

Continuación Tema 2

Msc. María Angélica Sánchez P.

1

TEMA 2. CONTENIDO

- Introducción a la forma y características de la tabla periódica.
- Introducción a los modelos atómicos. El Método Científico.
- Introducción a la teoría cuántica. **Concepto de orbital. Números cuánticos y llenado de la tabla periódica.**
- Propiedades periódicas: radio, potencial de ionización, afinidad electrónica, electronegatividad.
- Enlace químico. Tipos de enlace según relación a la tabla periódica. Enlace iónico, enlace metálico.
- Enlace covalente. Energía de enlace y orden de enlace. Enlace covalente polar.
- Orbitales híbridos.
- Repulsión entre pares de electrones y forma de las moléculas.
- Polaridad de las moléculas.
- Propiedades de los estados agregados y su relación con el tipo de enlaces: iónicos, metálicos, Van Der Waals, ion dipolo y puente de hidrógeno.

2

Bohr : la Energía del electrón esta Cuantizada
(falla átomos multielectrónicos)

Principio Incertidumbre - Dualidad Onda Partícula

Mecánica Cuántica ó Mecánica Ondulatoria

Schrödinger 1.926

Formuló una ecuación que describe el Comportamiento y la Energía de partículas subatómicas llamada *función de onda* Ψ


3

Ecuación de onda de Schrödinger

La ecuación de onda (Ψ) nos dice:

1. **La energía de un electrón con base en una Ψ dada.**
2. **La probabilidad de encontrar un electrón en un espacio definido.**

Dicha ecuación solo puede ser utilizada de forma exacta con un átomo de hidrógeno.
Por otra parte, dicha ecuación aproxima los resultados de partículas con muchos electrones.



Densidad Electrónica: Probabilidad de encontrar un electrón en una cierta región del átomo.

Orbital atómico (Ψ): Región del espacio cercana al núcleo en la que es probable encontrar un electrón con una energía específica.

Orbita: Trayectoria en el espacio.

4

Mecánica Cuántica

➔

Precisa describir la distribución de los electrones

↓

Principal (n)
Momento angular (l)
Magnético (m)
Spin, (m_s)

➔

Cada orbital atómico
Números Cuánticos
 $\Psi = f(n, l, m, m_s)$

5

Ecuación de onda de Schrödinger

$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$

Número cuántico principal (n)

E y distancia desde e hasta el núcleo

Mayor n ⇒ **E**

> **distancia**

n = 1, 2, 3, 4, ∞

n=1

1s

n=2

2s

n=3

3s

6

Orbital S

El 90% de los e⁻ se encuentran en el primer orbital

Radial probability

Distance from nucleus

7

Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

Número cuántico del momento angular l

Forma del orbital "volumen" de espacio que ocupan los e

Dado un valor n , $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

$n = 1, l = 0$	$l = 0$ orbital s
$n = 2, l = 0, 1$	$l = 1$ orbital p
$n = 3, l = 0, 1, 2$	$l = 2$ orbital d
	$l = 3$ orbital f

8

$l = 0$ (orbitales s)

1s, 2s, 3s

$l = 1$ (orbitales p)

2p_x, 2p_y, 2p_z

9

$l = 2$ (orbitales d)

3d_{x²-y²}, 3d_{z²}, 3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{zx}

10

Ecuación de onda de Schrödinger

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

Número cuántico magnético m_l

Orientación del orbital en el espacio

Dado un valor de l $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$

Valores enteros de m_l que existen: $2l + 1$

Si $l = 1$ (orbital p), $m_l = -1, 0, 1$

Si $l = 2$ (orbital d), $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$

Orbitales presentes en un subnivel

11

$m_l = -1$ 2p_x, $m_l = 0$ 2p_y, $m_l = 1$ 2p_z

$m_l = -2$ 3d_{x²-y²}, $m_l = -1$ 3d_{z²}, $m_l = 0$ 3d_{xy}, $m_l = 1$ 3d_{yz}, $m_l = 2$ 3d_{zx}

12

Ecuación de onda de Schrödinger

$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$
 número cuántico de giro (spin) m_s

$m_s = +\frac{1}{2} \text{ ó } -\frac{1}{2}$

13

Ecuación de onda de Schrödinger

$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$

La cantidad de energía contenida en un e⁻ en un átomo, puede ser descrita por su única función de onda, Y.

Principio de exclusión de Pauli – cada electrón en un átomo tiene sus propios números cuánticos, y no pueden existir dos e⁻ en el mismo átomo, con los mismos valores

Cada asiento está identificado (E, R12, S8). En cada asiento sólo puede haber una persona a la vez!

14

TABLE 7.2 Relation Between Quantum Numbers and Atomic Orbitals

n	ℓ	m _ℓ	Number of Orbitals	Atomic Orbital Designations
1	0	0	1	1s
2	0	0	1	2s
	1	-1, 0, 1	3	2p _x , 2p _y , 2p _z
3	0	0	1	3s
	1	-1, 0, 1	3	3p _x , 3p _y , 3p _z
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{zx} , 3d _{x²-y²} , 3d _{z²}
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

15

Ecuación de onda de Schrödinger

$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$

Nivel – electrones con el mismo valor de n

Subnivel – electrones con el mismo valor de n y l

Orbital – electrones con el mismo valor de n, l, y m_l

¿Cuántos electrones pueden existir en un orbital?

Si n, l, y m_l están definidas, entonces m_s = ½ ó - ½

$\Psi = (n, l, m_l, \frac{1}{2})$ $\Psi = (n, l, m_l, -\frac{1}{2})$

Un orbital puede contener 2 electrones

16

¿Cuántos orbitales "2p" hay en un átomo?

n=2
↓
2p
↑
l=1

Si l = 1, entonces m_l = -1, 0, +1

3 orbitales

¿Cuántos electrones pueden existir en el tercer subnivel?

n=3
↓
3d
↑
l=2

Si l = 2, entonces m_l = -2, -1, 0, +1, +2

5 orbitales que pueden contener un máximo de 10 e⁻

17

Energía en los orbitales con un solo electrón

La energía de un electrón es proporcional al número cuántico n

4s – 4p – – – 4d – – – – 4f – – – –

3s – 3p – – – 3d – – – – ← n=3

2s – 2p – – – ← n=2

1s – ← n=1

Energy ↑

$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$

18

¿Cuál es la configuración electrónica del Mg?

Mg: 12 electrones $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ $2 + 2 + 6 + 2 = 12$ electrones

$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2$

Abreviándolo ... [Ne]3s² [Ne] 1s²2s²2p⁶

¿Cuál es el número cuántico del último electrón para el Cl?

Cl: 17 electrones $2 + 2 + 6 + 2 + 5 = 17$ electrones

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$

Último electrón en el orbital 3p

$n = 3$ $l = 1$ $m_l = -1, 0, 0 + 1$ $m_s = 1/2 \text{ o } -1/2$

25

¿Cuál es la configuración electrónica Metales de transición?

Sc — Cu : Reglas similares

Excepciones: Cr y Cu

Cr: 24 electrones: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$

[Ar] 4s¹3d⁵

Cu: 29 electrones: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

[Ar] 4s¹3d¹⁰

Mayor Estabilidad • Orbital lleno • Orbital Semilleno

26

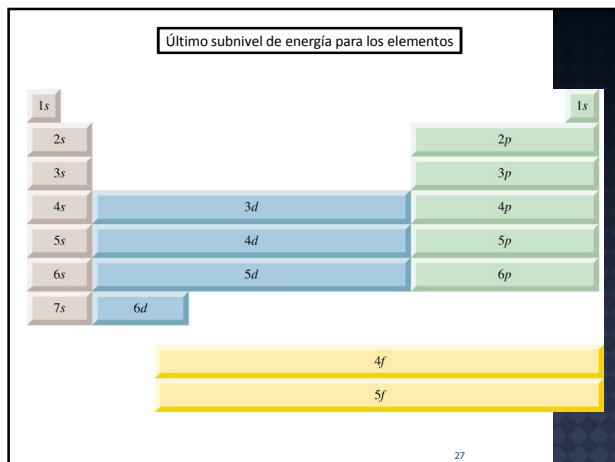


TABLE 7.3 The Ground-State Electron Configurations of the Elements*

Atomic Number	Symbol	Electron Configuration	Atomic Number	Symbol	Electron Configuration	Atomic Number	Symbol	Electron Configuration
1	H	1s ¹	38	Sr	[Kr]5s ²	75	Re	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁵
2	He	1s ²	39	Y	[Kr]5s ² 4d ¹	76	Os	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁶
3	Li	[He]2s ¹	40	Zr	[Kr]5s ² 4d ²	77	Ir	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁷
4	Be	[He]2s ²	41	Nb	[Kr]5s ¹ 4d ⁴	78	Pt	[Xe]6s ¹ 4f ¹⁴ 5d ⁹
5	B	[He]2s ² 2p ¹	42	Mo	[Kr]5s ¹ 4d ⁵	79	Au	[Xe]6s ¹ 4f ¹⁴ 5d ¹⁰
6	C	[He]2s ² 2p ²	43	Tc	[Kr]5s ² 4d ⁵	80	Hg	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰
7	N	[He]2s ² 2p ³	44	Ru	[Kr]5s ¹ 4d ⁷	81	Tl	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ¹
8	O	[He]2s ² 2p ⁴	45	Rh	[Kr]5s ¹ 4d ⁸	82	Pb	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ²
9	F	[He]2s ² 2p ⁵	46	Pd	[Kr]4d ¹⁰	83	Bi	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ³
10	Ne	[He]2s ² 2p ⁶	47	Ag	[Kr]5s ¹ 4d ¹⁰	84	Po	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁴
11	Na	[Ne]3s ¹	48	Cd	[Kr]5s ² 4d ¹⁰	85	At	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁵
12	Mg	[Ne]3s ²	49	In	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ¹	86	Rn	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁶
13	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	50	Sn	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ²	87	Fr	[Rn]7s ¹
14	Si	[Ne]3s ² 3p ²	51	Sb	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ³	88	Ra	[Rn]7s ²
15	P	[Ne]3s ² 3p ³	52	Te	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁴	89	Ac	[Rn]7s ² 6d ¹
16	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	53	I	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁵	90	Th	[Rn]7s ² 6d ²
17	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	54	Xe	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁶	91	Pa	[Rn]7s ² 5f ² 6d ¹
18	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	55	Cs	[Xe]6s ¹	92	U	[Rn]7s ² 5f ³ 6d ¹
19	K	[Ar]4s ¹	56	Ba	[Xe]6s ²	93	Np	[Rn]7s ² 5f ⁴ 6d ¹
20	Ca	[Ar]4s ²	57	La	[Xe]6s ² 5d ¹	94	Pu	[Rn]7s ² 5f ⁶

28

