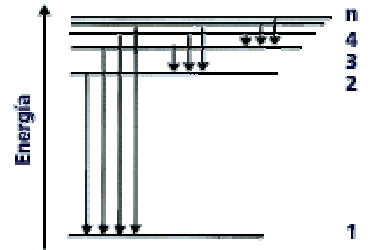
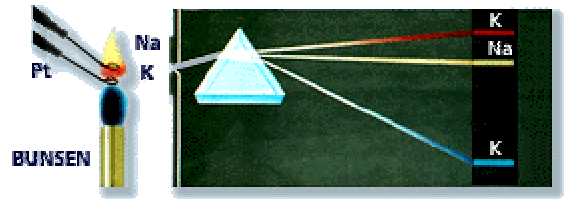
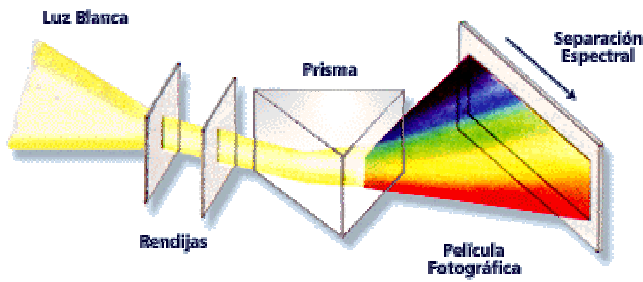


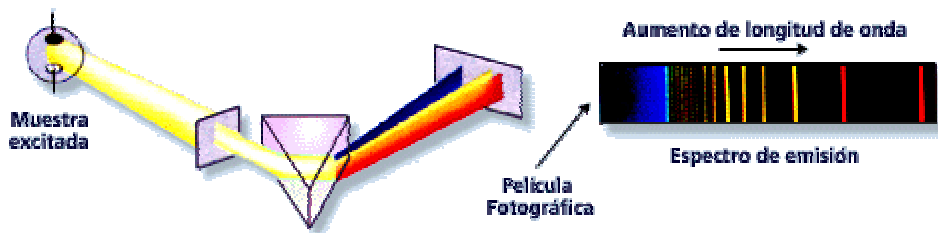
**LÍNEAS DE EMISIÓN EXCITADAS POR LA LLAMA DE UN MECHERO BUNSEN**



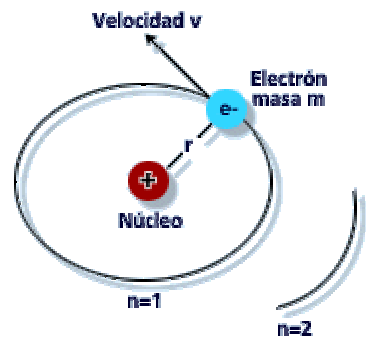
**SEPARACION DE LAS DIFERENTES LONGITUDES DE ONDA**



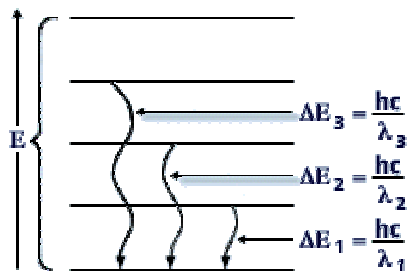
**ESPECTRO DE EMISION DE LINEA DE UNA MUESTRA**



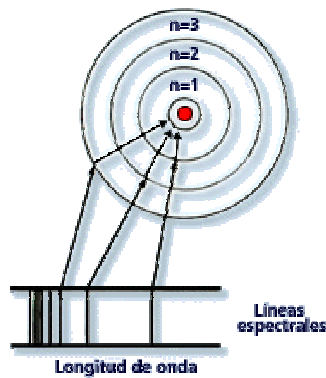
**HIDROGENO**



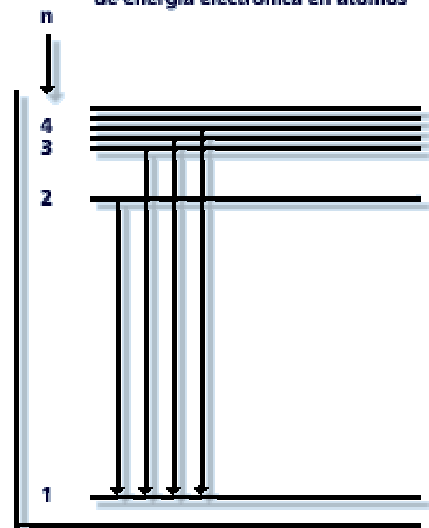
Niveles de energía cuantizada y longitud de onda de luz emitida



Líneas espectrales equivalen a traslados de electrones entre distintas orbitas



**Modelo de Bohr para los niveles de energía electrónica en átomos**

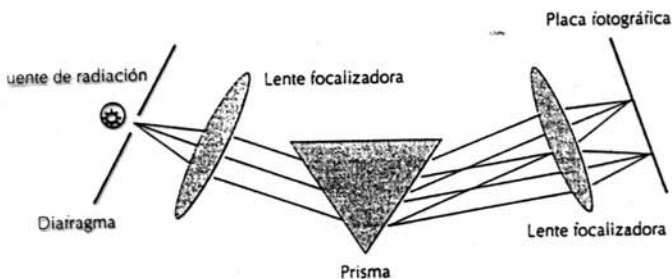


# TEMA 1: ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS

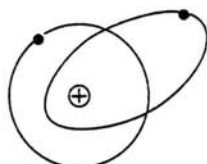
- 1.1 Los átomos
- 1.2 Propiedades espectrales de los átomos de hidrógeno
- 1.3 Modelo atómico de Bohr - Sommerfeld
- 1.4 Mecánica ondulatoria
  - 1.4.1 Cuantización de la Energía
  - 1.4.2 Interpretación de Born
- 1.5 Orbitales atómicos
  - 1.5.1 Niveles de energía hidrogenoides
  - 1.5.2 Números cuánticos atómicos
  - 1.5.3 Momento angular orbital – Espín del electrón
  - 1.5.4 Formas radiales de los orbitales hidrogenoides
  - 1.5.5 Función de distribución radial
  - 1.5.6 Formas angulares de los orbitales atómicos.

**Tabla 1.1:** Partículas atómicas fundamentales

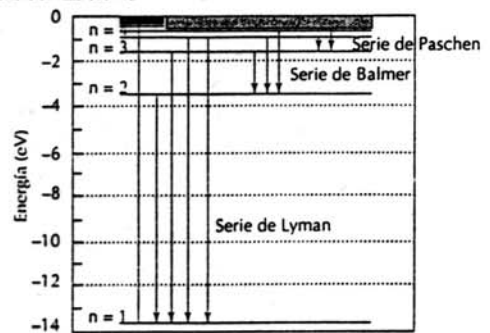
	Masa (kg)	Carga (C)
<b>Protón</b>	$1.6725 \cdot 10^{-27}$	$1.60 \cdot 10^{-19}$
<b>Neutrón</b>	$1.6725 \cdot 10^{-27}$	
<b>Electrón</b>	$9.1091 \cdot 10^{-31}$	$-1.60 \cdot 10^{-19}$



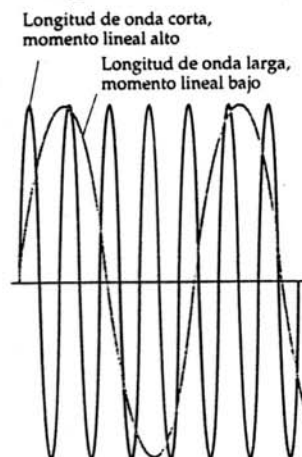
**Figura 1.1:** Esquema de un espectrofotómetro.



**Figura 1.3:** Modelo planetario del átomo Bohr - Rutherford.



**Figura 1.2:** Interpretación esquemática de las series espectrales del átomo de hidrógeno.



**Figura 1.4:** Función de onda de una partícula moviéndose libremente.

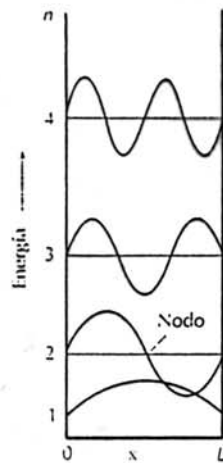


Figura 1.5: Energías (líneas horizontales) de los cuatro niveles inferiores de una partícula en una caja. Las funciones de onda se han superpuesto en los niveles.

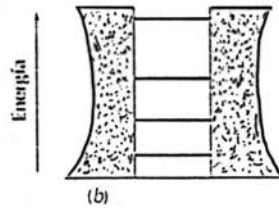
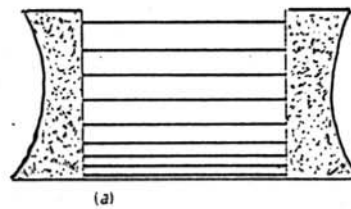


Figura 1.6: Separaciones entre los niveles de energía de una partícula en un pozo cuadrado.

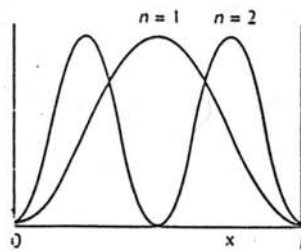


Figura 1.7: Densidad de probabilidad de una partícula en una caja con  $n=1$  y  $2$ .

- **Número Cuántico Principal  $n$**  que puede adquirir los valores  $n=1,2,3,\dots$ . Este número cuántico se relaciona directamente con el tamaño y la energía del orbital.
- **Número Cuántico azimutal  $l$** , adquiere los valores enteros desde 0 hasta  $n-1$ , para cada valor de  $n$ . Este número  $l$  se relaciona directamente con la **forma** que adquiere ese orbital en el espacio.

Números Cuánticos Azimutales y sus correspondientes Orbitales Atómicos					
Valor de $l$	0	1	2	3	4
Letra usada	s	p	d	f	g

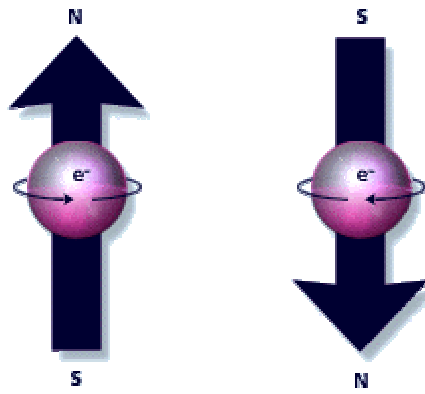
- **Número Cuántico Magnético  $m_l$** , adquiere "todos" los valores comprendidos entre  $-l$  y  $+l$ , y se relaciona con la **orientación** del orbital en el espacio, relativo a los otros orbitales en el átomo.

En resumen, estos números cuánticos pueden llegar a tomar valores como se muestra a continuación:

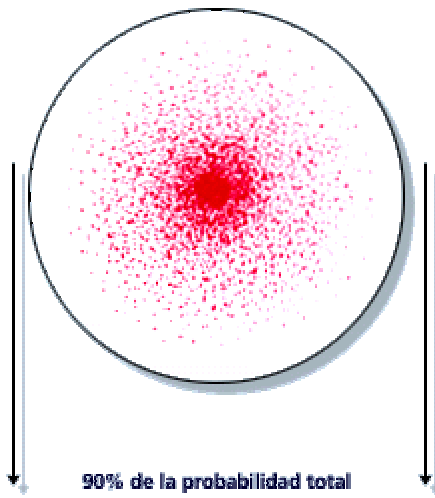
$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$
$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots (n-1)$ para cada $n$
$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$

Números Cuánticos de los primeros cuatro niveles de Orbitales en el átomo H				
$n$	$l$	Designación orbital	$m_l$	Nº de orbitales
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
	1	2p	-1,0,+1	3
3	0	3s	0	1
	1	3p	-1,0,+1	3
	2	3d	-2,-1,0,+1,+2	5
4	0	4s	0	1
	1	4p	-1,0,+1	3
	2	4d	-2,-1,0,+1,+2	5
	3	4f	-3,-2,-1,0,+1,+2,+3	7

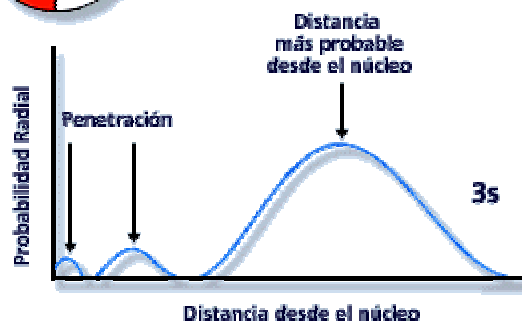
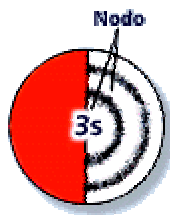
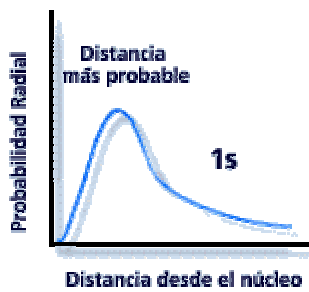
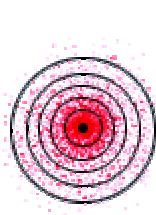
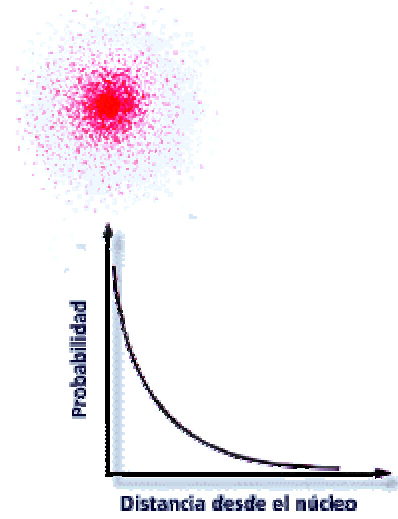
### El Spin del electrón

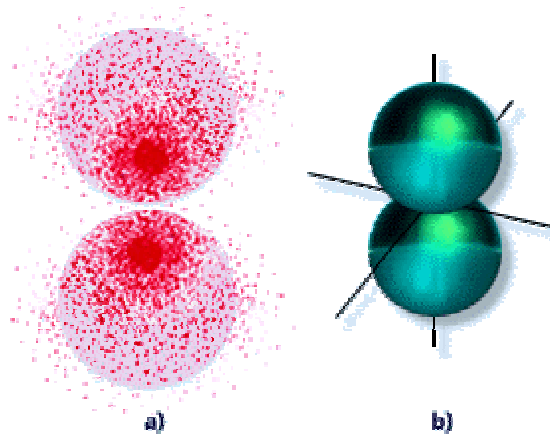


Densidad de probabilidad de presencia de un electrón en el espacio atómico

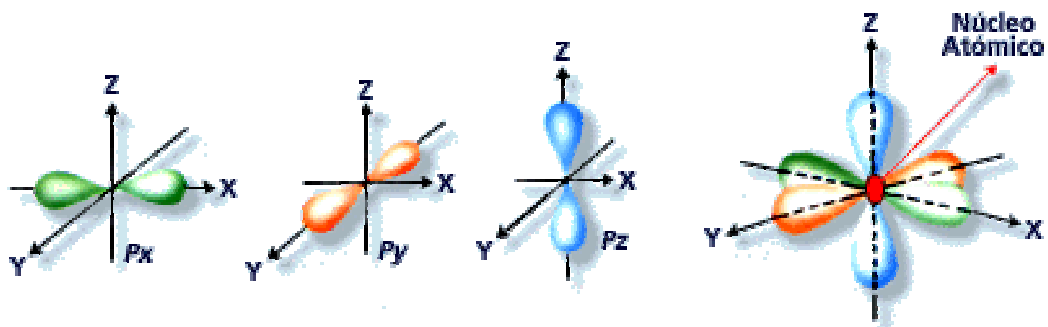


Probabilidad de ubicar un electrón dentro del átomo de Bohr

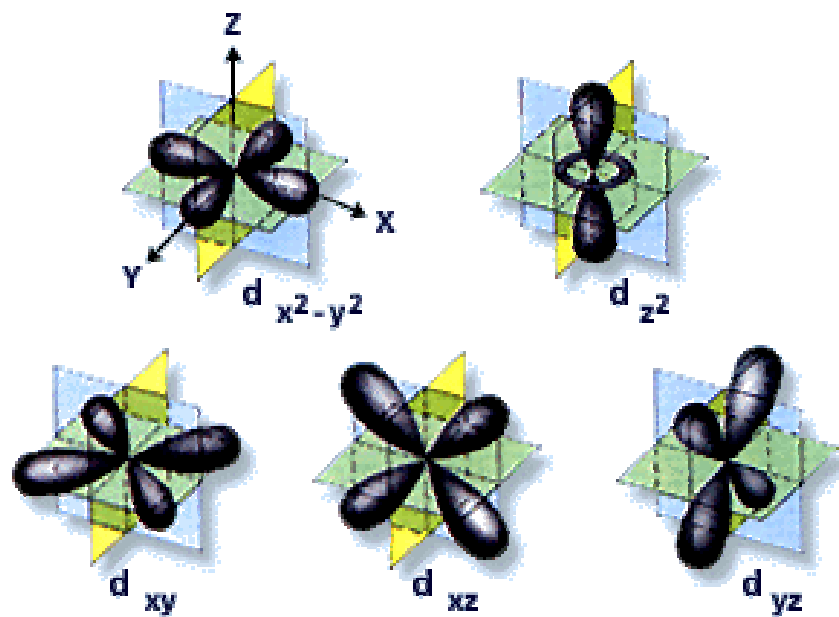


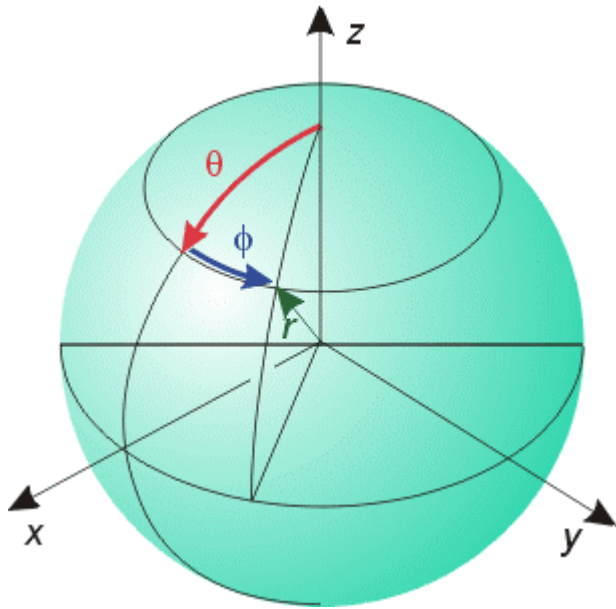


**Carácter direccional de los orbitales atómicos 2p**



**Caracter direccional de los orbitales atómicos 3d**



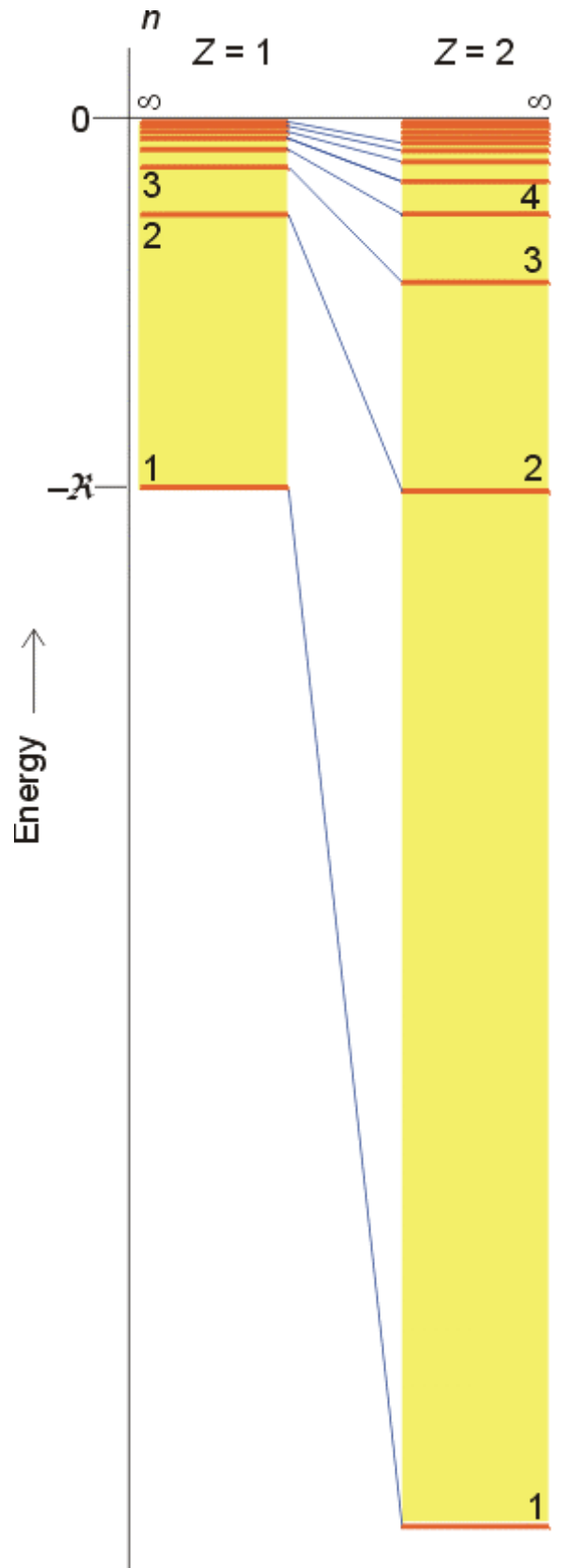


$$x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi$$

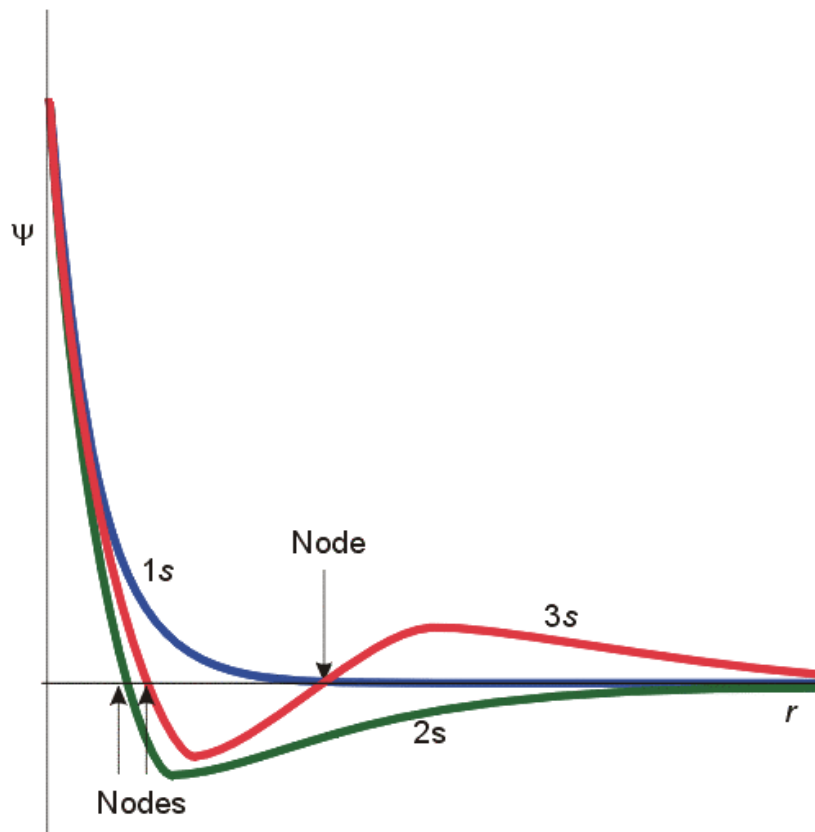
$$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi$$

$$z = r \cdot \cos\theta$$

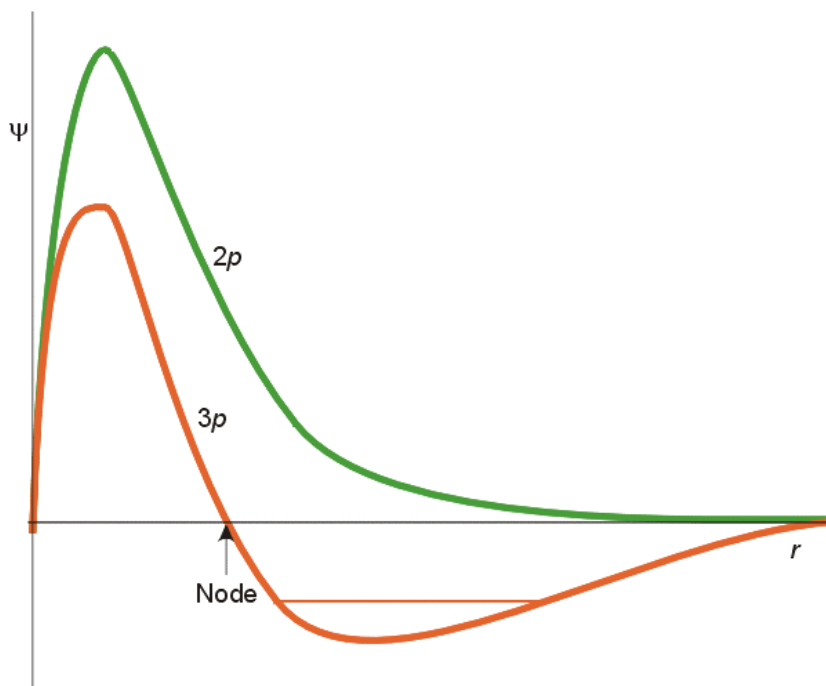
Coordenadas polares esféricas:  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$ .



Niveles de energía cuantizados de un átomo de H ( $Z = 1$ ) y un  $\text{He}^+$  ( $Z = 2$ )

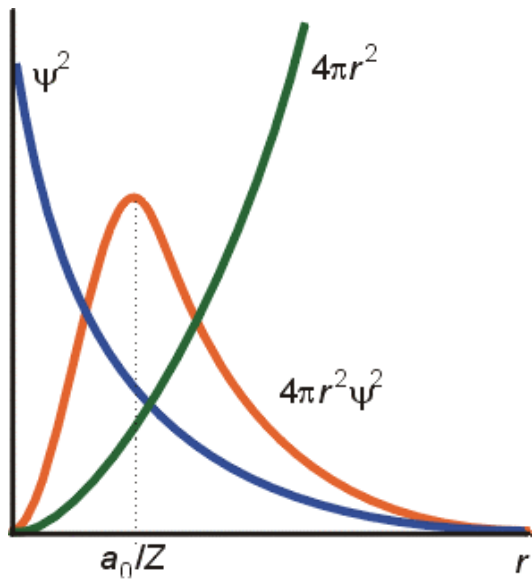


Amplitudes de los orbitales 1s, 2s y 3s del hidrógeno en función de la distancia al núcleo.

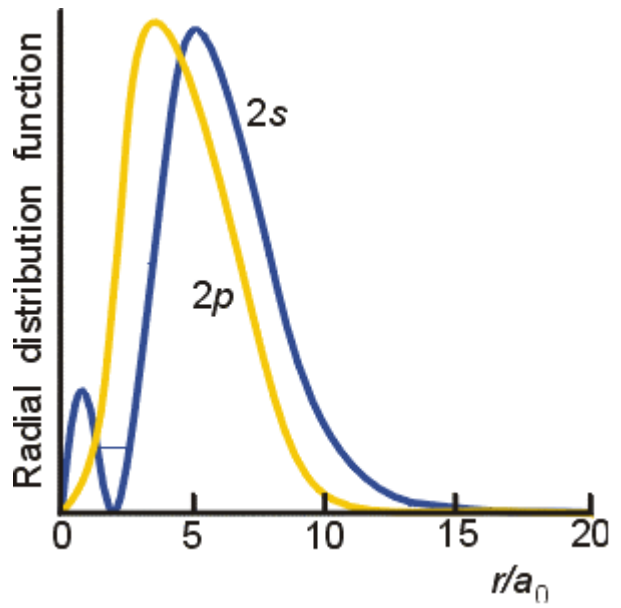


Amplitudes de los orbitales 2p y 3p del hidrógeno en función de la distancia al núcleo.





Función de distribución radial de un orbital 1s hidrogenoide.



Función de distribución radial de los orbitales 2s y 2p hidrogenoides.

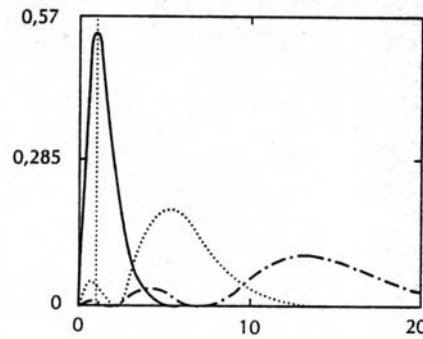


Figura 1.13: Funciones de distribución radial  $4\pi r^2 \Psi_{ns}^2$ : 1s(-), 2s(...) y 3s(-·-·-).

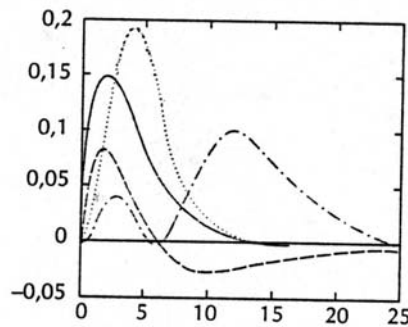
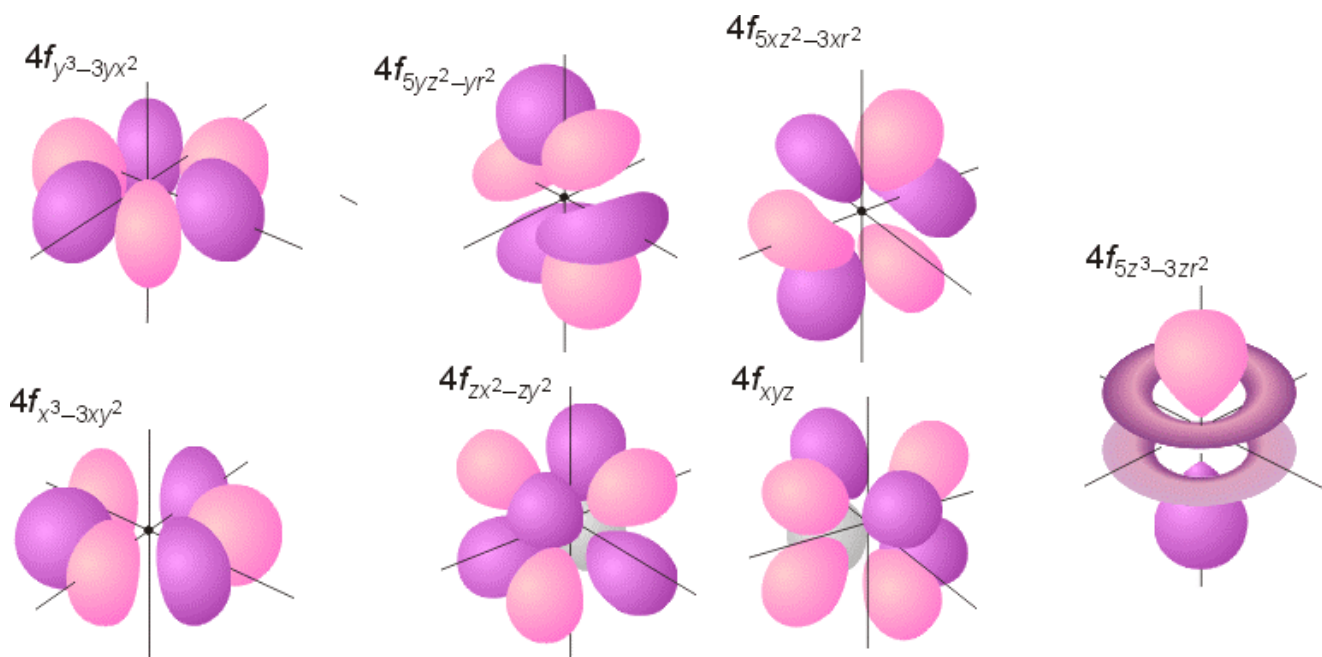


Figura 1.14: Funciones de distribución radial  $\Psi_{2p}$  (-),  $\Psi_{3p}$  (---),  $r^2\Psi_{2p}$  (...) y  $r^2\Psi_{3p}$  (-·-·-).



Carácter direccional de los orbitales atómicos  $4f$ .

Tabla 1.1 **Funciones de onda hidrogenoides:  $\psi = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$**

$n$	$l$	$m_l$	$R(r)$	$Y(\theta, \varphi)$	$\psi$
1	0	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	1s
2	0	0	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	2s
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$	$2p_0$
2	1	+1	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{-i\varphi}$	$2p_{+1}$
2	1	-1	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{+i\varphi}$	$2p_{-1}$

Tabla 1.2 **Las tres funciones  $2p$  reales.**

$R(r)$	$Y(\theta, \varphi)$	$\psi$
$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$	$2p_z$
$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \varphi$	$2p_x$
$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \varphi$	$2p_y$