

TEMA 3

Mecánica cuántica.

Números cuánticos.

Orbitales atómicos.

Átomos polieletrónicos

Configuraciones electrónicas.

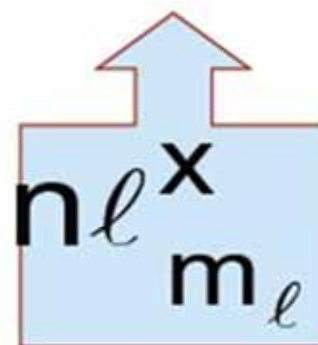
Apantallamiento.

Tabla periódica.



Orbitales

- La función de onda ψ para una combinación dada de valores de n , ℓ y m_ℓ se llama **orbital**
 - ◆ No hay que confundir el término orbital con el de órbita del modelo de Bohr
- El orbital es una **función de probabilidad**, cuyo sentido físico se refiere a una región del espacio respecto del núcleo donde la probabilidad de encontrar un electrón de energía concreta posee un valor especificado (90%)
- Los orbitales se designan en función de los valores característicos de n , ℓ y m_ℓ y es posible referirse a ellos mediante la notación:
 - ◆ n : nº cuántico principal (numérica)
 - ◆ ℓ : nº cuántico azimutal (alfabética: s, p, d, f...)
 - ◆ m_ℓ : nº cuántico magnético
 - ◆ x: indica el número de electrones



Etiquetas de los orbitales

Designación de los valores de ℓ

$$\ell = 0 \rightarrow s \quad \ell = 1 \rightarrow p$$

$$\ell = 2 \rightarrow d \quad \ell = 3 \rightarrow f$$

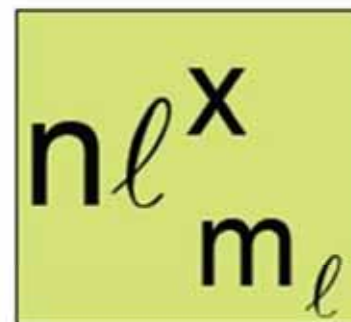
$$\ell = 4 \rightarrow g$$

Cada conjunto de 3 números cuánticos n, ℓ, m_ℓ ,
identifica unívocamente un orbital

$$n=2, \ell=1, m_\ell=-1 \rightarrow 2p_x$$

$$n=2, \ell=1, m_\ell=0 \rightarrow 2p_y$$

$$n=2, \ell=1, m_\ell=+1 \rightarrow 2p_z$$



Valores de los números cuánticos

n	ℓ	m_ℓ	Orbitales que forman la subcapa	nº orbitales ($2\ell+1$)	Número total de orbitales en la capa n^2
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
	1	-1, 0, 1	2p	3	
3	0	0	3s	1	9
	1	-1, 0, 1	3p	3	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	5	
4	0	0	4s	1	16
	1	-1, 0, 1	4p	3	
	2	-2, -1, 0, 1, 2	4d	5	
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f	7	

Orbitales con el mismo valor de n pertenecen a la misma **capa principal o nivel**.
Hay n^2 orbitales en la capa

Orbitales con los mismos valores de n y ℓ pertenecen a la misma **subcapa o subnivel**. Hay $(2\ell+1)$ orbitales en la subcapa



Energías permitidas del electrón en el H

- Los valores de las energías para el único electrón del átomo de hidrógeno ($Z=1$) vienen dadas por:

- ◆ n : es el número cuántico principal
- ◆ R_H : es la constante de Rydberg

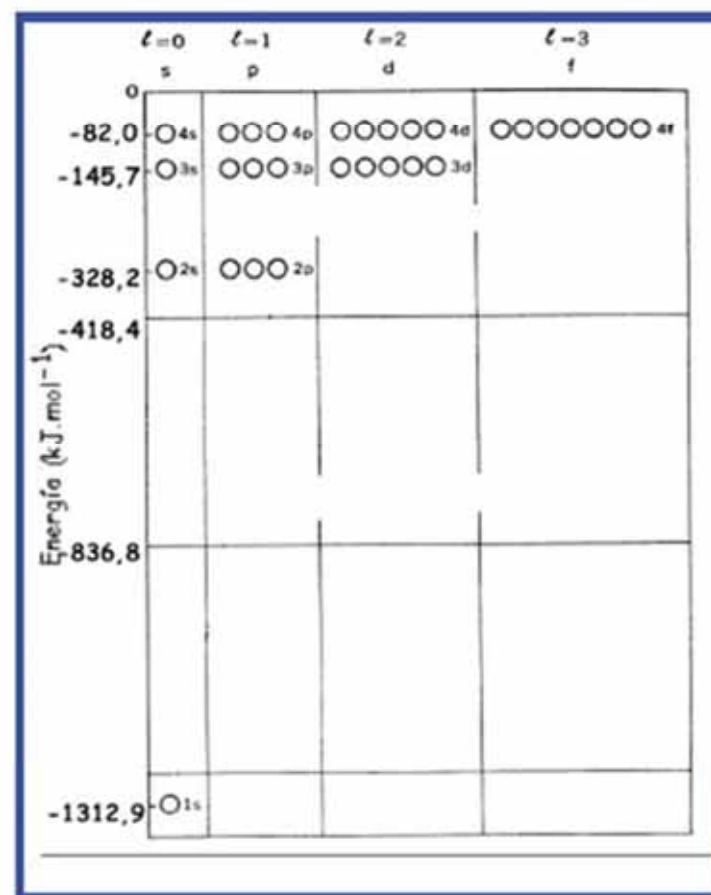
$$E_n = -\frac{2\pi^2 \cdot m \cdot e^4 \cdot Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot h^2 \cdot n^2} = -R_H \frac{1^2}{n^2}$$

$$E = -2,178 \cdot 10^{-18} \left(\frac{1}{n^2} \right) J$$

xN_A

$1 \text{ eV} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ $R_H = 13,605 \text{ eV}$

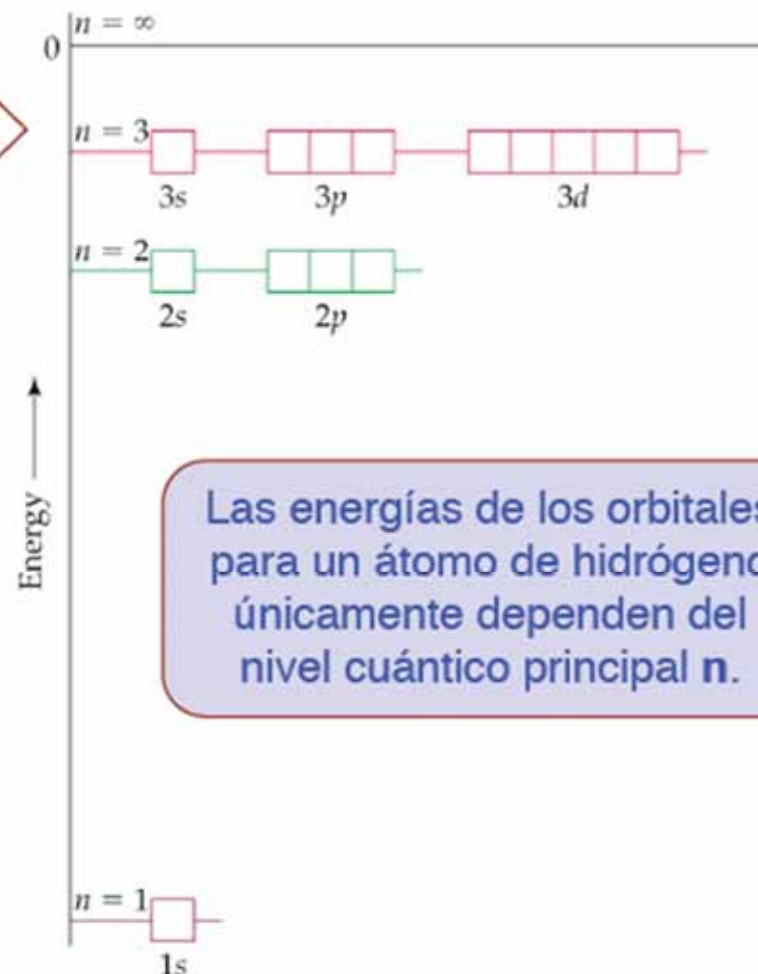
$$\begin{aligned} E(n=1) &= -1312,9 \text{ kJ/mol} \\ E(n=2) &= -328,2 \text{ kJ/mol} \\ E(n=3) &= -145,9 \text{ kJ/mol} \\ E(n=4) &= -82,05 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$



Energía de los orbitales hidrogenoideos

Niveles de energía de orbitales en un átomo de hidrógeno. Cada cuadro representa un orbital

Orbitales degenerados son aquellos que tienen la misma energía.



Las energías de los orbitales para un átomo de hidrógeno únicamente dependen del nivel cuántico principal n .

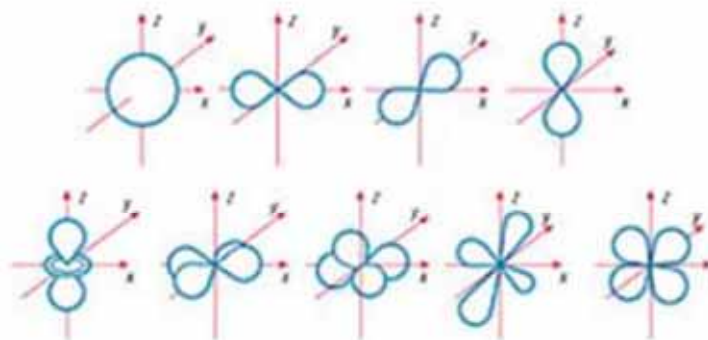
Representación de los orbitales del átomo de hidrógeno

Orbitales s

Orbitales p

Orbitales d

Orbitales f



Funciones radiales

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\theta,\phi) = R_{n,\ell}(r) \cdot Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)$$

- Son función de la distancia al núcleo (r)
- Dependen de los números cuánticos n y ℓ .
- Nodos radiales [$R(r)=0$] n° nodos radiales = $n - \ell - 1$
- Penetración de los electrones: $s > p > d > f$

Informa acerca de la manera en que Ψ varía en función de su distancia al núcleo



Funciones angulares

$$\psi_{n,\ell,m_l}(r,\theta,\phi) = R_{n,\ell}(r) \cdot Y_{\ell,m_l}(\theta,\phi)$$

- Determinan la forma y orientación de los orbitales.

$\ell = 0$, estados s, 1 orbital

$\ell = 1$, estados p, 3 orbitales

$\ell = 2$, estados d, 5 orbitales

$\ell = 3$, estados f, 7 orbitales

- Nodos [$Y_{\ell,m_l}(\theta,\phi)=0$] **nº de nodos angulares = ℓ**

◆ s $\Rightarrow$ 0 p $\Rightarrow$ 1 d $\Rightarrow$ 2 (d_{z^2} : 1 superficie cónica) f $\Rightarrow$ 3

Informa acerca de la manera en que Ψ varía en función de las líneas que desde el núcleo se dispersan en todas direcciones



- Para obtener la función de onda Ψ para un estado particular, basta multiplicar las partes angular (Y) y radial (R) de la función de onda y analizar esta.
- Todas las funciones de onda hidrogenoides son del tipo exponencial decreciente ($e^{-Zr/na}$)

TABLE 9.1 The Angular and Radial Wave Functions of a Hydrogen-like Atom

Angular Part $Y(\theta, \phi)$

$$Y(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

$$Y(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$$

$$Y(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$$

$$Y(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$$

$$Y(d_{z^2}) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y(d_{x^2-y^2}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$$

$$Y(d_{xy}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$$

$$Y(d_{xz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$$

$$Y(d_{yz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$$

Radial Part $R_{n,\ell}(r)$

$$R(1s) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$$

$$R(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma) e^{-\sigma/2}$$

$$R(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2) e^{-\sigma/2}$$

$$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$$

$$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (4 - \sigma) \sigma e^{-\sigma/2}$$

$$R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$$

$$a_0 = \epsilon_0 \frac{h^2}{\pi m_e^2} = 0,529 \text{ \AA} \equiv 53 \text{ pm}$$

radio de Bohr: se utiliza como una medida de longitud atómica

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



Orbitales s

- La función de onda completa la podemos obtener combinando las funciones de onda angular y radial.
- Como todas las funciones de onda hidrogenoides son de tipo exponencial decreciente ($e^{-Zr/na}$)
 - ◆ $\psi \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$
 - ◆ (para $r > 0 \rightarrow e^{-Zr/na} < 1$)
- El tamaño del orbital aumenta con n
- Las funciones tipo s presentan **simetría esférica. Los orbitales s son esféricamente simétricos**
 - ◆ El valor de la función de onda sólo depende de la distancia al núcleo pero no de los ángulos
 - ◆ La probabilidad de encontrar al electrón sólo depende de la distancia al núcleo pero no de la dirección

- Para ciertos valores de r la función Ψ se anula (**NODOS**)

$$\psi(1s) = R(1s)Y(1s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \cdot 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$$

$$\psi(2s) = R(2s)Y(2s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \cdot \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma) e^{-\sigma/2}$$

$$\psi(3s) = R(3s)Y(3s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \cdot \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2) e^{-\sigma/2}$$

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

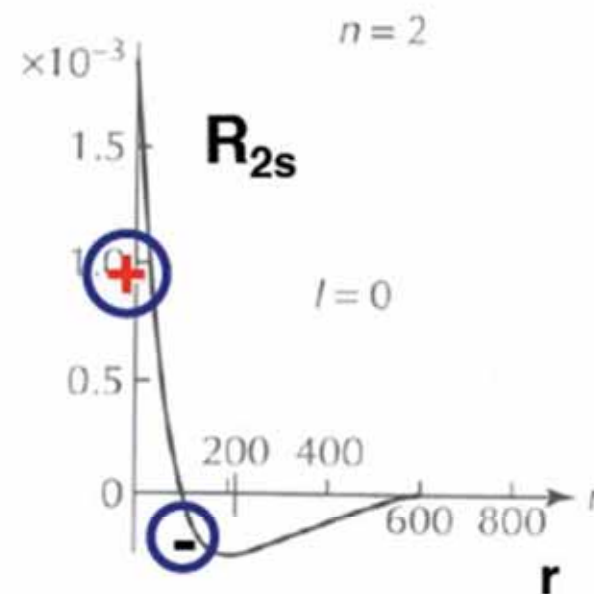


Definición de nodo

- Aunque se suele definir como los puntos en los que la función de onda se anula, realmente
- Los nodos son los puntos en los que una función de onda cambia de signo

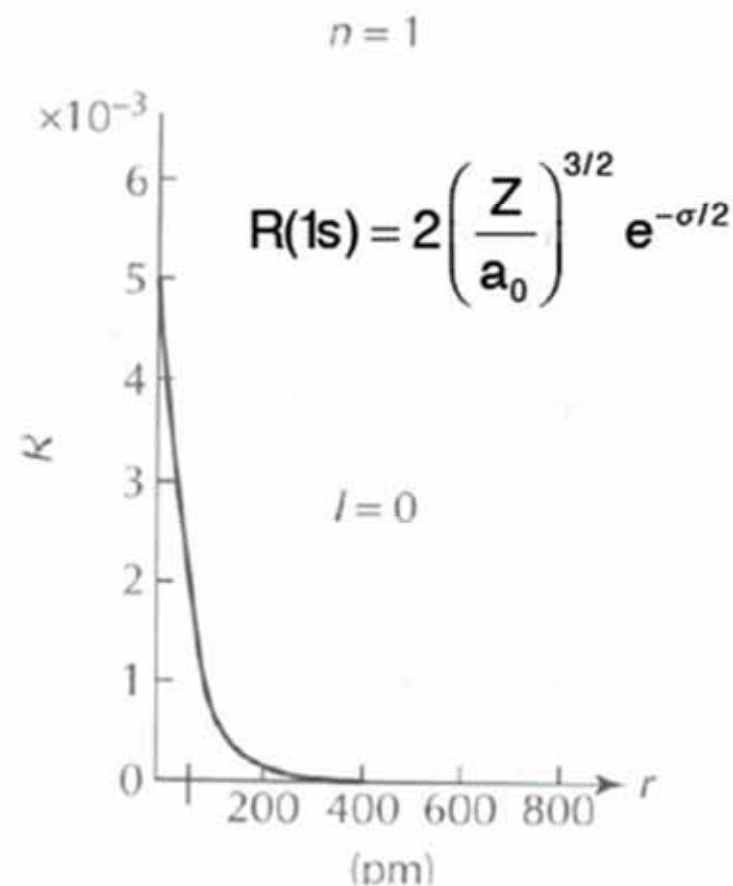
orbital	nodos radiales: $n - \ell - 1$	nodos angulares: ℓ
ns	$n-1$	0
np	$n-2$	1
nd	$n-3$	2

nodos totales = $n-1$



Orbital 1s

- ❖ La parte angular = cte
- ❖ El comportamiento de Ψ_{1s} viene dado únicamente por el de la parte radial
 - ❖ Ψ_{1s} siempre positiva.
 - ❖ Decrece exponencialmente y tiende asintóticamente a cero cuando $r \rightarrow \infty$
 - ❖ Ψ_{1s} tiene valor máximo en el origen:
 - ❖ para $r=0$, $e^{-Zr/a_0}=1$
 - ❖ $\Psi_{1s}(r=0) = (Z/a_0)^{3/2}(1/p^{1/2})$
- ❖ Ψ_{1s} carece de nodos radiales y angulares

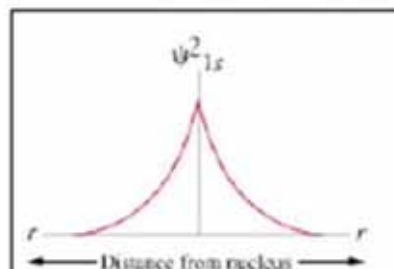


Orbital 1s

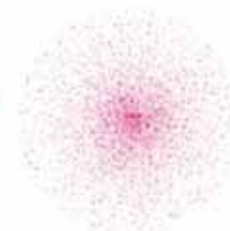
- Densidad de probabilidad $\Psi^2(1s)$
 - ◆ $\Psi^2(1s)$ tiene valor máximo en el origen
 - ◆ La probabilidad de encontrar al electrón en un dV es tanto mayor cuanto menor es la distancia al núcleo.
- $\Psi^2(1s)$ tiende asintóticamente a 0 cuando $r \rightarrow \infty$

$$\psi^2(1s) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{a_0^3} e^{-2r/a_0}$$

función densidad de probabilidad



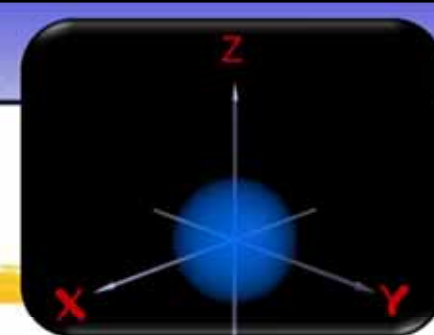
distribución de densidades en un plano



envolvente esférica que contiene el 90% de la densidad de carga electrónica



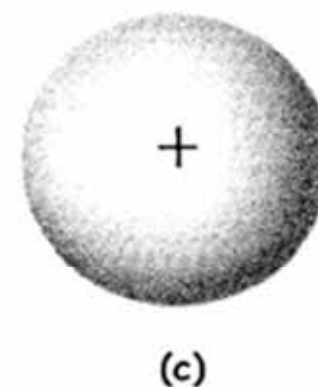
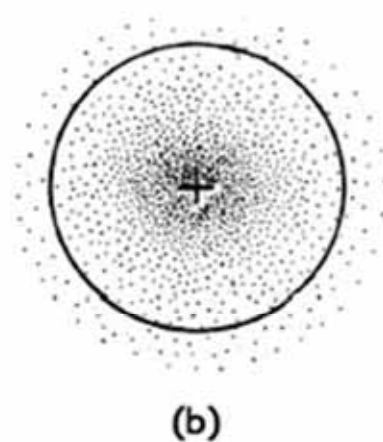
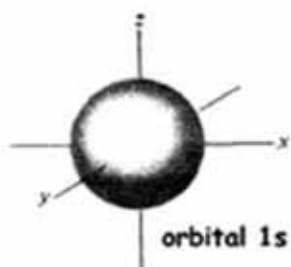
(a) 1s



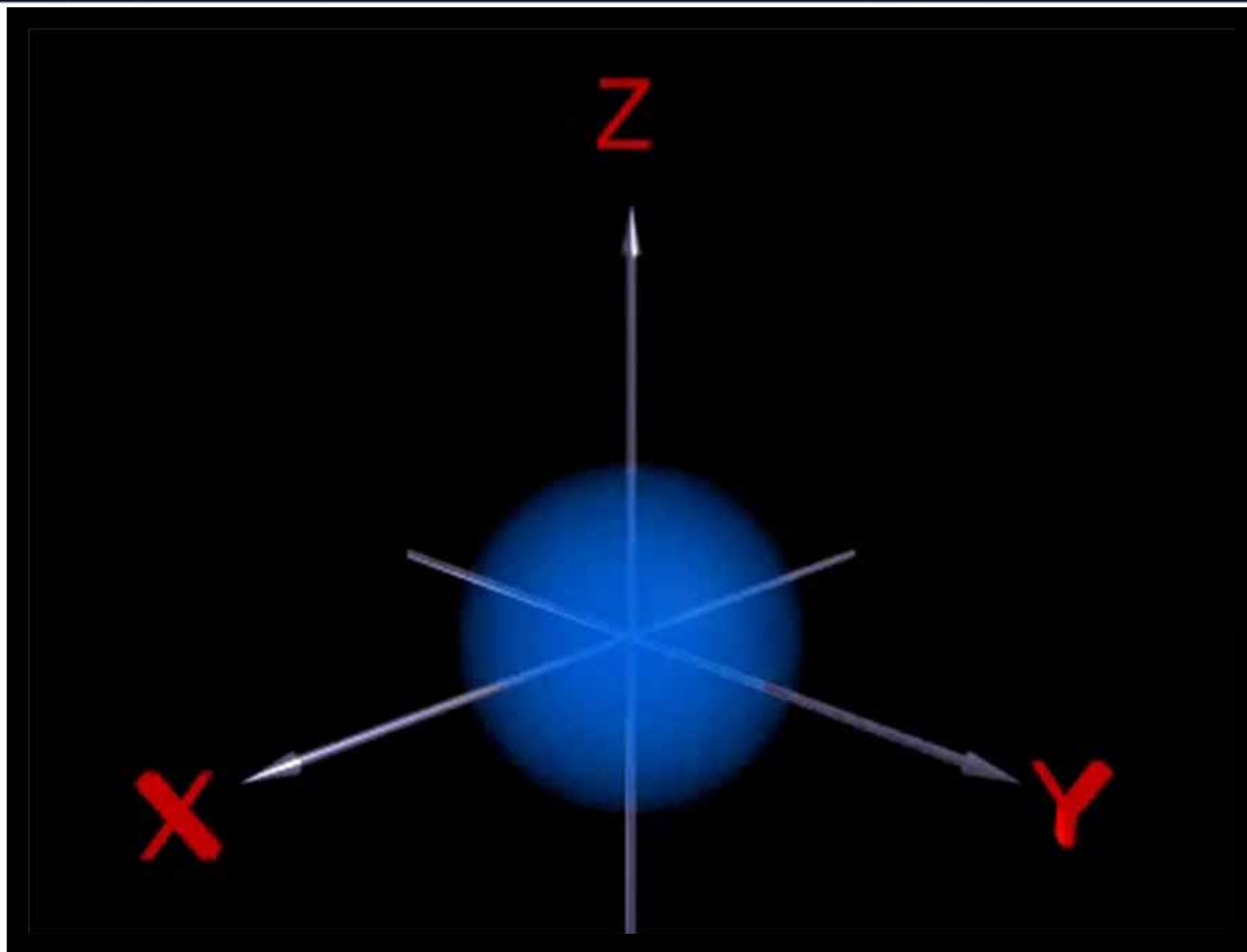
Representacion del orbital 1s

■ Representación de la densidad de probabilidad

- ◆ (a) Diagrama de puntos: a mayor densidad de puntos mayor probabilidad de encontrar al electrón.
- ◆ (b) Diagrama de contorno: sección transversal capa esférica en cuyo interior la probabilidad de encontrar al electrón es del 90% (radio $1,4\text{\AA}$ para el 1s)
- ◆ (c) Superficie límite que encierra probabilidad 90%. **Envolvente**



TEMA 3 Orbitales atómicos.

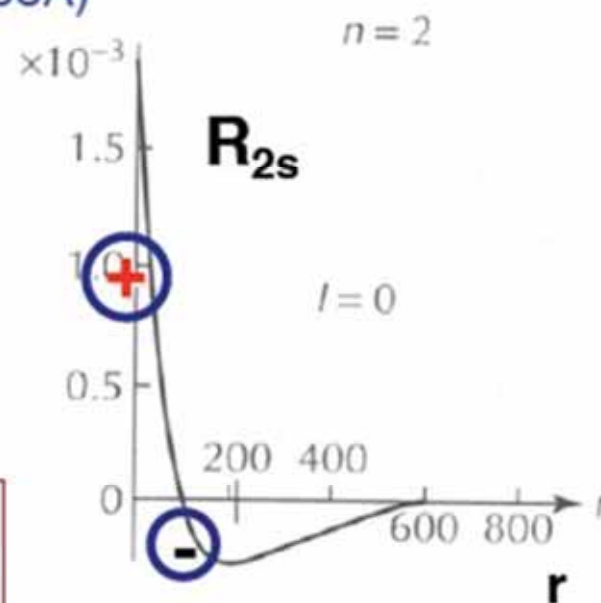


Orbital 2s

- Ψ_{2s} puede tomar valores positivos y negativos.
- Ψ_{2s} tiene valor máximo en el origen:
 - ◆ para $r=0$, $e^{-r/a}=1$
 - ◆ $\Psi_{2s}(r=0) = (1/a)^{3/2}(1/8\pi)^{1/2}$
- Tiende asintóticamente a cero cuando $r \rightarrow \infty$
 - ◆ Ψ_{2s} se anula cuando: $2-r/a_0=0 \rightarrow r=2a_0$ (1,058Å)
 - ◆ 1 nodo radial

$$\psi(2s) = R(2s)Y(2s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \cdot \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma)e^{-\sigma/2}$$

el cambio de función de (+) a (-)
indica la presencia de un nodo radial



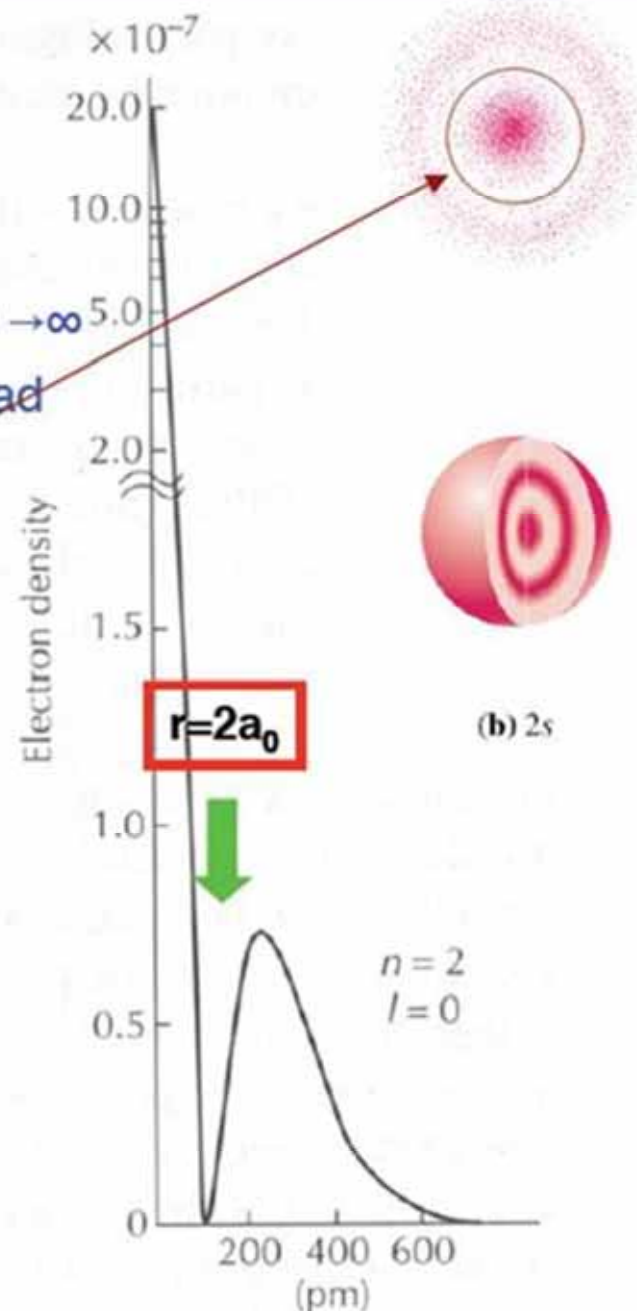
Orbital 2s

- Densidad de probabilidad
 - ◆ Ψ_{2s}^2 tiene valor máximo en el origen.
 - ◆ Ψ_{2s}^2 tiende asintóticamente a 0 cuando $r \rightarrow \infty$
- Esfera nodal para $r=2a_0$ donde la densidad de probabilidad es 0
 - ◆ $(\Psi_{2s}^2 = 0 \text{ para } r=2a_0)$

$$\psi^2(2s) = 0 \Rightarrow \left(\frac{1}{32\pi}\right) \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 (2 - \sigma)^2 e^{-\sigma} = 0$$

$$(2 - \sigma)^2 = 0; \quad 2 - \frac{r}{a_0} = 0 \Rightarrow r = 2a_0$$

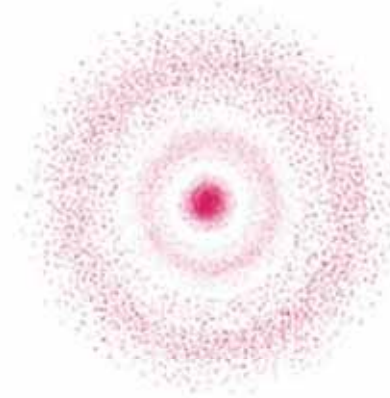
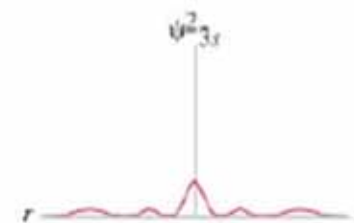
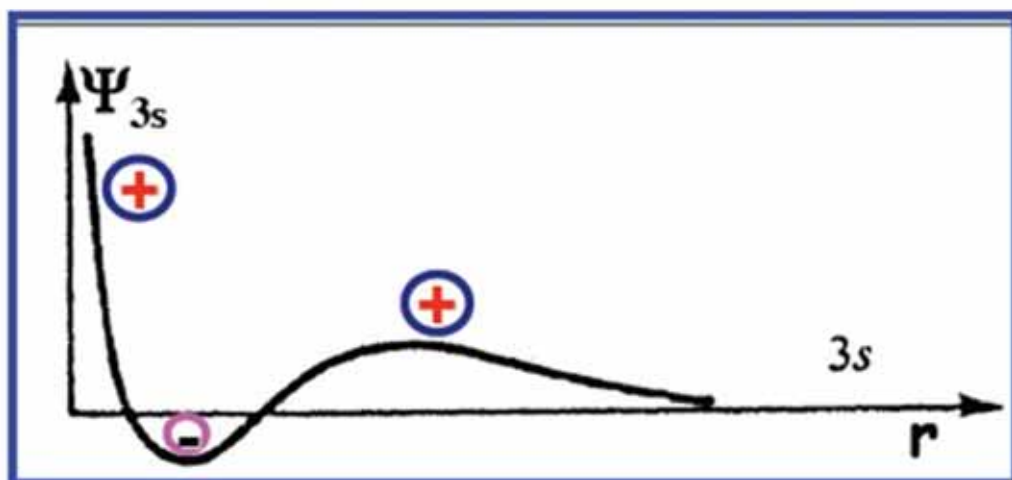
$$\sigma = \frac{2Zr}{na_0}$$



Orbitales 3s

- La función densidad probabilidad tiene dos nodos
 - para $r_1 = 1,902 \cdot a_0$ y $r_2 = 7,098 a_0$

Orbital 3s:
Nodos= $3 - 0 - 1 = 2$



(c) 3s

Comparación entre los orbitales s

- El tamaño de los orbitales ns aumenta con el valor de n
- Tamaño de los orbitales ns: Radio ($\text{\AA}$) de la superficie de contorno del 99% de probabilidad

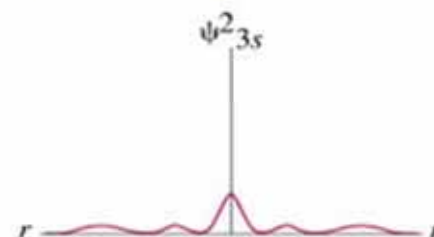
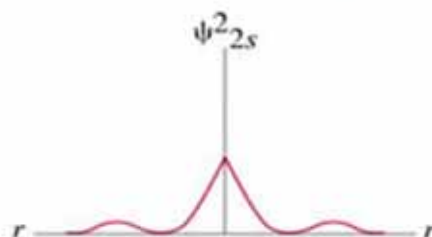
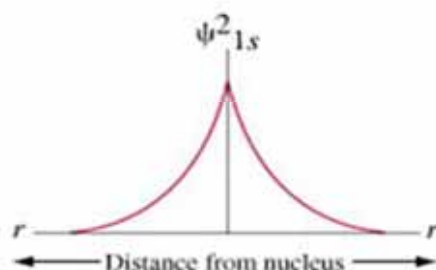
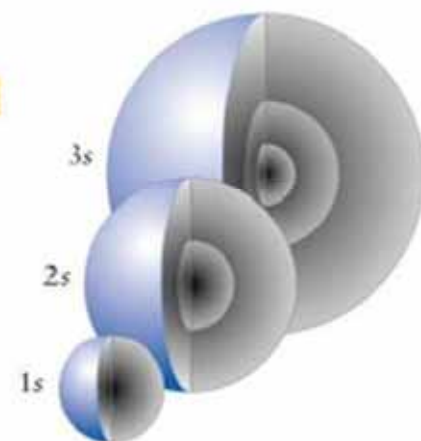
orbital radio ($\text{\AA}$)

1s 2,20

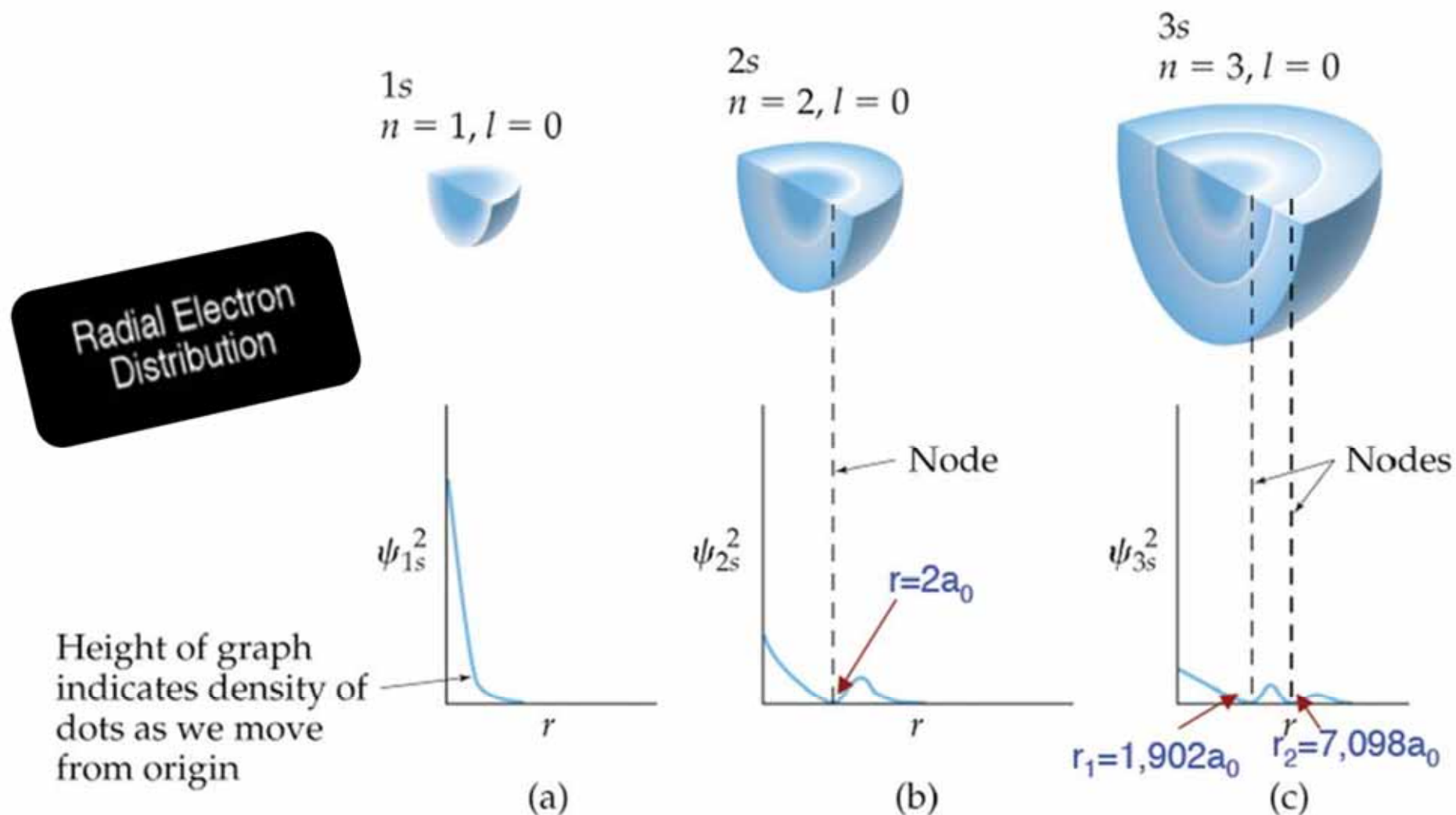
2s 6,50

3s 12,00

- La probabilidad de encontrar a un electrón próximo al núcleo es mayor si éste ocupa un orbital 1s que si es 2s o 3s.
 - electrón 3s más externo que 2s, y éste más externo que el 1s.
- Número de nodos radiales de los orbitales "s" viene dado por $(n-1)$ o de modo mas general $(n - \ell - 1)$



Comparacion entre los orbitales s



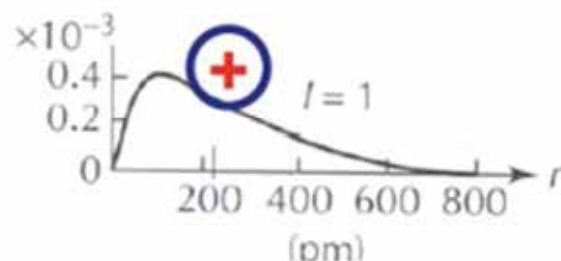
Radial Electron Distribution



Orbitales np

- Las funciones de onda Ψ_{np} muestran una cierta dependencia respecto de las coordenadas angulares (θ, ϕ)
- Su análisis es más complicado que en las funciones “ns”:
 - ◆ Es necesario analizar separadamente la parte radial de la parte angular
 - ◆ $\Psi_{np} = R(r)_p \cdot Y(\theta, \phi)_p$
- **Orbitales 2p. Parte radial**
 - ◆ Los tres orbitales 2p tienen la misma parte radial
 - ◆ La parte radial siempre es positiva (no hay nodos):
 - cuando $r=0$, $R(r)_{2p}=0$: a diferencia de los orbitales s
 - cuando $r \rightarrow \infty$, $R(r)_{2p} \rightarrow 0$

R(2p)



$$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$$

$$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (4 - \sigma) \sigma e^{-\sigma/2}$$



Orbitales np

- Parte angular de la función de onda
 - ◆ A diferencia de los orbitales ns no es una constante sino que muestra una dependencia con $\Psi(\theta, \phi)$
 - ◆ La parte angular del orbital 2pz es la mas fácil de analizar

$$Y(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$$

$$Y(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$$

$$Y(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$$



Orbital 2pz. Representacion de la parte angular

- Todos los puntos con el mismo valor de r y θ tienen el mismo valor de la función de ondas
- Se obtienen dos esferas tangentes
- Valores que toma la función $\Psi(\theta)_{2pz}$ en función del ángulo θ :

◆ $\Psi(\theta)_{2pz} > 0$ para $0 \leq \theta < \pi/2$,

◆ $\Psi(\theta)_{2pz} < 0$ para $\pi/2 < \theta < \pi$,

$$Y(2p_z) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta$$

- Valores singulares de $Y(\theta)_{2pz}$:

◆ para $\theta = 0 \rightarrow \cos 0^\circ = 1$; $\theta = \pi \rightarrow \cos \pi = -1$

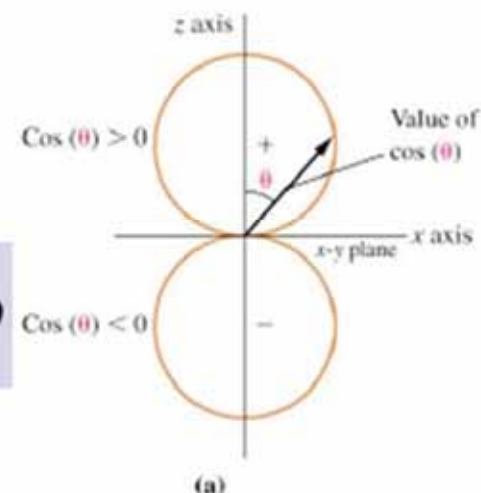
◆ para $\theta = \pi/2 \rightarrow \cos \theta = 0$

◆ plano xy es un plano nodal

- Valores extremos para $Y(\theta)_{2pz}$:

◆ la función $\Psi(\theta)_{2pz}$ toma valores máximos (+1 o -1) sobre el eje z ($\theta = 0, \pi$)

◆ Para una distancia dada, la probabilidad de encontrar al electrón es máxima sobre el eje z



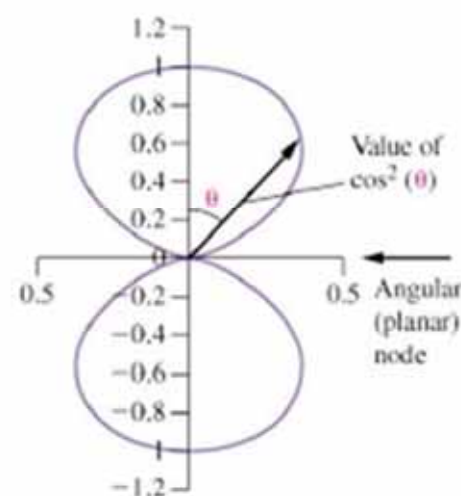
(a)
 $Y(\theta)_{2pz}$
 $r = \text{constante}$

Funcion de probabilidad del orbital 2pz

- Función de probabilidad Ψ^2_{2pz} :

$$\Psi^2_{2pz} = R^2(r)_{2pz} \cdot Y^2(\theta)_{2pz}$$

- La probabilidad máxima de encontrar al electrón $2p_z$ se presenta sobre los semiejes z a cierta distancia del núcleo a la cual es máxima la función $R^2(r)_{2pz}$
- El orbital $2p_z$ tiene las zonas de máxima probabilidad electrónica orientadas y distribuidas según direcciones preferenciales del espacio, al contrario que los orbitales "ns"
- Todos los puntos del plano xy constituyen un plano nodal: $Y^2(\theta)_{2pz} = 0$



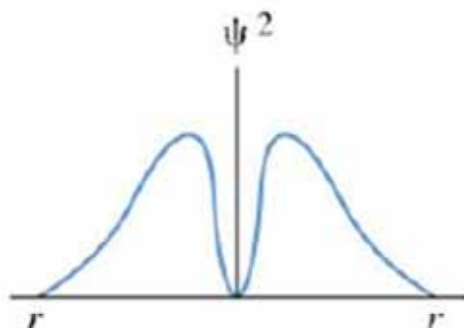
(b)

$$Y^2(\theta)_{2pz}$$

r=constante

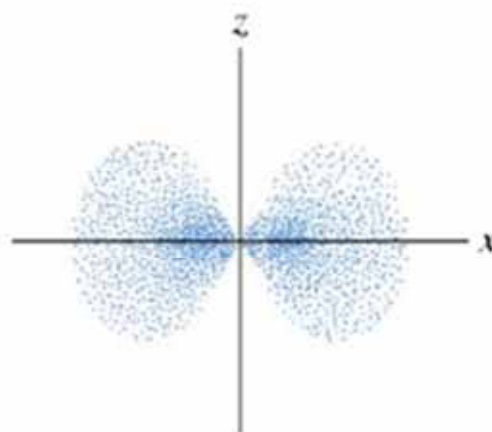
Diagrama de contorno del 2pz.
Los contornos son las líneas del plano yz en las que $Y^2_{(2pz)}$ es constante;
en tres dimensiones encierran el 50% y el 99% de la densidad de probabilidad total.

Orbitales p



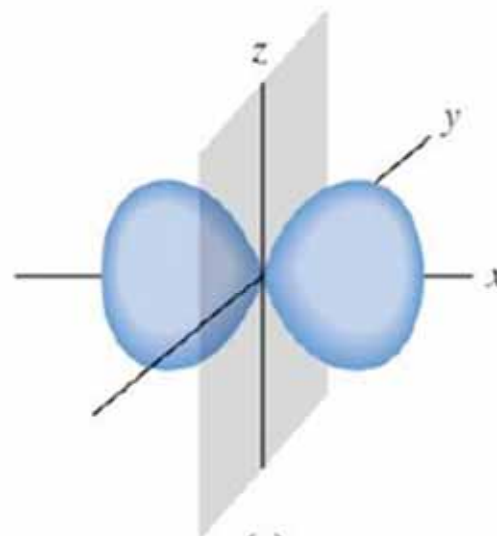
(a)

a) El Valor de Ψ^2 es cero en el núcleo, aumenta hasta un máximo a cierta distancia (según el eje x, y o z) y luego disminuye al aumentar la distancia.



(b)

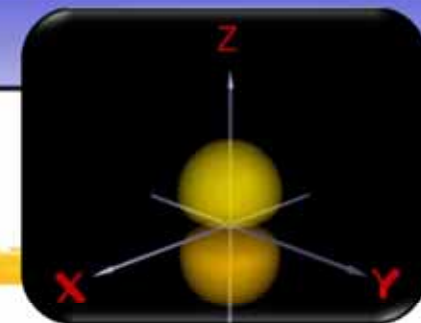
b) Los puntos representan la probabilidad y la densidad de carga del electrón en un plano que pasa a través del núcleo (p.e. el plano xz)



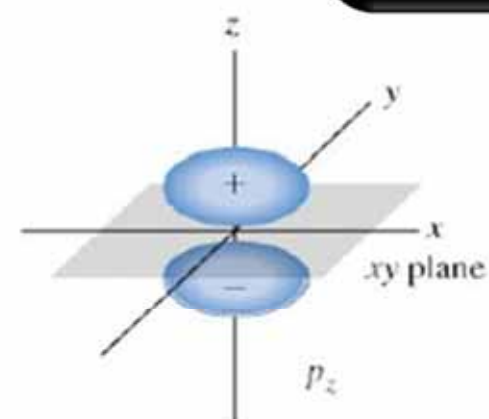
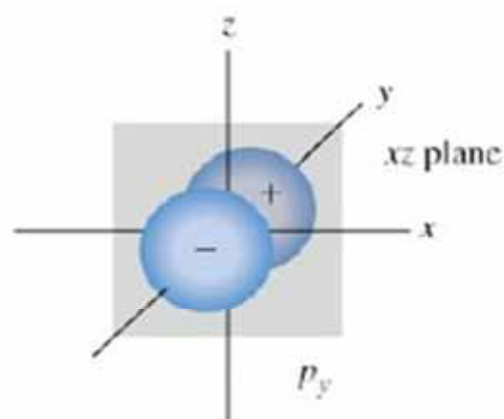
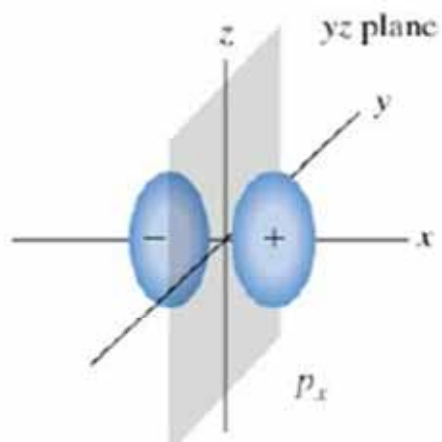
(c)

c) Superficie límite que encierra el 90% de probabilidad de encontrar al electrón $2p_x$. La probabilidad disminuye hasta hacerse cero en el plano nodal yz.

Representaciones Ψ^2 . Son lóbulos alargados



Nodos en los orbitales p



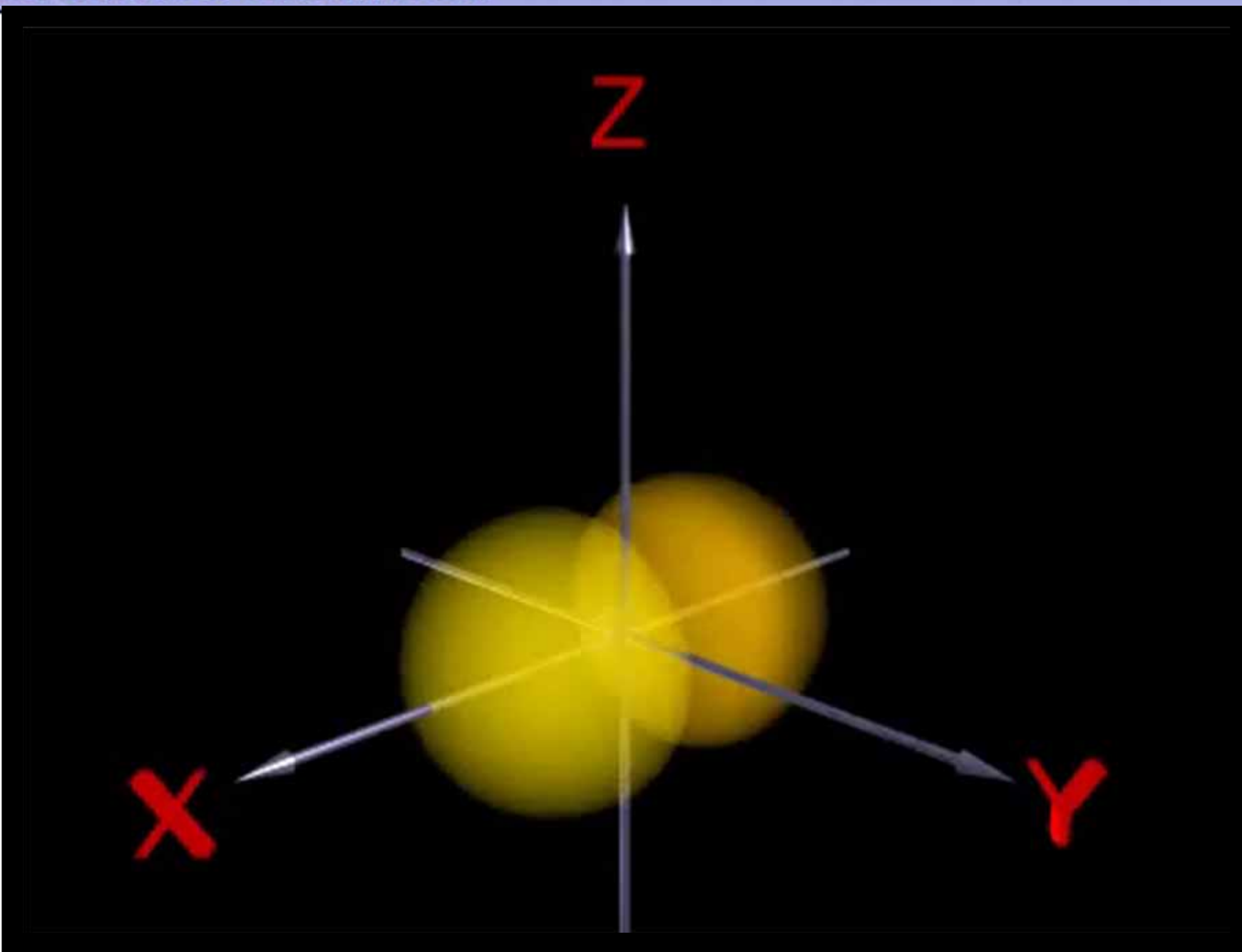
Orbitales 2p:

- ◆ Los tres orbitales 2p son:
 - perpendiculares entre sí
 - presentan fuerte carácter direccional
- ◆ Los orbitales 2p no tienen nodos en la parte radial
- ◆ La superficie nodal se debe a la parte angular

Los orbitales p se representan dirigidos según los ejes x, y, z. En cada lóbulo se indica el signo de la Ψ_{2p} (debido a la parte angular $Y(\theta)_{2p}$, ya que $R(r)_{2p}$ es positivo) y **no deben confundirse con cargas eléctricas.**



TEMA 3 Orbitales atómicos.



Orbitales p

Orbitales 3p:

- Los tres orbitales 3p tienen la misma parte radial
 - Los orbitales 3p tienen 1 nodo radial
- La parte angular es la misma que los correspondientes a los 2p
 - Los orbitales 3p tienen 1 nodo angular cada uno

Orbitales np:

- el tamaño aumenta en la serie: $2p < 3p < 4p \dots$
- el número de nodos radiales de las funciones np viene dado por $n-2 = n - \ell - 1$
- el número de nodos angulares es siempre ℓ

$$Y(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\phi$$

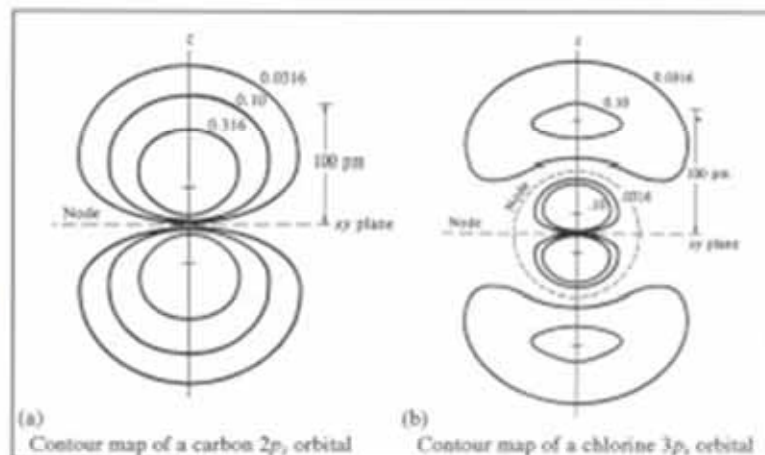
$$Y(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \sin\phi$$

$$Y(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$$

$$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$$

$$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (4 - \sigma) \sigma e^{-\sigma/2}$$

función	plano nodal
Y_{2pz}	xy
Y_{2px}	yz
Y_{2py}	xz



Orbitales d. Función radial

■ Parte radial orbitales 3d:

◆ $R(r)_{3d}$ es siempre >0

● $r=0 \Rightarrow R(r)_{3d}=0$

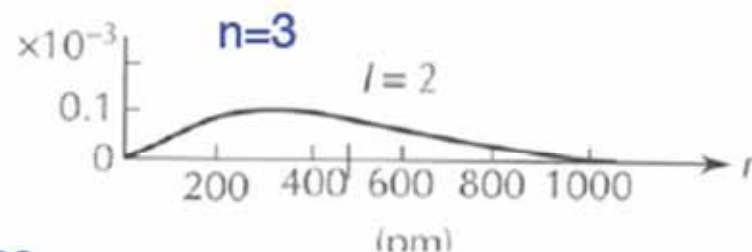
● $r \rightarrow \infty \Rightarrow R(r)_{3d} \rightarrow 0$

◆ No hay nodos radiales

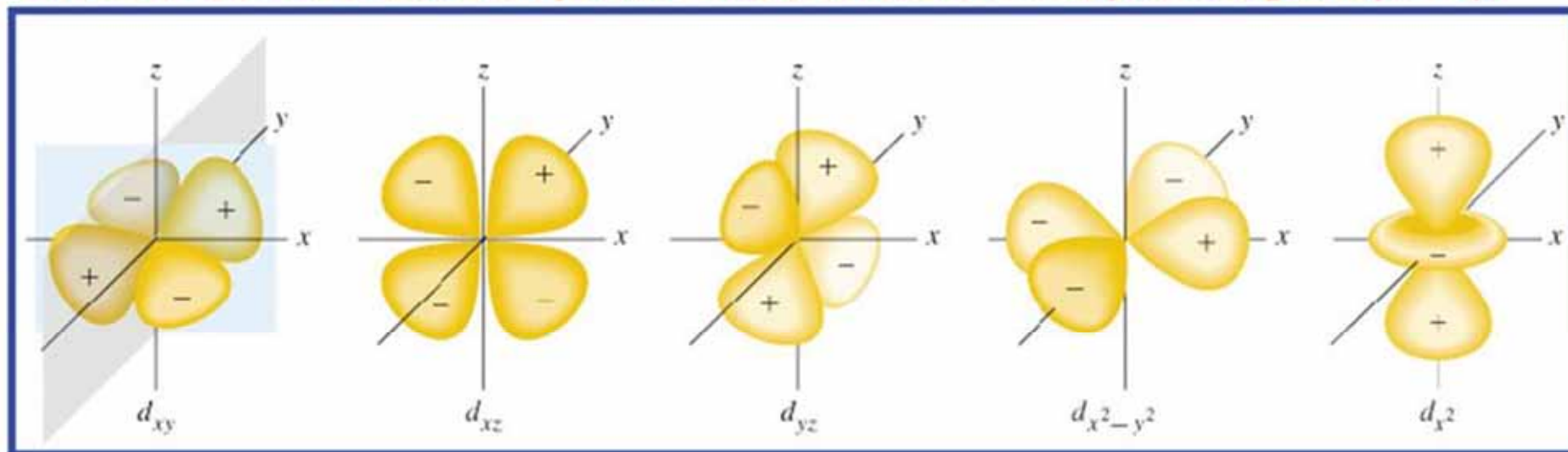
■ Parte angular:

◆ presentan 2 superficies nodales angulares

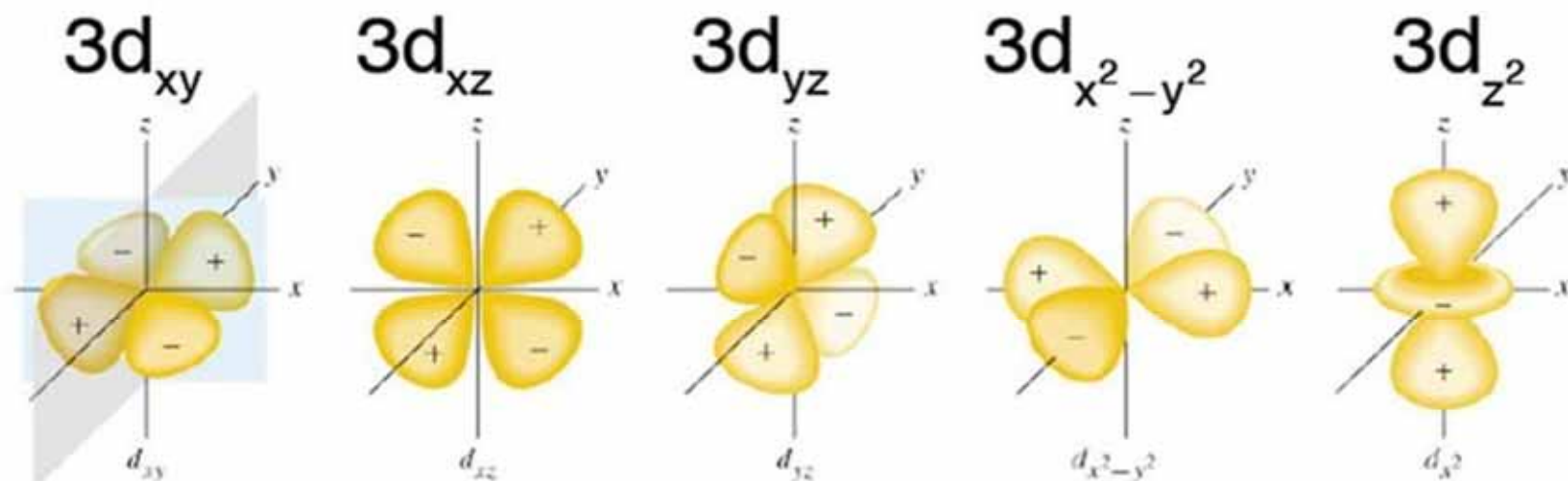
$$R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$$



Orbitales 3d: Presentan 2 superficies nodales debido a la parte angular ($l=2$).



Orbitales d

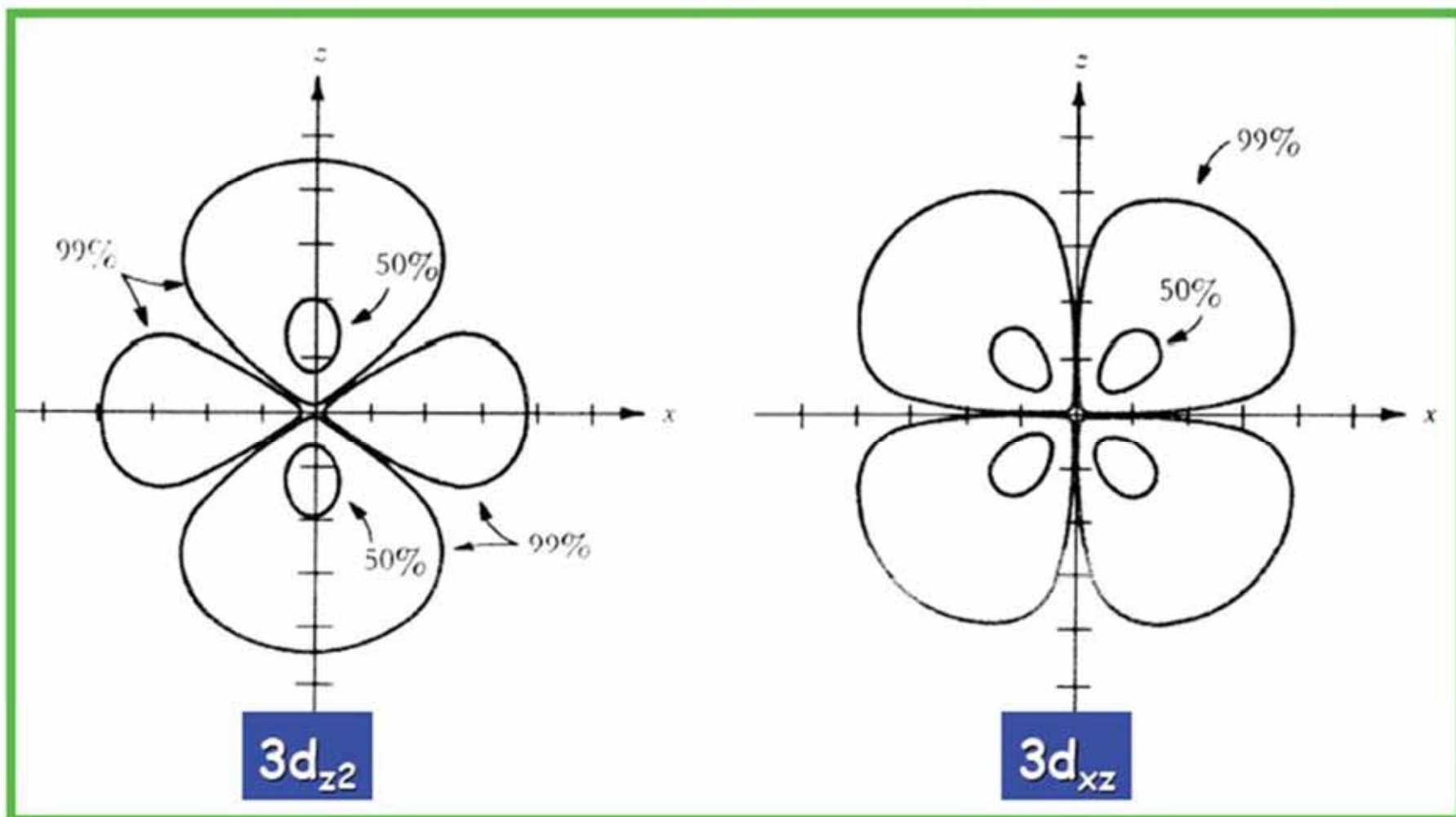


Las designaciones xy , xz , etc se relacionan con el número cuántico m_l . El número de superficies nodales es igual al número cuántico ℓ . Para los orbitales $3d$ hay dos superficies nodales angulares (las del orbital d_{z^2} son cónicas)

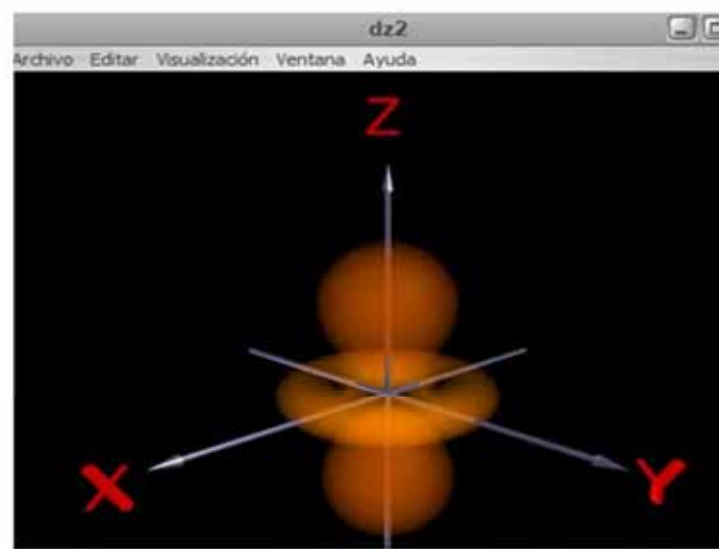
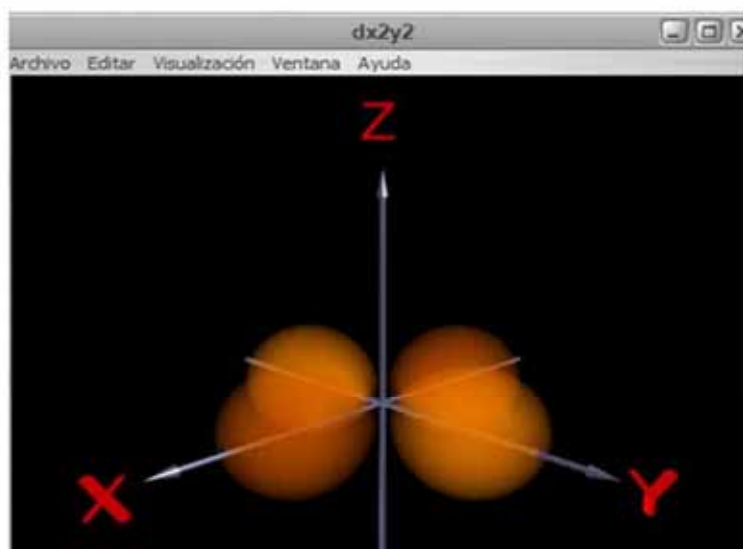
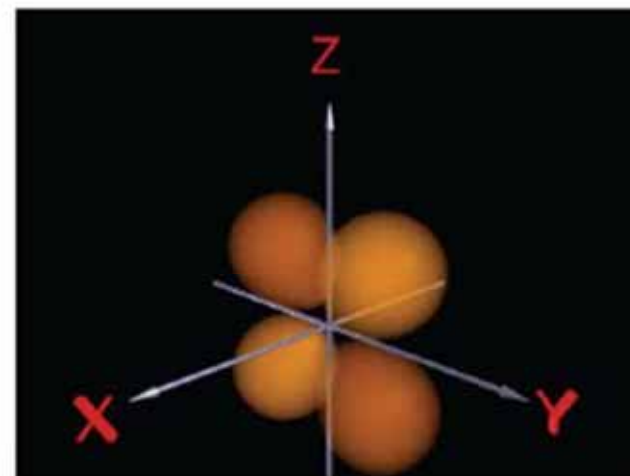
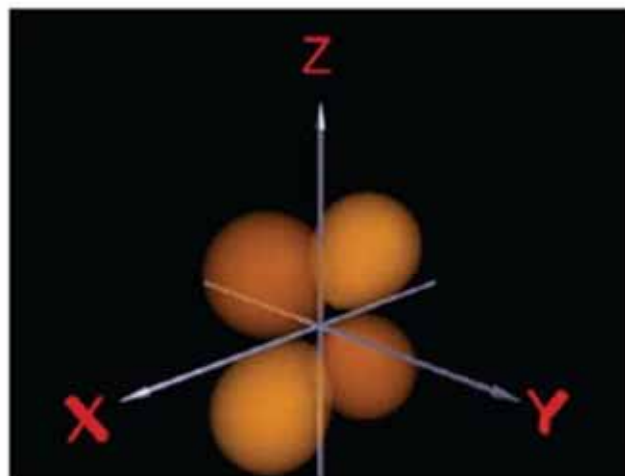
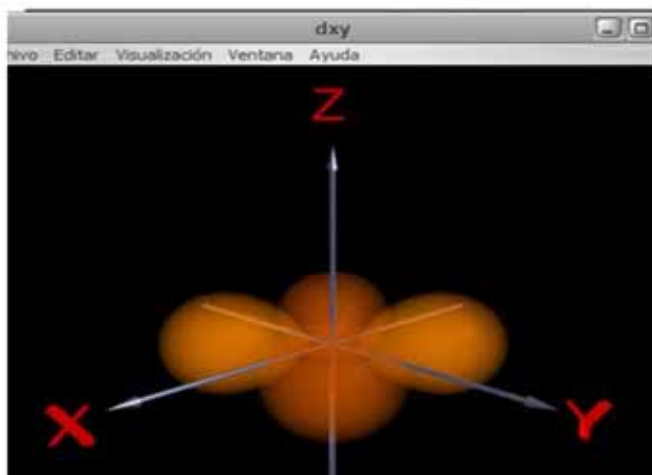
<u>función</u>	<u>planos nodales</u>
$3d_{xy}$	XZ, YZ
$3d_{xz}$	XY, YZ
$3d_{yz}$	XY, XZ
$3d_{x^2-y^2}$	Bisectrices: $XY-Z$
$3d_{z^2}$	Superficie cónica

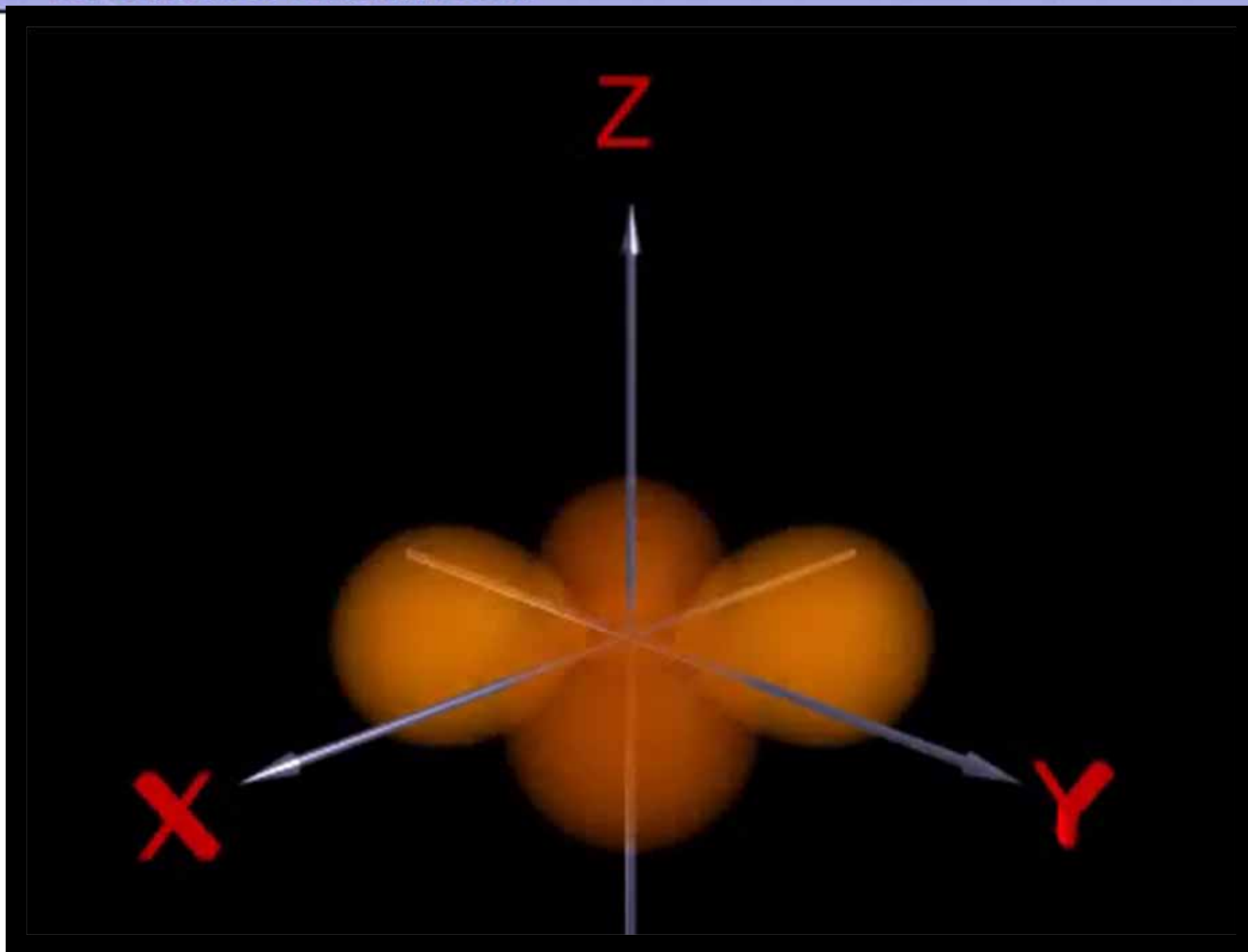
Orbitales d

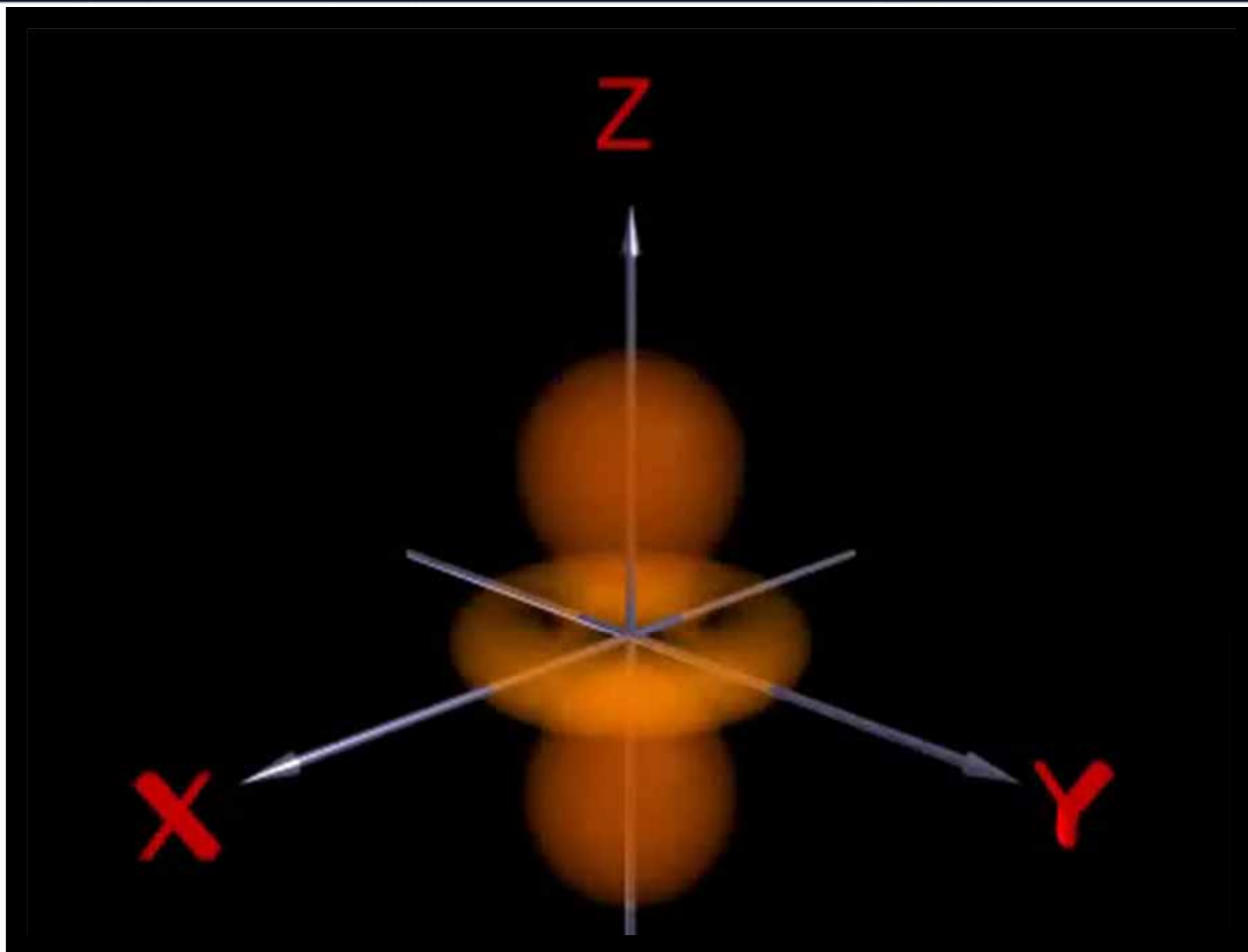
- Diagramas de contorno en el plano xz de los orbitales $3d_{z^2}$ y $3d_{xz}$



Orbitales d

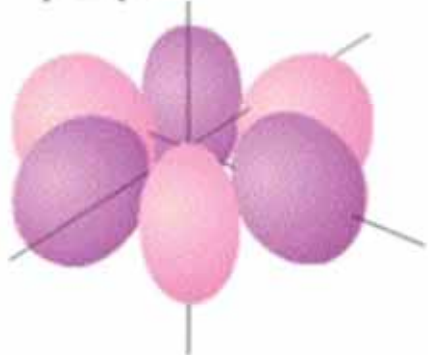




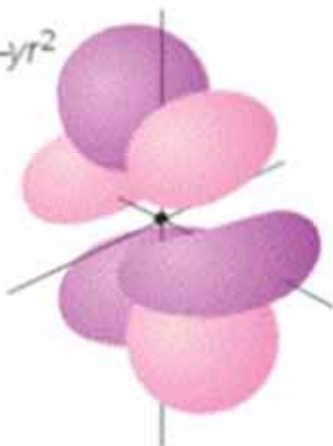


Orbitales f

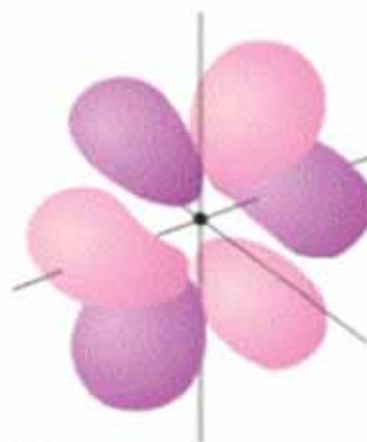
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



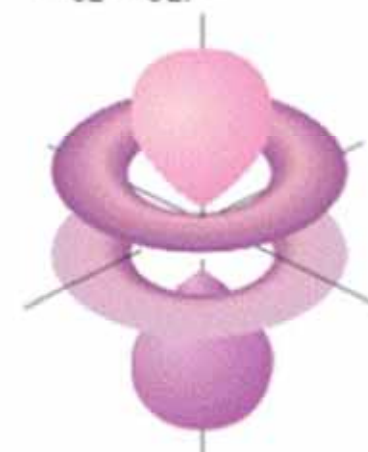
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



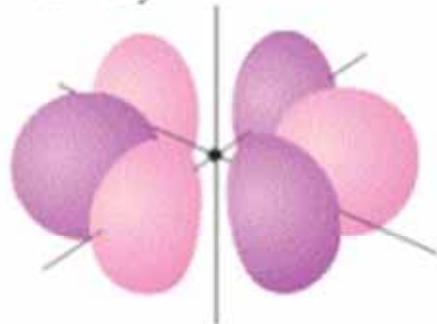
$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



$$4f_{5z^3-3zr^2}$$



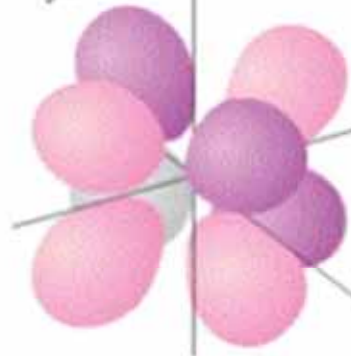
$$4f_{x^3-3xy^2}$$



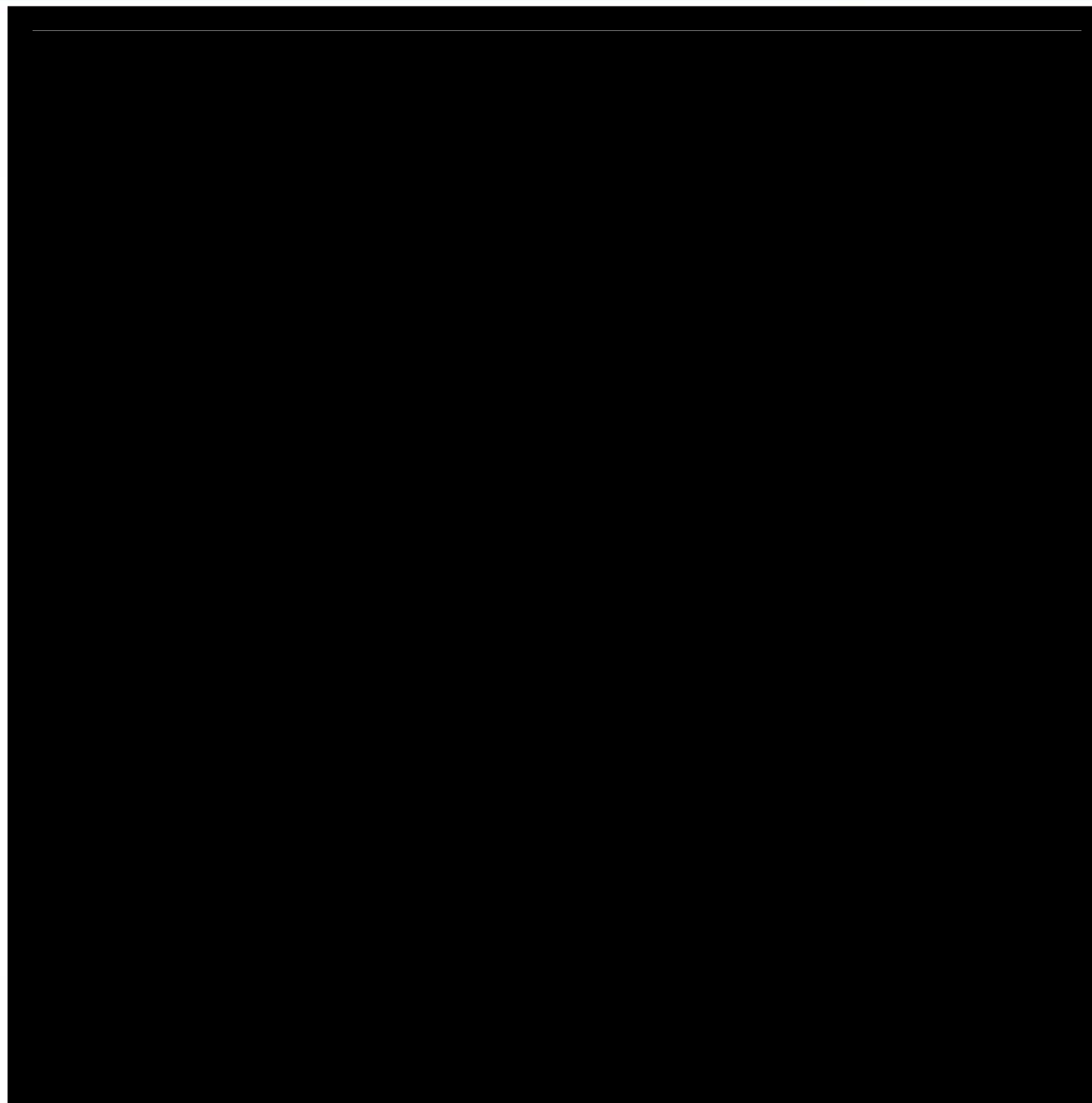
$$4f_{zx^2-zy^2}$$



$$4f_{xyz}$$

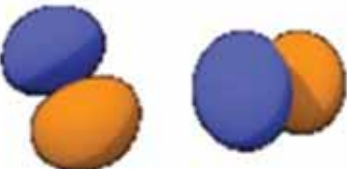
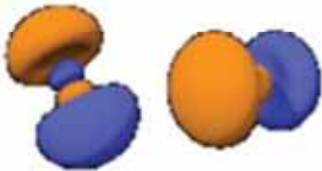
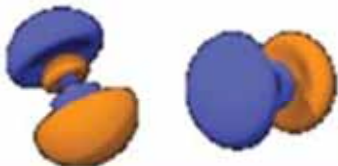
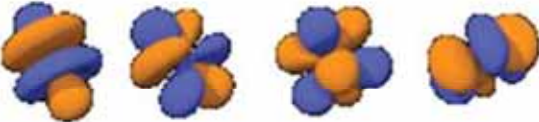


TEMA 3 Orbitales atómicos.



TEMA 3 Orbitales atómicos.

Orbitales atómicos con l y m frente a n

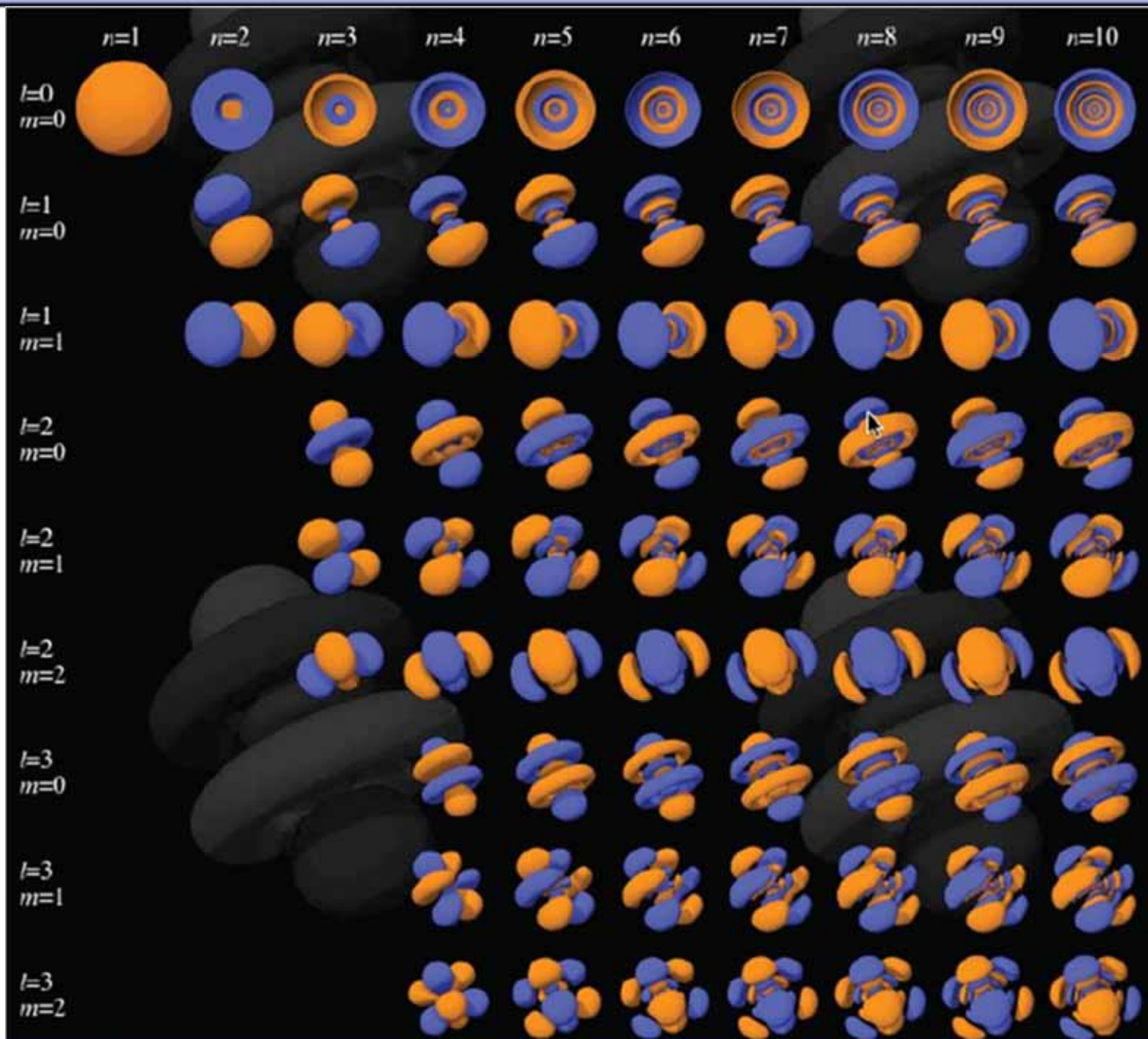
	$\ell=0$ $m=0$	$\ell=1$ $m=0$ $m=1$	$\ell=2$ $m=0$ $m=1$ $m=2$	$\ell=3$ $m=0$ $m=1$ $m=2$ $m=3$
$n=1$				
$n=2$				
$n=3$				
$n=4$				

<http://www.orbitals.com/orb/index.html>

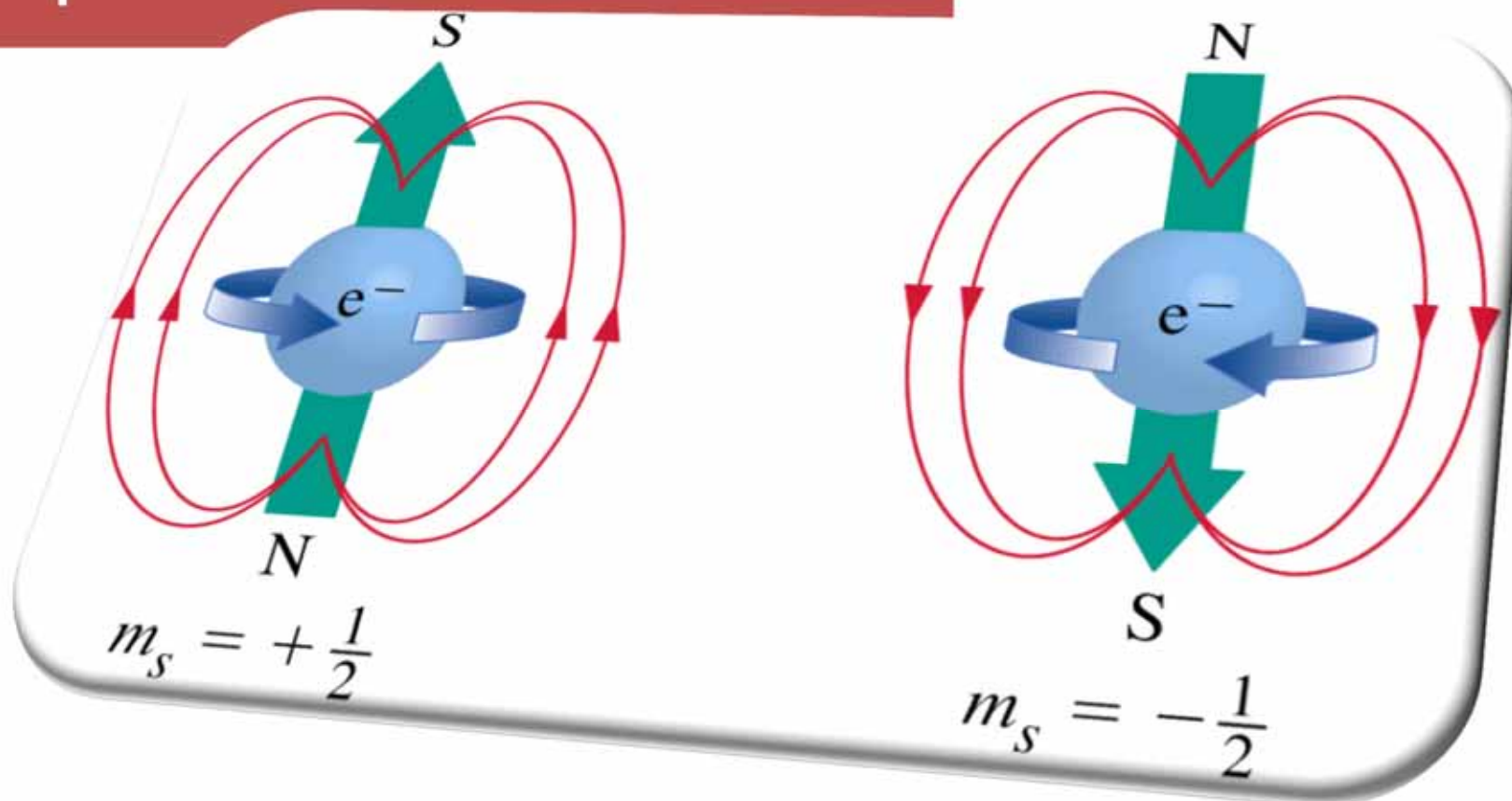


TEMA 3 Orbitales atómicos.

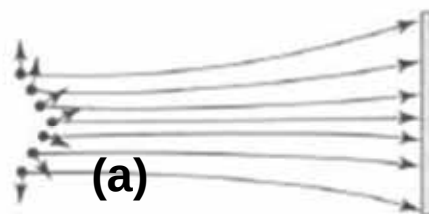
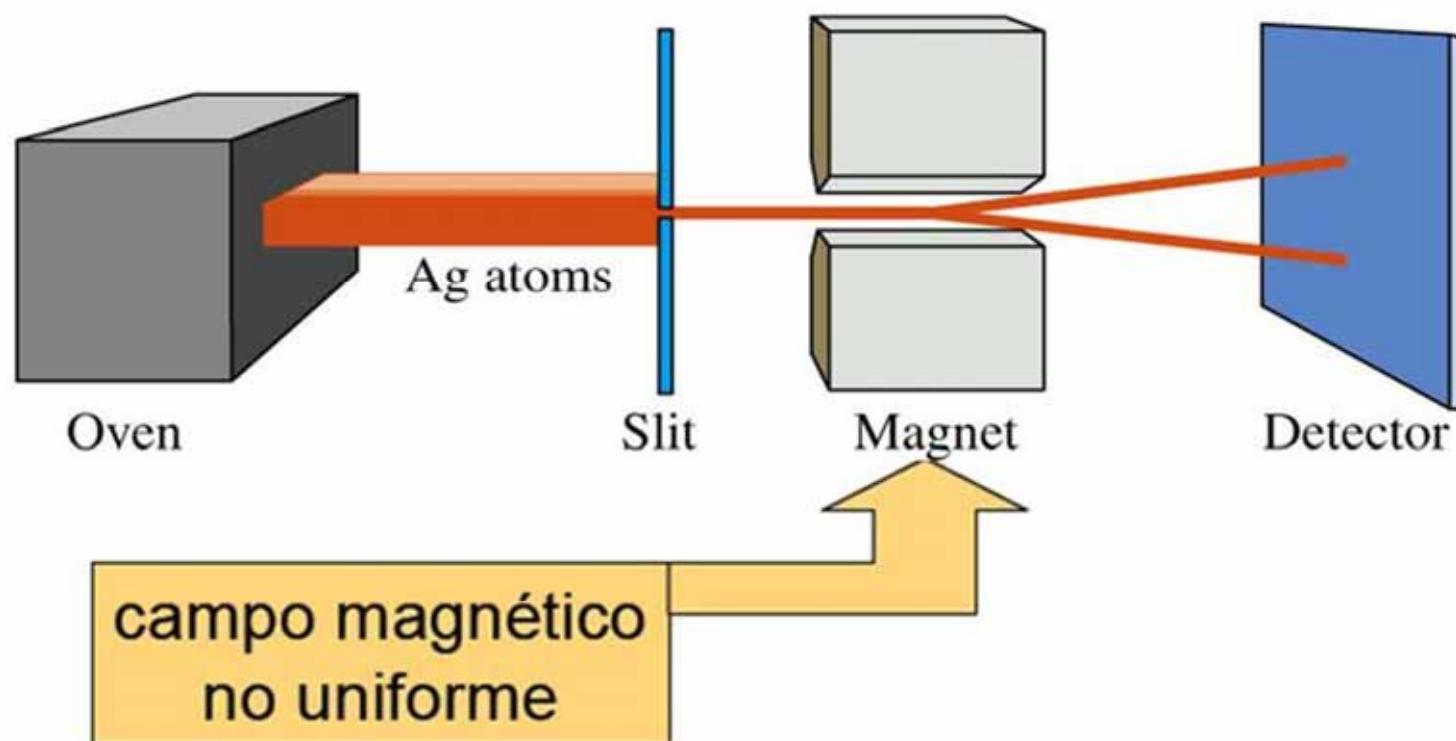
l y m
frente a n



El cuarto número cuántico: Espín electrónico



Experimento de Stern-Gerlach (1921)



(a)



(b)

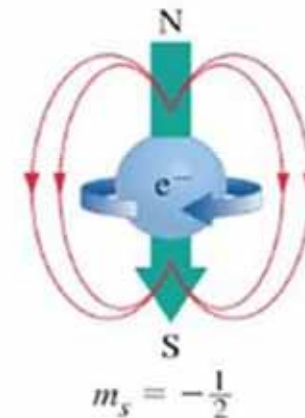
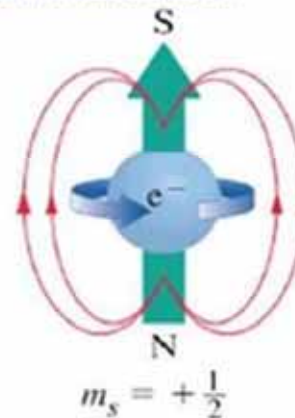
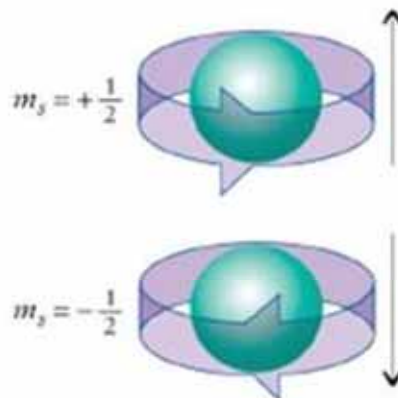
Experimento de Stern-Gerlach

- Se vaporiza plata en un horno y los átomos se hacen pasar a través de un campo magnético
- **Observación:** El haz de átomos se desdobra en dos.
- **Explicación:**
 - ◆ Un electrón, debido a su espín, genera un campo magnético.
 - ◆ Un par de electrones con espines opuestos no tiene campo magnético neto.
 - ◆ En un átomo de Ag, 23 electrones tienen un tipo de espín y 24 del tipo opuesto. La dirección del campo magnético neto producido depende solamente del espín del electrón desapareado.
 - ◆ En un haz de átomos de Ag existe la misma probabilidad de que el electrón desapareado tenga espín $+1/2$ que $-1/2$. El campo magnético inducido por los átomos interacciona con el campo magnético externo, no uniforme, desdoblándose el haz de átomos de Ag en 2 haces.



Espín electrónico

- Espín (del inglés spin):
- El electrón posee momento angular de rotación intrínseco:
 - ◆ de naturaleza mecanico-cuántica
 - ◆ no depende del estado orbital
 - ◆ es una magnitud vectorial
 - $|m.a.s.| = (h/2\pi)[s(s+1)]^{1/2}$;
 - s es el número cuántico de espín $= 1/2$
- Direcciones del vector m.a.s. están cuantizadas:
 - ◆ $m_s(h/2\pi)$
 - ◆ $m_s = +1/2$ ó $-1/2$



Visualización del espín del electrón. Dos electrones con espines opuestos generan campos magnéticos opuestos que se anulan entre sí.

Fin

NOBEL PRIZE WINNERS--NUCLEAR PHYSICS:

The 1982 Nobel Stamps issue illustrates the theme nuclear physics and honours five winners of the Nobel Prize in Physics. They were rewarded for their work in developing a new atomic theory--quantum mechanics. The Laureates are: NIELS BOHR, Denmark (1922), ERWIN SCHRÖDINGER, Austria (1933), LOUIS DE BROGLIE, France (1929), PAUL DIRAC, England (1933) and WERNER HEISENBERG, Germany (1932).





Ejercicio

¿Qué tipo de orbital (es decir, 2s, 4p, 5d,...) designa el siguiente grupo de números cuánticos: $n=4$, $l=2$, $m_l=-2$?

- a) 4p
- b) 4d
- c) 3d
- d) 4s
- e) 3p





Ejercicio

¿Qué tipo de orbital (es decir, 2s, 4p, 5d,...) designa el siguiente grupo de números cuánticos: $n=4$, $l=2$, $m_l=-2$?

- a) 4p
- b) **4d**
- c) 3d
- d) 4s
- e) 3p



Ejercicio

Para $n=4$, ¿Cuáles son los valores posibles de l ?

- a) -3,-2,-1, 0,1, 2, 3
- b) 4, 3, 2, 1
- c) 3, 2, 1, 0
- d) 4, 3, 2, 1, 0

Ejercicio

Para $n=4$, ¿Cuáles son los valores posibles de l ?

- a) -3,-2,-1, 0,1, 2, 3
- b) 4, 3, 2, 1
- c) 3, 2, 1, 0
- d) 4, 3, 2, 1, 0

Ejercicio

Un electrón que tiene $n=3$ y $m_l=0$

- a) debe tener $m_s=+1/2$
- b) debe tener $l=2$
- c) puede tener $l=0,1$ o 2
- d) debe tener $l=1$

Ejercicio

Un electrón que tiene $n=3$ y $ml=0$

- a) debe tener $m_s=+1/2$
- b) debe tener $l=2$
- c) **puede tener $l=0,1$ o 2**
- d) debe tener $l=1$

Ejercicio



¿Qué números cuánticos están asociados con la energía de un electrón en un átomo con $Z=1$?

- a) n, l
- b) sólo l
- c) n y dependiendo del giro m_s
- d) n, l y m_l



Ejercicio



¿Qué números cuánticos están asociados con la energía de un electrón en un átomo con $Z=1$?

- a) n, l
- b) sólo l
- c) n y dependiendo del giro m_s
- d) sólo n
- e) n, l y m_l



Ejercicio



¿Qué números cuánticos están asociados con la energía de un electrón en un átomo con $Z=1$?

- a) n, l
- b) sólo l
- c) n y dependiendo del giro m_s
- d) **sólo n**
- e) n, l y m_l

