarrollo y mención de:
spin.

2.3.2.- kernel,

2.3.3.- Lewis





Números Cuánticos



Conceptos Básicos

Para una mejor comprensión de esta presentación, se recomienda que el alumno ya este familiarizado con los conceptos siguientes:

- Ecuación de Onda de Schrödinger
- Diamagnetismo y Paramagnetismo



ECUACIÓN DE ONDA DE SCHRÖDINGER

En 1926, Erwin Schrödinger postuló una ecuación, conocida como ecuación de onda, que le permitió calcular los niveles de energía en un átomo, fundando así, una nueva mecánica, la de las partículas subatómicas, que se llamó **mecánica cuántica**. Las soluciones de la ecuación de onda describen los diferentes estados disponibles para los electrones en el interior de los átomos, estos estados quedaban descritos por **tres números cuánticos**; sin embargo, en 1928, **Paul A. M. Dirac** reformuló la mecánica cuántica del electrón para tener en cuenta los efectos de la relatividad, dando lugar a un **cuarto** número cuántico.



DIAMAGNETISMO Y PARAMAGNETISMO

Cuando en una sustancia todos los orbitales contienen dos electrones (**electrones apareados**), se observa que al colocar dicha sustancia bajo la influencia de un campo magnético externo, **es débilmente repelida** y se dice entonces que es una **sustancia diamagnética**; en contraste, una sustancia que contiene uno o más orbitales con un solo electrón (**electrones desapareados**), es atraída por un campo magnético externo, y se dice que es una **sustancia paramagnética**.



Antecedentes

Los números cuánticos son variables involucradas en la ecuación de onda de Schrödinger.

Dependiendo de los valores de los números cuánticos, se obtienen diferentes soluciones para la ecuación de onda.

Estas soluciones permiten conocer los lugares de máxima probabilidad para ubicar a un electrón dentro de un átomo.



Antecedentes

Los números cuánticos obtenidos de la ecuación de onda son tres:

- El *número cuántico principal*. (n)
- El *número cuántico secundario*, (l) también llamado *númerocuántico azimutal* o *número cuántico de momento angular*.
- El *número cuántico magnético*. (m)
- Adicionalmente el numero de spin (s)



Número Cuántico Principal

El número cuántico principal, se denota con un una letra n y su valor indica la órbita o nivel energético en el que se encuentra el electrón, mientras mayor sea el valor de n , más alejado esta el electrón del núcleo, y mayor es su contenido energético.



Número Cuántico Principal

Los valores que adquiere n , son números enteros mayores de cero; así por ejemplo:

Cuando $n = 1$, el electrón se encuentra en la órbita **1**

Cuando $n = 2$, el electrón se encuentra en la órbita **2**

Cuando $n = 3$, el electrón se encuentra en la órbita **3**.

Cuando $n = x$, el electrón se encuentra en la órbita **x**



Número Cuántico Secundario

El número cuántico secundario, se denota con una letra l y su valor indica la subórbita o subnivel de energía en el que se encuentra el electrón.

Dicha subórbita o subnivel energético, también llamado orbital, se puede entender como la forma geométrica que describe el electrón al moverse dentro del átomo.



Número Cuántico Secundario

Para cada valor de n , l adquiere diferentes valores enteros, que van desde **cero** hasta $n-1$; así por ejemplo:

Cuando $n = 1$, l adquiere un solo valor: **0**

Cuando $n = 2$, l adquiere dos valores: **0 y 1**

Cuando $n = 3$, l adquiere tres valores: **0, 1 y 2**

.



Número Cuántico Secundario

Como se mencionó anteriormente, los orbitales son formas geométricas que describen los electrones al moverse en el interior del átomo. Estas formas geométricas son diferentes para cada valor de l y a cada orbital se le asigna una literal.



Número Cuántico Secundario



$l = 0$



Orbital s

$l = 1$



Orbital p

$l = 2$



Orbital d



Número Cuántico Secundario

Cuando $l = 3$, los orbitales son del tipo **f**; cuando $l = 4$, los orbitales son del tipo **g** y a partir de aquí, se van asignando las letras siguientes del abecedario. Conforme aumenta el valor de l , aumenta la complejidad de la figura geométrica que describe el electrón; de hecho, aún no se han determinado las formas que presentan los orbitales del tipo **g**.



Número Cuántico Magnético

El número cuántico magnético, se denota con una letra m y sus valores indican las orientaciones que tienen los orbitales en el espacio.



Número Cuántico Magnético

Para cada valor de l , m adquiere diferentes valores enteros que van desde $-l$ hasta $+l$, pasando por **cero**; así por ejemplo:

Cuando $l = 0$, m adquiere un solo valor: **0**

Cuando $l = 1$, m adquiere tres valores: **-1, 0 y +1**

Cuando $l = 2$, m adquiere cinco valores: **-2, -1, 0, +1 y +2**



Con base en lo anterior, para las tres primeras órbitas de un átomo, se puede establecer la tabla siguiente:

	1a. Órbita	2a. Órbita			3a. Órbita									
n	1	2			3									
l (Orbital)	0 (s)	0 (s)	1 (p)		0 (s)	1 (p)		2 (d)						
m	0	0	-1	0	+1	0	-1	0	+1	-2	-1	0	+1	+2

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$l = n - 1$$

$$m = -l \text{ hasta } +l$$

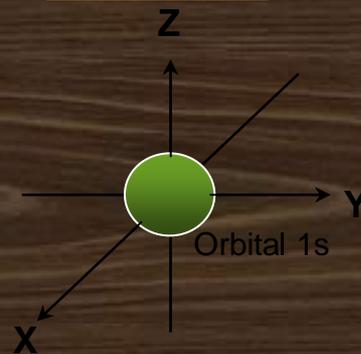


	1a. Órbita		2a. Órbita			3a. Órbita								
n	1		2			3								
l (Orbital)	0 (s)	0 (s)	1 (p)			0 (s)	1 (p)			2 (d)				
m	0	0	-1	0	+1	0	-1	0	+1	-2	-1	0	+1	+2

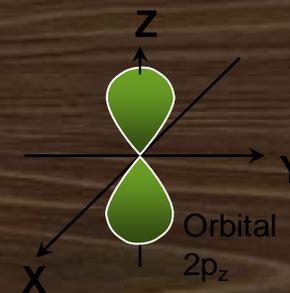
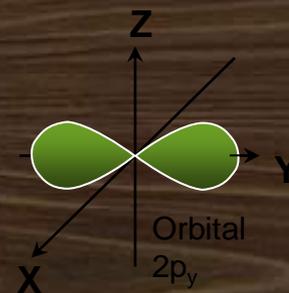
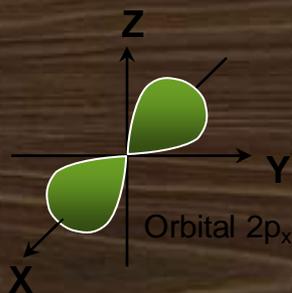
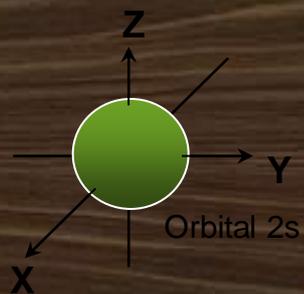


$n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 $l = n - 1$
 $m = -l$ hasta $+l$

1a. Órbita

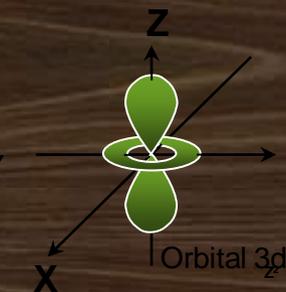
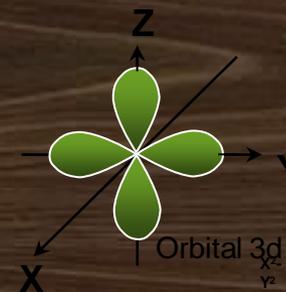
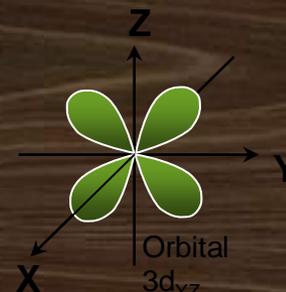
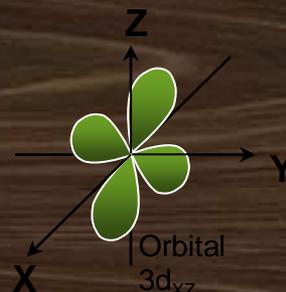
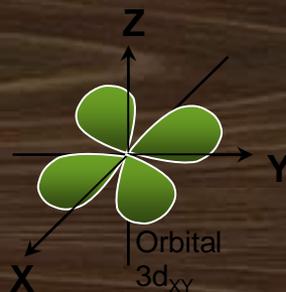
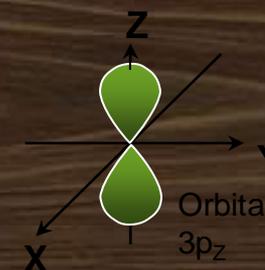
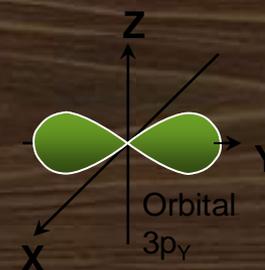
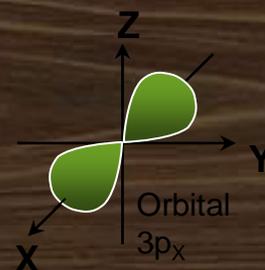
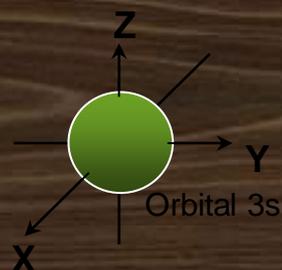


2a. Órbita



	1a. Órbita		2a. Órbita			3a. Órbita								
n	1		2			3								
l (Orbital)	0 (s)	0 (s)	1 (p)			0 (s)	1 (p)			2 (d)				
m	0	0	-1	0	+1	0	-1	0	+1	-2	-1	0	+1	+2

3a. Órbita



$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$l = n - 1$$

$$m = -l \text{ hasta } +l$$



Al emplear los parámetros n , l y m en la ecuación de onda de onda de Schrödinger, se logró conocer los lugares de máxima probabilidad (orbitales) para ubicar a un electrón dentro de un átomo, esto fue un gran avance para conocer la estructura electrónica del átomo y permitió justificar muchas características físicas y químicas de los elementos; sin embargo, fue necesario introducir un cuarto número cuántico, para tomar en cuenta los efectos relativistas y poder explicar el diamagnetismo y paramagnetismo que presentan los átomos de los elementos.



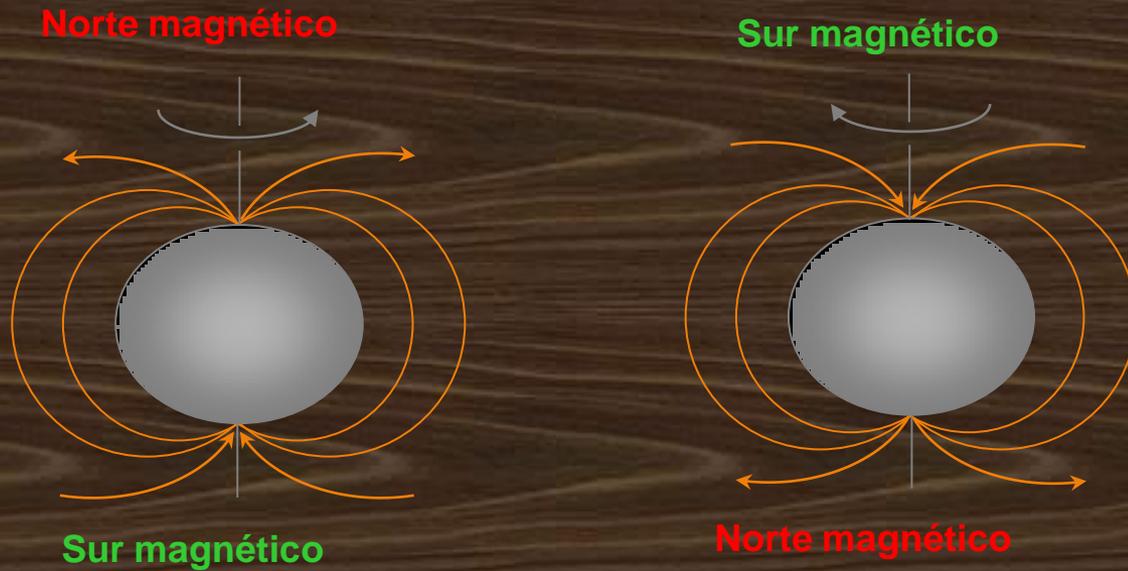
Número Cuántico de Espin

El cuarto número cuántico se denota con una letra S y se le denomina número cuántico de espín o de giro del electrón. Este número tiene dos valores por cada valor del número cuántico m ; los valores son $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$, y denotan los dos posibles giros del electrón alrededor de su propio eje.



El cuarto número cuántico se denota con una letra S y se le denomina número cuántico de espín o de giro del electrón.

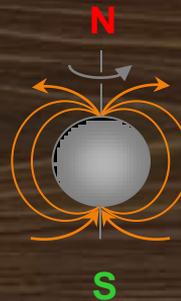
Número Cuántico de *Espin*



Ejemplo de Números Cuánticos

Hidrógeno: $1e^-$

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 $l = n - 1$
 $m = -l$ hasta $+l$
 $S = +1/2; -1/2$



Orbital



$1s^1$

Números



$n = 1$

cuánticos del

$l = 0$

electrón

$m = 0$

$s = +1/2$

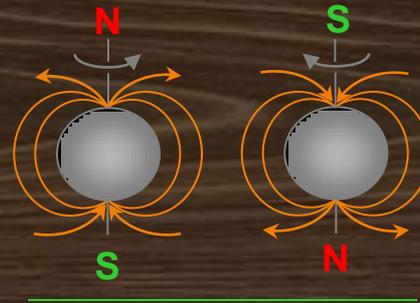
PARAMAGNÉTICO



Números Cuánticos

Helio: 2e⁻

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 $l = n - 1$
 $m = -l \text{ hasta } +l$
 $S = +1/2; -1/2$



Orbital →

1s²

Números cuánticos
de los electrones →

$n = 1$ $n = 1$

$l = 0$ $l = 0$

$m = 0$ $m = 0$

$s = +1/2$ $s = -1/2$

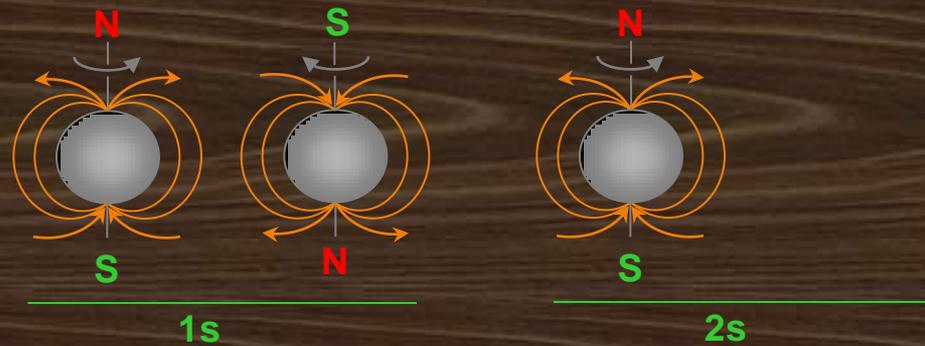
DIAMAGNÉTICO



Números Cuánticos

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 $l = n - 1$
 $m = -l \text{ hasta } +l$
 $S = +1/2; -1/2$

Litio: $3e^-$



Orbitales →

Números cuánticos
de los electrones →

$n = 1$	$n = 1$	$n = 2$
$l = 0$	$l = 0$	$l = 0$
$m = 0$	$m = 0$	$m = 0$
$s = +1/2$	$s = -1/2$	$s = +1/2$

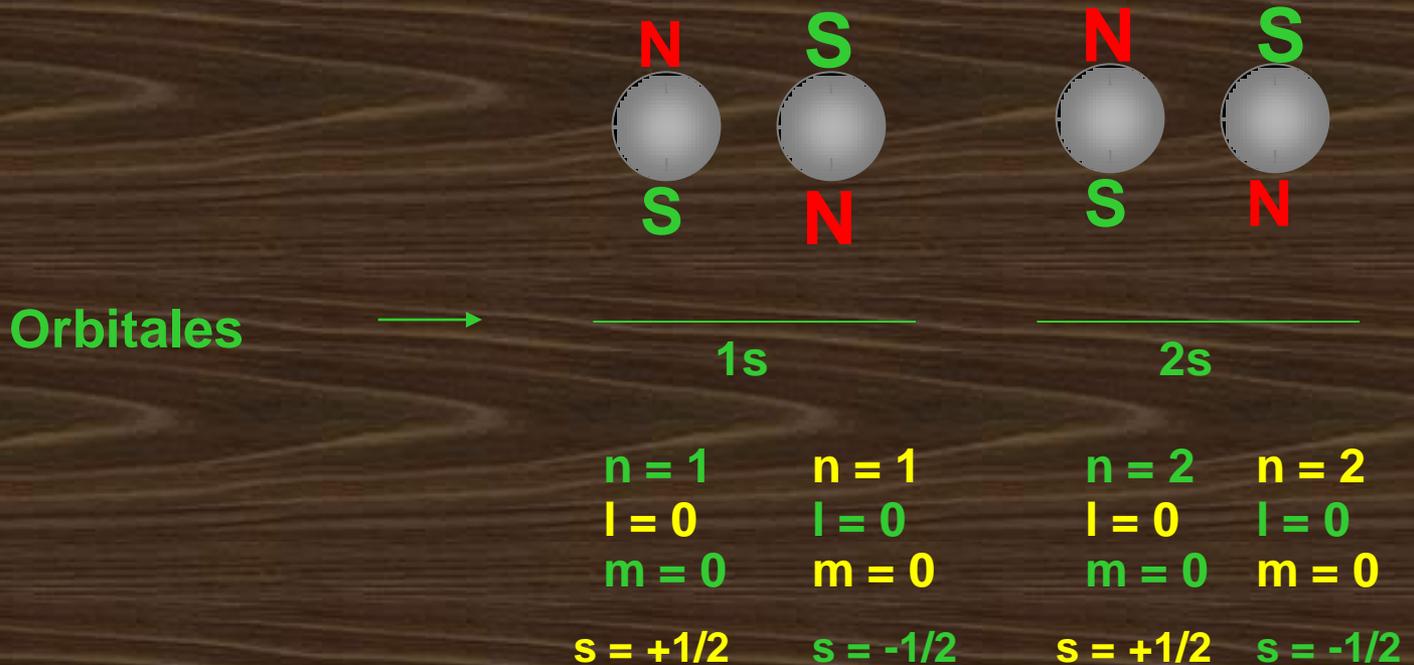
PARAMAGNÉTICO



Números Cuánticos

Berilio:4e⁻

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 $l = n - 1$
 $m = -l$ hasta $+l$
 $S = +1/2; -1/2$



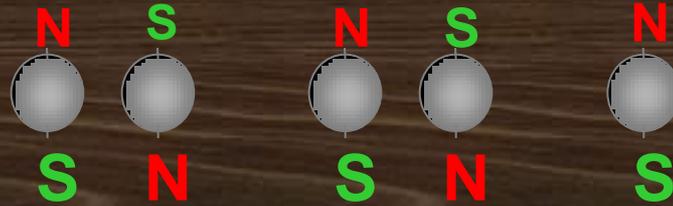
DIAMAGNÉTICO



Números Cuánticos

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 $l = n - 1$
 $m = -l \text{ hasta } +l$
 $S = +1/2; -1/2$

Boro: 5e⁻



Orbitales →

1s

2s

2p_x

2p_y

2p_z

n = 1	n = 1	n = 2	n = 2	n = 2
l = 0	l = 0	l = 0	l = 0	l = 1
m = 0	m = 0	m = 0	m = 0	m = -1
s = +1/2	s = -1/2	s = +1/2	s = -1/2	s = +1/2

PARAMAGNÉTICO



Videos de apoyo



Los numeros cuanticos.mov

