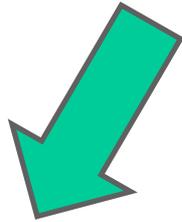
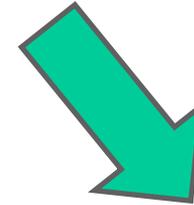


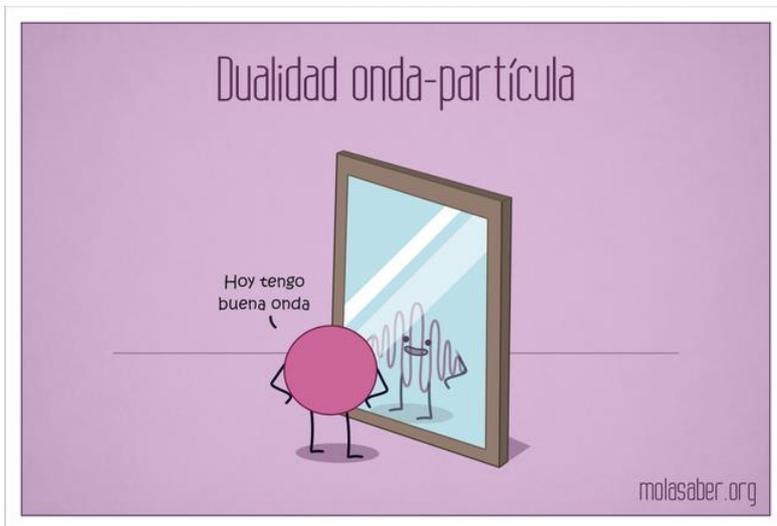
Dos eventos cruciales modifican la forma de ver el mundo



Dualidad onda-partícula de De Broglie

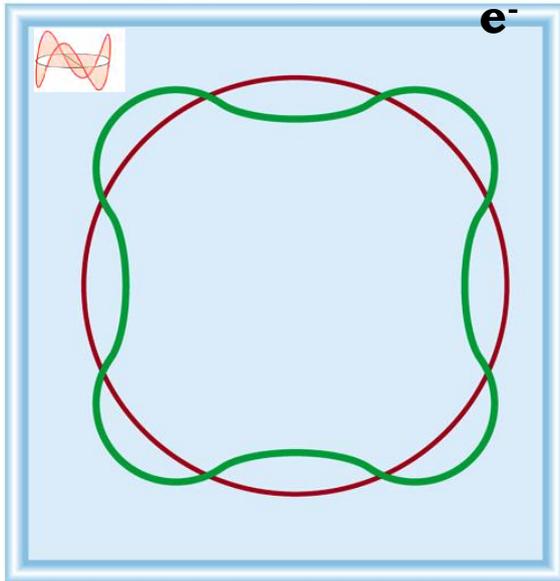


Principio de incertidumbre de Heisemberg



Comportamiento dual de la materia (Ondas de materia)

Louis de Broglie en 1924 sugirió:



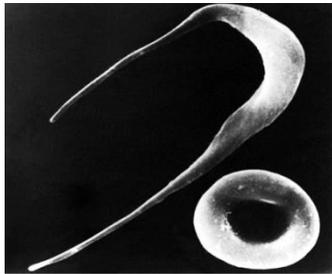
Longitud de onda de **Broglie**

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

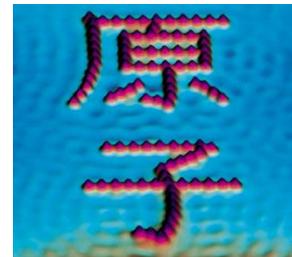
v = velocidad del electrón

m = masa del electrón

Aplicación de la difracción de electrones: Microscopía electrónica

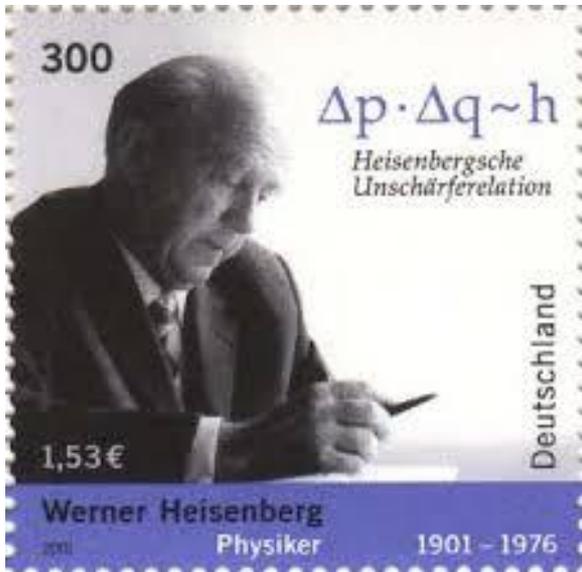


Células en sangre



Átomos de Fe en
superficie de cobre

Wegner Heisemberg



Es imposible determinar con exactitud el momento y la posición de un electrón (o de cualquier otra partícula muy pequeña) en forma simultánea.

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h$$

Heisemberg: *"la mecánica cuántica estableció definitivamente la no validez del principio de causalidad"* (Heisenberg, "Über den anschaulichen Inhalt Quantenmechanik", en *Zeitschrift für Physik*, 1927, XLIII, pág., 3 y 4).

No porque haya demostrado lo contrario a dicho principio sino por demostrar, sí, la imposibilidad absoluta de probar o refutar la hipótesis del determinismo causal exacto.

Modelo de mecánica cuántica de átomos

El enfoque matemático de la mecánica cuántica implica el tratamiento del electrón en un átomo como una *onda estacionaria*

ψ - Función de onda de **Schrödinger (1927)**

ψ^2 - densidad de probabilidad

ψ define la energía de un e^- y la probabilidad de encontrarlo en un espacio definido – **ORBITALES ATOMICOS**

Números cuánticos

$$\Psi = \text{fn}(\mathbf{n}, \mathbf{l}, \mathbf{m}_l, \mathbf{m}_s)$$

\mathbf{n} = número cuántico principal

Define el **nivel de energía** y **tamaño** del orbital

Distancia desde el e^- hasta el núcleo

\mathbf{n} toma valores enteros (1, 2, 3..... ∞)

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$$

l = número cuántico de momento angular orbital

Define **subniveles** de energía en los que se puede encontrar un electrón y está relacionado con la **forma** del orbital

Forma del espacio en el que puede moverse un e^-

l toma valores enteros (0, 1, 2 n-1)

$$l = \begin{cases} 0 & ; \text{orbital } s \\ 1 & ; \text{orbitales } p \\ 2 & ; \text{orbitales } d \\ 3 & ; \text{orbitales } f \end{cases}$$

$$\Psi = \text{fn} (n, l, m_l, m_s)$$

m_l = número cuántico magnético

Distingue **orientación** de los orbitales dentro de cada subnivel l
Es **UN** número por **cada orbital** en el subnivel l

Orientación del orbital en el espacio

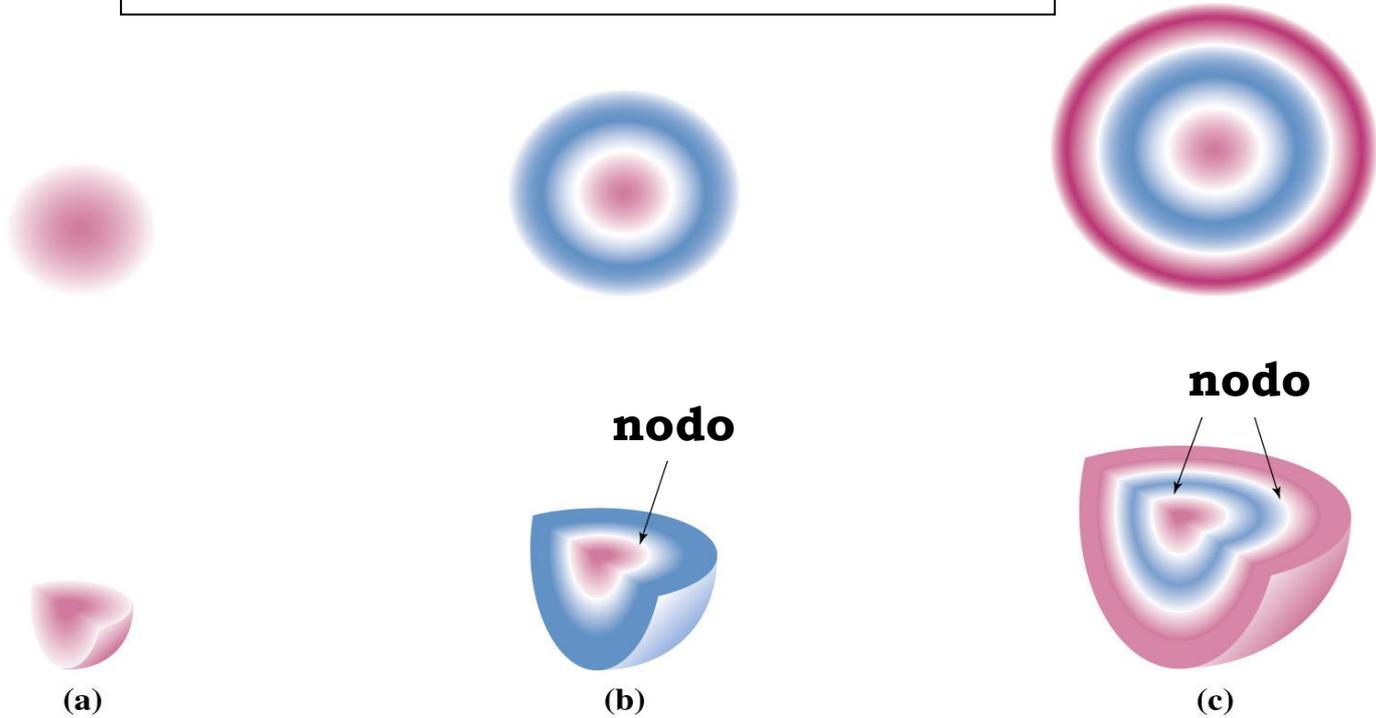
m_l toma valores enteros (-1 ..., 0, +1)

Si $l = 0$ (orbital **s**), $m_l = 0$

Si $l = 1$ (orbitales **p**), $m_l = -1, 0, \text{ ó } 1$

Si $l = 2$ (orbitales **d**), $m_l = -2, -1, 0, 1, \text{ ó } 2$

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s) \text{ para orbitales } S$$



$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$l = 0$	$l = 0$	$l = 0$
$m_l = 0$	$m_l = 0$	$m_l = 0$

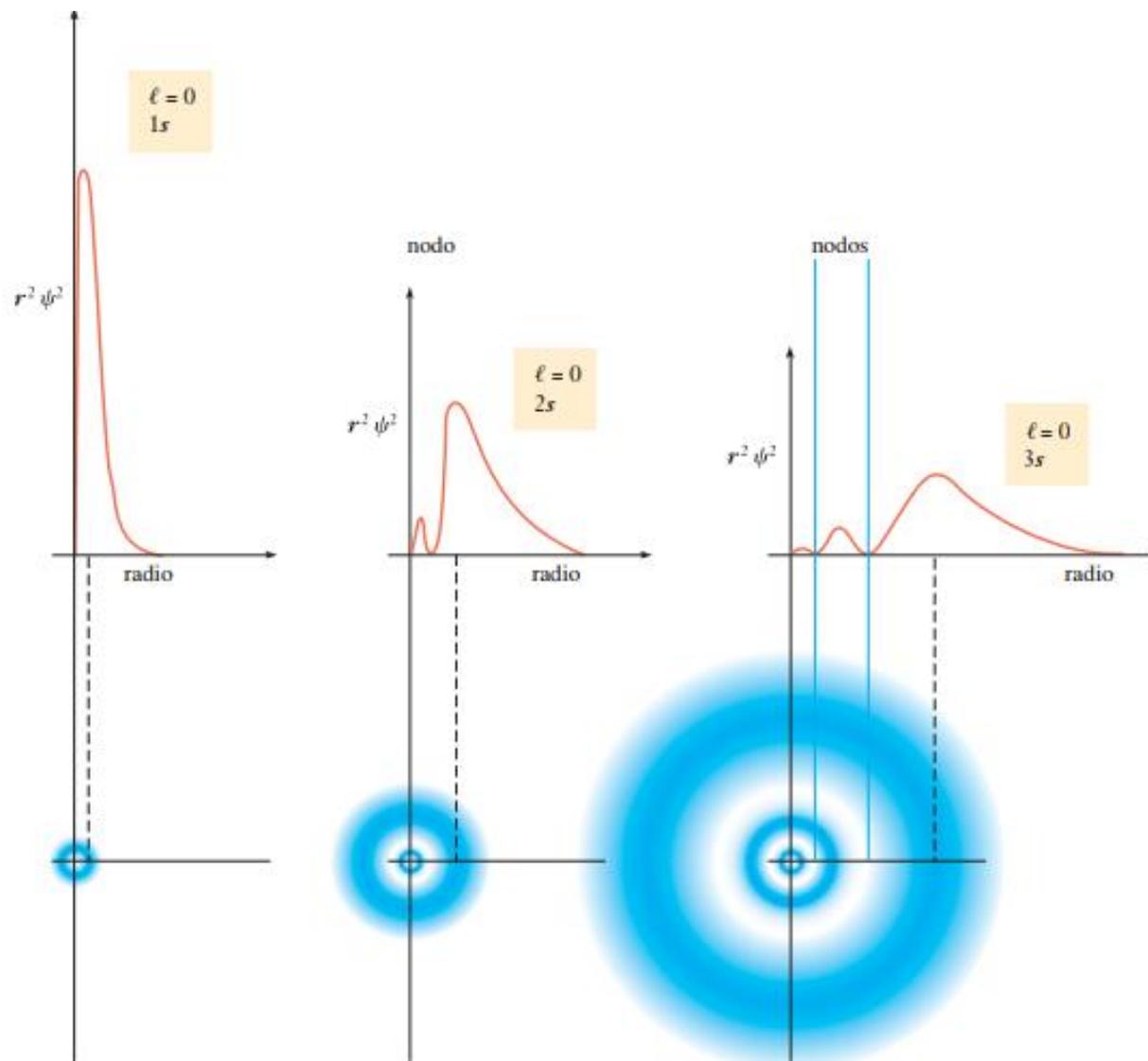
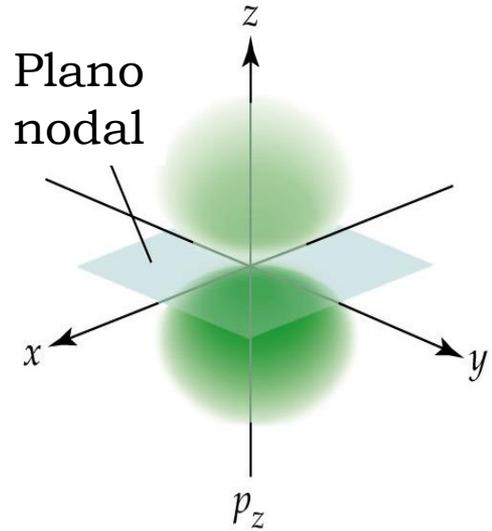
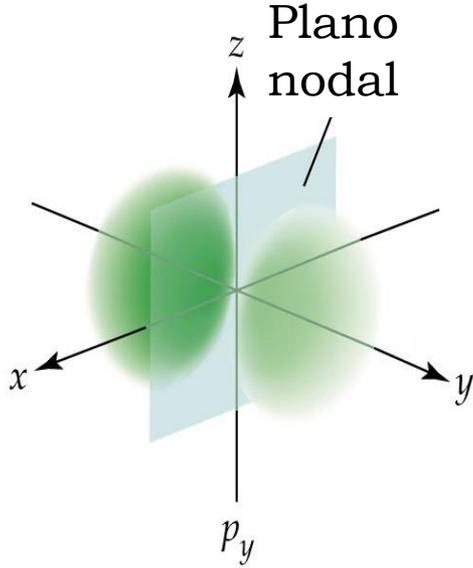
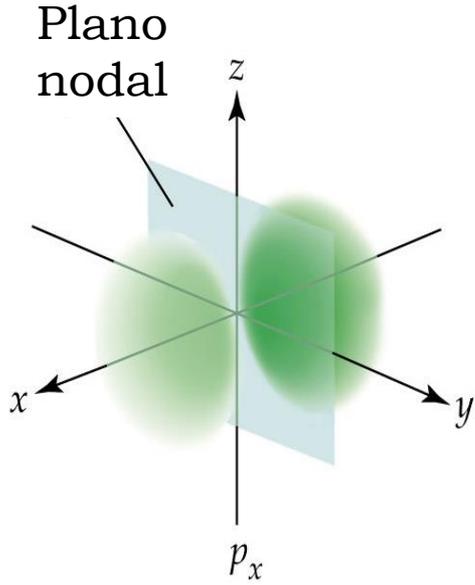


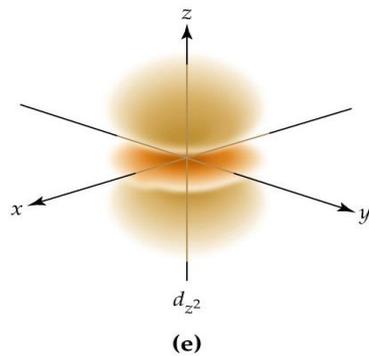
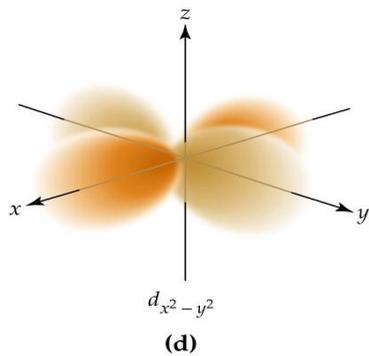
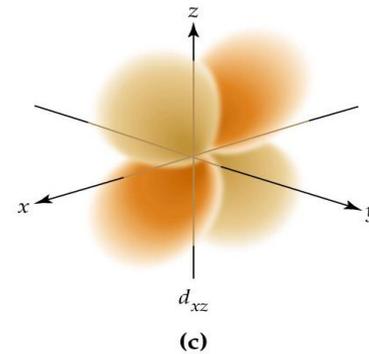
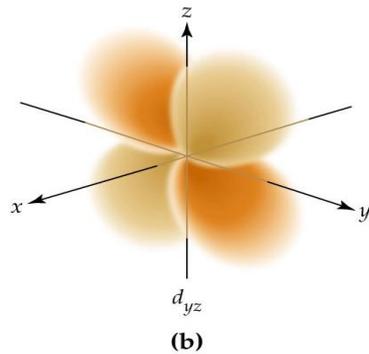
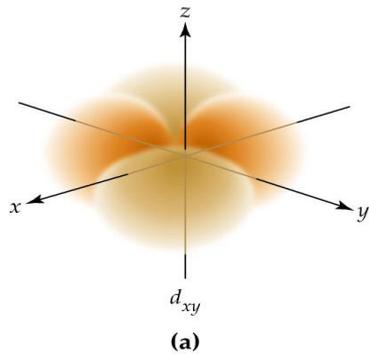
Figura 4.22 Gráficas de la distribución de densidad electrónica asociadas a los orbitales s. En todos los orbitales s, esta gráfica es igual en cualquier dirección (el orbital tiene simetría esférica). El esquema que está debajo de cada gráfica muestra una sección transversal, en el plano del núcleo atómico, de la nube de electrones asociada a ese orbital. La densidad electrónica es proporcional a $r^2 \psi^2$. Los orbitales s con $n > 1$ tienen regiones $n - 1$ donde la densidad electrónica cae a cero. Éstas se indican en la gráfica con las líneas azules, señalando el lugar donde la densidad electrónica cae a cero (nodos) y por las regiones blancas en el corte transversal.

$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s) \text{ para orbitales } p$$



$n = 2$	$n = 2$	$n = 2$
$l = 1$	$l = 1$	$l = 1$
$m_l = 1$	$m_l = 0$	$m_l = -1$

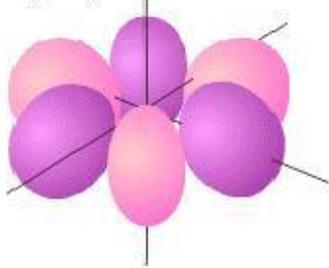
$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$ para orbitales d



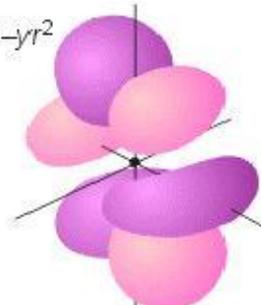
$n = 3$	$n = 3$	$n = 3$	$n = 3$	$n = 3$
$l = 2$	$l = 2$	$l = 2$	$l = 2$	$l = 2$
$m_l = 2$	$m_l = 1$	$m_l = 0$	$m_l = -1$	$m_l = -2$

$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$ para orbitales f

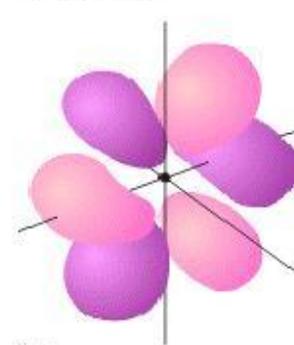
$4f_{y^3-3yx^2}$



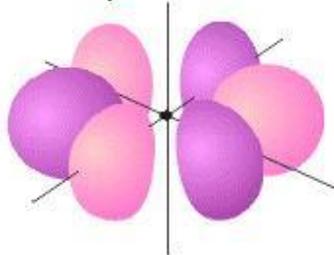
$4f_{5yz^2-yr^2}$



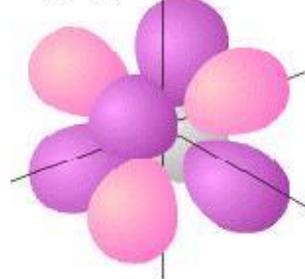
$4f_{5xz^2-3xr^2}$



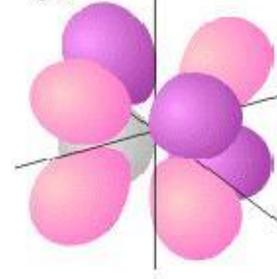
$4f_{x^3-3xy^2}$



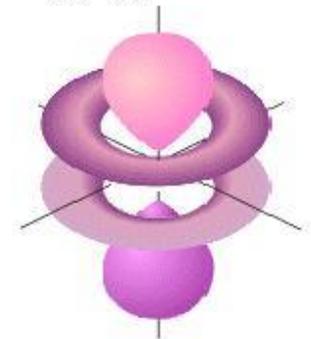
$4f_{zx^2-zy^2}$



$4f_{xyz}$



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



$n = 4$

$l = 3$

$m_l = 3$

$n = 4$

$l = 3$

$m_l = 2$

$n = 4$

$l = 3$

$m_l = 1$

$n = 4$

$l = 3$

$m_l = 0$

$n = 4$

$l = 3$

$m_l = -1$

$n = 4$

$l = 3$

$m_l = -2$

$n = 4$

$l = 3$

$m_l = -3$

Número total de **orbitales** para cada nivel **n**



$$n^2$$



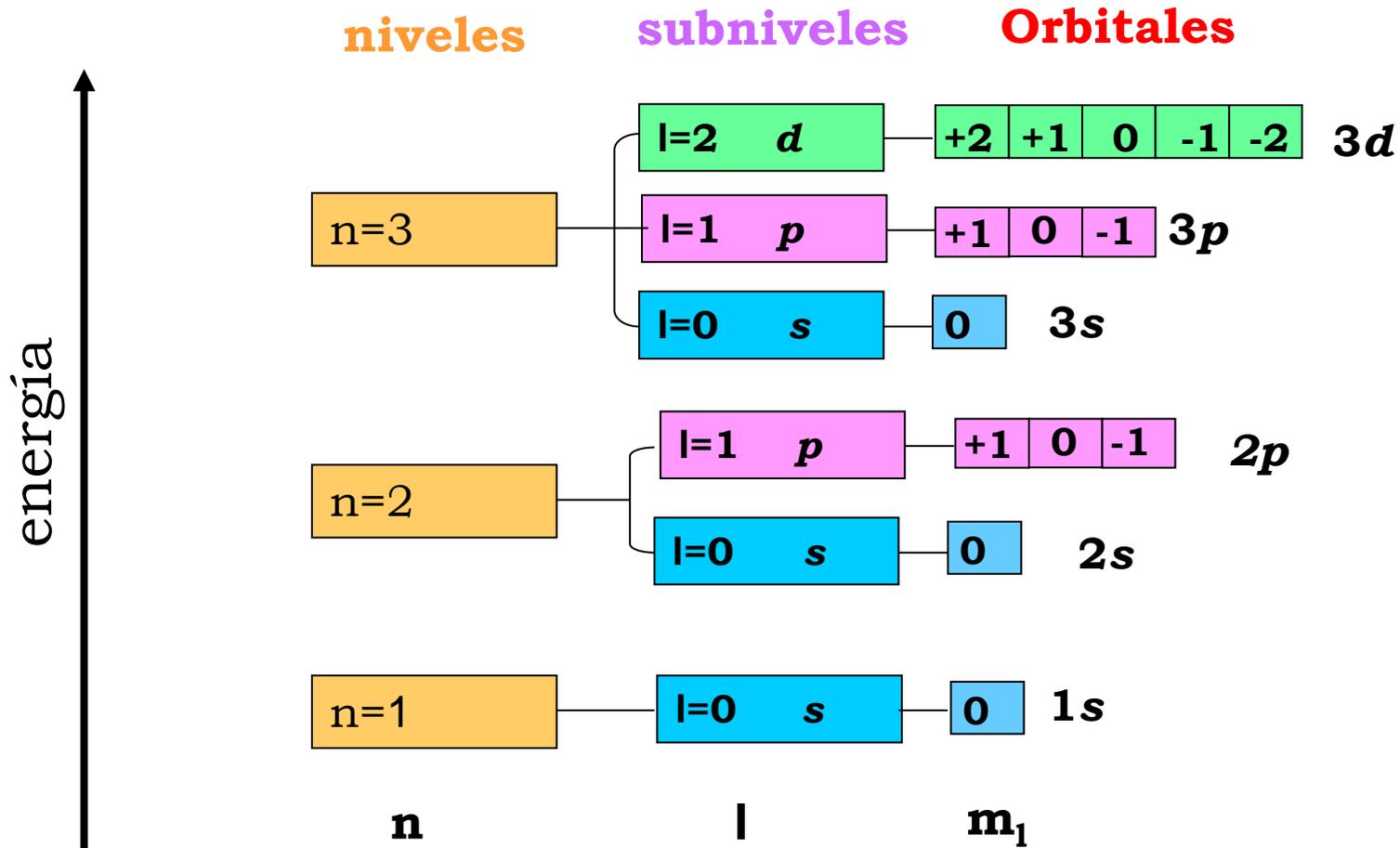
El nivel **n=1** consta de **1 orbital** [s]

El nivel **n=2** consta de **4 orbitales** [1 s y 3 p]

El nivel **n=3** consta de **9 orbitales** [1 s , 3 p y 5 d]

El nivel **n=4** consta de **16 orbitales** [1 s , 3 p , 5 d y 7 f]

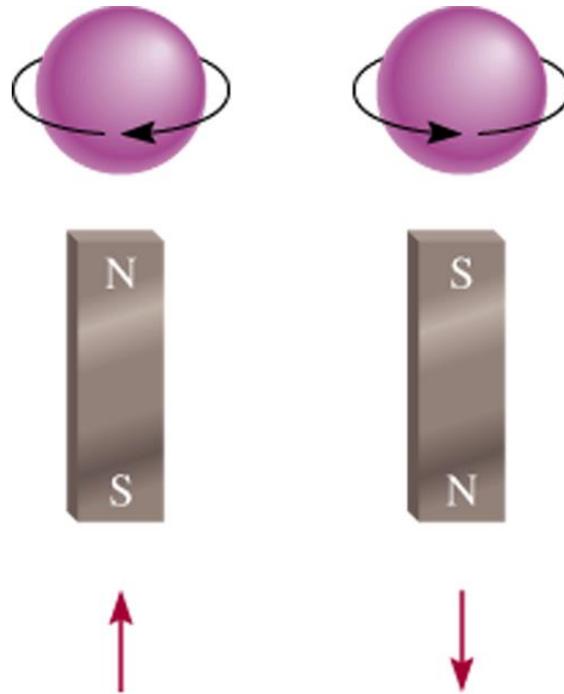
Disposición de orbitales en niveles y subniveles de energía en un átomo



$$\Psi = \text{fn}(n, l, m_l, m_s)$$

m_s = número cuántico magnético de espín

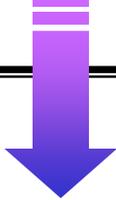
Define el comportamiento del electrón cuando éste gira en torno a su propio eje (**espín electrónico**) (Goudsmit y Uhlenbeck 1925)



m_s toma valores : **+ 1/2** **- 1/2**

La cantidad de energía que corresponde a cada e^- en un átomo se describe por una función de onda, Ψ , que es **UNICA**

Regla general : Principio de exclusión de Pauli (1925)



Cada orbital puede contener solo 2 e^- y sus espines deben estar apareados ($\uparrow\downarrow$)

Por lo tanto.....**NO** existen dos e^- en un átomo con los cuatro números cuánticos iguales

Cada orbital tiene $2e^-$, solo puede haber $2n^2$ e^- por nivel

DIAGRAMA DE ENERGIA

Niveles, subniveles y orbitales del átomo de hidrógeno

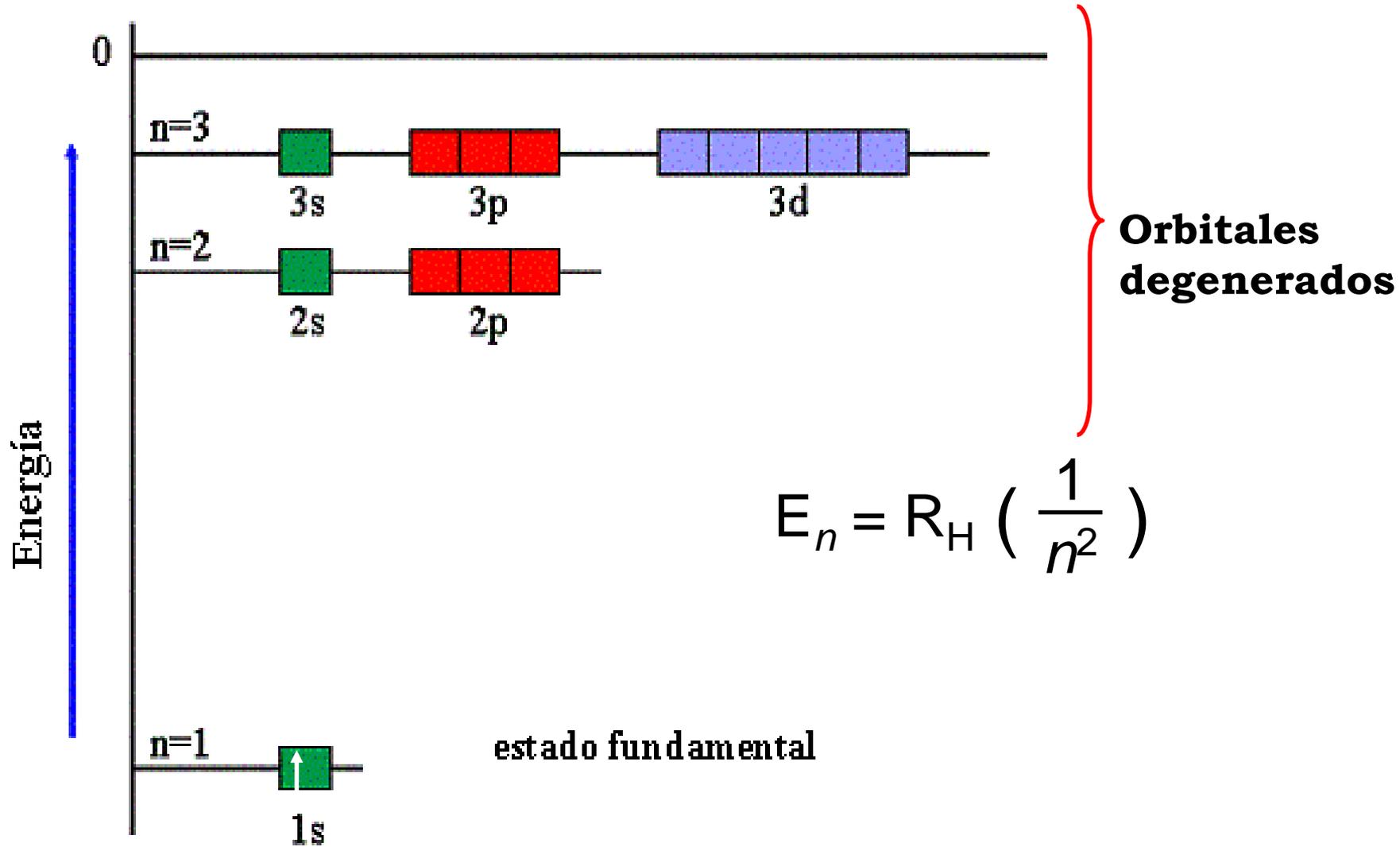
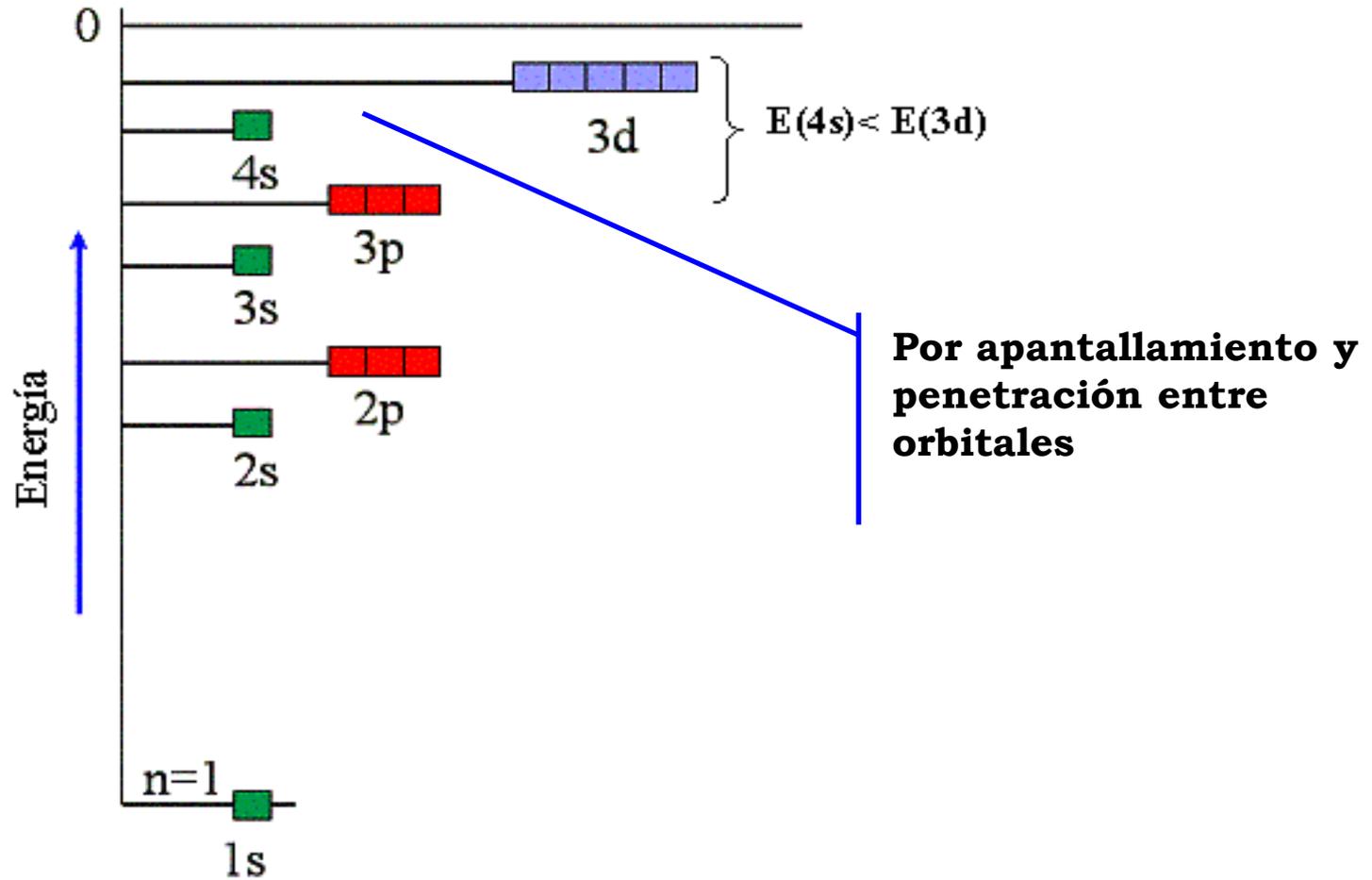


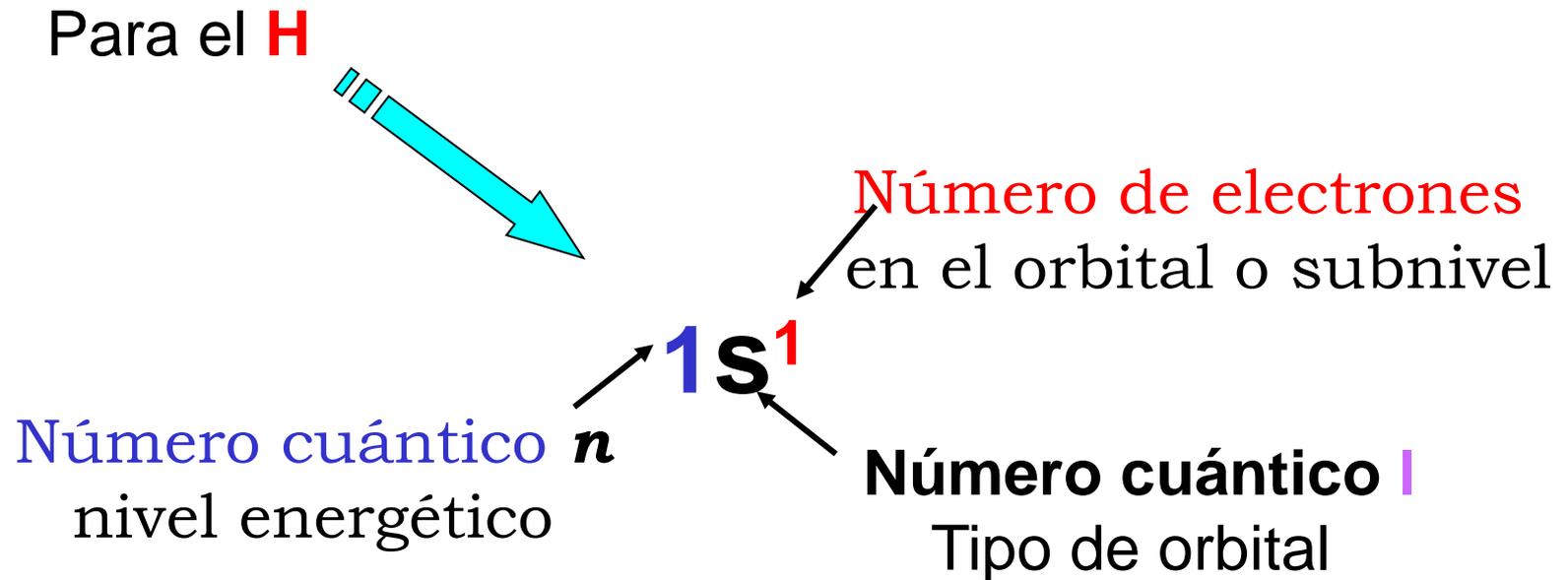
DIAGRAMA DE ENERGIA

Niveles, subniveles y orbitales en un átomo multielectrónico



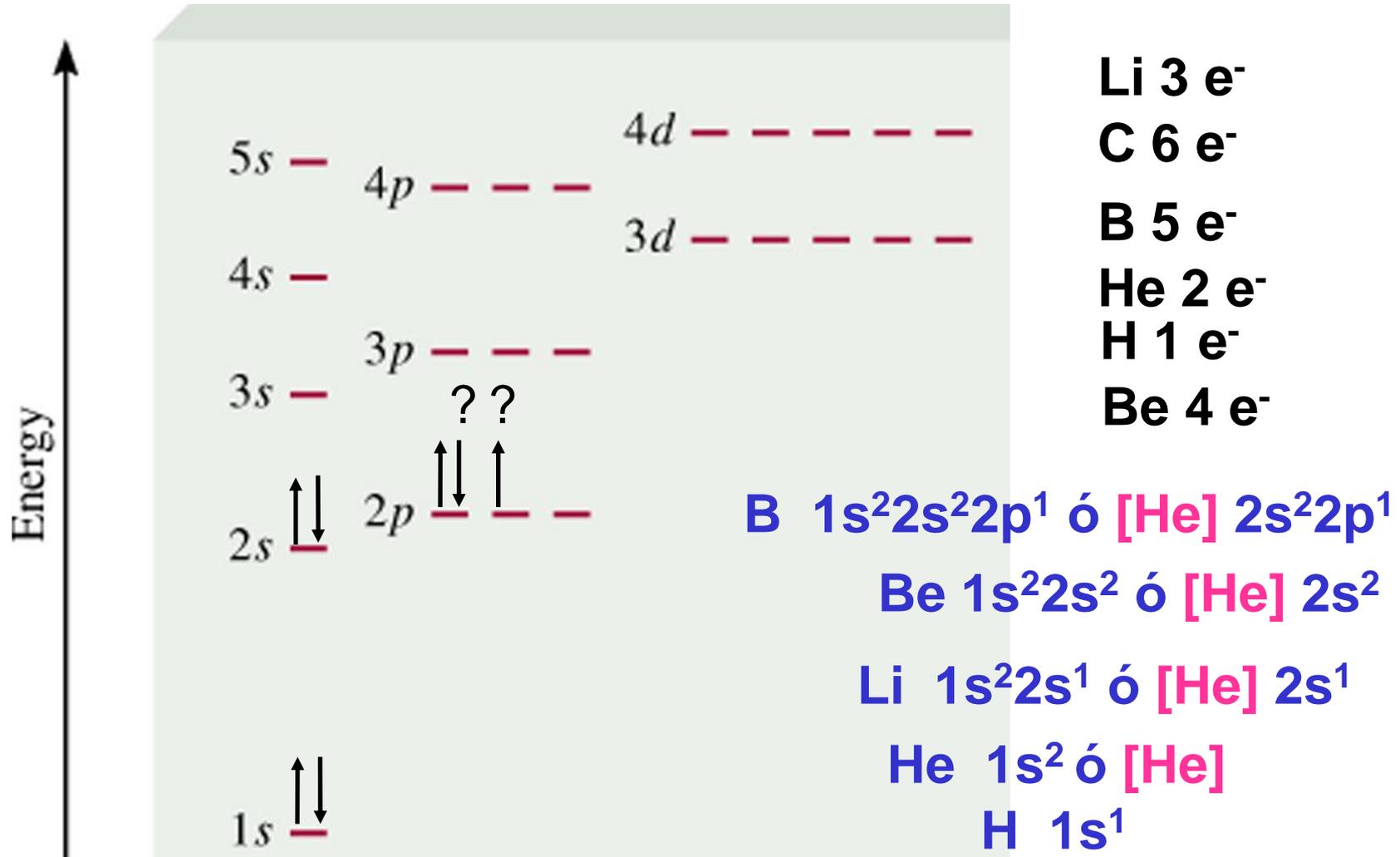
CONFIGURACION ELECTRONICA

Indica cómo los electrones se distribuyen entre los diversos orbitales en un átomo.

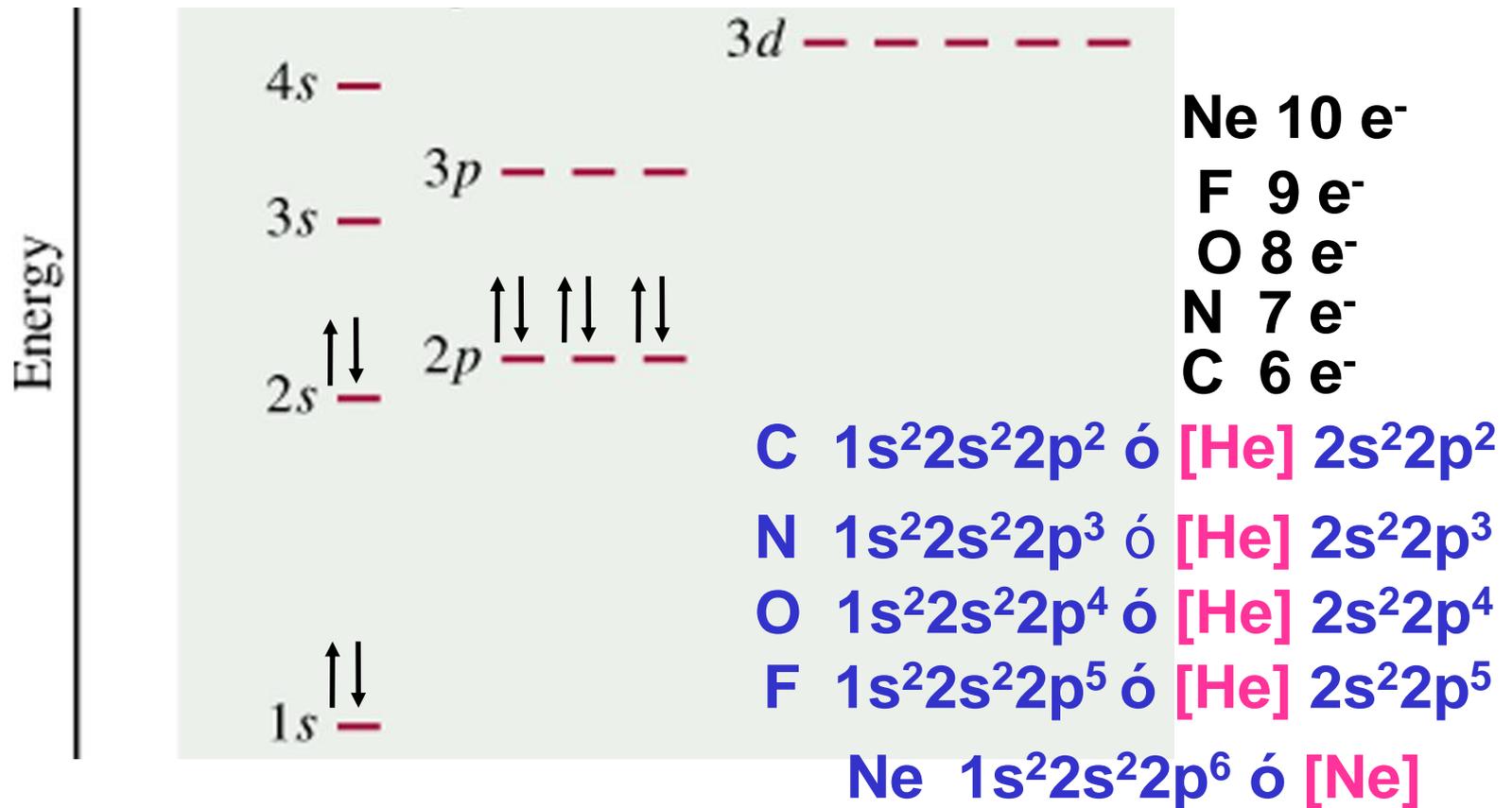


Principio de construcción

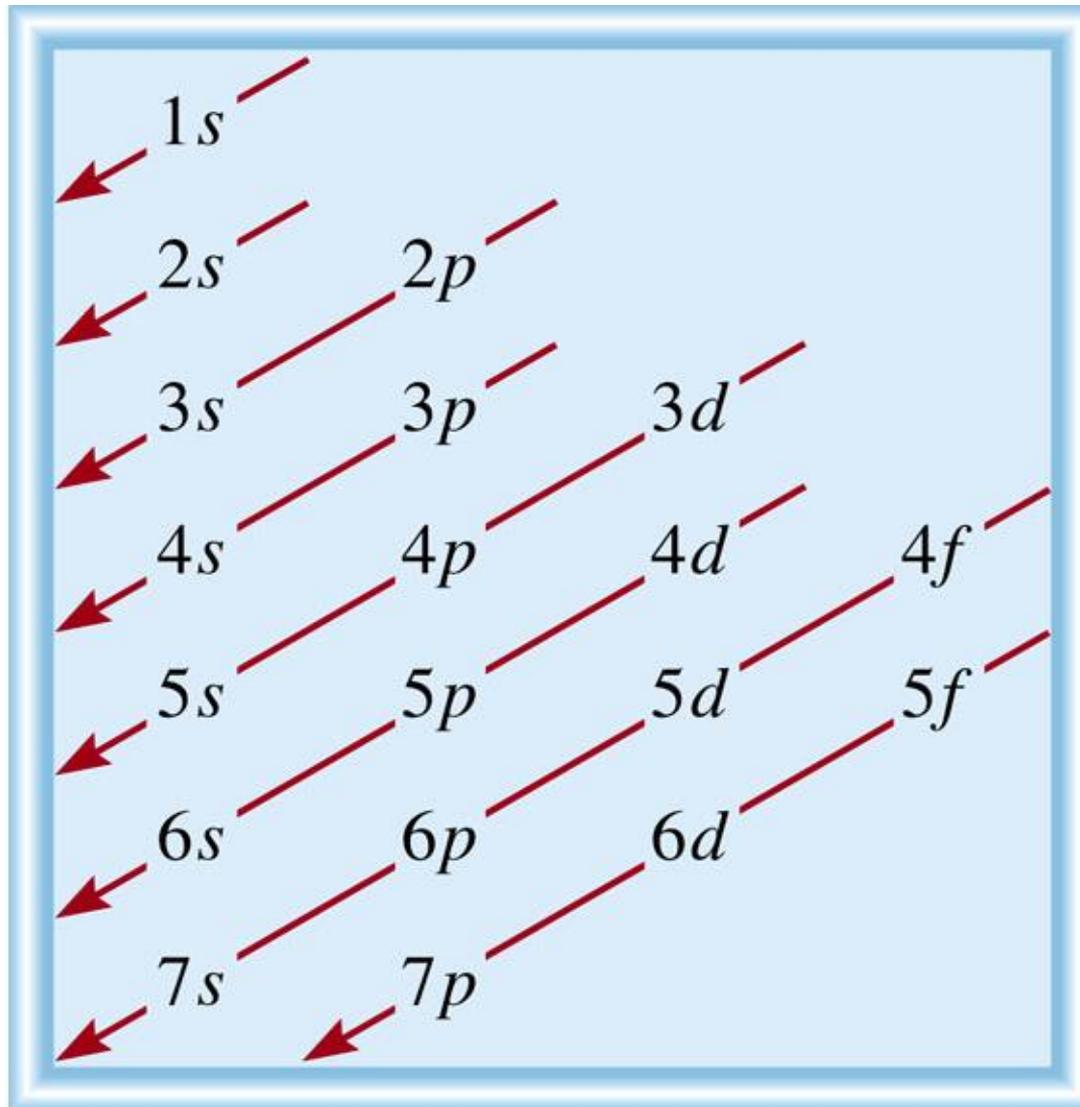
- no se debe agregar más de dos e⁻ por orbital (**Principio de Exclusión de Pauli**)
- Si en un subnivel hay más de un orbital, ubicar los e⁻ con espines paralelos en orbitales diferentes (**regla de Hund**)



Según la **Regla de Hund**, los electrones se colocan en los subniveles de manera tal que el mayor número de espines resulten paralelos. Esto proporciona la configuración más **estable** del átomo.

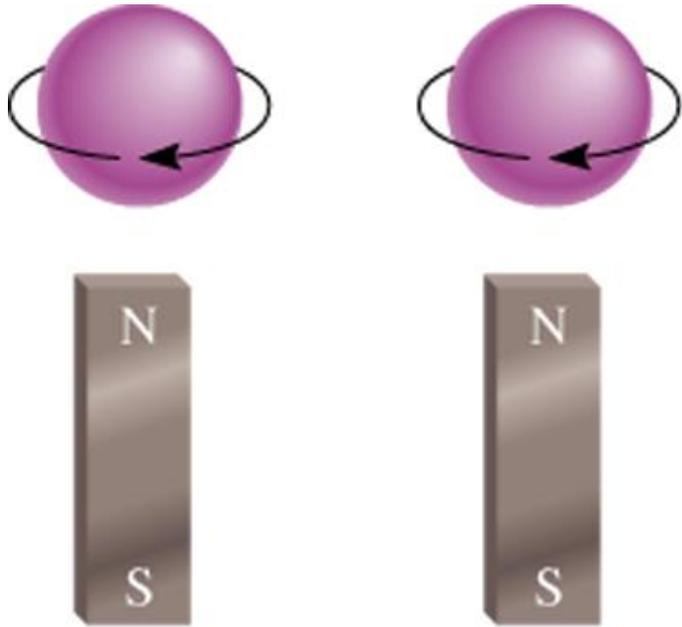


El orden que se debe seguir para llenar los orbitales



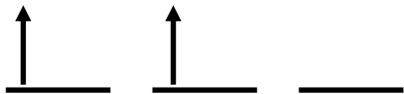
Para los distintos orbitales la energía resulta:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s$$

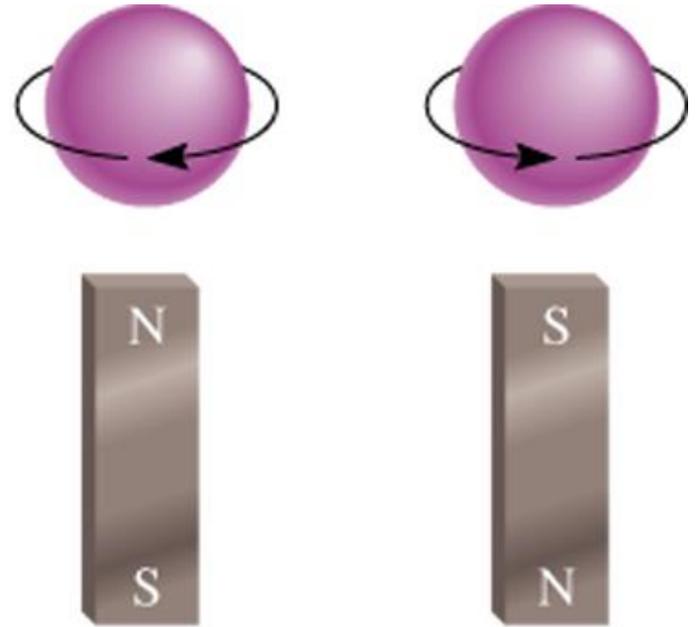


Paramagnético

Niveles semivacíos

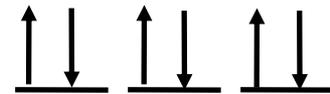


np



Diamagnético

Niveles llenos



np