

2. «Estructura atómica y clasificación periódica de los elementos»

- 2.1 Descubrimiento de las partículas fundamentales: establecimiento de los primeros modelos atómicos de Thomson y de Rutherford
- 2.2 Espectro electromagnético. El origen de las ideas cuánticas: efecto fotoeléctrico
- 2.3 Espectro del átomo de hidrógeno
- 2.4 Sistemas mono-electrónicos. El modelo atómico de Bohr
- 2.5 Descubrimiento de las partículas nucleares: protón y neutrón
- 2.6 Dualidad onda-corpúsculo. Principio de incertidumbre
- 2.7 El modelo mecánico-cuántico. Orbitales hidrogenoides. Números cuánticos
- 2.8 Orbitales atómicos del hidrógeno
- 2.9 Espín del electrón
- 2.10 Introducción a los átomos poli-electrónicos
- 2.11 Principio de exclusión de Pauli. Regla de Hund. Principio de construcción
- 2.12 Configuraciones electrónicas en el estado fundamental
- 2.13 Sistema periódico: propiedades periódicas
- 2.14 Cuestiones y problemas

2.1 Descubrimiento de las partículas fundamentales: establecimiento de los primeros modelos atómicos de Thomson y de Rutherford

Análisis histórico:

- En **1895** se descubren los **rayos catódicos**, su nombre se debe a que son una radiación procedente del cátodo. La radiación se produce entre dos electrodos, por aplicación de varios miles de voltios, colocados dentro de un tubo con un gas a una presión muy baja (100 Pa ó 0,001 atm). Un fenómeno inesperado de aplicación se produjo en 1895 con el descubrimiento de los rayos-X por W.C. Röntgen, que fue el primer galardonado con el premio Nobel de Física en 1901.

- En **1896** se descubre la **radiactividad natural** por A.H Becquerel, y el estudio de esta radiación por los esposos Pierre y Marie Curie, que les supuso el premio Nobel de Física a los tres en 1903. Con el fenómeno de la radiactividad natural se demostraba que todos los elementos químicos tienen algo en común. Así, los elementos químicos más pesados tienen las propiedades de la radiactividad α (partículas positivas), β (partículas negativas) y γ (radiación de muy alta energía).

- En **1897** J.J. Thomson trabajando con los rayos que salían del cátodo, en un tubo vacío, identificó los transportadores de carga eléctrica. Demostró que estos rayos consisten en partículas llamadas **electrones**, por lo que recibió el premio Nobel de Física en 1906. Los **electrones** son emitidos cuando se aplica una diferencia de potencial elevada, entre dos electrodos metálicos en contacto, en un tubo de vidrio que contiene una pequeña cantidad de gas. Sus observaciones confirmaron que los rayos catódicos son un chorro de partículas cargadas negativamente que se mueve desde el electrodo negativo o cátodo al ánodo, luego los electrones proceden del interior de los átomos de los elementos que constituyan el cátodo. Thomson determinó otras propiedades de los electrones como la relación $\frac{q_e}{m_e} = 1,76 \cdot 10^{11} \frac{C}{kg}$. Posteriormente, en 1912, el físico americano R. Millikan hizo la primera medida de la carga del electrón y recibió el premio Nobel en 1923, también fue galardonado por sus trabajos en el efecto fotoeléctrico. La carga del electrón es $1,6 \times 10^{-19} C$ y la masa $9,1 \cdot 10^{-31} kg$. Siendo un electrón **1837** veces más ligero que el átomo de hidrógeno 1u. El descubrimiento de Thomson tuvo, por tanto, **importantes repercusiones para la Química**, demostró que el átomo de los compuestos químicos no está construido como un bloque indivisible; aunque llevó un número de años antes de que este desarrollo tuviera repercusión directa en la Química.

- En **1904** Thomson propuso el **primer modelo atómico** en el que se consideraba el átomo como una esfera cargada positivamente de radio 10^{-10} m con los electrones entremezclados sobre su volumen.

Modelo atómico de Thomson: Como los átomos son eléctricamente neutros, si arrancamos un electrón a un átomo, éste debe quedar cargado positivamente. Estos resultados llevaron a J.J. Thomson a proponer el primer modelo atómico ("plum-pudding") en el que consideraba el átomo constituido por una distribución continua de cargas positivas y negativas, teniendo las positivas la mayor parte de la masa. Las positivas estarían repartidas por todo el átomo y los electrones estaban situados en unas posiciones fijas y suficientemente separados entre sí.

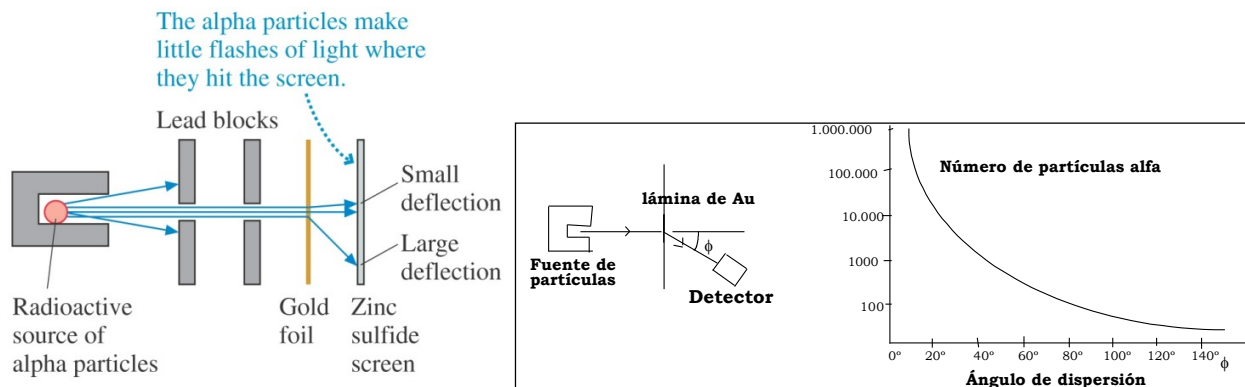
Modelo atómico de Rutherford: Al tratar de estudiar la estructura interna de los átomos y para comprobar la validez del modelo atómico de Thomson, Rutherford y sus colaboradores Geiger y Marsden, realizaron el siguiente experimento en 1909:

- Bombardearon una hoja metálica de Au, muy delgada, con partículas alfa α procedentes de una muestra del elemento químico radiactivo Ra. Las partículas, que son núcleos de helio, (${}^4\text{He}$) están cargadas positivamente, poseen una velocidad de $2 \cdot 10^4$ km/s y su masa es unas 7000 veces mayor que la de los electrones.

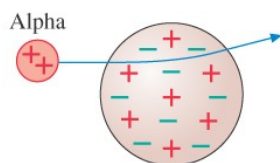
- La gran mayoría (más del 90%) de partículas α pasaba a través de la lámina de Au sin sufrir desviación.

- Un porcentaje pequeño de partículas α experimentaba desviaciones entre $\pm 60^\circ$.

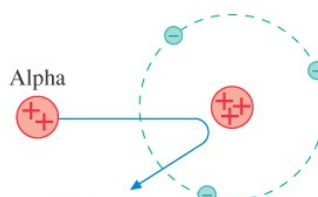
- Un porcentaje muy pequeño de partículas-alfa (1 de cada 20.000), experimentaba *desviaciones mayores de 90°* , es decir, no lograban traspasar la lámina de oro.



Los experimentos de Rutherford no se podían explicar con el modelo de Thomson, ya que con éste modelo, las partículas alfa deberían pasar a través de la hoja experimentando pequeñas desviaciones.



The alpha particle is only slightly deflected by a Thomson atom because forces from the spread-out positive and negative charges nearly cancel.



If the atom has a concentrated positive nucleus, some alpha particles will be able to come very close to the nucleus and thus feel a very strong repulsive force.

Para explicar estos experimentos Rutherford propuso el **modelo nuclear del átomo** que dice: “*En el átomo debe haber una concentración alta de carga positiva, es decir, mucha carga positiva en un volumen muy pequeño, llamado núcleo atómico y los electrones ocupan el espacio que rodea al núcleo girando a su alrededor*”.

A través de los datos experimentales de las desviaciones de las partículas alfa Rutherford determinó, de forma aproximada, la carga y el diámetro nuclear así como el diámetro de los átomos. Siendo el diámetro del núcleo de los átomos unas diez mil veces menores que el del propio átomo.

Este modelo presentaba dos **inconvenientes** importantes:

- 1.- No explica correctamente la estabilidad de los electrones girando alrededor del núcleo, ya que, los electrones al girar poseen aceleración y, en la teoría clásica del Electromagnetismo, se sabía que toda partícula cargada con aceleración emite energía, por lo que el electrón debería ir perdiendo energía y velocidad con lo que chocaría con el núcleo, lo que significa que este sistema atómico no sería estable.
- 2.- No explica por qué los átomos de un mismo elemento son idénticos, ya que con la Física Clásica no se podían explicar las configuraciones particulares de las órbitas electrónicas.

En **1913 Moseley determinó la carga nuclear** de los átomos analizando el espectro de rayos-X de los elementos químicos. Los rayos X se producen cuando un electrón muy energético choca con un átomo y le arranca un electrón. Si el electrón es de la capa $n = 1$ ó capa K deja un hueco al que cae un electrón de otra capa externa emitiendo un fotón de rayos X. Si el electrón cae desde $n = 2$ ó capa L tenemos una línea K_{α} .

Conocidos los espectros de rayos-X de muchos elementos químicos, representó gráficamente en el eje de ordenadas la raíz cuadrada de la frecuencia emitida de la radiación, del espectro de rayos-X, denominada la línea K_{α} y en el eje de abscisas el número del elemento en la Tabla Periódica.

Se comprueba que existe una regularidad lineal, por lo que Moseley dice: “*Esta regularidad lineal es una prueba de que en cada átomo hay una cantidad fundamental, que se incrementa con regularidad cuando se pasa desde un elemento químico al siguiente. Esta cantidad sólo puede ser la carga sobre el núcleo central*”.

La medición de la carga nuclear encontrada por Moseley establece una relación sencilla entre la frecuencia de la radiación característica de los rayos-X y la carga nuclear Z que viene dada por:
$$\sqrt{\nu} = aZ - b.$$

Las constantes a y b no dependen del elemento. Esto le permitió ordenar los elementos desde el ${}_{20}\text{Ca}$ hasta el ${}_{30}\text{Zn}$ por su número atómico. Además, el método de Moseley ayudó a determinar la posición de ciertos elementos que no se habían descubierto y también confirmó el fenómeno conocido como captura-K.

2.2 Espectro electromagnético. El origen de las ideas cuánticas: efecto fotoeléctrico

Los átomos en la antigüedad eran objetos conceptuales pero en la física clásica eran considerados sin estructura. En la segunda mitad del siglo XIX se acumuló un rico material empírico de las líneas espectrales emitidas por los átomos en el espectro visible. A esto se unió los rayos-X característicos descubiertos por C. Barkla (premio Nobel de Física en 1917), lo que unido a la clarificación posterior de la naturaleza ondulatoria de esta radiación y su difracción, por Max von Laue (premio Nobel de

Física en 1914), también supuso una importante fuente de información sobre la estructura interna de los átomos.

Los rayos-X característicos de Barkla son rayos secundarios, específicos para cada elemento expuesto a la radiación desde tubos de rayos-X, pero independiente de la forma química de las muestras. Karl Manne Siegbahn realizó las medidas de los espectros característicos de rayos-X de todos los elementos y demostró la sistemática, cómo consecutivamente las capas electrónicas son añadidas cuando vamos desde los elementos ligeros a los pesados. Para realizar estos experimentos diseñó espectrómetros de una alta precisión, por los que las diferencias de energía entre capas diferentes, y pudo establecer también reglas para la radiación de las transiciones entre las capas. Recibió el premio Nobel en 1924. Además, ello supuso un cambio radical en el conocimiento de la estructura atómica.

La física clásica considera que el movimiento es continuo y debido tanto a la ganancia como a la pérdida de energía. Entonces la pregunta es ¿por qué los átomos nos envían radiaciones con unas determinadas longitudes de onda?.

El origen de las ideas cuánticas: efecto fotoeléctrico

Radiación del cuerpo negro: Wilhelm Wien estudió la radiación del cuerpo-negro desde cuerpos sólidos calientes (los cuales en contraste con la radiación desde átomos en gases, tienen una distribución continua de frecuencias). Usando la electrodinámica clásica, obtuvo una expresión para la distribución de las frecuencias de esta radiación y el cambio de la longitud de onda de intensidad máxima, cuando la temperatura del cuerpo negro cambia (la ley de desplazamiento de Wien se usa para determinar la temperatura del Sol). Fue galardonado con el premio Nobel en 1911.

Sin embargo, Wien no pudo obtener una fórmula que explicase los experimentos para las longitudes de onda corta y larga. El problema no se explicó hasta que **Max Planck** introdujese su idea nueva y radical de que **la energía radiada se puede emitir sólo en quanta**, es decir, en porciones que tienen un valor definido, mayor para las longitudes de onda corta que para las largas (igual a una constante h veces la frecuencia de la radiación). Esto se considera como el nacimiento de la física cuántica. Wien recibió el premio Nobel en Física en 1911 y Planck en 1918 (galardonado en 1919).

Las ideas cuánticas nacieron al interpretar los datos experimentales representados en los siguientes gráficos, en los que en el eje de ordenadas se representa la densidad de energía de radiación de un cuerpo negro, y en el eje de abscisas la frecuencia, o bien, la longitud de onda de la radiación.

Si calentamos un cuerpo este va cambiando de color cuando va aumentando la temperatura y depende de la radiación emitida, empieza en rojo, que es de menor frecuencia, pasando por el blanco hasta el azul, de mayor frecuencia. Gustav Kirchhoff en 1859 asegura que la distribución de radiación en equilibrio es independiente del sistema con el que interacciona la radiación.

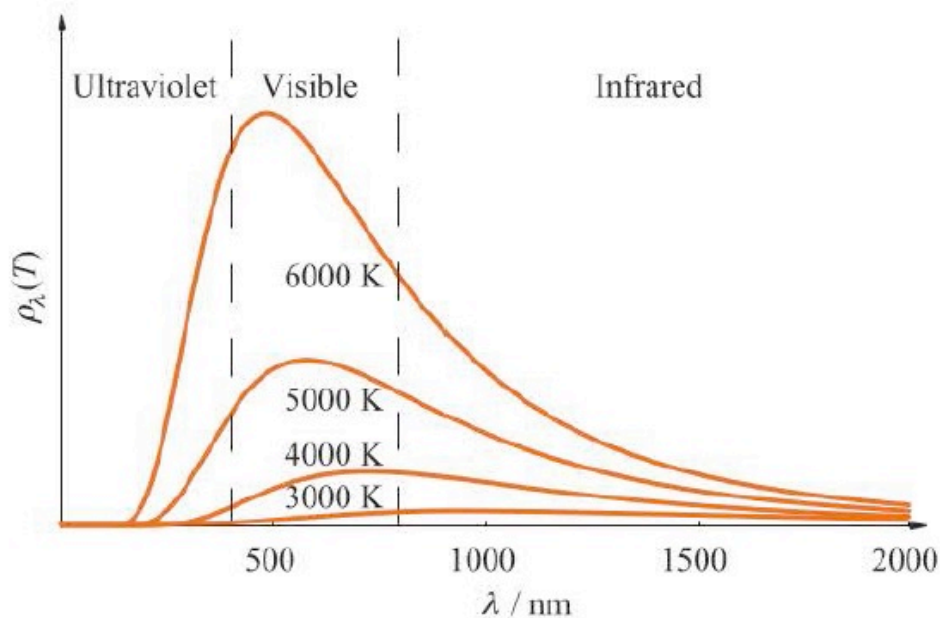
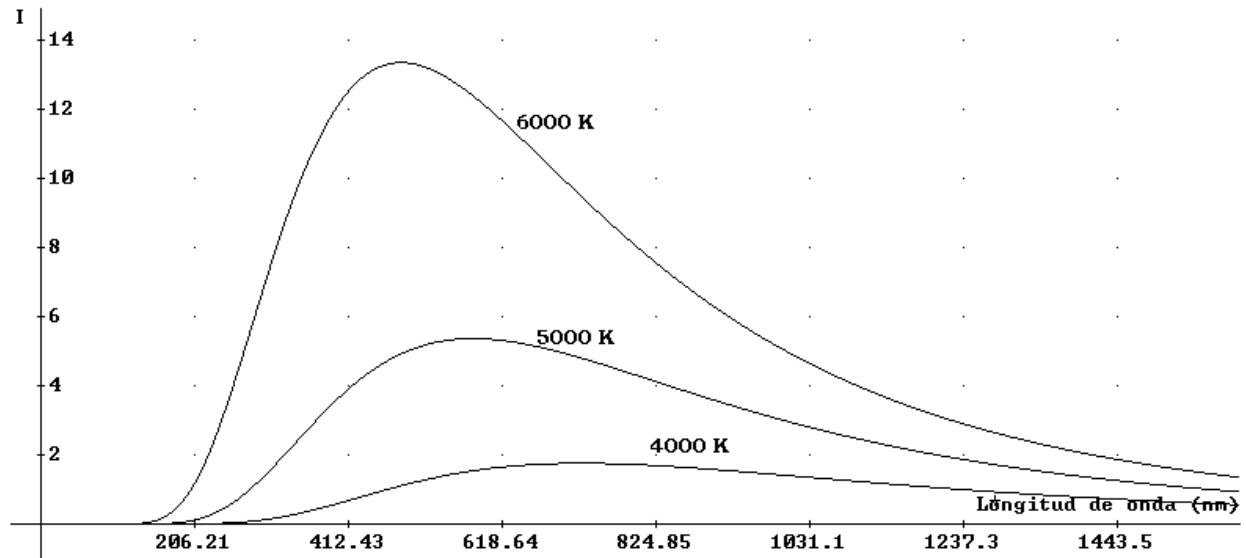
Cuando la radiación está en equilibrio con la materia entonces la materia absorbe y emite la misma cantidad de energía para cualquier longitud de onda. En esas condiciones la materia es un cuerpo negro que es un cuerpo ideal que absorbe y emite en todas las frecuencias. Es un proceso de interacción entre ondas electromagnéticas y materia, que es la cavidad que aloja las ondas. Por tanto, Planck considera a la cavidad del cuerpo negro como formada por una colección de osciladores armónicos cargados.

Max Planck, en 1900, descubrió una nueva ley para la distribución de la densidad de energía de radiación de un cuerpo negro. Para explicar los datos experimentales Planck consideró que la radiación emitida por el cuerpo negro se debe a las oscilaciones de los electrones en las partículas que constituyen el cuerpo. Estos electrones oscilan en el átomo como oscilan en una antena para dar las frecuencias de radio. Planck llegó a la conclusión de que había que asumir que la luz puede ser emitida

o absorbida por la materia sólo lo hace en múltiplos enteros de la frecuencia, o en múltiplos de una cantidad mínima de energía, la cual ha de tener una determinada frecuencia de radiación, llamado cuanto de energía:

$$\left\{ \rho_{\lambda(T)} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \right\} \left\{ \rho_{\nu(T)} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \right\} \quad \boxed{E = nh\nu = nh \frac{c}{\lambda}}$$

Siendo la energía de un oscilador un múltiplo entero n de la constante h llamada “constante de Planck”, de valor $6,626 \cdot 10^{-34}$ Js, y de ν la frecuencia de la radiación.



Efecto fotoeléctrico: Verificaciones muy importantes que vinieron a dar luz sobre la forma en que se observan los cuanta de energía se deben a Albert Einstein al interpretar el efecto fotoeléctrico (observado por primera vez por Hertz en 1887) con lo que se extendió la teoría de Planck. Einstein recibió el premio Nobel en 1921 y el galardón en 1922. La motivación del premio citó sus otros servicios a la Física teórica.

Experimentos posteriores realizados por James Franck y Gustav Hertz demostraron el inverso del efecto fotoeléctrico (es decir, un electrón que choca sobre un átomo, debe tener una energía mínima específica para producir un cuanto de luz de una energía determinada desde él) y demostraron que la validez general de las expresiones de Planck implican la constante h . Franck y Hertz compartieron el premio en 1925. Por el mismo tiempo, Arthur Compton (que recibió la mitad del premio en 1927) estudió la pérdida de energía de un fotón de rayos-X cuando es desparado sobre partículas materiales, y demostró que los cuanta de rayos-X, cuyas energías son diez mil veces mayores que las de la luz, también obedecen las reglas cuánticas. La otra mitad del premio se le concedió a Charles Wilson, cuyo aparato para observar dispersiones a altas energías se puede usar para verificar las predicciones de Compton.

Experimentos del efecto fotoeléctrico: Si la radiación emitida por una lámpara de Hg, en el vacío, se hace incidir sobre una superficie metálica de Na, dicha superficie emite electrones llamados fotoelectrones, y el fenómeno se llama efecto fotoeléctrico. Las radiaciones emitidas por la lámpara de Hg tienen unas determinadas longitudes de onda que son: 185 nm, 254 nm, 313 nm, 365 nm, 436 nm, 546 nm y 579 nm. Si las radiaciones se separan, mediante un prisma, en sus longitudes de onda se observa que las dos de mayor longitud de onda (546 nm y 579 nm) no producen la emisión de fotoelectrones. Si hacemos la representación gráfica de los datos ponemos en el eje de ordenadas la energía y en el eje de abscisas la frecuencia se obtiene una recta.

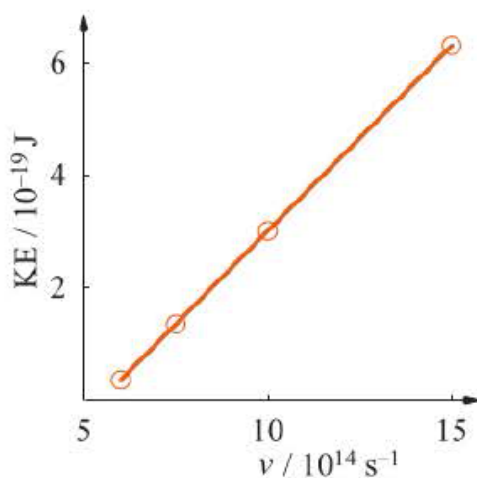
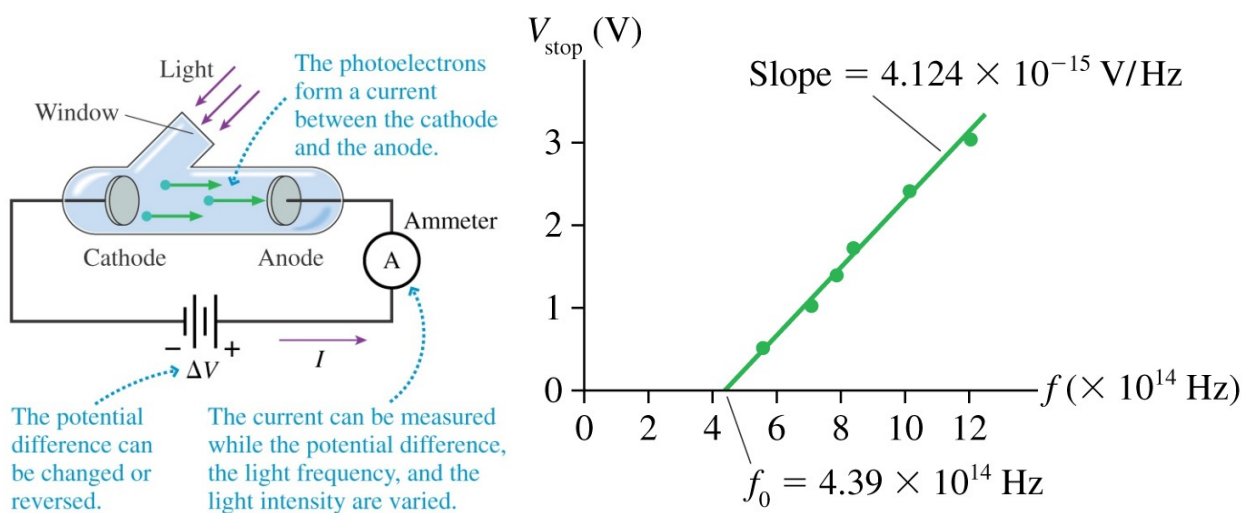


FIGURE 1.4

The kinetic energy of electrons ejected from the surface of sodium metal versus the frequency of the incident ultraviolet radiation. The threshold frequency here is 5.51×10^{14} Hz (1 Hz = 1 s $^{-1}$).

Longitud de onda λ	Frecuencia ν	Energía cinética fotoelectrones (KE)
436,0 nm	$6,9 \cdot 10^{14}$ Hz	$1,66 \cdot 10^{-19}$ J
365,0 nm	$8,2 \cdot 10^{14}$ Hz	$2,52 \cdot 10^{-19}$ J
313,0 nm	$9,6 \cdot 10^{14}$ Hz	$3,45 \cdot 10^{-19}$ J

En el curso de las experiencias se demostraron tres cosas:

1º) La emisión de fotoelectrones se produce con una longitud de onda de radiación máxima o con una frecuencia de radiación mínima.

2º) Las energías cinéticas con que salen los fotoelectrones es directamente proporcional a la frecuencia de la radiación incidente.

3º) Las energías de los fotoelectrones es independiente de la intensidad de la radiación utilizada, es decir, el aumento de la intensidad para una frecuencia determinada da lugar a un aumento en el número de fotoelectrones pero no de su energía.

Resultados experimentales

La interpretación teórica de estos resultados la proporcionó **Einstein en 1905** con la teoría de los cuantos de energía o fotones (Lewis en 1926): Considera el efecto fotoeléctrico en términos de un proceso de colisión, en el cual un cuanto de energía $h\nu$ o fotón choca contra la superficie del metal, entonces, una cierta cantidad de energía se invierte en liberar un fotoelectrón del metal realizando un trabajo (W) y el exceso de energía aparece en forma de energía cinética (E_c) del fotoelectrón.

$$\text{Siendo: } E_{\text{fotón}} = h\nu = W + E_{c(\text{fotoelectrón})}$$

Esta relación nos dice que la *energía electromagnética está cuantizada*. Esto significa que la energía no se transmite de forma continua sino que se transmite por cuantos o cantidades definidas de energía llamados fotones.

Si en la ecuación anterior despejamos la energía cinética de los fotoelectrones y consideramos que el trabajo mínimo para arrancar un fotoelectrón es $W = h\nu_0$, obtenemos la *ecuación*:

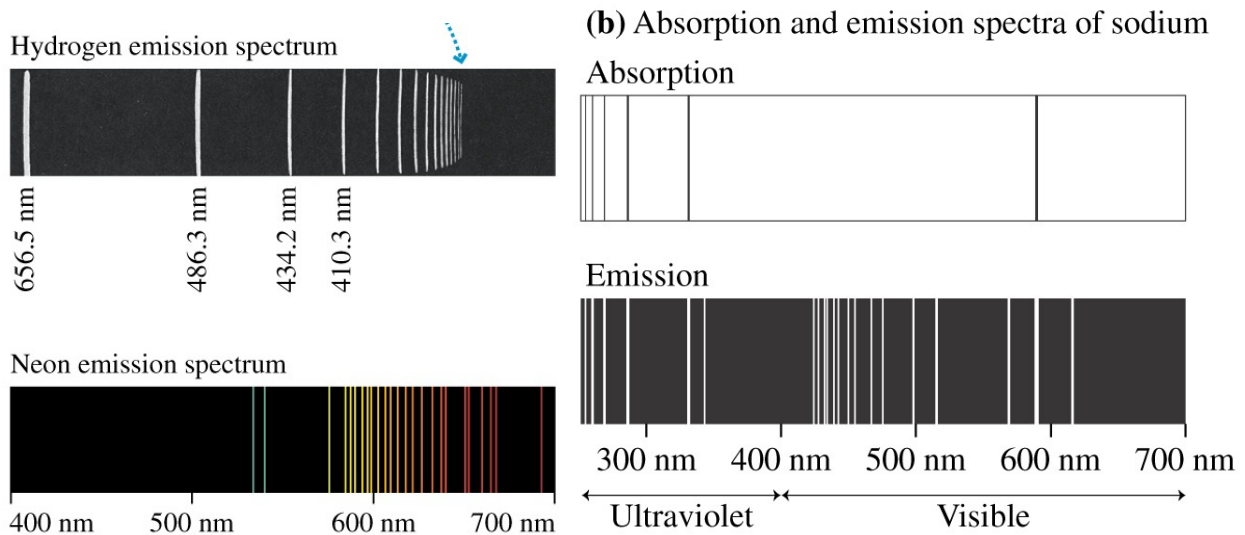
$$E_{c(\text{fotoelectrón})} = h\nu - W = h\nu - h\nu_0$$

$$V_{\text{stop}} = \frac{E_{c(\text{fotoelectrón})\text{máxima}}}{e} = \frac{h\nu - W}{e} = \frac{h}{e}(\nu - \nu_0)$$

Que es la ecuación de una recta donde **h** es la *pendiente de la recta de los datos experimentales*. Al calcular h mediante los datos del efecto fotoeléctrico coincide con el valor obtenido por Planck utilizando la radiación del cuerpo negro. Por lo que la cuantización de la energía se comprueba en dos experimentos distintos.

2.3 Espectro del átomo de hidrógeno

El espectro del átomo de hidrógeno se obtiene al dispersar el conjunto de radiaciones energéticas emitidas por el hidrógeno. El resultado de la dispersión es la separación de las radiaciones en sus de distintas frecuencias.



Experimento y observación del espectro del átomo de hidrógeno: En un tubo de vidrio cerrado que contiene gas hidrógeno a una presión muy baja, realizamos una descarga eléctrica. La radiación energética que se produce, en todas direcciones, se colima, es decir, se obtiene un haz de rayos paralelos, y la pasamos por un prisma con lo que se descompone en sus frecuencias visibles constituyentes. Las radiaciones separadas en sus distintas frecuencias o longitudes de onda en la zona visible del espectro (desde 400 nm hasta 700 nm) corresponden a 656,5 nm; 486,3 nm; 434,2 nm y 410 nm.

La observación experimental del espectro del hidrógeno pone de manifiesto que la energía emitida por éste no es continua sino que está constituido por una serie de líneas o rayas espectrales a una determinada longitud de onda o frecuencia. Balmer encontró en 1885 que estas líneas obtenidas en la zona visible se relacionaban mediante la siguiente expresión matemática:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = 109.677,57 \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right] \text{cm}^{-1} \quad (n = 3, 4, \dots)$$

Posteriormente, fueron descubiertas otras series de líneas en las zonas ultravioleta del espectro y en la infrarroja. El **espectroscopista Rydberg** generalizó la ecuación de Balmer comprobando que todas las líneas del espectro se relacionaban por la ecuación:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad \left(\begin{array}{l} n_1 = 1, 2, 3, 4, \dots \\ n_2 > n_1 \end{array} \right)$$

Si $n_1 = 1$ se conoce como serie de *Lyman* comprendida en la zona ultravioleta desde 70 nm a 130 nm. Si $n_1 = 2$ se conoce como serie de *Balmer* (zona visible desde 400 nm hasta 700 nm). Si $n_1 = 3$ se conoce como serie de *Paschen* (zona infrarroja superior a 900 nm). Si $n_1 = 4$ se conoce como serie de *Brackett* y si $n_1 = 5$ se conoce como serie de *Pfund*.

$$\text{Lyman } (91,2 \text{ nm} < \lambda < 121,6 \text{ nm})_{\text{uv}} \quad \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_{\text{H}} \left[\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad (n_2 > 1)$$

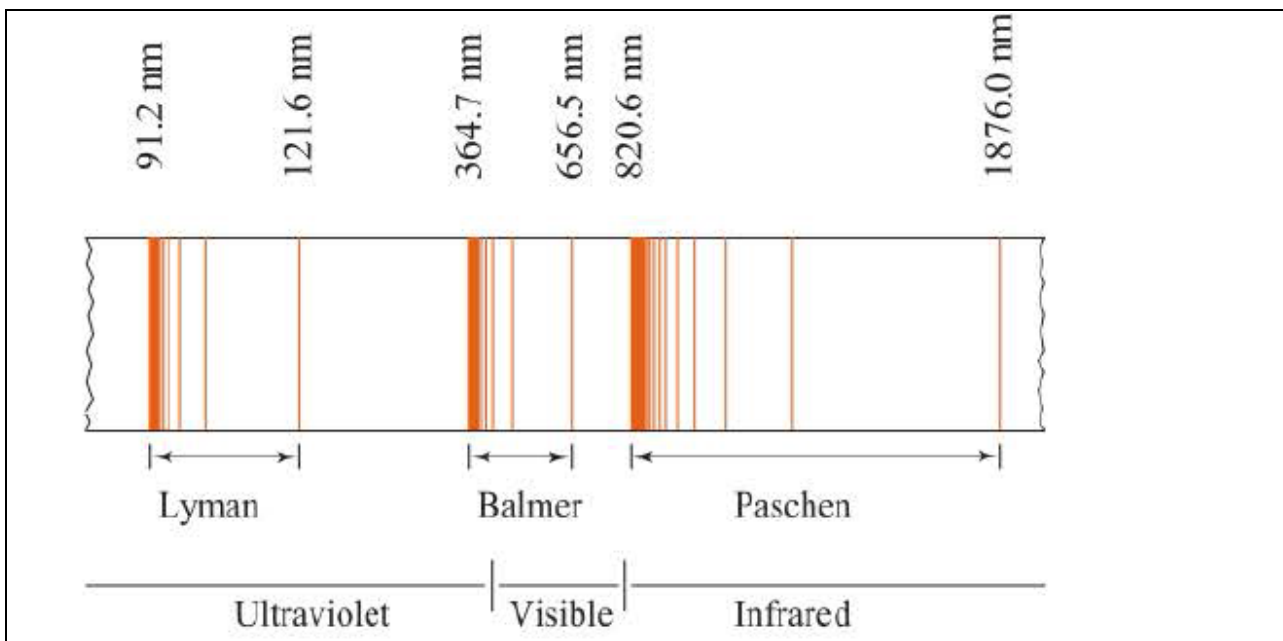
$$\text{Balmer } (364,7 \text{ nm} < \lambda < 656,5 \text{ nm})_{\text{visible}} \quad \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_{\text{H}} \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad (n_2 > 2)$$

$$\text{Paschen } (820,6 \text{ nm} < \lambda < 1876,0 \text{ nm})_{\text{IR}} \quad \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_{\text{H}} \left[\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad (n_2 > 3)$$

$$\text{Brackett } \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_{\text{H}} \left[\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad (n_2 > 4)$$

$$\text{Pfund } \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_{\text{H}} \left[\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad (n_2 > 5)$$

El espectro atómico del Hidrógeno es algo característico de ese átomo por lo que es razonable pensar que depende de la distribución electrónica en el átomo. Por tanto, sería muy importante el poder interpretar las líneas del espectro de emisión de los átomos para conocer su relación con la estructura electrónica. El espectro del átomo de Hidrógeno no se podía explicar con la teoría clásica de la radiación.



2.4 Sistemas mono-electrónicos. El modelo atómico de Bohr

En 1913 Niels Bohr propone el primer modelo cuántico del átomo de hidrógeno. En este modelo se **soluciona el problema** de la *radiación electrónica* al estar el electrón girando y **se interpreta** el hecho experimental del *espectro del átomo de hidrógeno*, es decir, el por qué los átomos emiten o absorben luz a unas determinadas frecuencias o longitudes de onda. **El modelo se puede resumir en tres postulados:**

1.- El electrón gira alrededor del núcleo describiendo órbitas circulares estacionarias de momento angular constante ($L = r \cdot mv = \text{cte}$) por estar sometido a una fuerza central.

2.- Las únicas órbitas estables o estacionarias son aquellas en las que se cumple que $L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$.

Es decir, que el momento angular del electrón sea un múltiplo de la constante de Planck.

3.- Si un electrón pasa de un estado estacionario superior E_2 a otro inferior E_1 emite un fotón ($-h\nu$) y si lo hace de un estado estacionario inferior (E_1) a otro superior (E_2) absorbe un fotón ($+h\nu$).

$$\Delta E = E_2 - E_1 = +h\nu$$

$$\Delta E = E_1 - E_2 = -h\nu$$

Análisis del primer postulado: En el primer postulado el electrón en su *movimiento circular* alrededor del núcleo está sometido a la fuerza eléctrica de atracción debida al núcleo y puede girar en cualquier *radio*, también puede tener cualquier valor del *momento angular* y por tanto cualquier valor de la *energía*. Es decir, no hay restricciones en esas magnitudes. La relación entre estas magnitudes viene dada por las ecuaciones:

$$F_{\text{centrípeta-electrón}} = F_{\text{eléctrica-núcleo}} \left\{ \begin{array}{l} m_e \frac{v_{\text{orbital}}^2}{r_{\text{órbita}}} = K_e \frac{Ze^+e^-}{r_{\text{órbita}}^2} = K_e \frac{Ze^2}{r_{\text{órbita}}^2} \\ m_e v_{\text{orbital}}^2 = K_e \frac{Ze^2}{r_{\text{órbita}}} \end{array} \right. \quad r_{\text{órbita}} = K_e \frac{Ze^2}{m_e v_{\text{orbital}}^2}$$

$$L_{\text{electrón}} = r_{\text{órbita}} \cdot m_e \cdot v_{\text{orbital}} \left\{ L^2 = r^2 m_e^2 v^2 = r^2 m_e K_e \frac{Ze^2}{r} = r m_e K_e Ze^2 \right. \quad \left. r_{\text{órbita}} = \frac{L_{\text{electrón}}^2}{m_e K_e Ze^2} \right.$$

$$E_{t(\text{electrón})} = E_c + E_{p(e)} = \frac{1}{2} m_e v_{\text{orbital}}^2 - K_e \frac{Ze^2}{r_{\text{órbita}}} = \frac{1}{2} K_e \frac{Ze^2}{r} - K_e \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} K_e \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} K_e \frac{Z^2 e^4 m_e}{L^2}$$

Análisis del segundo postulado: En el segundo postulado se introduce la cuantización del momento angular L del electrón y, por tanto, la cuantización de la energía del electrón.

$$\left\{ \begin{array}{l} L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \\ r = \frac{L^2}{m_e K_e Ze^2} = n^2 \frac{\hbar^2}{m_e K_e Ze^2} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} r = n^2 \frac{(1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \times 9 \cdot 10^9 \frac{\text{Nm}^2}{\text{C}^2} \times (1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2} = 5,3 \cdot 10^{-11} n^2 \\ r_{(n=1)} = a_0 = 53 \text{ pm} \end{array} \right.$$

$$E_{\text{total}} = -\frac{1}{2} K_e \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} \times 9 \cdot 10^9 \frac{\text{Nm}^2}{\text{C}^2} \times \frac{(1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2}{n^2 \times 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}} = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

El radio de la primera órbita del electrón ($n = 1$) será de $a_0 = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 53 \text{ pm}$; y la energía del electrón es de $-13,6 \text{ eV}$.

Análisis del tercer postulado: Si un electrón salta de un estado estacionario inferior E_1 a otro superior E_2 absorbe un fotón. Y si salta de un estado estacionario superior E_2 a otro inferior E_1 emite un fotón

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta E = E_2 - E_1 = +h\nu \\ \Delta E = E_1 - E_2 = -h\nu \end{array} \right.$$

Con el tercer postulado se podía explicar la ecuación que relaciona las líneas del espectro del átomo de hidrógeno. Así cada línea del espectro significa el salto del electrón desde una órbita a otra. Por ejemplo, si el electrón salta de la 2ª órbita a la 1ª, es decir, del estado n_2 al estado n_1 emite un fotón:

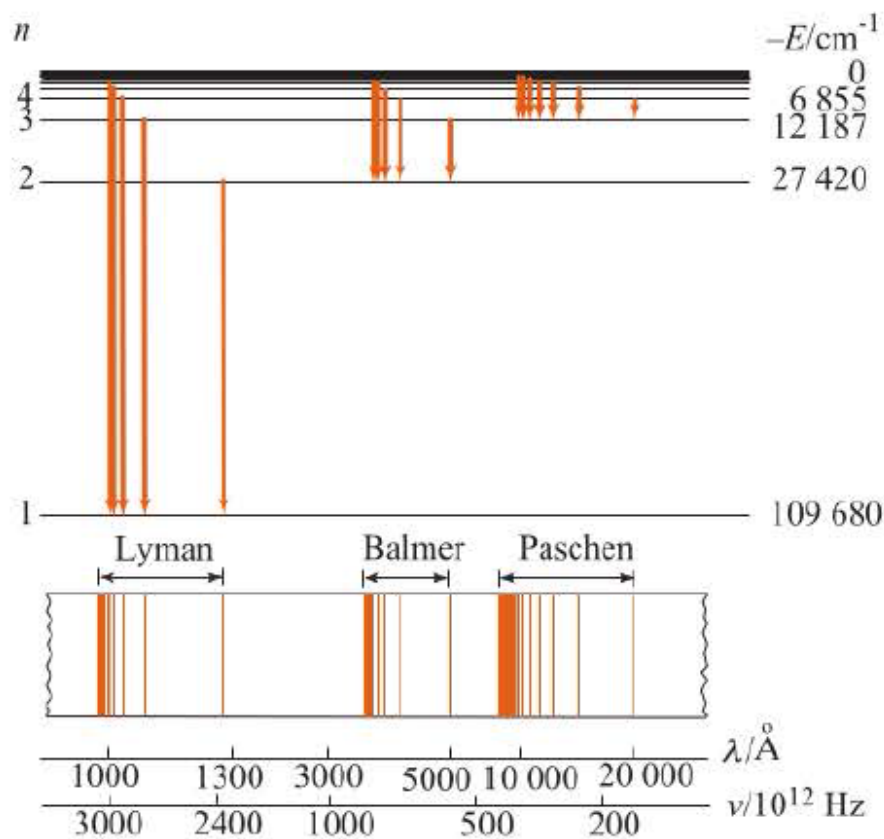
$$\Delta E = E_1 - E_2 = -h\nu \quad \left\{ E = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \right\}$$

$$\Delta E = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{n_1^2} + \frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{n_2^2} = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] = -h\nu = -h \frac{c}{\lambda} = -hc\tilde{\nu}$$

$$\nu = \frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{h} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] = \frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{6,62608 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

$$\tilde{\nu} = \frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{hc} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] = \frac{2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{6,62608 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 3,0 \cdot 10^{10} \frac{\text{cm}}{\text{s}}} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] = 109.669 \text{ cm}^{-1} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = 109.669 \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \text{ cm}^{-1} = R_H \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \text{ cm}^{-1}$$



Las aportaciones del modelo atómico de Bohr fueron las siguientes:

- Aplica por primera vez el fenómeno de la cuantización del momento angular del electrón y a la energía del electrón en su órbita.
- Explica con gran detalle los resultados experimentales del espectro del átomo de Hidrógeno. En primer lugar, **obtiene teóricamente la constante de Rydberg, R_H , que es un resultado**

experimental. En segundo lugar, **interpreta las líneas del espectro como saltos del electrón desde una órbita a otra.**

c) Propone una explicación de la clasificación de los elementos químicos en la Tabla Periódica. En la tabla periódica los elementos químicos se clasifican en grupos por tener propiedades químicas semejantes. Esto se explica por las órbitas electrónicas y las propiedades químicas de un elemento químico están determinadas fundamentalmente por el número de electrones en su órbita más externa.

Los fallos del modelo atómico de Bohr se pueden resumir en: a) No explica los fundamentos físicos para considerar que el momento angular del electrón en la órbita está cuantizado. b) No explica correctamente los espectros de los átomos polieletrónicos. c) No predice las intensidades de las líneas espectrales.

2.5 Descubrimiento de las partículas nucleares: protón y neutrón

En **1919** se realizaron dos importantes descubrimientos: **1)** Aston construye el espectrómetro de masas lo que permitió determinar con gran exactitud las masas atómicas y permitió conocer la existencia de los **isótopos**. **2)** Rutherford descubrió, al bombardear con partículas α el núcleo de Nitrógeno, su escisión acompañada por el escape de una partícula de masa $1836,1 \cdot m_e$ (igual a la del núcleo del isótopo más ligero del hidrógeno) y de carga la misma que la del electrón pero positiva (+e). Siendo la reacción: ${}^{14}\text{N} + {}^4\text{He} \rightarrow [{}^{18}\text{F}] \rightarrow {}^1\text{H} + {}^{17}\text{O}$.

El experimento fue repetido con otros materiales y, en todos los casos, el núcleo de estos materiales emitía núcleos de ${}^1\text{H}$ cuando eran bombardeados con partículas alfa rápidas. Así quedó probado que **el núcleo de los átomos contiene el núcleo de ${}^1\text{H}$ más sencillo y se llamó protón.**

En **1930** continuando los experimentos de Rutherford, Bothe y Becker descubrieron que cuando bombardeaban con partículas alfa algunos elementos ligeros (Be, B) se produce una radiación muy penetrante. Esta radiación no estaba compuesta de partículas cargadas, ya que no le afectaban los campos eléctricos o magnéticos y pensaron que era una radiación de alta energía. En **1932 Chadwick** demostró que se emiten partículas neutras que tienen una masa parecida a la de los protones. Esas partículas neutras se llamaron **neutrones** y el proceso es: ${}^9\text{Be} + {}^4\text{He} \rightarrow [{}^{13}\text{C}] \rightarrow {}^{12}\text{C} + {}^1_0\text{n}$. **Chadwick** usó las leyes de conservación de la energía y del momento lineal para analizar los resultados experimentales de choque de partículas alfa sobre Be, la radiación saliente la dirigió hacia una cámara de ionización, la cual fue alternativamente llenada con Hidrógeno y Nitrógeno. El análisis de la colisión de la radiación entrante en la cámara con los núcleos de H y de N le llevó a la conclusión que eran partículas de masa parecida a la del protón pero sin carga, que les llamó **neutrones**. El neutrón tiene una masa $1838,6$ veces la masa del electrón y es más pesado que el protón. Las medidas de su espín y momento magnético indican que como el protón y el electrón tienen un espín $\frac{1}{2}\hbar$ mientras su momento magnético es negativo (el momento magnético del neutrón es de $1,9131$ magnetones nucleares) y menor en 936 veces que el momento magnético del electrón.

Al poco tiempo del descubrimiento del neutrón **Heisenberg estableció el modelo protón-neutrón como estructura de los núcleos**. En este modelo todos los núcleos poseen dos tipos de partículas llamadas **nucleones** que son los protones y los neutrones. Hoy se conocen más de 2000 núcleos entre naturales y artificiales. Los núcleos difieren en el número de protones y neutrones. Un núcleo es un conglomerado de protones y neutrones ocupando una pequeña región del átomo. Se representa de la siguiente forma: ${}^A_Z\text{X}$. El número A es el número de nucleones o número másico, Z es el número de protones y la diferencia $(A-Z) = N$ es el número de neutrones.

Núcleos **isótopos** son los que tienen igual número de protones Z , núcleos **isobaros** los que tienen igual número de nucleones A y núcleos **isotonos** los que tienen igual número de neutrones.

2.6 Dualidad onda-corpúsculo. Principio de incertidumbre

En 1924 Louis de Broglie sugirió que “*de la misma forma que la luz tiene una doble naturaleza onda-corpúsculo, en determinadas circunstancias, las **partículas** podrán manifestar un comportamiento ondulatorio*”. La **luz** se comporta como una **onda** ya que tiene las propiedades de las ondas: difracción, reflexión, refracción, interferencia. Además, se comporta como una **partícula** como se comprueba en el efecto fotoeléctrico y en el efecto Compton.

Para un fotón la energía viene dada por la ecuación de Planck: $E = hv$. La relación entre la masa y la energía para cualquier partícula viene dada por la ecuación de la teoría de la relatividad: $E^2 = (pc)^2 + (m_0c^2)^2$ ($E_{\text{fotón}(m_0=0)} = pc$). Si igualamos las dos expresiones de la energía

$$E = hv = h \frac{c}{\lambda} = pc \quad \Rightarrow \quad \frac{h}{\lambda} = p$$

El paso trascendental que dio Louis de Broglie consistió en ampliar la ecuación **para cualquier partícula** de masa m y que se mueva con una velocidad v :

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

Un **electrón**, de masa $9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, con una velocidad $1,12 \cdot 10^8$ m/s tendría una **onda de materia** asociada, de longitud de onda $6,5 \cdot 10^{-12}$ m = 6,5 pm.

El carácter ondulatorio de los electrones fue **observado en 1927** por los americanos Davisson y Germer e independientemente por G.P. Thomson en 1926. Ellos demostraron que los electrones se difractan a través de una estructura cristalina de Ni y, el análisis de las figuras de difracción, permitió determinar la longitud de onda asociada a los electrones que era totalmente coincidente con la obtenida por la ecuación de De Broglie.

La hipótesis de De Broglie proporcionó la primera **racionalización del 2º postulado del modelo atómico de Bohr**: $L = n\hbar$. La existencia de sólo ciertas órbitas electrónicas puede explicarse considerando que son órbitas, de radio r , que contienen un número entero de longitudes de onda de De Broglie: $2\pi r = n\lambda$.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad \left\{ \begin{array}{l} 2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{mv} \\ r \cdot mv = n \frac{h}{2\pi} \end{array} \right\} \quad L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

The de Broglie Wavelengths of Various Moving Objects

Particle	Mass/kg	Speed/m·s ⁻¹	Wavelength/pm
Electron accelerated through 100 V	9.11×10^{-31}	5.9×10^6	120
Electron accelerated through 10 000 V	9.29×10^{-31}	5.9×10^7	12
α particle ejected from radium	6.68×10^{-27}	1.5×10^7	6.6×10^{-3}
22-caliber rifle bullet	1.9×10^{-3}	3.2×10^2	1.1×10^{-21}
Golf ball	0.045	30	4.9×10^{-22}

Principio de incertidumbre: Enunciado por Heisenberg en 1927: “*Es imposible conocer con exactitud y a un mismo tiempo la posición y el momento lineal de una partícula, de tal forma que si conocemos con exactitud la posición tendremos una gran incertidumbre en su momento lineal y si conocemos con exactitud su momento lineal tendremos una gran incertidumbre en conocer su posición*”. Siendo el producto de las incertidumbres

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

El principio es una consecuencia de la doble naturaleza de la materia. Sus repercusiones en los modelos atómicos son muy importantes, ya que para conocer la trayectoria del electrón, con precisión, hemos de conocer con gran precisión sus posiciones y sus velocidades, lo que ya no es posible.

- Si se quiere determinar la **posición de un electrón** dentro de un intervalo Δx debemos utilizar un aparato o instrumento de medida con una resolución espacial menor que Δx . Una forma de conseguir esta resolución es usar una luz con una longitud de onda $\lambda = \Delta x$, y los fotones han de tener un momento lineal $p = \frac{h}{\lambda}$.

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

- Mientras mayor sea el momento lineal del fotón menor será su longitud de onda y mayor su frecuencia $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c}$.

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

- Mientras menor sea el momento lineal mayor será su longitud de onda y menor su frecuencia.

- Si queremos determinar con la mayor precisión posible la **posición de un electrón**, usaríamos fotones con el momento lineal mayor posible, para que al tener longitudes de onda muy pequeñas sea posible distinguir donde se encuentra el electrón.

- Sin embargo, al utilizar fotones de alto momento lineal, al chocar con el electrón lo perturba violentamente y tendríamos una gran incertidumbre en determinar su velocidad y su momento lineal.

- Si tenemos incertidumbre en determinar su momento lineal trae como consecuencia que no podríamos determinar su trayectoria, ya que para conocer la trayectoria con precisión hemos de conocer con gran precisión las posiciones y las velocidades.

2.7 El modelo mecánico-cuántico. Orbitales hidrogenoides. Números cuánticos

El modelo mecánico-cuántico del átomo de hidrógeno toma como principios básicos la dualidad onda-corpúsculo y el principio de incertidumbre.

La importancia del principio de incertidumbre en la descripción de la estructura electrónica de los átomos y, por tanto, de la química, es que el modelo atómico de Bohr en el que se representa al electrón viajando en una órbita determinada no es válido. Un electrón en una órbita definida tendrá una posición definida y una velocidad en cada instante, lo que está prohibido por el principio de incertidumbre.

En **mecánica cuántica** no se habla de posiciones exactas del electrón sino de la **probabilidad** de que el electrón esté en una posición dada. Por ejemplo, si decimos que la probabilidad de encontrar un electrón en una zona próxima al núcleo es 0,01 significa que en 100 observaciones del átomo el electrón estará próximo al núcleo en una ocasión.

La expresión matemática que nos expresa donde probablemente podemos encontrar un electrón se llama la **función de onda** Ψ (letra griega psi). Esta función de onda tiene valores grandes en algunas regiones y pequeños en otras, parecidos a la altura de una onda en el agua.

La **interpretación de la función de onda** fue propuesta por Born: “*La probabilidad de encontrar un electrón en una posición dada es proporcional al cuadrado de la función de onda, Ψ^2 , en esa posición*”. Por ejemplo, si $\Psi = 0,1$ en un punto y $\Psi = -0,2$ en otro punto, el cuadrado de la función de onda es 0,01 y 0,04; lo que significa que en el segundo punto hay una probabilidad de encontrar al electrón cuatro veces mayor.

La *función de onda de un electrón* en un átomo se llama un **orbital atómico** que lo podemos definir como **una región del espacio en la que hay una probabilidad alta de encontrar al electrón**. Un átomo de hidrógeno tiene un número infinito de orbitales atómicos diferentes. Cada uno de ellos corresponde a diferentes regiones del espacio. Dependiendo del orbital que ocupe el electrón el átomo tendrá una **energía** y cuando el electrón experimente una **transición** desde un orbital a otro, el cambio de energía se manifiesta emitiendo un fotón, como en el modelo de Bohr.

2.8 Orbitales atómicos del hidrógeno

La ecuación por la que se obtienen los orbitales atómicos del hidrógeno la obtuvo en 1926 Schrödinger. Cuando solucionó la ecuación, conocida con su nombre, Schrödinger encontró por *deducción* que:

1. Algunos **orbitales atómicos** pueden existir sólo con determinadas energías. Mientras Bohr *asume* que sólo existen determinadas órbitas.
2. La **energía del átomo** está **cuantizada** y los electrones sólo pueden tener determinados valores de energía. Por una extraordinaria coincidencia los niveles de energía permitidos calculados desde la ecuación de Schrödinger son los mismos que los obtenidos por Bohr. Sin embargo, el modelo de Schrödinger se puede extender a los átomos poli-electrónicos.
3. Cada **orbital atómico** se identifica por tres **números cuánticos**: “*un número cuántico es un número que determina el estado de un electrón y especifica el valor de una propiedad*”.
4. Los números cuánticos son: el número cuántico principal **n**, el número cuántico azimutal **l** y el número cuántico magnético **m_l**.

Número cuántico principal n : Determina la **energía** de un electrón en un átomo de hidrógeno exactamente igual que en el modelo de Bohr y puede tomar los valores 1, 2, 3, 4, ... hasta el infinito.

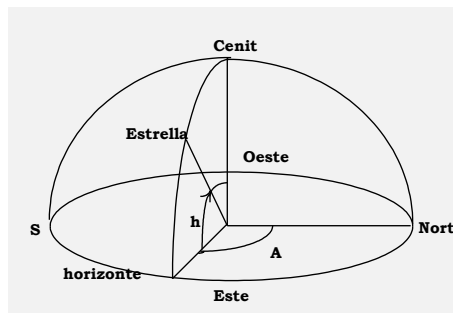
$$E = -\frac{1}{2} K_e \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} K_e^2 \frac{Z^2 e^4 m_e}{n^2 \hbar^2}$$

Para $n = 1$ hay sólo un orbital, para $n = 2$ hay cuatro orbitales y en general **hay n^2 orbitales para cada valor de n** . Todos los orbitales con el mismo valor de n están en la misma **capa del átomo**. Los cuatro orbitales con $n = 2$ pertenecen a la misma capa, los nueve orbitales con $n = 3$ pertenecen a otra capa, y así sucesivamente.

El **número cuántico principal n** también **nos determina la distancia promedio** del electrón al núcleo. Hay que recordar que no podemos determinar la posición del electrón, pero podemos hablar de la distancia promedio desde el núcleo. El hecho importante es que la distancia promedio de un electrón al núcleo se incrementa cuando lo hace n . Así, cuando el electrón está en un orbital de la capa de energía menor ($n = 1$) su distancia promedio desde el núcleo es menor que cuando ocupa cualquiera de los orbitales de la capa con $n = 2$.

Número cuántico acimutal o del momento angular l : Especifica la magnitud del *momento angular L del electrón* mediante la siguiente expresión y, además, es un índice que agrupa los orbitales de una capa en diferentes series llamadas **subcapas**. $|L| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$

Para localizar un objeto en el Universo necesitamos sólo sus direcciones y no sus distancias. Podemos imaginar que todos los objetos están localizados en la esfera celestrial y **necesitamos dos coordenadas**. El más sencillo se basa en la observación del horizonte, el sistema coordenado **altitud-acimut**, considera el ángulo acimut A definido a lo largo del horizonte y el ángulo altitud h por encima del horizonte.



Todos los orbitales de una capa que tienen el mismo valor de l pertenecen a la misma subcapa. Para una capa de número cuántico principal n , el número cuántico azimutal l puede tener los valores **0, 1, ..., hasta $(n-1)$** , dando n valores en total. Este rango de valores para l significa que hay sólo una subcapa de la capa $n = 1$ con valor $l = 0$, dos subcapas de la capa $n = 2$ de valores $l = 0$ y $l = 1$, y así sucesivamente. Las subcapas se denominan por letras usando la siguiente correspondencia: con $l = 0$ se llama s (sharp), con $l = 1$ se llama p (principal), con $l = 2$ se llama d (difusa), con $l = 3$ se llama f (fundamental),...

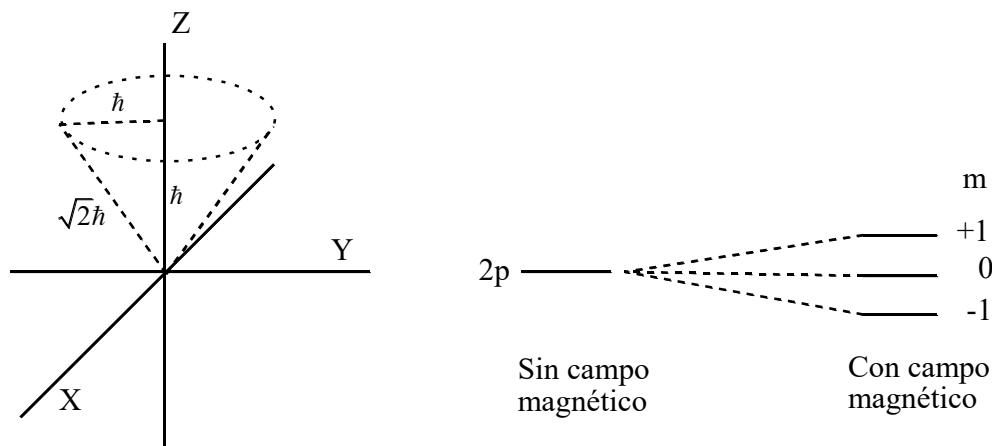
Número cuántico magnético m_l : Especifica la *componente z del momento angular orbital* de un electrón a través de la expresión y el orbital individual en una subcapa. $L_z = m_l \hbar$

Una subcapa con el número cuántico azimutal l posee $(2l+1)$ orbitales individuales, cada orbital corresponde a uno de los valores permitidos de m_l que son **0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm l$** . Por ejemplo, los orbitales

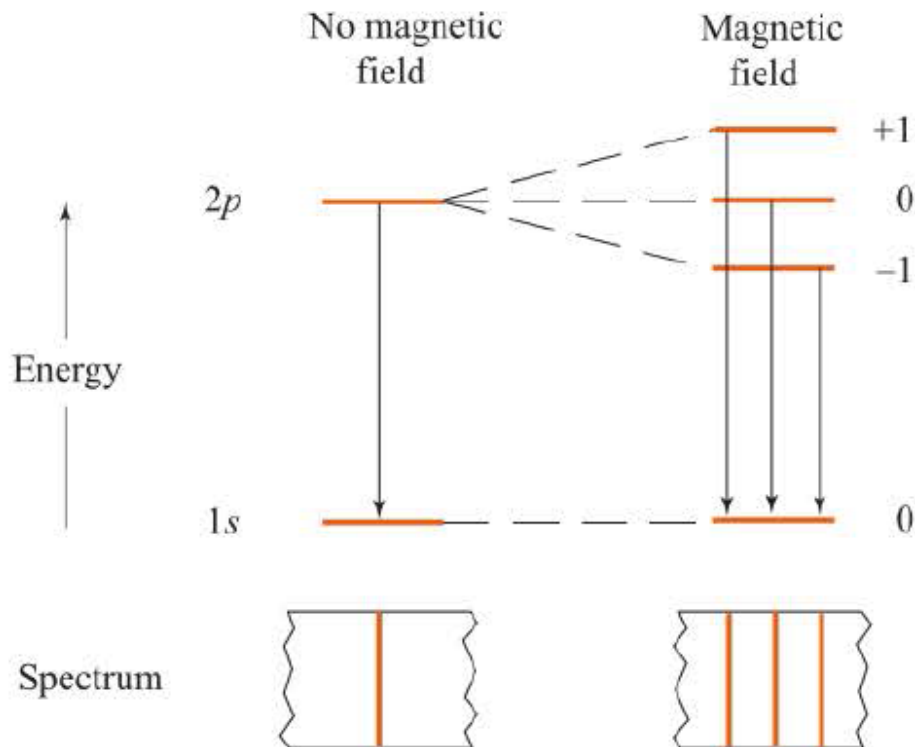
que hay en la subcapa p, de cualquier capa y que tienen de número cuántico azimutal $l=1$, son tres y tienen de número cuántico magnético 0, +1, -1. Que se denominan p_z , p_x y p_y .

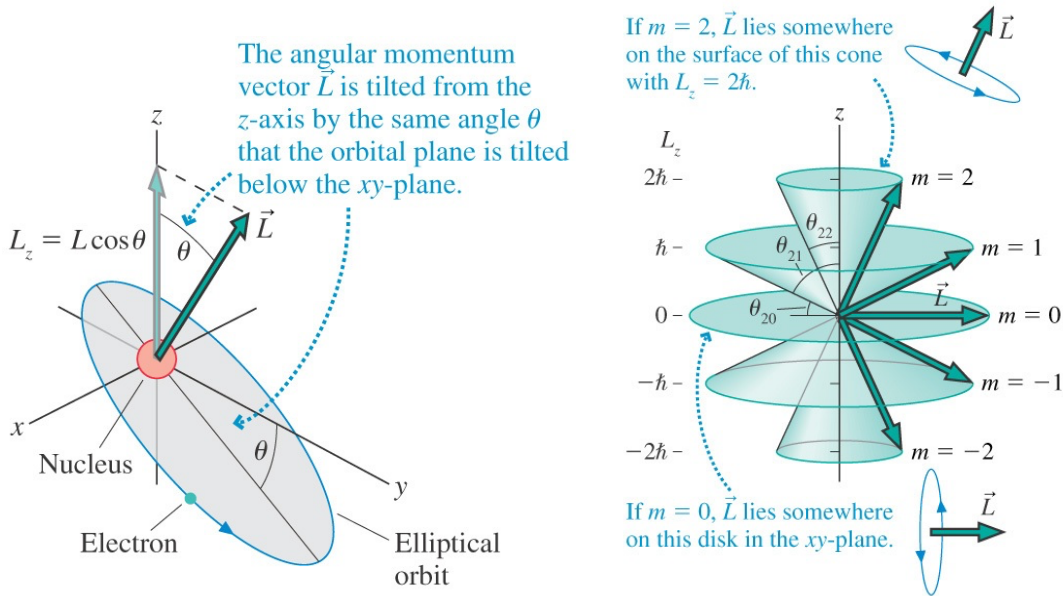
El número cuántico m_l se llama magnético porque la energía del átomo de hidrógeno en un campo magnético depende de m_l . En ausencia del campo magnético, cada nivel de energía está degenerado $2l+1$ veces. En presencia de un campo magnético, estos niveles se separan, y las energías dependen del valor particular de m (efecto Zeeman).

Por ejemplo, si $l = 1$ tenemos que $\{ |L| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar \}$ $\{ |L| = \sqrt{2} \cdot \hbar \}$ $\{ L_z = 0, \pm\hbar \}$, y los valores de $m = 0; \pm 1$.



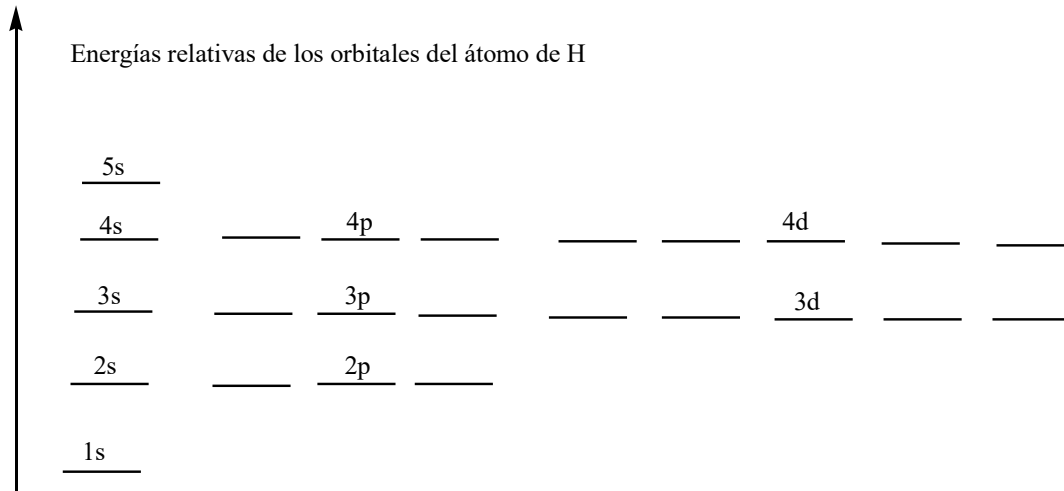
Los niveles de energía del átomo de hidrógeno son divididos por la presencia de un campo magnético



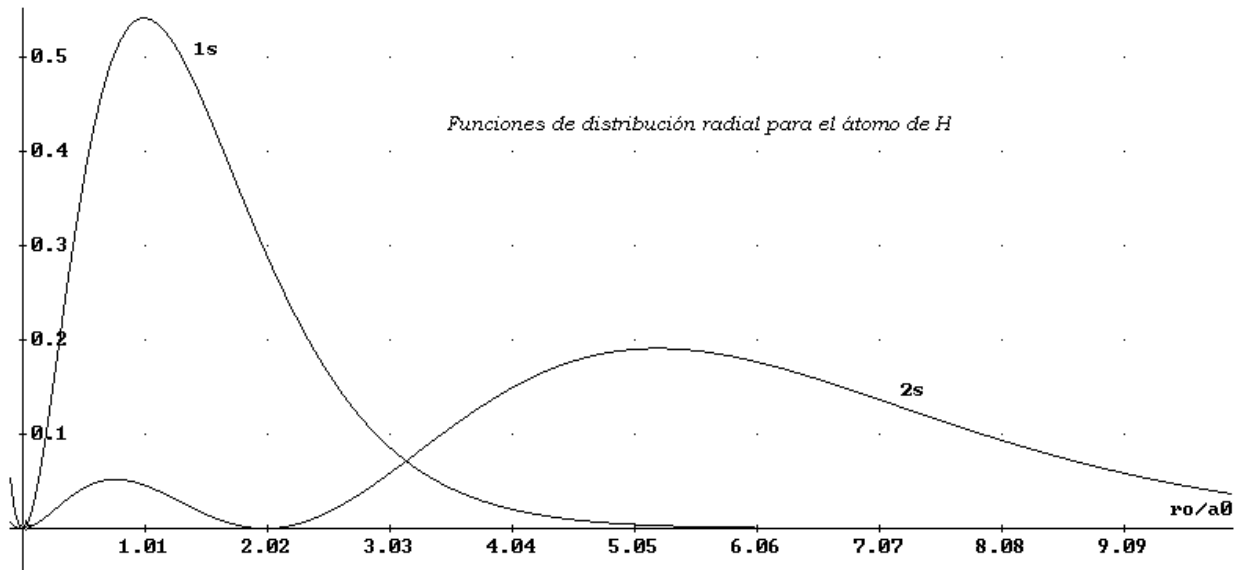


Relación entre capas, subcapas y orbitales

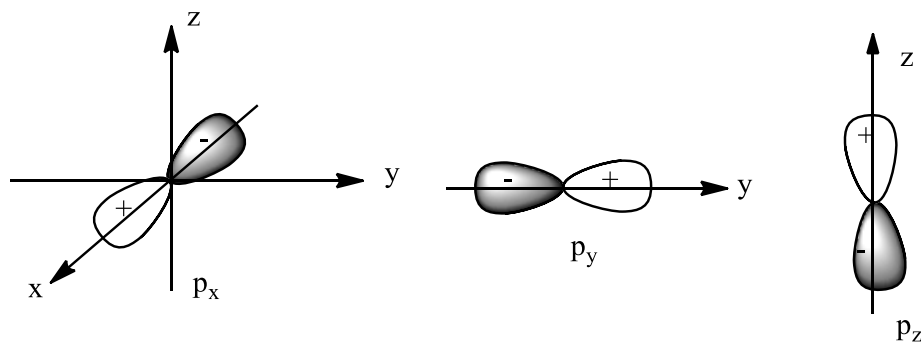
Capa, n	1	2	3		4		5		6		7			
Subcapa, l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	0	1	2		
m_l	0	0	-1	0	1	0	-1	0	1	-2	-1	0	1	2
orbitales	1s	2s	2p _x ; 2p _y ; 2p _z	3s	3p _x ; 3p _y ; 3p _z	3d _{xy} ; 3d _{xz} ; 3d _{yz} ; 3d _{z²} ; 3d _(x²-y²)								



Orbitales s: El orbital de menor energía en el átomo de H es el orbital 1s. **Todos los orbitales s son esféricos.** Es decir, la **probabilidad de encontrar el electrón a una distancia desde el núcleo es la misma en todas direcciones.** La superficie de la esfera que dibuja el orbital s nos da el 90% de probabilidad de encontrar el electrón en su interior. Para el átomo de H la superficie tiene de radio 140 pm. El orbital 2s tiene un nodo esférico y el 3s tiene dos.

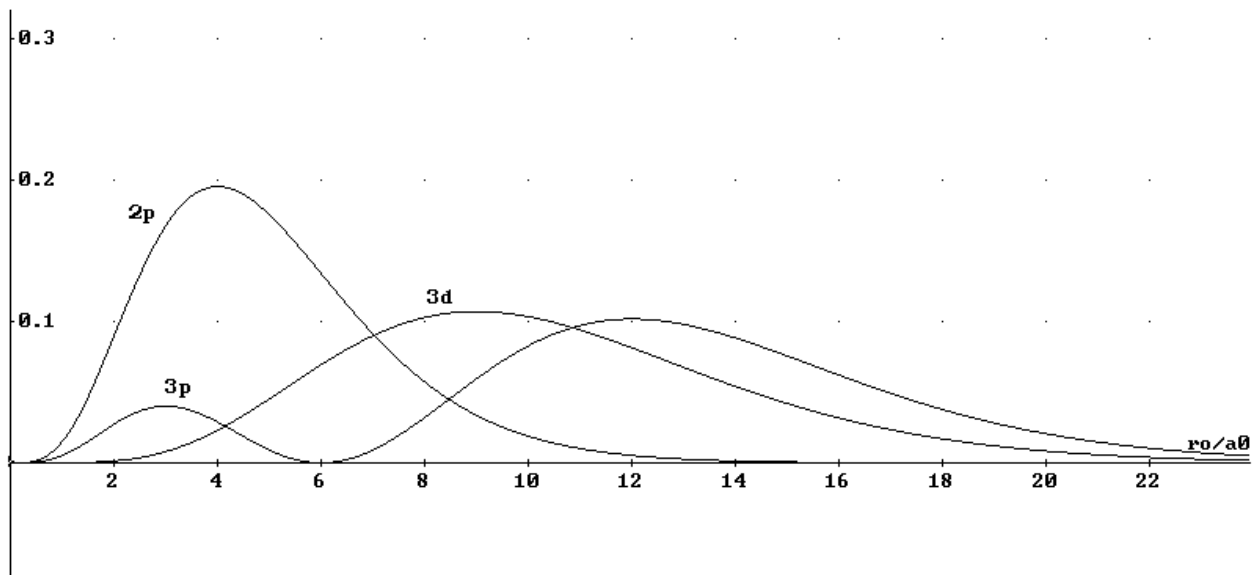
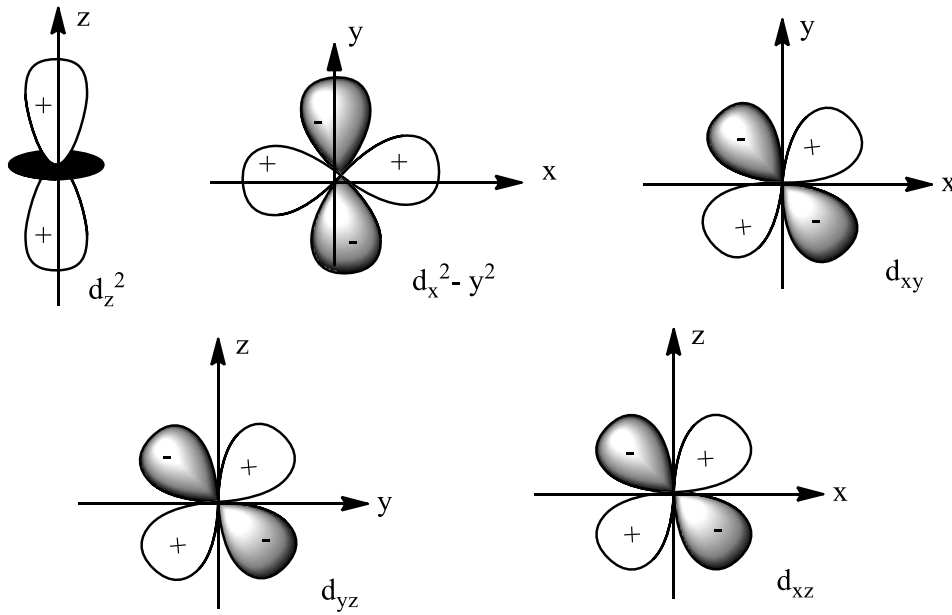


Orbitales p: Hay tres orbitales con $l = 1$ ($m_l = 0, \pm 1$) en las capas $n \geq 2$ que se llaman orbitales p. Si $n = 2$ y $l = 1$ hay tres orbitales $2p$, que son de la misma forma, cada uno tiene dos elipsoides distorsionados y separados (no esferas tangentes) y los tres son perpendiculares entre sí.



Se nombran con el subíndice del eje p_z , p_x y p_y . Un electrón en un orbital p_x es más probable que se encuentre próximo al eje x. Un orbital p tiene un plano nodal que pasa a través del núcleo, un plano sobre el que nunca se encontrará el electrón.

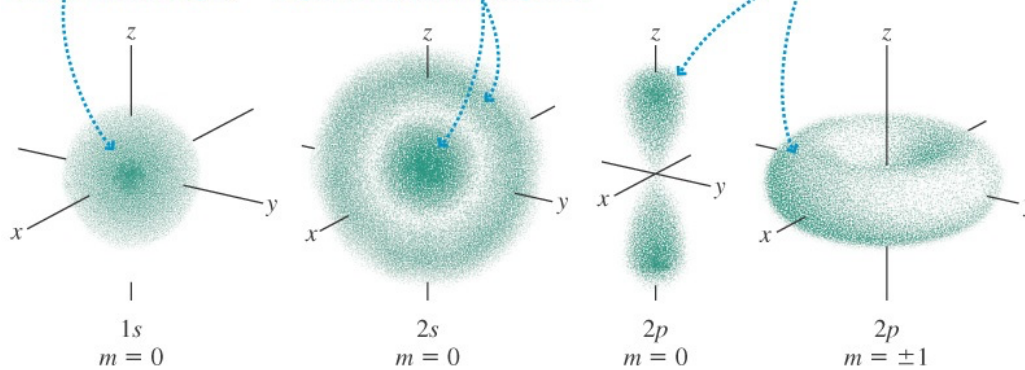
Orbitales d: Hay cinco orbitales con $l = 2$ ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2$) en las capas $n \geq 3$. El orbital $3d_z^2$ tiene dos conos nodales. El orbital $3d_{x^2-y^2}$ tiene dos planos nodales. Los otros tres orbitales ($3d_{xy}$, $3d_{xz}$, $3d_{yz}$) tienen la misma forma que el anterior $3d_{x^2-y^2}$ pero sus orientaciones diferentes. El $3d_{xy}$ tiene sus lóbulos dirigidos entre los ejes x,y y se obtiene rotando un ángulo de 45° el orbital $3d_{x^2-y^2}$.



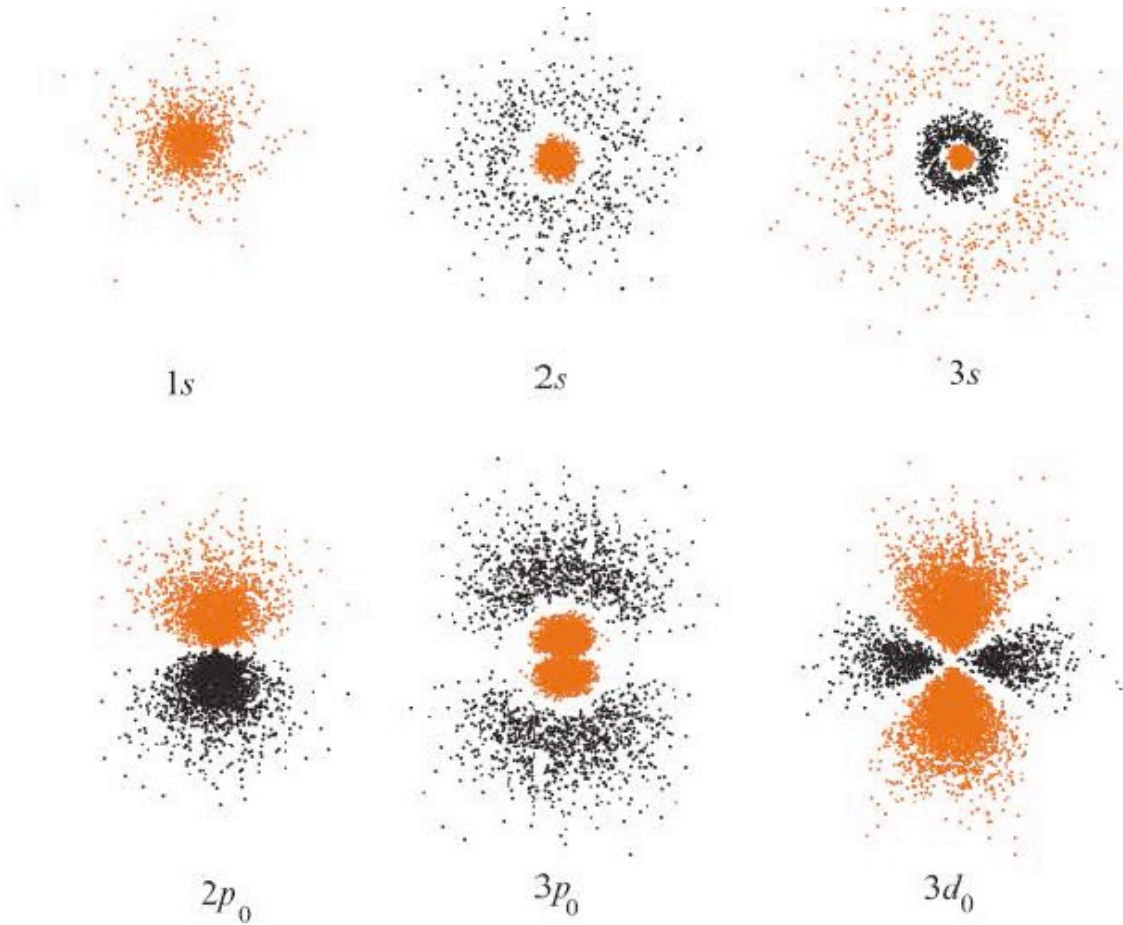
An electron in the 1s state is most likely to be found at the origin.

An electron in a 2s state is likely to be found either at the origin or in a surrounding shell.

The p electrons are more likely to be found in some directions than in others.



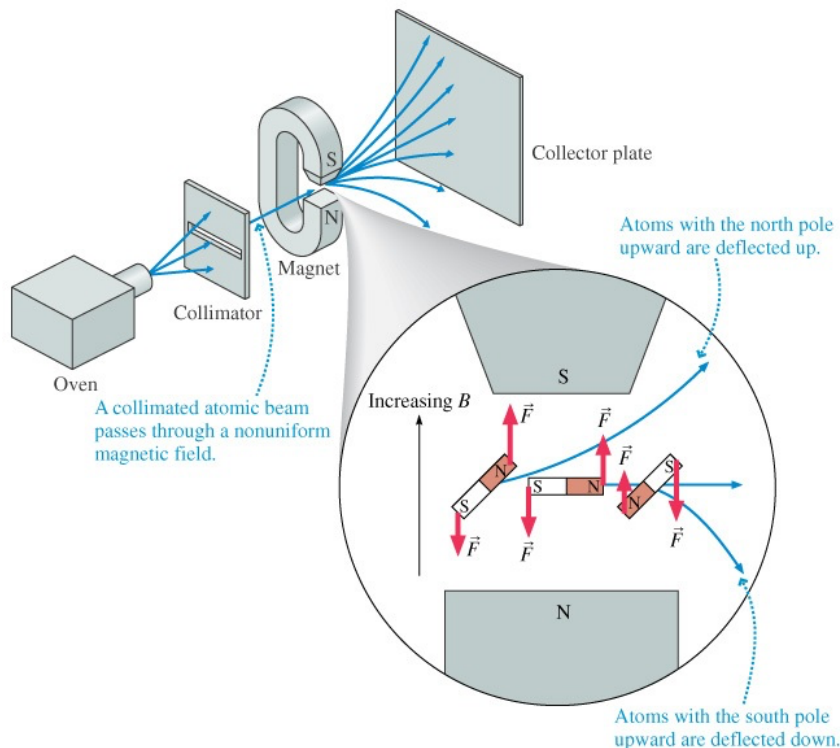
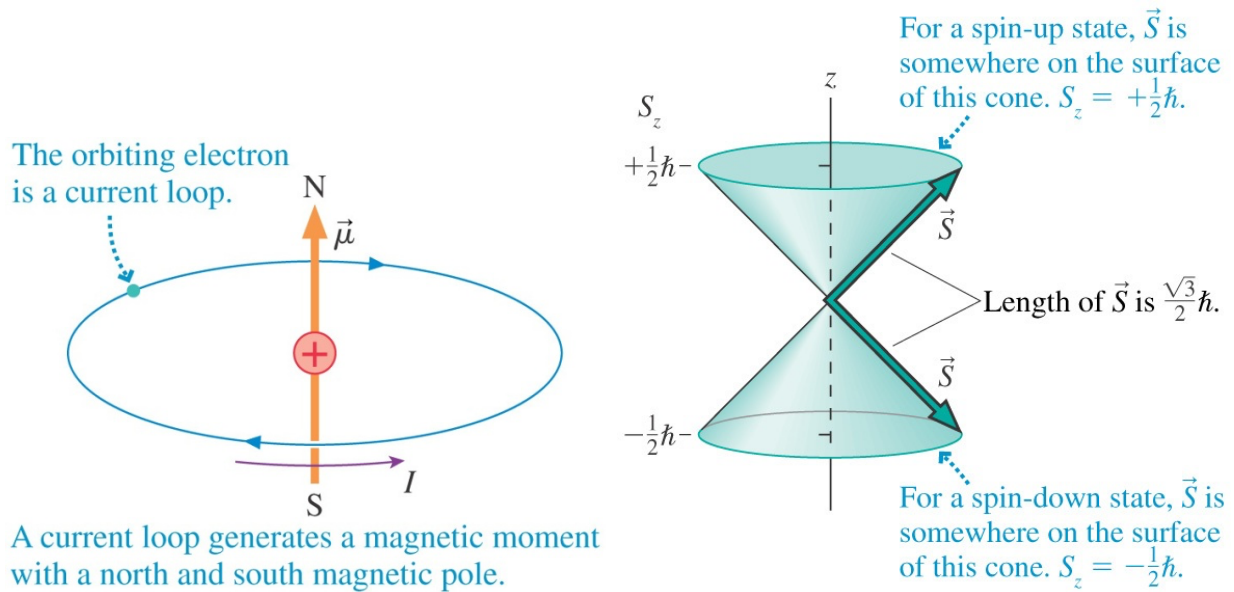
Dibujo de la densidad de probabilidad planar de algunos orbitales del átomo de hidrógeno. La densidad de los puntos es proporcional a la probabilidad de encontrar al electrón en esa región.



2.9 Espín del electrón

Un análisis detallado del espectro del átomo de hidrógeno revela que las líneas espectrales no tienen exactamente las frecuencias predichas por los cálculos de la ecuación de Schrödinger. Otro hecho importante, que no se explicaba mediante la ecuación de **Schrödinger**, es el doblete de la línea amarilla en el espectro atómico del sodio. La ecuación predice una línea alrededor de 590 nm mientras que las observadas son dos líneas a 589,59 nm y 588,99 nm. Estas observaciones las explicaron en 1925 los físicos Uhlenbeck y Goudmist que propusieron que el electrón se comporta como una pequeña esfera rotando sobre su eje. Esta propiedad se llama **espín** del electrón. Las componentes del momento angular de espín sobre el eje z son $\frac{1}{2}\hbar$. Estas cantidades sugieren introducir un cuarto número cuántico para el electrón. Este cuarto número cuántico representa la componente z del momento angular de espín del electrón y se llama **número cuántico de espín m_s**, que puede tomar dos valores $\pm\frac{1}{2}$ en unidades atómicas.

En los primeros años de la década 1930 el físico inglés Paul Dirac desarrolló una extensión relativista de la mecánica cuántica y uno de sus grandes éxitos es que el espín surgió de una forma perfectamente natural.



2.10 Breve introducción a los átomos poli-electrónicos

El átomo de hidrógeno está constituido por dos partículas, un protón y un electrón, la ecuación de Schrödinger se resuelve completamente y la función de onda electrónica se calcula exactamente. Sin embargo, para los átomos poli-electrónicos, constituidos por tres o más partículas, la ecuación de Schrödinger no se puede resolver y la función de onda electrónica no se puede calcular exactamente. Actualmente, se utilizan *métodos aproximados* que dan muy buenos resultados al contrastarlos con los *resultados experimentales*, el mejor es el método Hartree-Fock.

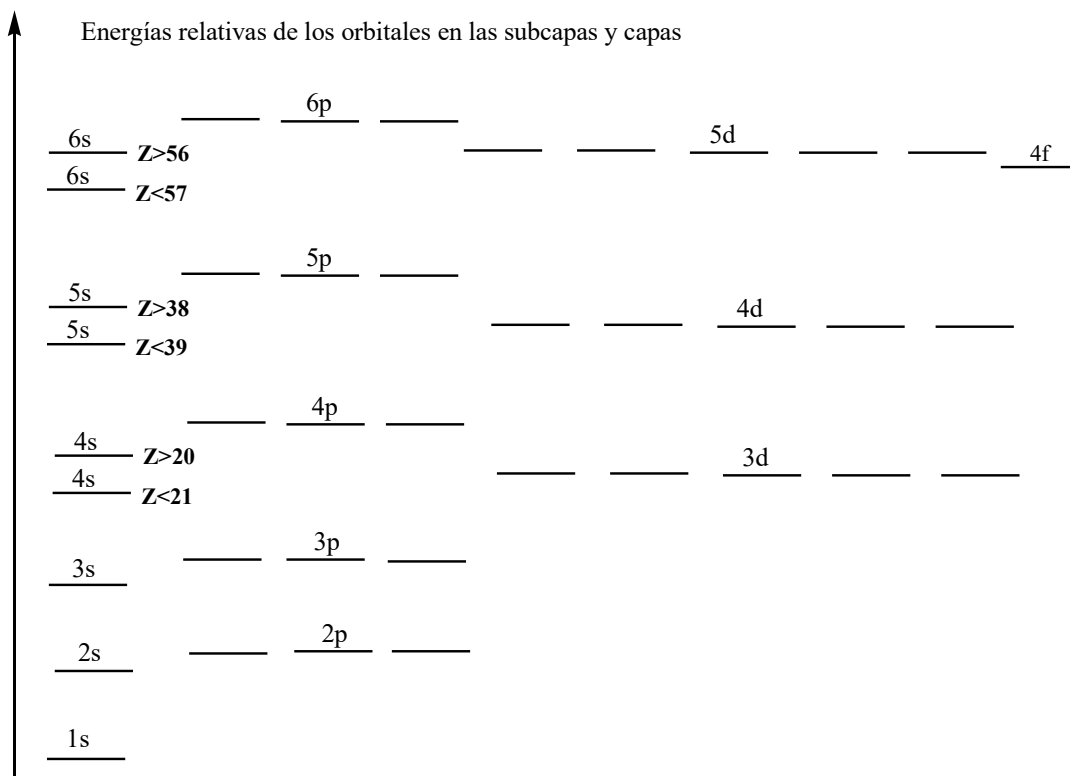
Una representación de los átomos polielectrónicos es considerar que **los electrones ocupan orbitales** como en el átomo de hidrógeno pero **con diferentes energías**. Los **núcleos** de los átomos poli-electrónicos tiene una carga mayor y *atraen a los electrones con más fuerza* y hace que **disminuya la**

energía. Sin embargo, existen *repulsiones entre los electrones* que contribuye a **aumentar su energía.**

Carga nuclear efectiva: En el átomo de hidrógeno la energía de los orbitales depende del número cuántico principal y los orbitales de la misma capa (s,p,d) tienen la misma energía.

En los átomos poli-electrónicos *las repulsiones entre los electrones tienen como consecuencia la variación de las energías de los orbitales de las subcapas de una capa*, así **para una misma capa la energía de la subcapa p es mayor que la energía de la subcapa s**. Los orbitales de una subcapa tienen las mismas energías. La diferencia en energía de las subcapas de una misma capa **se debe a las formas de los orbitales**. Hay dos factores a tener en cuenta:

1. Un electrón s puede encontrarse más próximo al núcleo que un electrón p. Un electrón s **penetra** más hacia el núcleo que un electrón p.
2. Cada electrón en el átomo es repelido por los otros electrones y se encuentra menos unido al núcleo que en el caso de que no existiesen los otros electrones. Decimos que en el átomo cada electrón es **apantallado** (protegido), de la atracción total del núcleo, por los otros electrones y que la **carga nuclear efectiva** es menor que la carga real.



Las **energías de los orbitales** obtenidas para los átomos neutros, en sus **estados fundamentales** o de menor energía nos indica que:

1. La energía de un orbital cambia cuando cambia el número atómico Z. Así, **cuando aumenta Z la energía orbital disminuye** debido al aumento de atracción entre el núcleo y los electrones. Esta disminución de energía es más rápida para los orbitales internos, los cuales son menos apantallados o protegidos desde el núcleo.

2. Para $Z > 1$, los orbitales con el mismo valor de n pero diferente valor de l tienen diferente energías. Así, para $n = 3$ las energías de los orbitales son $E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$. La separación de estos niveles de energía, que están degenerados en el átomo de hidrógeno, se debe a las repulsiones interelectrónicas.

3. Las **energías relativas** de ciertos orbitales **cambian** cuando lo hace Z . Así en el $H(Z=1)$ los orbitales $E_{3d} < E_{4s}$. Sin embargo, desde $Z = 7(N)$ hasta $Z = 20(Ca)$ $E_{3d} > E_{4s}$. Para valores mayores de Z , desde $Z = 21(Sc)$ $E_{3d} < E_{4s}$. Esto, se explica porque el orbital $4s$ es más penetrante en el núcleo, que los orbitales $4p$ y $3d$, lo que hace que disminuya su energía para algunos valores de Z . En $Z = 21(Sc)$ se produce una repentina bajada en la energía del orbital $3d$ debido a que los electrones $3d$ no se apantallan muy bien.

4. Aunque a partir del Sc $E_{3d} < E_{4s}$ podríamos preguntarnos por qué el ${}_{23}V$ tiene la configuración externa $\dots 3d^3 4s^2$ en lugar de la $\dots 3d^5$. La explicación es la siguiente: aunque es cierto que la configuración $3d^5$ tiene una suma menor de energía orbital que la configuración $3d^3 4s^2$, la energía de un átomo no se obtiene sólo por la suma de las energías orbitales de los electrones. La energía total de un átomo se obtiene sumando las energías de los orbitales y, a esta suma, le restamos la suma de las energías promedio de repulsión interelectrónicas. Esto es lo que hace que una configuración sea más o menos estable.

La separación energética entre los orbitales ns y np es mucho menor que entre los orbitales np y nd , dando el familiar octeto estable $ns^2 np^6$. El concepto de orbital es la base de muchos análisis cualitativos de la química de los átomos de las moléculas. Sin embargo, el uso de los orbitales es una aproximación.

2.11 Principio de exclusión de Pauli. Regla de Hund. Principio de construcción

La energía menor de un átomo no se obtiene colocando todos los electrones en el orbital de menor energía $1s$. Esta configuración está prohibida por un principio fundamental de la naturaleza descubierto por Pauli en 1925: “*No puede haber más de dos electrones en un orbital y si hay dos electrones en un orbital sus espines deben ser distintos*”. Los espines de los electrones en un mismo orbital deben estar apareados $\uparrow\uparrow$. Como un orbital atómico se designa con tres números cuánticos (n, l y m_l) y los dos estados de espín se especifican con el tercer número cuántico m_s , otra forma de expresar el principio para **átomos** es: “*No pueden tener los mismos números cuánticos dos electrones en un átomo*”.

El principio de Pauli es una consecuencia del principio de incertidumbre, ya que para que dos electrones puedan estar en un mismo orbital y se puedan distinguir han de tener número cuántico de espín distinto. Es decir, dos electrones con el mismo espín tienen una probabilidad cero de encontrarse en el mismo orbital.

Regla de Hund: Es una regla empírica formulada por Hund para determinar el estado electrónico más estable o de menor energía: “*El estado electrónico con mayor valor de momento angular electrónico total S es el más estable (menor energía) y la estabilidad decrece cuando decrece S* ”.

El momento angular electrónico de espín total (S) es la suma de los momentos angular de espín de cada electrón. Es una regla empírica y no un principio ya que hay casos en los que no se cumple, como en el Ti y sobre todo en las configuraciones excitadas. Por ejemplo, el carbono tiene la configuración electrónica $C = 1s^2 2s^2 2p^2$ que puede tener tres términos:

$$\left\{ 1s^2 2s^2 p_x^2 \quad (S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0) \right\} \quad \left\{ 1s^2 2s^2 p_x^1 p_y^1 \quad (S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1) \right\} \quad \left\{ 1s^2 2s^2 p_x^1 p_y^1 \quad (S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0) \right\}$$

Explicación: los electrones con el mismo espín tienden a permanecer lo más alejados posibles por lo que minimizan la repulsión electrónica entre ellos, por otra parte, al estar más alejados hay menos

apantallamiento del núcleo y hace que los electrones estén más próximos al núcleo haciendo que la atracción electrón y núcleo sea mayor.

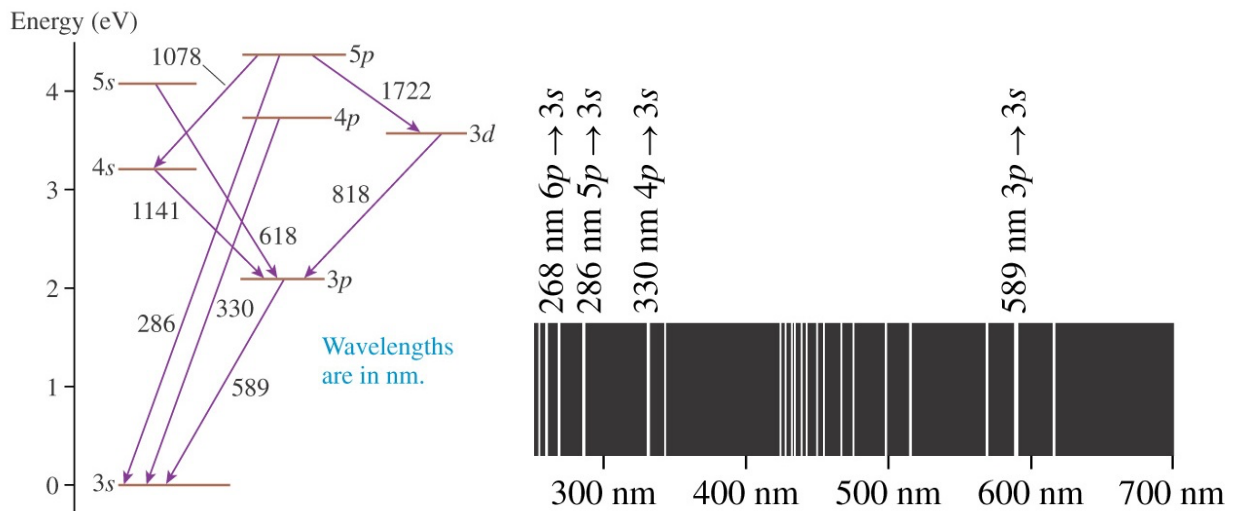
Principio de construcción: “Es el procedimiento para llegar a la configuración electrónica en el estado fundamental o de menor energía total de los átomos”.

Así, para obtener la configuración electrónica de un elemento químico, con número atómico Z , procedemos de la siguiente forma: 1º) añadimos los Z electrones, uno después de otro, a los orbitales en el orden de energía para ese número atómico, considerando que en cada orbital no puede haber más de dos electrones; 2º) si hay más de un orbital degenerado (con la misma energía) en una subcapa (orbitales $2p$), añadimos los electrones con espines paralelos en los diferentes orbitales de la subcapa.

2.12 Configuraciones electrónicas de los elementos químicos en el estado fundamental:

Períodos de la tabla periódica						
1º	2º	3º	4º	5º	6º	7º
1H: $1s^1$ 2He: $1s^2$	3Li: $1s^2 2s^1$ 4Be: $1s^2 2s^2$ 5B: $1s^2 2s^2 2p^1$ 6C: $1s^2 2s^2 2p^2$ 7N: $1s^2 2s^2 2p^3$ 8O: $1s^2 2s^2 2p^4$ 9F: $1s^2 2s^2 2p^5$ 10Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$	11Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 12Mg: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ 13Al: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ 14Si: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ 15P: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ 16S: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ 17Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ 18Ar: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	19K: [Ar] $4s^1$ 20Ca: [Ar] $4s^2$ 21Sc: [Ar] $3d^1 4s^2$ 22Ti: [Ar] $3d^2 4s^2$ 23V: [Ar] $3d^3 4s^2$ 24Cr: [Ar] $3d^5 4s^1$ 25Mn: [Ar] $3d^5 4s^2$ 26Fe: [Ar] $3d^6 4s^2$ 27Co: [Ar] $3d^7 4s^2$ 28Ni: [Ar] $3d^8 4s^2$ 29Cu: [Ar] $3d^{10} 4s^1$ 30Zn: [Ar] $3d^{10} 4s^2$ 31Ga: [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^1$ 32Ge: [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^2$ 33As: [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^3$ 34Se: [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^4$ 35Br: [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^5$ 36Kr: [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^6$	37Rb: [Kr] $5s^1$ 38Sr: [Kr] $5s^2$ 39Y: [Kr] $4d^1 5s^2$ 40Zr: [Kr] $4d^2 5s^2$ 41Nb: [Kr] $4d^4 5s^1$ 42Mo: [Kr] $4d^5 5s^1$ 43Tc: [Kr] $4d^5 5s^2$ 44Ru: [Kr] $4d^7 5s^1$ 45Rh: [Kr] $4d^8 5s^1$ 46Pd: [Kr] $4d^{10}$ 47Ag: [Kr] $4d^{10} 5s^1$ 48Cd: [Kr] $4d^{10} 5s^2$ 49In: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^1$ 50Sn: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^2$ 51Sb: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^3$ 52Te: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^4$ 53I: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^5$ 54Xe: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^6$	55Cs: [Xe] $6s^1$ 56Ba: [Xe] $6s^2$ 57La: [Xe] $5d^1 6s^2$ 58Ce: [Xe] $4f^1 5d^1 6s^2$ 59Pr: [Xe] $4f^3 6s^2$ 60Nd: [Xe] $4f^4 6s^2$ 61Pm: [Xe] $4f^6 6s^2$ 62Sm: [Xe] $4f^6 6s^2$ 63Eu: [Xe] $4f^7 6s^2$ 64Gd: [Xe] $4f^7 5d^1 6s^2$ 65Tb: [Xe] $4f^9 6s^2$ 66Dy: [Xe] $4f^{10} 6s^2$ 67Ho: [Xe] $4f^{11} 6s^2$ 68Er: [Xe] $4f^{12} 6s^2$ 69Tm: [Xe] $4f^{13} 6s^2$ 70Yb: [Xe] $4f^{14} 6s^2$ 71Lu: [Xe] $4f^{14} 5d^1 6s^2$ 72Hf: [Xe] $4f^{14} 5d^2 6s^2$ 73Ta: [Xe] $4f^{14} 5d^3 6s^2$ 74W: [Xe] $4f^{14} 5d^4 6s^2$ 75Re: [Xe] $4f^{14} 5d^5 6s^2$ 76Os: [Xe] $4f^{14} 5d^6 6s^2$ 77Ir: [Xe] $4f^{14} 5d^7 6s^2$ 78Pt: [Xe] $4f^{14} 5d^9 6s^1$ 79Au: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^1$ 80Hg: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2$ 81Tl: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$ 82Pb: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2$ 83Bi: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$ 84Po: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^4$ 85At: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$ 86Rn: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$	87Fr: [Rn] $7s^1$ 88Ra: [Rn] $7s^2$ 89Ac: [Rn] $6d^1 7s^2$ 90Th: [Rn] $6d^2 7s^2$ 91Pa: [Rn] $5f^2 6d^1 7s^2$ 92U: [Rn] $5f^3 6d^1 7s^2$ 93Np: [Rn] $5f^4 6d^1 7s^2$ 94Pu: [Rn] $5f^6 7s^2$ 95Am: [Rn] $5f^7 7s^2$ 96Cm: [Rn] $5f^7 6d^1 7s^2$ 97Bk: [Rn] $5f^7 7s^2$ 98Cf: [Rn] $5f^{10} 7s^2$ 99Es: [Rn] $5f^{11} 7s^2$ 100Fm: [Rn] $5f^{12} 7s^2$ 101Md: [Rn] $5f^{13} 7s^2$ 102No: [Rn] $5f^{14} 7s^2$ 103Lr: [Rn] $5f^{14} 6d^1 7s^2$

Espectro de emisión del sodio



2.13 Sistema Periódico: Propiedades periódicas

La tabla periódica fue construida por Lothar Meyer y por Dmitri I. Mendeleev en febrero de 1869. Mendeleev ordenó los elementos químicos conocidos, en aquella época, en grupos y períodos, ordenados por aumento de sus pesos atómicos. Por otra parte, como el peso atómico casi siempre se incrementa con el número atómico y, por tanto, con el número de electrones en el átomo, Mendeleev era inconsciente de que estaba ordenando los átomos en orden del número de electrones.

La periodicidad de los elementos refleja la periodicidad en sus configuraciones electrónicas. Mendeleev prácticamente lo hizo sobre el modelo de las configuraciones electrónicas sin conocer nada acerca de la estructura atómica.

La tabla periódica está dividida en períodos, grupos y bloques. Los **períodos** son las filas y los **grupos** las columnas. Los **bloques** son nombrados por su última subcapa que está ocupada, de acuerdo al principio de construcción. Así, el Na y el Ca pertenecen al bloque s. El N y el Ne pertenecen al bloque p. El Fe al bloque d de metales de transición.

El número de período es el mismo que el del número cuántico principal de la capa de valencia de sus átomos. Los grupos, que son las columnas, de la tabla la IUPAC recomienda que se numeren de izquierda a derecha de la tabla periódica desde el 1 hasta el 18. Siendo los grupos principales el 1, 2 y del 13 al 18 y los elementos de transición los grupos desde el 3 al 12.

Las **propiedades físicas** de los elementos presentan una alta periodicidad. Esta periodicidad es muy clara cuando examinamos los tamaños atómicos y las energías necesarias para arrancar electrones a los átomos.

Radio atómico: Como las nubes electrónicas de los átomos no tienen bordes definidos, es necesario definir lo que se entiende por su radio atómico. *El radio atómico de un elemento es la mitad de la distancia entre los centros de átomos vecinos.* Si el elemento es un metal entonces la distancia es aquella entre los núcleos de átomos vecinos en una muestra sólida. Si el elemento es un no metal, entonces la distancia es aquella entre el núcleo de dos átomos de aquel elemento unido por un simple enlace químico (Cl-Cl). La distancia entre núcleo vecinos en el cobre sólido es 270 pm, su radio atómico es 135 pm. La distancia entre los núcleos en la molécula Cl₂ es 198 pm, luego el radio atómico del Cl es 99 pm.

El radio atómico decrece a lo largo de un período (fila) y se incrementa en los grupos (columnas). Por ejemplo, desde el Li hasta Ne disminuye el radio atómico y aumenta desde el Li hasta Cs.

En los grupos aumenta el radio porque lo hace el número de electrones que se encuentran en distintos orbitales desde $n = 2$ hasta $n = 7$. En los períodos el radio atómico disminuye porque los átomos de un período tienen los electrones más externos en el mismo nivel de número cuántico n y la carga nuclear es cada vez mayor con lo que se produce una contracción volumétrica.

Radios iónicos: El radio iónico de un elemento es su contribución a la distancia entre iones vecinos en un compuesto iónico sólido. La distancia entre el núcleo del catión y sus aniones vecinos es la suma de los dos radios iónicos. Lo que se hace en la práctica es tomar el del ion oxígeno O^{2-} como 140 pm y calcular el de los demás.

Todos los cationes tienen un radio menor que el de sus átomos, ya que se forma cuando un átomo pierde uno o más electrones. El radio atómico del Li es 145 pm y el radio iónico del catión Li^+ es de sólo 60 pm. De igual forma que el radio atómico, y por las mismas razones, el radio catiónico decrece al cruzar un período (debido al incremento de la carga nuclear efectiva) y se incrementa al descender en los grupos (están siendo ocupadas las capas con mayor número cuántico principal).

Los aniones son mayores que sus átomos. La razón es el incremento en el número de electrones en la capa de valencia del anión y los efectos repulsivos que ejercen sobre los otros. La variación en el radio de los aniones es igual que para los átomos y los cationes, los menores en la parte superior derecha de la tabla periódica, próximos al F.

Energía de ionización: La facilidad con la que un electrón se puede arrancar de un átomo en fase gas se mide por su energía de ionización: “La **energía de ionización E.I.** de un elemento es la energía mínima **requerida** para arrancar un electrón desde el estado fundamental de un átomo gaseoso, siendo cero las energías cinéticas del electrón arrancado y del ion que queda”.



La magnitud energía de ionización depende de la energía que tenga el electrón en el orbital en que se encuentre, mientras mayor sea la energía del electrón, en valores absolutos, en un orbital determinado mayor es la energía de ionización del átomo.

Los factores de los que depende son fundamentalmente:

1. La **carga nuclear efectiva** que tenga el átomo, es decir, la carga real del núcleo menos una corrección debida al efecto de pantalla de los electrones internos. De tal forma que al *aumentar la carga nuclear efectiva aumenta la energía del orbital y por tanto la energía de ionización*.

2. El **tamaño del orbital** en el que se encuentre el electrón que va a ser arrancado (1s, 2s, 3s ó 2p, 3p). Si el electrón que va a ser arrancado está en un orbital mayor, es decir, de *mayor número cuántico principal n*, la energía del electrón en ese orbital disminuye y la energía de ionización es menor. Esto se debe a que la probabilidad de encontrar el electrón cerca del núcleo en los orbitales de mayor n es menor y la energía de ionización disminuye. Éste efecto se observa en átomos con la misma configuración electrónica en conjunto y el mismo número de electrones en el nivel más alto.

3. El **tipo de orbital** donde se encuentra el electrón que va a ser arrancado, es decir si es un electrón perteneciente a un orbital s, p, d ó f, ya que el poder de penetración en las proximidades del núcleo decrece en éste orden.

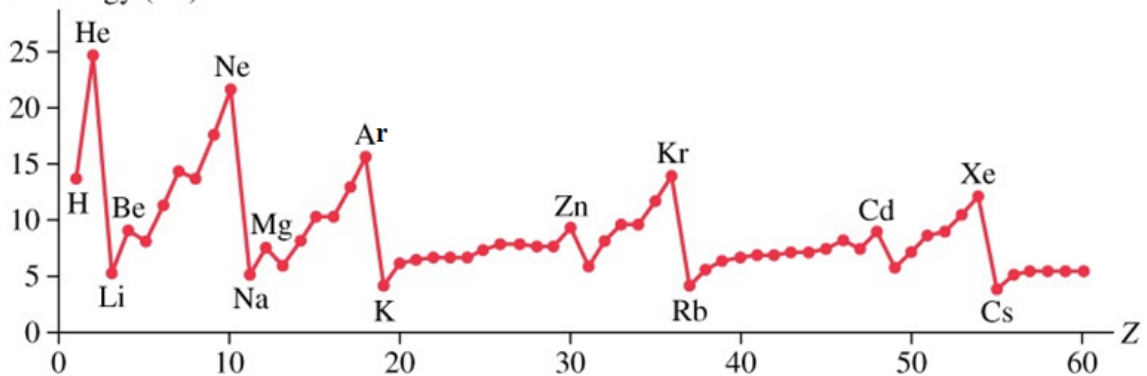
4. La **configuración electrónica**, ya que los elementos que tienen una configuración electrónica con la capa de valencia completa (gases nobles) presentan una energía de ionización muy alta. Los elementos que tienen la configuración electrónica con una subcapa semillena también presentan una energía de ionización relativamente alta por ser más estables (N).

E.I.	H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg
kJ/mol	1310	2370	519	900	790	1090	1400	1310	1680	2080	494	736

Al analizar los datos experimentales de las energías de ionización de los elementos químicos se comprueba que es una propiedad periódica, ya que ésta varía periódicamente con el número atómico. Así, con unas pocas excepciones, la energía de ionización se incrementa desde la izquierda a la derecha, cruzando un período de la tabla periódica, y vuelve a disminuir su valor cuando se parte en el siguiente período.

Los valores de energía de ionización menores se encuentran en la parte inferior izquierda de la tabla periódica (Cs) y los superiores en la parte superior derecha (He). Es decir, que se necesita menos energía para arrancar un electrón a los átomos próximos al Cs y se necesita más energía para arrancar un electrón a los átomos próximos al He. Estos resultados son consistentes con el hecho de que el Cs es altamente reactivo perdiendo su electrón.

Ionization energy (eV)



Afinidad electrónica: La afinidad electrónica de un elemento es una medida del cambio de energía que ocurre cuando se añade un electrón a un átomo o ion: “La **afinidad electrónica A.E.** es la energía **desprendida** cuando se añade un electrón a un átomo o ion del elemento”



- Una afinidad electrónica alta significa que se desprende mucha energía cuando un electrón se añade a un átomo: $A.E. > 0$ ($\Delta_i U^{\circ} < 0$).

- Una afinidad electrónica negativa significa que debemos suministrar energía para que el átomo acepte el electrón: $A.E. < 0$ ($\Delta_i U^{\circ} > 0$).

Los átomos que tienen mayor afinidad electrónica son los que adquieren una configuración electrónica más estable. Por ejemplo, los halógenos tienen valores relativamente grandes de afinidad electrónica puesto que los iones haluro formados tienen una configuración muy estable. Así el Cl si gana un electrón adquiere la configuración en la capa de valencia de $3s^2 3p^6$. Los átomos con subniveles completos y los de subniveles semicompletos tienen valores bajos de afinidad electrónica. Por ejemplo, el Be, Mg, Ca, Zn, Cd y Hg (ns^2), así como el N, P, As ($ns^2 np^3$), lo que prueba su mayor estabilidad.

ΔH_{gana}	H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg
kJ/mol	-73	+48	-60	+48	-27	-122	+7	-141	-328	+116	-53	+39

Electronegatividad: La electronegatividad de un átomo es un concepto de mucha importancia para el conocimiento cualitativo del enlace químico. *La electronegatividad* (χ) *de un elemento es una medida de la fuerza de sus átomos de atraer electrones cuando son parte de un compuesto.* Un elemento con electronegatividad alta tiene una capacidad muy alta de atraer los electrones en un enlace. Un elemento con una electronegatividad baja es probable que pierda un electrón hacia un átomo más electronegativo en un compuesto. Aunque el concepto es cualitativo se obtiene una escala cuantitativa de electronegatividades.

La escala más popular es la propuesta por **Mulliken**: $\chi = \frac{1}{2}(EI + AE)$. Toma como argumento que la tendencia de un átomo a adquirir electrones es un balance de la buena disposición con la que gana electrones (medida por la A.E.) y la dificultad con la que pierde electrones (medida por la E.I.).

Escala de Pauling de electronegatividades: Pauling estableció una escala de electronegatividades relativas al átomo de F, que es el elemento más electronegativo. Se basó en datos experimentales ya que la energía media de enlace de las moléculas heterodiatómicas (NO) es mayor que la media aritmética de las energías de enlace de las moléculas homodiatómicas correspondientes (N₂; O₂). Es decir, la energía media de enlace en la molécula AB es mayor que la media de las energías de enlace AA y BB: $E_{AB} > \frac{1}{2}[E_{AA} + E_{BB}]$. La diferencia aumentaba dependiendo de los átomos, por lo que dependía de una característica de los átomos llamada **electronegatividad**:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_2 \rightarrow 2 A \quad E_{AA} \\ B_2 \rightarrow 2 B \quad E_{BB} \\ AB \rightarrow A + B \quad E_{AB} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} E_{AB} > \frac{1}{2}(E_{AA} + E_{BB}) \\ E_{AB} = \frac{1}{2}(E_{AA} + E_{BB}) + a(\chi_A - \chi_B)^2 \end{array} \right.$$

Siendo el parámetro **a** una constante que depende de las unidades. Si la energía E se mide en eV/molécula el parámetro a es igual a 1 eV/molécula = 96,5 kJ/mol. Pauling asignó al F una electronegatividad de valor 4 (adimensional) y a partir de los datos experimentales se obtuvieron las electronegatividades de todos los demás elementos químicos.

χ	H	Li	Be	B	C	N	O	F	Na	Mg	Al	Si
	2,2	1,0	1,6	2,0	2,6	3,0	3,4	4,0	0,93	1,3	1,6	1,9

El grado de **polaridad** o desplazamiento de los electrones de un enlace químico entre dos átomos A-B está relacionado con la diferencia de electronegatividad. Así, si el átomo B es más electronegativo que el átomo A se dice que el enlace está polarizado.

2,14 Cuestiones y problemas de «estructura del átomo»

- 1) Calcula: a) las energías de los estados del átomo de Hidrógeno con $n = 2$ y $n = 3$; b) la longitud de onda de un fotón emitido por el átomo cuando un electrón realiza una transición entre estos dos estados. Datos: $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js; $c = 3 \cdot 10^8$ ms $^{-1}$; $R_H = 109.677,581$ cm $^{-1}$. [a) $E_2 = -3,4$ eV; $E_3 = -1,51$ eV; b) 656 nm (rojo)]
- 2) Una serie de líneas en el espectro del átomo de hidrógeno se encuentra en las longitudes de onda 657 nm, 486,7 nm, 434,5 nm y 410,6 nm. a) ¿Cuál es la longitud de onda de la línea siguiente de la serie?. b) ¿Cuál es la energía requerida para ionizar el átomo de hidrógeno cuando está en el estado inferior para esta transición?. Datos: $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js; $c = 3 \cdot 10^8$ ms $^{-1}$; $R_H = 109.677,581$ cm $^{-1}$. [a) 397,5 nm para $n_2=7$; b) 3,40 eV].
- 3) Usa la fórmula de Rydberg para el átomo de hidrógeno y calcula la longitud de onda correspondiente a la transición electrónica desde $n = 6$ hasta $n = 2$. Posteriormente determina la energía correspondiente a dicha longitud de onda. Datos: $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js; $c = 3 \cdot 10^8$ ms $^{-1}$; $R_H = 109.677,581$ cm $^{-1}$. [410,7 nm; 3,03 eV]
- 4) Cuando el H está a temperatura relativamente baja su electrón está en el primer nivel de energía. A esto se le conoce como estado fundamental. a) ¿Cuál es la mayor longitud de onda de la radiación que puede ser absorbida por el hidrógeno en estas condiciones y el valor de la energía correspondiente?; b) calcula la energía de ionización del átomo de hidrógeno. [a) 121,7 nm y 10,2 eV; b) 13,6 eV]
- 5) Calcula la longitud de onda de la línea del espectro emitida por el átomo de hidrógeno cuando el electrón realiza la transición entre los estados $n = 4$ y $n = 2$. [486,7 nm (azul)]
- 6) Un cuerpo, de masa 50 g, y un electrón, de masa $9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, llevan una velocidad de 300 m/s cada uno, con una incertidumbre del 0,01%. ¿Cuál será la exactitud fundamental con que se podrá determinar la posición de cada uno, si la posición y la velocidad se miden simultáneamente? [1,93 mm para el electrón y 3×10^{-32} m para el cuerpo]
- 7) Escribe los valores para el número cuántico magnético de las siguientes subcapas: a) $l = 0$; b) 5s; c) $l = 3$; d) 4f. [a) $m = 0$; b) $m = 0$; c) $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$; d) $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$]
- 8) ¿Cuál de las series de números cuánticos son incorrectos y por qué?: a) $n = 3$; $l = 2$; $m = 0$; $s = +\frac{1}{2}$; b) $n = 2$; $l = 2$; $m = -1$; $s = -\frac{1}{2}$; c) $n = 6$; $l = 2$; $m = -2$; $s = +\frac{1}{2}$. [Es incorrecta la serie b) $n = 2$; $l = 2$; $m = -1$; $s = -\frac{1}{2}$].
- 9) Escribe las configuraciones electrónicas de: Na, Mg, Sc, P, V, Hg, Cu, Cr, Ni $^{2+}$, Pb $^{2+}$, Zn $^{2+}$, N $^{3-}$, Se $^{2-}$ y I $^-$.
- 10) Predice las configuraciones electrónicas de: Si, B, C, In $^+$, In $^{3+}$, Cu $^+$, Cu $^{2+}$, O $^{2-}$; P $^{3-}$.
- 11) Explica cuál de los siguientes pares tiene mayor radio iónico: a) Mg $^{2+}$ y Ca $^{2+}$; b) O $^{2-}$ y F $^-$; c) Mg $^{2+}$ y Al $^{3+}$; d) O $^{2-}$ y S $^{2-}$; e) Cl y Cl $^-$; f) O $^{2-}$ y N $^{3-}$. [Ca $^{2+}$; O $^{2-}$; Mg $^{2+}$; S $^{2-}$; Cl $^-$; N $^{3-}$]
- 12) Explica la razón de la pequeña disminución en la energía de ionización entre el átomo de N, 1400 kJ/mol, y el átomo de O, 1310 kJ/mol.
- 13) Explica por qué hay una disminución en la afinidad electrónica entre los átomos de C (122 kJ/mol) y N (-7 kJ/mol)

- 14) a) Analiza las aportaciones del tercer postulado del modelo atómico de Bohr. b) Analiza el significado físico y sus valores de los cuatro números cuánticos en el modelo mecánico-cuántico.
- 15) Especifica los electrones desapareados, si los tuviera, en la capa de valencia de: Be ; N ; F ; Mg^{2+} ; S ; Sc^+ ; Cu^+ ; Ar ; Ag^+ ; I. [0, 3, 1, 0, 2, 2, 0, 0, 0]
- 16) Tomando como ejemplo los elementos del 2º período, analiza cómo varían el radio atómico, la energía de ionización, la afinidad electrónica y la electronegatividad.
- 17) La configuración electrónica general para los elementos del grupo 13 es $ns^2 np^1$. Escribe la configuración electrónica general para los elementos de los grupos 2 y 18. [ns^2 ; $ns^2 np^6$]
- 18) Escribe las configuraciones electrónicas fundamentales, a partir del gas noble anterior, de los siguientes átomos: Zn^{2+} , Se^{2-} , I, Y, P. [$Ar3d^{10}$, $Ar3d^{10}4s^24p^6$, $Kr4d^{10}5s^25p^6$, $Kr4d^15s^2$, $Ne3s^23p^3$]
- 19) Analiza el modelo mecánico-cuántico en los átomos polieletrónicos: números cuánticos, tipos de orbitales y representación y sus niveles de energía.
- 20) Especifica los electrones desapareados, si los tuviera, de: K; Ti; Br; Ca^{2+} ; Se; K^{1+} ; Zn^{2+} ; Ne; Ba^{2+} ; Br^{-1} . [1, 2, 1, 0, 2, 0, 0, 0, 0]
- 21) Analiza los factores de los que depende el radio atómico, la energía de ionización, la afinidad electrónica y la electronegatividad.
- 22) La configuración electrónica de la capa de valencia de un elemento es $3s^2p^5$. a) Justifique si se trata de un metal o un no-metal. b) Indique, razonadamente, un elemento que posea mayor potencial de ionización. c) Indique, razonadamente, un elemento que posea menor potencial de ionización.
- 23) Escriba la configuración electrónica de los iones magnesio Mg^{2+} ($Z = 12$) y sulfuro S^{2-} ($Z = 16$). Razone cuál de los dos iones tendrá mayor radio. Justifique cuál de los dos elementos, Mg ó S, tendrá mayor energía de ionización.

Preguntas de estructura atómica

- 1.- a) Escriba las configuraciones electrónicas del átomo e iones siguientes: Al ($Z=13$), Na^+ ($Z=11$), O^{2-} ($Z=8$). b) ¿Cuáles son isoelectrónicos? c) ¿Cuál o cuáles tienen electrones desapareados?
- 2.- Los elementos X, Y y Z tienen números atómicos 13, 20 y 35, respectivamente. a) Escriba la configuración electrónica de cada uno de ellos. b) ¿Serían estables los iones X^{2+} , Y^{2+} y Z^{2-} ? Justifique las respuestas.
- 3.- Dadas las siguientes configuraciones electrónicas pertenecientes a elementos neutros: A ($1s^2 2s^2 2p^2$); B ($1s^2 2s^2 2p^5$); C ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$); D ($1s^2 2s^2 2p^4$). Indique razonadamente: a) El grupo y período 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.
- 4.- Los átomos neutros X, Y, Z, tienen las siguientes configuraciones: $X=1s^2 2s^2 p^1$; $Y=1s^2 2s^2 p^5$; $Z=1s^2 2s^2 p^6 3s^2$. a) Indique el grupo y el período en el que se encuentran. b) Ordénelos, razonadamente, de menor a mayor electronegatividad. c) ¿Cuál es el de mayor energía de ionización?
- 5.- Dados los siguientes grupos de números cuánticos (n, l, m): (3, 2, 0); (2, 3, 0); (3, 3, 2); (3, 0, 0); (2, -1, 1); (4, 2, 0). Indique: a) Cuáles no son permitidos y por qué. b) Los orbitales atómicos que se corresponden con los grupos cuyos números cuánticos sean posibles.

- 6.- a)** Escriba las configuraciones electrónicas de los iones siguientes: Na^+ ($Z=11$) y F^- ($Z = 9$). **b)** Justifique que el ion Na^+ tiene menor radio que el ion F^- . **c)** Justifique que la energía de ionización del sodio es menor que la del flúor.
- 7.-** 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.
- 8.- a)** Defina afinidad electrónica. **b)** ¿Qué criterio se sigue para ordenar los elementos en la tabla periódica?. **c)** ¿Justifique cómo varía la energía de ionización a lo largo de un periodo?
- 9.- a)** ¿Por qué el volumen atómico aumenta al bajar en un grupo de la tabla periódica?. **b)** ¿Por qué los espectros atómicos son discontinuos?. **c)** Defina el concepto de electronegatividad.
- 10.-** Dados los elementos cuyos números atómicos son 7, 17 y 20. **a)** Escriba sus configuraciones electrónicas. **b)** Razone a qué grupo y periodo de la tabla periódica pertenecen. **c)** ¿Cuál será el ion más estable de cada uno? Justifique la respuesta.
- 11.-** Razone si las siguientes configuraciones electrónicas son posibles en un estado fundamental o en un estado excitado: a) $1s^2 2s^2 2p^4 3s^1$; b) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$; c) $1s^2 2s^2 2p^6 2d^{10} 3s^2$.
- 12.- a)** Indique cuáles de los siguientes grupos de números cuánticos son posibles para un electrón en un átomo: $(4,2,0,+1/2)$; $(3,3,2, -1/2)$; $(2,0,1,+1/2)$; $(3,2,-2,-1/2)$; $(2,0,0,-1/2)$. **b)** De las combinaciones de números cuánticos anteriores que sean correctas, indique el orbital donde se encuentra el electrón. **c)** Enumere los orbitales del apartado anterior en orden creciente de energía.
- 13.-** Cuatro elementos que llamaremos A, B, C y D tienen, respectivamente, los números atómicos: 2, 11, 17 y 25. Indique: **a)** El grupo y el periodo al que pertenecen. **b)** Cuáles son metales. **c)** El elemento que tiene mayor afinidad electrónica.
- 14.-** Dado el elemento de $Z = 19$: **a)** Escriba su configuración electrónica. **b)** Indique a qué grupo y periodo pertenece. **c)** ¿Cuáles son los valores posibles que pueden tomar los números cuánticos de su electrón más externo?
- 15.-** Dadas las siguientes configuraciones electrónicas de la capa de valencia: 1) ns^1 2) $ns^2 np^4$ 3) $ns^2 np^6$. **a)** Indique el grupo al que corresponde cada una de ellas. **b)** Nombre dos elementos de cada uno de los grupos anteriores. **c)** Razone cuáles serán los estados de oxidación más estables de los elementos de esos grupos.
- 16.- a)** Defina el concepto de energía de ionización de un elemento. **b)** Justifique por qué la primera energía de ionización disminuye al descender en un grupo de la tabla periódica. **c)** Dados los elementos F, Ne y Na, ordénelos de mayor a menor energía de ionización.
- 17.- a)** Escriba las configuraciones electrónicas del cloro ($Z = 17$) y del potasio ($Z = 19$). **b)** ¿Cuáles serán los iones más estables a que darán lugar los átomos anteriores? **c)** ¿Cuál de esos iones tendrá menor radio?
- 18.-** Los números atómicos de los elementos A, B y C son, respectivamente, 19, 31 y 36. **a)** Escriba las configuraciones electrónicas de estos elementos. **b)** Indique qué elementos, de los citados, tienen electrones desapareados. **c)** Indique los números cuánticos que caracterizan a esos electrones desapareados.
- 19.-** Dados los siguientes grupos de números cuánticos: A: $(2, 2, 1, 1/2)$; B: $(3, 2, 0, -1/2)$; C: $(4, 2, 2, 0)$; D: $(3, 1, 1, 1/2)$. **a)** Razone qué grupos no son válidos para caracterizar un electrón. **b)** Indique a qué orbitales corresponden los grupos permitidos.

20.- La configuración electrónica de un átomo excitado de un elemento es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 5s^1$. Razone cuáles de las afirmaciones siguientes son correctas y cuáles falsas para ese elemento: **a)** Pertenece al grupo de los alcalinos. **b)** Pertenece al periodo 5 del sistema periódico. **c)** Tiene carácter metálico.

21.- Dadas las especies: Cl^- ($Z = 17$), K^+ ($Z = 19$) y Ar ($Z = 18$): **a)** Escriba la configuración electrónica de cada una de ellas. **b)** Justifique cuál tendrá un radio mayor.

22.- Considere la serie de elementos: Li, Na, K, Rb y Cs. **a)** Defina Energía de ionización. **b)** Indique cómo varía la Energía de Ionización en la serie de los elementos citados. **c)** Explique cuál es el factor determinante de esta variación.

23.- Los números atómicos de los elementos A, B y C son respectivamente 20, 27 y 34. **a)** Escriba la configuración electrónica de cada elemento. **b)** Indique qué elemento es el más electronegativo y cuál el de mayor radio. **c)** Indique razonadamente cuál o cuáles de los elementos son metales y cuál o cuáles no metales.

24.- a) Escriba la configuración electrónica de los elementos A, B y C, cuyos números atómicos son 33, 35 y 37, respectivamente. **b)** Indique el grupo y el periodo al que pertenecen. **c)** Razone qué elemento tendrá mayor carácter metálico.

25.- Indique: **a)** Los subniveles de energía, dados por el número cuántico secundario l , que corresponden al nivel cuántico $n = 4$. **b)** A qué tipo de orbitales corresponden los subniveles anteriores. **c)** Si existe algún subnivel de $n = 5$ con energía menor que algún subnivel de $n = 4$, diga cuál.

26.- Dadas las siguientes configuraciones electrónicas externas: ns^1 ; $ns^2 np^1$; $ns^2 np^6$. **a)** Identifique el grupo del sistema periódico al que corresponde cada una de ellas. **b)** Para el caso de $n = 4$, escriba la configuración electrónica completa del elemento de cada uno de esos grupos y nómbrelo.

27.- Indique: **a)** Los subniveles de energía, dados por el número cuántico secundario l , que corresponden al nivel cuántico $n = 4$. **b)** A qué tipo de orbitales corresponden los subniveles anteriores. **c)** Si existe algún subnivel de $n = 5$ con energía menor que algún subnivel de $n = 4$, diga cuál.

28.- Dadas las siguientes configuraciones electrónicas externas: ns^1 ; $ns^2 np^1$; $ns^2 np^6$. **a)** Identifique el grupo del sistema periódico al que corresponde cada una de ellas. **b)** Para el caso de $n = 4$, escriba la configuración electrónica completa del elemento de cada uno de esos grupos y nómbrelo.

29.- 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.

30.- a) Razone si para un electrón son posibles las siguientes series de números cuánticos: $(0, 0, 0, -1/2)$; $(1, 1, 0, +1/2)$; $(2, 1, -1, +1/2)$; $(3, 2, 1, -1/2)$. **b)** Indique a qué tipo de orbital corresponden los estados anteriores que sean posibles. **c)** Indique en cuál de ellos la energía es mayor.

31.- 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.

32.- La configuración electrónica del ion X^{3+} es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. **a)** ¿Cuál es el número atómico y el símbolo de X? **b)** ¿A qué grupo y periodo pertenece ese elemento? **c)** Razone si posee electrones desapareados el elemento X.

33.- Los números atómicos de los elementos A, B, C y D son 2, 11, 17 y 25, respectivamente. **a)** Escriba, para cada uno de ellos, la configuración electrónica e indique el número de electrones

desapareados. **b)** Justifique qué elemento tiene mayor radio. **c)** Entre los elementos B y C, razone cuál tiene mayor energía de ionización.

34.- Dadas las configuraciones electrónicas: A: $1s^23s^1$; B: $1s^22s^3$; C: $1s^22s^22p^63s^23p^5$; D: $1s^22s^22p_x^22p_y^02p_z^0$. Indique razonadamente: **a)** La que no cumple el principio de exclusión de Pauli. **b)** La que no cumple el principio de máxima multiplicidad de Hund. **c)** La que, siendo permitida, contiene electrones desapareados.

35.- a) Escriba la configuración electrónica de los iones: Al^{3+} ($Z = 13$) y Cl^- ($Z = 17$). **b)** Razone cuál de los dos iones tendrá mayor radio. **c)** Razone cuál de los elementos correspondientes tendrá mayor energía de ionización.

36.- Dados los conjuntos de números cuánticos: $(2, 1, 2, \frac{1}{2})$; $(3, 1, -1, \frac{1}{2})$; $(2, 2, 1, -\frac{1}{2})$; $(3, 2, -2, \frac{1}{2})$. **a)** Razone cuáles no son permitidos. **b)** Indique en qué tipo de orbital se situaría cada uno de los electrones permitidos.

37.- Dadas las especies químicas Ne y O^{2-} , razone la veracidad o falsedad de las siguientes afirmaciones: **a)** Ambas especies poseen el mismo número de electrones. **b)** Ambas especies poseen el mismo número de protones. **c)** El radio del ion óxido es mayor que el del átomo de neón.

38.- La configuración electrónica de la capa de valencia de un elemento A es $3s^2p^5$. **a)** Justifique si se trata de un metal o un no metal. **b)** Indique, razonadamente, un elemento que posea mayor potencial de ionización que A. **c)** Indique, razonadamente, un elemento que posea menor potencial de ionización que A.

39.- La configuración electrónica del ion X^{3-} es $1s^22s^22p^63s^23p^6$. **a)** ¿Cuál es el número atómico y el símbolo de X? **b)** ¿A qué grupo y periodo pertenece ese elemento? **c)** Razone si el elemento X posee electrones desapareados.

40.- Para un átomo de número atómico $Z = 50$ y número másico $A = 126$: **a)** Indique el número de protones, neutrones y electrones que posee. **b)** Escriba su configuración electrónica. **c)** Indique el grupo y el periodo al que pertenece el elemento correspondiente.

41.- El número de electrones de los elementos A, B, C, D y E es 2, 9, 11, 12 y 13, respectivamente. Indique, razonando la respuesta, cuál de ellos: **a)** Corresponde a un gas noble. **b)** Es un metal alcalino. **c)** Es el más electronegativo.

42.- Para el ión Cl^- ($Z=17$) del isótopo cuyo número másico es 36: **a)** Indique el número de protones, electrones y neutrones. **b)** Escriba su configuración electrónica. **c)** Indique los valores de los números cuánticos de uno de los electrones externos.

43.- El número de protones en los núcleos de cinco átomos es el siguiente: A = 9; B = 16; C = 17; D = 19; E = 20. Razone: **a)** ¿Cuál es el más electronegativo? **b)** ¿Cuál posee menor energía de ionización? **c)** ¿Cuál puede convertirse en anión divalente estable?

44.- a) Escriba las configuraciones electrónicas de las especies siguientes: N^{3-} ($Z = 7$), Mg^{2+} ($Z = 12$), Cl^- ($Z = 17$), K ($Z = 19$) y Ar ($Z = 18$). **b)** Indique los que son isoelectrónicos. **c)** Indique los que presentan electrones desapareados y el número de los mismos.

45.- Razone si son verdaderas o falsas las siguientes afirmaciones: **a)** El neón y el O^{2-} tienen la misma configuración electrónica. **b)** El neón tiene una energía de ionización menor que la del oxígeno. **c)** El neón y el O^{2-} tienen el mismo número de protones.

46.- Para un elemento de número atómico $Z = 20$, a partir de su configuración electrónica: **a)** Indique el grupo y el periodo al que pertenece y nombre otro elemento del mismo grupo. **b)** Justifique la valencia más probable de ese elemento. **c)** Indique el valor de los números cuánticos del electrón más externo.

47.- Para un átomo en su estado fundamental, razone sobre la veracidad o falsedad de las siguientes afirmaciones: **a)** El número máximo de electrones con número cuántico $n = 3$ es 6. **b)** En un orbital $2p$ sólo puede haber 2 electrones. **c)** Si en los orbitales $3d$ se sitúan 6 electrones, no habrá ninguno desapareado.

48.- Indique el máximo número de electrones de un átomo que pueden tener los siguientes números cuánticos, asigne los restantes y especifique los orbitales en los que pueden encontrarse los electrones. **a)** $n = 2$; $s = +\frac{1}{2}$. **b)** $n = 3$; $l = 2$. **c)** $n = 4$; $l = 3$; $m = -2$.

49.- Dadas las moléculas PH_3 y Cl_2O : **a)** Represente sus estructuras de Lewis. **b)** Establezca sus geometrías mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia. **c)** Indique la hibridación del átomo central.

50.- Dos elementos A y B tienen de número atómico 17 y 20, respectivamente. **a)** Escriba el símbolo de cada uno y su configuración electrónica en el estado fundamental. **b)** Indique el ion más estable de cada uno y escriba su configuración electrónica. **c)** Justifique cuál tiene mayor radio iónico.

51.- **a)** Justifique cómo es el tamaño de un átomo con respecto a su anión y con respecto a su catión. **b)** Explique qué son especies isoelectrónicas y clasifique las siguientes según esta categoría: Cl^- ; N^{3-} ; Al^{3+} ; K^+ ; Mg^{2+} .

52.- **a)** ¿Qué caracteriza, desde el punto de vista de la configuración electrónica, a un metal de transición? **b)** Indique la configuración electrónica del ion hierro (II) y justifique la existencia de ese estado de oxidación. **c)** ¿Por qué existen siete clases de orbitales f?

53.- **a)** Dos átomos tienen las siguientes configuraciones electrónicas $1s^2 2s^2 2p^6$ y $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. La primera energía de ionización de uno es 2.080 kJ/mol y la del otro 496 kJ/mol. Asigne cada uno de estos valores a cada una de las configuraciones electrónicas y justifique la elección. **b)** La segunda energía de ionización del átomo de helio ¿será mayor, menor o igual que la energía de ionización del átomo de hidrógeno? Razone la respuesta.

54.- **a)** Escriba la configuración electrónica de los iones S^{2-} y Fe^{2+} . **b)** Indique un catión y un anión que sean isoelectrónicos con S^{2-} . **c)** Justifique por qué la segunda energía de ionización del magnesio es mayor que la primera.

55.- **a)** Escriba las configuraciones electrónicas de los átomos de Na y Mg. **b)** Justifique por qué el valor de la primera energía de ionización es mayor para el magnesio que para el sodio. **c)** Justifique por qué el valor de la segunda energía de ionización es mayor para el átomo de sodio que para el de magnesio.

56.- El número de protones de los núcleos de cinco elementos es: A: 2 B: 11 C: 9 D: 12 E: 13. Justifique mediante la configuración electrónica, el elemento que: **a)** Es un gas noble. **b)** Es el más electronegativo. **c)** Pertenece al grupo 1 del Sistema Periódico.

57.- Un átomo X en estado excitado presenta la siguiente configuración electrónica: $1s^2 2s^2 2p^2 3s^1$. **a)** ¿De qué elemento se trata? **b)** Indique los números cuánticos de cada uno de los electrones desapareados de X en su estado fundamental.

58.- Considere los elementos Be, O, Zn y Ar. **a)** Escriba las configuraciones electrónicas de los átomos anteriores. **b)** ¿Cuántos electrones desapareados presentan cada uno de esos átomos? **c)** Escriba las configuraciones electrónicas de los iones más estables que puedan formar.

59.- Considere las siguientes configuraciones electrónicas: 1) $1s^22s^22p^7$ 2) $1s^22s^3$ 3) $1s^22s^22p^5$ 4) $1s^22s^22p^63s^1$. **a)** Razone cuáles cumplen el principio de exclusión de Pauli. **b)** Justifique el estado de oxidación del ion más probable de los elementos cuya configuración sea correcta.

60.- Los números atómicos de los elementos A, B, C y D son 12, 14, 17 y 37, respectivamente. **a)** Escriba las configuraciones electrónicas de A^{2+} y D. **b)** Comparando los elementos A, B y C, razone cuál tiene mayor radio. **c)** Razone cuál de los cuatro elementos tiene mayor energía de ionización.

61.- Escriba la configuración electrónica correspondiente al estado fundamental de: **a)** El gas noble del tercer periodo. **b)** El elemento del cuarto periodo con mayor radio atómico. **c)** El elemento del grupo 15 con mayor electronegatividad.

62.- Indique razonadamente: **a)** Cómo evoluciona la primera energía de ionización en los elementos de un mismo periodo al aumentar el número atómico. **b)** Si el radio del ion cloruro será mayor o menor que el radio atómico del cloro. **c)** Que tienen en común el Na^+ y el O^{2-} .

63.- Para el ión fluoruro ($Z = 9$) del isótopo cuyo número másico es 19: **a)** Indique el número de protones, electrones y neutrones. **b)** Escriba su configuración electrónica. **c)** Indique los valores de los números cuánticos de uno de los electrones externos.

64.- Indique razonadamente la veracidad o falsedad de las siguientes afirmaciones: **a)** Un electrón situado en un orbital 2p podría representarse por los siguientes números cuánticos (2, 1, 0, 1/2). **b)** Un elemento químico que presenta propiedades químicas semejantes al carbono tiene de configuración electrónica de su capa de valencia ns^2np^2 . **c)** Si un elemento químico que pertenece al grupo 2 pierde dos electrones adquiere una configuración electrónica en su capa de valencia correspondiente al grupo 18.

65.- Indique razonadamente: **a)** La posición en el sistema periódico y el estado de oxidación más probable de un elemento cuyos electrones de mayor energía poseen la configuración $3s^2$. **b)** Si un elemento de configuración electrónica de su capa de valencia $4s2p^5$ es un metal o no metal. **c)** Por qué en los halógenos la energía de ionización disminuye a medida que aumenta el número atómico del elemento.

66.- Dados los elementos A, B y C de números atómicos 9, 12 y 14, respectivamente, indique razonadamente: **a)** La configuración electrónica de cada uno de ellos. **b)** Grupo y periodo que ocupan en la tabla periódica. **c)** El orden creciente de electronegatividad.

Contenidos

Estructura de la materia. Hipótesis de Planck. Modelo atómico de Bohr.

Mecánica cuántica: Hipótesis de De Broglie, Principio de Incertidumbre de Heisenberg. Orbitales atómicos. Números cuánticos y su interpretación. Partículas subatómicas: origen del Universo.

Clasificación de los elementos según su estructura electrónica: Sistema Periódico. Propiedades de los elementos según su posición en el Sistema Periódico: energía de ionización, afinidad electrónica, electronegatividad, radio atómico.

Criterios de evaluación

1. Analizar cronológicamente los modelos atómicos hasta llegar al modelo actual discutiendo sus limitaciones y la necesidad de uno nuevo. CEC, CAA.

2. Reconocer la importancia de la teoría mecanocuántica para el conocimiento del átomo. CEC, CAA, CMCT.
3. Explicar los conceptos básicos de la mecánica cuántica: dualidad onda-corpúsculo e incertidumbre. CCL, CMCT, CAA.
4. Describir las características fundamentales de las partículas subatómicas diferenciando los distintos tipos. CEC, CAA, CCL, CMCT.
5. Establecer la configuración electrónica de un átomo relacionándola con su posición en la Tabla Periódica. CAA, CMCT.
6. Identificar los números cuánticos para un electrón según en el orbital en el que se encuentre. CMCT, CAA, CEC.
7. Conocer la estructura básica del Sistema Periódico actual, definir las propiedades periódicas estudiadas y describir su variación a lo largo de un grupo o periodo. CAA, CMCT, CEC, CCL.

Estándares de aprendizaje evaluables

- 1.1. Explica las limitaciones de los distintos modelos atómicos relacionándolo con los distintos hechos experimentales que llevan asociados.
- 1.2. Calcula el valor energético correspondiente a una transición electrónica entre dos niveles dados relacionándolo con la interpretación de los espectros atómicos.
- 2.1. Diferencia el significado de los números cuánticos según Bohr y la teoría mecanocuántica que define el modelo atómico actual, relacionándolo con el concepto de órbita y orbital.
- 3.1. Determina longitudes de onda asociadas a partículas en movimiento para justificar el comportamiento ondulatorio de los electrones.
- 3.2. Justifica el carácter probabilístico del estudio de partículas atómicas a partir del principio de incertidumbre de Heisenberg.
- 4.1. Conoce las partículas subatómicas y los tipos de quarks presentes en la naturaleza íntima de la materia y en el origen primigenio del Universo, explicando las características y clasificación de los mismos.
- 5.1. Determina la configuración electrónica de un átomo, conocida su posición en la Tabla Periódica y los números cuánticos posibles del electrón diferenciador.
- 6.1. Justifica la reactividad de un elemento a partir de la estructura electrónica o su posición en la Tabla Periódica.
- 7.1. Argumenta la variación del radio atómico, potencial de ionización, afinidad electrónica y electronegatividad en grupos y periodos, comparando dichas propiedades para elementos diferentes.