.

1. Primeros modelos del átomo
2.-Naturaleza de la luz. .Espectros atómicos
3.-Orígenes de la teoría cuántica: Hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico.
4.-Modelo de Bohr.
5.-Dualidad onda-partícula .Hipótesis de De Broglie.
6.-Principio de incertidumbre de Heisemberg.
7.-Modelo mecano-cuántico.
8.-Orbitales atómicos y números cuánticos.
9.-Representación de orbitales atómicos.
10.-Energías de orbitales atómicos: Configuración electrónica.

1.-PRIMEROS MODELOS DEL ÁTOMO.

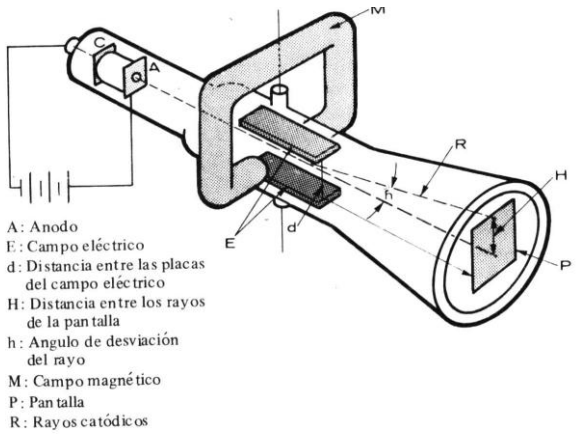
Dalton (s.XIX) supuso que la materia estaba formada por partículas infinitamente pequeñas, indivisibles e inalterables, a las que llamó átomos. Los postulados de su teoría atómica son:

- Un elemento está constituido por átomos de la misma clase, todas idénticas en masa y propiedades.
- Un compuesto está constituido por átomos de clase diferente, correspondientes a los elementos que lo forman. La relación numérica entre los átomos de clase diferente que forman el compuesto es constante.
- En una reacción química, los átomos no cambian, sólo se agrupan de modo distinto a como estaban, originando así otras sustancias.

Esto cumple la ley de la conservación de la masa, ya que si los átomos que había sólo intercambian sus posiciones, no puede haber variación de la masa.

Modelo atómico de Thomson:

A lo largo del siglo XIX fueron realizándose experimentos que sugerían que la teoría atómica de Dalton estaba equivocada, y que el átomo era divisible. La confirmación de que el átomo era divisible vino del estudio de descargas eléctricas en los tubos de vacío, pues se observó una fluorescencia en la pared del tubo opuesta al cátodo (-), y se supuso que era producida por una radiación invisible que salía de éste (rayos catódicos). Pronto se supo que los rayos catódicos estaban constituidos de partículas cargadas negativamente. En 1891 Thomson, al medir la relación carga/masa de dichas partículas, encontró un valor más de 1000 veces superior que los ya conocidos para los iones. Thomson entonces pensó que los componentes de estos rayos no eran átomos con carga, sino partículas nuevas resultantes de la fragmentación del átomo: electrones.



El modelo de Thomson considera el átomo como una esfera material de electricidad positiva, dentro de la cual se encuentran los electrones en número suficiente para que el conjunto resulte neutro. (simil:Sandía).

Modelo de Rutherford:

En 1911 Rutherford descubrió que el átomo tenía un núcleo central en el cual se hallaba concentrada la totalidad de la carga positiva.

Rutherford llegó a esta conclusión mientras investigaba la difusión de partículas alfa (núcleos de helio, He) en la materia. Rutherford estudió la dispersión (Variación que sufren las constantes físicas de un haz corpuscular u ondulatorio al atravesar un medio, debido a su interacción con las partículas que lo constituyen) de las partículas en láminas metálicas delgadas, y encontró que algunas de ellas se desviaban con un ángulo superior a 90º, lo que era inexplicable según el modelo de Thomson. Estas grandes desviaciones de las partículas sólo se podían explicar por un choque contra una

.

partícula de gran masa y elevada carga positiva. Esto hizo suponer a Rutherford que toda la carga positiva del átomo estaba concentrada en un pequeño gránulo donde residía, además, la casi totalidad de la masa: el núcleo. Además, los datos que tenía, hacían suponer que el núcleo era 10.000 veces menor que el, por lo que éste era prácticamente hueco.

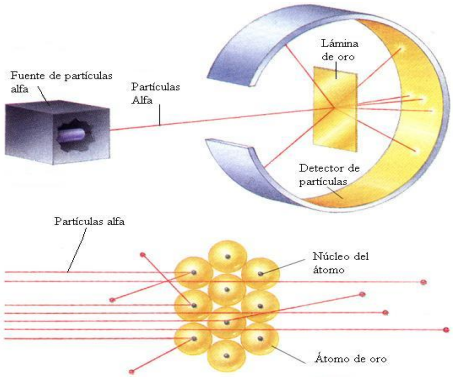


Figura 1.2. Interpretación del experimento de Rutherford. La mayor parte del espacio de un átomo está casi "vacío" ya que sólo está ocupado por livianos electrones. Toda la carga positiva del átomo y casi toda su masa se encuentra en su centro, en un núcleo muy denso y pequeño. La mayoría de las partículas con carga positiva (a) atraviesan el átomo por el espacio desocupado sin experimentar desviaciones. Algunas (b) se acercan a los núcleos y se desvían al ser repelidas por su carga positiva. Sólo unas pocas llegan a acertar (c) en un núcleo y salen despedidas hacia atrás.

Así el modelo atómico de Rutherford afirmaba:

La carga positiva del átomo está concentrada en un núcleo de tamaño reducido, mientras que la carga negativa, que se mueve alrededor del núcleo, queda distribuida dentro de una esfera cuyo radio es el radio atómico, y en cuyo centro se sitúa el núcleo positivo.

Sin embargo este modelo tuvo que abandonarse por ciertos motivos:

- *No estaba de acuerdo con las leyes electromagnéticas clásicas, ya que estas afirmaban que toda partícula que se mueve pierde energía, por tanto los electrones acabarían precipitándose al núcleo.*
- *No explicaba la existencia de los espectros atómicos. (qué estudiaremos a continuación).*

2.- NATURALEZA DE LALUZ. ESPECTROS ATÓMICOS

Newton, a finales del siglo XVII, sostuvo que la luz estaba compuesta por partículas, diferentes según el color, y que ``rebotaban'' en un espejo logrando así explicar porqué los ángulos de incidencia y reflexión eran los mismos. Parece ser que la propagación rectilínea de la luz tuvo mucho que ver con esta posición. Además lograba explicar la refracción sobre la superficie de dos medios diferentes usando también una teoría corpuscular.

Christian Huygens en el año 1678, describe y explica lo que hoy se considera como leyes de reflexión y refracción. Define a la luz como un movimiento ondulatorio semejante al que se produce con el sonido. Propuso el modelo ondulatorio, en el que se defendía que la luz no era más que una perturbación ondulatoria, parecida al sonido, y de tipo mecánico pues necesitaba un medio material para propagarse.

Hertz, en 1888, logró producir ondas por medios exclusivamente eléctricos y, a su vez, demostrar que estas ondas poseen todas las características de la luz visible, con la única diferencia de que las longitudes de sus ondas son manifiestamente mayores. Ello, deja en evidencia que las ondas eléctricas se dejan refractar, reflejar y polarizar, y que su velocidad de propagación es igual a la de la luz. Las investigaciones de Maxwell y Hertz trajeron con ellas importantes consecuencias teóricas. Todas las radiaciones se revelaron de la misma índole física, diferenciándose solamente en la longitud de onda en la cual se producen. Su escala comienza con las largas ondas hertzianas y, pasando por la luz visible, se llegan a la de los rayos ultravioletas, los rayos X, los radiactivos, y los rayos cósmicos.

De Broglie, en 1923 atribuye a la luz una doble naturaleza, ondulatoria y corpuscular. Afirmando que a toda partícula en movimiento se le puede asociar una onda. Para admitir esto aplicó a las partículas en movimiento conceptos admitidos para las radiaciones electromagnéticas.

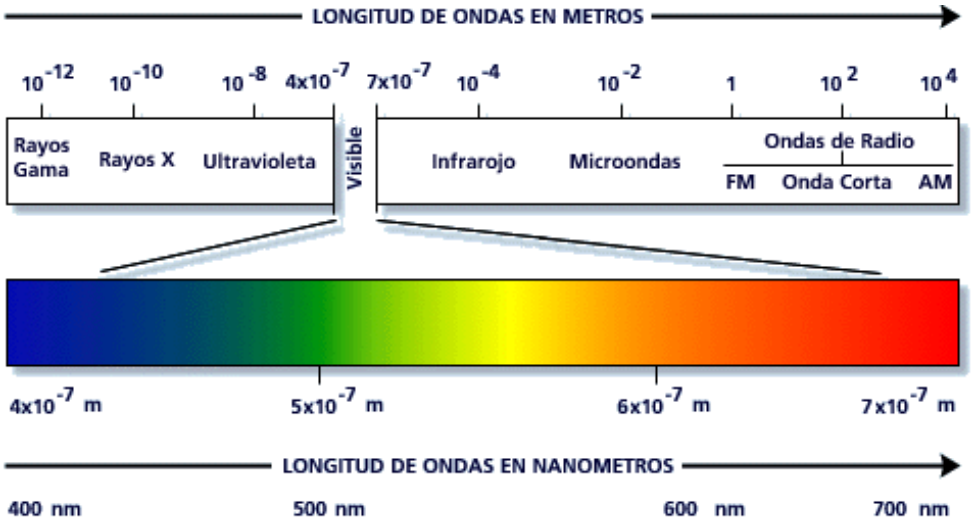
.

2.1.-Espectro atómicos.

Recordamos del curso anterior que una onda electromagnética consistía en la oscilación de un campo eléctrico y otro magnético en direcciones perpendiculares, entre sí, y a su vez, perpendiculares ambos a la dirección de propagación. La radiación electromagnética viene determinada por su frecuencia "υ" o por su longitud de onda "λ", relacionadas entre sí por:

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

También vimos en primero que se llamaba **espectro electromagnético** al conjunto de todas las radiaciones electromagnéticas desde muy bajas longitudes de ondas como los rayos *gamma* (10^{-12} m) hasta kilómetros (ondas de radio).



Este fenómeno es debido a que las distintas radiaciones que componen cualquier luz compleja NO se propaga con la misma velocidad al cruzar los diversos medios transparentes (vidrio, agua, etc.) y por lo tanto, se desvían con diferentes ángulos de refracción, lo que ocasiona la separación de las "diferentes luces" que componen esa "luz compleja blanca". Hoy sabemos que el espectro de la luz blanca está formado por una infinidad de colores que nuestros ojos agrupados en serie (y otros que NO vemos) cada uno de los cuales es una radiación electromagnética.

Cuando a los elementos en estado gaseoso se les suministra energía (descarga eléctrica, calentamiento...) éstos emiten radiaciones de determinadas longitudes de onda. Estas radiaciones dispersadas en un prisma de un espectroscopio se ven como una serie de rayas **discontinuas**, y el conjunto de las mismas es lo que se conoce como **espectro de emisión**. Todos los cuerpos no tienen el mismo espectro de emisión. Esto es, hay cuerpos que emiten en el infrarrojo, por ejemplo, y otros cuerpos no. Igualmente, si una luz continua atraviesa una sustancia, ésta absorbe unas determinadas radiaciones que aparecen como rayas negras en el fondo continuo (**espectro de absorción**).

En realidad, cada uno de los elementos químicos tiene su propio espectro de emisión. Y esto sirve para identificarlo y conocer de su existencia en objetos lejanos, inaccesibles para nosotros, como son las estrellas.

Así, el sodio tiene su característico espectro de emisión, lo mismo que el calcio, o que el hidrógeno, etc.

.

Espectro de emisión del Hidrógeno:

Espectro de emisión del sodio:

En 1885 Johann Balmer descubrió una ecuación que describe la emisión y absorción del espectro del átomo de hidrógeno:

$$\frac{1}{\lambda} = 1.097 \cdot 10^7 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

dónde n = 3, 4, 5, 6, ...

Balmer encontró la ecuación dada la casualidad de un error, ya que no tenía ninguna comprensión de la física subyacente. Esta ecuación se puede generalizar a todas las líneas del espectro de radiación, llegando a la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

En el espectro de emisión $n_f < n_i$

Rh: constante de Rydberg: 1.09678 10^7 m^{-1}

El espectro de emisión de hidrógeno cubre un amplio rango de longitudes de onda desde el infrarrojo hasta el ultravioleta. La siguiente tabla muestra las series de transición en el espectro de hidrógeno las cuales reciben el nombre de sus descubridores.

Serie	nf	ni	Región del espectro
Lyman	**1**	**2,3,4…n**	**Ultravioleta**
Balmer	**2**	**3,4,5…n**	**Visible/infrarrojo**
Paschen	**3**	**4,5,6…n**	**Infrarrojo**
Brackett	**4**	**5,6,7…n**	**Infrarrojo**
Pfund	**5**	**6,7,8…n**	**Infrarrojo (salto más corto)**

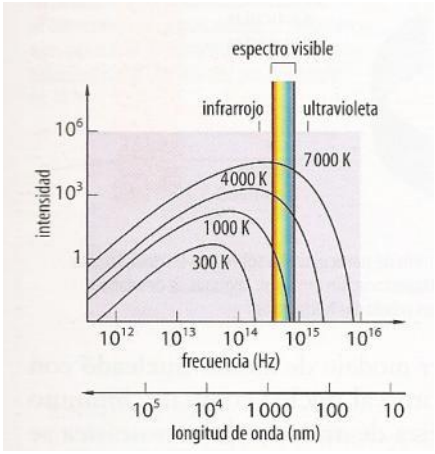
3.-ORÍGENES DE LA TEORÍA CUÁNTICA. *Hipótesis de Plank* y Efecto fotoeléctrico.

El modelo de Rutherford, basado en la concentración de carga positiva en el núcleo de los átomos girando los electrones a en órbitas a enorme distancia del núcleo en relación a su tamaño, explicaba la gran penetrabilidad de determinadas partículas en la materia. Pero recordemos que no explicaba los espectros atómicos experimentales conocidos así como la no emisión de energía por el giro de los electrones. Estas líneas espectrales deberían ser explicadas a partir de una nueva teoría atómica.

.

Hipótesis de Plank.

A finales del siglo XX surge uno de los fenómenos más complejos y enrevesados estudiados entonces, la ***radiación del cuerpo negro***, un sistema ideal que absorbe toda la radiación que incide sobre él. Estos cuerpos al irse calentando van encontrando un equilibrio de radiación en el cual, a mayor temperatura, el cuerpo emite a su vez más radiación. Los estudios realizados por el físico alemán, Max Plank (1858-1947) consistieron en el estudio de las frecuencias de las radiaciones emitidas por un cuerpo que se calentaba a diferentes temperaturas. Sus sorprendentes resultados encontraron que a medida que aumentaba la temperatura del cuerpo emisor, el pico de intensidad emitida se desplazaba hacia frecuencias más altas.



La teoría clásica hasta ese momento predecía que, al aumentar la temperatura, debía cambiar la intensidad de la radiación emitida pero no su frecuencia.

Esta experiencia sirvió para demostrar la relación entre la energía emitida por un cuerpo y la longitud de onda o frecuencia, características de las ondas. Este dilema resuelto por Max Planck provoca el nacimiento de la nueva **teoría cuántica**.

En 1900, Plank demostró que realizando una inusitada modificación de los cálculos clásicos, e introduciendo una hipótesis nueva y singularmente extraña, había encontrado una distribución espectral que explicaba perfectamente los datos experimentales.

Esta ``sorprendente hipótesis'' era ***que la energía emitida y absorbida por el cuerpo no era continua, es decir, el cuerpo no podía tomar o dejar cualquier valor de ésta, sino discreta y además, proporcional a la frecuencia***. Es decir:

$$E=h\nu$$

En donde ***h*** es la constante de proporcionalidad, de valor y conocida actualmente como *constante de Planck*.(h= $6.63.10^{-34}$ J.s). Y donde **v =** frecuencia de la radiación en s^{-1}

La radiación electromagnética se emite en ``paquetes'' de energía o fotones cuyo valor energético es:

$$E=nh\nu$$

Efecto fotoeléctrico.

Una placa de zinc recién pulida, cargada negativamente, pierde su carga si se la expone a la luz ultravioleta. Este fenómeno se llama ***efecto fotoeléctrico***.

En 1905, para tratar de explicar el mecanismo del efecto fotoeléctrico externo, Albert Einstein sugirió que podría considerarse que la luz se comporta en determinados casos como una partícula, y que la energía de cada partícula luminosa, o fotón, sólo depende de la frecuencia de la luz.

Si el fotón tiene la suficiente energía(o frecuencia, el electrón es expulsado del metal. La teoría de Einstein explicaba muchas características del efecto fotoeléctrico externo, como por ejemplo el hecho de que la energía máxima de los electrones expulsados sea independiente de la intensidad de la luz. (nº de fotones).

Para que los electrones puedan ser arrancados del metal la frecuencia de la radiación ha de ser mayor que la frecuencia umbral de los electrones adheridos al metal.

La luz estaría formada por FOTONES (partículas luminosas) $E= h\nu$

.

Por tanto: $E_{\text{cinética máxima del electrón desprendido}} = h\,(\nu - \nu_o)$

Este fenómeno otorga por tanto características de comportamiento corpuscular o de partícula a la luz.

4. MODELO DE BOHR

El modelo de Bohr es muy simple y recuerda al modelo planetario, los planetas describiendo órbitas circulares alrededor del Sol. El electrón de un átomo o ión hidrogenoide describe también órbitas circulares, pero los radios de estas órbitas no pueden tener cualquier valor. El modelo justifica la ecuación anterior del espectro de emisión de hidrógeno y está pasado en los tres postulados siguientes:

I) Si el electrón describe una órbita circular de radio r, la fuerza centrifuga será igual a la fuerza de atracción por el núcleo. Dichas órbitas son estacionarias (el electrón no emite energía en el giro).

$$Fcta = Fe \rightarrow \frac{mv^2}{r} = K\frac{Q_n \cdot q_e}{r^2}$$

II) En el modelo de Bohr, solamente están permitidas aquellas órbitas cuyo momento angular está cuantizado.

$$L = m_e v r = \frac{nh}{2\pi} \qquad \text{con } n = 1,2...$$

n es un número entero que se denomina número cuántico, y ***h*** es la constante de Plank: $6.6256 \cdot 10^{-34}$ J·s

III) Los electrones pueden saltar de una órbita permitida a otra, absorbiendo o emitiendo energía. Por tanto la frecuencia de la radiación será:

$$f = (E_2 - E_1)/h$$

En base a estos postulados podemos demostrar la longitud del radio de la primera órbita, combinando las ecuaciones de los dos primeros postulados.

$$r = \frac{n^2h^2}{4\pi^2 m^2 K Q_n q_e} \rightarrow r = a_0 \cdot n^2$$ para átomo de hidrógeno $a_0 = 5{,}29 \cdot 10^{-11}$ m

Se puede determinar así mismo que la energía asociada a un nivel energético del electrón sumando su energía cinética y potencial eléctrica vendrá dado por:

$$E = -K\frac{Q_n q_e}{2\,r} = -K\frac{Q_n q_e}{2\,a_0 \cdot n^2} = -\frac{b}{n^2}$$

$$b = 2.18\ 10^{-18} J$$

Si la Energía asociada tiene signo negativo, significa que si damos valor nulo a la energía cuando electrón y protón están infinitamente separados (electrón libre), todas las demás energías serán más pequeñas y por tanto negativas. Afirmamos entonces:

La energía del átomo es menor que la que tiene núcleo y electrón por separado.

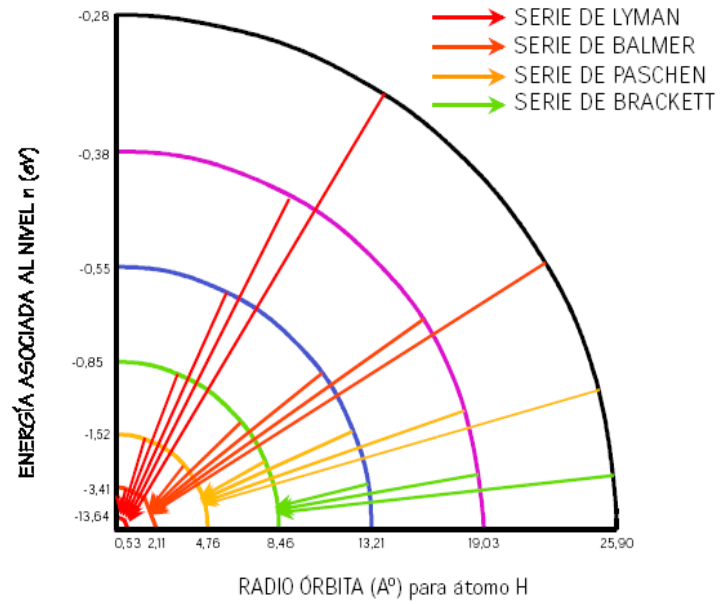
Para n=1, valor más negativo de energía, que corresponde a la mínima energía del electrón. (Máxima estabilidad). A todos los demás niveles se les denomina, niveles excitados.

.

El modelo permite explicar las líneas del espectro de líneas del átomo de hidrógeno. La energía radiante (en forma de un fotón) se emite cuando el electrón se mueve desde un estado de mayor energía a un estado de menor energía. El movimiento del electrón es análogo al de una pelota de tenis hacia arriba o hacia abajo en una escalera. La pelota puede parar en un escalón pero nunca entre dos escalones. El subir un escalón necesita energía, y el descender libera energía.

Cada línea del espectro de emisión corresponde a una transición particular en un átomo de hidrógeno. Cuando se estudia una muestra (previamente excitada), ésta contiene millones de átomos, y entonces se observan todas las transiciones posibles y, por consiguiente, las correspondientes líneas espectrales.

Niveles de energía para el átomo de hidrógeno, y las distintas series de emisión. Cada nivel de energía corresponde a la energía asociada a un estado energético permitido en la órbita, como postuló Bohr.



El modelo fue posteriormente corregido por ***Sommerfeld*** al afirmar que las órbitas serían elípticas. Los electrones se mueven realmente con diferente velocidad y por tanto la órbita no es circular. Dentro de una misma órbita principal existen subórbitas de diferente trayectoria además de la circular. Se desprende de aquí la necesidad de un segundo número cuántico que determine esa forma de la órbita.

Este número cuántico secundario o azimutal, ***l***, delimita por tanto la subórbita a la que pertenece el electrón, de modo que l podía variara desde el valor 0 hasta (n-1), siendo n, el número cuántico principal. El valor de *l = 0* correspondía, precisamente a la órbita circular, como caso particular de la elipse.

Años más tarde, en 1896, se observó además que cuando el espectro del hidrógeno se realizaba en presencia de campos magnéticos, las rayas espectrales sufrían otro desdoblamiento que se interpretó como las diferentes orientaciones posibles de las órbitas elípticas, que NO podían ser cualesquiera. Este hecho quedó recogido en las ecuaciones matemáticas mediante la dependencia en su solución de un tercer nº cuántico denominado número cuántico magnético (m) que podía *variar desde el valor –l hasta el +l* (pasando por el valor cero). A este efecto de desdoblamiento se lo denominó efecto Zeeman.

Incluso cuando de nuevo mejoraron las técnicas espectroscópicas, se pudo observar que cada una de las líneas del efecto Zeeman eran DOS MUY JUNTAS cuando los campos magnéticos aplicados al hidrógeno eran muy intensos. Este hecho se interpretó argumentando que tal desdoblamiento era debido a un acople del campo magnético que originaba "el electrón-bolita" girando sobre sí con el campo magnético externamente aplicado. A este efecto, se lo denominó efecto Zeeman anómalo y de nuevo, las ecuaciones matemáticas que lo describían mostraron unas soluciones que dependían de un cuarto número cuántico al que se le dio el nombre de spín y cuyo valor podía ser +1/2 ó 1/2. La interpretación de este cuarto nº se identificó con el sentido de giro del "electrón-bolita".
Así las cosas, resultó que para describir correctamente el estado del electrón en el átomo de hidrógeno, **eran necesarios conocer y especificar CUATRO NÚMERO CUÁNTICOS**. Esta situación era totalmente nueva en el mundo de la física. Pronto se vio que el mundo del microcosmos

.

está bastante más apartado de lo que los físicos pensaban del macrocosmos, por lo que hubo que "inventar" una nueva física.

4.1.-Aciertos e inconvenientes del modelo de Bohr:

Aciertos:

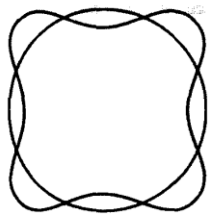
- *Justifica la estabilidad del átomo, orbitas estacionarias.*
- *Introduce el concepto de niveles de energía, justificando los espectros atómicos.*
- *Relaciona propiedades y estructura de los átomos.(justifica la clasificación periódica actual)*

Inconvenientes:

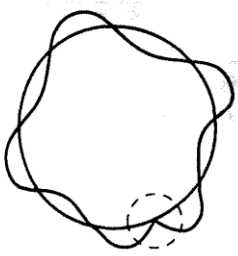
- *Los resultados para átomos de más de un electrón son defectuosos.*
- *Mezcla ideas clásicas e ideas cuánticas careciendo esto de coherencia.*

5.-Dualidad onda-partícula .Hipótesis de De Broglie (1924).

Los científicos de la época no tenían aún una explicación lógica de porqué los electrones se debían mantener a unas distancias fijas del núcleo. De Broglie razonó que si las ondas se pueden comportar como una corriente de partículas (fotones), como se demostró en el efecto fotoeléctrico, entonces las partículas se pueden comportar como ondas. Apareció así para la luz una **DOBLE NATURALEZA**: tanto un comportamiento ondulatorio (que explicaba perfectamente los fenómenos de interferencia y difracción) y un comportamiento corpuscular (que explicaba el efecto fotoeléctrico).



a) Órbita permitida



b) Órbita no permitida

Un electrón enlazado a un núcleo se comporta como una onda estacionaria, como las de la cuerda de una guitarra en la que los extremos están bloqueados, ésta no se mueven en absoluto, a esos puntos se les llama nodos. De Broglie argumentó que si el electrón se comporta como una onda estacionaria en el átomo de hidrógeno, la longitud de onda debe caber exactamente en la circunferencia de la órbita. De lo contrario parte de la onda se cancelaría a si misma en cada órbita sucesiva; con el tiempo la amplitud de la onda se cancelaría y se reduciría a cero.

Por tanto la longitud de la circunferencia ha de ser igual a un número entero de longitudes de onda:

$$2\pi r = n\lambda$$

Según la hipótesis de De Broglie, cada partícula en movimiento lleva asociada una onda, de manera que la dualidad onda-partícula puede enunciarse de la siguiente forma:

$$2º\ post.Bohr \rightarrow \ mvr = \frac{nh}{2\pi} \rightarrow p = \frac{nh}{2\pi r} = \frac{nh}{n\lambda}$$

$$p = m \cdot v = \frac{h}{\lambda}$$

Una partícula de masa m que se mueva a una velocidad v puede, en condiciones experimentales adecuadas, presentarse y comportarse como una onda de longitud de onda, λ.

Puede observarse la menor cantidad de movimiento de un electrón, comparada con la de un coche. A pesar la mayor velocidad del electrón, su masa es muchísimo más pequeña, en consecuencia, la longitud de onda asociada al coche es mucho más pequeña que la correspondiente al electrón.

.

6.- Principio de incertidumbre de Heisemberg (1927).

En 1927, el físico alemán Werner Heisenberg enunciaría el (fundamental) **principio de indeterminación** según el cual, ***es imposible conocer a la vez y con precisión la posición y el momento lineal de un electrón en el átomo*** ya que para estudiar a un electrón es necesario hacerlo "con luz", pero al recibir tal luz, el electrón se excitaría, con lo que nosotros estudiamos es la situación alterada del electrón, pero no su situación "no alterada" que es la que interesa. Hay que reparar en el hecho de que este principio NO marca una limitación material-instrumental, sino una limitación FÍSICA; es decir, que es imposible acceder a la realidad profunda, pues la presencia del observador modifica la realidad que desea estudiar.

La expresión matemática que describe el **principio** de **incertidumbre** de Heisenberg es :

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

siendo Δx la incertidumbre en la posición y Δp la incertidumbre en la cantidad de movimiento.

Si queremos determinar con total precisión la posición:

$\Delta x = 0$ (incertidumbre 0 para la posición)

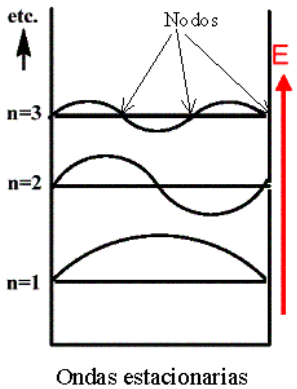
De la desigualdad para el principio de incertidumbre verificamos entonces que :

$$\Delta p \geq \frac{h}{4\pi\Delta x} \rightarrow \infty$$

Es decir, que la **incertidumbre** en el momento es infinita.

Por lo tanto, para salvar el inconveniente marcado por la indeterminación de Heisenberg, se hizo necesario comenzar a hablar de probabilidad de hallar un electrón en una zona del espacio determinada. Curiosamente, las soluciones de las nuevas ecuaciones que describían esas probabilidades dependían de cuatro números (cuánticos): los mismos n, l m y s del modelo de Bohr, pero ahora representaban "otra cosa". Dado que NO es posible hablar de la localización exacta de los electrones, y solo de **probabilidades** de hallarlo, a esa zonas del espacio donde la probabilidad de hallar al electrón es máxima (95%), se la denominó **ORBITAL**. La forma geométrica (tridimensional) de los orbitales atómicos depende, precisamente, de los valores de los cuatro números cuánticos, y se bautizaron con nombres diferentes.

7.-Modelo mecano-cuántico.



Ondas estacionarias

Basado en el principio de dualidad onda partícula y en el principio de incertidumbre, en el año 1926, el física austriaco, ***Erwin* Shrödinger** utilizó una técnica matemática complicada para formular una ecuación que describe el comportamiento y la energía del electrón, teniendo en cuenta que toda partícula lleva asociada una onda .En un espacio de una dimensión estas ondas estables están caracterizada por un número entero. Al ser un espacio de tres dimensiones, dará origen a los tres números cuánticos. Podemos pensar en las ecuaciones de onda de Schrödinger como en ondas estacionarias de diferente energía.

Para resolver la ecuación de Shrödinger se necesitan cálculos avanzados. Es importante destacar que la ecuación incorpora comportamiento de partícula, tiene en cuenta la masa de la misma, como de onda, en términos de una ecuación de onda Ψ, que no tiene en sí significado físico (el principio de incertidumbre imposibilita conocer la posición exacta y la velocidad del

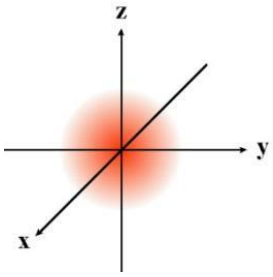
.

electrón). El valor de la función de onda al cuadrado **(Ψ^2) si representa *la distribución de probabilidad de encontrar al electrón en cierta región del espacio (ORBITAL)*, también denominado *densidad electrónica*.**

Por tanto las soluciones de la ecuación de Shrödinger son unas funciones que dependen de tres números, denominados números cuánticos (n, l, m).

8.-Descripción mecánico- cuántica del átomo: Orbitales y números cuánticos

Mientras que en el modelo de Bohr se hablaba de órbitas definidas en el modelo de Schrödinger sólo podemos hablar de las distribuciones probables para un electrón con cierto nivel de energía. Así para un electrón en el estado fundamental la probabilidad de la distribución se refleja en la siguiente figura, dónde la intensidad sombreada indica una mayor probabilidad de encontrar al electrón en esa región, o lo que es lo mismo una mayor densidad electrónica.



De la resolución de la ecuación de onda de Schrödinger se obtiene una serie de funciones de onda (ó probabilidades de distribución de los electrones) para los diferentes niveles energéticos que se denominan **orbitales atómicos**.

La figura representa el orbital de mínima energía del átomo de hidrógeno con -2.18 x 10^{18} J (la misma que tenía la órbita más cercana al núcleo del modelo de Bohr). Mientras que el modelo de Bohr utilizaba un número cuántico(n) para definir una órbita el modelo de Schrödinger utiliza tres números cuánticos para describir un orbital: ***n, l y*** m_l . A continuación vemos las características de estos números:

Número cuántico principal "n"

- Toma valores enteros: 1, 2, 3...
- A mayor n más lejos se encuentra del núcleo la región de mayor densidad electrónica.
- A mayor n el electrón tiene mayor energía y se encuentra menos "atado" al núcleo.

Número cuántico del momento angular ó azimutal " ℓ ***"*** :

- Depende de "n" y toma valores enteros de 0 a (n-1). Así para n=1 sólo hay un valor posible 0. Para n=2 hay dos valores de l, 0 y 1. Para n=3 hay tres valores posibles: 0, 1 y 2.
- Generalmente el valor de ***l*** se representa por una letra en vez de por su valor numérico:

ℓ	0	1	2	3	4	5
nombre del orbital	s	p	d	f	g	h

- Definen *la forma* del orbital

El número cuántico magnético " m_l ***"***

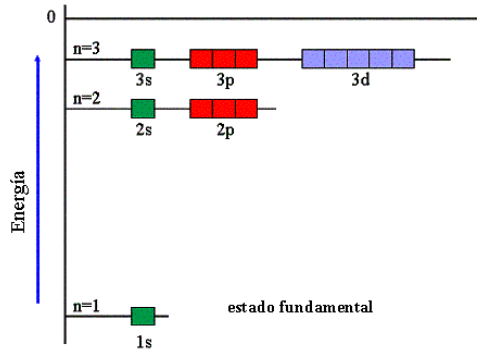
- El valor del número cuántico magnético depende de ***l***. Toma valores enteros entre –***l*** y ***l***, incluyendo al 0. Para cierto valor ***l*** hay (2 ***l*** +1) valores de m_l
- Describe la orientación del orbital en el espacio.

Veamos los diferentes orbitales que podemos tener para n=3. Tendremos entonces tres valores de ***l***: 0,1 y 2. Los valores de ml para cada valor de ***l*** se compilan en la tabla siguiente: (los orbitales que comparten los valores de n y ***l*** se dicen que pertenecen al mismo subnivel y todos los orbitales con el mismo n formarían un nivel)

.

ℓ *(define la forma)*	*Subnivel*	m_l *(define orientación)*	*Nº de orbitales en el subnivel*
0	3s	0	1
1	3p	-1,0,1	3
2	3d	-2,-1,0,1,2	5

- Para el hidrógeno todos los orbitales del mismo nivel tienen la misma energía, como podemos ver en el gráfico adjunto:



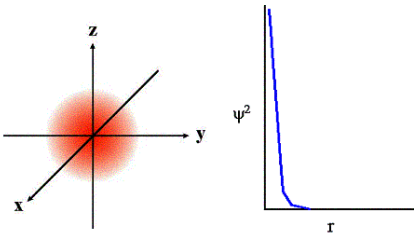
- En condiciones normales todos los átomos de hidrógeno están en su estado fundamental (El electrón en el orbital 1s)
- El electrón puede pasar a un estado excitado mediante la absorción de un fotón con el nº apropiado de cuantos de energía.

9.-Representaciones de los Orbitales atómicos.

- ***Orbital tipo s***

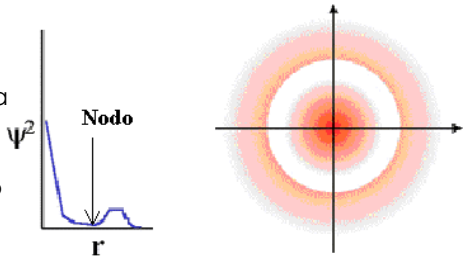
El orbital 1s tiene simetría esférica.

Representado Ψ^2 frente a la distancia al núcleo (r) vemos que la probabilidad de encontrar al electrón disminuye conforme aumenta r. Esto indica que en el estado fundamental la atracción electrostática del núcleo es lo suficientemente fuerte para mantener al electrón en un radio próximo al núcleo.

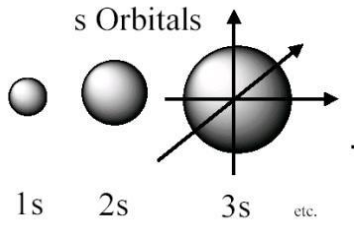


Los orbitales s de niveles superiores son también esféricamente simétricos, pero presentan nodos en la función de probabilidad:

- En un *nodo* la densidad electrónica se aproxima a 0.
- El orbital 2s tiene un nodo, el orbital 3s dos nodos, etc.
- Los orbitales s para n>1 (estados excitados) tienen una densidad electrónica en la cual es más probable encontrar al electrón lejos del núcleo.
- ***El tamaño del orbital s aumenta al aumentar el número cuántico principal (n).***



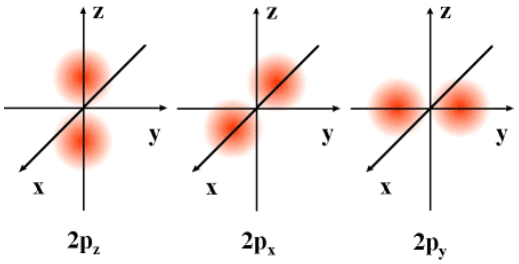
.



Generalmente se representan los límites de los orbitales atómicos de Schrödinger de manera que el orbital englobe al 90% de la distribución de densidad electrónica. En el caso de los orbitales s la representación es una esfera, de mayor radio cuánto mayor sea n..

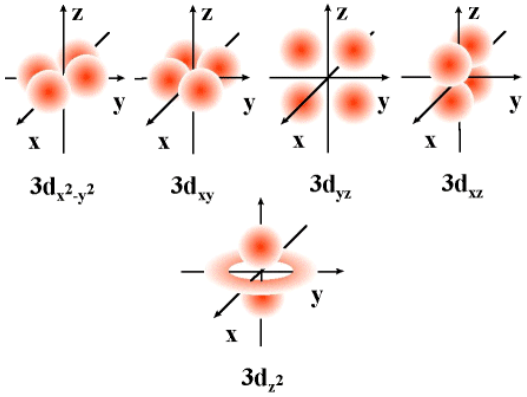
- ***Orbital tipo p***

La forma de los orbitales p es de dos lóbulos situados en lados opuestos al núcleo y con un nodo en él. Hay tres tipos de orbitales p (***l***=1; m_l= -1,0,1) que difieren en su orientación. No hay una correlación simple entre los tres números cuánticos magnéticos y las tres orientaciones: las direcciones *x, y* y z. Los orbitales p del nivel *n* se denominan np_x, np_y, np_z. Los orbitales p al igual que los s aumentan de tamaño al aumentar el número cuántico principal.



- ***Orbital tipo d***

En el tercer subnivel tenemos 5 orbitales atómicos (para n>3 l =2; m_l=-2,-1,0,1,2) con diferentes orientaciones en el espacio tal y como vemos en la figura :

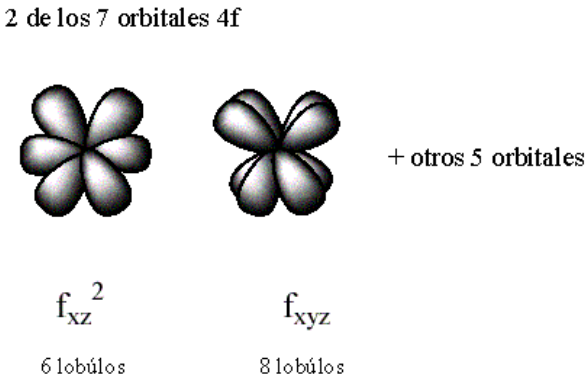


Aunque el orbital $3d_{z^2}$ difiere en su forma de los otros cuatro, los cinco orbitales d tienen todos la misma energía.

.

- ***Otros orbitales de mayor energía***

Para n>4 tendremos 7 **orbitales f** (*l*=3 y ml=-3,-2,-1,0,1,2,3). Los orbitales f son importantes para comprender el comportamiento de los elementos con número atómico mayor a 57.

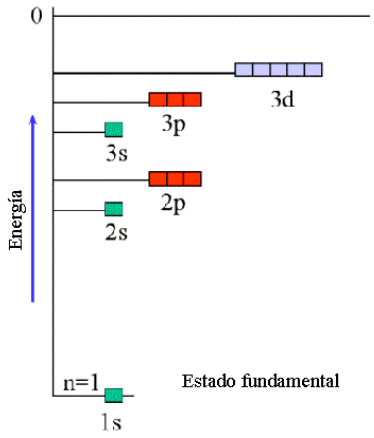


Para valores de ***l*** >4 tenemos los orbitales *g* y subsiguientes (a partir de *f* sigue el orden alfabético de las consonantes). En química general nos bastará con los orbitales s, p y d para comprender las propiedades de los elementos.

10.- Las energías de los orbitales atómicos

En el modelo de Böhr la energía de un electrón dependía únicamente del número cuántico principal. Lo mismo ocurre en la descripción de los orbitales atómicos en mecánica cuántica **para el átomo de hidrógeno.** Para átomos con más de un electrón (polielectrónicos) los orbitales atómicos tienen la misma forma que los orbitales del átomo de hidrógeno, pero la presencia de más de un electrón afecta a los niveles de energía de los orbitales (debido a la repulsión entre dos electrones).

Así por ejemplo el orbital 2s tienen un valor de energía menor que los orbitales 2p para átomos con más de un electrón:

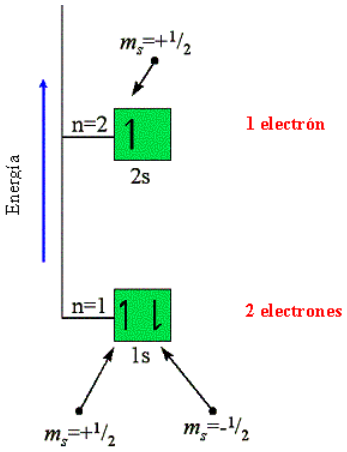


10.1.- El número cuántico de espín electrónico y el Principio de exclusión de Pauli

Los experimentos con los espectros de emisión de los átomos de sodio e hidrógeno indican que las líneas del espectro se pueden separar por la aplicación de un campo magnético externo obteniéndose para cada línea dos muy próximas. Este efecto duplica los niveles de energía que se le suponen al átomo.

.

Se considero entonces que los electrones actúan como pequeños imanes en un campo magnético debido a que giran sobre su propio eje. Ya que un electrón puede girar en dos sentidos (como las agujas del reloj ó en el sentido contrario a las agujas del reloj), se introdujo un cuarto número cuántico, conocido como **número cuántico de espín electrónico**, m_s, que toma dos valores: + ½ ó – ½ .



El principio de exclusión de Pauli establece que dos electrones en un átomo no pueden tener los mismos cuatro números cuánticos (n, l, m_l y m_s)

Un orbital atómico podrá estar ocupado como mucho por dos electrones que tengan valores de m_s opuestos.

10.2.- Configuración Electrónica

La forma como están distribuidos los electrones de un átomo entre los distintos orbitales atómicos se denomina *configuración electrónica*

Los orbitales se llenan en orden creciente de energía, con no más de dos electrones por orbital

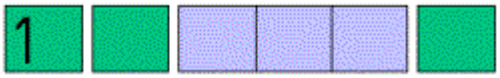
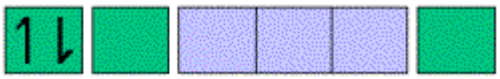
Ejemplo: Litio

Este elemento tiene 3 electrones. Empezaremos llenando el orbital de menor energía con dos electrones que tendrán distinto m_s. El electrón restante ocupará el orbital 2s, que es el siguiente con menor energía: La flecha indica el valor del cuarto número cuántico: para +1/2: □ y□ para– 1/2: También podemos describir la distribución de electrones en el átomo de litio como:

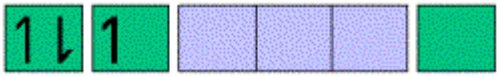
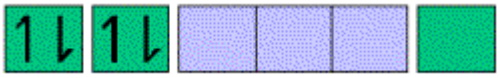
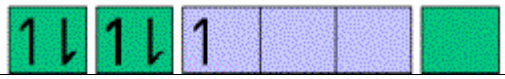
$$1s^2 2s^1$$

Los electrones que tienen números de espín opuestos cancelan los efectos magnéticos y se dice que son *electrones apareados*. Un ejemplo son los dos electrones que ocupan el orbital 1s en el átomo de Litio. De manera similar decimos que el electrón que ocupa el orbital 2*s* orbital está *desapareado*.

En la tabla a continuación vemos como se distribuyen los electrones de los átomos en orden creciente a su número atómico (Z)

Elemento	Z	Diagrama de orbitales 1s 2s 2p 3s	Configuración electrónica
H	1		$1s^1$
He	2		$1s^2$

.

Li	**3**		**$1s^2\ 2s^1$**
Be	**4**		**$1s^2\ 2s^2$**
B	**5**		**$1s^2\ 2s^2\ 2p^1$**
C	**6**		**$1s^2\ 2s^2\ 2p^2$**

En el helio se completa el primer nivel (n=1), lo que hace que la configuración del He sea muy estable. Para el Boro el quinto electrón se sitúa en un orbital 2p y al tener los tres orbitales 2p la misma energía no importa cuál de ellos ocupa. En el carbono el sexto electrón podría ocupar el mimo orbital que el quinto u otro distinto. La respuesta nos la da ***la regla de Hund***:

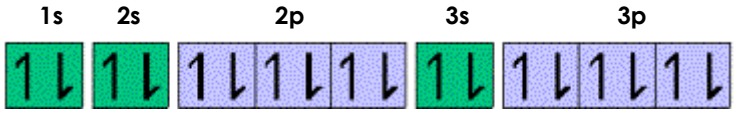
> ***La distribución más estable de los electrones en los subniveles es aquella que tenga el mayor número de espínes paralelo s(despareados).***

Los electrones se repelen entre sí y al ocupar distintos orbitales pueden situarse más lejos uno del otro. Así el carbono en su estado de mínima energía tiene dos electrones desapareados, y el nitrógeno tiene 3.

N	**7**		**$1s^2\ 2s^2\ 2p^3$**
Ne	**10**		**$1s^2\ 2s^2\ 2p^6$**
Na	**11**		**$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$**

El neón completa el nivel dos y al igual que el helio tiene una configuración estable. Las configuraciones electrónicas pueden también escribirse de manera abreviada haciendo referencia al último nivel completo. Así la configuración del sodio la podemos escribir como **[Ne]$3s^1$** .

También podemos escribir la configuración del litio como **[He]$2s^1$** A los electrones que pertenecen a un nivel incompleto se les denomina *electrones de valencia*. El gas noble Argón representa el final del período iniciado por el sodio para n=3.

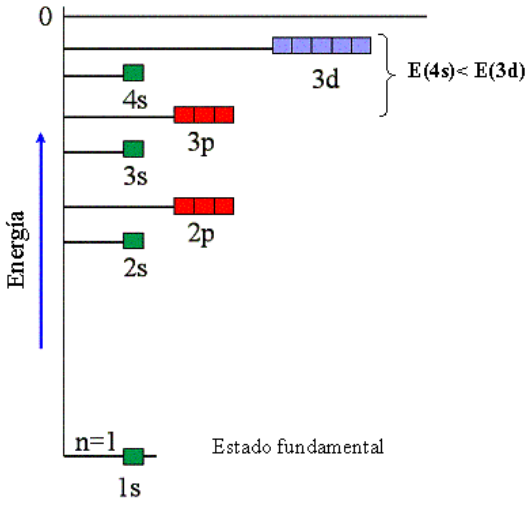


$_{18}Ar$ =[Ne] $3s^2\ 3p^6$

En el siguiente elemento, el potasio con 19 electrones, deberíamos empezar a llenar los orbitales 3d. Sin embargo el comportamiento químico del potasio es similar al de litio y el sodio, ambos con un electrón de valencia desapareado en un orbital s, por lo que al potasio le correspondería la configuración [Ar] $4s^1$. Por lo tanto el orbital 4s tendrá que tener menor energía que los orbitales 3d (debido al efecto de los electrones en el orbital).

- ***La regla de estabilidad energética depende de los números cuánticos n y l .***
- ***Su inestabilidad aumenta a medida que lo hace el valor de n+l***
- ***Cuando para dos orbitales la suma n+l es la misma , tiene mayor energía aquel que tenga mayor valor de n***

.



El Calcio con 20 electrones completará el orbital 4s y el siguiente elemento con 21 electrones, el escandio, se empezará a llenar los orbitales 3d. Como hay 5 orbitales 3d en el cuarto período de la tabla periódica aparecen 10 elementos (del Sc al Zn) más que en los períodos anteriores. A estos elementos se les denomina **metales de transición** y se caracterizan por tener el subnivel 3d incompleto ó por dar fácilmente lugar a cationes con este subnivel incompleto.

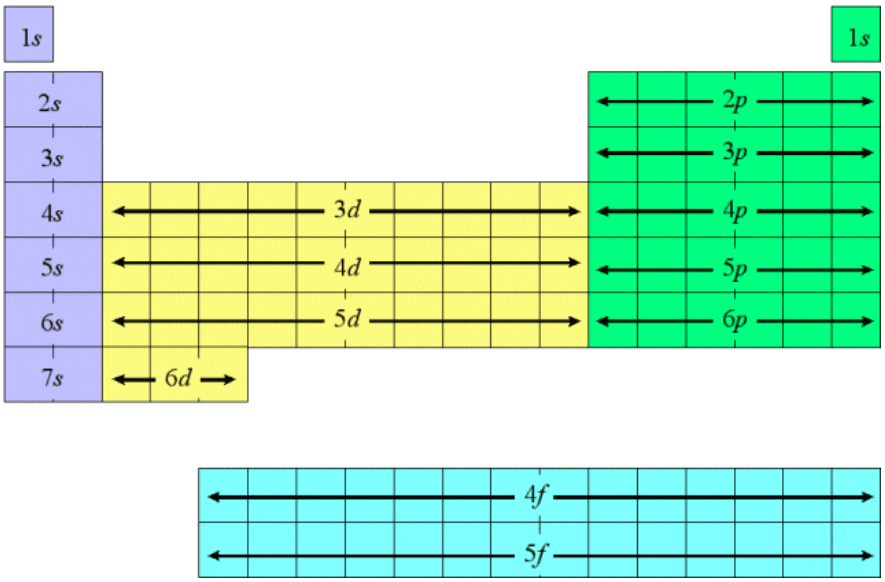
En los elementos de transición del grupo 6 (Cr, Mo y W), así como los del grupo 11 (Cu, Ag, Au), las configuraciones electrónicas más estables son las de semillenado de orbitales tipo d, ya que se evita la repulsión interelectrónica al quedar estos electrones más desapareados:

$_{24}Cr$: $3d^4 4s^2 \rightarrow 3d^5\ 4s^1$ ésta última más estable.

$_{29}Cu$: $3d^9\ 4s^2 \rightarrow 3d^{10}\ 4s^1$

10.3.-Configuración Electrónica y la Tabla Periódica

La tabla periódica esta estructurada de manera que todos los átomos de una columna tienen los mismos electrones de valencia. Así los metales alcalinos de la primera columna tienen todos un electrón de valencia en un orbital s, ó el grupo de los halógenos que tienen 7 electrones de valencia: dos en el orbital s y 5 en los tres orbitales p. Si agrupamos las columnas en función del último tipo de orbital que se ha llenado tendremos:



.

- A la izquierda, están los metales alcalinos y alcalinotérreos, donde se están llenando los orbitales s.
- A mano derecha, están los grupos del 13 a 18, en los cuales se están llenando los orbitales p.

- En la mitad de la tabla periódica, , están los metales de transición, en los cuales se están llenando los orbitales d.
- Debajo de los metales de transición están las dos filas de elementos en los cuales se están llenando los orbitales f; los lantánidos y los actínidos.

En resumen:

- 2, 6, 10 y 14 son el número de electrones que pueden albergar los orbitales ***s, p, d*** y ***f*** respectivamente(que corresponden al número cuántico del momento angular ***l***=0,1,2,3)

- El primer subnivel de orbitales s es el 1s, del subnivel p es el 2p, del subnivel d es el 3d y del subnivel f es el 4f. (es decir no existen los orbitales 1p, 1d, 2d, 1f, 2f y 3f).

.

Ejercicios Tema 2: Estructura de la materia. QUÍMICA 2º BACHLLERATO.

1.-La energía de los niveles principales de un átomo de hidrógeno viene dada por la expresión $E = -13{,}64Z^2/n^2$ (eV). Calcula la longitud de onda de la radiación emitida por el salto de un electrón del nivel n = 4 al n = 2 en un átomo de hidrógeno. DATOS: $H=6{,}63\ 10^{-34}$ J.s; $e^-=1{,}6\ 10^{-19}$C .

2.-Los rayos X tienen una longitud de onda que oscila entre los 10^{-3} y los 10 nm. Determina la energía correspondiente a cada radiación e intenta averiguar por qué se denominan 'penetrantes' a los primeros y 'blandos' a los segundos.

3.-Determina la frecuencia y la longitud de onda del fotón emitido por el tránsito del electrón del átomo de hidrógeno del nivel 3 al nivel 2, sabiendo que entre ellos hay una diferencia de energía de 1,89 eV. ¿Caerá dentro del visible?

4.- ¿Qué límite de radiación del espectro visible es más energético: el rojo o el azul?

5.- ¿Son posibles los estados representados por los siguientes números cuánticos: (2,0,0,-1/2); (3,1, -1,1/2); (1,1,0,1/2); (4,0,1,-1/2)

6.-Escribe las configuraciones electrónicas de los siguientes elementos o iones:
Cu (Z = 29) Cl- (Z = 17) Fe^{2+} (Z = 26)

7.-Dados los elementos de números atómicos 17, 20 y 55, escribir para cada uno:
a) Configuración electrónica.
b) Símbolo.
c) Ión más estable y su configuración electrónica.

8. Considera la configuración electrónica siguiente: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^8\ 4s^2$.
a) ¿A qué elemento corresponde?.
b) ¿Cuál es su situación en el sistema periódico?.
c) Indica los valores de los números cuánticos del último electrón que entra a formar parte de su configuración electrónica.
d) Nombre de dos elementos cuyas propiedades sean semejantes a éste. Razónalo.

9.- Los rayos X tienen longitudes de onda comprendidas entre 0,1 y 1 nm. Calcula la energía de fotones de rayos X cuya longitud de onda es 0,6 nm, sabiendo que el valor de la constante de Planck es $h = 6{,}625 \cdot 10^{-34}$ J·s .

10.- De las siguientes proposiciones, referentes a la teoría de Bohr para el átomo de hidrógeno, señala las que consideras correctas:
i) Las órbitas del electrón son circulares y pueden tener cualquier radio.
ii)La velocidad del electrón aumenta al aumentar el radio de la órbita.
iii)El electrón sólo puede ocupar determinadas órbitas estacionarias, que están cuantizadas.
iv)La energía asociada a las órbitas del electrón es proporcional al radio de la órbita.
v) Si el electrón pasa de una órbita a otra tiene que emitir o absorber energía.
vi) La diferencia entre los distintos niveles de energía es constante.

11. Dadas la configuración electrónica 1s2, 2s2 2p6, 3s2 3p6, 5s1 de un elemento, cuyo símbolo representaremos por X, se puede deducir que:
i) Su número atómico es 19.
ii) El átomo de X se encuentra en su estado fundamental.
iii) El átomo de X se encuentra en un estado excitado.
iv) Al pasar el electrón desde el orbital 4s al 5s se emite energía luminosa, que da lugar a una línea del espectro.
Sol:i) Depende si es un átomo neutro; ii) No; iii) si; iv) no

12. Escribe la configuración electrónica correspondiente a cada uno de los siguientes

.

átomos e iones:

Na^+, Mg^{2+}, Al, Al^{3+}, O, O^{2-}, Cl

13. La configuración electrónica de un átomo neutro es $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$.
a) ¿Cuál es el número atómico del elemento al que corresponde dicho átomo?
b) ¿En qué grupo del sistema periódico debe encontrarse?

14. Supongamos cuatro electrones de un átomo, representados por sus cuatro números cuánticos:
Electrón 1 (4, 1, -1, -1/2)
Electrón 2 (3, 1, 2, +1/2)
Electrón 3 (1, 0, 0, +1/2)
Electrón 4 (4, 2, 0, -1/2)

Dar contestación razonada a las siguientes cuestiones:
a) ¿Son correctos todos los cuartetos de números cuánticos, o hay alguno(s) imposible(s)?
b) Ordenar los electrones según el criterio de energía creciente.
c) Indicar el tipo de orbital atómico en que se encuentra cada electrón "correcto".

15.-Responde razonadamente a: **a)** ¿Los orbitales 2px, 2py y 2pz tienen la misma energía?; **b)** ¿Por qué el número de orbitales "d" es 5? (Selectividad)

16.-El grupo de valores 3,0,3, correspondientes a los números cuánticos n, l y m, respectivamente, ¿es o no permitido? ¿Y el 3,2,–2? Justifica la respuesta.

17.-Indica los números cuánticos de cada unos de los 3 últimos e^- del P.

18.-Indica el valor de los cuatro números cuánticos de cada uno de los electrones del átomo de titanio neutro (Z = 22)

19.-Indica el valor de los números cuánticos de cada uno de los seis últimos electrones del Mo (Z = 42).

20.-Justifica si es posible o no que existan electrones con los siguientes números cuánticos: **a)** (3, –1, 1, –½); **b)** (3, 2, 0, ½); **c)** (2, 1, 2, ½); **d)** (1, 1, 0, –½).

21.-Justifica si es posible o no que existan electrones con los siguientes números cuánticos: **a)** (2, –1, 1, ½); **b)** (3, 1, 2, ½); **c)** (2, 1, –1, ½); **d)** (1, 1, 0, –2) (Cuestión Selectividad)

22.- El color amarillo de la luz de sodio posee una longitud de onda de 5890 Å. Calcula la diferencia energética correspondiente a la transición electrónica que se produce expresada en eV. ($h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ J·s; 1 eV = $1{,}602 \cdot 10^{-19}$ J)

23.-Calcula la energía emitida por 0,2 moles de fotones producidos por radiaciones de 60 s^{-1}.

24.-Qué energía cinética tendrán 1 mol de electrones desprendidos de la superficie metálica del sodio al iluminar ésta con radiación suficiente de 4800 Å si sabemos que la frecuencia umbral del sodio es de $5 \cdot 10^{14}\ s^{-1}$. (1 Å = 10^{-10} m)

25.-Calcula: **a)** la energía de un fotón cuya longitud de onda es de 5500 Å. **b)** la energía de un mol de fotones.

26.-Calcula la energía de un fotón de una lámpara de vapor de mercurio cuya longitud de onda es de 546 nm.

27.- Calcula frecuencia y la longitud de onda de la radiación emitida por un electrón que pasa del estado excitado cuya energía es de –3,4 eV al estado fundamental de energía -13,6 eV.

Soluciones:

.

1.- La expresión permite calcular la energía del electrón en el nivel 4 y el nivel 2:

$$E_4 = -13{,}64 \cdot 1^2 / 4^2 = -0{,}8525 \text{ eV} \quad E_2 = -13{,}64 \cdot 1^2 / 2^2 = -3{,}41 \text{ eV}$$

La diferencia de energía ($E_2 - E_4 = -2{,}5575$ eV) señala una disminución energética y, de acuerdo a la hipótesis de Planck, supone la emisión de radiación electromagnética formada por fotones de energía 2,5575 eV cuya frecuencia (o longitud de onda) se puede determinar por la expresión :

$$\Delta E = h.\nu = h.c / \lambda$$

Por tanto la determinación de la longitud de onda sólo requiere saber expresar los diferentes datos y valores obtenidos en el sistema internacional de unidades para efectuar los cálculos con corrección:

$$h = 6{,}6252 \times 10^{-27}\ erg.s = 6{,}6252 \times 10^{-27}\ g \times \frac{cm^2}{s^2} \times s \times \frac{1\ kg}{1000\ g} \times \frac{1\ m^2}{10000\ cm^2} = 6{,}6252 \times 10^{-34}\ J.s$$

$$\Delta E = 2{,}5575\ eV \times \frac{1{,}602 \cdot 10^{-19}\ C}{1\ e} = 4{,}097 \times 10^{-19}\ J$$

$$c = 3 \cdot 10^8\ m/s$$

$$\lambda = \frac{h.c}{\Delta E} = \frac{6{,}6252 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{4{,}097 \cdot 10^{-19}} = 4{,}851 \cdot 10^{-7}\ m = 4851\ A^o$$

9.- 33,125·10-17 J.

15.-

a) Si tienen la misma energía. Sólo al aplicar un campo magnético se desdoblan según la dirección de éste.

b) Por que en orbitales d (l=2) y m toma cinco valores posibles: –2, –1, 0, +1 y +2 correspondientes a los cinco orbitales.

16.-

a) 3,0,3: No permitido. Pues si `l`=0, entonces m solo puede tomar el valor 0. (–`l` PmP +`l`).

b) 3,2,–2: Sí permitido. Puesto que `l` < n y `l`=2, con lo que m puede tomar los valores:-2, -1, 0, +1 y +2.

17.-

Z (P) = 15. Configuración electrónica: $1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^3$

n = 3; l = 1; m = –1; s = –½; n = 3; l = 1; m = 0; s = –½; n = 3; l = 1; m = +1; s = –½;

18.-

n = 1; l = 0; m = 0; s = –½; n = 1; l = 0; m = 0; s = +½;
n = 2; l = 0; m = 0; s = –½; n = 2; l = 0; m = 0; s = +½;
n = 2; l = 1; m = -1; s = –½; n = 2; l = 1; m = 0; s = –½; n = 2; l = 1; m = +1; s = –½;
n = 2; l = 1; m = -1; s = +½; n = 2; l = 1; m = 0; s = +½; n = 2; l = 1; m = +1; s = +½;
n = 3; l = 0; m = 0; s = –½; n = 3; l = 0; m = 0; s = +½;
n = 3; l = 1; m = -1; s = –½; n = 3; l = 1; m = 0; s = –½; n = 3; l = 1; m = +1; s = –½;
n = 3; l = 1; m = -1; s = +½; n = 3; l = 1; m = 0; s = +½; n = 3; l = 1; m = +1; s

= +½;
n = 4; l = 0; m = 0; s = –½; n = 4; l = 0; m = 0; s = +½;
n = 3; l = 2; m = -2; s = –½; n = 3; l = 2; m = -1; s = –½

19.-

Z (Mo) = 42. Configuración electrónica: [Kr] $5s^2\ 4d^4$

n = 5; l = 0; m = 0; s = –½; n = 5; l = 0; m = 0; s = +½;
n = 4; l = 2; m = –2; s = –½; n = 4; l = 2; m = –1; s = –½;
n = 4; l = 2; m = 0; s = –½; n = 4; l = 2; m = +1; s = –½;

20.-

a) (3, –1, 1, –½); **NO.** Porque l no puede tomar valores negativos.

b) (3, 2, 0, ½); **SÍ.** l <n; –l,0,+l; s (–½, ½). Orbital 3d

c) (2, 1, 2, ½); **NO.** Porque m > l

d) (1, 1, 0, –½). **NO.** Porque l = n y debe ser menor.

21.-

a) (2, –1, 1, ½); **NO.** Porque l no puede tomar valores negativos.

b) (3, 1, 2, ½); **NO.** Porque m > l

c) (2, 1, –1, ½); **SÍ.** l <n; –l,0,+l; (–½, ½). Orbital 2p

d) (1, 1, 0, –2) **NO.** Porque l = n y debe ser menor y s(–½, ½).

22.-

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\times10^{8}\ m/s}{5{,}89\times10^{-7}\ m} = 5{,}1\times10^{14}\ \ s^{-1}$$

$$\Delta E = h\times\nu = 6{,}626\times10^{-34}\ J\times s\times5{,}1\times10^{14}\ \ s^{-1}\times\frac{1eV}{1{,}602\times10^{-19}\ J} = \mathbf{2{,}1\ eV}$$

23.-

$$E = n\times h\times\nu = 0{,}2\times6{,}02\times10^{23}\times6{,}626\times10^{-34}\ J\times s\times60\ s^{-1} = \mathbf{4{,}8\times10^{-9}\ J}$$

24.-

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\times10^{8}\ m/s}{4{,}8\times10^{-7}\ m} = 6{,}25\times10^{14}\ \ s^{-1}$$

$$E_{cin.e^-} = \mathrm{h}\times\left(\nu-\nu_0\right) = 6{,}626\times10^{-34}\ J\times s\times\left(6{,}25\times10^{14}\ s^{-1} - 5\times10^{14}\ s^{-1}\right) = 8{,}28\times10^{-20}\ J$$

$$E_{cinetica} = \mathrm{n}\times E_{cine.e^-} = 6{,}02\times10^{23}\times8{,}28\times10^{-20} = \mathbf{49860\ J}$$

25.-

c) $E_{foton} = \mathrm{h}\times\dfrac{c}{\lambda} = 6{,}626\times10^{-34}\ J\times s\times\dfrac{3\times10^{8}\ m/s}{5{,}5\times10^{-7}\ m} = \mathbf{3{,}6\times10^{-19}\ J}$

d) $E(1\ mol) = \mathrm{n}\times E_{foton} = 6{,}02\times10^{23}\times3{,}6\times10^{-19}\ J = \mathbf{217{,}6\ kJ}$

.

26.-

$$E_{foton} = \mathrm{h} \times \frac{c}{\lambda} = 6,626 \times 10^{-34}\, J \times s \times \frac{3 \times 10^{8}\, m/s}{5,46 \times 10^{-7}\, m} = \mathbf{3,64 \times 10^{-19}\, J}$$

27.-

e) $$\nu = \frac{\Delta E}{\mathrm{h}} = \frac{-3,4\ eV - (-13,6\ eV)}{6,626 \times 10^{-34}\, J \times s} \times \frac{1,602 \times 10^{-19}\, J}{1 eV} = \mathbf{2,47 \times 10^{15}\, s^{-1}}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^{8}\, m/s}{2,47 \times 10^{15}\, s^{-1}} = \mathbf{121,6\, nm}$$

1.-Radio atómico
2.-Radio iónico
3.-Potencial de ionización.
4.-Afinidad electrónica
5.-Electronegatividad y carácter metálico.

El estudio de la materia y de sus propiedades en el mundo occidental, empezó ya en la antigüedad, en el siglo V con los griegos, entonces se describía el mundo material como la combinación de cuatro elementos: tierra, agua, aire y fuego. A medida que se iban descubriendo nuevos elementos los químicos iban descubriendo analogías en sus propiedades. Existe por tanto una ley natural que relaciona los distintos elementos y los agrupa en función de sus propiedades.

DÖBERNIER en 1829, hizo la primera clasificación de los elementos en **triadas**, conjunto de tres elementos de propiedades muy similares. El central tenía el peso atómico medio de los extremos de la triada.

Li	*Ca*	*Cl*	*S*
Na	*Sr*	*Br*	*Se*
k	*Ba*	*I*	*Te*

Newland, 1866, formuló la ley de las octavas. En aquella época se hablaba de pesos atómicos y no de masas atómicas. Estos agrupamientos de ocho elementos permitieron definir las primeras propiedades periódicas.

Mendeleiev Y Meyer (1869), tomando de partida los estudios anteriores establecieron la primera tabla de elementos basándose en:

-Colocar los elementos por orden creciente de masas atómicas.

-Agruparlos en función de sus propiedades. En el caso de Mendeleiev en columnas.

Tuvo mérito el dejar espacios libres para los elementos que en ese momento no habían sido aún descubiertos .Prediciendo incluso algunas de sus propiedades. Así predijo la existencia del elemento Germanio, al que inicialmente se le denominó Ekasilicio por sus propiedades semejantes al Silicio.

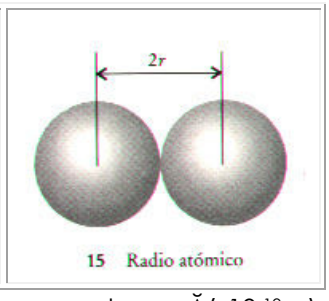
En 1913 **Henry Moseley** demostró la regularidad existente entre los valores de las longitudes de onda de los rayos X emitidos por diferentes metales tras ser bombardeados con electrones, y los números atómicos de estos elementos metálicos. Este hecho permitió clasificar a los elementos en la tabla periódica en orden creciente de número atómico. En la tabla periódica los elementos se ordenan de acuerdo a sus números atómicos en orden creciente.

"Si los elementos se colocan según aumenta su número atómico, se observa una variación periódica de sus propiedades físicas y químicas". Ley de periodicidad de Moseley.

1.Radio atómico

El tamaño de un átomo no es invariable sino que depende del entorno inmediato en el que se encuentre, de su interacción con los átomos vecinos. Estimar el tamaño de los átomos es un poco complicado debido a la naturaleza difusa de la nube electrónica que rodea al núcleo y que varía según los factores ambientales. Se realizan las medidas sobre muestras de elementos puros no combinados químicamente y los datos así obtenidos son los *tamaños relativos de los átomos.*

Radio atómico de un elemento es la mitad de la distancia entre los centros de dos átomos vecinos.



15 Radio atómico

Los radios atómicos se indican a menudo en angstroms Ă(10^{-10}m), nanómetros (nm, 10^{-9} m) ó picometros (pm, 10^{-12} m).

A la hora de estudiar las variaciones periódicas es importante tener en cuenta el concepto de carga nuclear efectiva ($Z_{ef.}$). Este concepto tiene en cuenta la carga real que afecta al último nivel ocupado o capa de valencia. Se refiere a la verdadera carga que "sufre" el último nivel objeto de estudio. Este valor es el que tenemos que tener en cuenta a la hora de hacer un estudio sobre las fuerzas atractivas basadas en la ley de Coulomb.

$$F = K\frac{Z_{ef}}{r^2}$$

La carga nuclear efectiva Zef:

-Aumenta al aumentar la carga nuclear (protones), Z.

-Disminuye con el número de electrones internos (apantallamiento), S.

Z_{ef}= Z-S(apant)

***Como aproximación podríamos considerar que cada electrón en un nivel más interno, neutraliza la carga de un protón del núcleo.**

1.1. Variación periódica del Radio atómico.

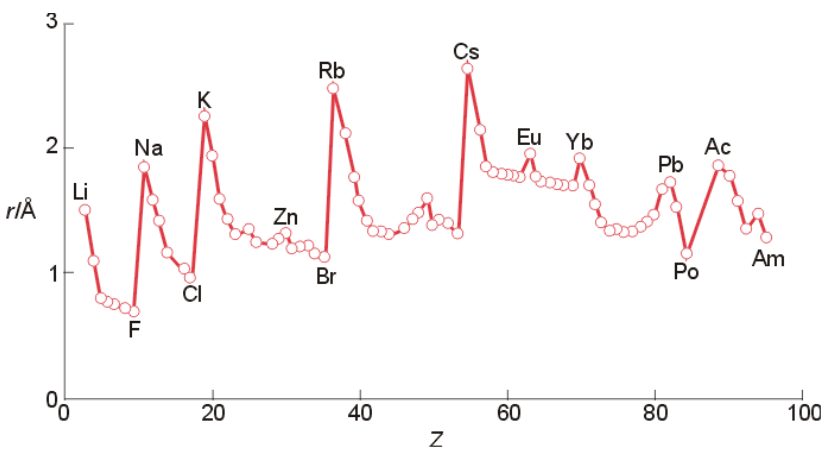
Aumenta hacia abajo en un grupo: a medida que descendemos en el grupo los electrones más externos ocupan niveles que están más alejados del núcleo, los orbitales de mayor energía son cada vez más grandes, y además, el efecto de ***apantallamiento*** de los electrones internos hace que la carga efectiva (Zef. sobre el último nivel ocupado) aumente muy lentamente de un elemento a otro (a pesar del gran aumento de protones en el núcleo).
Si comparamos los radios de $_{11}$Na con 11 protones en su núcleo con el $_{19}$K con 19 protones, cabría pensar que al poseer éste último 8 protones más, atraería más hacia sí la nube de carga. Sabemos que el apantallamiento de los electrones de niveles internos hace disminuir esa atracción sobre el último nivel ocupado.

***Disminuyen a lo largo de un periodo**: al desplazarnos hacía la derecha* los nuevos electrones objeto de estudio se encuentran en el mismo nivel energético del átomo. El aumento de la carga del núcleo (un protón más por cada lugar que nos desplazamos en el periodo) hacía la derecha atrae con más fuerza los electrones y el átomo es más compacto.

Si comparamos el $_5B$ frente al $_6C$, ambos en el mismo periodo, sabemos que el carbono posee un protón más en el núcleo y también un electrón más en el nivel 2p, por tanto hay un aumento del la carga nuclear atrayendo hacía sí más la nube electrónica. El efecto de apantallamiento apenas es inapreciable, pues los niveles electrónicos internos permanecen inalterables.

En el caso de los elementos de transición, las variaciones no son tan obvias ya que los electrones se añaden a una capa interior, pero todos ellos tienen radios atómicos inferiores a los de los elementos de los grupos precedentes IA y IIA. Los volúmenes atómicos van disminuyendo hasta que llega un momento en el que hay tantos electrones en la nueva capa que los apantallamientos mutuos y las repulsiones se hacen importantes, observándose un crecimiento paulatino tras llegar a un mínimo.

Los radios atómicos aumentan en términos generales hacia abajo en un grupo y disminuyen a lo largo de un periodo.

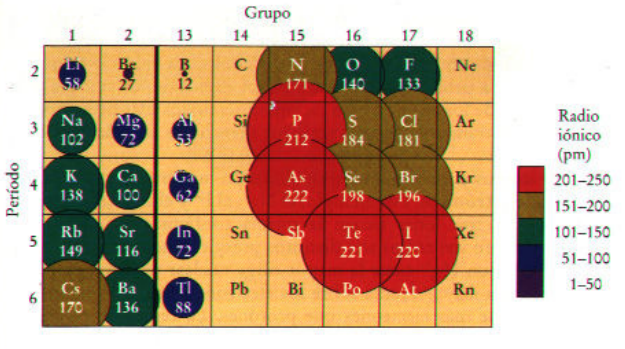


2. Radio iónico.

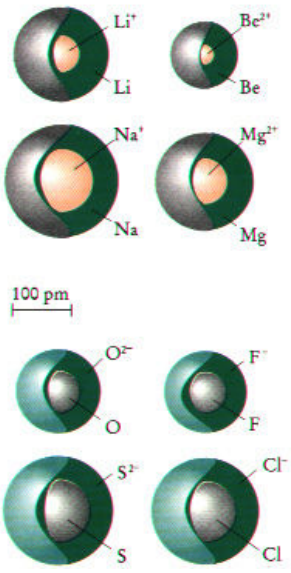
La estructura y la estabilidad de los sólidos iónicos depende de manera crucial del tamaño de los iones. Éste determina tanto la energía de red del sólido como la forma en que los iones se empacan en el sólido.

El tamaño de un ion depende de:

- Su carga nuclear.
- Número de electrones.
- Orbitales en los que residen los electrones de la capa exterior.



2.1.Variación periódica



Los iones positivos sencillos son siempre más pequeños que los átomos de los que derivan y, al aumentar la carga positiva, su tamaño disminuye. Al perder un electrón respecto al átomo neutro, la repulsión electrónica dentro de los electrones del mismo nivel disminuye y el átomo se contrae.

Los iones sencillos cargados negativamente son siempre mayores que los átomos de los que derivan. Al tener un electrón más que átomo del que deriva, las repulsiones de los electrones del mismo nivel aumenta, alejándose éstos. Al entrar un electrón más el tamaño aumenta.

Dentro de un grupo, las diferencias entre los radios atómicos e iónicos son muy parecidas. Para iones con la misma carga, el tamaño aumenta conforme bajamos por un grupo de la tabla periódica. Un aumento en el número cuántico principal del orbital ocupado más externo de un ion, aumenta también el tamaño del ion así como el del átomo del que deriva

Los radios iónicos, en general, aumentan al descender por un grupo y disminuyen a lo largo de un periodo. Los cationes son menores que los respectivos átomos neutros y los aniones son mayores.

3.-Potencial o Energía de ionización

1er Potencial de ionización:

Energía necesaria para arrancar un e^- de un átomo aislado en fase gaseosa en su estado fundamental y obtener un ion monopositivo gaseoso en su estado fundamental más un electrón sin energía cinética. Siempre se les asigna un valor positivo, por tratarse de una reacción endotérmica (absorbe energía).

$$M(g) + 1^aEI \rightarrow M^+(g) + 1\ e^-$$

2º Potencial de ionización:

Energía necesaria para arrancar a un ion monopositivo gaseoso en estado fundamental y obtener un ion dipositivo en las mismas condiciones más un electrón sin energía cinética.

$$M^+(g) + 2^aEI \rightarrow M^{2+}(g) + 1\ e^-$$

La **Energía de ionización total** para llegar a un ion determinado es la suma de los sucesivos potenciales de ionización.

- Las energías de ionización miden, por tanto, la fuerza con que el átomo retiene sus electrones. Energías pequeñas indican una fácil eliminación de electrones y por consiguiente una fácil formación de iones positivos.

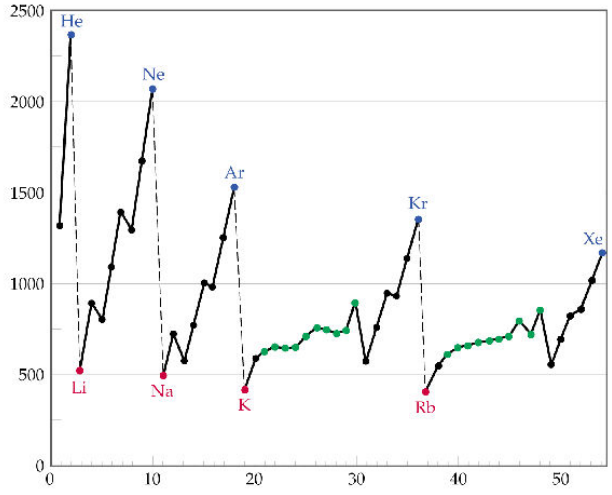
- Los potenciales de ionización sucesivos para un mismo elemento crecen muy deprisa, debido a la dificultad creciente para arrancar un electrón cuando existe una carga positiva que le atrae y menos cargas negativas que le repelan.

- El conocimiento de los valores relativos de las energías de ionización sirve para predecir si un elemento tenderá a formar un compuesto iónico o covalente

Energía de ionización	**Tendencia del elemento**	**Tipo de compuesto**
Baja	**Perder electrones y dar iones positivos**	**Iónicos**
Elevada	**Compartir electrones**	**Covalentes**
Muy elevada	**Ganar electrones y dar iones negativos**	**Iónicos**

3.1. Variación periódica:

Al descender en un grupo, el aumento del número de electrones tiende a reducir el potencial de ionización debido a los efectos combinados del aumento de tamaño y de efecto pantalla. Por tanto, se obtienen átomos más voluminosos en los que los electrones están menos retenidos, por lo que el potencial de ionización decrecerá.
Al avanzar ***hacía la derecha en un periodo*** tiende a aumentar al hacerlo el número atómico. En principio, la tendencia que cabria esperar es que al aumentar la carga nuclear efectiva y no aumentar apenas el radio atómico, la energía de ionización sea cada vez mayor.
En cada segmento periódico, los gases nobles tienen las energías de ionización más elevadas. Estos gases son elementos muy estables y sólo los más pesados de ellos muestran alguna tendencia a unirse con elementos para dar compuestos.



Con referencia a la tabla periódica, vemos como varían los átomos siguientes en orden de energía de primera ionización creciente: ***Ne, Na, P, Ar y K.***

- *Na, P y Ar están en la misma periodo de la tabla, por lo que* $P.I._{Na}<P.I._{P}<P.I._{Ar}$*. Al aumentar la carga nuclear aumenta la atracción por los electrones del último nivel.*

- *Ne y Ar son gases nobles. Puesto que el Ne presenta un menor número atómico es esperable que* $P.I._{Ar}<P.I._{Ne}$*.*

- *De igual modo, el Na y el K son metales alcalinos, por lo que atendiendo a su disposición en el sistema periódico, lo esperable es que* $P.I._{K}<P.I._{Na}$*. Al descender en el grupo del Na al K aumentan los protones pero también el efecto de pantalla de los electrones internos, por lo que los electrones del último nivel se encuentran más alejados y menos atraido, siendo menor así su E.I.*

- *A partir de estas observaciones concluimos que las energías de ionización siguen el orden* $\boldsymbol{P.I._{K}<P.I._{Na}<P.I._{P}<P.I._{Ar}<P.I._{Ne}}$**.**

(*) Hay que tener en cuenta que en las cuestiones que se planteen en lo sucesivo hay que justificar los ordenamientos en base a los conceptos estudiados de carga nuclear y apantallamiento.

4.-Afinidad electrónica

Energía desprendida en un proceso en el que un determinado átomo neutro gaseoso en estado fundamental, capta un electrón para dar un ion mononegativo gaseoso en estado fundamental.

$$\boldsymbol{X(g) + 1e^- \rightarrow X^-(g) + AE}$$

Este proceso de captación de electrones suele ser favorable (la atracción nuclear compensa la repulsión electrónica. Valores de E<0).
Las segundas, terceras, afinidades electrónicas son siempre energéticamente desfavorables.
La energía total puesta en juego para pasar de un átomo neutro en estado fundamental y gaseoso a un ion negativo con *n* cargas es la suma de las afinidades electrónicas.

4.1. Variación periódica

La variación de afinidad electrónica dentro del sistema periódico es similar a la variación del potencial de ionización, aunque es mucho menos periódica. A partir de estas dos propiedades se puede analizar hasta que punto un átomo neutro se encuentra estable con su número de electrones. A mayor potencial de ionización y

electroafinidad, mayor es la apetencia electrónica (electronegatividad) de la especie. Los elementos con las afinidades electrónicas más altas son los situados cerca del oxígeno, el flúor y el cloro.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 73																	He 21
2	Li -60	Be 19											B -27	C -122	N 7	O -141	F -328	Ne 29
3	Na -53	Mg 19											Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar 35
4	K -48	Ca 10	Sc -18	Ti -8	V -51	Cr -64	Mn	Fe -16	Co -64	Ni -112	Cu -118	Zn 47	Ga -29	Ge -116	As -78	Se -195	Br -325	Kr 39
5	Rb -47	Sr	Y -30	Zr -41	Nb -86	Mo -72	Tc -53	Ru -101	Rh -110	Pd -54	Ag -126	Cd 32	In -29	Sn -116	Sb -103	Te -190	I -295	Xe 41
6	Cs -45	Ba	Lu	Hf	Ta -31	W -79	Re -14	Os -106	Ir -151	Pt -205	Au -223	Hg 61	Tl -20	Pb -35	Bi -91	Po -183	At -270	Rn 41
7	Fr -44	Ra																

Afinidades electrónicas expresadas en kJ/mol

Los elementos que tienen mayor actividad química son los que tienen un potencial de ionización muy pequeño y una afinidad electrónica muy grande.

5. Electronegatividad

La electronegatividad de un elemento mide su tendencia a atraer hacia sí electrones, cuando está químicamente combinado con otro átomo. Cuanto mayor sea, mayor será su capacidad para atraerlos.

Pauling la definió como la capacidad de un átomo en una molécula para atraer electrones hacia así. Sus valores, basados en datos termoquímicos, han sido determinados en una escala arbitraria, denominada *escala de Pauling*, cuyo valor máximo es 4 que es el valor asignado al flúor, el elemento más electronegativo. El elemento menos electronegativo, el cesio, tiene una electronegatividad de 0,7.

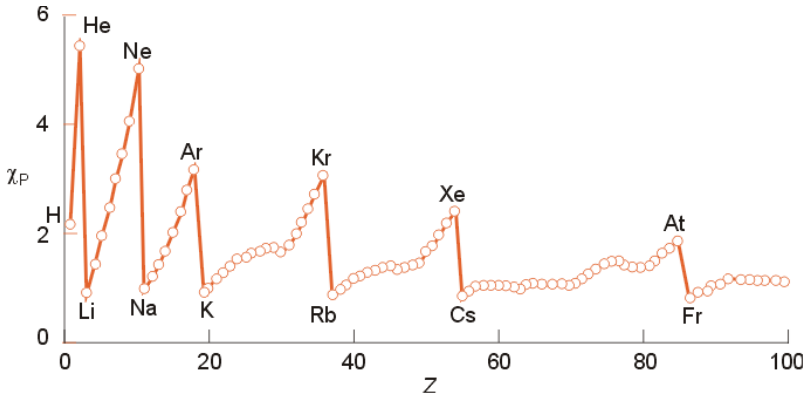
H 2.20																		He
Li 0.98	Be 1.57												B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 4.00	Ne
Na 0.93	Mg 1.31												Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
K 0.82	Ca 1.0	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00	
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.8	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60	
Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2	
Fr 0.7	Ra 0.9	**																

La electronegatividad de un átomo en una molécula está relacionada con su potencial de ionización y su electroafinidad.

Un átomo con una afinidad electrónica muy negativa (elevada en valor absoluto) y un potencial de ionización elevado, atraerá electrones de otros átomos y además se resistirá a dejar ir sus electrones ante atracciones externas; **será muy electronegativo.**
El método sugerido por el profesor R.S. **Mulliken** promedia los valores del potencial de ionización y afinidad electrónica de un elemento:

$$X_M = 0{,}0085\ (P.I. + A.E.)$$

5.1. Variación periódica



Las electronegatividades de los elementos representativos aumentan de izquierda a derecha a lo largo de los periodos y de abajo a arriba dentro de cada grupo. Al igual que varia la energía de ionización y la afinidad electrónica.
Las variaciones de electronegatividades de los elementos de transición no son tan regulares. En general, las energías de ionización y las electronegatividades son inferiores para los elementos de la zona inferior izquierda de la tabla periódica que para los de la zona superior derecha.

El concepto de la electronegatividad es muy útil para conocer el tipo de enlace que originarán dos átomos en su unión. El enlace entre átomos de la misma clase y de la misma electronegatividad es apolar. Cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad entre dos átomos, tanto mayor será la densidad electrónica del orbital molecular en las proximidades del átomo más electronegativo. Se origina un enlace polar.
Cuando la diferencia de electronegatividades es suficientemente alta, se produce una transferencia completa de electrones, dando lugar a la formación de especies iónicas.

Compuesto	**F_2**	**HF**	**LiF**
Diferencia de electronegatividad	**4.0 - 4.0 = 0**	**4.0 - 2.1 = 1.9**	**4.0 - 1.0 = 3.0**
Tipo de enlace	**Covalente no polar**	**Covalente polar**	**Iónico**

La electronegatividad es una medida de la fuerza con la que un átomo atrae un par de electrones de un enlace. Cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad entre átomos implicados en un enlace más polar será éste. Los compuestos formados por elementos con electronegatividades muy diferentes tienden a formar enlaces con un marcado carácter iónico. Este último concepto lo repasaremos más en profundidad en el siguiente tema.

5.1 Carácter metálico

Se entiende por metal un elemento con pocos electrones en su última capa (1 ó 2) y excepcionalmente (3 ó 4) y gran tendencia a cederlos. El no metal tendrá gran tendencia a la captación de electrones.

A medida que descendemos en un grupo los electrones están "más libres", menos atrapados por el campo de atracción del núcleo y el carácter metálico aumentará.

Al avanzar hacia la derecha en un periodo la afinidad electrónica al aumentar, hace que el átomo tenga tendencia a captar electrones (mayor electronegatividad), y por tanto el carácter metálico disminuirá.

Ejercicios resueltos:

Ejemplo 1-Dadas las siguientes configuraciones electrónicas pertenecientes a elementos neutros:
A (1s2 2s2 2p2); B (1s2 2s2 2p5); C (1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s1); D (1s2 2s2 2p4).
Indique razonadamente:
a. El grupo y periodo al que pertenece cada elemento.
b. El elemento de mayor y el de menor energía de ionización.
c. El elemento de mayor y el de menor radio atómico.

Respuesta:
a. A: 2º período y grupo 14 (Carbono); B: 2º período, grupo 17 (Flúor); C: 4º período, grupo 1 (Potasio); D: 2º período, grupo 16 (Oxígeno).
b. Como la energía de ionización decrece con el tamaño, el de menor energía de ionización será el C (K) y el de mayor será el B (F).
c. Dado que el tamaño del átomo viene dado fundamentalmente por el número cuántico principal, el mayor será el D (K). Los otros tres pertenecen a un mismo período en el que debido al aumento de carga nuclear efectiva y, por tanto, mayor atracción entre los electrones y el núcleo, a medida que se avanza hacia la derecha en el período disminuirá el radio atómico por lo que el más pequeño será el B (F).

Ejemplo 2.- Dados los elementos A (Z=13), B (Z=9) y C (Z=19)
a. Escriba sus configuraciones electrónicas.
b. Ordénelos de menor a mayor electronegatividad.
c. Razone cuál tiene mayor volumen.

Respuesta:
a. A(Z=13, Al): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$. B(Z=9, F): $1s^2 2s^2 2p^5$. C(Z=19, K): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$.
b. La electronegatividad es la tendencia de los elementos a atraer hacía sí los electrones que forman parten de un enlace dentro de una molécula y aumentará a medida que el átomo del elemento en cuestión sea más pequeño ya que más cerca del núcleo estarán los electrones que están formando dicho enlace. Luego se ordenarán: eC < eA <eB (eK < eAl < eF
c. El C(K). Su mayor número cuántico principal, que es quien da información del tamaño de los orbitales vale 4, mientras que en los otros vale 3 (A) y 2 (B) respectivamente.

Ejemplo3.-a) De las siguientes secuencias de iones, razone cual se corresponde con la ordenación en función de los radios iónicos: (I) $Be^{2+} < Li^{+} < F^{-} < N^{3-}$, (II) $Li^{+} < Be^{2+} < N^{3-} < F^{-}$; b) Ordene de mayor a menor los radios de los elementos de que proceden.

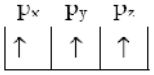
Respuesta:
a) La secuencia I es la correcta ya que a igualdad de electrones el Be2+ tiene una mayor carga nuclear y por tanto una mayor Z* que el Li+. Igualmente, el N3– tiene el mismo nº de electrones que el F– pero es mayor por tener una menor Z* (menor carga nuclear y mismo efecto pantalla por tener los mismos electrones).
b) Li > Be > N > F. En el mismo periodo, el radio atómico disminuye hacia la derecha al haber una mayor Z* por aumentar más Z que el EP

Ejemplo 4.- a) Indique el número de electrones desapareados que hay en los siguientes átomos: As (Z = 33) Cl (Z = 17) Ar (Z = 18)
b) Indique los grupos de números cuánticos que corresponderán a esos electrones desapareados.

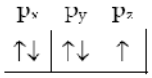
Respuesta:
a)
As(Z=33) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^3$
Cl(Z=17) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Ar(Z=18) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Los electrones se disponen según la regla de Hund: Cuando varios electrones ocupan orbitales de la misma energía (es decir, de un mismo subnivel), se disponen de modo que se tenga el máximo número de electrones desapareados (con el mismo spin).

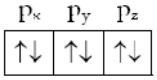
As :$4p^3$, 3 electrones desapareados



Cl: $3p^5$, 1 electrón desapareado



Ar: $3p^6$, ningún electrón desapareado



En el arsénico los tres electrones desapareados se encuentran en el subnivel 4p
Nivel de energía 4 (n=4)
Orbital tipo p (l=1)
Orientación, en un orbital tipo p hay tres orientaciones posibles px, py y pz correspondientes a los valores m = -1, m = 0 y m = 1.
Spin (s=+1/2) Todos electrones tendrán el mismo valor de s.
Los números cuánticos de los tres electrones son:
(4,1,-1,+1/2)
(4,1,0,+1/2)
(4,1,1,+1/2)

En el Cloro el electrón desapareado se encuentra en el subnivel 3p
Nivel de energía 3 (n=3)
Orbital tipo p (l=1)
Orientación, en un orbital tipo p hay tres orientaciones posibles px, py y pz correspondientes a los valores m = -1, m = 0 y m = 1.
Spin (s=+1/2)
Los números cuánticos del electrón son:
(3,1,1,+1/2)

Ejemplo 5.- Dadas las siguientes especies: Ar, Ca^{2+} y Cl^- .
a) Escriba sus configuraciones electrónicas.
b) Ordénelas, razonando la respuesta, en orden creciente de sus radios.
Números atómicos: Ar = 18; Ca = 20; Cl = 17.

Respuesta:

a.El Ar tiene 18 protones y 18 electrones.
Ar (Z=18) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

El Ca neutro tiene 20 protones y 20 electrones.
Ca(Z=20) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

El Ca^{+2} tiene 20 protones y 18 electrones.
Ca^{+2} (Z=20) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

El Cl neutro tiene 17 protones y 17 electrones.
Cl (Z=17) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p5$
El Cl- tiene 17 protones y 18 electrones.
Cl-1 (Z=17) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Los tres átomos son isoelectrónicos porque tienen idéntica configuración electrónica.

b. Los tres átomos tienen el mismo número de electrones en su corteza, sin embargo en el núcleo tienen distinto número de protones. Cuanto menor número de protones, con menor fuerza serán atraídos los 18 electrones y estos estarán mas alejados del núcleo.
Radio Cl - >Radio Ar > Radio Ca^{+2}

PROPIEDADES PERIÓDICAS.

Cuestiones generales.

1.- Indica el nombre, símbolo, nombre del grupo a que pertenece y periodo de los elementos de números atómicos 3, 9, 16, 19, 38 y 51.

2.- **a)** Indica el nombre, símbolo y la configuración electrónica de los elementos de números atómicos 12, 15, 17 y 37; **b)** ¿cuántos electrones desapareados tiene cada uno de estos elementos en su estado fundamental. (Cuestión Selectividad).

3.- Un elemento neutro tienen la siguiente configuración electrónica: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$. Di el nombre del elemento, del grupo y el periodo a que pertenece.

4.- ¿Cuál será la configuración electrónica de un elemento situado el grupo 10 y periodo 5?

5.- Escribe la configuración electrónica de la última capa de: **a)** el segundo alcalino-terreo; **b)** el tercer elemento del grupo 9; **c)** el selenio.

6.- Un átomo X tiene la siguiente configuración electrónica: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 5s^1$. Explica razonadamente si las siguientes frases son verdaderas o falsas: **a)** X se encuentra en su estado fundamental; **b)** X pertenece al grupo de los metales alcalinos; **c)** X pertenece al 5º periodo del sistema periódico; **d)** Si el electrón pasara desde el orbital 5s al 6s, emitiría energía luminosa que daría lugar a una línea en el espectro de emisión. (Selectividad).

Propiedades periódicas

7.- Las primeras energías de ionización (en eV/átomo) para una serie de átomos consecutivos en el sistema periódico son: 10,5; 11,8; 13,0; 15,8; 4,3; 6,1. Indica cuál de ellos será un halógeno, cuál un anfígeno, cuál un alcalino, cual un gas noble,y alcalinotérreo.
(1 eV = $1,6 \cdot 10^{-19}$ J).

8.- **a)** Define energía (potencial) de ionización y escribe la ecuación que representa el proceso de ionización; **b)** Explica razonadamente porqué, para un mismo elemento, las sucesivas energías de ionización aumentan. (Cuestión Selectividad).

9.- Ordena razonadamente los siguientes elementos: Fe, Cs, F, N y Si de menor a mayor: **a)** radio atómico; **b)** electronegatividad; **c)** energía de ionización.

10.- Dos elementos presentan las siguientes configuraciones electrónicas: A: $1s^2\ 2s^2 2p^6$; B: $1s^2\ 2s^2 2p^6\ 3s^1$ **a)** Si los valores de las energías de ionización son 2073 y 8695 kJ/mol, justifica cual será el valor asociado a cada elemento; **b)** ¿por qué el radio atómico y la energía de ionización presentan tendencias periódicas opuestas?

11.- a) Justifica el orden de los siguientes átomos (Ba, Cs, Cl, Ag, I, He) según su radio atómico, su energía de ionización y su afinidad electrónica. **b)** Explica qué iones son mayores y cuales menores que sus correspondientes átomos de los que proceden.

12.- Considere los elementos Be (Z=4), O (Z=8), Zn (Z=30) y Ar (Z=18). **a)** Según el principio de máxima multiplicidad o regla de Hund, ¿cuántos electrones desapareados presenta cada elemento en la configuración electrónica de su estado fundamental? **b)** En función de sus potenciales de ionización y afinidades electrónicas, indique los iones más estables que pueden formar y escriba sus configuraciones electrónicas. Justifique las respuestas. (Cuestión Selectividad).

SOLUCIONES (P. Periódicas).

1.-

Z	Nombre	Símbolo	Grupo	Periodo
3	Litio	Li	Alcalinos (1)	2
9	Flúor	F	Halógenos (17)	2
16	Azufre	S	Anfígenos (16)	3
38	Estroncio	Sr	Estroncio (2)	5
51	Antimonio	Sb	Nitrogenoideos (15)	5

2,-

Z	Nombre	Símbolo	Configuración electrónica	Nº de e^- desapareados
12	Magnesio	Mg	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2$	0
15	Fósforo	P	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^3$	3
17	Cloro	Cl	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^5$	1
37	Rubidio	Rb	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6d^{10}\ 4s^2p^6\ 5s^1$	1

3.-Se trata del Bromo (Br) del grupo 17 (halógenos) y periodo 4.

4.-$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6d^{10}\ 4s^2p^6d^8\ 5s^2$

5.-a) (Mg) $2s^2$; **b)** (Ir) $5d^7\ 6s^2$; **c)** (Se) $4s^2p^4$

6.-

a) VERDADERA. Puesto que los electrones ocupan los niveles de menor energía posible.

b) VERDADERA. Puesto que su configuración electrónica fundamental acaba en "s^1" .

c) VERDADERA. Puesto que su configuración electrónica fundamental acaba en "5 s^1", lo que significa que la capa más externa es la quinta.

d) FALSA. Para que el electrón externo pasara al orbital 6s, debería absorber energía produciendo una raya negra en el espectro de absorción. Cuando dicho electrón regresara al nivel fundamental (5s) entonces es cuando emitiría una raya en el espectro de emisión.

7.-Al ser consecutivos los átomos la mayor energía de ionización corresponderá al gas noble (15,8 eV), El halógeno tendrá la inmediatamente anterior (13,0 eV) y el anfígeno el anterior (11,8 eV). El metal alcalino debe ser el que menos energía de ionización tenga, y como es lógico, va después del gas noble; corresponde pues al valor 4,3 eV, mientras que el último valor corresponderá al metal alcalino-térreo.

8.-

a) "Es la energía necesaria para extraer un e^- de un átomo neutro en estado gaseoso y formar un catión". $X(g) - 1\ e^- \rightarrow X^-(g)$.

b) Al ir extrayendo sucesivos electrones, éstos deberán salir de un ión cada vez más positivo, con lo que serán más atraídos lo electrones de valencia, y en consecuencia, mayor energía se precisará para extraerlos.

9.-

a) F < N < Si < Fe < Cs; los átomos de menor tamaño son los del periodo 2 (F y N) siendo el F menor por tener una mayor carga nuclear efectiva sobre los electrones de valencia, por un menor apantallamiento, al tener más e^- en la última capa. El Si es del periodo y es por tanto mayor al tener más capas electrónicas. Lo mismo le sucede al Fe del periodo 4 y en mucha mayor medida al Cs del periodo 6.

b) Cs < Fe < Si < N < F; la electronegatividad crece según se sube en la tabla y según se desplaza hacia la derecha dentro de un mismo periodo. Así mientras el Cs es uno de los elementos menos electronegativos, el F es el elemento más electronegativo.

c) Cs < Fe < Si < N < F; sigue el mismo orden que la electronegatividad, puesto que en los metales es más sencillo extraer un electrón y más cuanto más alejado se encuentre del núcleo, mientras que los no metales tienen altas energía de ionización y mayores cuanto más a la derecha y más hacia arriba se encuentren en la Tabla Periódica.

10.-

a) Lógicamente el valor menor de energía de ionización corresponderá al metal alcalino B, siendo el valor elevado al gas noble A.

b) Porque cuanto menor es el átomo más atraídos estarán los electrones por el núcleo, incluso en el caso de similar Z^*, ya que, por la ley de Coulomb, a mayor distancia menor atracción.

11.-

a) **Tamaño:** He < Cl < I < Ag < Ba < Cs; **Energía de ionización:** Cs < Ba < Ag < I < Cl < He; **Afinidad electrónica:** (es menor cuanto más negativa, es decir cuanto más energía se desprenda al capturar un e^-) Cl < I < Ag < Cs < Ba < He. Así, el cloro es el elemento de los descritos que más energía desprende al capturar el e^- por ser mayor su Z^* y menor su tamaño. En el caso del Ba y el He la afinidad electrónica será positiva, y aunque en teoría el He debería ser el elemento al que cuesta más introducir un e^-, también es cierto que los metales alcalino-térreos tienen afinidades electrónicas positivas por tener el nivel "s" completo.

12.-

a)

Be (Z=4)	$1s^2\ 2s^2$;	No tiene ningún e^- desapareado
O (Z=8)	$1s^2\ 2s^2p^2p^1p^1$;	Tiene 2 e^- desapareados
Zn (Z=30)	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6d^{10}4s^2$;	No tiene e^- desapareados
Ar (Z=18)	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6$;	No tiene e^- desapareados

b)

Be^{2+}	$1s^2$;	E.O.= +2
O^{2-}	$1s^2\ 2s^2p^6$;	E.O.= −2
Zn^{2+}	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6d^{10}$;	E.O.= +2
Ar	$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2p^6$;	Gas noble; E.O.= 0