



ce
pre
UNI

Química

MODELO ATÓMICO ACTUAL

CICLO
Preuniversitario

2024-I

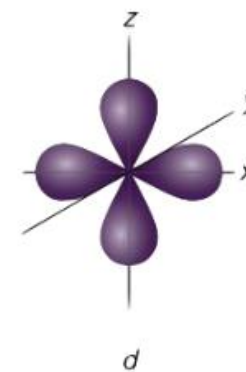
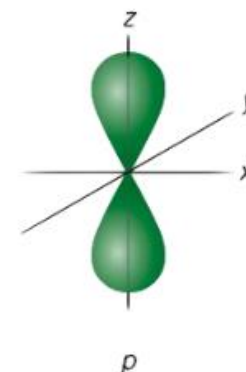
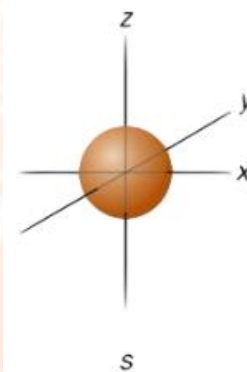


MODELO ATÓMICO ACTUAL

¿Cómo es el interior de un átomo?

La respuesta está dada por la Mecánica Cuántica Ondulatoria.

Esta teoría tiene un alto grado de complejidad matemática, y de conceptos probabilísticos, que han conducido al concepto de orbital.

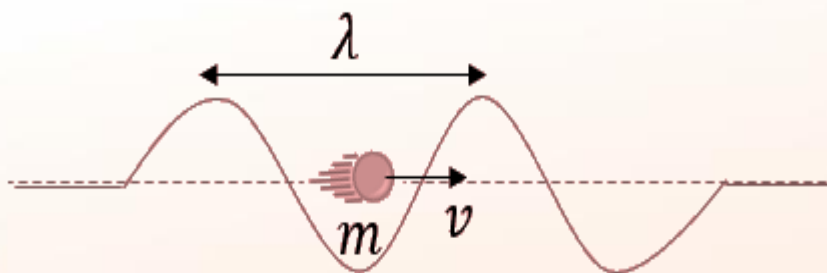


Dualidad onda partícula de Louis de Broglie (1924)



Postuló que si las ondas electromagnéticas tienen propiedad de partícula entonces las partículas como el electrón, protón, neutrón deben poseer también propiedades de onda (ondas de materia).

Esta hipótesis fue aceptada por Einstein y constituye la base de la Mecánica Cuántica.



$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

h : es la constante de Planck.

p : el momentum (momento lineal, cantidad de movimiento).

λ : Longitud de onda asociada.

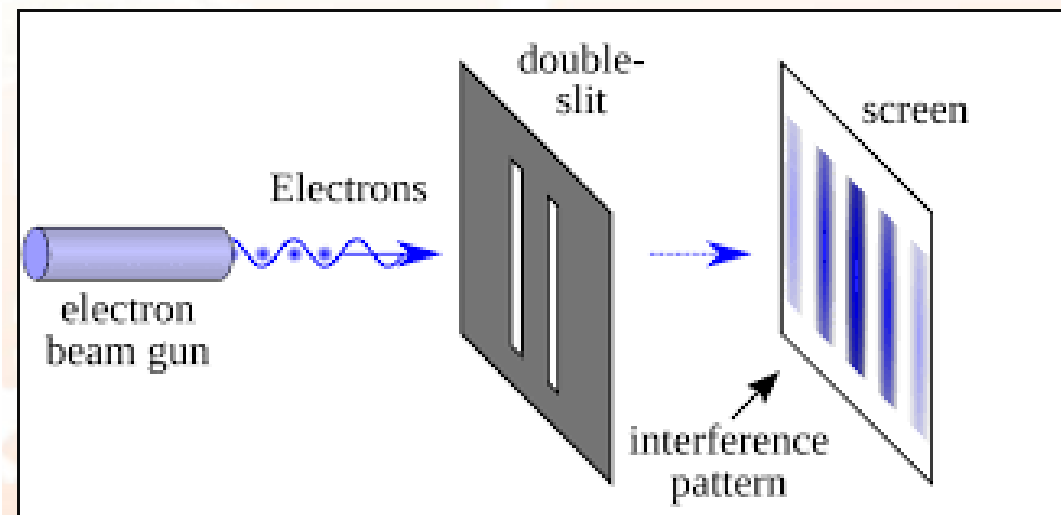
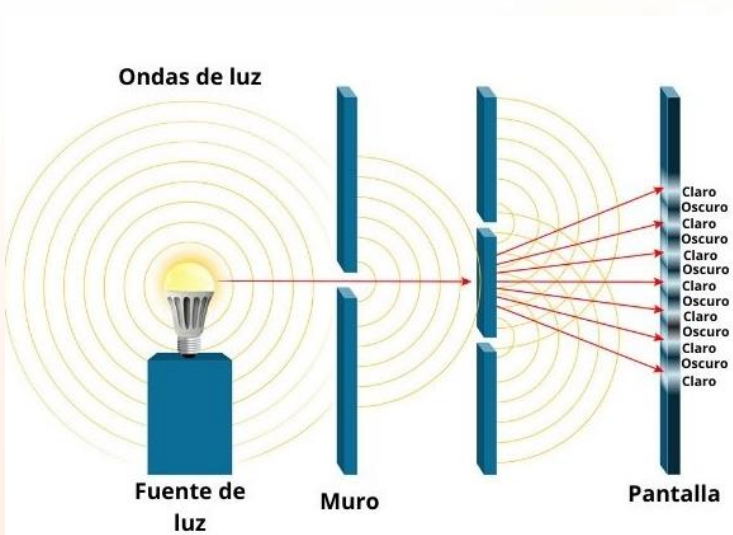
El valor tan pequeño de la constante de Planck : $h = 6,63 \times 10^{-34}$ J.s, impide asociar de manera significativa el comportamiento ondulatorio de la materia a nivel macroscópico, pues λ adopta valores muy pequeños.

https://www.youtube.com/watch?v=nX4ZrC4q_cw

Difracción de los electrones

Davisson, Germer y G. Thomson (1927) descubrieron la difracción de los electrones a través de cristales de Ni y otros metales, confirmando de manera experimental la naturaleza ondulatoria de los electrones.

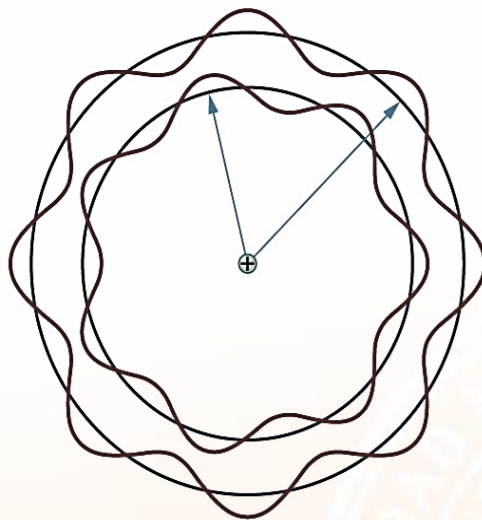
https://www.youtube.com/watch?v=nX4ZrC4q_cw



Los electrones y toda partícula tiene comportamiento de onda, y llevan asociada una onda de materia" (De Broglie)

"La luz no solo es una onda, sino que también se comporta como un haz de partículas (fotones)" (Einstein: efecto fotoeléctrico) y una aplicación de ello es el microscopio electrónico.

Aplicando la dualidad onda-partícula al modelo atómico de Bohr



$$2\pi[a_0 n^2] = n \cdot \lambda$$

Longitud de onda asociada al electrón en el nivel n , en el átomo de Bohr.

$$\lambda = 2\pi a_0 n$$

$$\underbrace{L \odot}_{2\pi r} = n \cdot \lambda$$

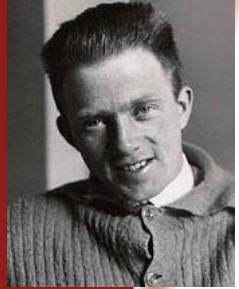
$$2\pi r = n \cdot \lambda$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{\frac{h}{m v}}$$

Reordenando: $L = m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$

Principio de incertidumbre de Heisenberg (1927)



Como consecuencia del comportamiento dual de los electrones, Heisenberg enuncia su "Principio de Indeterminación, imprecisión o Incertidumbre", que dice:

"Es imposible determinar simultáneamente y con exactitud, la posición y el momentum (o la velocidad) del electrón".

Cuando más exacta se mide una de éstas propiedades, menos exacta es medir la otra, presentándose un grado de incertidumbre o indeterminación.

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

x: posición

p=mv: momentum

Δx = incertidumbre en la posición.

Δp = incertidumbre en el momentum.

h = constante de Planck



PREGUNTA 1

Dadas las siguientes proposiciones:

- I. El modelo atómico actual, se fundamenta únicamente en principios de la física clásica.
- II. Según Louis de Broglie, la materia en movimiento presenta propiedades ondulatorias.
- III. Según el principio de incertidumbre de Heisenberg, es posible determinar con exactitud la velocidad y posición de una partícula.

Son correctas:

- A) solo I
- B) solo II
- C) solo III
- D) I y II
- E) I, II y III

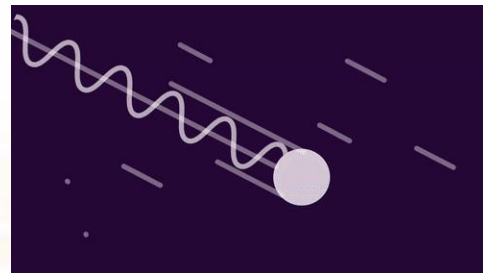
Rpta: B

PREGUNTA 2

Calcule la longitud de onda asociada de un electrón, cuando este se encuentra en el nivel 3, del átomo de hidrógeno de Bohr.

Dato: a_o = radio de Bohr.

- A) $4\pi a_o$
- B) $6\pi a_o$
- C) $8\pi a_o$
- D) $10\pi a_o$
- E) $12\pi a_o$

ce
pre
UNI**Rpta: B**

PREGUNTA 3

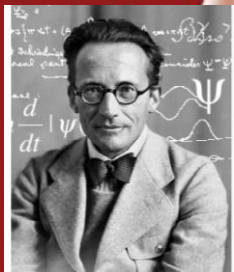
En un microscopio electrónico, en lugar de fotones, se utilizan electrones para formar la imagen. Estos se comportan como una onda con una longitud de onda muy pequeña y nos permite obtener imágenes con mayor resolución. ¿Cuál será la longitud de onda asociada (en pm) a un electrón que viaja a 20 % de velocidad de la luz?

($m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$; $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$; $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ Jxs}$)

- A) 6,05
- B) 18,2
- C) 19,1
- D) 12,1
- E) 30,2

Rpta: D

Ecuación de onda de Schrödinger (1926)



El físico austriaco Erwin Schrödinger puso las bases para el desarrollo de la Mecánica Cuántica Ondulatoria, la cual incluye los conceptos de masa y onda pues la solución de la ecuación que propuso conduce a la llamada función de onda (Ψ).

Asociada con dicha función se genera un conjunto de números llamados "números cuánticos": principal (n), secundario o angular (ℓ) y magnético (m_ℓ).

La función de onda (Ψ) carece de significado físico, mientras que la función elevada al cuadrado (Ψ^2), se asocia con la densidad de probabilidad de hallar el electrón en un volumen del espacio.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

Ecuación de Schrödinger

$$\frac{\delta^2 \psi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 \psi}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 \psi}{\delta z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

Donde:

x, y, z : Representan los ejes coordenados en el espacio tridimensional.

ψ : Función de onda del electrón, carece de significado físico .

ψ^2 : Es un indicador de la probabilidad de encontrar un electrón en una región espacial (densidad electrónica)

δ : Símbolo de derivada parcial

m : Masa de un electrón.

V : Energía potencial de un electrón.

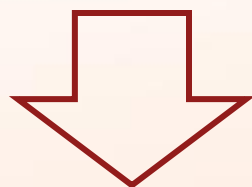
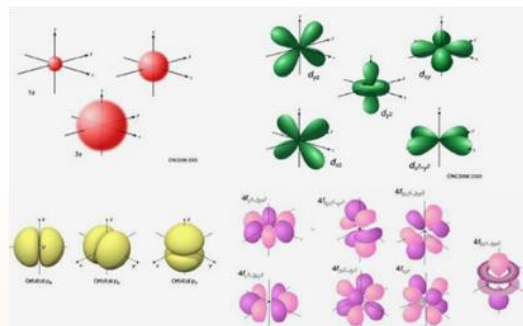
E : Energía total de un electrón.

<https://www.youtube.com/watch?v=gXywgJ4wybg>

Schrödinger



Mecánica cuántica
ondulatoria



Tres números
cuánticos

(n, ℓ, m_ℓ)

$$\left(\alpha_0 m c^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j c \right) \psi(\mathbf{x}, t) = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t)$$



Cuatro números
cuánticos:

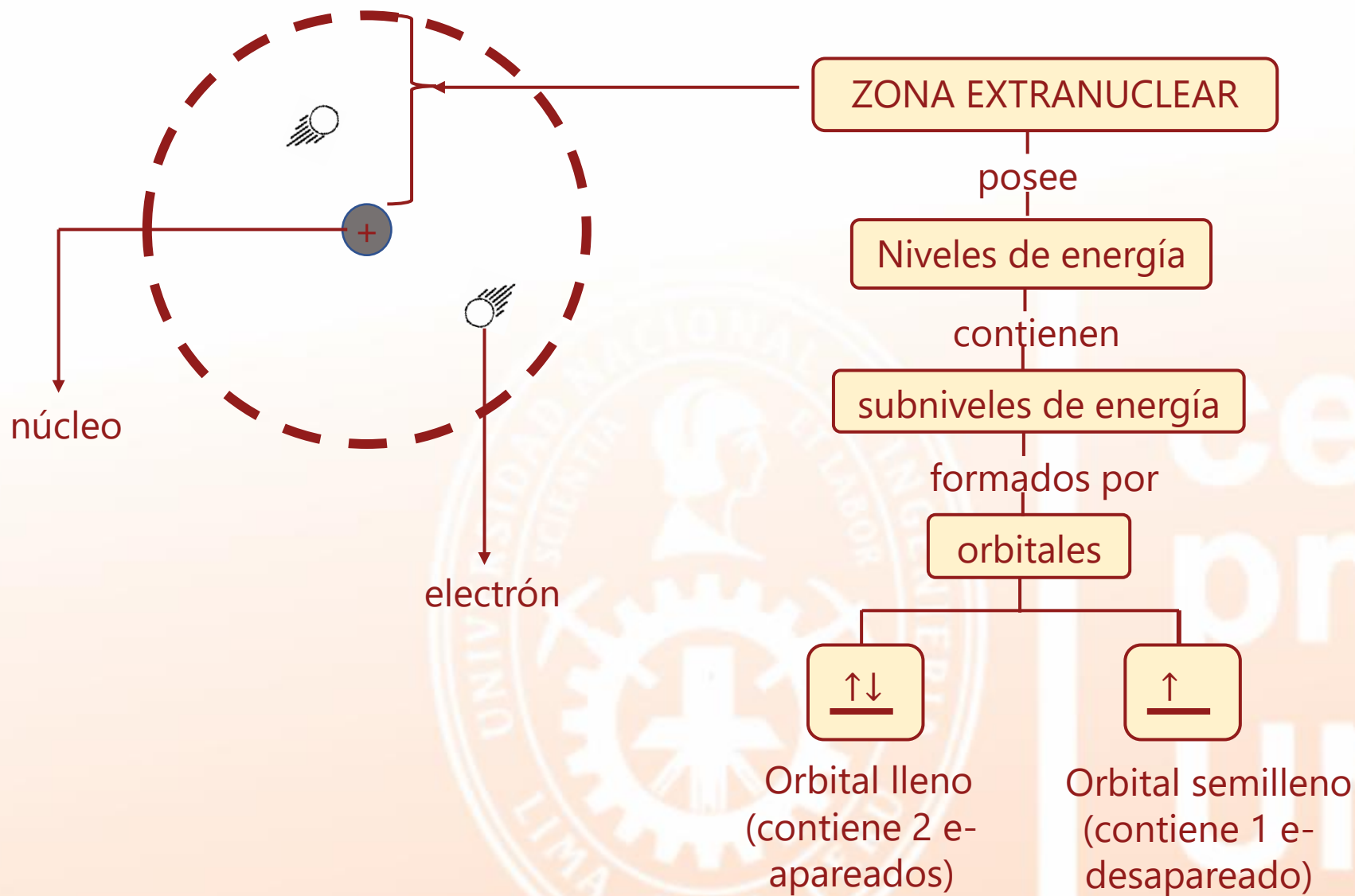
(n, ℓ, m_ℓ, m_s)

Dirac



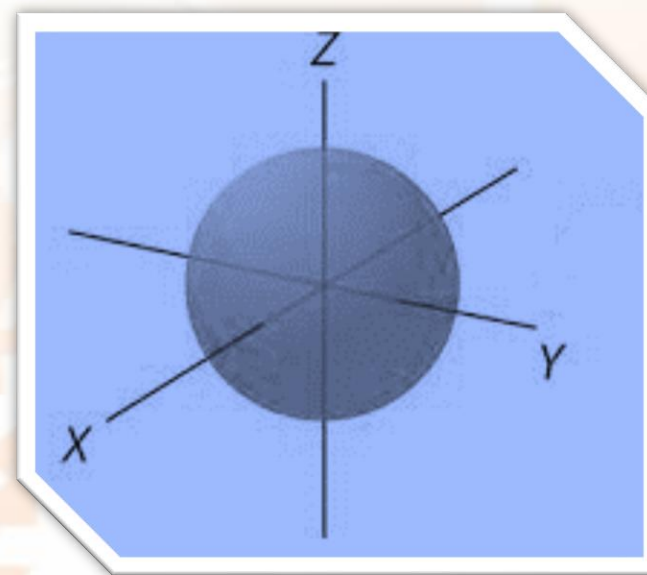
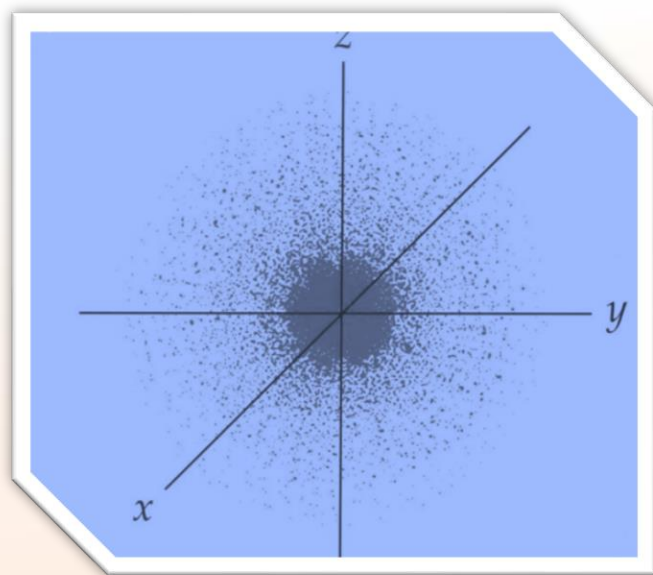
Mecánica cuántica
matricial

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA



ORBITAL ATÓMICO

- Es la región de espacio en donde existe la mayor probabilidad de encontrar a los electrones.
- En un orbital puede existir como máximo dos electrones.



Representaciones:



NÚMEROS CUÁNTICOS

- Las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger y Dirac para átomos de hidrógeno dieron funciones de onda, que describen los estados disponibles del único electrón del átomo de hidrógeno.
- Cada uno de los estados posibles del electrón se describen mediante cuatro números cuánticos.
- Estos números cuánticos desempeñan un rol muy importante en la descripción de los niveles de energía de los electrones y formas de los orbitales que describen la distribución de los electrones en el espacio.

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER (3 números)



ECUACIÓN DE DIRAC (4 números)

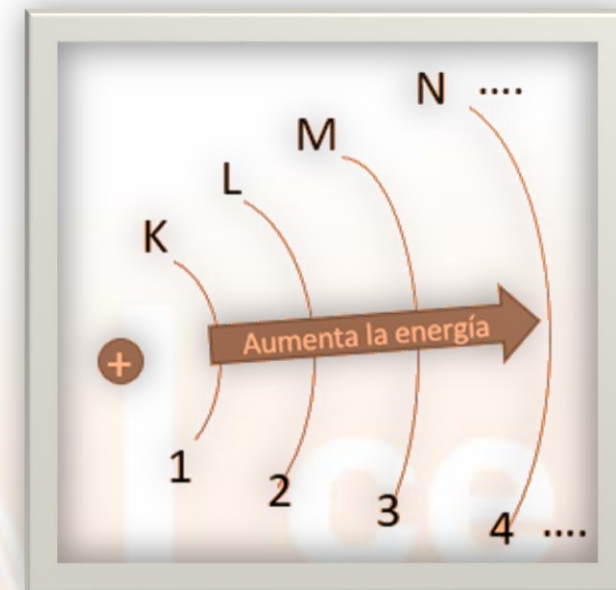
Número cuántico de spin

NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL (n)

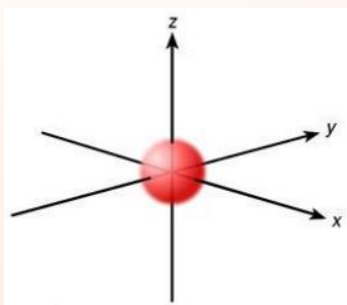
- Indica el nivel energético.
- Determina la energía y el tamaño del orbital.
- Cuanto más alejado del núcleo se encuentre un electrón, ocupará un nivel con mayor energía y será menos estable.

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots, \infty$$

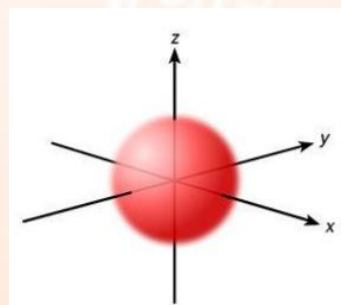
$$K, L, M, N, O, P, Q$$



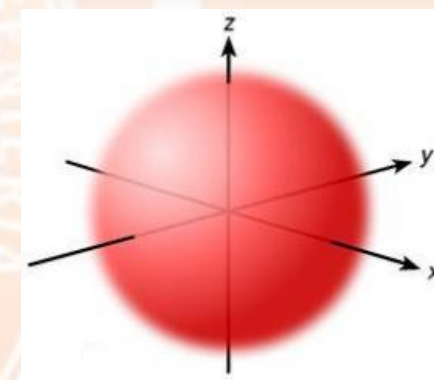
1s



2s



3s



Para un nivel tenemos que:

$$\# e_{max}^- = 2n^2$$

$$\# \text{ orbitales en nivel "n"} = n^2$$

NÚMERO CUÁNTICO DEL MOMENTO ANGULAR (ℓ)

- Identifica a los subniveles de energía.
- Determina la energía y la forma de los orbitales.

$$\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots, n-1$$

n	ℓ	Subnivel	# Subniveles = n
1	0	1s	1
2	0	2s	2
	1	2p	
3	0	3s	3
	1	3p	
	2	3d	

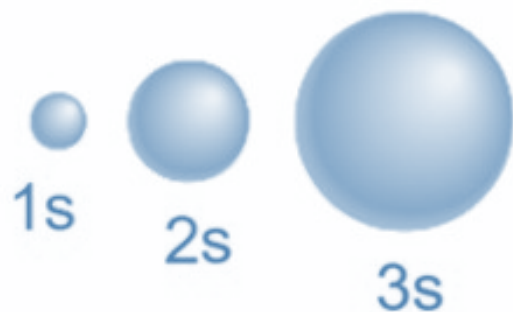
NÚMERO CUÁNTICO MAGNÉTICO (m_ℓ)

- Indica la orientación de los orbitales atómicos.
- Cada valor corresponde a un orbital atómico.

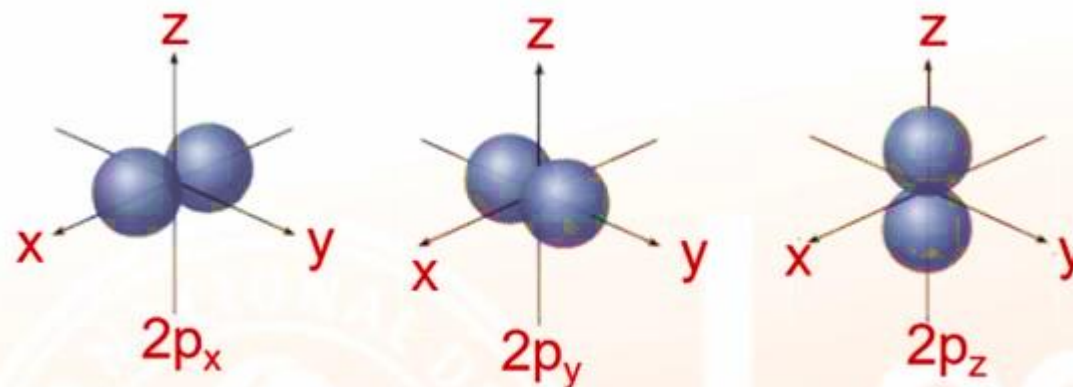
$$m_\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots, n-1$$

ℓ	m_ℓ	# Orbitales = $2\ell + 1$	# Max. $e^- = 4\ell + 2$
0 (s)	0 s	1	2
1 (p)	-1 0 +1 p_x p_y p_z	3	6
2 (d)	-2 -1 0 +1 +2 d_{xy} d_{xz} d_{yz} $d_{x^2-y^2}$ d_{z^2}	5	10
3 (f)	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7	14

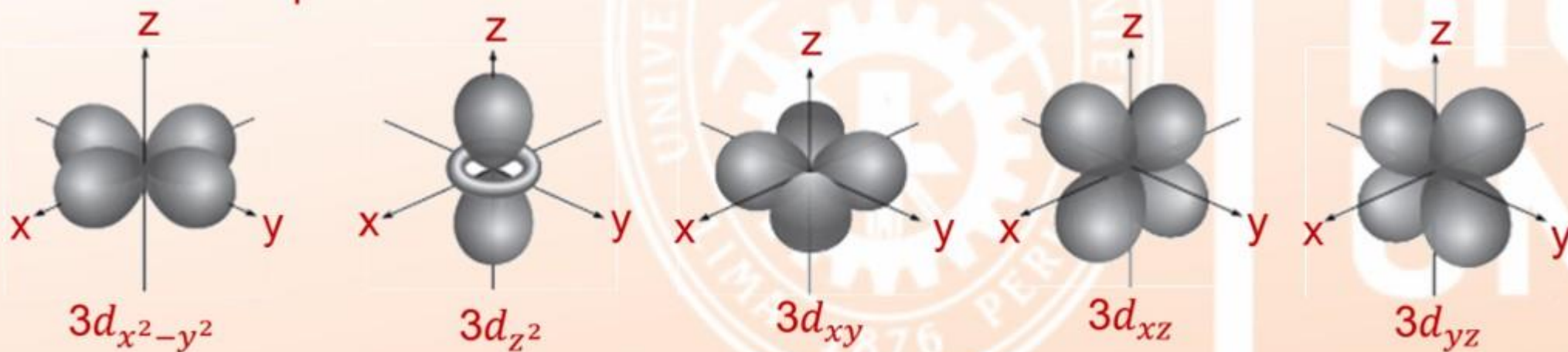
$\ell = 0$: Orbital s
(forma esférica)



$\ell = 1$: Orbitales p
(forma dilobular)



$\ell = 2$: Orbitales d (solo 4 de ellos son de forma tetra lobular o trebol)



Notación cuántica de un subnivel de energía

$$n\ell^x$$

$n \rightarrow$ nivel de energía ($n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$)

$\ell \rightarrow$ subnivel de energía: s ($\ell = 0$), p ($\ell = 1$), d ($\ell = 2$), f ($\ell = 3$),

$x \rightarrow \leq$ al número máximo de electrones en el subnivel citado.

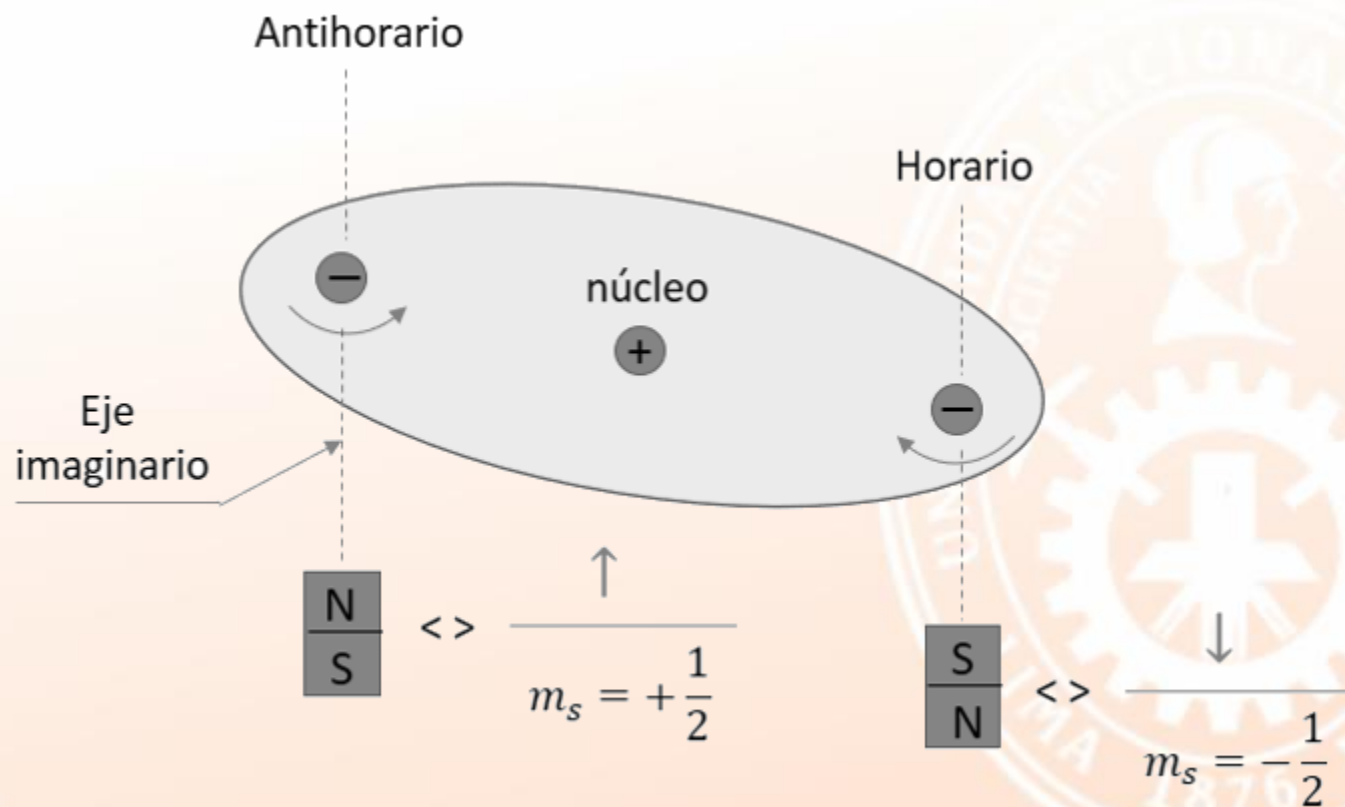
Por ejemplo: $2p^5$, $3s^2$, $3d^7$, $4p^6$,

Notación	n	ℓ	$\#e^-$
$2p^5$	2	1	5
$3s^2$	3	0	2
$3d^7$	3	2	7
$4p^6$	4	1	6

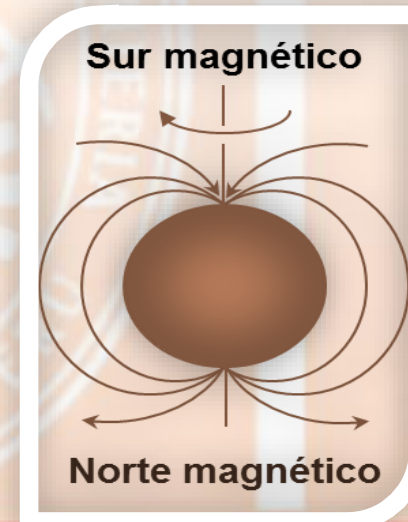
NÚMERO CUÁNTICO DE ESPÍN (ms)

Indica el giro aparente del electrón sobre su eje imaginario.

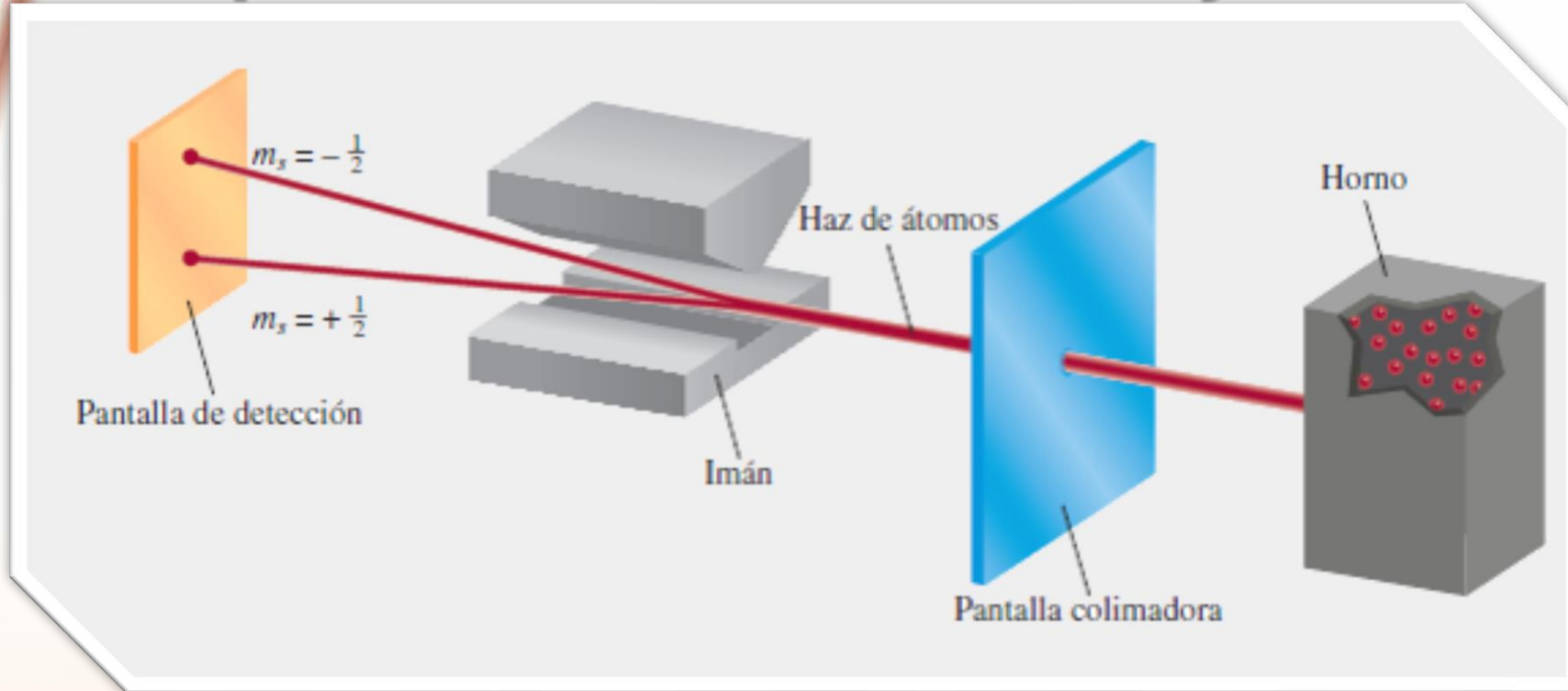
$$m_s = \mp \frac{1}{2}$$



Visión clásica del espín



Experimento de Stern y Gerlach, (1922)



Los átomos en los que el número cuántico de espín electrónico (m_s) del electrón no apareado es $+1/2$ se desvían en una dirección; aquellos en los que m_s es $-1/2$ se desvían en la otra.

<https://youtu.be/PH1FbkLVJU4>



Walther Gerlach



Otto Stern

PREGUNTA 4

Indique en forma ordenada si las siguientes proposiciones, referente a la mecánica cuántica ondulatoria son verdaderas (V) o falsas (F):

- I. Los números cuánticos " n " y " ℓ " definen un subnivel.
- II. El numero cuántico " ℓ " determina la orientación espacial del orbital.
- III. La región del espacio de forma dilobular en donde existe la probabilidad de encontrar al electrón, corresponde al orbital " p "

- A) VVV
- B) VFV
- C) FVV
- D) FFV
- E) FFF

Rpta: B

PREGUNTA 5

Respecto a los números cuánticos (n, ℓ, m_ℓ, m_s) que identifican a un electrón en un átomo, indique de las siguientes proposiciones, ¿cuáles son las correctas?

- I. El conjunto de números cuánticos $(2, 1, 0, +1/2)$, representa un posible estado permitido para un electrón.
- II. El conjunto de números cuánticos $(4, 0, 0, -1/2)$, caracteriza un electrón que se encuentran ubicado en un orbital tipo "d".
- III. El número máximo posible de electrones para valores de (n, ℓ, m_ℓ, m_s) con $n=4$ y $\ell=3$, es 14 .

- A) I y II
- B) II y III
- C) I y III
- D) Solo II
- E) Solo III

Rpta: C

PREGUNTA 6

¿Cuáles de los siguientes juegos de números cuánticos son posibles para un electrón en el átomo?

- I. $2, 2, 0, -1/2$
- II. $2, 1, 0, -1/2$
- III. $3, 2, -3, +1/2$

- A) Solo I
- B) Solo II
- C) Solo III
- D) I y II
- E) II y III

ce
pre
UNI**Rpta: B**

PREGUNTA 7

Respecto a los números cuánticos, determine si la proposición es verdadera (V) o falsa (F).

- I. El número máximo de orbitales que puede contener cada nivel de energía es n^2 .
- II. En un nivel n , el número de orbitales en el subnivel de máxima energía relativa es $(2n - 1)$.
- III. El número cuántico de espín toma solo dos valores enteros.

- A) VFF
- B) VFV
- C) VVF
- D) VFF
- E) VVV

Rpta: C

DISTRIBUCIÓN ELECTRÓNICA

Consiste en la distribución de los electrones de un átomo en sus niveles de energía, subniveles y orbitales.

se sustenta en el

Principio de Aufbau

formulado por



Niels Bohr

se aplica mediante la

Regla de Moeller

Principio de exclusión

establecida por



Wolfgang Pauli

se aplica mediante la

Regla de Pauli

Principio de máxima multiplicidad

establecida por



Friedrich Hund

se aplica mediante la

Regla de Hund

PRINCIPIO DE CONSTRUCCIÓN (AUFBAU)

DIAGRAMA DE MÖELLER

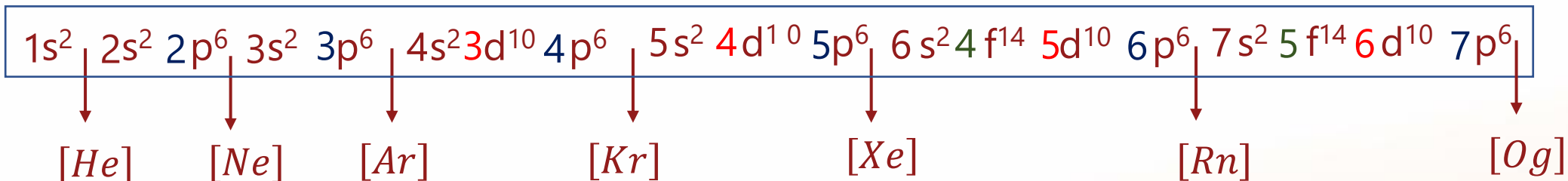


Therald Möeller

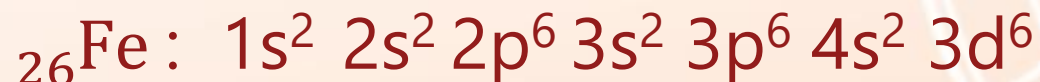
Niveles	1	2	3	4	5	6	7
subniveles	$1s^2$	s^2 p^6	s^2 p^6 d^{10}	s^2 p^6 d^{10} f^{14}	s^2 p^6 d^{10} f^{14}	s^2 p^6 d^{10}	s^2 p^6
Capacidad real	2e-	8e-	18e-	32e-	32e-	18e-	8e-
Capacidad teórica	2e-	8e-	18e-	32e-	50e-	72e-	98e-

- La distribución electrónica que describiremos para cada átomo recibe el nombre de configuración electrónica del estado fundamental o basal.
- Ésta corresponde al átomo aislado en su estado energético más bajo.

Distribución electrónica en niveles y subniveles de energía



Ejemplos:



Distribución electrónica abreviada

“Los electrones ocupan los subniveles de energía de acuerdo a su energía creciente”

Una primera aproximación (regla práctica) la da la llamada regla de Madelung, hallando la energía relativa (E_R).

a)

$$E_R = n + \ell$$

Ejemplo:

Subnivel	n	ℓ	$E_R = n + \ell$
4p	4	1	5
3s	3	0	3
5f	5	3	8
3d	3	2	5

De lo señalado en la tabla, tenemos:

$$3s < 3d < 4p < 5f$$

aumenta energía relativa

$$3s > 3d > 4p > 5f$$

aumenta estabilidad

b) Si el valor de dos subniveles coincide en ($n + \ell$), como se observa en la tabla con los subniveles 4p y 3d, el número cuántico principal determina, que subnivel tiene mayor energía, así $3d < 4p$.



- Se denominan orbitales degenerados a aquellos orbitales que poseen el mismo valor de energía al estar en el mismo subnivel (p, d o f), pero se diferencian en la orientación espacial.
- Tienen igual n y ℓ

Ejemplo:

El subnivel de energía 2p está formado de tres orbitales de igual energía; por lo tanto son degenerados:

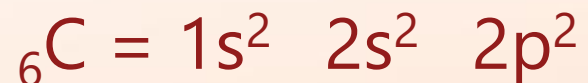
$$2p = 2p_x, 2p_y, 2p_z$$



- Se denomina estado excitado, a aquel sistema donde la especie atómica absorbe cierta cantidad de energía, lo que provoca que uno o más de sus electrones sean promovidos a niveles (o subniveles) de mayor energía. Son inestables, luego regresan a su estado basal emitiendo luz.

Ejemplo: Para un átomo de carbono ($Z = 6$)

Estado **fundamental**
(basal) del carbono



Estados **excitados** del carbono



PREGUNTA 8

De acuerdo al principio de AUFBAU indique verdadero (V) o falso (F) a las siguientes proposiciones:

- I. Establece que los electrones se distribuyen de menor a mayor estabilidad.
- II. Establece cuando se distribuye electrones en un mismo subnivel, se busca ocupar la mayor cantidad de orbitales semillenos.
- III. Establece que la distribución de electrones se realiza de menor a mayor energía.

- A) VVV
- B) FFF
- C) VFV
- D) FFV
- E) VVF

Rpta: D

PREGUNTA 9

Con relación a las configuraciones electrónica indique verdadero (V) o falso (F), según corresponda:

- I. $_{13}\text{Al} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
- II. $_{35}\text{Br} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4p^6 5s^1$
- III. $_{38}\text{Sr} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2$

- A) VFV
- B) VFF
- C) FVV
- D) FFV
- E) FFF

ce
pre
UNI**Rpta: A**

PREGUNTA 10

Los orbitales atómicos son regiones del espacio, donde existe la más alta probabilidad de encontrar al electrón. Tomando en cuenta, la forma y el nivel energético de los orbitales atómicos, indique la alternativa correcta.

- A) En un subnivel 4d, todos los orbitales tienen la misma forma.
- B) Para el átomo de magnesio ($Z=12$), los orbitales 3s y $2p_z$ tienen la misma energía .
- C) Los orbitales $5p_x$ y $4d_{xy}$ son orbitales degenerados.
- D) Los orbitales 1s y 3 s tienen formas diferentes.
- E) El subnivel 3d presenta 5 orbitales degenerados con diferentes orientaciones espaciales.

Rpta: E