

ESTRUCTURA INTERNA DE LA MATERIA.

- 1. Primeros modelos del átomo***
 - 2.-Naturaleza de la luz. . Radiación del cuerpo negro , hipótesis de Planck.***
 - 3.-Efecto fotoeléctrico.***
 - 4.-Espectro atómico de hidrógeno.***
 - 5.-Modelo de Bohr.***
 - 6.-Dualidad onda-partícula .Hipótesis de de Broglie.***
 - 7.-Principio de incertidumbre de Heisenberg.***
 - 8.-Modelo mecano-cuántico.Ecuación de Schrödinger***
 - 9.-Números cuánticos***
 - 10.-Orbitales atómicas.***
 - 11.-Sistema periódico y 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).

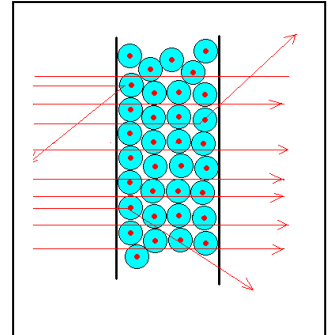
Modelo de Rutherford:

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 90° , 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 1.1. 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 α 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 dice:

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.(que estudiaremos a continuación).

2.- Naturaleza de la luz. Radiación del cuerpo negro , hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico.

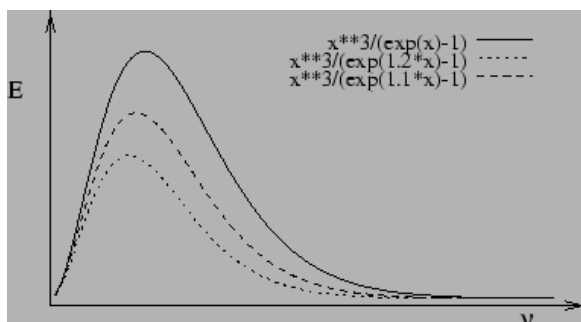
Newton, a finales del siglo XVII, sostuvo que la luz estaba compuesta por partículas, diferentes según el color, y que “rebotaban” en un espejo logrando así explicar porqué los ángulos de incidencia y reflexión eran los mismos. Parece ser que la propagación rectilínea de la luz tuvo mucho que ver con 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 mas 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.

Pero no obstante 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. Además al irse calentando el cuerpo aumenta la cantidad de energía radiada (de acuerdo con la ley de Stefan-Boltzmann) y la concentración de la energía se desplaza hacia longitudes de ondas más cortas. Una gráfica de la distribución espectral de la radiación de un cuerpo negro puede verse en la figura .



Este resultado experimental se intentó explicar de una forma directa a partir de la termodinámica clásica, y el resultado obtenido, que también está representado en la figura , claramente no coincidía con el resultado "verdadero", que es siempre el que marca la experiencia de laboratorio

Hipótesis de Planck.

En 1900 el físico alemán, Max Planck afirmó 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 :

$$E = h\nu$$

donde h es la constante de proporcionalidad, de valor y conocida actualmente como *constante de Planck*. ($h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ J.s).

Y donde ν = frecuencia de la radiación en s^{-1}

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

$$E = nh\nu$$

3.-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, 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:

$$E_{\text{cinética máxima del electrón desprendido}} = h(\nu - \nu_0)$$

4.-Espectro atómico de hidrógeno.

Todos los cuerpos emiten energía a ciertas temperaturas. El espectro de la radiación energética emitida es su 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.

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:

$$1/\lambda = 1.097 \times 10^7 (1/4 - 1/n^2)$$

donde $n = 3, 4, 5, 6, \dots$

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:

Dado que esta transición produce la emisión de un fotón de frecuencia ν y energía $h\nu$ se puede escribir:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

n_1 = nivel final ; n_2 = nivel inicial . En el espectro de emisión $n_{\text{final}} < n_{\text{inicial}}$

Rh: constante de Rydberg: $1.09678 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

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.

Series de espectros de emisión del átomo de hidrógeno

Serie	nf	ni	Región del espectro
Lyman	1	2,3,4..	Ultravioleta
Balmer	2	3,4,5..	Visible y ultravioleta
Paschen	3	4,5,6..	Infrarrojo
Brackett	4	5,6,7..	Infrarrojo
Pfund	5	8,9,10..	Infrarrojo

5.-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 esta pasado en los tres postulados siguientes:

1º) Si el electrón describe una órbita circular de radio r, la fuerza centrífuga será igual ala fuerza de atracción por el núcleo. Dichas órbitas son estacionarias.(el electrón no emite energía en el giro).

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

2º) En el modelo de Bohr, solamente están permitidas aquellas órbitas cuyo momento angular está cuantizado.

$$L = m_e v r = \frac{n\hbar}{2\pi} \quad \text{con } n = 1, 2, \dots$$

n es un número entero que se denomina número cuántico, y h es la constante de Planck $6.6256 \cdot 10^{-34}$ Js

3º) 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 quedando :

$$r = \frac{n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{\pi m_e Z e^2} = \frac{n^2}{Z} a_0 \quad a_0 = 5.2917 \cdot 10^{-11} \text{m}$$

Se puede determinar así mismo que la energía asociada a un nivel energético del electrón vendrá dado por:

$$E = - \frac{m_e e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

$E = -K/n^2$

$$K=2.18 \cdot 10^{-18} \text{J}$$

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 mas pequeñas y por tanto negativas. Afirmamos entonces:

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

Para $n=1$, valor más negativo de E que corresponde a la mínima energía del electrón.(Máxima estabilidad).

A todos los demás niveles se les denomina , niveles excitados.

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.

Por otra parte Zeeman observó que cuando un átomo era sometido a un campo magnético ,aparecen nuevas línea en el espectro (efecto Zeeman) y son debidas a las diferentes orientaciones de las órbitas elípticas en el espacio. Esta orientación también cuantizada dará lugar a la aparición de un tercer numero cuántico , es el número cuántico magnético , m_s .

5.1.-Aciertos e inconvenientes del modelo de Bohr:

Aciertos:

- *Justifica la estabilidad del átomo , orbitas estacionarias.*
- *Introduce el concepto de niveles de energía.*
- *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.*

6.-Dualidad onda-partícula .Hipótesis de de Broglie

Un conjunto de partículas, como un chorro de electrones moviéndose a una determinada velocidad puede comportarse según todas las propiedades y atributos de una onda, es decir: puede reflejarse, refractarse y difractarse.

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:

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 .

$$mv = p = \frac{h}{\lambda}$$

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

7.- Principio de incertidumbre de Heisenberg.

- Al medir una magnitud física, perturbamos siempre su valor.
- Si queremos medir la posición y la cantidad de movimiento de un electrón debemos iluminarlo, y al hacerlo, la luz se dispersa y así medimos su posición a través de esa luz dispersada.
- Si utilizamos luz de onda , la difracción que sufre la luz permite fijar la posición con una incertidumbre que, en el mejor de los casos, es λ .
- Por otra parte, en el caso más simple, el electrón puede transferirle toda su cantidad de movimiento, o parte de ella, modificando la que inicialmente poseía el electrón. CON LO CUAL VARIAMOS SE VELOCIDAD INICIAL.
- Heisenberg elaboró esa idea en el principio de incertidumbre o de indeterminación, que asegura que:

Es imposible conocer simultáneamente la velocidad (o más exactamente la cantidad de movimiento) y la posición de una partícula con absoluta exactitud.

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

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

- Si queremos determinar con total precisión la posición:

$$\Delta x = 0$$

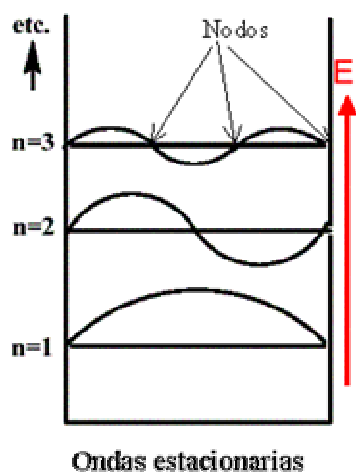
- De la desigualdad para el principio de incertidumbre verificamos

entonces que :

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \rightarrow \infty$$

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

8.-Modelo mecano-cuántico. Ecuación de Schrödinger



En 1926, Schrödinger propone presentar el comportamiento del electrón como una onda, o sea mediante una ecuación de onda. El electrón en el átomo está aprisionado por un campo eléctrico producido por el núcleo. Por tanto las ondas serán estacionarias (amplitud nula en los extremos). Solo este tipo de ondas hace cumplir la condición de “aprimonamiento del átomo”. El ejemplo del movimiento de una cuerda de guitarra nos ayudará a comprender el concepto de onda estacionaria. La cuerda de guitarra vibra pero no se desplaza, por eso es *estacionaria*.

Un nodo es un punto que no se mueve. La longitud de la cuerda tiene que ser un múltiplo del valor de media longitud de onda, ya que en los dos extremos de la cuerda que están fijos debe haber un nodo.

En la ecuación de Schrödinger también se tiene en cuenta la masa de la partícula. Teniendo en cuenta que toda partícula lleva asociada una onda.

En un espacio de una dimensión estas ondas estables están caracterizadas por un número entero. Al ser un espacio de tres dimensiones, dará origen a los tres números cuánticos.

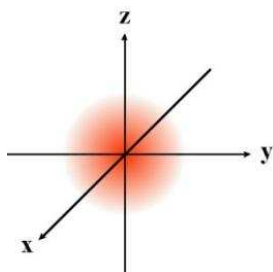
Podemos pensar en las ecuaciones de onda de Schrödinger como en ondas estacionarias de diferente energía.

Para resolver la ecuación de onda Schrödinger requiere el uso de herramientas de cálculo complejas, que no vamos a analizar. Aunque la ecuación de onda ψ 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 Schrödinger son unas funciones que dependen de tres números, denominados números cuánticos (n, l, m).

9.-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, donde la intensidad del color rojo 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 anterior representa el orbital de mínima energía del átomo de hidrógeno con -2.18×10^{-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

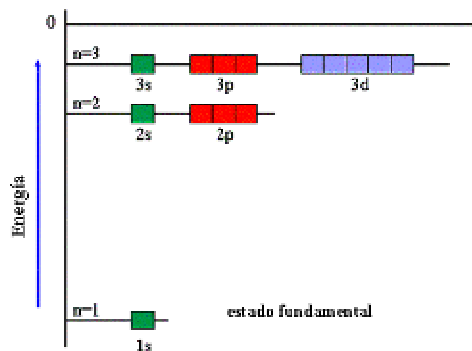
El número cuántico magnético “ m_l ”

- El valor del número cuántico magnético depende de l . Toma valores enteros entre $-l$ y l , incluyendo al 0. Para cierto valor l hay $(2l+1)$ 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 m_l 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:

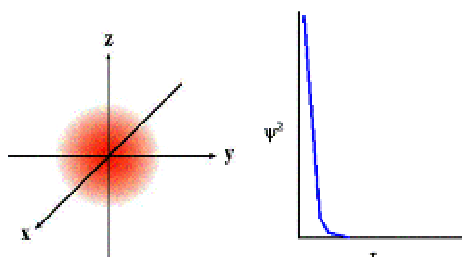


- En condiciones normales todos los átomos de hidrógeno están en su estado fundamental (El electrón en el orbital 1s)
- El electrón puede pasar a un estado excitado mediante la absorción de un fotón con el n° apropiado de cuantos de energía.

10.-Representaciones de los Orbitales

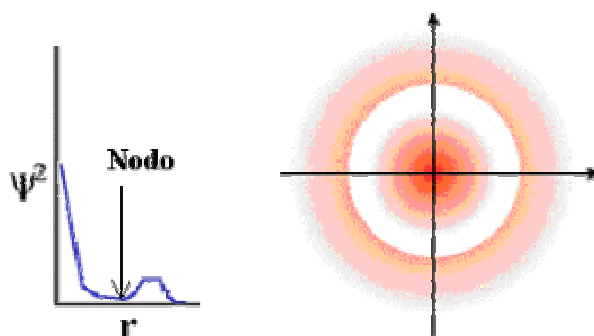
Orbitales s

El orbital 1s tienen simetría esférica:



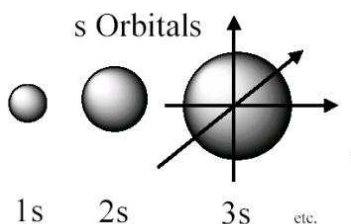
Representado ψ^2 frente a la distancia al núcleo (r) vemos que la probabilidad de encontrar al electrón disminuye conforme aumenta r . Esto indica que en el estado fundamental la atracción electrostática del núcleo es lo suficientemente fuerte para mantener al electrón en un radio próximo al núcleo.

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



función de probabilidad:

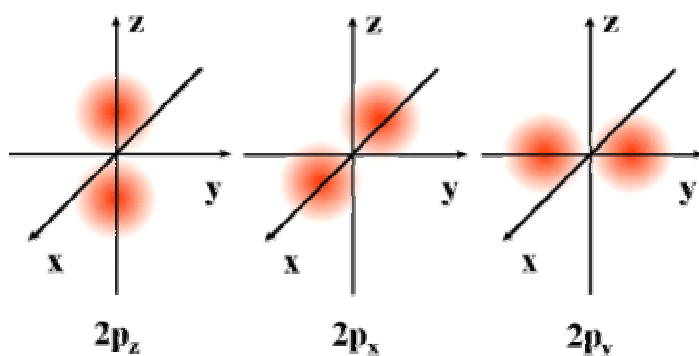
- En un *nodo* la densidad electrónica se aproxima a 0. El orbital 2s tiene un nodo, el orbital 3s dos nodos...etc
- Los orbitales s para $n > 1$ (estados excitados) tienen una densidad electrónica en la cual es más probable encontrar al electrón lejos del núcleo.
- **El tamaño del orbital s aumenta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

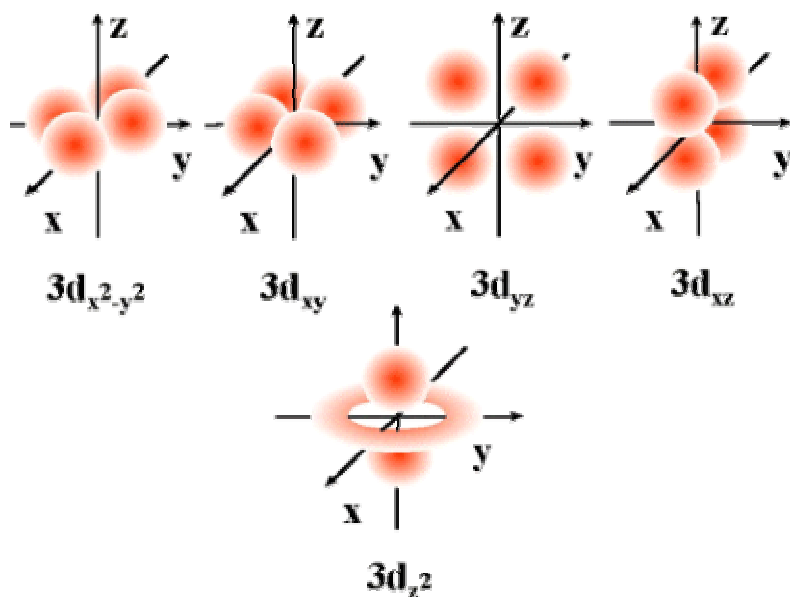
Orbitales p

- 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.**



Orbitales 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 :

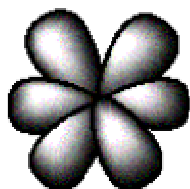


Aunque el orbital $3d_{z^2}$ difiere en su forma de los otros cuatro, los cinco orbitales d tienen todos la misma energía.

Otros orbitales de mayor energía

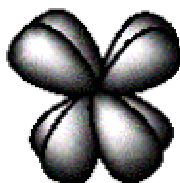
Para $n > 4$ tendremos 7 orbitales f ($\ell = 3$ y $m_\ell = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$). Los orbitales f son importantes para comprender el comportamiento de los elementos con número atómico mayor a 57.

2 de los 7 orbitales 4f



f_{xz}^2

6 lóbulos



f_{xyz}

8 lóbulos

+ otros 5 orbitales

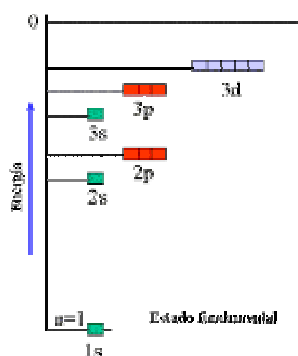
Para valores de $\ell > 4$ tenemos los orbitales g y subsiguientes (a partir de f sigue el orden alfabético de las consonantes). En química general nos bastará con los orbitales s, p y d para comprender las propiedades de los elementos.

11.- Las energías de los orbitales atómicos

En el modelo de Bohr 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:



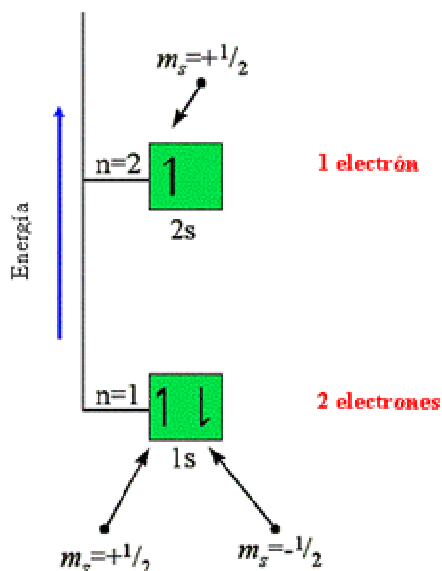
11.1 El número cuántico de espín electrónico y el Principio de exclusión de Pauli

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: $+\frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$.

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.



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

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 $+\frac{1}{2}$; y para $-\frac{1}{2}$:

También podemos describir la distribución de electrones en el átomo de litio como:



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 2s 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							Configuración electrónica
		1s	2s	2p			3s		
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 mismo 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 espines paralelos(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							$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

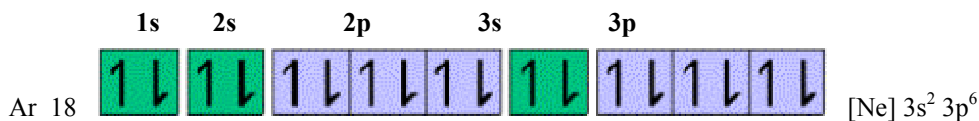
El neón completa el nivel dos y al igual que el helio tiene una configuración estable.

Las configuraciones electrónicas pueden también escribirse de manera abreviada haciendo referencia al último nivel completo. Así la configuración del sodio la podemos escribir como $[\text{Ne}]3s^1$.

También podemos escribir la configuración del litio como $[\text{He}]2s^1$

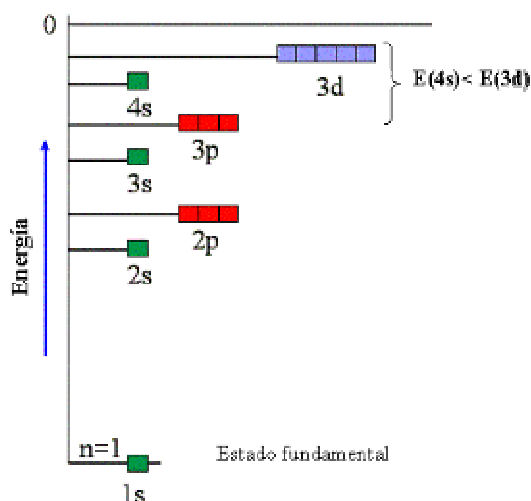
A los electrones que pertenecen a un nivel incompleto se les denomina *electrones de valencia*.

El gas noble Argón representa el final del período iniciado por el sodio para $n=3$



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



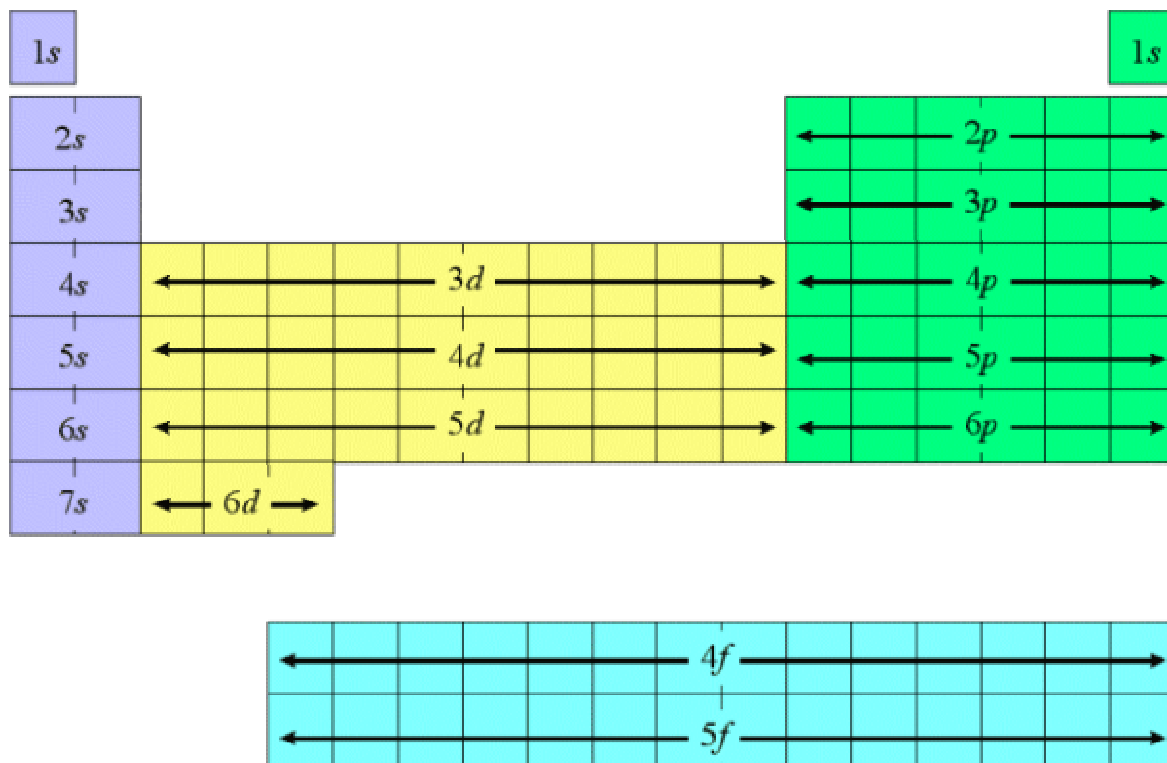
El Calcio con 20 electrones completará el orbital 4s y el siguiente elemento con 21 electrones, el escandio, se empezará a llenar los orbitales 3d. Como hay 5 orbitales 3d en el cuarto período de la tabla periódica aparecen 10 elementos(del Sc al Zn) más que en los períodos anteriores. A estos elementos 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.

A partir del cerio (elemento 58) se empiezan a llenar los orbitales 4f que pueden albergar en su conjunto 14 electrones. Estos elementos adicionales vienen después del lantano y forman la serie de **los lantánidos o tierras raras**, que son elementos con los subniveles 4f incompletos o que producen fácilmente cationes con los subniveles 4f incompletos. Las energía de los orbitales 5d y 4f están muy próximas y así el lantano tiene la configuración electrónica [Xe] $6s^2 5d^1$ y el cerio [Xe] $6s^2 5d^1 4f^1$

Después del actino ([Rn] $7s^2 6d^1$) viene la serie de los actínidos que empieza con el torio([Rn] $7s^2 6d^1 5f^1$) dónde la mayoría de los elementos no se encuentran en la naturaleza sino que se han sintetizado.

Configuración Electrónica y la Tabla Periódica

La tabla periódica está 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 al 18, en los cuales se están llenando los orbitales p.

Estos dos grupos comprenden los elementos principales

- 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)

