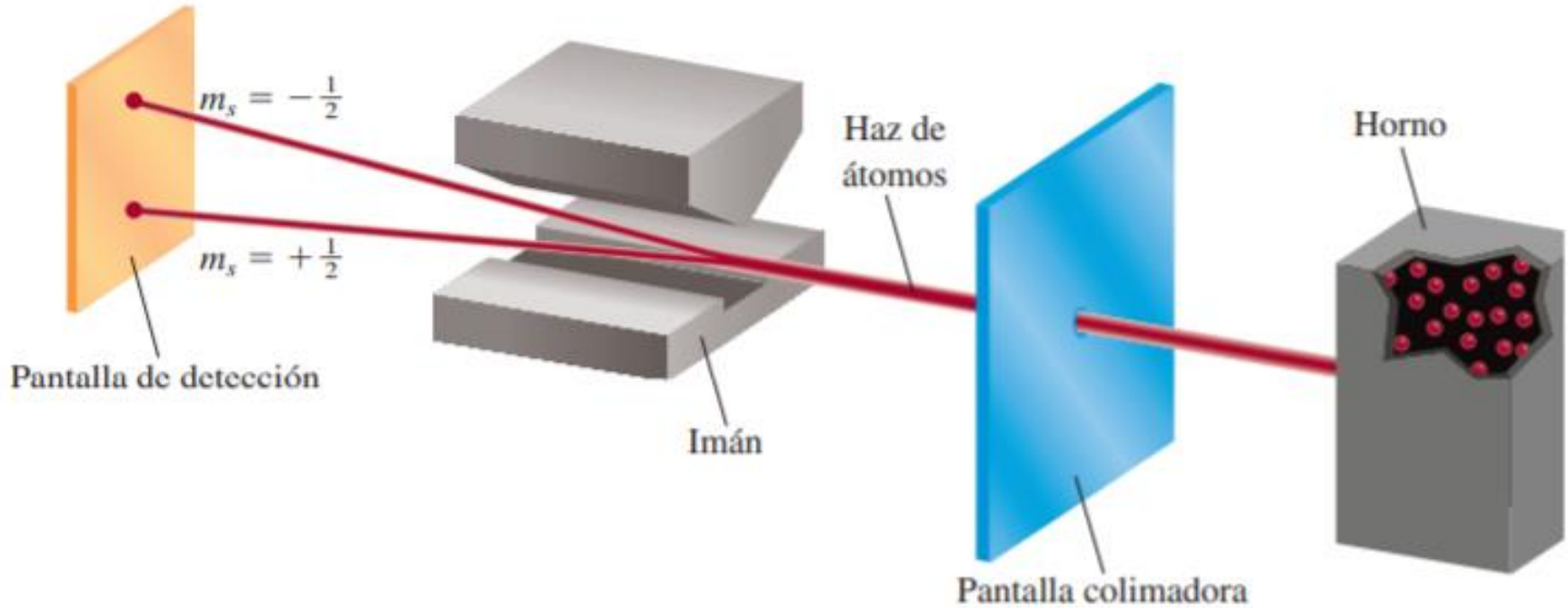
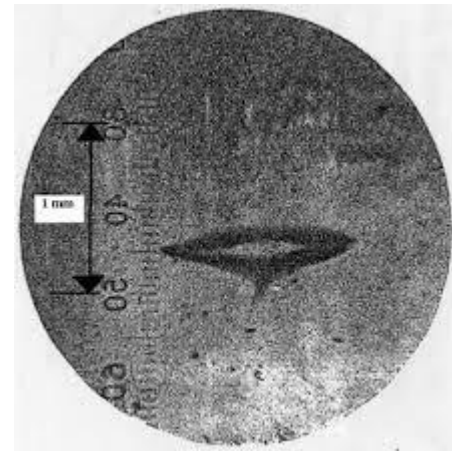


Experimento Stern-Gerlach (spin)



ESPECTRO DEL SODIO

número cuántico Spín (+/- 1/2)



● Números cuánticos:

● Los tres números cuánticos son:

- n : número cuántico principal **ENERGÍA**
- l : número cuántico orbital **FORMA**
- m_l : número cuántico magnético **ORIENTACIÓN ESPACIAL**

● Sus valores permitidos son:

- $n = 1, 2, 3, 4, \dots$
- $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$
- $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, 1, \dots, l - 1, l$

* (cuarto) número cuántico Spín (+/- 1/2)

Se acostumbra especificar los estados del electrón con distinto momento angular con una letra

□ $l =$	0	1	2	3	4	5 . . .
□ Letra =	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h . . .</i>

Los estados atómicos usualmente se refieren por sus valores de n y l

Un estado con $n = 2$ y $l = 1$ se llama estado $2p$.

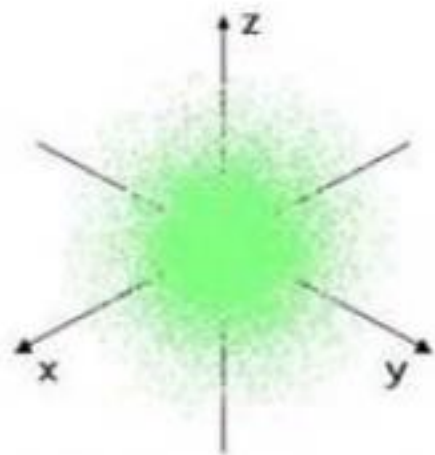
Funciones radiales para el átomo de H

Table 8.4 The Radial Wavefunctions $R_{n\ell}(r)$ of Hydrogen-like Atoms for $n = 1, 2,$ and 3

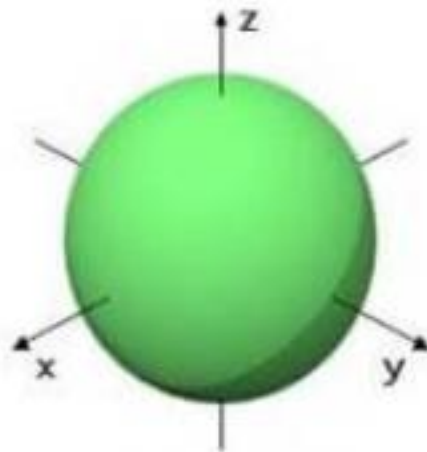
n	ℓ	$R_{n\ell}(r)$
1	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$
2	0	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{\sqrt{3} a_0} e^{-Zr/2a_0}$
3	0	$\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} 2 \left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2}{27} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] e^{-Zr/3a_0}$
3	1	$\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{Zr}{a_0} \left(1 - \frac{Zr}{6a_0}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	2	$\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$

$$\psi = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

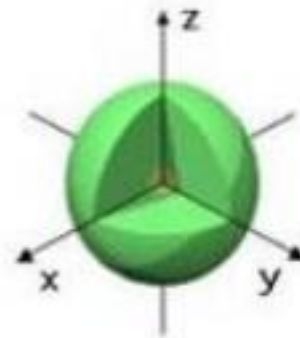
ORBITAL S: Tiene simetría esférica alrededor del núcleo atómico.



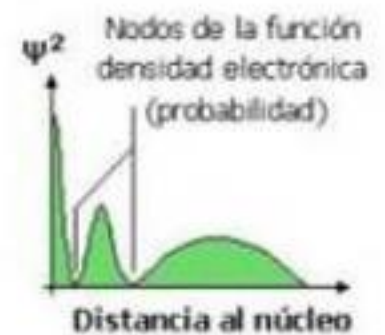
Orbital s ($\ell = 0, m_\ell = 0$)



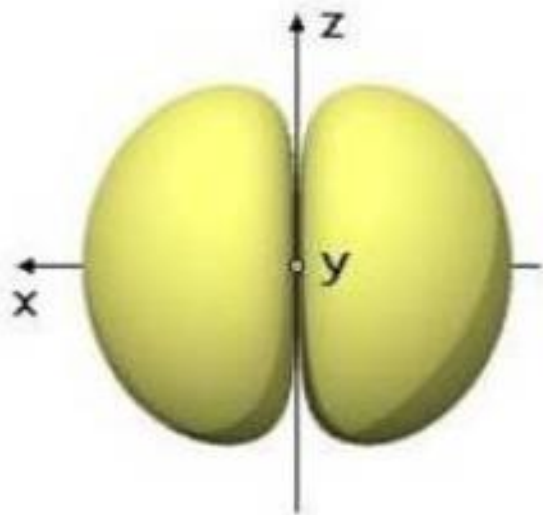
$n = 1$ (H)



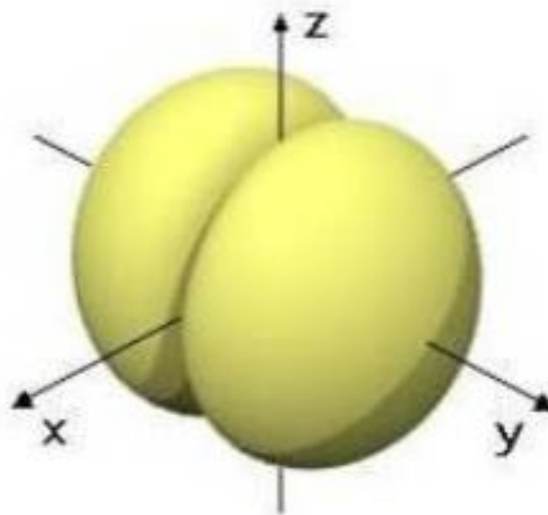
$n = 3$ (Na)



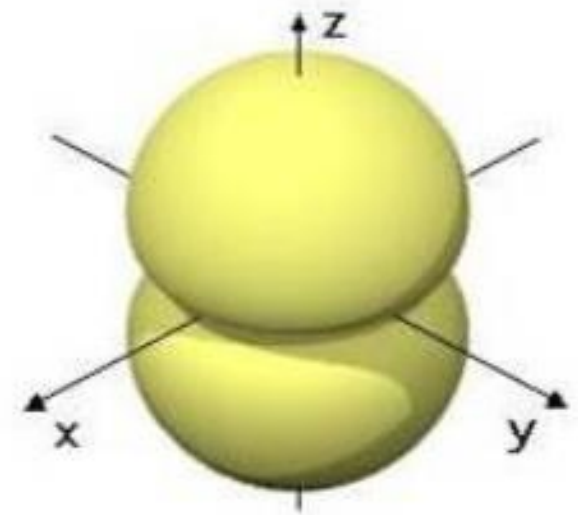
ORBITAL P: La forma geométrica es la de dos esferas achatadas hacia el punto de contacto (el núcleo atómico) y orientadas según los ejes de coordenadas.



Orbital p_x

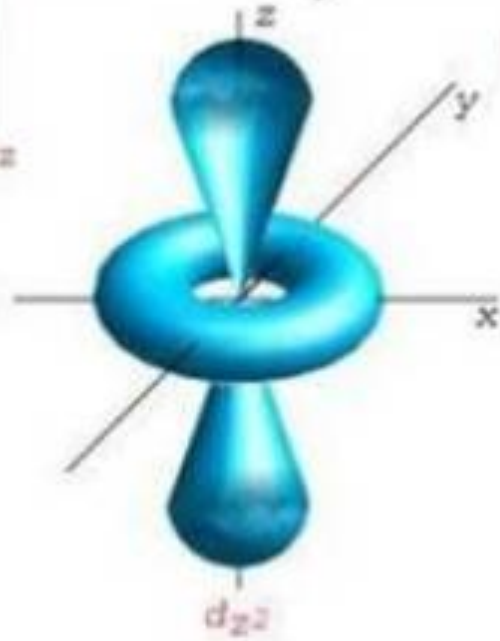
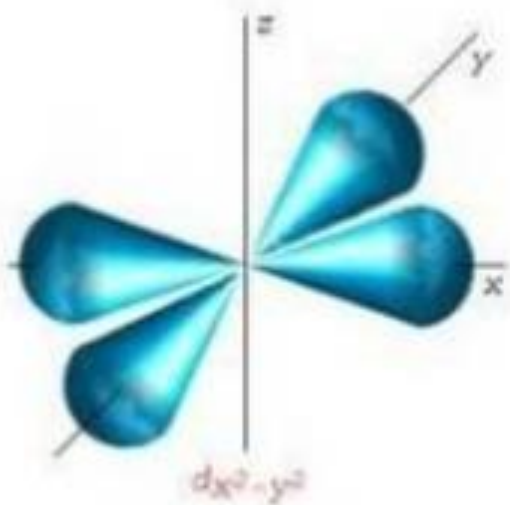
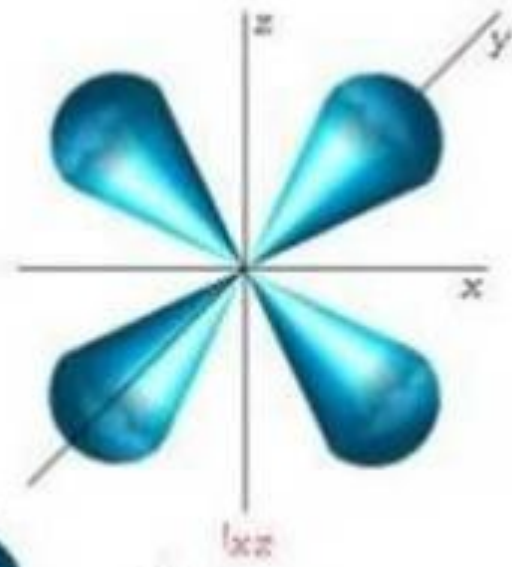
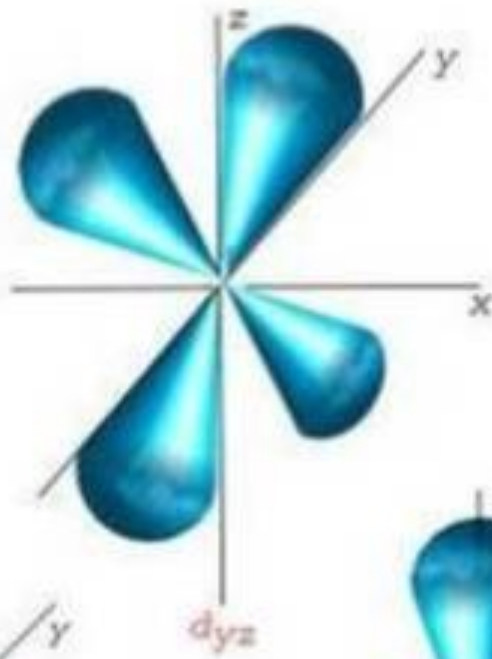
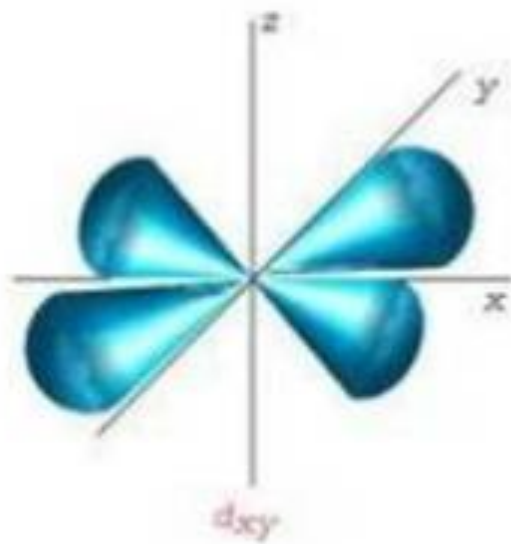


Orbital p_y

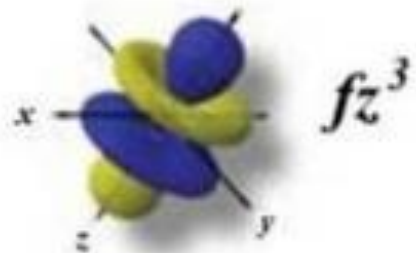


Orbital p_z

ORBITAL D



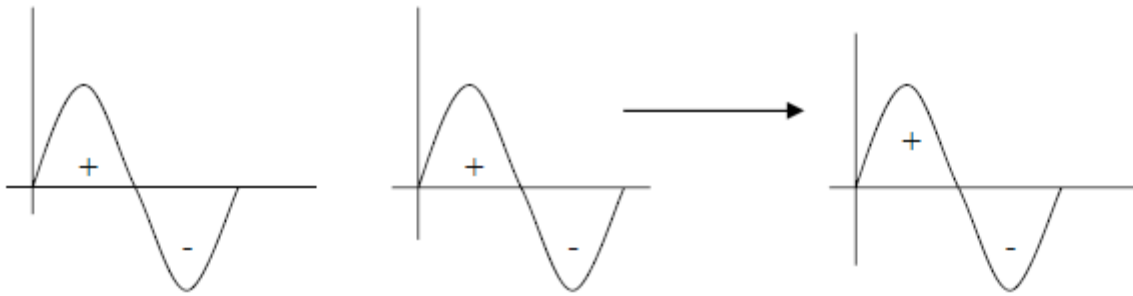
ORBITAL F



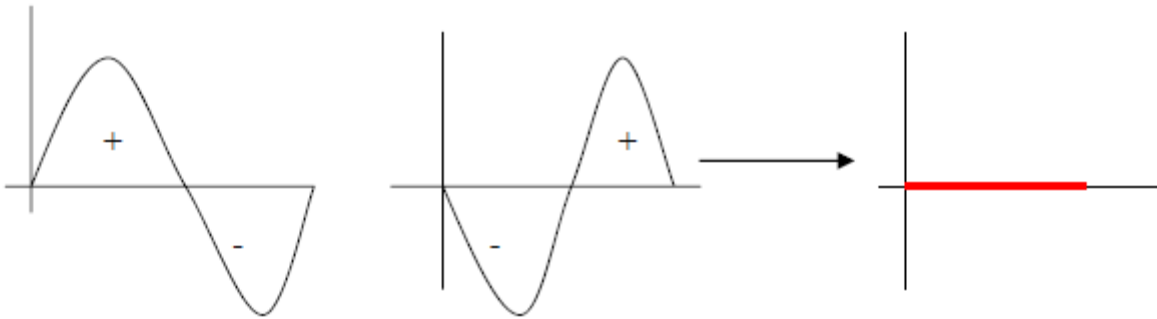
Teoría de orbitales Moleculares

La combinación de orbitales atómicos sobre átomos diferentes forman los llamados orbitales moleculares; dentro de este modelo se señala que los electrones que pertenecen a la molécula forman parte de un TODO.

- La solución a la ecuación de Schrödinger permite representar espacialmente a los orbitales atómicos.
- Un orbital tiene un significado físico sólo cuando obtenemos el cuadrado de la función de onda para describir la densidad de probabilidad.
- Cuando las ondas se combinan, éstas pueden interactuar tanto constructiva como destructivamente; es decir, cuando dos orbitales atómicos se traslapan, éstos pueden estar en fase o fuera de fase.

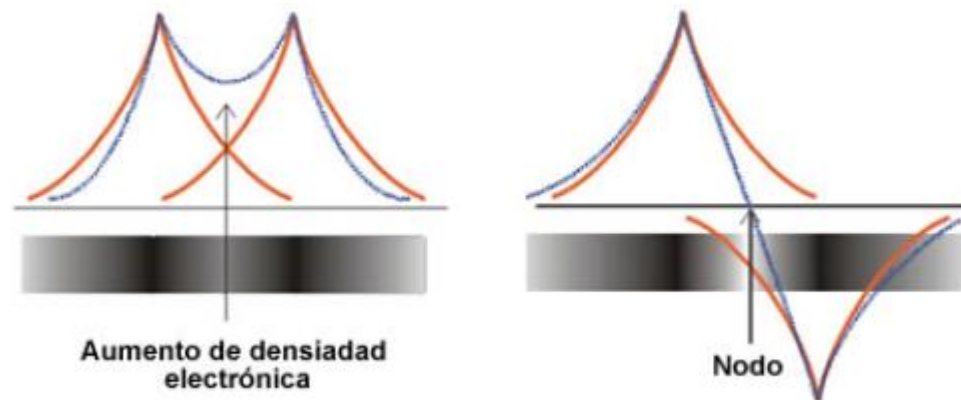


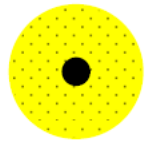
Ondas constructivas



Ondas destructivas

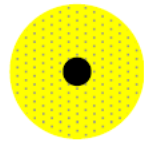
- ✚ Cuando el **traslapamiento es en fase** ocurre una interferencia constructiva en la región cercana al núcleo y **se produce un orbital de enlace**.
- ✚ Cuando el **traslapamiento es fuera de fase** reduce la probabilidad de encontrar electrones fuera del núcleo (interferencia destructiva) y **se produce un orbital de antienlace**.
- ✚ El **traslapamiento de dos orbitales atómicos siempre produce dos orbitales atómicos, uno de enlace y otro de antienlace**.



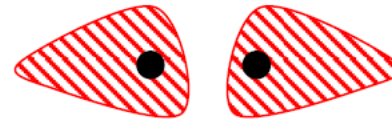
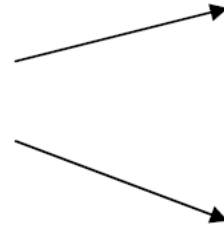


1s

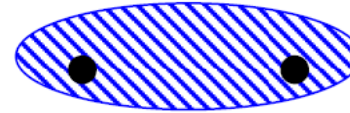
+



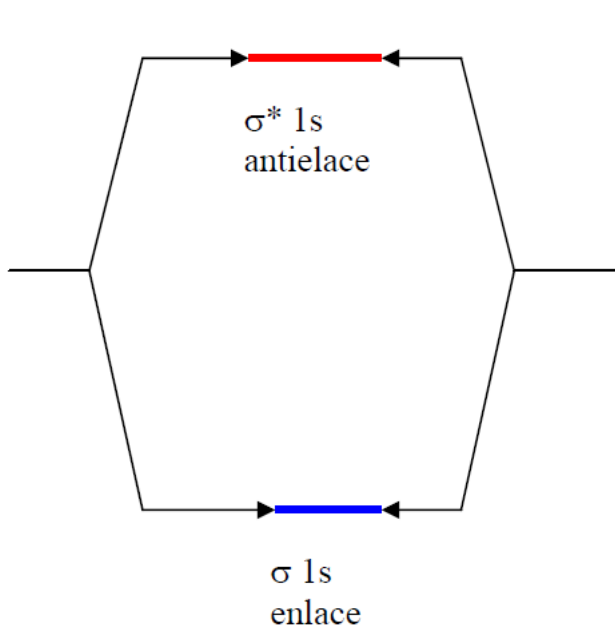
1s



σ^* 1s (antienlace)



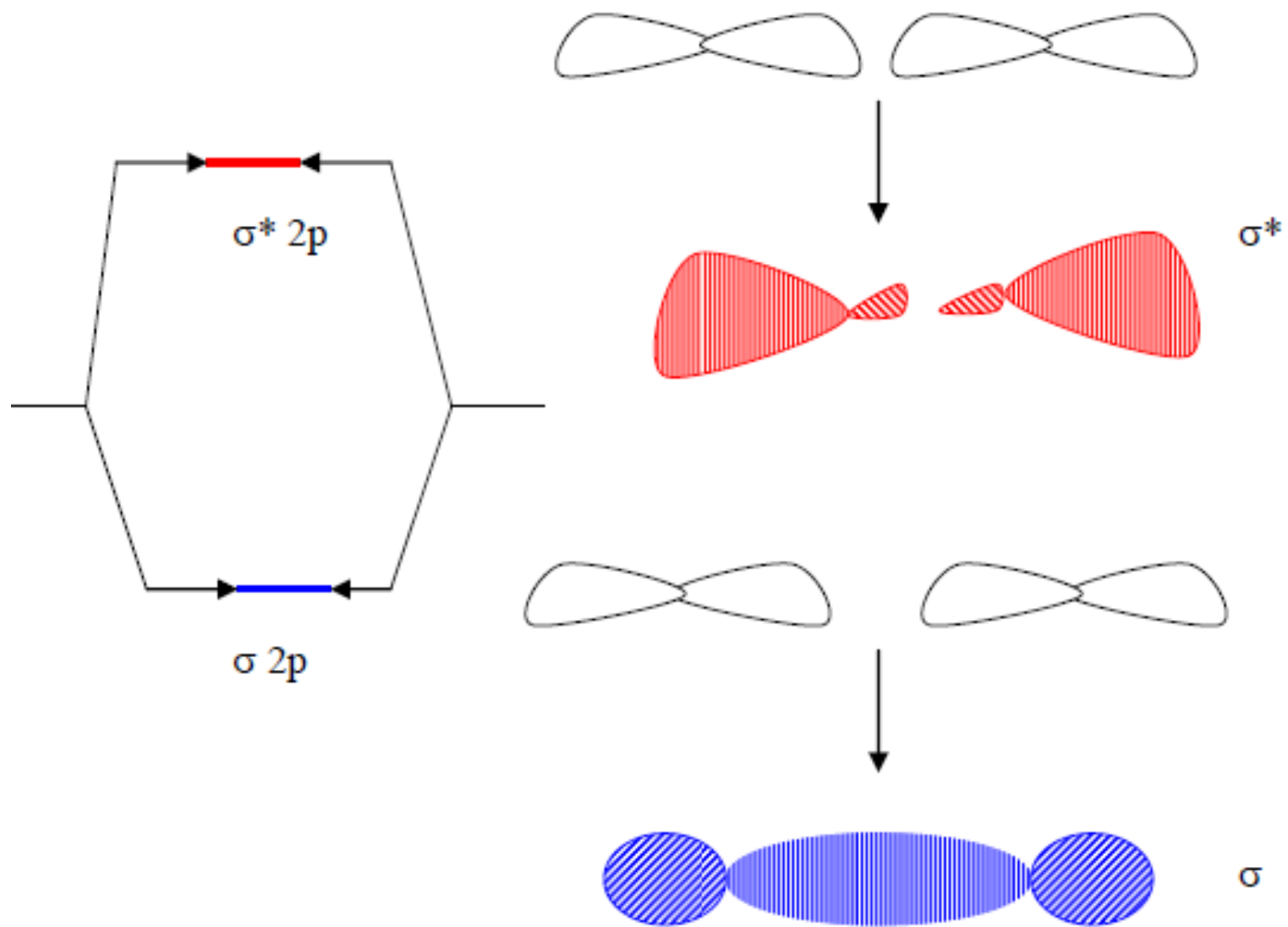
σ 1s (enlace)

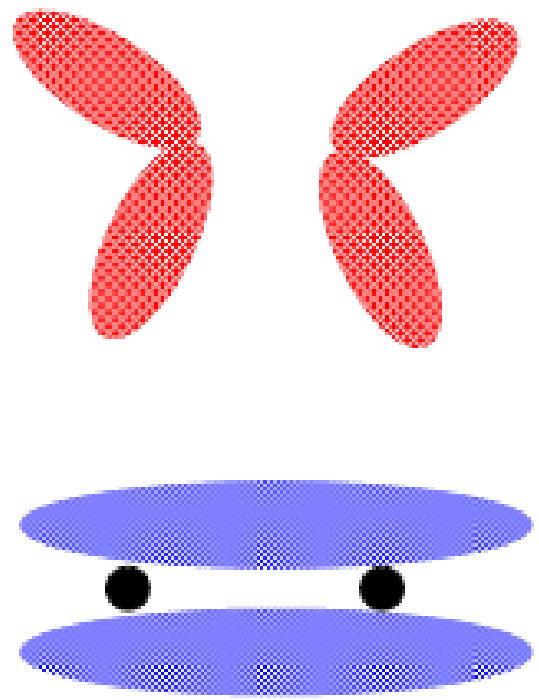
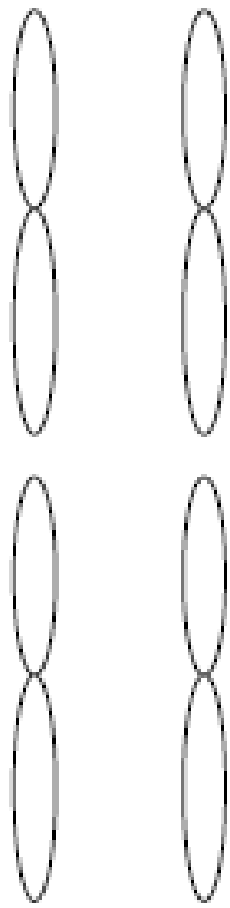
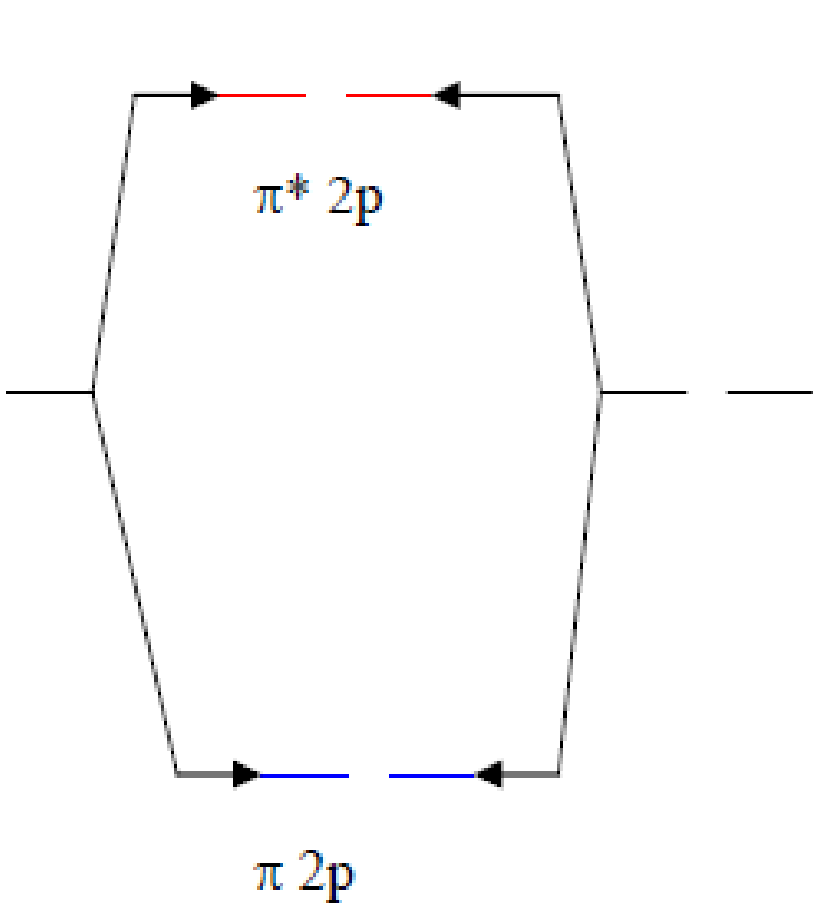


energía

En general, un **orbital molecular de enlace** tiene una **energía menor** y una **estabilidad mayor** que los orbitales atómicos que lo formaron.

Un **orbital molecular de antienlace** corresponde a una **interacción destructiva**; tiene **mayor energía** y **menor estabilidad**.





Principio de exclusión de Pauli

Dos electrones en un mismo estado no pueden tener el mismo SPIN.

Dos reglas básicas determinan la estructura de los átomos complejos:

1. Los electrones de un átomo tienden a ocupar los niveles de menor energía disponibles
2. Principio de exclusión de Pauli

Algunos elementos en su estado fundamental

Hidrógeno: $(n, \ell, m_\ell, m_s) = (1, 0, 0, \pm 1/2)$ en el estado fundamental.

El estado del e se describe con cualquiera de estos dos conjuntos de números cuánticos .
















H: $1s^1$

Helio: $(1, 0, 0, 1/2)$ para el primer electrón.

$(1, 0, 0, -1/2)$ para el segundo electrón.

Los electrones tienen espines antiparalelos ($m_s = +1/2$ and $m_s = -1/2$).

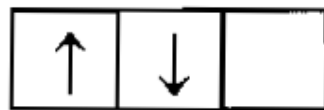
He: $1s^2$

Atom	1s	2s	2p			Electron configuration
Li						$1s^2 2s^1$
Be						$1s^2 2s^2$
B						$1s^2 2s^2 2p^1$

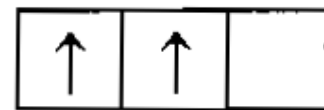
El C tiene 6 electrones ¿de qué forma se distribuyen?



$2p_x 2p_y 2p_z$



$2p_x 2p_y 2p_z$

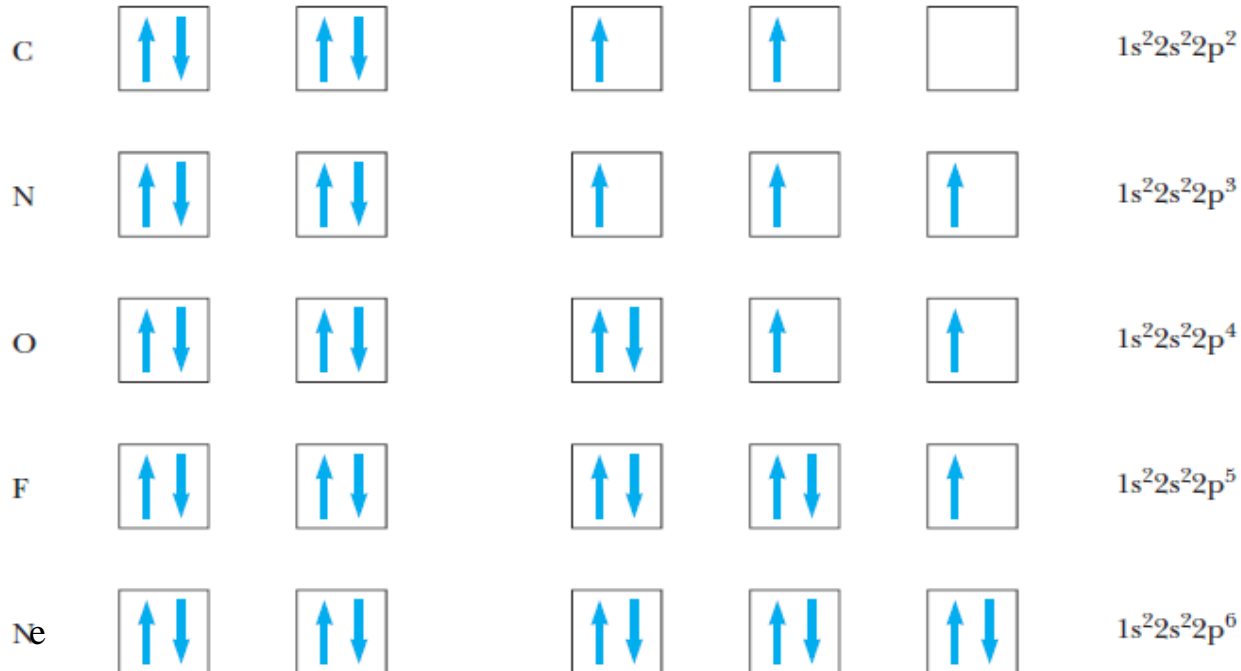


$2p_x 2p_y 2p_z$

Reglas de Hund: Cuando un átomo tiene orbitales de igual energía, el orden en que se llena de electrones es tal que se tiene un número máximo de electrones con espines desapareados

- 2 electrones con spin paralelo → sustancia paramagnética (atraída por imán)
- con spin antiparalelos → sustancia diamagnética (ligeramente repelida por imán)

Se sabe que C es paramagnético (concuerta con regla de Hund)



Propiedades del núcleo

Todos los núcleos están compuestos por dos tipos de partículas: protones y neutrones

Z = número atómico (número de protones)

N = número de neutrones

A = número másico, número de nucleones ($Z + N$)

Representación simbólica: $\boxed{\begin{matrix} A \\ Z \end{matrix} X_N}$

Donde X es el símbolo del elemento químico

${}_{26}^{56}\text{Fe}$ tiene un número de masa 56 y un número atómico de 26

Los isótopos de un elemento tienen el mismo valor de Z pero diferentes valores de N y A

El H tiene isótopos: ${}_1^1\text{H}$ núcleo ordinario, ${}_1^2\text{H}$ deuterio, ${}_1^3\text{H}$ tritio

Carga y masa

Unidad de masa atómica, u.

Se define de manera que la masa de ^{12}C es 12 u.

$$1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

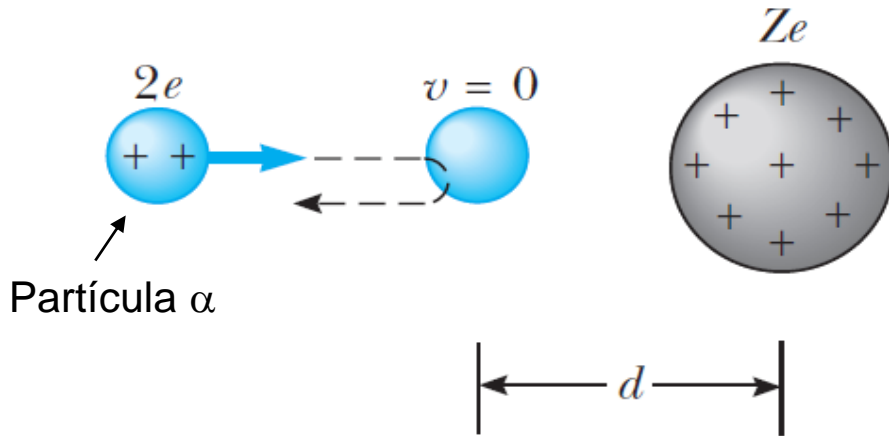
(La energía en reposo de una partícula es $E = mc^2$)

Table 12.1 Some Nucleon and Electron Properties

Particle	Symbol	Rest Energy (MeV)	Charge	Mass (u)	Spin	Magnetic Moment
Proton	p	938.272	$+e$	1.0072765	1/2	$2.79 \mu_{\text{N}}$
Neutron	n	939.566	0	1.0086649	1/2	$-1.91 \mu_{\text{N}}$
Electron	e	0.51100	$-e$	5.4858×10^{-4}	1/2	$-1.00116 \mu_{\text{B}}$

El tamaño del núcleo

Experiencias de Rutherford: una partícula α (núcleo de He) en una colisión frontal con un núcleo de carga Ze



Por la repulsión con el núcleo la partícula se detiene momentáneamente a una distancia d .

En ese instante la energía cinética de la partícula α incidente se transforma completamente en energía potencial eléctrica.

$$\frac{1}{2} m v^2 = k \frac{q_1 q_2}{r} = k \frac{(2e)(Ze)}{d}$$

$$d = \frac{4kZe^2}{m v^2}$$

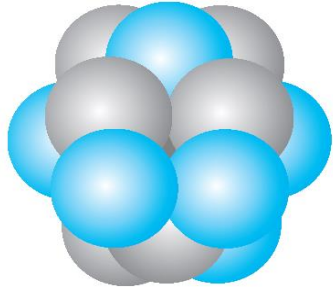
Rutherford encontró que las partículas α se acercaban hasta una distancia de $3.2 \cdot 10^{-14}$ m del núcleo para láminas de oro y $2 \cdot 10^{-14}$ m para láminas de plata

Concluyó que la carga positiva en el átomo está concentrada en una pequeña esfera llamada núcleo cuyo radio no es mayor que 10^{-14} m.

El núcleo es una parte muy pequeña del átomo

Un femtómetro o Fermi $1 \text{ fm} \equiv 10^{-15} \text{ m}$

Muchos experimentos han demostrado que la geometría del núcleo es aproximadamente esférica con un radio promedio de



$$r = r_0 A^{1/3}$$

A es el número de masa
 $r_0 = 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

Como el volumen de una esfera es proporcional al radio al cubo:

El volumen del núcleo es directamente proporcional a A, el número de nucleones

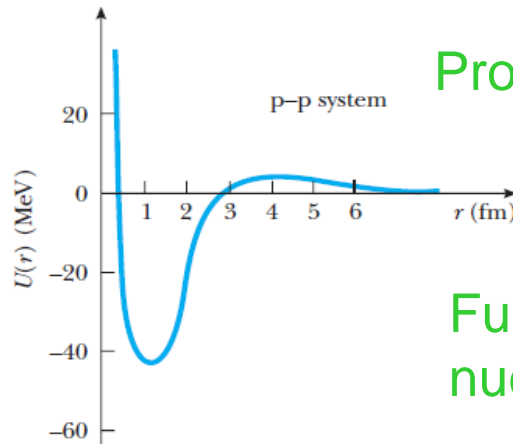
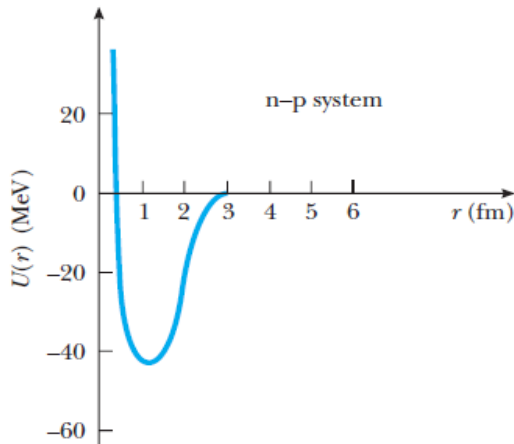
¿Cómo se mantiene unido el núcleo?

Fuerza nuclear:

es mayor que la de Coulomb (para distancias cortas)

no depende de la carga

depende de la orientación relativa de los spines de los nucleones



Profundidad del pozo ~ 40-50 MeV

Fuente repulsión impide a los nucleones acercarse mas de 0.4 fm

Diferencia entre las interacción p-p y n-p: la energía potencial p-p es la superposición de la interacción nuclear y la de Coulomb.

A distancias menores a 2 fm son casi idénticas, pero a distancias mayores el potencial de un par p-p tiene una barrera positiva

La fuerza nuclear no afecta a los electrones

Radiactividad

- ✓ **Rayos alfa (α): se emiten núcleos de ^4He**

Desintegración alfa: El elemento radiactivo de número atómico Z , emite un núcleo de Helio (dos protones y dos neutrones), el número atómico disminuye en dos unidades y el número másico en cuatro unidades,

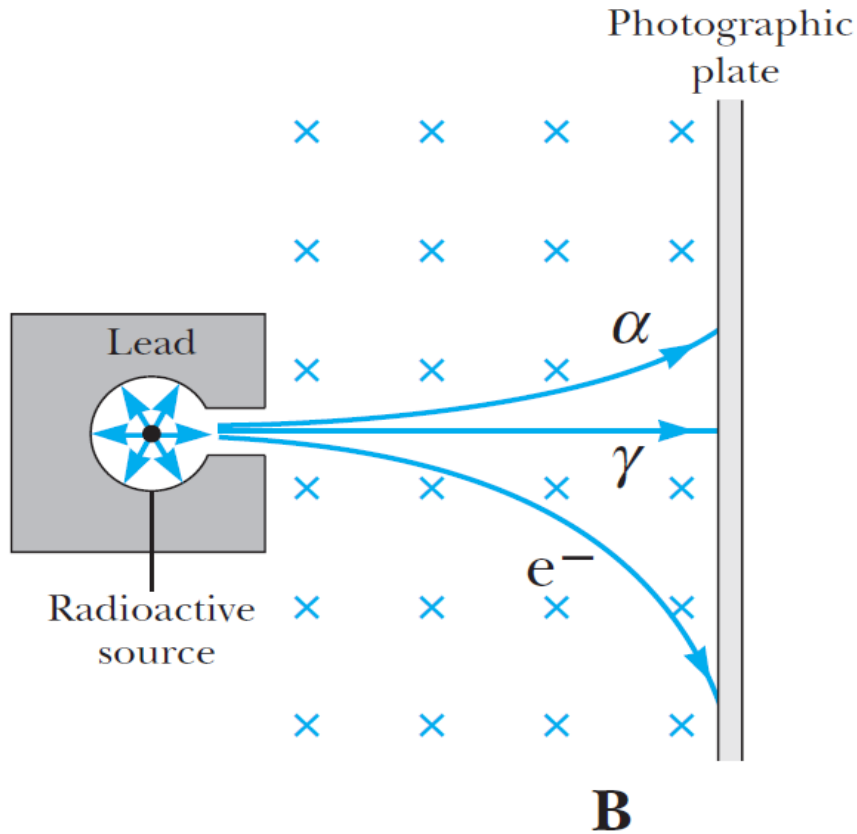
- ✓ **Rayos beta (β): se emiten electrones**

El núcleo del elemento radiactivo emite un electrón, en consecuencia, su número atómico aumenta en una unidad, pero el número másico no se altera.

- ✓ **Rayos gamma (γ): se emiten fotones de alta energía**

Desintegración gamma: El núcleo del elemento radiactivo emite un fotón de alta energía, la masa y el número atómico no cambian, solamente ocurre un reajuste de los niveles de energía ocupados por los nucleones.

Es posible distinguir entre estas tres formas de radiación usando un campo magnético **B**



El campo **B** separa la radiación en tres componentes.

Dos se desvían en direcciones opuestas y una no se desvía (no tiene carga)

La velocidad a la cual un proceso de decaimiento ocurre en una muestra radiactiva es proporcional al número de núcleos radiactivos

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

λ constante de decaimiento o **constante de desintegración**

N decrece con el tiempo

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt \quad \int_{N_0}^N \frac{dN}{N} = -\lambda \int_0^t dt \quad \ln \left(\frac{N}{N_0} \right) = -\lambda t$$

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

N_0 número de núcleos radiactivos que no han decaído en $t = 0$.

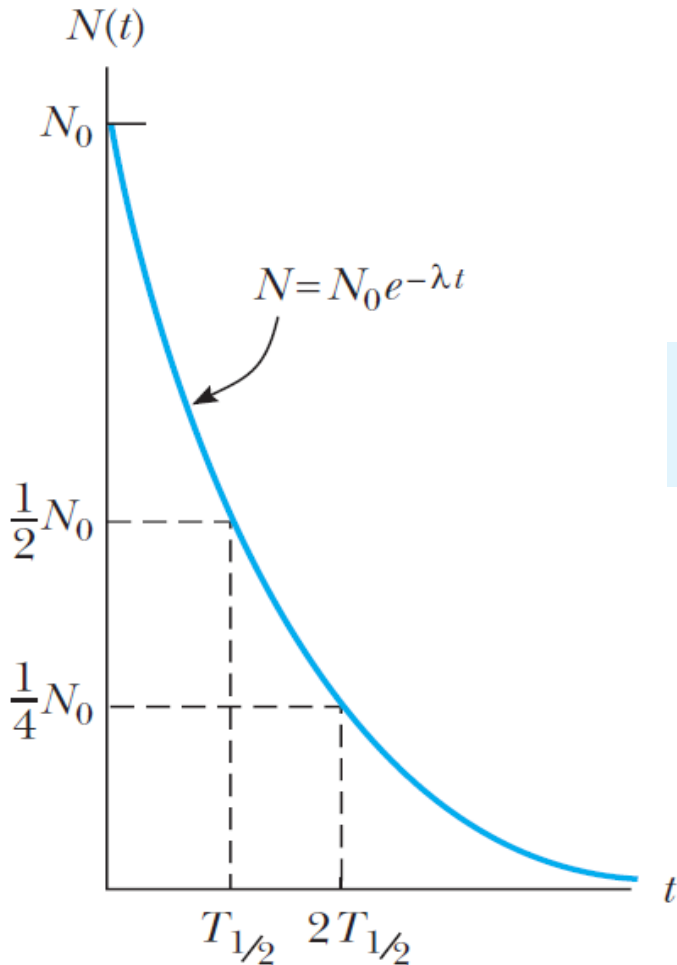
Velocidad de decaimiento o actividad

$$R = \left| \frac{dN}{dt} \right| = N_0 \lambda e^{-\lambda t} = R_0 e^{-\lambda t}$$

N y R decrecen exponencialmente con el tiempo

La **vida media** $T_{1/2}$ de una sustancia radiactiva es el tiempo que tarda la mitad de un número dado de núcleos en decaer

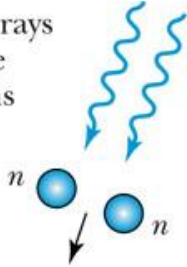
$$N = N_0 e^{-\lambda t} \quad \frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T_{1/2}}$$



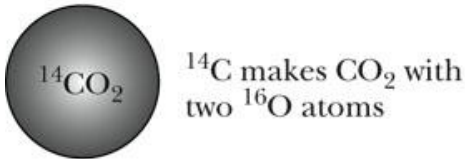
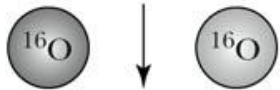
$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda}$$

Fechaamiento con carbono

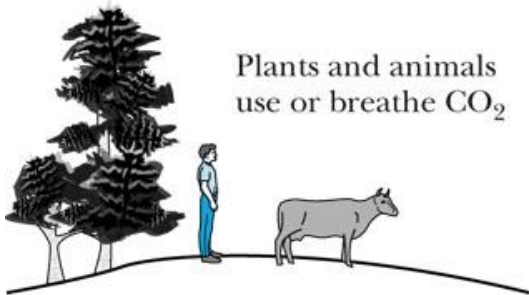
Cosmic rays
produce
neutrons



Neutrons
interact with ^{14}N
to produce ^{14}C



Plants and animals
use or breathe CO_2



When an organism dies, the ratio of $^{14}\text{C}/^{12}\text{C}$ decreases.

- El ^{14}C radioactivo se produce en la atmósfera por el bombardeo de neutrones producido por rayos cósmicos
- El cociente $^{14}\text{C} / ^{12}\text{C}$ es $1.3 \cdot 10^{-12}$ para todos los organismos (continuamente intercambian CO_2 con sus alrededores)
- Cuando un organismo muere no absorbe más ^{14}C de la atmósfera y $^{14}\text{C} / ^{12}\text{C}$ disminuye por el decaimiento beta del ^{14}C
- La vida media del ^{14}C es de 5730 años, entonces es posible determinar la edad de un material midiendo la actividad debida al decaimiento del ^{14}C