Universidad Autónoma del Estado de México
Centro Universitario UAEM Valle de México

CENTRO UNIVERSITARIO UAEM VALLE DE MÉXICO

PROGRAMA EDUCATIVO
INGENIERÍA INDUSTRIAL

UNIDAD DE APRENDIZAJE
INGENIERÍA DE MATERIALES

UNIDAD DE COMPETENCIA
MATERIA Y SU NATURALEZA ATÓMICA

UNIDAD TEMÁTICA
NÚMEROS CUÁNTICOS
CONFIGURACION ELECTRONICA

Dr. en C. en. Ing. José Guadalupe Miranda Hernández
jgmirandah@uaemex.mx

MARZO 2018

UNIDAD DE APRENDIZAJE

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO
CENTRO UNIVERSITARIO UAEM VALLE DE MÉXICO
COORDINACIÓN DE INGENIERÍA INDUSTRIAL

PROGRAMA PERMANENTE DE ELABORACIÓN Y ACTUALIZACIÓN DE UNIDADES DE APRENDIZAJE

Unidad de Aprendizaje

INGENIERÍA DE MATERIALES

Elaborado por:

M. en C. Armando Vargas Gómez
Profesor de Asignatura
Fecha: 10 Diciembre 2004

Actualizado por:

Dr. José Gpe. Miranda Hernández
Profesor-Investigador
Fecha: 10 de Agosto de 2012

Centro Universitario
UAEM Valle de México
Talleres y Laboratorios

Revisado por:

La Comisión Permanente de Elaboración y Actualización de Unidades de Aprendizaje de la Academia de Ingeniería Industrial del Centro Universitario UAEM Valle de México
Fecha: 13 de septiembre de 2012

Aprobado y avalado por:

H. Consejo Académico
del Centro Universitario UAEM Valle de México
Acta en Sesión Extraordinaria no.: 28
Fecha: 17 de septiembre de 2012

H. Consejo de Gobierno
del Centro Universitario UAEM Valle de México
Acta en Sesión Extraordinaria no.: 28
Fecha: 17 de septiembre de 2012

Centro Universitario
UAEM Valle de México
Ing. Industrial

UNIDAD DE APRENDIZAJE

2. Materia y su naturaleza atómica.	2.1	Estructura del átomo.
	2.2	Configuración electrónica.
	2.3	Números cuánticos.
	2.4	Enlaces atómicos y moleculares.
3. Estructuras cristalina.	3.1	Sistemas cristalinos.
	3.2	Redes de Bravais
	3.3	Parámetros de red, número de átomos por celda, número de coordinación y factor de empaquetamiento.
	3.4	Índices de Miller, Direcciones y Planos cristalográficos.
4. Imperfecciones reticulares	4.1	Imperfecciones cristalinas.
	4.2	Defectos puntuales.
	4.3	Defectos lineales (o dislocaciones).
	4.4	Defectos superficiales.
5. Difusión y procesamiento de materiales	5.1	Mecanismos de difusión y energía de activación.
	5.2	Leyes de Fick.
	5.3	Difusión y el efecto en el procesamiento de materiales.

GUIÓN

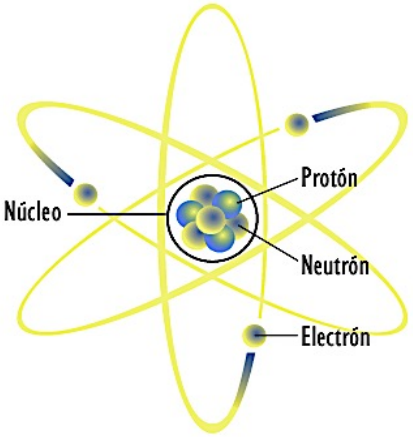
En este material se muestra el objetivo general de la unidad de competencia, mencionando las unidades temáticas que considera esta unidad. Así mismo y en particular se presenta el desarrollo de la unidad tamática de **2.2 números cuánticos y 2.3 configuración electrónica**. Para el desarrollo de esta unidad temática se inicia con una breve repaso del tema 2.1 estructura del átomo para después continuar con los temas que ocupan a este trabajo mediante una introducción, tablas e imágenes que deben ser enriquecidas por el profesor en la explicación y presentación del material a los estudiantes.

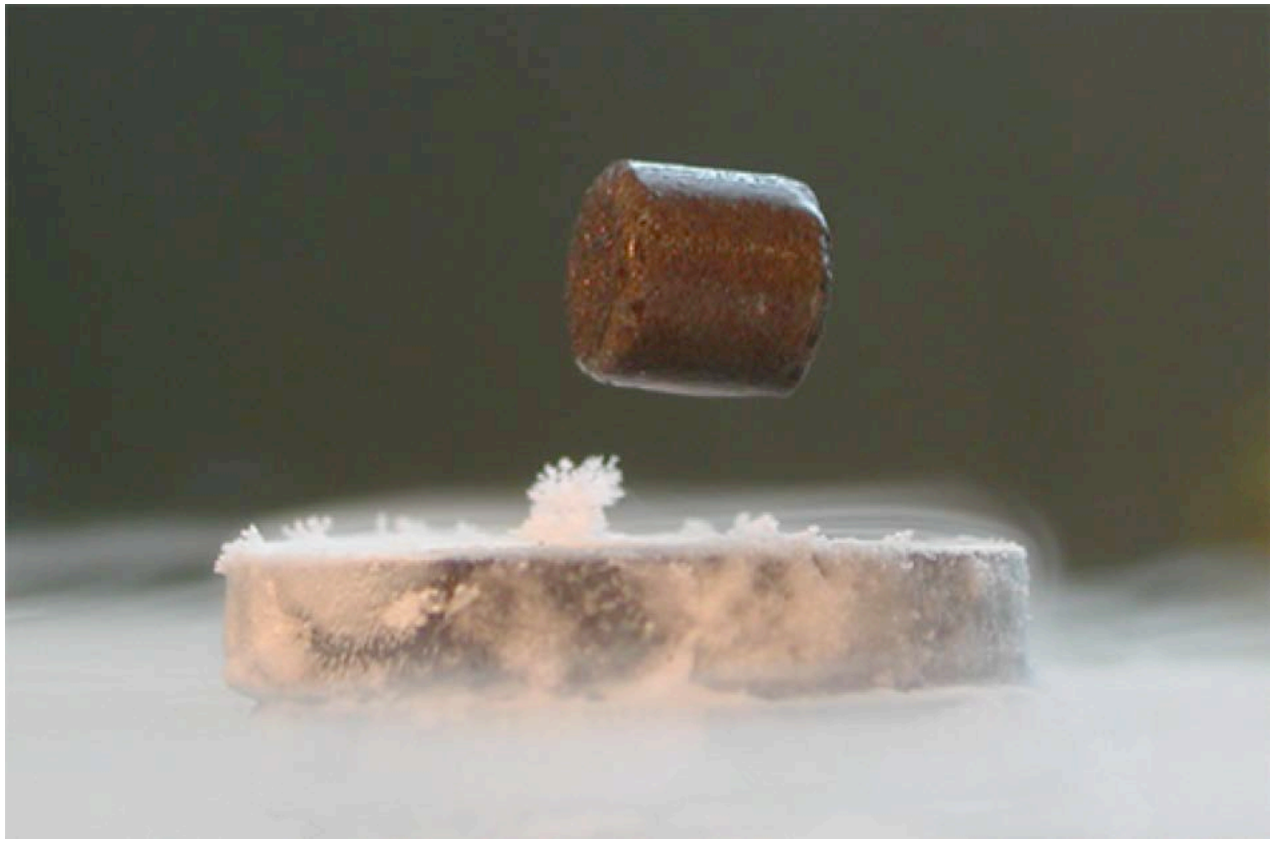
Este material no es el sustituto de un apunte es un apoyo didáctico que pretende ser ilustrativo, objetivo y concreto con el fin de ser un apoyo para el profesor o refuerzo conceptual para el estudiante en el fortalecimiento del proceso de enseñanza-aprendizaje.

En esta unidad de competencia se encuantran algunos ejercicios cuantitativo a resolver y deben ser retroalimentados por el profesor en la explicación al alumno, finalmente el profesor deberá pedir evidencia a los estudiantes de ejercicios resueltos.

UNIDAD DE COMPETENCIA 2

Materia y su naturaleza atómica





Objetivo

Conocer la estructura atómica de los materiales sólidos en función de la disposición y organización geométrica de los átomos y sus interacciones entre ellos.

Unidades Temáticas

2.1 Estructura del átomo.

2.2 ***Números cuánticos.***

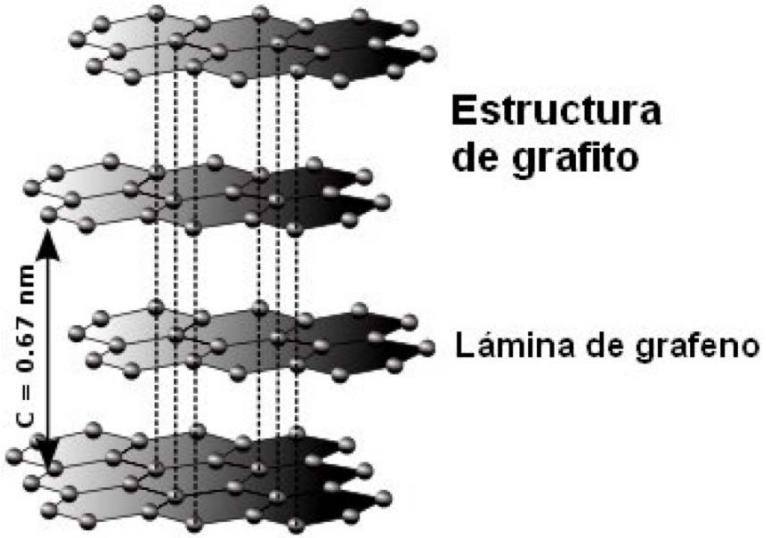
2.3 ***Configuración electrónica.***

2.4 Enlaces atómicos y moleculares.

2.1 Estructura del átomo

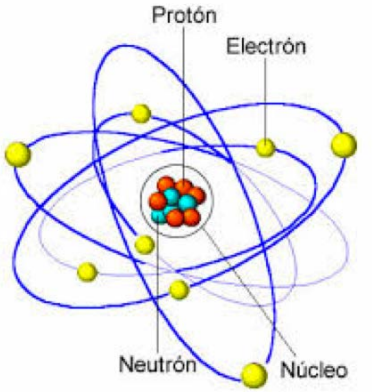
REPASO

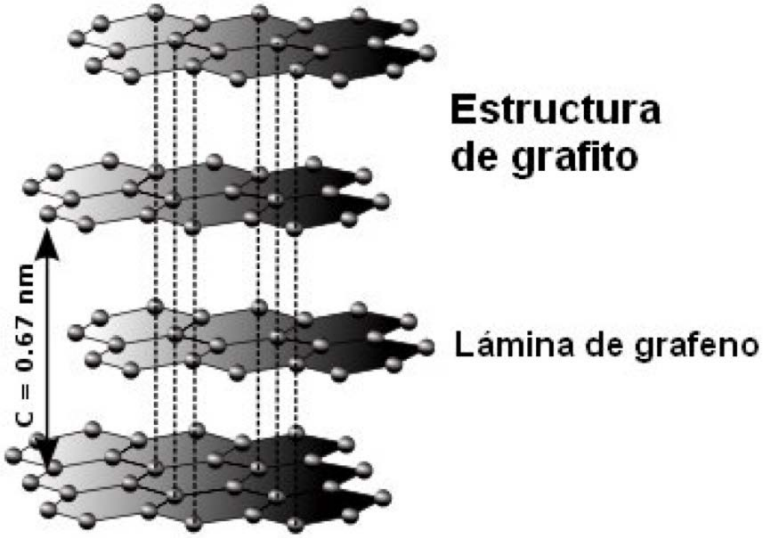
Te has preguntado ¿qué pasaría si dividieras por mitades muchas veces un trozo de grafito de un lápiz?, ¿llegarías hasta una parte indivisible o podrías seguir dividendo infinititamente?.



2.1 Estructura del átomo

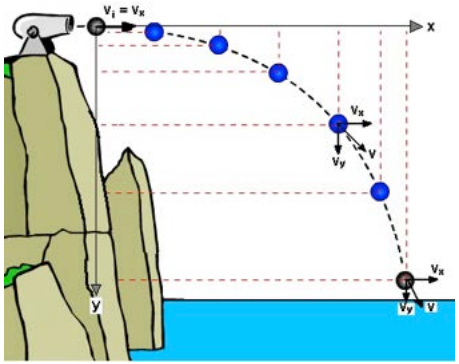
ÁTOMO: son la unidad básica de toda la materia, la estructura que define a todos los elementos y tiene propiedades químicas bien definidas.

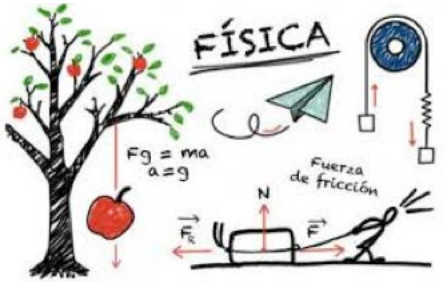


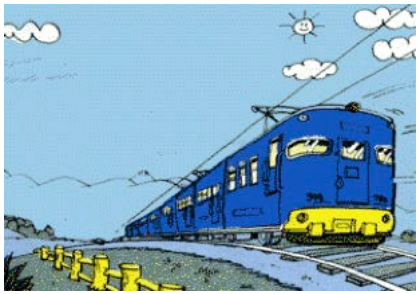


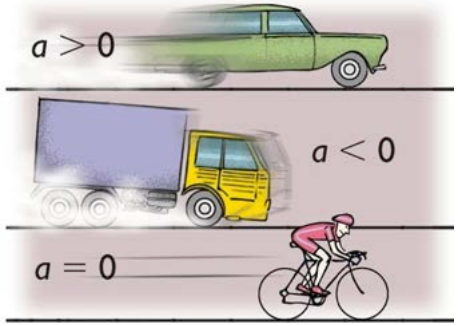
2.2 Números cuánticos

En muchas ocasiones es necesario conocer la posición, la dirección del movimiento y la velocidad de moviles como: proyectiles, aviones, trenes, barcos, entre otros, y pueden ser calculados por que el movimiento de estos, obedecen a las leyes de la ***mecánica clásica***.



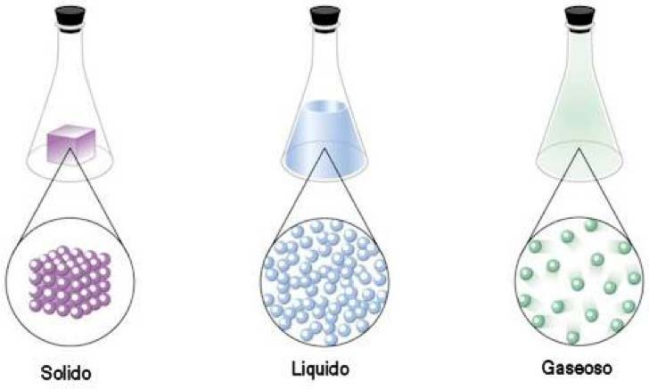


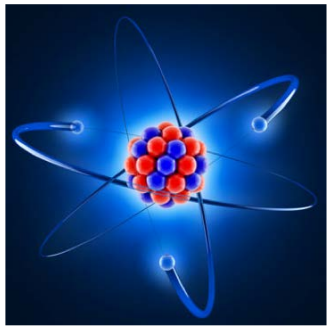


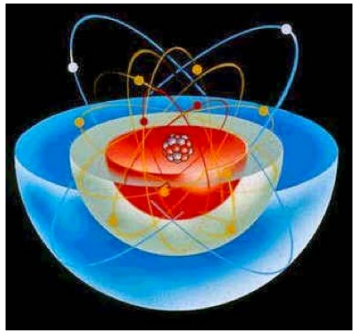


2.2 Números cuánticos

De la misma manera el comportamiento de la materia y la radiación son importantes para la ciencia y sus aplicaciones, razón por la cual es necesario describir y explicar las propiedades de las moléculas, los átomos y sus constituyentes: electrones, protones, neutrones, y otras partículas como los quarks, los gluones, fotones y bosones.

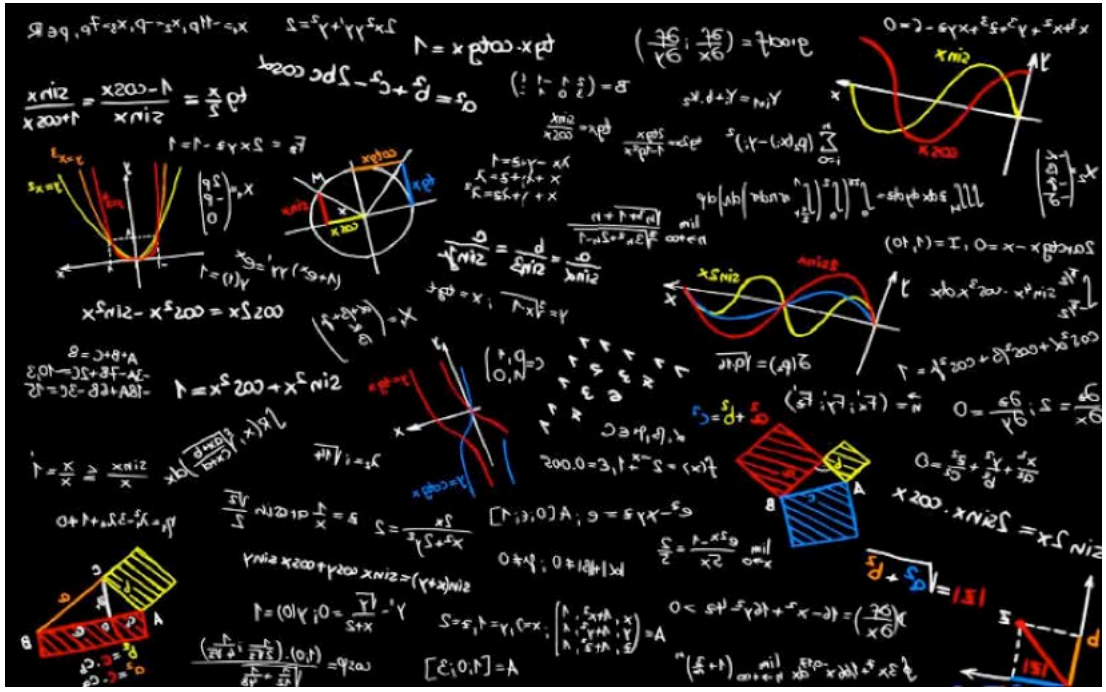






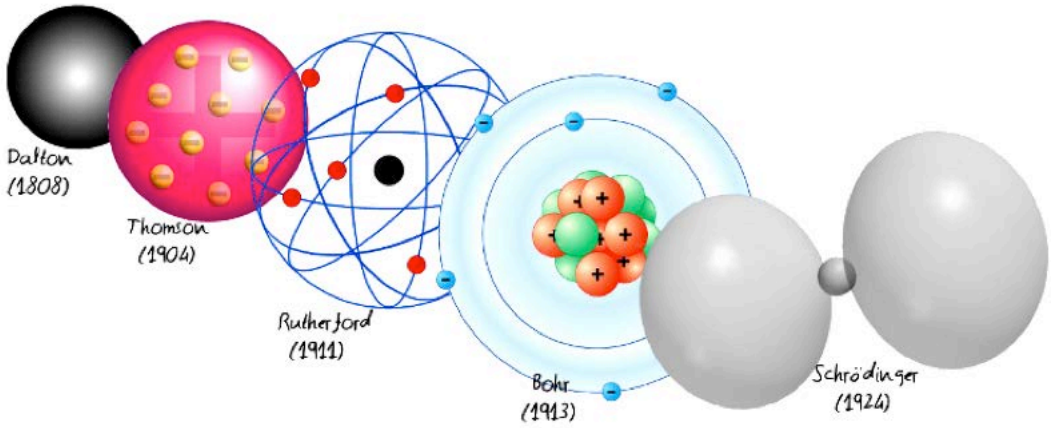
2.2 Números cuánticos

Debido al tamaño de las particulas elementales a escalas atómicas y subatómica la mecánica clásica no prodria describir su comportamiento ya que estas obedecen a las leyes de la ***mecánica cuántica***.



2.2 Números cuánticos

El modelo actual del átomo se basa en la mecánica cuántica ondulatoria. Werner Heisenberg con el principio de incertidumbre “Es imposible determinar el momento y la posición de un electrón o cualquier otra partícula muy pequeña de forma simultánea”.



2.2 Números cuánticos

Posteriormente **Erwin Schrödinger** dice que un electrón puede ser descrito mediante una ecuación matemática denominada función de onda, ψ, también llamada ecuación de Schrödinger y la descripción del electrón se obtiene resolviendo dicha ecuación.

$$-\frac{\hbar}{2m_e}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 \mathrm{x}}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 \mathrm{y}}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 \mathrm{z}}\right)+V\,\Psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad ; \quad \Psi=\Psi(x,y,z,t)$$

$$-\frac{\hbar}{2m_e}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 \mathrm{x}}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 \mathrm{y}}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 \mathrm{z}}\right)+V\,\Psi=E\Psi \quad ; \quad \Psi=\Psi(x,y,z)$$

2.2 Números cuánticos

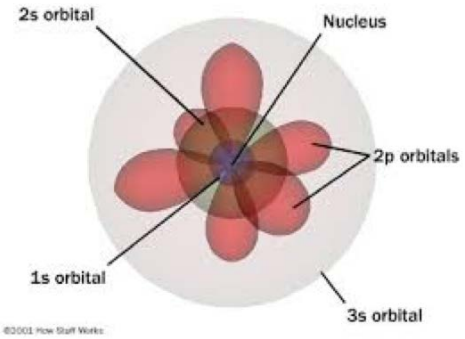
Estas funciones se denominan orbitales (región del espacio de máxima probabilidad de encontrar un electrón).

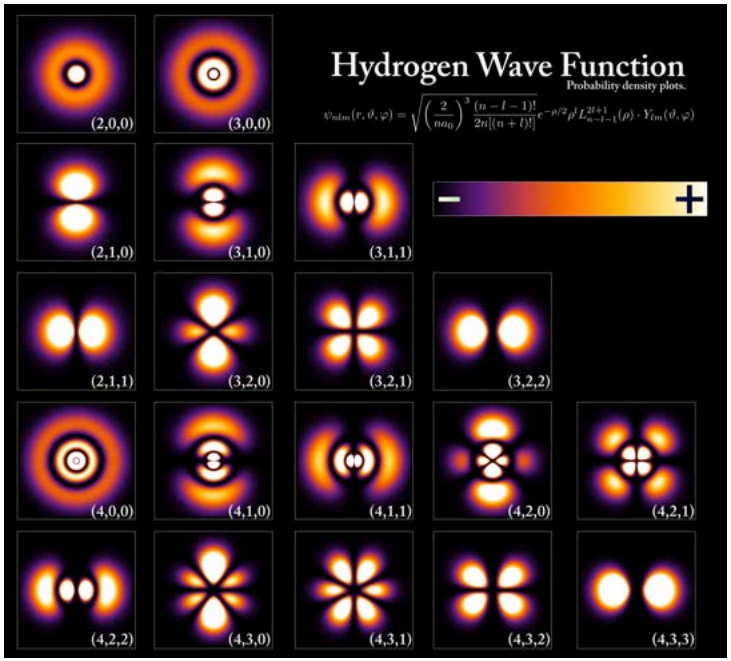
Cada orbital esta asociado a 3 números cuánticos (**n, l** y $\mathbf{m_l}$) que describen a un electrón en el átomo.

Son los números que definen la energía y la localización de electrónes en los átomos relacionaldos con los orbitales atómicos.

2.2 Números cuánticos

Por lo tanto, el orbital atómico tiene una forma definida. Existe un cuarto número cuántico ($\mathbf{m_s}$ o **s**) que refiere a una propiedad magnética de los electrones llamada espin.





2.2 Números cuánticos

a. *Número cuántico principal* (**n**):

Su valor indica la órbita o nivel energético en el que se encuentra el electrón, y considera que mientras mayor sea el valor de **n**, más alejado esta el electrón del núcleo, y mayor es su contenido energético.

2.2 Números cuánticos

Los valores que adquiere n, son números enteros mayores de cero; por ejemplo:

Cuando n = **1**, el electrón se encuentra en la órbita **1**

Cuando n = **2**, el electrón se encuentra en la órbita **2**

Cuando n = **3**, el electrón se encuentra en la órbita **3**

.

.

Cuando $n = x$, el electrón se encuentra en la órbita x

2.2 Números cuánticos

b. *Número cuántico secundario o acimumuntal* (l):

Su valor indica la subórbita o subnivel de energía en el que se encuentra el electrón.

Dicha sub-órbita o sub-nivel energético, también llamado orbital, se puede entender como la forma geométrica que describe el electrón al moverse dentro del átomo.

2.2 Números cuánticos

Para cada valor de n, l adquiere diferentes valores enteros, que van desde **cero** hasta n**-1**; por ejemplo:

Cuando n **= 1**, l adquiere un valor: **0**

Cuando n **= 2**, l adquiere dos valores: **0** y **1**

Cuando n **= 3**, l adquiere tres valores: **0**, **1** y **2**

.

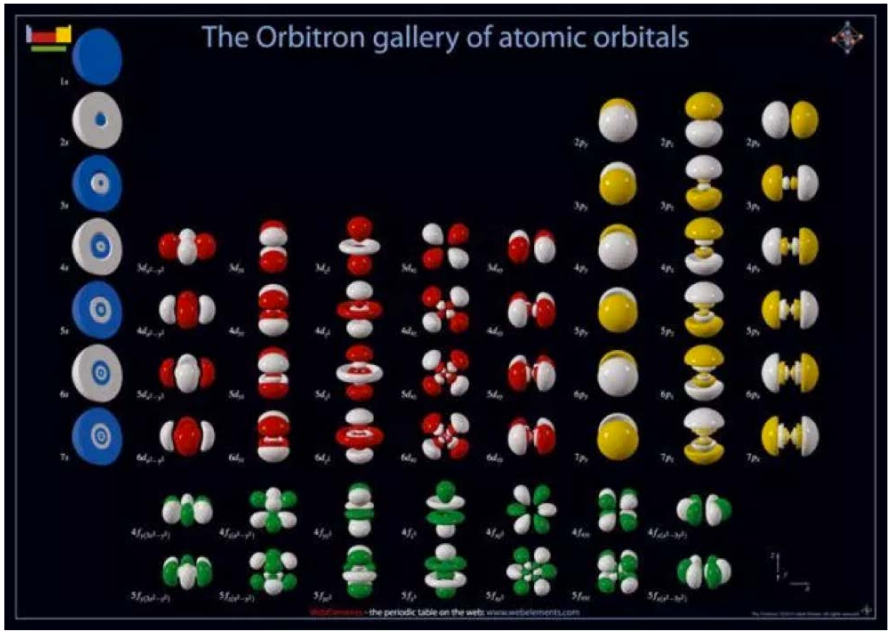
.

.

Cuando n **= x**, l adquiere tres valores: **0**, **1**, **2**, …, n*-1*

2.2 Números cuánticos

Como se mencionó anteriormente, los orbitales son formas geométricas que describen los electrones al moverse en el interior del átomo. Estas formas geométricas son diferentes para cada valor de l y a cada orbital se le asigna una literal.

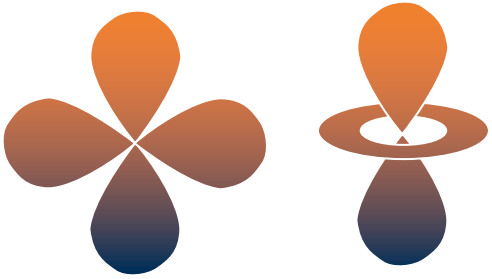


2.2 Números cuánticos

Entonces si:

$l = 0$ **Orbital s**

$l = 1$ **Orbital p**

$l = 2$  **Orbital d**

2.2 Números cuánticos

Cuando $l = 3$, los orbitales son del tipo **f**; cuando $l = 4$, los orbitales son del tipo **g** y a partir de aquí, se van asignando las letras siguientes del abecedario. Conforme aumenta el valor de l, aumenta la complejidad de la figura geométrica que describe el electrón; de hecho, aún no se han determinado las formas que presentan los orbitales del tipo **g**.

2.2 Números cuánticos

b. *Número magnético* (m_l):

El número cuántico magnético, se denota con una letra ***m*** y sus valores indican las orientaciones que tienen los orbitales en el espacio.

2.2 Números cuánticos

Para cada valor de l, m adquiere diferentes valores enteros que van desde $-l$ hasta $+l$, pasando por **cero**; por ejemplo:

Cuando $l = 0$, m adquiere un solo valor: **0**

Cuando $l = 1$, m adquiere tres valores: **–1, 0** y **+1**

Cuando $l = 2$, m adquiere cinco valores: **–2, –1, 0, +1** y **+2**

.
.
.

Cuando $l = n-1$, m adquiere **2n-1** valores: –(**n-1**), …, **–1, 0, +1, …,** (**n-1**)

2.2 Números cuánticos

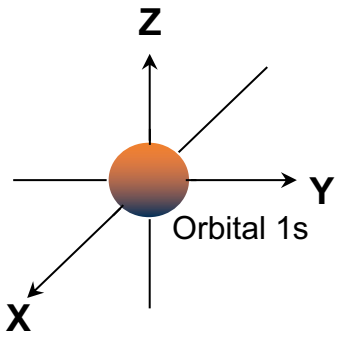
Por lo tanto, para las tres primeras órbitas de un átomo, se tienen los siguientes números cuánticos, de acuerdo a la tabla siguiente:

	1a. Órbita	2a. Órbita			3a. Órbita								
n	1	2			3								
l (Orbital)	0 (s)	0 (s)	1 (p)		0 (s)	1 (p)			2 (d)				
m	0	0	-1	0	+1	0	-1	0	+1	-2	-1	0	+1	+2

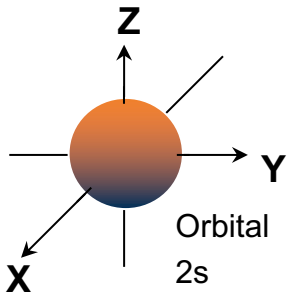
2.2 Números cuánticos

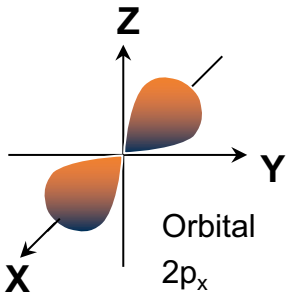
	1a. Órbita	2a. Órbita				3a. Órbita								
n	1	2				3								
l (Orbital)	0 (s)	0 (s)	1 (p)			0 (s)	1 (p)			2 (d)				
m	0	0	-1	0	+1	0	-1	0	+1	-2	-1	0	+1	+2

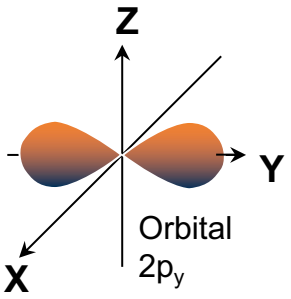
1a. Órbita

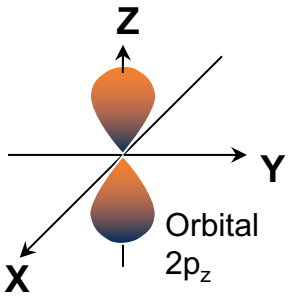


2a. Órbita





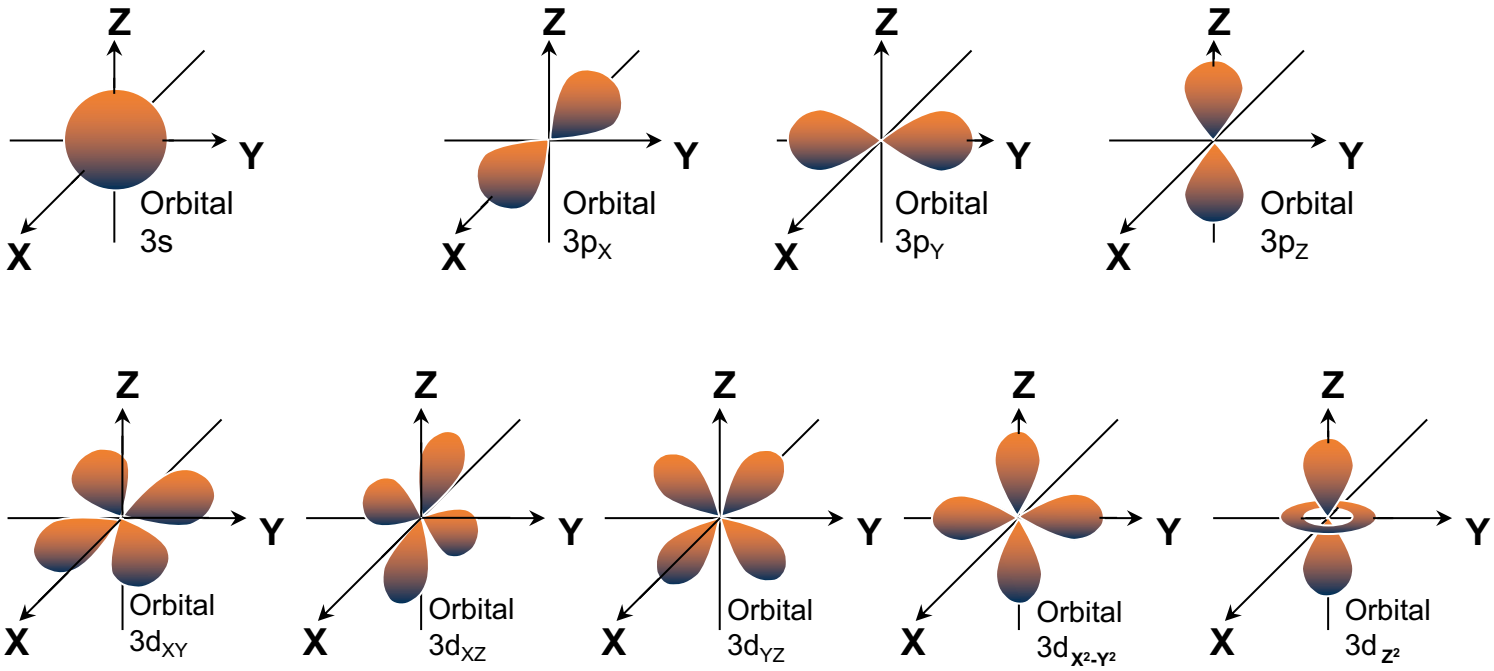




2.2 Números cuánticos

	1a. Órbita	2a. Órbita				3a. Órbita								
n	1	2				3								
l (Orbital)	0 (s)	0 (s)	1 (p)			0 (s)	1 (p)			2 (d)				
m	0	0	-1	0	+1	0	-1	0	+1	-2	-1	0	+1	+2

3a. Órbita



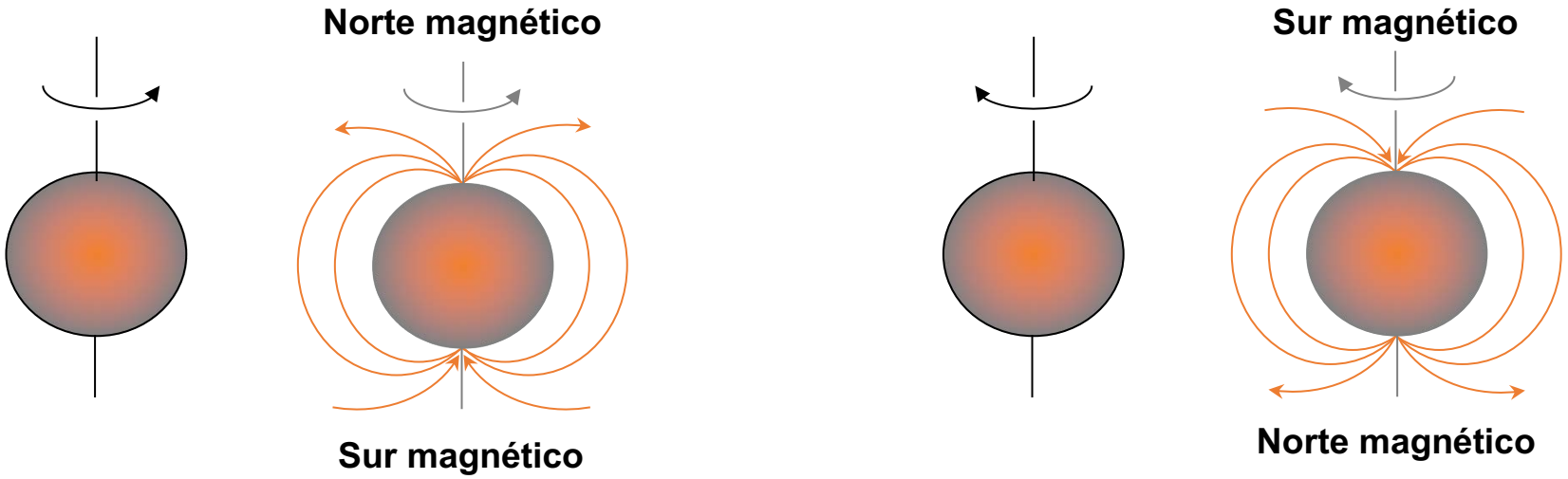
2.2 Números cuánticos

Al emplear los parámetros n, l y m en la ecuación de onda de onda de Schrödinger, fue un gran avance para conocer la estructura electrónica del átomo y permitió justificar muchas características físicas y químicas de los elementos. Pero fue necesario introducir un cuarto número cuántico, para considerar los efectos magnéticos y poder explicar el diamagnetismo y paramagnetismo de los átomos de los elementos.

2.2 Números cuánticos

b. *Número cuático de espín o de giro* (m_s):

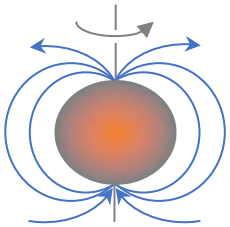
Este número tiene dos valores por cada valor del número cuántico m_l; los valores son +½ y -½, y denotan los dos posibles giros del electrón alrededor de su propio eje.



2.2 Números cuánticos

EJEMPLOS

Hidrógeno: número atómico 1



Orbital → **1s**

Números cuánticos del electrón →

$n = 1$

$l = 0$

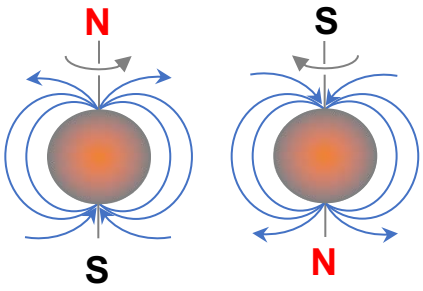
$m_l = 0$

$m_s = +1/2$

PARAMAGNÉTICO

2.2 Números cuánticos

Helio: número atómico 2



Orbital → **1s**

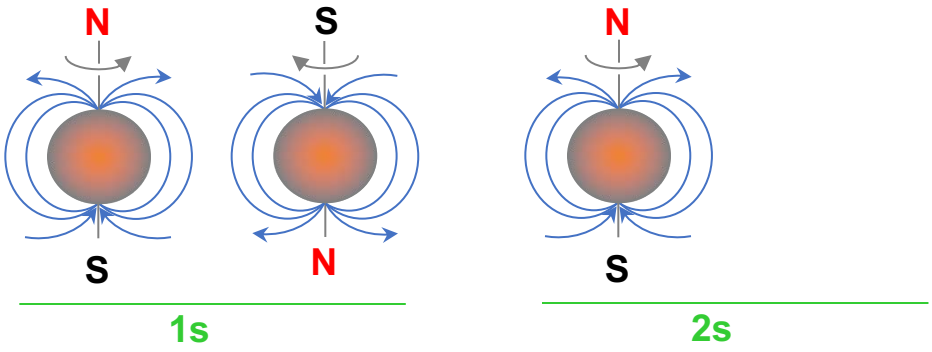
Números cuánticos de los electrones →

n = 1	n = 1
l = 0	l = 0
m = 0	m = 0
s = +1/2	s = -1/2

DIAMAGNÉTICO

2.2 Números cuánticos

Litio: número atómico 3

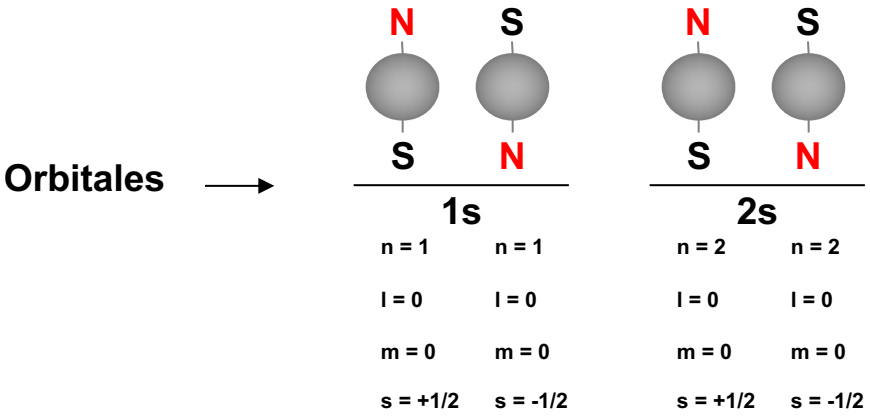


Números cuánticos de los electrones			
	n = 1	n = 1	n = 2
	l = 0	l = 0	l = 0
	m = 0	m = 0	m = 0
	s = +1/2	s = -1/2	s = +1/2

PARAMAGNÉTICO

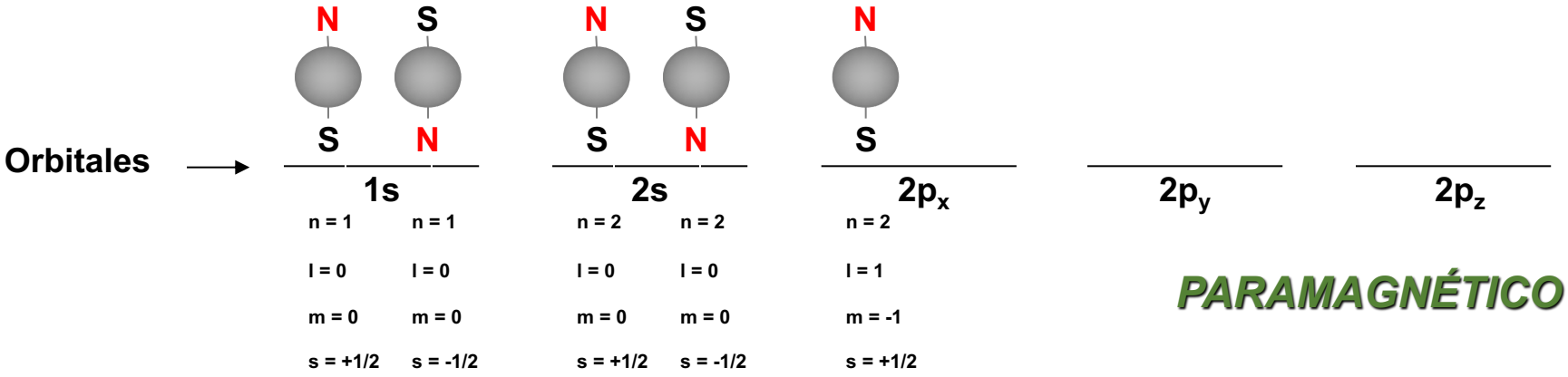
2.2 Números cuánticos

Berilio: número atómico 4



DIAMAGNÉTICO

Boro: número atómico 5



PARAMAGNÉTICO

2.2 Números cuánticos

CUESTIONARIO DE REPASO

Enunciado:

a) El número cuántico ___ indica el tipo de orbital que describe el electrón.

Presiona el número que corresponde a tu elección aquí

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

Opciones

1 Esférica
2 p
3 De 0 a infinito
4 d
5 De $-l$ a $+l$
6 Secundario
7 Diamagnético
8 s
9 De 0 a n
10 Con dos lóbulos
11 Magnético
12 Paramagnético
13 Principal
14 De espín

2.2 Números cuánticos

CUESTIONARIO DE REPASO

Enunciado:

b) Cuando el número cuántico azimutal adquiere el valor de 2, el orbital es del tipo ___.

Presiona el número que corresponde a tu elección aquí

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

Opciones

1 Esférica
2 p
3 De 0 a infinito
4 d
5 De $-l$ a $+l$
6 Secundario
7 Diamagnético
8 s
9 De 0 a n
10 Con dos lóbulos
11 Magnético
12 Paramagnético
13 Principal
14 De espín

2.2 Números cuánticos

CUESTIONARIO DE REPASO

Enunciado:

c) El número cuántico ___, se denota con una letra

m

Presiona el número que corresponde a tu elección aquí

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

Opciones

1 Esférica
2 p
3 De 0 a infinito
4 d
5 De $-l$ a $+l$
6 Secundario
7 Diamagnético
8 s
9 De 0 a n
10 Con dos lóbulos
11 Magnético
12 Paramagnético
13 Principal
14 De espín

2.2 Números cuánticos

CUESTIONARIO DE REPASO

Enunciado:

d) El número cuántico magnético, adquiere valores que van ___.

Presiona el número que corresponde a tu elección aquí

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

Opciones

1 Esférica
2 p
3 De 0 a infinito
4 d
5 De $-l$ a $+l$
6 Secundario
7 Diamagnético
8 s
9 De 0 a n
10 Con dos lóbulos
11 Magnético
12 Paramagnético
13 Principal
14 De espín

2.2 Números cuánticos

CUESTIONARIO DE REPASO

Enunciado:

e) Cuando un átomo tiene electrones desapareados, se dice que es un átomo ___.

Presiona el número que corresponde a tu elección aquí

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

Opciones

1 Esférica
2 p
3 De 0 a infinito
4 d
5 De $-l$ a $+l$
6 Secundario
7 Diamagnético
8 s
9 De 0 a n
10 Con dos lóbulos
11 Magnético
12 Paramagnético
13 Principal
14 De espín

2.2 Números cuánticos

CUESTIONARIO DE REPASO

Enunciado:

f) El número cuántico ___ indica la órbita o nivel energético en el que se encuentra el electrón.

Presiona el número que corresponde a tu elección aquí

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

Opciones

1 Esférica
2 p
3 De 0 a infinito
4 d
5 De $-l$ a $+l$
6 Secundario
7 Diamagnético
8 s
9 De 0 a n
10 Con dos lóbulos
11 Magnético
12 Paramagnético
13 Principal
14 De espín

2.2 Números cuánticos

CUESTIONARIO DE REPASO

Enunciado:

g) Cuando el número cuántico secundario adquiere el valor de cero, la forma geométrica que describe el electrón es ___.

Presiona el número que corresponde a tu elección aquí

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

Opciones

1 Esférica
2 p
3 De 0 a infinito
4 d
5 De $-l$ a $+l$
6 Secundario
7 Diamagnético
8 s
9 De 0 a n
10 Con dos lóbulos
11 Magnético
12 Paramagnético
13 Principal
14 De espín

2.3 Configuración electrónica

Es la combinación de los estados cuánticos que son solución de la ecuación de Schrödinger para un átomo y representa la distribución de los electrones en los diferentes orbitales en las capas principales y subcapas.

También representa simbólicamente la disposición de los electrones de un átomo en los diferentes subniveles (s, p ,d y f).

Las configuraciones electrónicas permiten entender la formación de los enlaces quimicos que forman a las sustancias químicas a partir de reacciones químicas.

2.3 Configuración electrónica

Se basa en tres reglas o principios que rigen la configuración electrónica:

1. PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI

En un mismo átomo no pueden existir dos electrones con sus cuatro números cuánticos iguales.

Ejemplo, si se tienen dos electrones en el mismo subnivel, **2px**, sus números cuánticos de espin deben ser diferentes: **+1/2** y **-1/2**, ya que **n, l** y **ml** son iguales para ambos electrones **(2, 1 y -1)**; es decir, **(2, 1, -1, +1/2)** y **(2, 1, -1, -1/2).**

2.3 Configuración electrónica

2. PRINCIPIO DE MINÍMA ENERGÍA (AUFBAU O DE LLENADO)

Rige el orden de llenado de los diferentes niveles y subniveles. Primero se llenan los orbitales de menor energía y después los de mayor energía

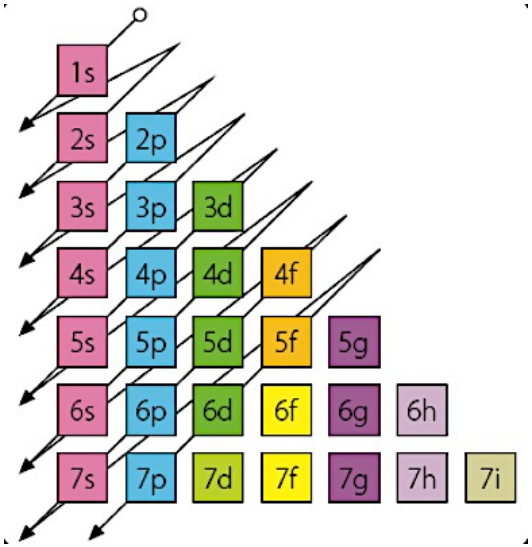


Diagrama de Moeller.

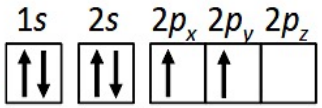
Excepciones a la regla general: Cu, Ag, Au, La

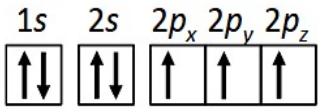
2.3 Configuración electrónica

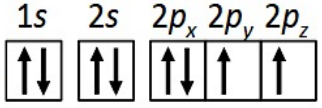
3. PRINCIPIO DE MÁXIMA MULTIPLICIDAD DE HUND

Los electrones, al ocupar un subnivel, se distribuyen en el mayor número posible de orbitales de forma que sus spines sean paralelos (máxima multiplicidad o desapareamiento máximo). Al ocupar diferentes orbitales, los electrones permanecen tan alejados uno de otro como es posible, minimizando las repulsiones electrón-electrón.

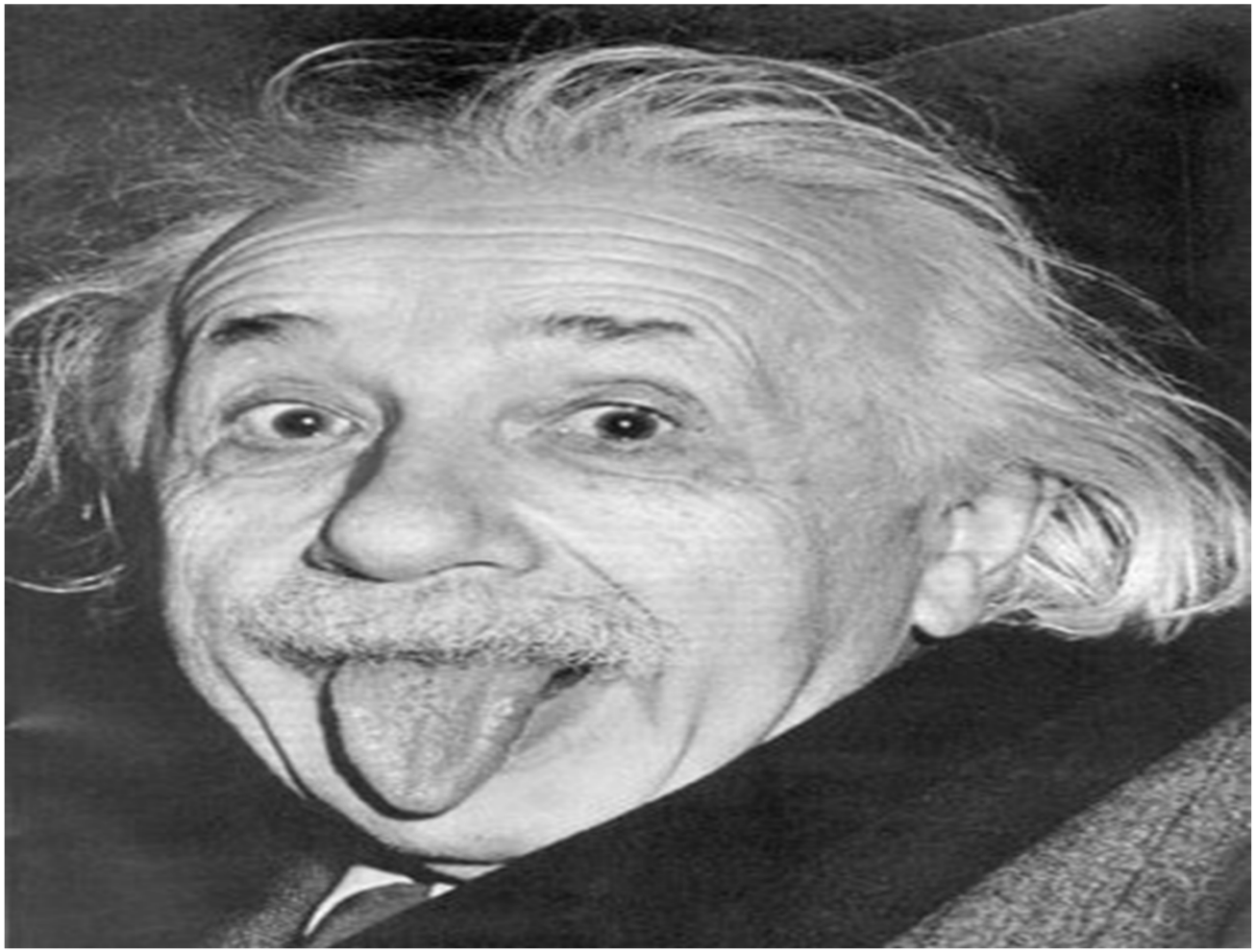
Ejemplo: En el caso de los orbitales p entrarán uno en cada orbital.

- C (6 electrones): $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ → 

- N (7 electrones): $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$ → 

- O (8 electrones): $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$ → 

FIN DE LA UNIDAD



GRACIAS

REFERENCIAS

1. Donald R. Askeland, “Ciencia e Ingeniería de los Materiales”, International Thomson Editores, 4ta edición México D.F. 2004.
2. Michael F. Ashby, David R. H. Jones. “Engineering Materials1. An Introduction to Properties, Applications and Design”, Editorial Reverte, 1ra edition, Barcelona España 2008.
3. Maria Isabel Cabello Bravo, “Química 2”, Ed. Cal y Canto, Universidad de Chile, 2011.
4. Alfredo Velásquez Márquez, “Presentación números cuánticos”, Profesor de Carrera de la División de Ciencias Básicas de la Facultad de Ingeniería de la UNAM.
5. Cecilia Avendaño, “Química III”, Profesora del Coegio de Química de la UNAM.
6. Edmundo Olave San Martín “Presentación enlace químico”, Profesor de Química, Universidad de Chile.
7. William D. Callister, Jr. “Introducción a la Ciencia e Ingeniería de los Materiales”, Editorial Reverte, 1ra edición, Barcelona España 2004.
8. James F. Shackelford, “Introducción a la Ciencia de Materiales para Ingenieros”, Editorial Pearson, 6ta edición, Madrid España 2005.