Tema 0: Introducción

- Leyes de la Química. Concepto de mol.
- Teoría atómica.
- Estructura de la materia.
- Espectros atómicos.
- El átomo de Bohr.
- Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos.
- Orbitales atómicos hidrogenoides.
- Átomos polielectrónicos.
- Configuraciones electrónicas.
- Tabla periódica y propiedades periódicas.
- Fórmula empírica y fórmula molecular.
- Peso atómico y Peso molecular.
- Compuestos químicos.

Leyes de la Química. Concepto de mol.

QUIMICA: Ciencia que estudia la estructura, propiedades y transformaciones de la materia a partir de su composición atómica.

Ley de conservación de la masa: En toda reacción química la masa se conserva, es decir, la masa consumida de los reactivos es igual a la masa obtenida de los productos. (Antoine-Laurent de Lavoisier, *Traité élémentaire de Chimie*, 1789)

Leyes de la Química. Concepto de mol.

Ley de las proporciones recíprocas: Las masas de los elementos que se combinan con una masa de un tercero, guardan la misma proporción que las masas de los dos cuando se combinan entre sí. (Jeremías Richter, 1792)

Ley de las proporciones definidas: Cuando se combinan dos o más elementos para dar un determinado compuesto, siempre lo hacen en una relación de masas constantes. (Joseph Proust, 1794-1804)

Ley de los volúmenes de combinación: Los volúmenes de los gases que intervienen en una reacción química (tanto de reactivos como de productos) están en la proporción de números enteros sencillos. (Louis Joseph Gay-Lussac, 1778-1850)

Ley de las proporciones múltiples: Cuando dos elementos se combinan para originar diferentes compuestos, fijada la cantidad de uno, las cantidades del otro que se combinan para dar los compuestos están en relación de números enteros sencillos. (John Dalton, 1803)

Hipótesis atómica de Dalton (I)

- Las sustancias elementales no pueden descomponerse.
- Las sustancias, simples o compuestas, tienen siempre las mismas propiedades características.
- Los elementos no desaparecen al formarse un compuesto, pues se pueden recuperar por descomposición de éste.
- La masa se conserva en las reacciones químicas.
- La proporción de los elementos que forman un compuesto es constante.
- La materia es discontinua; esta formada por átomos que son partículas indivisibles.
- Todos los átomos de un mismo elemento son iguales, tienen la misma masa y átomos de diferentes elementos difieren en su masa.
- Los átomos de diferentes elementos se combinan para formar átomos compuestos.

Hipótesis atómica de Dalton (II)

- Los cambios químicos son cambios en las combinaciones de los átomos entre sí, los átomos no se crean ni se destruyen.
- Los átomos que se combinan para formar un compuesto lo hacen siempre en la misma proporción, es decir, que todos los átomos compuestos de una misma sustancia son iguales.
- Cuando se mezclan dos elementos, el átomo compuesto resultante contiene un átomo de cada uno.

Dificultades de la hipótesis de Dalton

- No explica por completo la ley de las proporciones múltiples.
- No distingue entre átomos y moléculas.
- No puede explicar por qué la densidad del vapor de agua (según él de fórmula: HO), es menor que la del oxígeno (según él: O).

Hipótesis de Avogadro (1811)

- Volúmenes iguales de distintas sustancias gaseosas, medidos en las mismas condiciones de presión y temperatura, contienen el mismo número de partículas.
- Para explicar esta ley, señaló que las moléculas de la mayoría de los gases elementales más habituales eran diatómicas.
- La hipótesis fue ignorada por la comunidad científica hasta que fue retomada por Stanislao Cannizzaro (1860).

El número de Avogadro: MOL

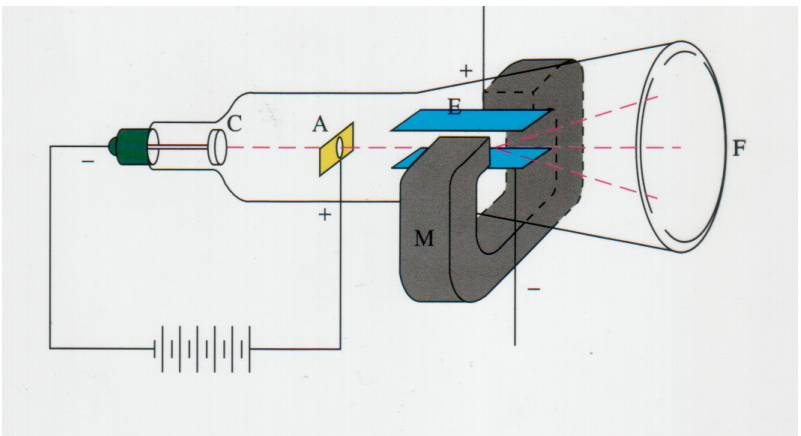
- La unidad de cantidad de materia en el Sistema Internacional es el mol.
- El número de moléculas (o átomos) que hay en un mol es una constante universal conocida como número de Avogadro.
- Su valor es: $N_A = 6.022\,141\,79(30) \cdot 10^{23}\ \text{mol}^{-1}$.
- La unidad de masa atómica (uma) es un doceavo de la masa del isótopo ^{12}C.
- El valor numérico de la masa de un mol de una sustancia en gramos coincide con el valor numérico de la masa de una molécula expresada en unidades de masa atómica (Peso molecular relativo): $1\ \text{uma} = 1\ \text{g mol}^{-1}$.

Rayos Catódicos

- William Crookes hacia 1860 construyó un tubo de vacío en el que introducía gases a baja presión. Al aplicarles un potencial eléctrico los gases producían fluorescencia.
- Comprobó que la fuorescencia es debida a rayos constituidos por partículas materiales: los **Rayos Catódicos**

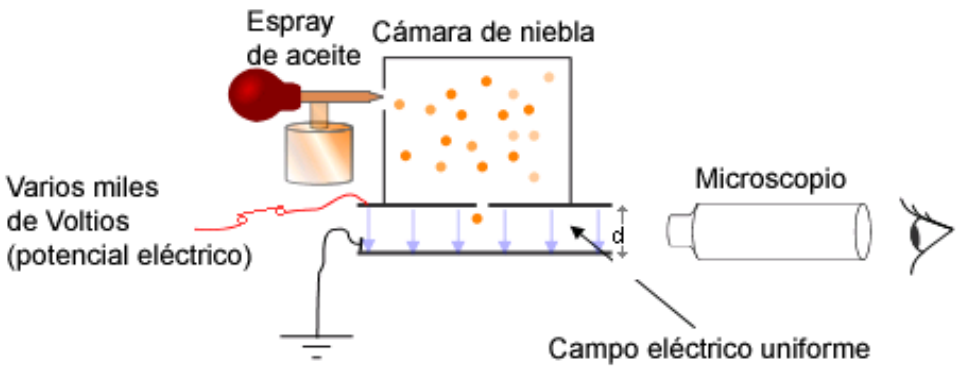
Descubrimiento del electrón

- Joseph John Thomson (1897) determinó la relación Q/m de los **Rayos Catódicos**
- Se considera que este experimento marca el descubrimiento del electrón



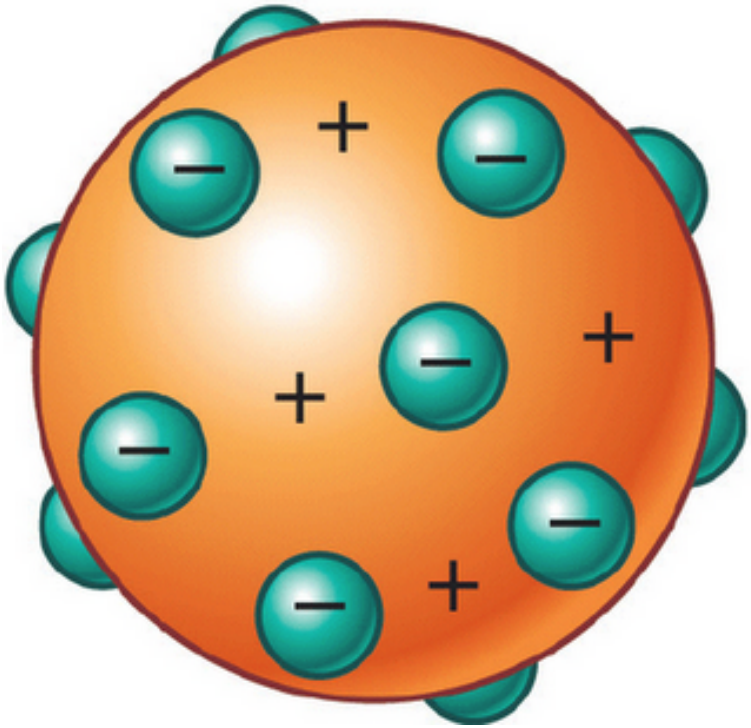
La carga del electrón: experimento de Millikan

- Robert Millikan determinó la carga del electrón en 1909 mediante el llamado *experimento de la gota de aceite*.



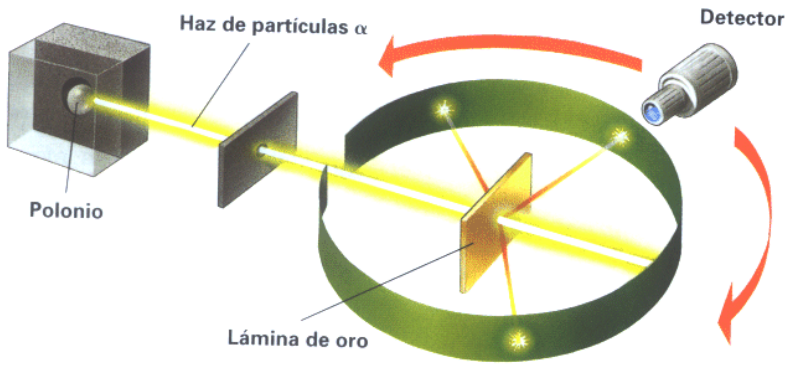
Teoría atómica

Modelo atómico de Thomson



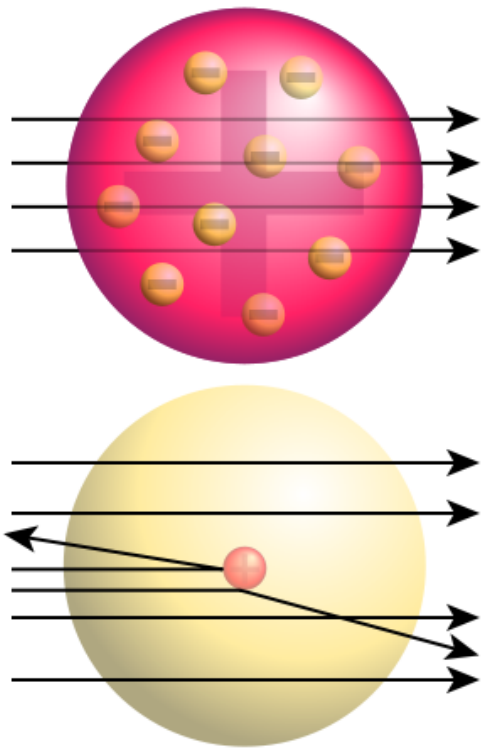
Experimento de Rutherford

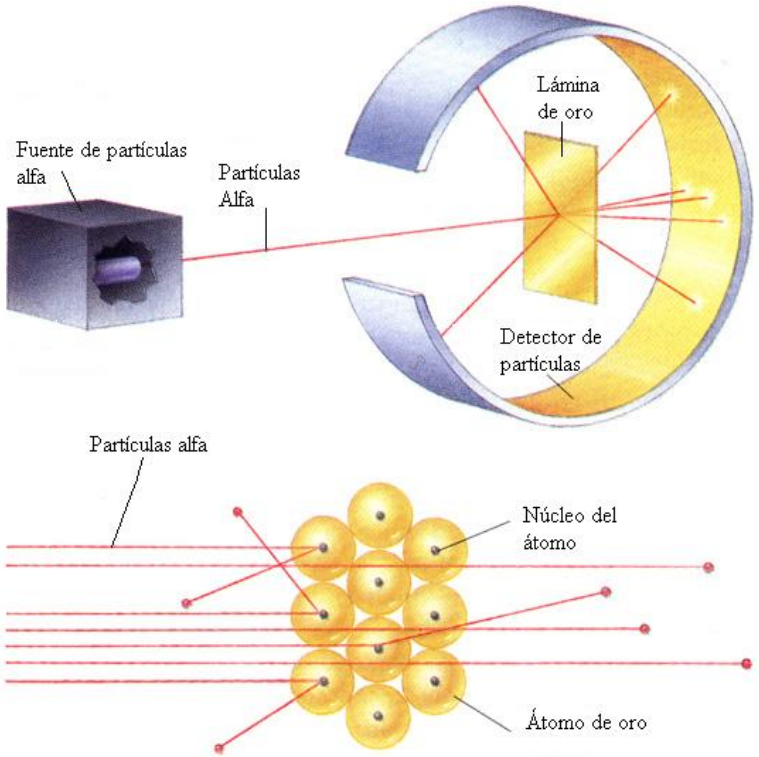
Realizado por Hans Geiger y Ernest Marsden en 1909 bajo la dirección de Ernest Rutherford.



Teoría atómica

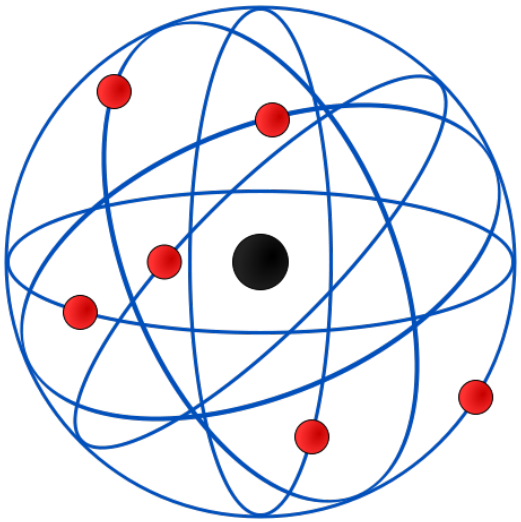
Interpretación del experimento de Rutherford





Modelo atómico de Rutherford

Rutherford fue capaz de ajustar matemáticamente la función de distribución angular de las partículas desviadas y a partir de este ajuste, en 1911, estimó que el tamaño del núcleo atómico debía estar entre 10^{-12} y 10^{-13} cm, mucho menor que el radio atómico conocido (10^{-8} cm)



El descubrimiento del protón

- Una de las consecuencias del modelo de Rutherford es que la carga positiva de los átomos se concentra en una región muy pequeña del espacio: el núcleo atómico.
- Eugene Goldstein en 1886 observó que un tubo de rayos catódicos genera una corriente de partículas cargadas positivamente: los *Rayos Canales*.
- En 1919 Ernest Rutherford, al bombardear nitrógeno con partículas α, encontró destellos que asoció a la presencia de núcleos de hidrógeno.
- En principio pensó que provenían de su fuente de radiación α. Luego vio que provenían del nitrógeno, que a su vez se transformaba en oxígeno por la colisión con las partículas α.
- Había descubierto la existencia del protón.
- Rutherford consideró que los núcleos estaban constituidos por electrones y protones (dos electrones y cuatro protones en el caso de las partículas α).

El descubrimiento del neutrón

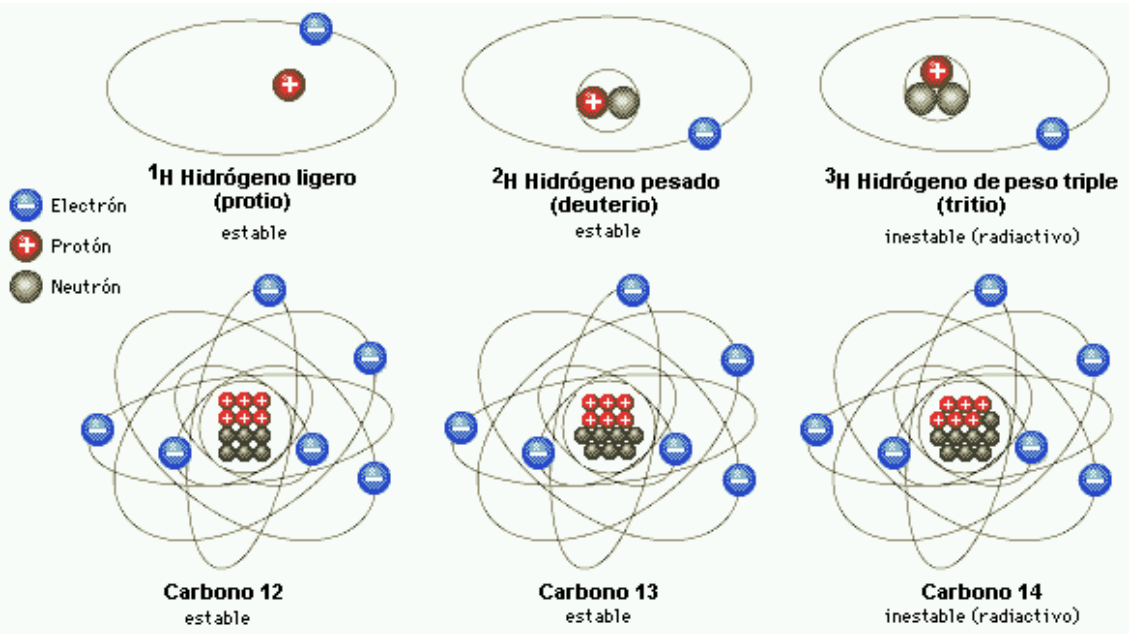
- Rutherford sugirió que en interior del núcleo atómico un protón se podía unir a un electrón para producir una partícula neutra.
- J. L. Glasson, estudiante del Cavendish Laboratory, intentó encontrar el neutrón en un tubo de descarga con hidrógeno. Esperaba que algunos núcleos de hidrógeno (protones) chocaran con electrones y produjeran neutrones. Falló.
- En 1932, James Chadwick, un antiguo colaborador de Rutherford, fue capaz de localizar la presencia de neutrones.
- Chadwick encontró que el neutrón tiene una masa igual a 1.0067 veces la masa del protón, y no tiene carga eléctrica.

La estructura del núcleo

- De acuerdo con los descubrimientos de Rutherford y Chadwick, los núcleos están constituidos por protones y neutrones.
- Los protones son partículas cargadas cuya carga es $e = 1.602\,176\,487 \cdot 10^{-19}$ C, y cuya masa es $m_P = 1,672\,621\,637 \cdot 10^{-37}$ kg, unas 1836 veces la masa del electrón.
- Las partículas α son núcleos de helio.
- En la colisión de partículas α con otros átomos, se pueden producir *transmutaciones* de unos elementos en otros.
- El número de protones en un núcleo determina el elemento químico a que corresponde el átomo.

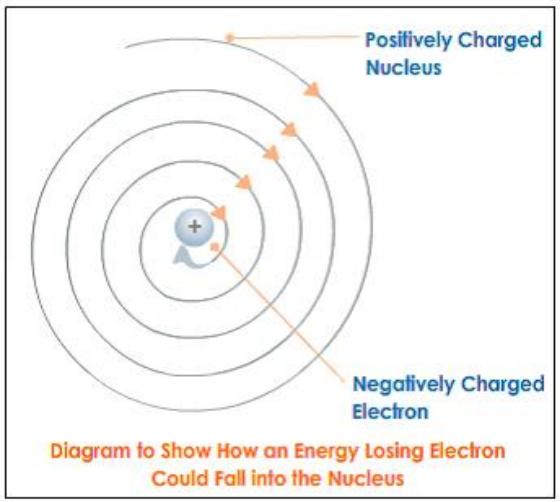
Isótopos

- **Isótopos**: elementos que existen en dos o más formas con diferentes pesos atómicos, pero idénticas químicamente (Frederick Soddy, 1913).
- Los isótopos de un elemento tienen el mismo número de protones en el núcleo pero difieren en el número de neutrones.



Interpretación del modelo atómico de Rutherford

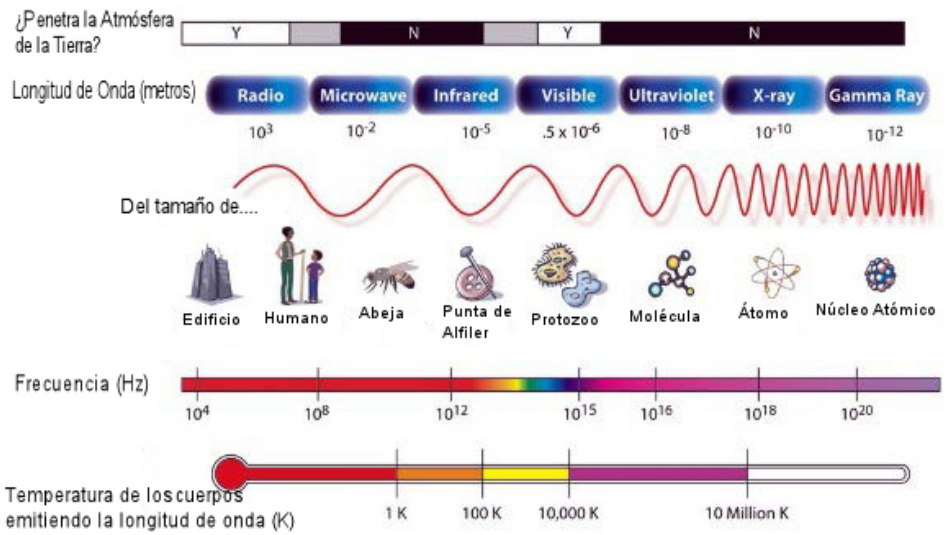
De acuerdo con el electromagnetismo clásico: una carga en movimiento acelerado emite energía en forma de radiación electromagnética (ondas).
Un electrón que describe una trayectoria cerrada está sometido a una aceleración y, por tanto, debe emitir energía.
Como consecuencia, el electrón acabaría por impactar sobre el núcleo.



Espectros atómicos

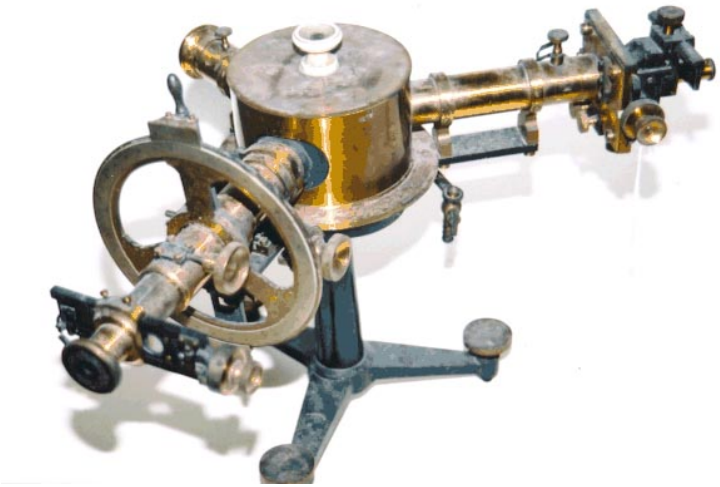
Ondas electromagnéticas

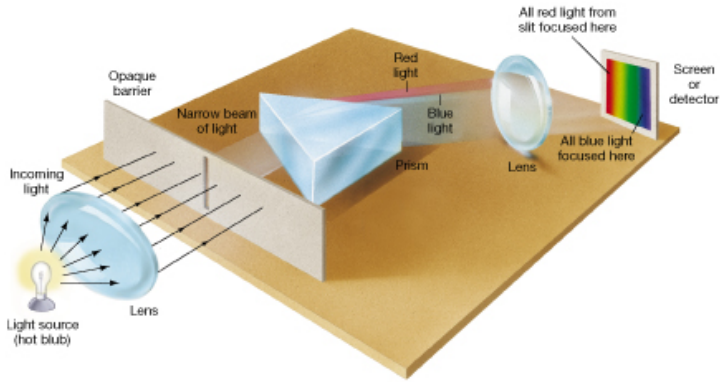
- Las ondas electromagnéticas implican variaciones de los campos magnéticos y eléctricos en el espacio.
- Transportan energía y momento lineal, pero carecen de masa.
- El conjunto de todas las radiaciones electromagnéticas forma el *espectro electromagnético*



Espectros atómicos

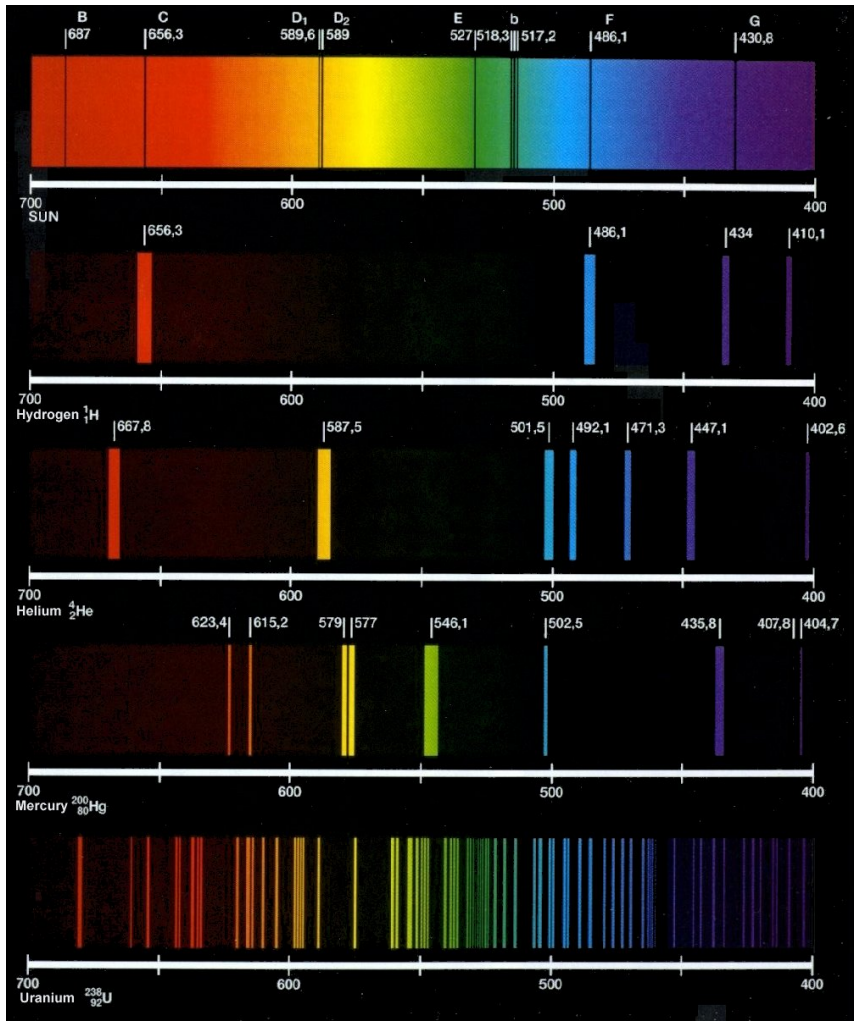
Espectroscopio





Espectros atómicos

- Cuando se calienta suficientemente un cuerpo, emite luz característica de su composición.
- En el caso de un átomo, esa luz corresponde a longitudes de onda muy definidas (líneas).
- El conjunto de esas líneas forman su *espectro atómico*



Espectros atómicos

Espectro visible del átomo de hidrógeno

- Johann Balmer en 1885 encontró una expresión matemática para las líneas del espectro visible:

$$\lambda = B\left(\frac{m^2}{m^2 - 2^2}\right) \qquad m = 3, 4, 5, 6$$

donde $B = 3.6456 \cdot 10^{-7}\text{m}$.

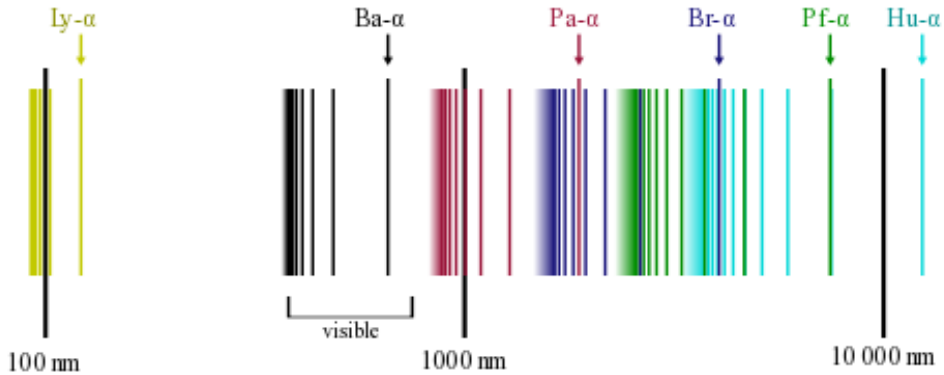
Espectros atómicos

Espectro completo del átomo de hidrógeno

- Johannes Rydberg en 1888 encontró una expresión matemática que permite generalizar la expresión de Balmer a las demás líneas del espectro del hidrógeno:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \qquad n_0 = 1, 2, 3...; \qquad n_1 = 2, 3, 4...; \qquad n_1 > n_0$$

donde $R = 1.0973731568525(73) \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$.

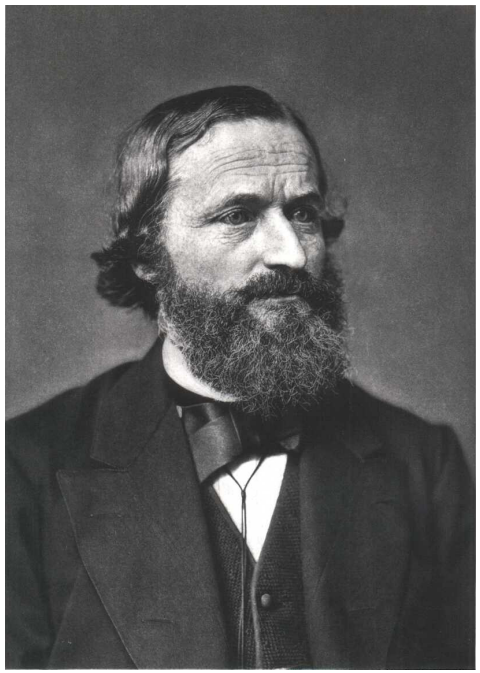


Longitudes de onda en escala logarítmica

$n_0 = 1,$	$n_1 = 2, 3, 4...$	Lyman
$n_0 = 2,$	$n_1 = 3, 4, 5...$	Balmer
$n_0 = 3,$	$n_1 = 4, 5, 6...$	Paschen
$n_0 = 4,$	$n_1 = 5, 6, 7...$	Brackett
$n_0 = 5,$	$n_1 = 6, 7, 8...$	Pfund
$n_0 = 6,$	$n_1 = 7, 8, 9...$	Humphreys

El átomo de Bohr

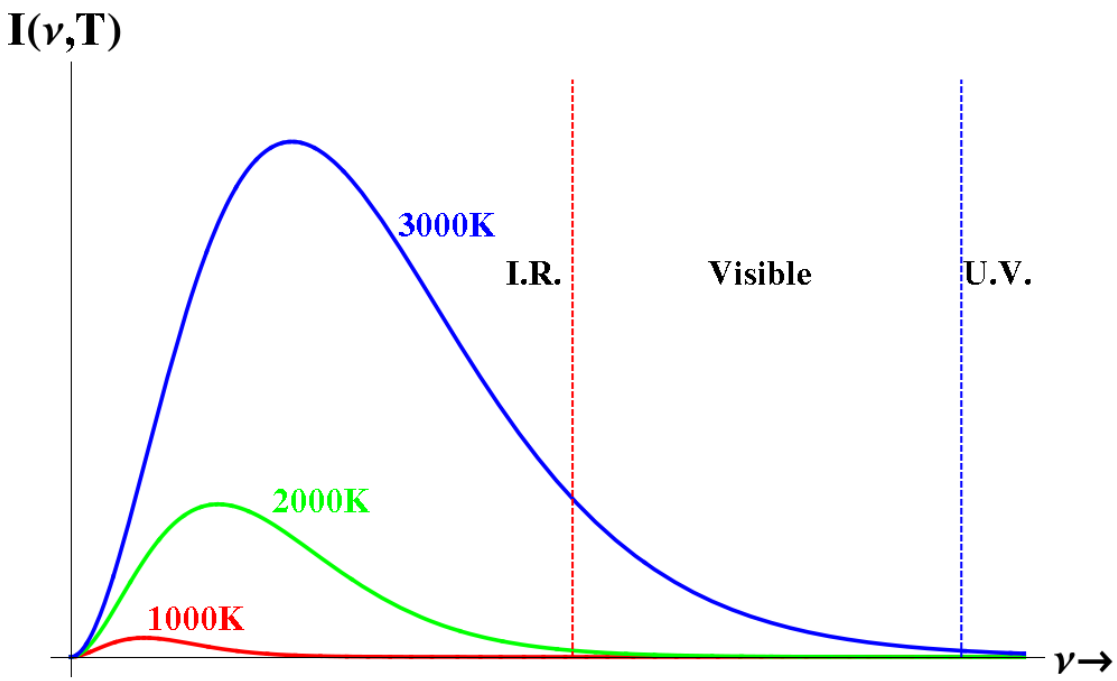
La radiación del cuerpo negro (Gustav Robert Kirchhoff, 1860)



- **Cuerpo negro**: sistema ideal capaz de absorber toda la radiación electromagnética.
- El cuerpo negro emite radiación electromagnética característica de su temperatura.

El problema de la radiación del cuerpo negro

A finales del siglo XIX se intentaba buscar una interpretación teórica a la ley de distribución que permitiese predecir la curva de emisión a partir del comportamiento de la radiación electromagnética y de las partículas que forman las paredes del cuerpo negro.



Interpretación de la radiación del cuerpo negro

Wilhelm Wien intentó en 1893 explicar las curvas a partir de argumentos termodinámicos:

$$I(\nu, T) = \frac{8\pi\, k_B\, \beta\, \nu^2}{c^3}\, e^{-\beta\, \nu / T}$$

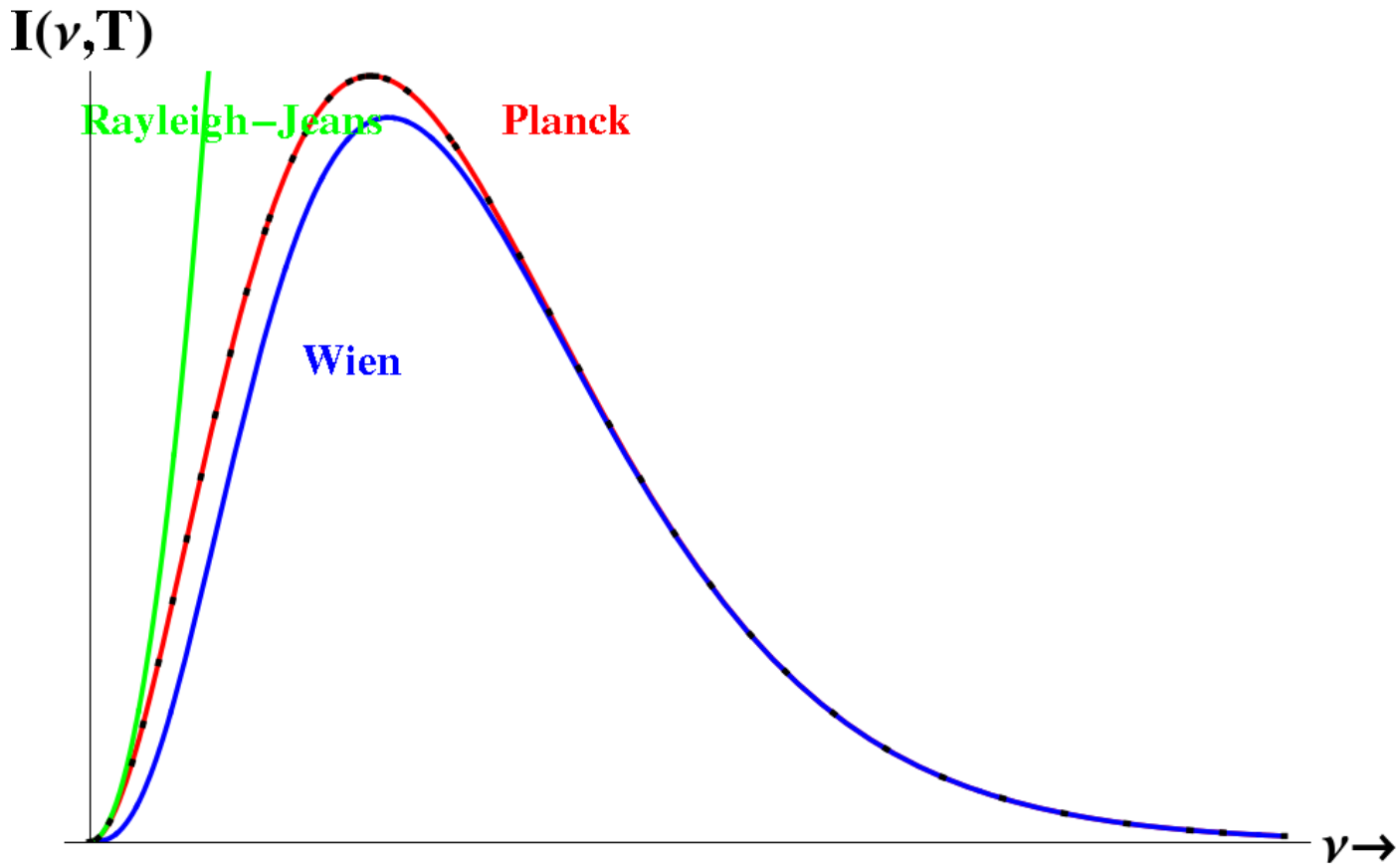
John William Strutt (lord Rayleigh) y James Jeans lo intentaron en 1900 a partir de la mecánica estadística clásica:

$$I(\nu, T) = \frac{8\pi\, \nu^2}{c^3}\, k_B\, T$$

Max Planck en 1900 ajustó los datos experimentales mediante:

$$I(\nu, T) = \frac{8\pi\, \nu^2}{c^3}\, \frac{h\, \nu}{e^{h\, \nu / k_B\, T} - 1}$$

Interpretación de la radiación del cuerpo negro



Interpretación de la radiación del cuerpo negro

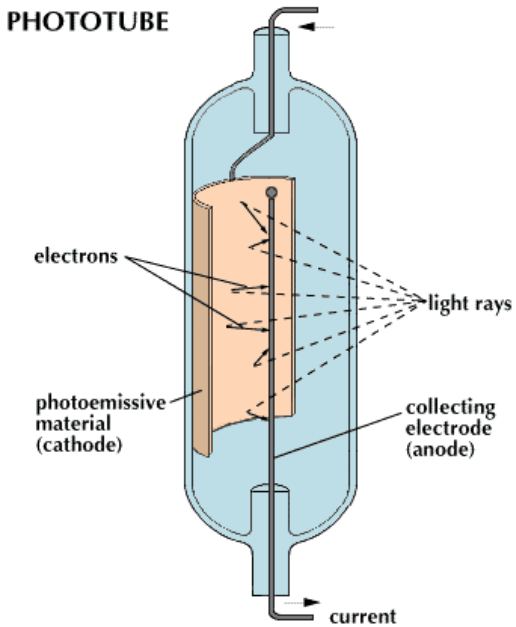
En su interpretación, Planck llegó a la conclusión que los sistemas que formaban las paredes del cuerpo negro se comportaban como osciladores que sólo podían aceptar o ceder energías en paquetes (o *cuantos*) tales que:

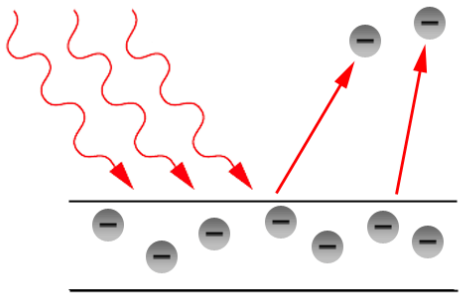
$$E = n\, h\, \nu$$

donde n es un número entero y h es una constante universal conocida como *constante de Planck*, cuyo valor es:
$h = 6.62606896(33) \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}$

El efecto fotoeléctrico

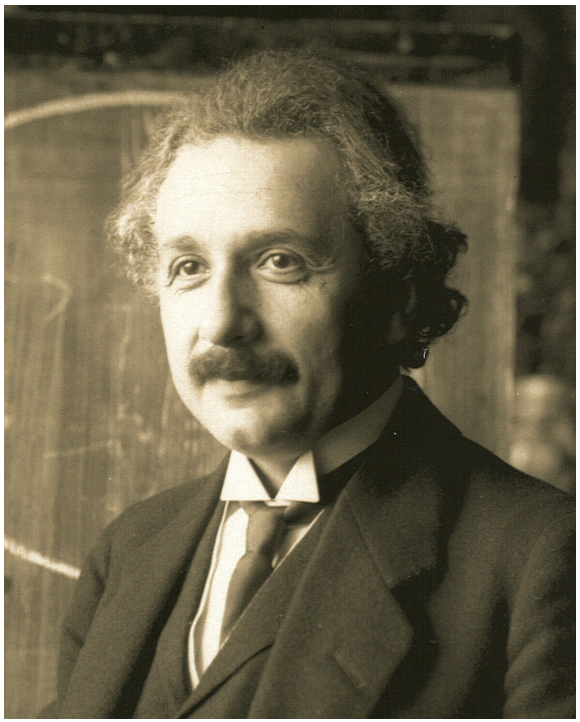
Heinrich Hertz, 1887
Consiste en la emisión de electrones por un material cuando se le ilumina con radiación electromagnética (luz visible o ultravioleta, en general).

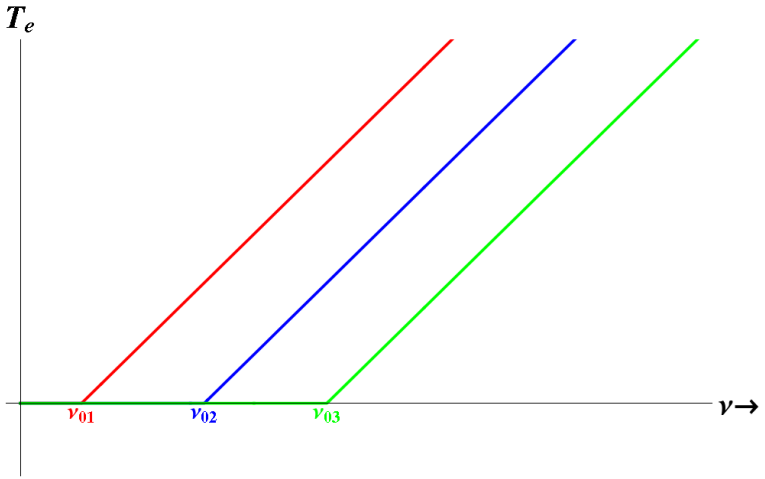




Interpretación del efecto fotoeléctrico

Albert Einstein, 1905





$$T_e = a\,(\nu - \nu_0)$$

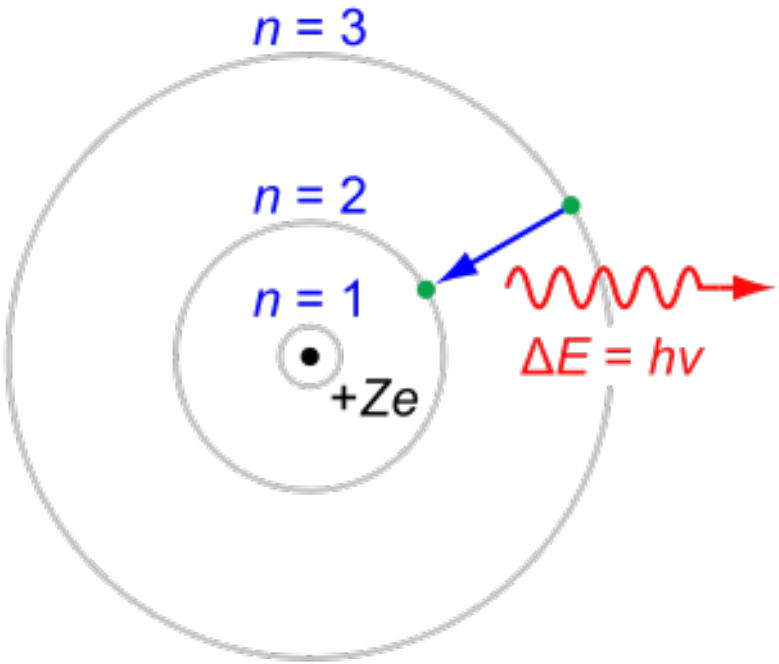
$$E_f = h\,\nu$$

$$T_e = E_f - E_0 = h\,(\nu - \nu_0)$$

Radiación electromagnética formada por paquetes (cuantos) de luz, los fotones, cuya energía es proporcional a su frecuencia.

El átomo de Bohr

Niels Bohr, 1913, propuso su modelo atómico basado en el de Rutherford.



Año 1908. Juegos Olímpicos de Londres. El primer torneo que reconoció el fútbol como deporte no de exhibición, sino de competición. Dinamarca perdió la final con Inglaterra, pero los daneses habían ganado 17-1 a Francia en la primera ronda. En ese equipo danés jugaba el físico Niels Bohr, que después ganaría el premio Nobel.

El átomo de Bohr

Postulados del modelo atómico de Bohr

- Los electrones se mueven en torno al núcleo en órbitas circulares sin emitir energía. No todas las órbitas están permitidas.
- Los electrones pueden saltar de una órbita a otra sin pasar por estados intermedios.
- El salto de un electrón de una órbita a otra implica la emisión o absorción de un único cuanto de luz (fotón) cuya energía corresponde a la diferencia de energía entre ambas órbitas.
- Las órbitas permitidas tienen valores discretos o cuantizados del momento angular orbital L de acuerdo con la siguiente ecuación: $L = n\,\hbar = n\,\frac{h}{2\pi}$

El modelo atómico de Bohr y el espectro del hidrógeno

- En el modelo de Bohr la energía de las órbitas permitidas es:

$$E_n = -\frac{m_e\ e^4}{8\,\epsilon_0^2\ h^2}\ \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6\text{eV}}{n^2} \qquad n = 1, 2... \tag{1}$$

- De acuerdo con el postulado sobre la absorción o emisión de fotones y teniendo en cuenta la relación entre energía y frecuencia del fotón:

$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = h\,\nu_{12} = h\,\frac{c}{\lambda} \tag{2}$$

- Despejando $1/\lambda$ en (2) y sustituyendo (1), se obtiene

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{h\ c}\,(E_{n_2} - E_{n_1}) = \frac{m_e\ e^4}{8\,\epsilon_0^2\ h^3\ c}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \tag{3}$$

- Que coincide con la fórmula de Rydberg, con

$$R_H = \frac{m_e\ e^4}{8\,\epsilon_0^2\ h^2\ c} = 1.097373156 \times 10^7\ \text{m}^{-1} \tag{4}$$

El átomo de Bohr

Éxitos y fracasos del modelo de Bohr

- Permite explicar el espectro del átomo de hidrógeno y el de los iones hidrogenoides.
- No permite explicar los espectros de átomos con más de un electrón.
- Es inconsistente desde el punto de vista físico: mezcla razonamientos basados en la física clásica con postulados que no se justifican en ella.

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Partículas y ondas

- Einstein propuso que en ciertas condiciones (efecto fotoeléctrico) las ondas electromagnéticas tienen un comportamiento corpuscular (partículas).
- Louis de Broglie, en su tesis doctoral, *Recherches sur la théorie des quanta*, propuso que los electrones pueden comportarse como ondas de longitud:

$$\lambda_e = \frac{h}{p}$$

- La predicción de de Broglie fue comprobada experimentalmente por Clinton Davisson y Lester Germer (1927) en un experimento de difracción de electrones.

La ecuación de ondas clásica

En el electromagnetismo clásico, la ecuación que describe el movimiento de una onda electromagnética es:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial t^2}$$

$\mathcal{E} \equiv \mathcal{E}(x, y, z, t)$

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

- En 1927, Erwing Schrödinger propuso una ecuación de onda para el movimiento del electrón:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right]+V\,\Psi=-\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\Psi\equiv\Psi(x,y,z,t)$$

- En el caso de estados cuya densidad de probabilidad no varía con el tiempo (estados estacionarios) la ecuación se reduce a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right]+V\,\psi=E\,\psi$$

$$\psi\equiv\psi(x,y,z)$$

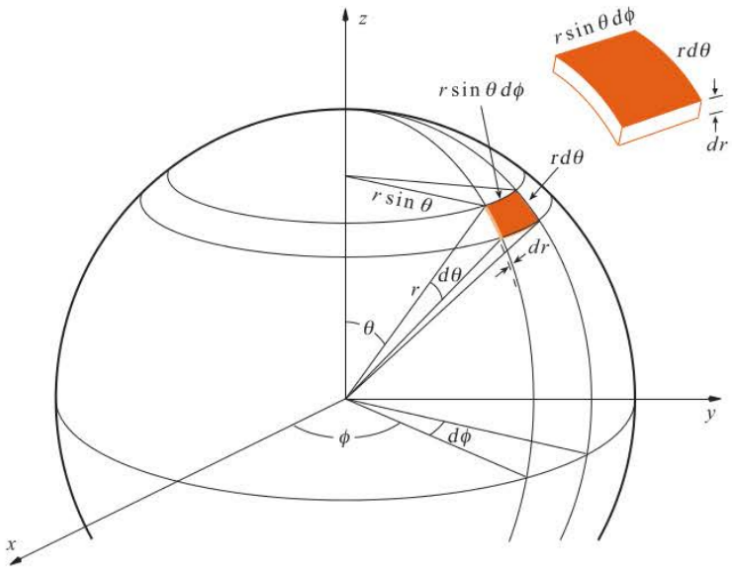
- que es la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*, y que se suele escribir como

$$\hat{H}\psi=E\,\psi$$

La ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

En el caso del átomo de hidrógeno, con simetría esférica, la ecuación se resuelve usando coordenadas polares esféricas:

$$\hat{H}\psi(r,\theta,\phi) = E\ \psi(r,\theta,\phi)$$



$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi & 0 \le r \le \infty \\ y &= r\sin\theta\sin\phi & 0 \le \theta \le \pi \\ z &= r\cos\theta & 0 \le \phi \le 2\pi \end{aligned}$$

El elemento de volumen es:

$$d\tau = dx\ dy\ dz = r^2 \sin\theta\ dr\ d\theta\ d\phi$$

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

El átomo de Hidrógeno ($Z = 1$) es el más simple, donde el electrón y el protón interactúan mediante un potencial de Coulomb:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

donde el factor $4\pi\epsilon_0$ surge del uso de unidades del sistema internacional (SI), en el sistema de unidades atómicas esta ecuación se simplificaría a $V(r) = -\frac{Z}{r}$. y la ecuación de Schrödinger es:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(r,\theta,\phi) + V(r)\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi)}$$

donde ∇^2 es el operador laplaciano en coordenadas esféricas:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

y sustituyendo en la ecuación de Schrödinger y multiplicando todo por $2m_e r^2$:

$$-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}\right) - \hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}\right] + 2m_e r^2 \left[V(r) - E\right]\psi = 0$$

Puede comprobarse que el segundo término de la ecuación anterior es la acción del operador $\widehat{L}^2$ sobre la función ψ y podemos escribirla:

$$-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \widehat{L}^2\psi + 2m_e r^2[V(r) - E]\psi = 0$$

Los términos primero y tercero dependen sólo de r y el segundo término sólo de θ y ϕ por lo que podemos factorizar la función de onda

orbitales

$$\psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\phi) = R_{n,\ell}(r)\,Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

Las soluciones de la ecuación Angular para el átomo de hidrógeno

Sólo es posible conocer con precisión de manera simultánea el cuadrado del momento angular $\widehat{L}^2$ y una de sus componentes ($\widehat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$). Las funciones propias, $Y_\ell^m(\theta,\phi)$, reciben el nombre de **armónicos esféricos** y serán comunes a ambos operadores:

$$\widehat{L}^2 \cdot Y_\ell^m(\theta,\phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 \cdot Y_\ell^m(\theta,\phi)$$
$$\widehat{L}_z \cdot Y_\ell^m(\theta,\phi) = m\hbar \cdot Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

con los números cuánticos m y ℓ que cumplen:

$$m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots, \pm\ell; \qquad \ell \geq |m|$$
$$m = -\ell, -\ell+1, \ldots, 0, \ldots, +\ell-1, +\ell$$

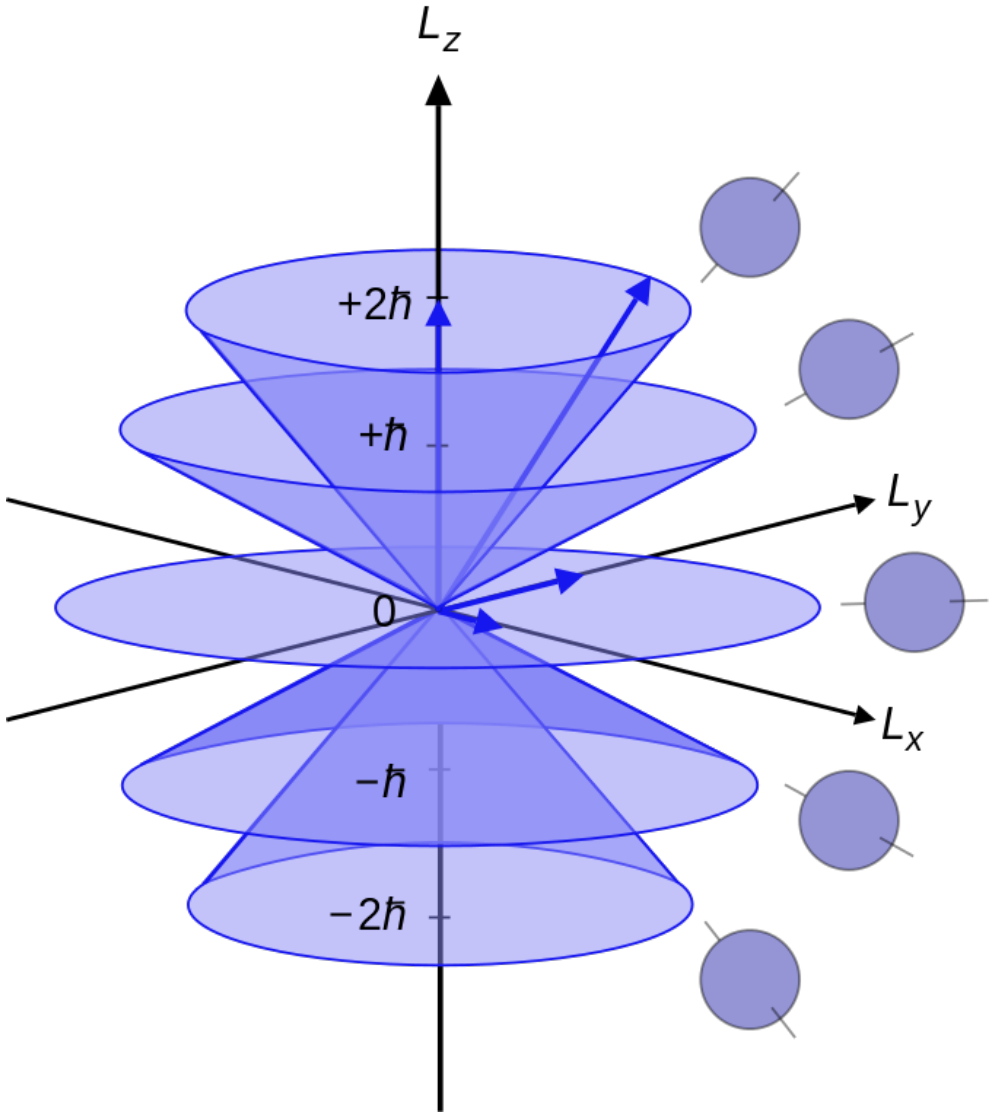
Los armónicos esféricos tienen la siguiente forma:

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^m \left[\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}\right] \cdot P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}$$

Las soluciones de la ecuación Angular para el átomo de hidrógeno

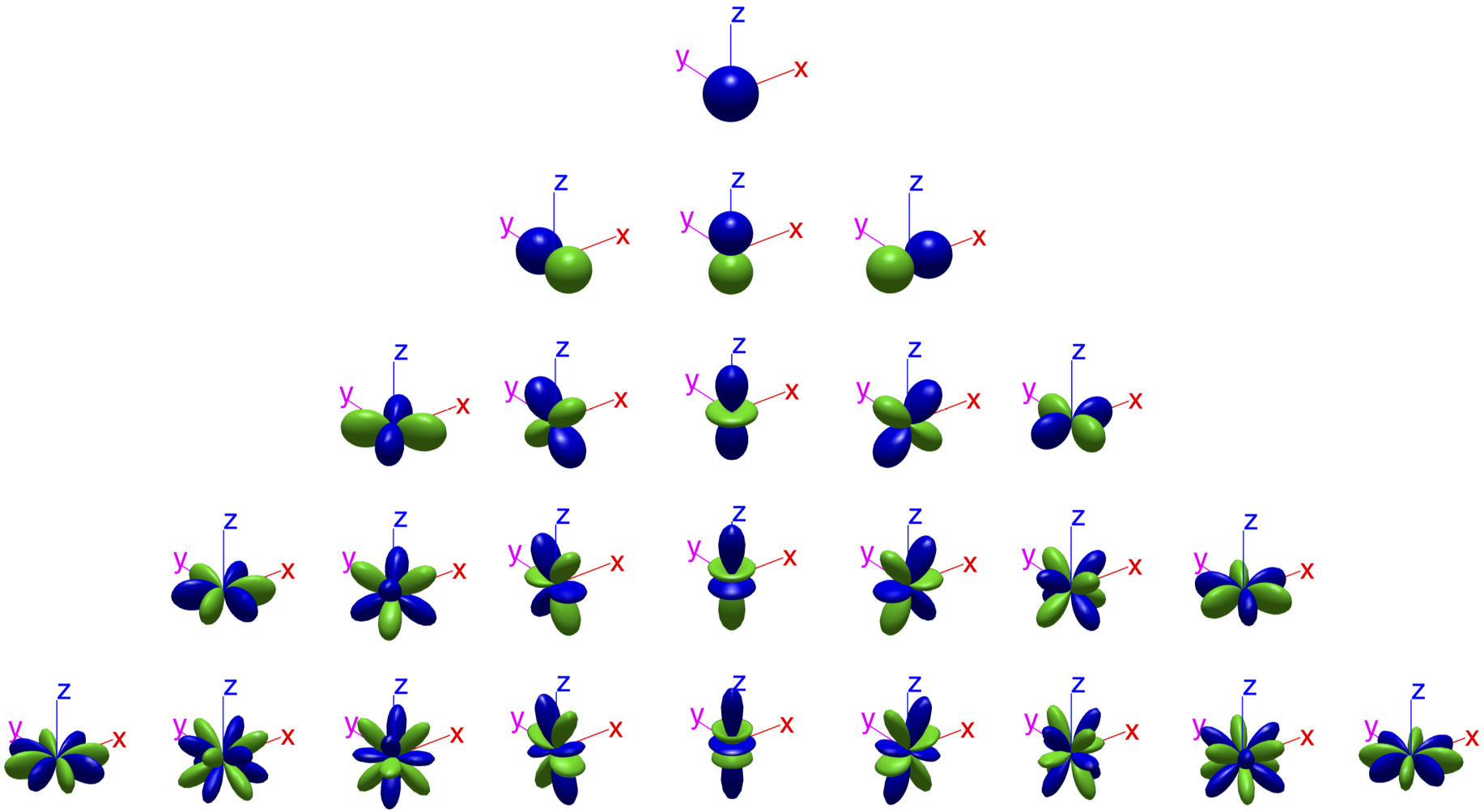
El vector $\vec{L}$ se encuentra en un cono pero desconocemos sus componentes L_x y L_y ya que sus operadores no conmutan con $\widehat{L}_z$ ni con $\widehat{L}^2$

Ejemplo con $\ell = 2, \quad |\vec{L}| = \sqrt{6}\hbar$



Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Armónicos Esféricos (reales)



Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Las soluciones de la ecuación Radial para el átomo de hidrógeno

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{n,\ell}}{dr}\right)+\left[\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}+V(r)-E\right]R_{n,\ell}(r)=0$$

$$E=-\frac{Z^2e^2}{4\pi\epsilon_0 2a_0 n^2},\quad n=1,2,\ldots\quad 0\leq\ell\leq n-1$$

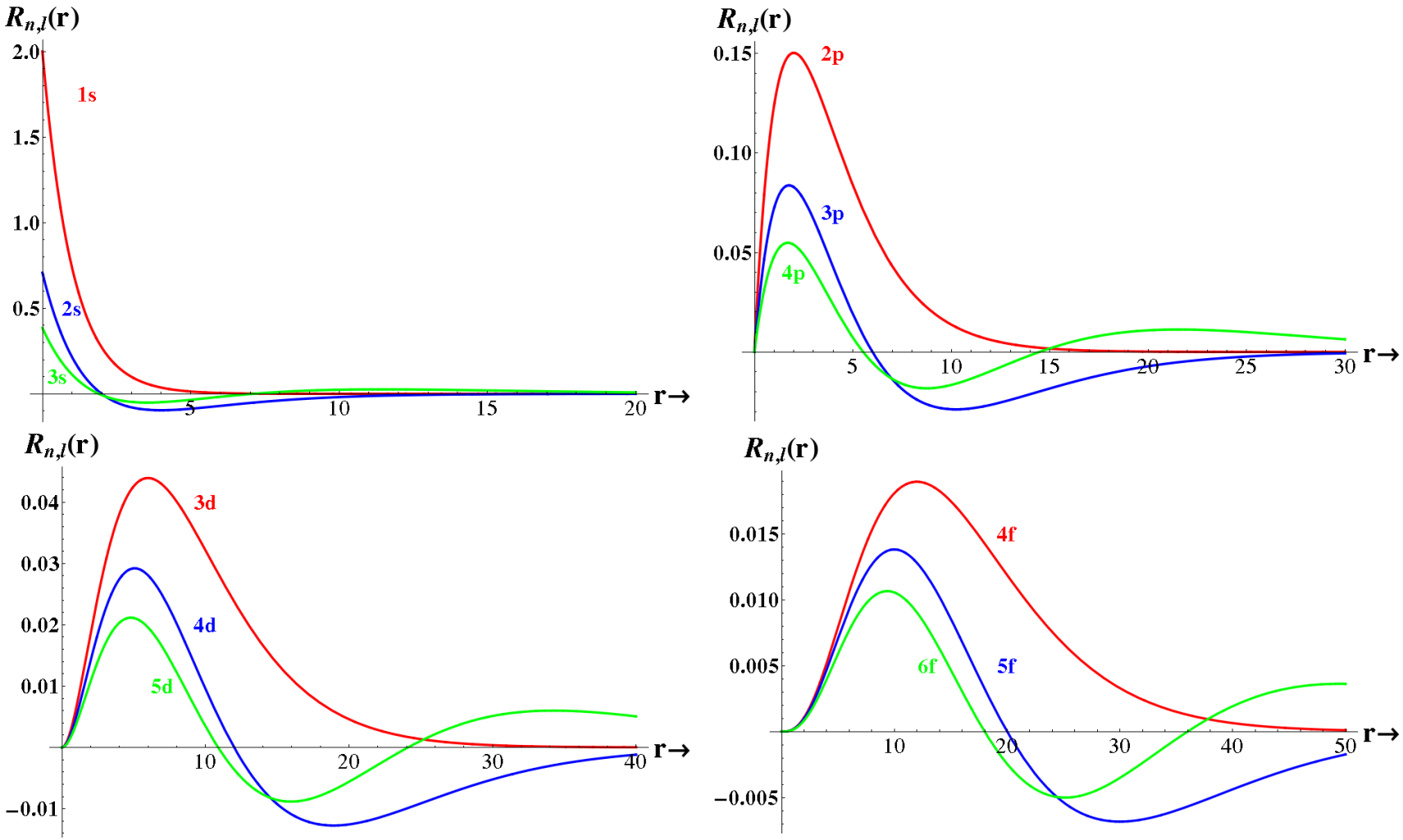
donde $a_0=4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$ es el radio atómico de Bohr, obteniéndose las mismas energías que el modelo de Bohr del átomo de Hidrógeno pero el electrón no está restringido a moverse en las órbitas de Bohr, sino que está descrito por su función de onda $\psi(r,\theta,\phi)$

$$R_{n,\ell}(r)=-\left\{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+1)!]^3}\right\}^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\ell+\frac{3}{2}}\cdot\quad r^{\ell}\quad e^{-\frac{r}{na_0}}\quad L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

donde $L_{n+\ell}^{2\ell+1}$ son los polinomios asociados de Laguerre.

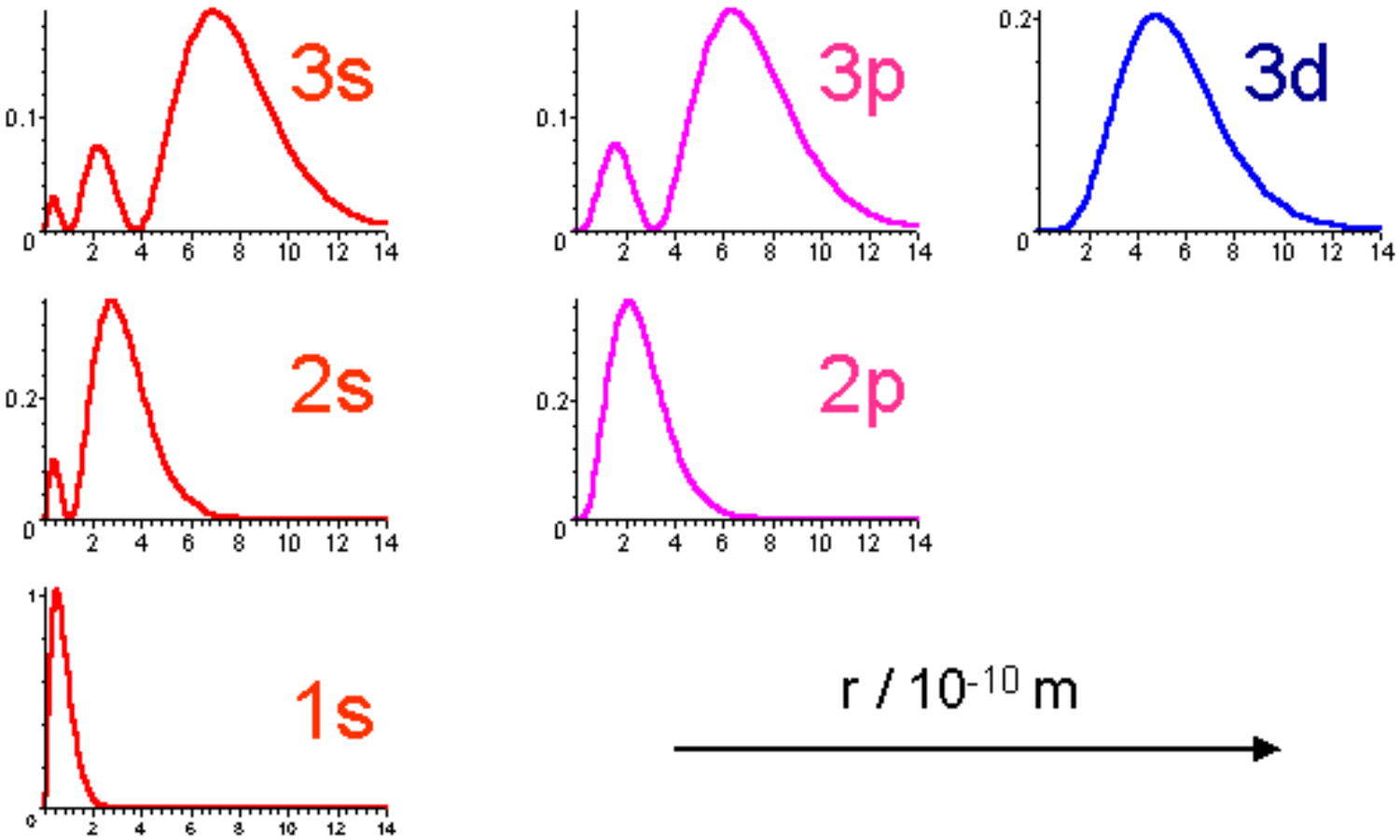
Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Las funciones radiales para el átomo de hidrógeno



Ecuación de Schrödinger. Números cuánticos

Función de distribución radial $4\pi r^2 R^2_{n,\ell}(r)$ con $(n-\ell-1)$ nodos



Orbitales atómicos hidrogenoides

Funciones de onda completas para átomos hidrogenoides

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\rho}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)e^{-\rho/2}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\rho/2} \cos\theta$$

$$\psi_{21\pm1} = \pm\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\rho/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (27-18\rho+2\rho^2)e^{-\rho/3}$$

$$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho(6-\rho)e^{-\rho/3} \cos\theta$$

$$\psi_{31\pm1} = \pm\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho(6-\rho)e^{-\rho/3} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\rho/3}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$\psi_{32\pm1} = \pm\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{32\pm2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$

$$\rho = \frac{Zr}{a_0}$$

Orbitales atómicos hidrogenoides

- Llamamos **orbital** a la función de onda de un electrón (también funciones de onda monoelectrónicas). El nombre se extiende a cualquier función monoelectrónica, para cualquier otro sistema atómico o molecular.
- n es el **número cuántico principal**. La energía del orbital es proporcional a $-1/2n^2$, $(n = 1, 2, 3, ...)$ (en unidades atómicas es el valor indicado).
- ℓ es el **número cuántico del momento angular**. El módulo del momento angular es $\sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$, $\qquad (\ell = 0, 1, ..., n-1)$.

nombre de los orbitales

ℓ	0	1	2	3	4	5	...
Símbolo	s	p	d	f	g	h	...

- m es el **número cuántico magnético** $(m = -\ell, -\ell+1, ..., 0, ..., +\ell-1, +\ell)$. La componente z del momento angular del electrón es $m\hbar$

Orbitales atómicos hidrogenoides

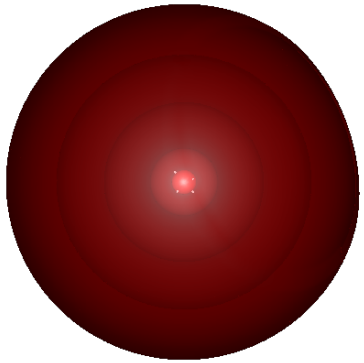
- Ejemplos de orbitales:

$n = 1$	$\ell = 0$	$m = 0$	$1s$
$n = 2$	$\ell = 0$	$m = 0$	$2s$
$n = 2$	$\ell = 1$	$m = +1$	$2p_{+1}$
$n = 2$	$\ell = 1$	$m = -1$	$2p_{-1}$
$n = 2$	$\ell = 1$	$m = 0$	$2p_0$
$n = 3$	$\ell = 2$	$m = 0$	$3d_0$
...	...	...	...
$n = 5$	$\ell = 3$	$m = +2$	$5f_{+2}$
...	...	...	...

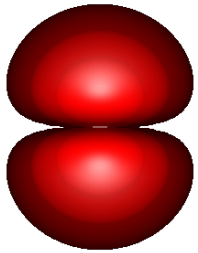
Orbitales atómicos hidrogenoides

La densidad electrónica en el átomo de hidrógeno

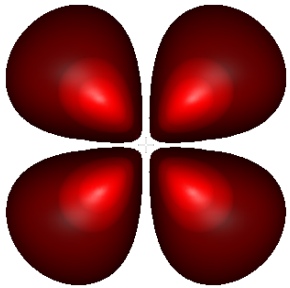
$1s$



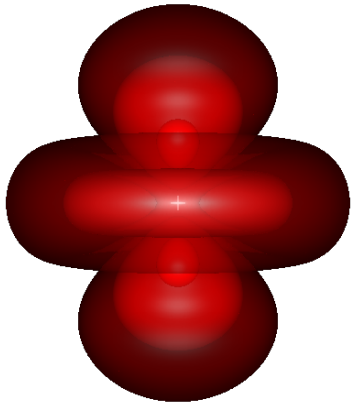
$2p_z$



$3d_{xz}$



$3d_{3z^2-r^2}$

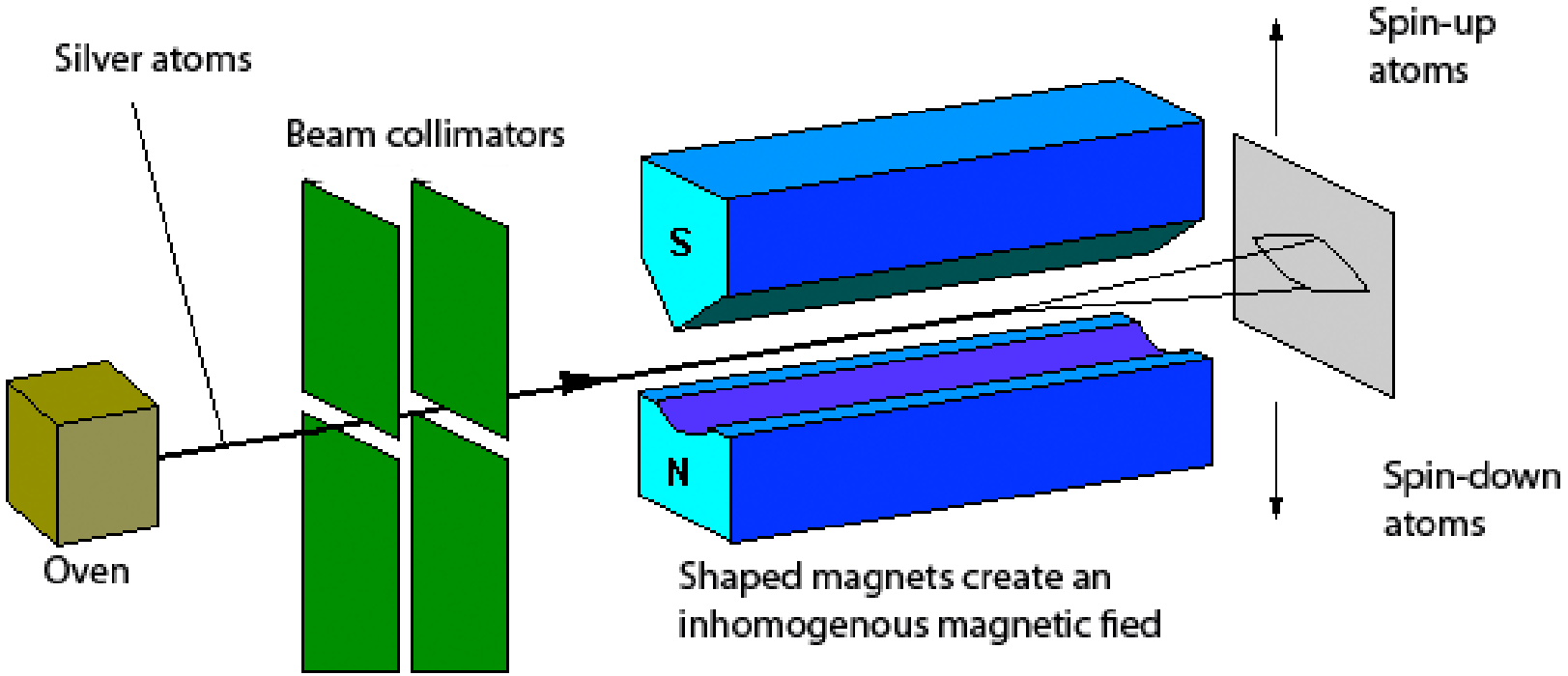


Átomos polielectrónicos

- La ecuación de Schrödinger para átomos con más de un electrón es un problema mucho más complicado que para el átomo de hidrógeno. No tiene solución analítica pero si numérica, obteniéndose funciones de onda razonablemente precisas.
- El procedimiento habitual consiste en representar la contribución de cada electrón mediante una función parecida a los orbitales del hidrógeno.
- La aproximación más simple a la función de onda es un producto de orbitales de la forma: $\phi_1(\vec{r}_1)\ \phi_2(\vec{r}_2)...\ \phi_N(\vec{r}_N)$ (producto de Hartree).
- Una función de ese tipo no cumple una ley física fundamental: el *Principio de exclusión de Pauli* que exige que, si se intercambian dos electrones, la función debe cambiar de signo.
- Además, las funciones de los electrones deben depender de una coordenada no clásica: *el espín*, que para un electrón puede tomar dos valores, representados por α y β.
- Una función que si cumple lo anterior es un determinante de Slater (producto de Hartree antisimetrizado).

Átomos polielectrónicos

El experimento de Stern-Gerlach(1922)



Átomos polielectrónicos

Evidencias del spin electrónico

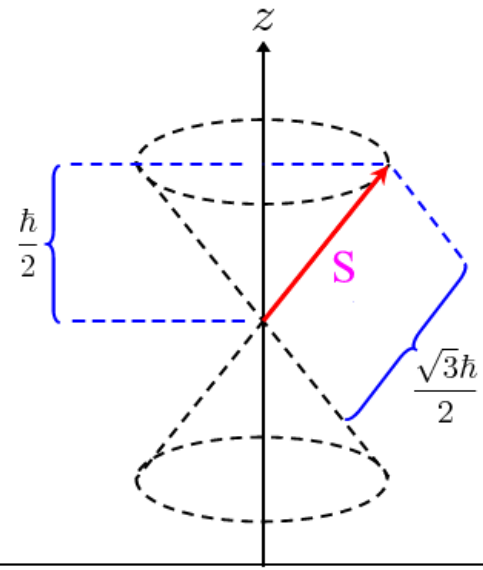
1. (1921) dispersión Compton: sugirió que el electrón es la partícula magnética elemental
2. (1922) experimento Stern-Gerlach: pasando un haz de átomos de plata ($4d^{10}5s^1$) a través de un campo magnético inhomogéneo se observó su división en dos haces
3. (1925) Uhlenbeck y Goudsmit: demostraron que se trataba de dos estados de momento angular. El electrón tiene momento angular intrínseco, momento angular de SPIN
4. (1925) Principio de exclusión de Pauli: antisimetría de la función de onda, como consecuencia no más de dos electrones por orbital, o, dos electrones no pueden tener todos sus números cuánticos iguales. Número cuántico de spin: m_s
5. (1928) Dirac: desarrolló la teoría cuántica relativista, derivando de ella el momento angular de spin electrónico

Spin electrónico

Los operadores de momento angular de spin electrónico se definen de forma análoga a los operadores de momento angular orbital, con la salvedad de que sólo hay dos estados de spin:

$$\widehat{S}_z \cdot \alpha(\sigma) = m_s^{\alpha}\hbar \cdot \alpha(\sigma)$$
$$\widehat{S}_z \cdot \beta(\sigma) = m_s^{\beta}\hbar \cdot \beta(\sigma)$$
$$\widehat{S}^2 \cdot \alpha(\sigma) = s(s+1)\hbar^2 \cdot \alpha(\sigma)$$
$$\widehat{S}^2 \cdot \beta(\sigma) = s(s+1)\hbar^2 \cdot \beta(\sigma)$$

$$m_s^{\alpha} = \frac{1}{2}, \quad m_s^{\beta} = -\frac{1}{2}, \quad s = \frac{1}{2}$$



momento magnético orbital	momento magnético de spin
$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}$	$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{2m_e}g\vec{S}$
$\lvert\vec{\mu}_L\rvert = -\frac{e\hbar}{2m_e}\sqrt{\ell(\ell+1)}$	$\lvert\vec{\mu}_S\rvert = -\frac{e\hbar}{2m_e}g\sqrt{s(s+1)}$
$\mu_{L_z} = -\frac{e\hbar}{2m_e}m$	$\mu_{S_z} = -\frac{e\hbar}{2m_e}gm_s$

donde el factor g electrónico es probablemente la constante universal más exacta conocida $g = 2.0023193043625635$ con un error de $1.7 \cdot 10^{-13}$

Funciones de onda aproximadas para los átomos polielectrónicos

- A partir de un producto de Hartree, se puede construir una función sencilla que cumpla el principio de exclusión de la siguiente manera:

$$\Psi(1,2...,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_1(2) & ... & \phi_1(N) \\ \phi_2(1) & \phi_2(2) & ... & \phi_2(N) \\ ... & ... & ... & ... \\ \phi_N(1) & \phi_N(2) & ... & \phi_N(N) \end{vmatrix}$$

  (*determinante de Slater*).

- El número entre paréntesis se refiere a las coordenadas de posición y de espín del átomo correspondiente.
- La diagonal contiene el producto de Hartree.
- Nótese que si dos columnas son iguales el determinante se anula (*no puede haber dos electrones con los números cuánticos iguales*).

La densidad electrónica de los átomos polielectrónicos

- Tomando una función simple como la vista antes (determinante de Slater), con los orbitales cumpliendo ciertas condiciones matemáticas, la densidad electrónica de los atomos se puede escribir como:

$$\rho(\vec{r}) = \phi_1^2(\vec{r}) + \phi_2^2(\vec{r}) + ... + \phi_N^2(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} \phi_i^2(\vec{r})$$

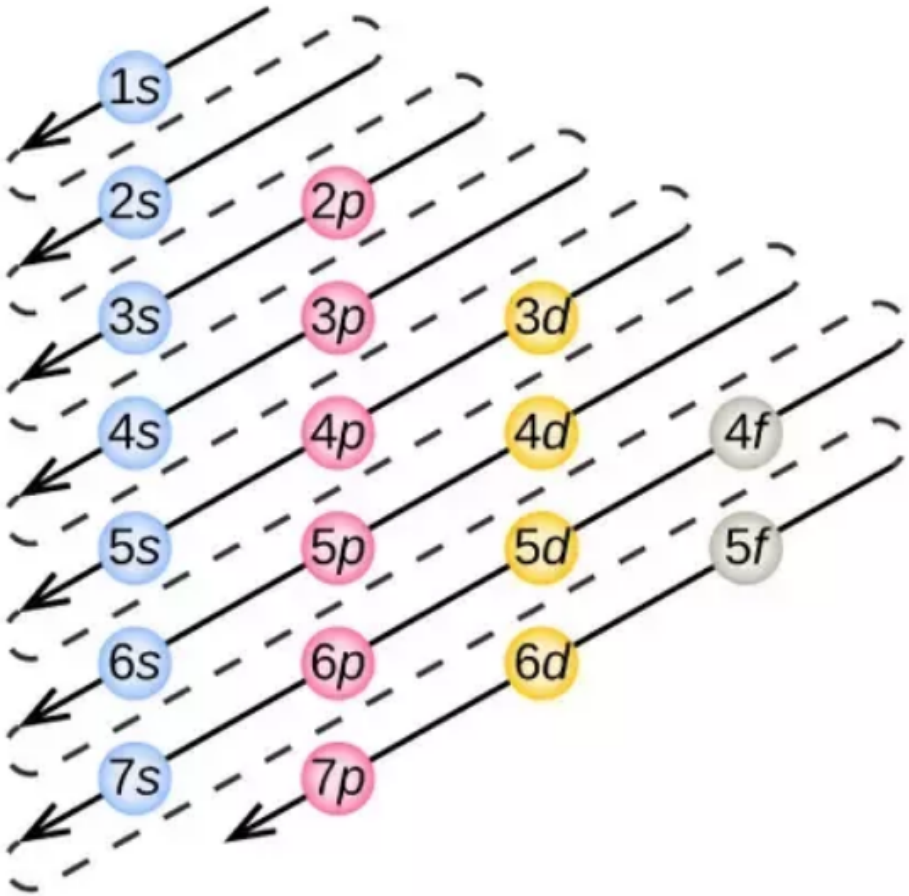
- La nube de carga electrónica del átomo puede interpretarse así una superposición de nubes asociadas a cada uno de los electrones.
- Lo anterior es una aproximación ligada a la simplicidad de la función de onda elegida.
- La suma: $\phi_{2p_x}^2(\vec{r}) + \phi_{2p_y}^2(\vec{r}) + \phi_{2p_z}^2(\vec{r})$ tiene simetría esférica.

Llenado de orbitales (principio de Aufbau)

- Para determinar qué orbitales se seleccionan, se considera un conjunto de orbitales similares a los hidrogenoides ordenados en energías crecientes.
- Se aplican las reglas de llenado de orbitales: el estado de menor energía se obtiene rellenando los orbitales de energía más baja.
- El llenado está sometido a una restricción de origen físico: el *Principio de exclusión de Pauli* relacionado con la existencia del espín electrónico.
- El Principio de exclusión exige que un orbital esté ocupado al máximo por un par de electrones (que diferirán en su espín).
- El orden energético para el llenado es (menor energía el de menor valor de la suma $(n+\ell)$, en caso de igual valor $(n+\ell)$ es más estable el de menor n): $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p$

Configuraciones electrónicas

Llenado de orbitales (principio de Aufbau)



Configuraciones electrónicas

- Llamaremos *capa* al conjunto de orbitales correspondientes a un valor dado de n y un valor dado de ℓ.
- El número de orbitales en una capa (n, ℓ) es $2\ell + 1$.
- Ejemplo, una capa $3d$ tiene 5 orbitales distintos (correspondientes a los diferentes valores del número cuántico m: -2, -1, 0, 1, 2.
- Una configuración electrónica es un conjunto de orbitales y el número de electrones que ocupan cada uno de ellos.
- En una configuración electrónica sólo se indican los orbitales ocupados (que contienen algún electrón).
- Los orbitales con el mismo par (n, ℓ) se agrupan como una unidad.
- Las ocupaciones se escriben como superíndices.

Configuraciones electrónicas

- Átomo de He (2 electrones): $1s^2$
- Átomo de Li (3 electrones): $1s^2\,2s$
- Átomo de Be (4 electrones): $1s^2\,2s^2$
- Átomo de B (5 electrones): $1s^2\,2s^2\,2p$
- Átomo de C (6 electrones): $1s^2\,2s^2\,2p^2$
- Átomo de N (7 electrones): $1s^2\,2s^2\,2p^3$
- Átomo de O (8 electrones): $1s^2\,2s^2\,2p^4$
- Átomo de F (9 electrones): $1s^2\,2s^2\,2p^5$
- Átomo de Ne (10 electrones): $1s^2\,2s^2\,2p^6$

Configuraciones electrónicas

- Átomo de Sc (21 electrones): $(\mathrm{Ar})4s^2\,3d$
- Átomo de Ti (22 electrones): $(\mathrm{Ar})4s^2\,3d^2$
- Átomo de V (23 electrones): $(\mathrm{Ar})4s^2\,3d^3$
- Átomo de Cr (24 electrones): $(\mathrm{Ar})4s\,3d^5$
- Átomo de Mn (25 electrones): $(\mathrm{Ar})4s^2\,3d^5$
- Átomo de Cu (29 electrones): $(\mathrm{Ar})4s\,3d^{10}$
- Átomo de La (57 electrones): $(\mathrm{Xe})6s^2\,5d$
- Átomo de Ce (58 electrones): $(\mathrm{Xe})6s^2\,4f^2$
- Átomo de Pr (59 electrones): $(\mathrm{Xe})6s^2\,4f^3$
- Átomo de Gd (64 electrones): $(\mathrm{Xe})6s^2\,4f^7\,5d$

Tabla periódica y propiedades periódicas

- En 1869, Lothar Meyer y Dmitri Mendeleev propusieron independientemente que cuando los elementos se ordenan en orden creciente de su masa atómica, algunas propiedades siguen secuencias periódicas
- La primera propiedad propuesta por Mayer fue el volumen atómico:

$$\text{volumen atómico molar} = \frac{\text{masa molar}}{\text{densidad}}$$

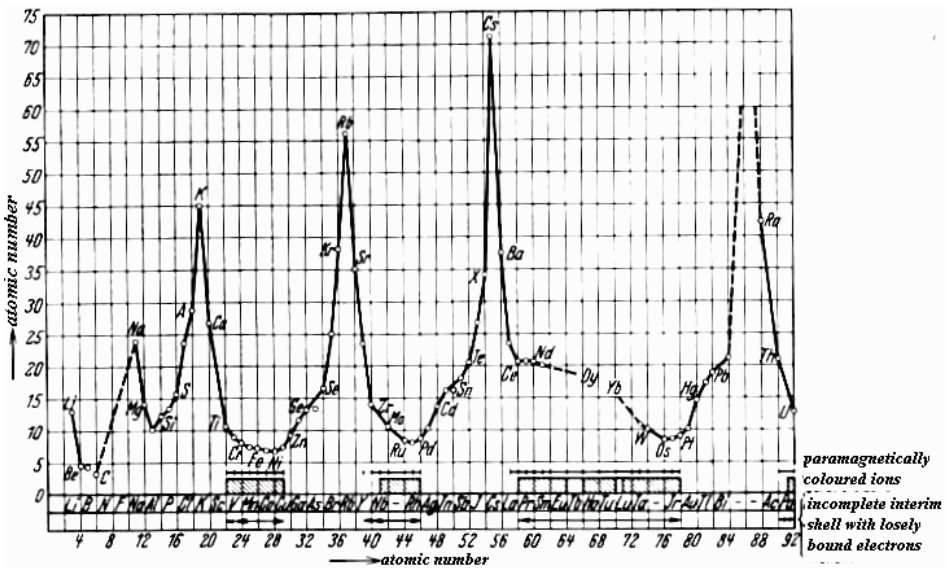


Fig. 844 Concerning periodicity of properties of chemical elements. Periodic dependence of atomic volume on the atomic number in the natural system of elements

Tabla periódica y propiedades periódicas

Sistema periódico de Mendeleev(1871)

Mendeleev's Periodic Table of 1871[1]

	I --- R_20	II --- RO	III --- R_2O_3	IV RH_4 RO_2	V RH_3 R_2O_3	VI RH_2 RO_3	VII RH R_2O_7	VIII --- RO_4
1	H 1							
2	Li 7	Be 9.4	B 11	C 12	N 14	O 16	F 19	
3	Na 23	Mg 24	Al 27.3	Si 28	P 31	S 32	Cl 35.5	
4	K 39	Ca 40	? 44	Ti 48	V 51	Cr 52	Mn 55	Fe, Co, Ni,Cu 56, 59, 59, 63
5	Cu 63	Zn 65	? 68	? 72	As 75	Se 78	Br 80	
6	Rb 85	Sr 87	? Yt 88	Zr 90	Nb 94	Mo 96	? 100	Ru, Rh. Pd, Ag 104, 104, 106, 108
7	Ag 108	Cd 112	In 113	Sn 118	Sb 122	Te 125	I 127	
8	Cs 133	Ba 137	? Di 138	? Ce 140	?	?	?	?, ?, ?, ?
9	?	?	?	?	?	?	?	
10	?	?	? Er 178	?? La 180	Ta 182	W 184	?	Os, Ir, Pt, Au 195, 197, 198, 199
11	Au 199	Hg 200	Tl 204	Pb 207	Bi 208	?	?	
12	?	?	?	Th 231	?	U 240	?	

Tabla periódica y propiedades periódicas

Éxito del sistema periódico de Mendeleev

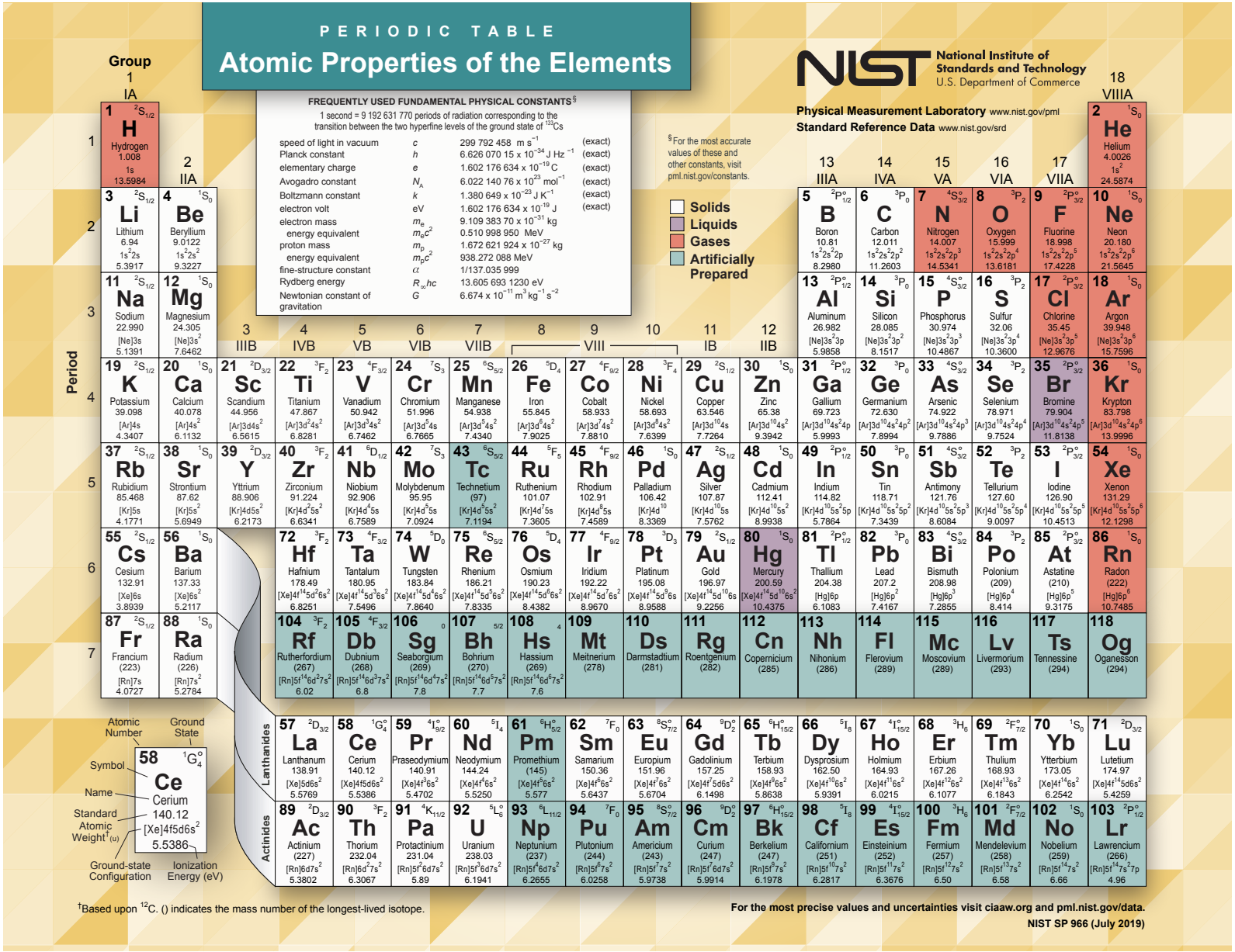
- Mendeleev predijo la existencia de algunos átomos y sus propiedades.

Propiedad	Eka-aluminio	Galio
masa atómica	68	69.3
densidad(g/cm^3)	5.9	5.93
punto de fusión (°C)	Bajo	30.15
Óxido	Ea_2O_3	Ga_2O_3
fórmula del Cloruro	Ea_2Cl_6	Ga_2Cl_6

Propiedad	Eka-silicio	Germanio
masa atómica	72	72.59
densidad(g/cm^3)	5.9	5.35
punto de fusión(°C)	alto	947
color	negro	gris
Electronegatividad (g/cm^3)	4.7	4.7
Oxicidad	base débil	base débil
punto de ebullición	por debajo 100°C	86°C ($GeCl_4$)
densidad del cloruro (g/cm^3)	1.9	1.9

- No previó la existencia de los gases nobles y no dejó lugar para ellos en su tabla.
- William Ramsey, su descubridor, los situó entre los halógenos y los metales alcalinos.
- Henry G. J. Moseley, basándose en el análisis de los espectros de rayos X, propuso en 1913 utilizar la carga atómica (número atómico) como criterio de ordenación. De esta manera pudo predecir la existencia de nuevos elementos.

Tabla periódica y propiedades periódicas

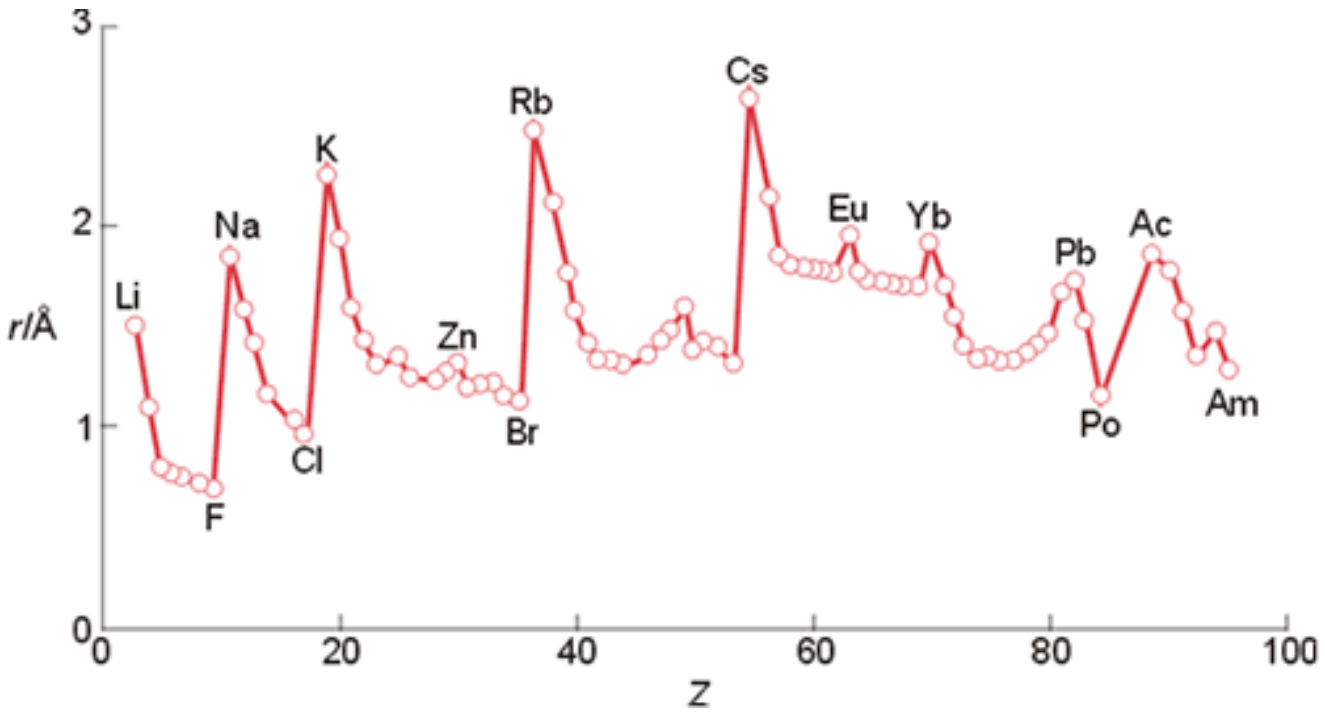


Propiedades periódicas: el radio atómico

- El radio atómico es difícil de definir porque la densidad de carga electrónica de un átomo se extiende hasta el infinito.
- Se puede definir un radio atómico efectivo como el que corresponde a la esfera que encierra un 90% de la carga electrónica.
- Radio covalente: la mitad de la distancia de enlace entre los núcleos de dos átomos iguales unidos por un enlace covalente.
- Radio metálico: la mitad de la distancia de enlace entre los núcleos de dos átomos contiguos en una red metálica.
- Radio iónico: radio atribuido a un ion (catión o anión) en una red cristalina.

Variación del radio atómico con el número atómico

- El radio atómico se relaciona con la *carga nuclear efectiva* (carga nuclear apantallada) que experimentan los electrones de la capa más externa del átomo.



Carga nuclear efectiva: reglas de Slater

- La carga nuclear efectiva viene dada por la expresión: $Z_{ef} = Z - \sigma$ donde el *apantallamiento*, σ se puede estimar de acuerdo con las siguientes reglas semiempíricas debidas a John Slater (1930):

Grupo	otros electrones mismo grupo	electrones en el nivel $n-1$	electrones en niveles $< n-1$
1s	0.30	–	–
ns, np	0.35	0.85	1
nd, nf	0.35	1	1

Los grupos son: $(1s)$, $(2s, 2p)$, $(3s, 3p)$, $(3d)$, $(4s, 4p)$, $(4d)$, $(4f)$,...
Número cuántico efectivo: n^*(n)= 1(1); 2(2); 3(3); 3.7(4); 4(5); 4.2(6);

Propiedades periódicas: el radio iónico

- Los cationes son más pequeños que los correspondientes átomos neutros de que derivan.
- Para cationes con el mismo número de electrones, el radio disminuye al aumentar el número atómico. Ej: $R_{Al^{3+}} < R_{Mg^{2+}} < R_{Na^{+}}$
- Para un elemento dado, el radio es menor cuanto mayor es la carga del catión. Ej: $R_{Sn^{4+}} < R_{Sn^{3+}} < R_{Sn^{2+}} < R_{Sn^{+}}$
- Los aniones tienen radios mayores que los correspondientes átomos neutros de que derivan.
- Para aniones isolectrónicos, el radio es mayor cuanto más negativa sea la carga del anión. Ej: $R_{Cl^{-}} < R_{S^{2-}}$

Propiedades periódicas: la energía de ionización atómica

- La *energía de ionización atómica* es la mínima energía que debe absorber un sistema atómico (átomo o ion atómico) aislado para desprenderse de un electrón.
- Primera energía de ionización: es la energía de ionización atómica correspondiente al átomo neutro.
- Segunda, tercera, ... energías de ionización, son las energías de ionización atómicas correspondientes a los cationes monovalentes, divalentes, ...
- Ejemplo: energías de ionización del fosforo:

$$\begin{aligned}
P(g) &\rightarrow P^{+}(g) + e^{-} && I_1 = 1060\ \text{kJ}\ \text{mol}^{-1} \\
P^{+}(g) &\rightarrow P^{2+}(g) + e^{-} && I_2 = 1890\ \text{kJ}\ \text{mol}^{-1} \\
P^{2+}(g) &\rightarrow P^{3+}(g) + e^{-} && I_3 = 2905\ \text{kJ}\ \text{mol}^{-1} \\
P^{3+}(g) &\rightarrow P^{4+}(g) + e^{-} && I_3 = 4950\ \text{kJ}\ \text{mol}^{-1} \\
P^{4+}(g) &\rightarrow P^{5+}(g) + e^{-} && I_3 = 6270\ \text{kJ}\ \text{mol}^{-1} \\
P^{5+}(g) &\rightarrow P^{6+}(g) + e^{-} && I_3 = 21200\ \text{kJ}\ \text{mol}^{-1}
\end{aligned}$$

La primera energía de ionización atómica

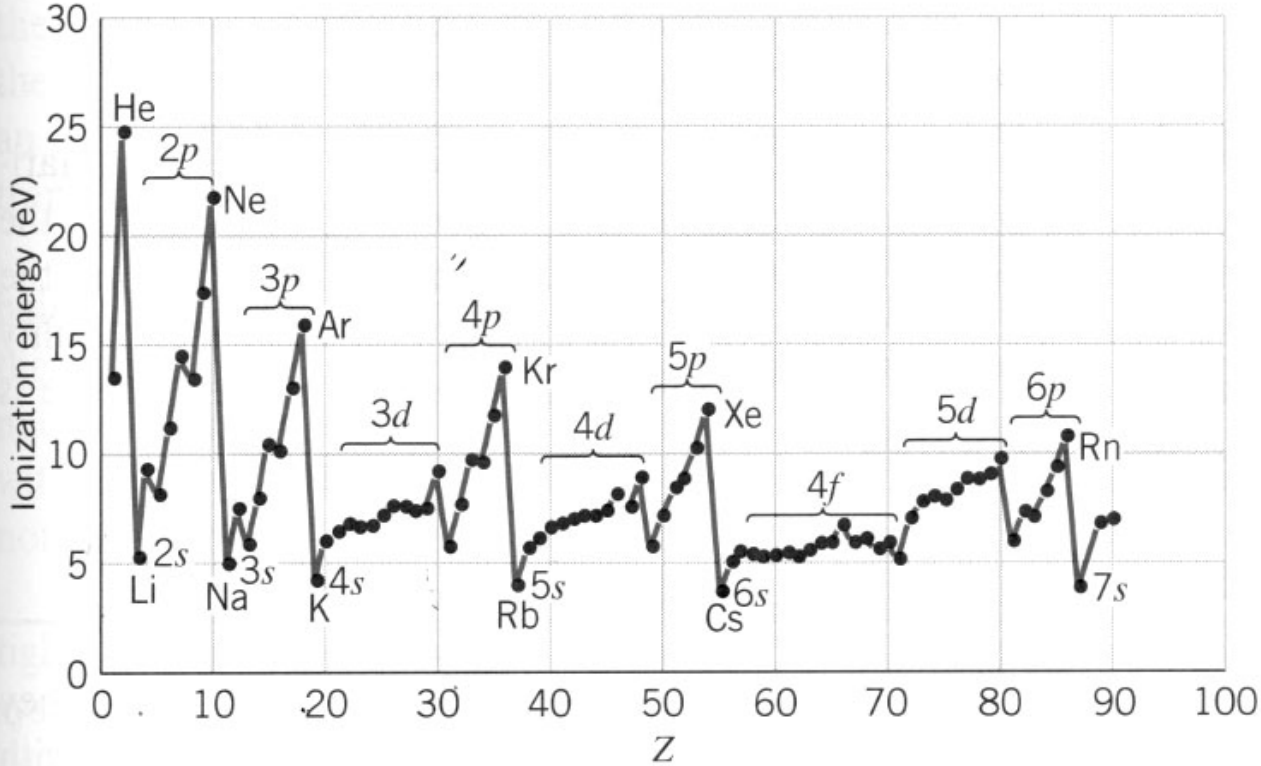


FIGURE 8.4 Ionization energies of neutral atoms of the elements.

Las energías de ionización sucesivas

Energías de ionización en kJ mol^{-1}

	1	2	3	4	5	6	7	8
H	1312							
He	2372	5250						
Li	520	7297	11810					
Be	899	1757	14845	21000				
B	800	2426	3659	25020	32820			
C	1086	2352	4619	6221	37820	47260		
N	1402	2855	4576	7473	9442	53250	64340	
O	1314	3388	5296	7467	10987	13320	71320	84070
F	1680	3375	6045	8408	11020	15160	17860	92010
Ne	2080	3963	6130	9361	12180	15240		
Na	496	4563	6913	9541	13350	16600	20113	25666
Mg	737	1450	7731	10545	13627	17995	21700	25662

Propiedades periódicas: la afinidad electrónica

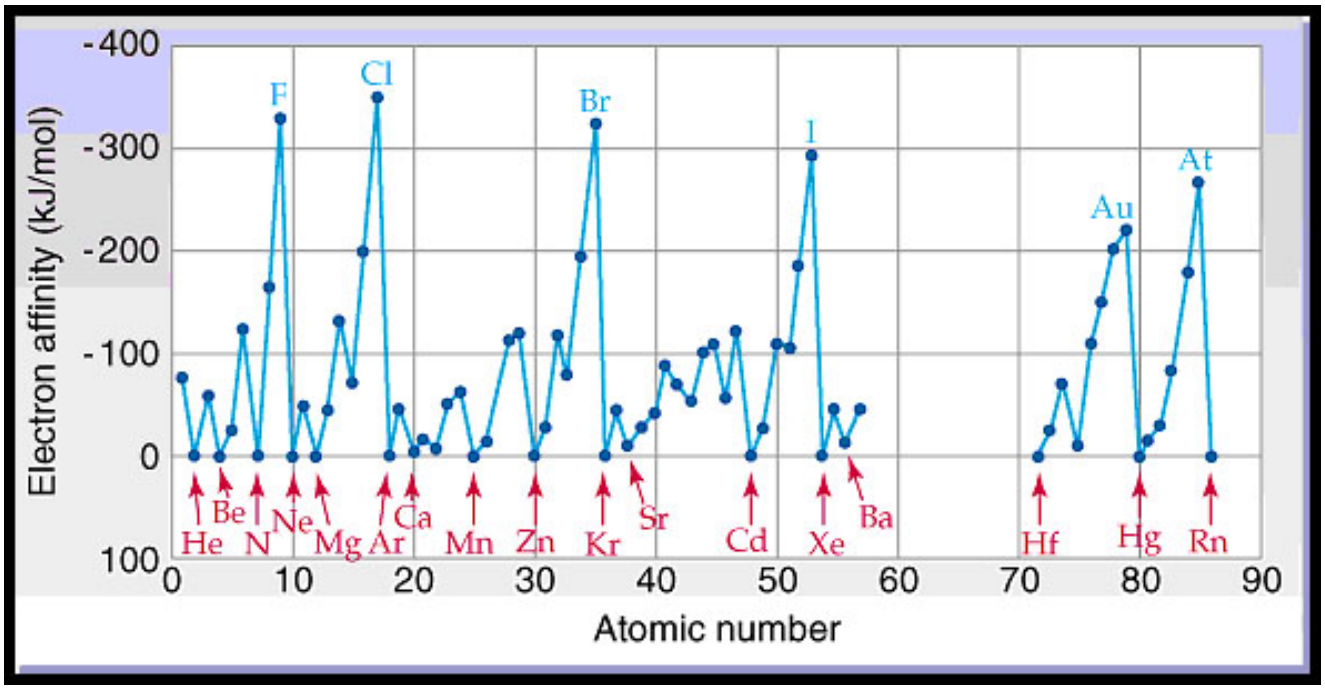
- La *afinidad electrónica* es la energía que acompaña a la captura de un electrón por un átomo para formar un anión:

$$X + e^- \rightarrow X^-$$

- Ejemplos

$$\begin{aligned}
Li(g) + e^- &\rightarrow Li^-(g) \quad Ea = -59.6 \text{ kJ mol}^{-1} \\
Be(g) + e^- &\rightarrow Be^-(g) \quad Ea > 0 \\
B(g) + e^- &\rightarrow B^-(g) \quad Ea = -26.7 \text{ kJ mol}^{-1} \\
C(g) + e^- &\rightarrow C^-(g) \quad Ea = -153.9 \text{ kJ mol}^{-1} \\
N(g) + e^- &\rightarrow N^-(g) \quad Ea = -7 \text{ kJ mol}^{-1} \\
O(g) + e^- &\rightarrow O^-(g) \quad Ea = -141.0 \text{ kJ mol}^{-1} \\
F(g) + e^- &\rightarrow F^-(g) \quad Ea = -328.0 \text{ kJ mol}^{-1} \\
Ne(g) + e^- &\rightarrow Ne^-(g) \quad Ea > 0
\end{aligned}$$

Propiedades periódicas: la afinidad electrónica



Fórmula empírica y fórmula molecular

Jöns Jacob Berzelius.

- La notación moderna fue introducida por Jöns Jacob Berzelius hacia 1813.
- La fórmula química de una sustancia es una expresión compuesta de símbolos que representan los átomos y subíndices que reflejan la proporción en que aparece cada tipo de átomo en la molécula.

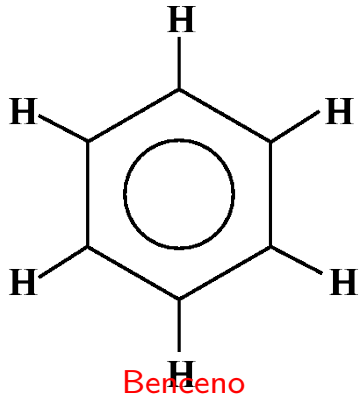
Fórmula empírica y fórmula molecular

- Fórmula empírica: los subíndices sólo reflejan la proporción de los distintos tipos de átomos. Ej. CH
- La fórmula empírica CH puede representar distintos tipos de moléculas, p. ej:
  C_2H_2 (acetileno o etino)
  C_6H_6 (benceno)
  C_8H_8 (barreleno, bicyclo[2.2.2]octa-2,5,7-trieno)
  C_8H_8 (benzociclobuteno)
  C_8H_8 (cubano)
- Fórmula molecular: los subíndices representan el número de átomos de cada tipo presentes en una molécula. Ej C_6H_6.

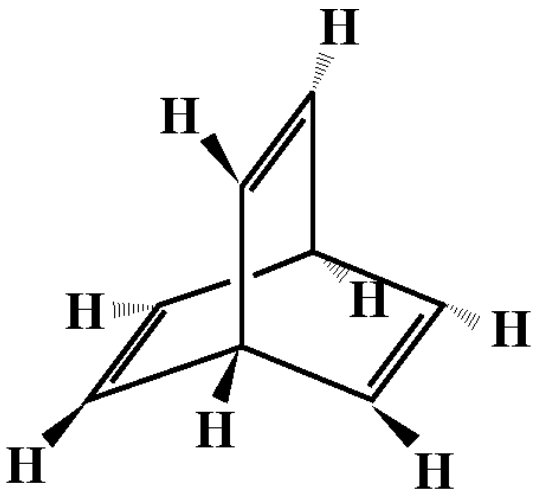
Fórmula empírica y fórmula molecular

- Para eliminar ambigüedades, en ocasiones se usan fórmulas desarrolladas:

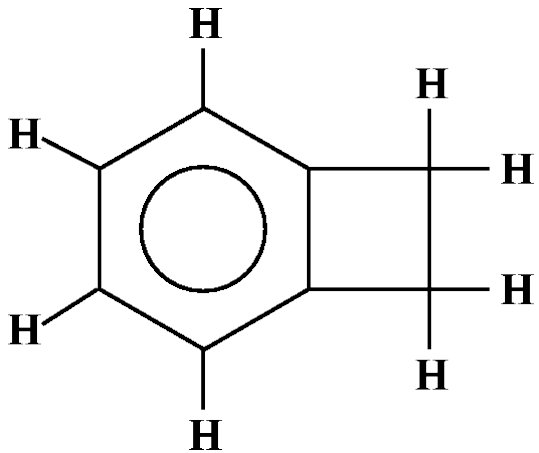
Acetileno



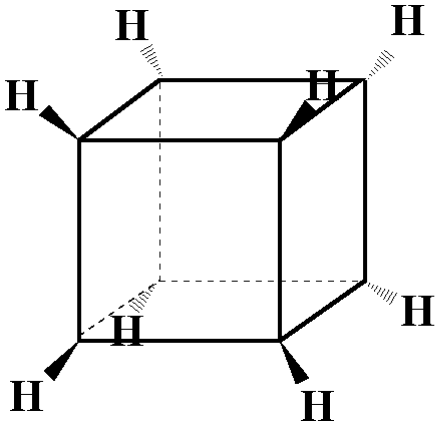
Benceno



Barreleno



Benzociclobuteno



Cubano

Peso atómico y Peso molecular

Masa molar de una molécula

- Es la masa en gramos de un mol de la molécula considerada.
- Sus unidades son $\mathrm{g} \cdot \mathrm{mol}^{-1}$.
- Cuando todas las moléculas están formadas por un mismo tipo de isótopos, coincide con la masa de una molécula expresada en unidades de masa atómica.
- En el caso de átomos, se habla de masa atómica: la masa en gramos de un mol de átomos como el considerado.

Peso atómico y Peso molecular

- Se denomina peso atómico al promedio de las masas de los isótopos de un elemento pesadas con su abundancia relativa en la Tierra.
- Por ejemplo, en la Tierra se encuentran cinco isótopos del átomo de cinc, de masas atómicas (en $g \cdot mol^{-1}$) y proporciones: $(63.9291, 48.63\%)$, $(65.926, 27.90\%)$, $(66.9271, 4.10\%)$, $(67.9248, 18.75\%)$, $(69.9253, 0.62\%)$
  El peso atómico del cinc viene dado por:
  $P_{at}(Zn) = \frac{1}{100}\,(63.9291 \cdot 48.63 + 65.926 \cdot 27.90 + 66.9271 \cdot 4.10 + 67.9248 \cdot 18.75 + 69.9253 \cdot 0.62)\ g \cdot mol^{-1} = 65.3955\ g \cdot mol^{-1}$
- El peso molecular es el equivalente a la masa molecular cuando en ella se reemplazan las masas atómicas por pesos atómicos.

Peso atómico y Peso molecular

La fórmula química da información sobre la composición en masa de una molécula:

- Consideremos un compuesto de fórmula $A_aB_bC_cD_d$ donde A, B, C y D corresponden a distintos átomos.
- La masa molecular viene dada por:

$$\begin{aligned} \text{masa mol} &= a \cdot \text{masa at}_A + b \cdot \text{masa at}_B \\ &+ c \cdot \text{masa at}_C + d \cdot \text{masa at}_D \\ &= \sum_i n_i \cdot \text{masa at}_{I_i} \end{aligned}$$

donde $n_i = a, b, c, d$; $I_i = \text{A, B, C, D}$.

- Las proporciones en masa de cada átomo en la molecula vienen dadas por:

$$\%\text{masa}_{I_i} = \frac{n_i \cdot \text{masa at}_{I_i}}{\text{masa mol}} \times 100$$

Peso atómico y Peso molecular

Ejemplo

- El carbonato ácido de sodio (bicarbonato sódico) tiene de fórmula: $HNaCO_3$.
- Las masas atómicas de los átomos que lo forman en $g \cdot mol^{-1}$ son:
  m(H)= 1.0078, m(Na)= 22.9898, m(C)= 12.0000, m(O)= 15.9949
- La masa molecular es:
  $(1.0078 + 22.9898 + 12.0000 + 3 \cdot 15.9949)\ g \cdot mol^{-1} = 83.9823\ g \cdot mol^{-1}$
- Las proporciones en masa de cada elemento en la molécula son:

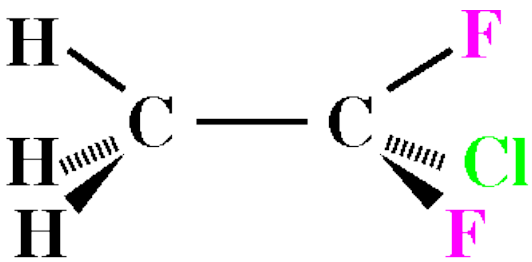
$$\%H = \frac{1.0078}{83.9823} \times 100 = 1.20\,\% \quad \%Na = \frac{22.9898}{83.9823} \times 100 = 27.37\,\%$$

$$\%C = \frac{12.0000}{83.9823} \times 100 = 14.29\,\% \quad \%O = \frac{3 \cdot 15.9949}{83.9823} \times 100 = 57.14\,\%$$

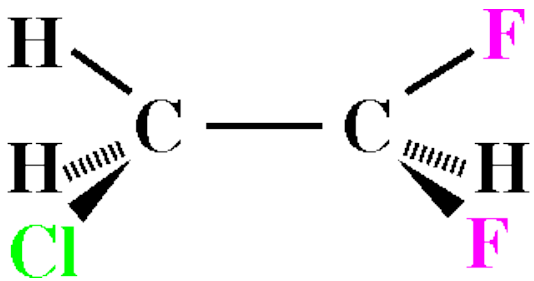
Compuestos químicos

¿Qué define una molécula?

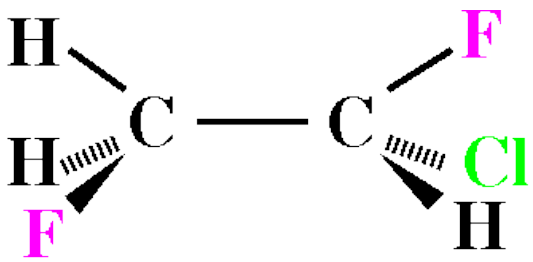
- A un mismo juego de átomos pueden corresponder distintas moléculas. P.ej. las siguientes especies responden a la fórmula molecular $C_2H_3F_2Cl$



1-cloro-1,1-difluoretano

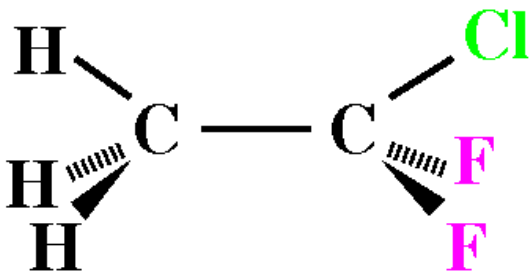


1-cloro-2,2-difluoretano

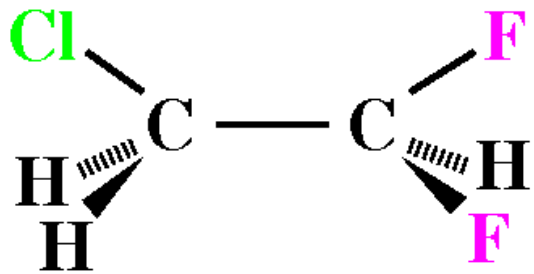


1-cloro-1,2-difluoretano

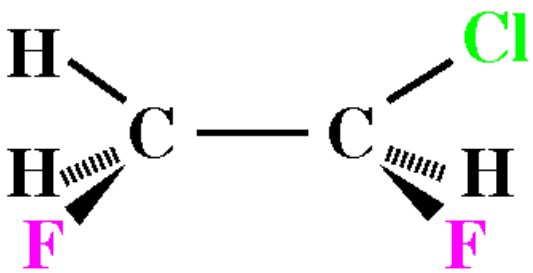
- Las siguientes no son distintas de las anteriores:



1-cloro-1,1-difluoretano



1-cloro-2,2-difluoretano



1-cloro-1,2-difluoretano