

Control 2-1: Estructura atómica y configuraciones electrónicas (12/11/2009)

1.- Explica el segundo postulado de Bohr. ¿Cómo se justifica el mismo con la mecánica ondulatoria?.

Bohr introduce este postulado para explicar los espectros atómicos y obtener valores teóricos acordes con los resultados experimentales de las frecuencias de las rayas espectrales. Señala que el producto del momento lineal del electrón ($p = m \cdot v$) por la longitud de la órbita ($2\pi r$) debe ser múltiplo de la constante de Planck (h), esto es $m \cdot v \cdot 2\pi r = n \cdot h$ siendo n un número entero llamado número cuántico principal.

Con la mecánica ondulatoria el electrón tiene naturaleza dual partícula - onda y debe cumplir dos ecuaciones fundamentales:

Como partícula, su energía debe ser $E = p \cdot c$ (ecuación de Einstein)

Como onda, $E = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda$ (ecuación de Planck)

Por todo ello, la longitud de onda asociada al electrón será $\lambda = h/p$

Para que la órbita sea estable el electrón debe comportarse como onda estacionaria, es decir, la órbita debe contener exactamente un número entero de longitudes de onda. Esto es $2\pi r = n\lambda$. Sustituyendo λ por su valor h/p llegamos al postulado de Bohr.

2.- Explica el significado de los números cuánticos. ¿Cómo se introducen en el modelo atómico de Bohr-Sommerfeld - Zeeman?. ¿Cómo surgen en la teoría cuántica moderna?.

En el modelo atómico de Bohr - Sommerfeld - Zeeman los números cuánticos se van introduciendo por la necesidad de explicar los desdobles de las líneas espectrales a medida que aumenta la resolución óptica de los instrumentos y a la aplicación de campos magnéticos a las fuentes luminosas.

El primer número cuántico, principal n , se introduce en el segundo postulado de Bohr y representa el nivel de energía principal del electrón.

El segundo número cuántico, azimutal l , lo introduce Sommerfeld para explicar el desdoble de las líneas espectrales al mejorar la resolución de los instrumentos. Sommerfeld lo asocia a la cuantización de la excentricidad de las órbitas posibles.

El tercer número cuántico, magnético m_l , y el cuarto, spin m_s , se introducen para explicar los desdobles de las rayas espectrales al aplicar campos magnéticos a las fuentes luminosas; m_l se asocia a las posibles orientaciones espaciales de las órbitas y m_s al momento magnético intrínseco del electrón.

En la teoría cuántica moderna el electrón tiene naturaleza ondulatoria y su estado viene determinado por una función matemática denominada FUNCIÓN DE ONDA ψ . El estado energético del electrón nos lleva a encontrar unas ecuaciones de onda donde aparece la función de onda. La resolución de estas ecuaciones nos conduce a obtener unos valores de funciones de ondas que dependen de unos parámetros que coinciden en valores con los números cuánticos introducidos en la teoría cuántica.

3.- Responde a las siguientes cuestiones:

a) ¿Cuál es la diferencia entre órbita de Bohr y orbital?.

La órbita sería la línea seguida por el electrón en su trayectoria alrededor del núcleo. Pero el electrón tiene naturaleza ondulatoria y no puede representarse como una pequeña masa girando alrededor del núcleo. Su estado viene definido por la ecuación de onda ψ . Cuando se interacciona con el electrón manifiesta su carácter corpuscular y colapsa como partícula de masa m situada en un determinado sitio. La zona espacial alrededor del núcleo donde el electrón colapsa con alta probabilidad (99%) se denomina orbital y se representa gráficamente con la expresión ψ^2 .

b) **¿Cuántos electrones se pueden ubicar en el nivel con $n = 4$?**

Para $n = 4$, l puede tomar los valores 3, 2, 1 y 0.

Para $l = 3$, m_l puede tomar los valores -3, -2, -1, 0, 1, 2 y 3 (7 orbitales f)

Para $l = 2$ m_l puede tomar los valores -2, -1, 0, 1 y 2 (5 orbitales d)

Para $l = 1$ m_l puede tomar los valores -1, 0 y 1 (3 orbitales p)

Para $l = 0$ m_l sólo puede tomar el valor 0 (1 orbital s)

Por tanto en el nivel 4 hay 16 orbitales y en cada uno de ellos caben dos electrones (con spines contrarios $+1/2$ y $-1/2$) por lo que en $n = 4$ caben 32 electrones.

c) **¿Es posible el estado definido por los números cuánticos (3, 0, -1, 1/2)?**

Para $l = 0$ m_l sólo puede tomar el valor 0 por lo que no es un conjunto válido de números cuánticos.

d) **Enuncia el principio de exclusión de Pauli. ¿Cuál es su consecuencia?**

El electrón es una especie de partículas en las que se cumple que cuando se agrupan dos o más de ellos lo hacen en estados cuánticos diferentes, es decir, con conjuntos de números cuánticos diferentes (forman parte de una familia de partículas llamadas FERMIONES en oposición a otras partículas que sí pueden agruparse en el mismo estado cuántico llamadas BOSONES, uno de los cuales es el fotón).

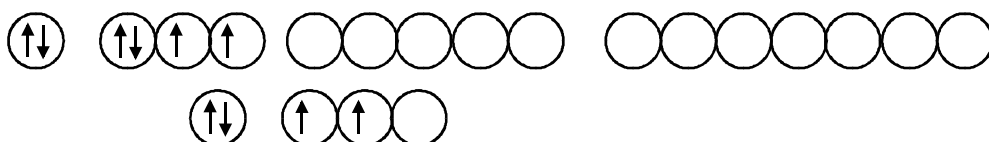
Pauli enunció este principio de exclusión para asignar unas configuraciones electrónicas a los átomos que explicaban perfectamente la estructura de la Tabla Periódica. En un orbital atómico sólo caben dos electrones y no más, por lo que en átomos multielectrónicos éstos van rellenando orbitales en orden creciente de energía. Cuando un subnivel se llena se pasa a otro y así se obtienen unas determinadas estructuras electrónicas.

e) **¿Es posible la configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^4 3s^1$? En caso afirmativo, señala tres posibles especies químicas compatibles con la misma.**

Es una configuración posible (en cada nivel n existen los subniveles que se reflejan). Lo que ocurre es que todos los electrones no ocupan subniveles de mínima energía: el electrón en $3s$ podría ubicarse en el subnivel $2p$. En otras palabras, se trata de una configuración electrónica excitada (no en estado fundamental). Esta configuración es compatible con las especies químicas que posean 9 electrones: el átomo de fluor (F) o los iones O^{1-} o N^{2-} .

f) **Representa los diagramas de Hund de las siguientes configuraciones:**

a. $4s^2 4p^4$ b. $2s^2 2p^2$



4.- **Determina la longitud de onda del fotón correspondiente a la transición de un electrón del nivel 3 al nivel 1 en el átomo de hidrógeno.**

DATOS:

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{s} \quad e^- = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad E_n = -13,64 \cdot Z^2 / n^2 \text{ (eV)} \quad c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

Para el átomo de hidrógeno $Z = 1$

$$\text{Para } n = 1 \quad E_1 = -13,64 \text{ eV}$$

$$\text{Para } n = 3 \quad E_3 = -13,64/9 = -1,516 \text{ eV}$$

El tránsito del electrón del nivel 3 al nivel 1 supone una diferencia energética de:

$$\Delta E = E_1 - E_3 = -13,64 - (-1,516) = -12,12 \text{ eV} \quad \text{El signo negativo indica proceso exotérmico, es decir, en este tránsito se emite un fotón con energía de 12,12 eV.}$$

Expresando los valores en unidades del S.I.

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-27} \text{ g} \cdot \frac{\text{cm}^2}{\text{s}^2} \cdot \text{s} \times \frac{1 \text{ m}^2}{10^4 \text{ cm}^2} \times \frac{1 \text{ kg}}{10^3 \text{ g}} = 6,6252 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$12,12 \text{ eV} \times \frac{1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}}{1 \text{ e}} = 1,942 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

Y teniendo en cuenta las expresiones $\Delta E = h \cdot \nu$ $\lambda \cdot \nu = c$

$$\nu = \frac{1,942 \cdot 10^{-18}}{6,6252 \cdot 10^{-34}} = 2,931 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{2,998 \cdot 10^8}{2,931 \cdot 10^{15}} = 1,023 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 1023 \text{ \AA}$$

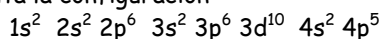
5.- Escribe las configuraciones electrónicas de los átomos o iones siguientes:

Br Si Ag⁺ (Z = 47) S²⁻ Ge⁴⁺

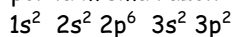
Se trata de configuraciones electrónicas en estado fundamental. Por ello sólo hay que rellenar el diagrama de llenado de los niveles y subniveles de acuerdo a los electrones disponibles. Para átomos y aniones el orden energético viene dado por el diagrama de la derecha (3d resulta más energético que 4s debido a las repulsiones que efectúan 3s y 3p sobre 3d).

Para cationes esa repulsión queda compensada con el exceso de carga positiva del núcleo y el orden de llenado es horizontal (3d se llena antes que 4s).

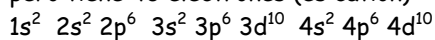
Br tiene Z = 35 y al ser átomo neutro tiene 35 electrones que colocados en orden energético resulta la configuración



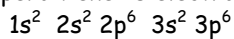
Si tiene Z = 14 y por la misma razón 14 electrones que ubicar.



Ag⁺ tiene Z = 47 pero tiene 46 electrones (es catión)



S²⁻ tiene Z = 16 pero tiene 18 electrones que ubicar



Ge⁴⁺ tiene Z = 32 pero tiene 28 electrones (es catión)

