

Tema 2: Estructura electrónica del átomo

Juan J. Borrás Almenar
Departamento de Química
Inorgánica

Asignatura:

12865–Estructura y Enlace de la Materia
Licenciatura de Química

Cuadro 1: Lista de algunas constantes y factores de conversión

Constante	Símbolo	Valor aproximado
Velocidad de la luz en el vacío	c	$3,00 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Masa del electrón	m_e	$9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Masa del protón	m_p	$1,673 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Masa del neutrón	m_n	$1,675 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Constante de Planck	h	$6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
Constante de Rydberg	R_H	$13,605 \text{ eV}; 2,1789 \times 10^{-18} \text{ J};$ $3,289 \times 10^{15} \text{ Hz}; 109677 \text{ cm}^{-1}$

$1\text{eV} = 1,6022 \times 10^{-19} \text{ J}$
 $1\text{nm} = 1,0 \times 10^{-9} \text{ m}$

1. Relación entre frecuencia y longitud de onda de la REM

EJERCICIO 1. La mayor parte de la luz procedente de una lámpara de sodio tiene una longitud de onda de 589 nm. ¿Cuál es la frecuencia de esta radiación? ¿Cuál es la energía asociada a esta radiación?

EJERCICIO 2. La luz que emiten los diodos rojos, LED (diodos emisores de luz) habituales en muchos circuitos electrónicos tiene una longitud de onda de 690 nm. ¿Cuál es la frecuencia de esta luz?

EJERCICIO 3. Una emisora de radio FM emite una frecuencia de 91,5 megahercios (MHz). ¿Cuál es la longitud de onda de estas ondas de radio?

EJERCICIO 4. El espectro del magnesio tiene una línea a 266,8 nm. ¿Cuál o cuáles de las siguientes proposiciones son correctas en relación a esta radiación?

- Su frecuencia es más alta que la correspondiente a la radiación con longitud de onda 402 nm.
- Es visible al ojo humano.
- Su velocidad en el vacío es mayor que la luz roja de longitud de onda 652 nm.
- Su longitud de onda es más larga que la de los rayos X.

EJERCICIO 5. La línea más intensa del espectro del cerio está a 418,7 nm.

- Determina la frecuencia de la radiación que produce esta línea
- En qué región del espectro electromagnético aparece esta línea?
- ¿Es visible al ojo? ¿En caso afirmativo, ¿qué color tiene? En caso negativo, ¿tiene una energía más alta o más baja que la luz visible?

2. Ecuación de Planck para el cálculo de la energía de los fotones. Teoría cuántica

EJERCICIO 6. La radiación de longitud de onda 242,4 nm es la longitud de onda más larga que produce la fotodisociación del O_2 , ¿cuál es la energía de (a) un fotón y (b) un mol de fotones de esta radiación?

EJERCICIO 7. La acción protectora del ozono en la atmósfera se debe a la absorción de radiación UV por el ozono en el intervalo 230–290 nm de longitud de onda. ¿Cuál es la energía asociada con la radiación, expresada en kilojulios por mol, en este intervalo de longitudes de onda?

EJERCICIO 8. La clorofila absorbe la luz con energías de $3,056 \times 10^{-19} \text{ J}$ y $4,414 \times 10^{-19} \text{ J}$. ¿Qué color y frecuencia corresponden a estas absorciones?

EJERCICIO 9. Una determinada radiación tiene una longitud de onda de 474 nm. ¿Cuál es la energía, expresada en julios de a) un fotón, b) un mol de fotones de esta radiación?

EJERCICIO 10. ¿Cuál es la longitud de onda, en nanómetros, de la luz con un contenido en energía de 1799 kJ/mol? ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentra esta luz?

EJERCICIO 11. Las lámparas de vapor de sodio a alta presión se utilizan en el alumbrado de las calles. Las dos líneas más intensas en espectro del sodio están a 589,00 y 589,59 nm. ¿Cuál es la diferencia en energía por fotón entre las radiaciones correspondientes a estas dos líneas?

3. Dualidad onda-partícula

EJERCICIO 12. Calcula la longitud de onda asociada a un electrón que se desplaza con una velocidad de $0,01c$.

EJERCICIO 13. Calcula la longitud de onda asociada a un coche de 1000 kg de masa que se desplaza a una velocidad de 120 km hr^{-1} .

EJERCICIO 14. ¿Cuál es la longitud de onda asociada a los electrones que se mueven a una velocidad que es la décima parte de la velocidad de la luz?

EJERCICIO 15. Suponiendo que Superman tuviera una masa de 91 kg, ¿cuál es la longitud de onda asociada con él si se mueve a una velocidad igual a la quinta parte de la velocidad de la luz?

EJERCICIO 16. ¿A qué velocidad debe acelerarse un haz de protones para poseer una longitud de onda de 10,0 pm?

EJERCICIO 17. ¿Cuál debe ser la velocidad, en metros por segundo, de un haz de electrones si poseen una longitud de onda de De Broglie de $1 \mu\text{m}$?

4. Significado de la cuantización de la energía

EJERCICIO 18. ¿Es probable que exista, para el átomo de hidrógeno, el nivel de energía, $E_n = -1,00 \times 10^{-20} \text{ J}$?

EJERCICIO 19. ¿Existe un nivel de energía para el átomo de hidrógeno $E_n = -2,69 \times 10^{-20} \text{ J}$?

EJERCICIO 20. ¿Es probable que una de las órbitas del electrón en el modelo de Bohr tenga un radio de 1,00 nm?

5. Espectros atómicos

EJERCICIO 21. Explica la diferencia entre un espectro de emisión y otro de absorción

EJERCICIO 22. Determina la longitud de onda de la línea de la serie de Balmer del hidrógeno correspondiente a la transición desde $n = 5$ a $n = 2$

EJERCICIO 23. Calcula las longitudes de onda, en nanómetros, de las cuatro primeras líneas de la serie de Balmer del espectro del hidrógeno, comenzando con la componente de longitud de onda más larga.

EJERCICIO 24. En el espectro del hidrógeno se detecta una línea a 1880 nm. ¿Es una línea de la serie de Balmer? Justifícalo.

EJERCICIO 25. ¿Qué valor de n corresponde a la línea de la serie de Balmer a 389 nm?

EJERCICIO 26. Determina la longitud de onda de la luz absorbida en una transición electrónica de $n = 2$ a $n = 4$ en un átomo de hidrógeno.

EJERCICIO 27. Calcula la energía necesaria (en kJ mol^{-1}) para ionizar un mol de átomos de hidrógeno.

EJERCICIO 28. La serie de líneas de Lyman del átomo de hidrógeno corresponde a las transiciones desde $n=2,3,4,\dots\infty$ hasta $n=1$. Sabiendo que el límite de la serie tiende a 109678 cm^{-1} , calcula la energía de ionización para un mol de átomos de hidrógeno (en kJ mol^{-1}).

EJERCICIO 29. ¿Por qué la transición $2p \rightarrow 2s$ no genera ninguna línea espectral en el espectro de emisión del hidrógeno?

EJERCICIO 30. ¿Identifica su pertenencia a las series de Balmer o Lyman de cada una de las siguientes transiciones $n_i \rightarrow n_f$? a) $2 \rightarrow 1$, b) $3 \rightarrow 2$, c) $5 \rightarrow 2$, d) $4 \rightarrow 1$.

EJERCICIO 31. Las frecuencias de ciertas líneas consecutivas en la serie de Lyman son 2,466, 2,923, 3,083, 3,157 y $3,197 \times 10^{15} \text{ Hz}$. Utiliza estos valores para dibujar esquemáticamente el aspecto de esta parte del espectro de emisión. Asigna cada una de las líneas del espectro a una transición en particular.

EJERCICIO 32. ¿Cuál es la energía de la transición correspondiente a la línea espectral de frecuencia $3,197 \times 10^{15} \text{ Hz}$

EJERCICIO 33. Utilizando las frecuencias de la cuestión 31, dibuja un gráfico que permita estimar el valor de la constante de Rydberg.

EJERCICIO 34. A partir de la ecuación $\nu = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$, determina las frecuencias de las siguientes transiciones $n_i \rightarrow n_f$ que integran la serie Paschen del espectro atómico del hidrógeno: 1. $7 \rightarrow 3$, 2. $6 \rightarrow 3$, 3. $5 \rightarrow 3$, 4. $4 \rightarrow 3$. Determina la energía de cada transición.

EJERCICIO 35. La serie de Lyman del espectro del hidrógeno puede representarse por la ecuación

$$\nu = 3,2881 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

- Calcule las líneas de esta serie de longitudes de onda máxima y mínima, en nanómetros
- ¿Cuál es el valor de n que corresponde a la línea espectral a 95,0 nm?
- ¿Hay alguna línea a 108,5 nm? Justifíquelo

6. Modelo de Bohr

EJERCICIO 36. Cuando se excita un electrón desde la primera hasta la tercera órbita de Bohr, calcula el aumento en: a) la distancia al núcleo, b) la energía.

EJERCICIO 37. ¿Cuáles son: a) la frecuencia, en s^{-1} ; y b) la longitud de onda, en nanómetros, de la luz emitida cuando el electrón de un átomo de hidrógeno cae desde el nivel $n = 7$ a $n = 4$; c) ¿en qué región del espectro electromagnético se encuentra esta luz?

EJERCICIO 38. Determine para el átomo de hidrógeno

- a) el radio de la órbita $n = 4$
- b) si existe una órbita con un radio de 400 nm
- c) la energía del nivel correspondiente a $n = 8$
- d) si existe un nivel de energía a $-25,0010^{-17}$ J.

EJERCICIO 39. ¿Qué transición electrónica en el átomo de hidrógeno, empezando desde la órbita $n = 7$, producirá luz infrarroja de longitud de onda 2170 nm?

EJERCICIO 40. Determina la energía cinética del electrón ionizado de un ion Li^{+2} en su estado fundamental utilizando un fotón de frecuencia $5,000 \times 10^{+2} \text{ s}^{-1}$

EJERCICIO 41. Determina la longitud de onda de la luz emitida en una transición electrónica desde $n = 5$ a $n = 3$ en un ion Be^{+3} .

EJERCICIO 42. La frecuencia de transición de $n = 3$ a $n = 2$ para un átomo hidrogenoide desconocido es 16 veces mayor que la del átomo de hidrógeno. ¿Cuál es la identidad del ion?

7. Principio de incertidumbre

EJERCICIO 43. Si la posición de un electrón queda determinada con una precisión de 0,01 Å, calcula la indeterminación en la medida simultánea de su velocidad.

EJERCICIO 44. Un automóvil de 1000 kg de masa se mueve rectilíneamente. Si mediante fotografías sucesivas es posible determinar su posición con una precisión de la longitud de onda de la luz utilizada ($\lambda=5000\text{Å}$), calcula la indeterminación en la medida simultánea de su velocidad

EJERCICIO 45. Puede demostrarse que un electrón sometido a 12 eV tiene una velocidad de $2,05 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}$. Suponiendo que la precisión de este valor es de 1,5%, ¿con qué precisión podemos medir la posición del electrón de forma simultánea con la velocidad?

EJERCICIO 46. Superman tiene una masa de 91 kg y se mueve con una velocidad igual a una quinta parte de la velocidad de la luz. Si esta velocidad se conoce con una precisión de 1,5%, ¿cuál es la incertidumbre en su posición?

EJERCICIO 47. ¿Cuál es la incertidumbre en la velocidad de un haz de protones cuya posición se conoce con la incertidumbre de 24 nm ?

8. Números cuánticos y orbitales atómicos

EJERCICIO 48. De entre las siguientes afirmaciones, selecciona la respuesta correcta y explica tu razonamiento. Un electrón que tiene $n = 3$ y $m_\ell = 0$: a) debe tener $m_s = +\frac{1}{2}$, b) debe tener $\ell = 1$, c) puede tener $\ell = 0, 1$ o 2 d) debe tener $\ell = 2$

EJERCICIO 49. Indique un valor aceptable para cada uno de los números cuánticos que faltan:

- a) $n = 3, \ell = \quad, m_\ell = 2, m_s = +\frac{1}{2}$,
- b) $n = \quad, \ell = 2, m_\ell = -1, m_s = -\frac{1}{2}$,
- c) $n = 4, \ell = 2, m_\ell = 0, m_s = \quad$,
- d) $n = \quad, \ell = 0, m_\ell = \quad, m_s = \quad$,

EJERCICIO 50. ¿Qué tipo de orbitales (es decir $3s, 4p \dots$) designan los siguientes grupos de números cuánticos?

- a) $n = 5, \ell = 1, m_\ell = 0$,

b) $n = 4, \ell = 2, m_\ell = -2,$

c) $n = 4, \ell = 0, m_\ell = 0,$

EJERCICIO 51. ¿Cuál o cuáles de las siguientes proposiciones son correctas para un electrón con $n = 4$ y $m_\ell = -2$ Justifícalo

a) El electrón está en la cuarta capa principal

b) El electrón puede estar en un orbital d c) El electrón puede estar en un orbital p d) El electrón debe tener $m_s = +\frac{1}{2}$

EJERCICIO 52. En relación con los electrones distribuidos en capas, subcapas y orbitales de un átomo, ¿cuántos electrones pueden tener en

a) $n = 3, \ell = 2, m_\ell = 0,$ y $m_s = +\frac{1}{2}$?

b) $n = 3, \ell = 2$ y $m_\ell = 0$?

c) $n = 3$ y $\ell = 2$?

d) $n = 3$?

e) $n = 3, \ell = 2$ y $m_s = +\frac{1}{2}$?

EJERCICIO 53. En relación al concepto de subcapas y orbitales,

a) ¿Cuántas subcapas se encuentran en el nivel $n = 4$ b) ¿Cuáles son los nombres de las subcapas en el nivel $n = 3$ c) ¿Cuántos orbitales tienen los valores $n = 4, \ell = 3$?d) ¿Cuántos orbitales tienen los valores $n = 4, \ell = 3$ y $m_\ell = -2$?e) ¿Cuál es el número total de orbitales en el nivel $n = 4$?

EJERCICIO 54. ¿Puede un orbital tener los siguientes números cuánticos, $n = 2, \ell = 2$ y $m_\ell = 2$?

EJERCICIO 55. ¿Puede tener un orbital los números cuánticos $n = 3, \ell = 0$ y $m_\ell = 0$

EJERCICIO 56. Para un orbital con $n = 3,$ y $m_\ell = -1,$ ¿cuáles son los posibles valores de ℓ ?

EJERCICIO 57. ¿Cual es la combinación de números cuánticos de un electrón $5p$? ¿Y para uno $3d$?

EJERCICIO 58. ¿Cuántos orbitales hay en un nivel con $n = 4$?

EJERCICIO 59. ¿Qué conjuntos de números cuánticos describen los orbitales atómicos $2p$?

EJERCICIO 60. ¿Qué orbital atómico tiene el conjunto de números cuánticos $n = 3, \ell = 0, m_\ell = 0$? ¿Cómo distinguirías entre los dos electrones que ocupan este orbital?

EJERCICIO 61. Escribe los orbitales correspondientes a los siguientes conjuntos de números cuánticos: a) 2, 1, -1. b) 4, 3, 2. c) 4, 2, -2.

EJERCICIO 62. ¿Qué valores puede tomar el número cuántico m_ℓ para un electrón $4d$? ¿Y para uno $3s$?

EJERCICIO 63. De los siguientes conjuntos de números cuánticos para el electrón, indica los que sean falsos justificando la respuesta: a) 2, 1, 0, -1/2; b) 2, 1, -1, 3/2; c) 2, 0, 0, 1/2; d) 2, 2, 1, 1/2; e) 5, 4, 5, 1/2

EJERCICIO 64. Escribe la notación del orbital correspondiente a los números cuánticos $n = 4, \ell = 2$ y $m_\ell = 0$

EJERCICIO 65. Escribe la notación de un orbital que corresponde a los números cuánticos: $n = 3, \ell = 1$ y $m_\ell = 1$

EJERCICIO 66. Escribe todas las combinaciones de números cuánticos que definan los orbitales del átomo de hidrógeno con la misma energía que el orbital $3s$

EJERCICIO 67. ¿Qué conjuntos de orbitales cuánticos describen los cinco orbitales $3d$?

EJERCICIO 68. ¿A qué tipos de orbitales corresponden los siguientes valores de ℓ : a) 1; b) 3; c) 2; d) 0?

EJERCICIO 69. ¿Cuántos orbitales atómicos hay en un subnivel $5f$?

EJERCICIO 70. ¿Cuántos subniveles contienen los niveles con números cuánticos principales: a) 1; b) 2; c) 3; d) 4? ?

EJERCICIO 71. a) $1p$; b) $2s$; c) $3f$; d) $5s$; e) $2d$?

EJERCICIO 72. Escribe los conjuntos de números cuánticos que describan todos los electrones que ocupan completamente los orbitales atómicos $4p$

9. Funciones de onda y orbitales atómicos

EJERCICIO 73. ¿Cual es la probabilidad de encontrar un electrón $2p_x$ en los puntos del plano yz ?

EJERCICIO 74. Indica cuales de los siguientes orbitales no son posibles: a) $2d$; b) $10s$; c) $4g$; d) $3p$; e) $5f$.

EJERCICIO 75. Completa:

- el número cuántico m_l describe la _____ del orbital atómico.
- la forma de un orbital atómico viene dada por el número cuántico _____.
- si una subcapa electrónica tiene 7 orbitales el valor de l es _____.
- el número máximo de orbitales que pueden asociarse al conjunto de números cuánticos $n=3, l=2$ es _____.

EJERCICIO 76. Completa:

- los orbitales de tipo _____ tienen simetría esférica, mientras que los orbitales de tipo _____ tienen simetría cilíndrica.
- los orbitales de tipo _____ no dependen de las coordenadas angulares, mientras que los orbitales _____ sólo dependen de las coordenadas r, θ .
- mientras que la función ψ_{1s} toma su valor máximo en el _____, la función ψ_{2p} se anula en _____.
- de los dos orbitales $2s$ y $2p$ es más penetrante el orbital _____.
- para un tipo de orbital dado, el tamaño del "orbital" aumenta con el número cuántico _____.

EJERCICIO 77. Completa:

- la parte radial, $R(r)$, de la función de onda es la misma para los orbitales _____.
- la parte angular, $Y(\theta, \phi)$, de la función de ondas de un orbital $2p_z$ es máxima para $\theta =$ _____.
- la probabilidad de encontrar un electrón $2p$ en un elemento dV es _____ en el origen.

EJERCICIO 78. ¿Qué significan los términos *simplemente degenerado* y *triplemente degenerado*?

EJERCICIO 79. ¿Qué es un plano nodal?

EJERCICIO 80. ¿Cuántos planos nodales tiene cada uno de los siguientes orbitales atómicos a) s ; b) p ?

EJERCICIO 81. ¿Para un átomo dado, ordena los siguientes orbitales atómicos en orden creciente del tamaño: a) $1s$, b) $2s$, c) $3s$, d) $4s$, e) $5s$? ¿Cuál de estos OA son más difusos?

EJERCICIO 82. ¿Para un átomo dado, ordena los siguientes orbitales atómicos en orden creciente de su energía: a) $1s$, b) $2s$, c) $3s$, d) $2p$, e) $3p$?