



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

## 1.-PRIMEROS MODELOS DEL ÁTOMO.

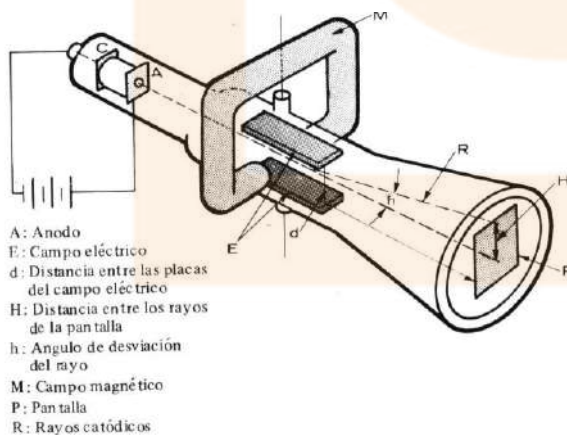
Dalton (s.XIX) supuso que la materia estaba formada por partículas infinitamente pequeñas, indivisibles e inalterables, a las que llamó átomos. Los postulados de su teoría atómica son:

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

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

### Modelo atómico de Thomson:

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



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

### Modelo de Rutherford:

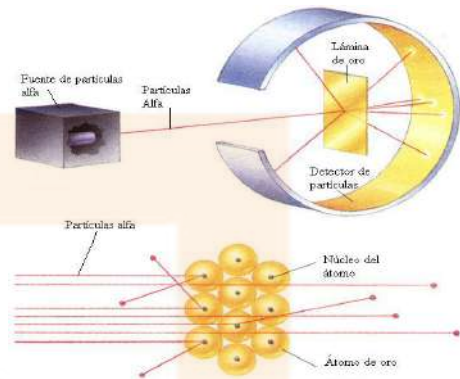
En 1911 Rutherford descubrió que el átomo tenía un núcleo central en el cual se hallaba concentrada la totalidad de la carga positiva.

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



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

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



Así el modelo atómico de Rutherford afirmaba:

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

Sin embargo este modelo tuvo que abandonarse por ciertos motivos:

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

## 2.- NATURALEZA DE LA LUZ. ESPECTROS ATÓMICOS

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

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

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

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

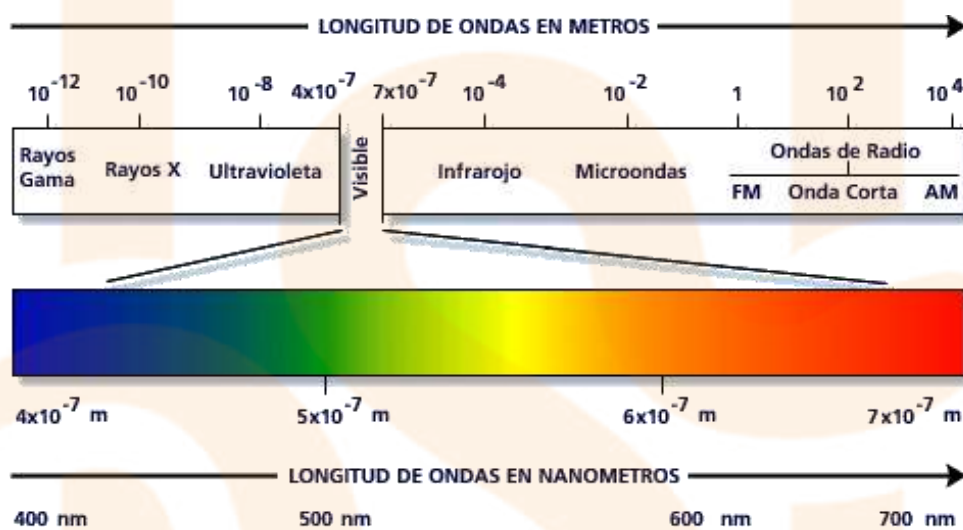


### 2.1.-Espectro atómicos.

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

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

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



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

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

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

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



Espectro de emisión del Hidrógeno:



Espectro de emisión del sodio:



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

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

dónde  $n = 3, 4, 5, 6, \dots$

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

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{En el espectro de emisión } n_f < n_i$$

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

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

Serie	$n_f$	$n_i$	Región del espectro
Lyman	1	2,3,4...n	Ultravioleta
Balmer	2	3,4,5...n	Visible/infrarrojo
Paschen	3	4,5,6...n	Infrarrojo
Brackett	4	5,6,7...n	Infrarrojo
Pfund	5	6,7,8...n	Infrarrojo (salto más corto)

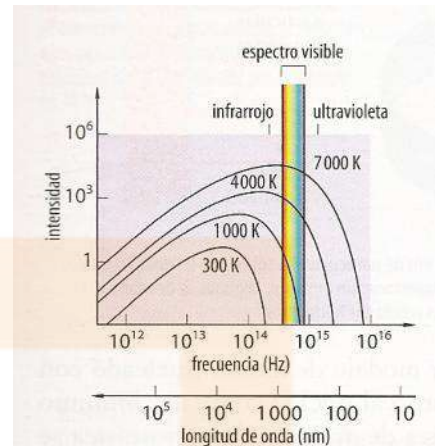
### 3.-ORÍGENES DE LA TEORÍA CUÁNTICA. Hipótesis de Plank y Efecto fotoeléctrico.

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



### Hipótesis de Plank.

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



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

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

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

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

$$E=hf$$

En donde **h** es la constante de proporcionalidad, de valor y conocida actualmente como **constante de Planck**. ( $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$  J.s). Y donde **v** = frecuencia de la radiación en  $s^{-1}$

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

$$E=nhf$$

### Efecto fotoeléctrico.

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

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

Si el fotón tiene la suficiente energía (o frecuencia, el electrón es expulsado del metal. La teoría de Einstein explicaba muchas características del efecto fotoeléctrico externo, como por ejemplo el hecho de que la energía máxima de los electrones expulsados sea independiente de la intensidad de la luz. ( $n^\circ$  de fotones).

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

La luz estaría formada por FOTONES (partículas luminosas)  $E = hf$



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

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

#### 4. MODELO DE BOHR

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

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

$$F_{\text{cta}} = F_e \rightarrow \frac{mv^2}{r} = K \frac{Q_n \cdot q_e}{r^2}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$b = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

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

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

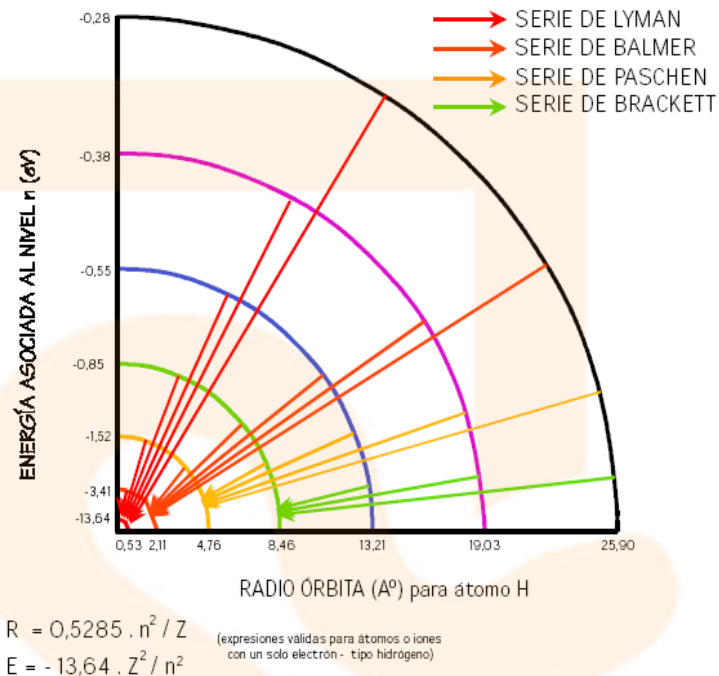
Para  $n=1$ , valor más negativo de energía, que corresponde a la mínima energía del electrón. (Máxima estabilidad). A todos los demás niveles se les denomina, niveles excitados.



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

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

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



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

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

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

Incluso cuando de nuevo mejoraron las técnicas espectroscópicas, se pudo observar que cada una de las líneas del efecto Zeeman eran DOS MUY JUNTAS cuando los campos magnéticos aplicados al hidrógeno eran muy intensos. Este hecho se interpretó argumentando que tal desdoblamiento era debido a un acople del campo magnético que originaba "el electrón-bolita" girando sobre sí con el campo magnético externamente aplicado. A este efecto, se lo denominó efecto Zeeman anómalo y de nuevo, las ecuaciones matemáticas que lo describían mostraron unas soluciones que dependían de un cuarto número cuántico al que se le dio el nombre de espín y cuyo valor podía ser  $+1/2$  ó  $1/2$ . La interpretación de este cuarto  $n^\circ$  se identificó con el sentido de giro del "electrón-bolita".

Así las cosas, resultó que para describir correctamente el estado del electrón en el átomo de hidrógeno, **eran necesarios conocer y especificar CUATRO NÚMERO CUÁNTICOS**. Esta situación era totalmente nueva en el mundo de la física. Pronto se vio que el mundo del microcosmos



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

#### 4.1.-Aciertos e inconvenientes del modelo de Bohr:

##### Aciertos:

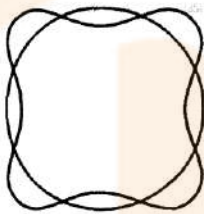
- *Justifica la estabilidad del átomo, orbitas estacionarias.*
- *Introduce el concepto de niveles de energía, justificando los espectros atómicos.*
- *Relaciona propiedades y estructura de los átomos.(justifica la clasificación periódica actual)*

##### Inconvenientes:

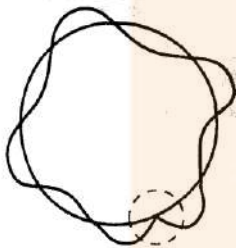
- *Los resultados para átomos de más de un electrón son defectuosos.*
- *Mezcla ideas clásicas e ideas cuánticas careciendo esto de coherencia.*

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

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



a) Órbita permitida



b) Órbita no permitida

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

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

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

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

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

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

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

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





### 6.- Principio de incertidumbre de Heisenberg (1927).

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

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

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

siendo  $\Delta x$  la incertidumbre en la posición y  $\Delta p$  la incertidumbre en la cantidad de movimiento.

Si queremos determinar con total precisión la posición:

$$\Delta x = 0 \quad (\text{incertidumbre } 0 \text{ para la posición})$$

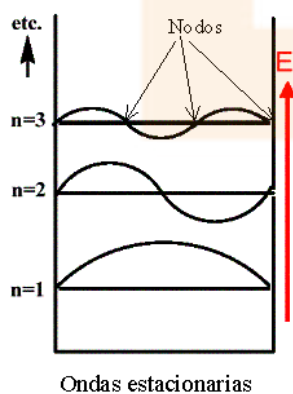
De la desigualdad para el principio de incertidumbre verificamos entonces que :

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

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

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

### 7.-Modelo mecano-cuántico.



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

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

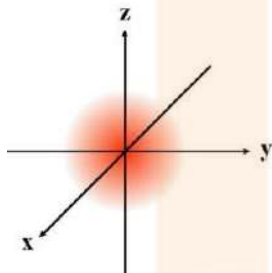


electrón). El valor de la función de onda al cuadrado ( $\Psi^2$ ) si **representa la distribución de probabilidad de encontrar al electrón en cierta región del espacio (ORBITAL)**, también denominado **densidad electrónica**.

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

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

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



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

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

#### Número cuántico principal "n"

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

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

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

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

- Definen *la forma* del orbital

#### El número cuántico magnético "m<sub>l</sub>"

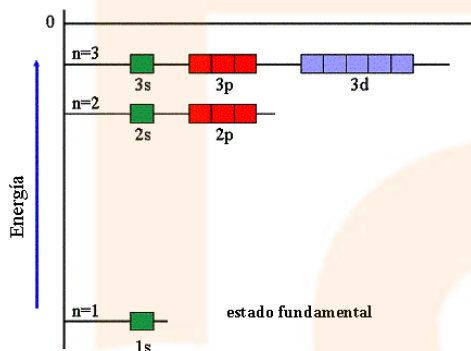
- El valor del número cuántico magnético depende de  $l$ . Toma valores enteros entre  $-l$  y  $l$ , incluyendo al 0. Para cierto valor  $l$  hay  $(2l+1)$  valores de  $m_l$ .
- Describe la orientación del orbital en el espacio.

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



$\ell$ (define la forma)	Subnivel	$m_\ell$ (define orientación)	Nº de orbitales en el subnivel
0	3s	0	1
1	3p	-1,0,1	3
2	3d	-2,-1,0,1,2	5

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



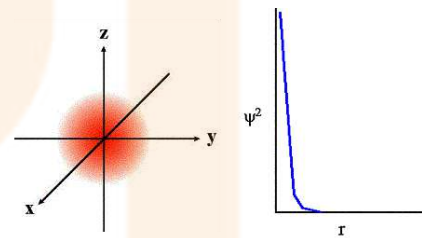
- En condiciones normales todos los átomos de hidrógeno están en su estado fundamental (El electrón en el orbital 1s)
- El electrón puede pasar a un estado excitado mediante la absorción de un fotón con el nº apropiado de cuantos de energía.

### 9.-Representaciones de los Orbitales atómicos.

- Orbital tipo s**

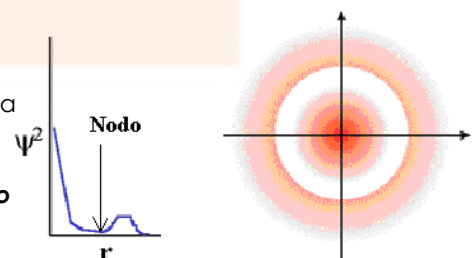
El orbital 1s tiene simetría esférica.

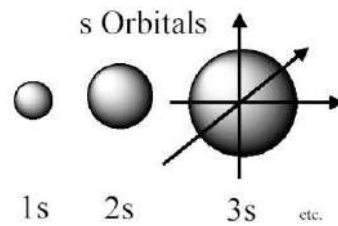
Representado  $\Psi^2$  frente a la distancia al núcleo ( $r$ ) vemos que la probabilidad de encontrar al electrón disminuye conforme aumenta  $r$ . Esto indica que en el estado fundamental la atracción electrostática del núcleo es lo suficientemente fuerte para mantener al electrón en un radio próximo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



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

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

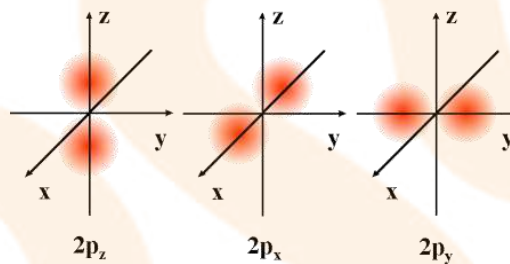




Generalmente se representan los límites de los orbitales atómicos de Schrödinger de manera que el orbital englobe al 90% de la distribución de densidad electrónica. En el caso de los orbitales s la representación es una esfera, de mayor radio cuánto mayor sea  $n$ .

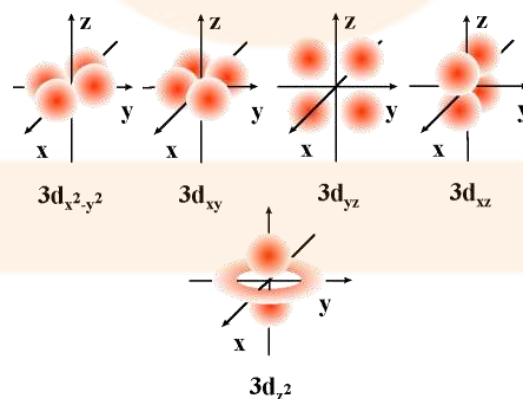
- **Orbital tipo p**

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



- **Orbital tipo d**

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



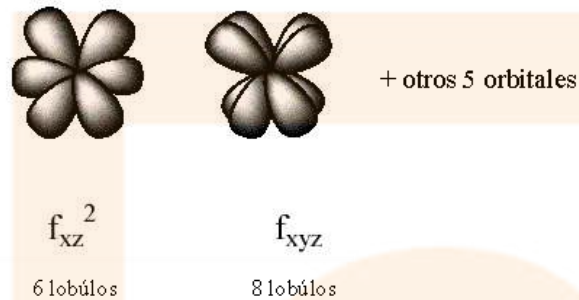
Aunque el orbital  $3d_{z^2}$  difiere en su forma de los otros cuatro, los cinco orbitales d tienen todos la misma energía.



- **Otros orbitales de mayor energía**

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

2 de los 7 orbitales 4f

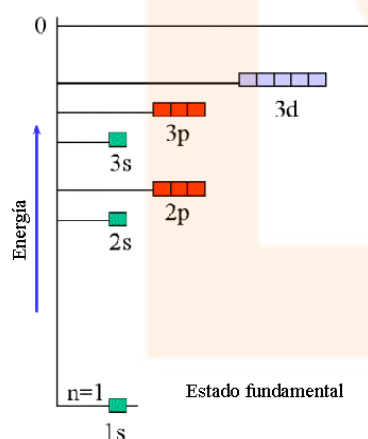


Para valores de  $l > 4$  tenemos los orbitales g y subsiguientes (a partir de f sigue el orden alfabético de las consonantes). En química general nos bastará con los orbitales s, p y d para comprender las propiedades de los elementos.

### 10.- Las energías de los orbitales atómicos

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

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

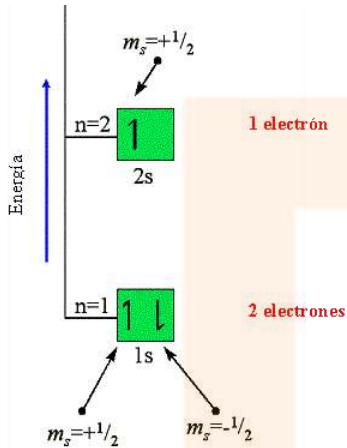


#### 10.1.- El número cuántico de espín electrónico y el Principio de exclusión de Pauli

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



Se considero entonces que los electrones actúan como pequeños imanes en un campo magnético debido a que giran sobre su propio eje. Ya que un electrón puede girar en dos sentidos (como las agujas del reloj ó en el sentido contrario a las agujas del reloj), se introdujo un cuarto número cuántico, conocido como **número cuántico de espín electrónico**,  $m_s$ , que toma dos valores:  $+ \frac{1}{2}$  ó  $- \frac{1}{2}$ .



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

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

### 10.2.- Configuración Electrónica

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

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

#### Ejemplo: Litio

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



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

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

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



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

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

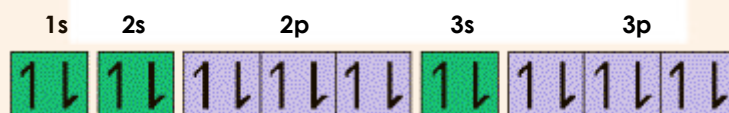
**La distribución más estable de los electrones en los subniveles es aquella que tenga el mayor número de espines paralelos (despareados).**

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

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

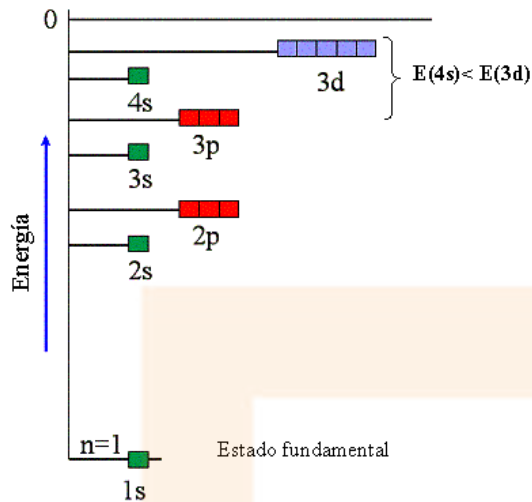
El neón completa el nivel dos y al igual que el helio tiene una configuración estable. Las configuraciones electrónicas pueden también escribirse de manera abreviada haciendo referencia al último nivel completo. Así la configuración del sodio la podemos escribir como **[Ne]3s<sup>1</sup>**.

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



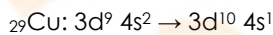
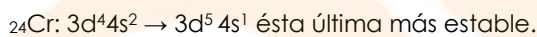
En el siguiente elemento, el potasio con 19 electrones, deberíamos empezar a llenar los orbitales 3d. Sin embargo el comportamiento químico del potasio es similar al de litio y el sodio, ambos con un electrón de valencia desapareado en un orbital s, por lo que al potasio le correspondería la configuración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

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



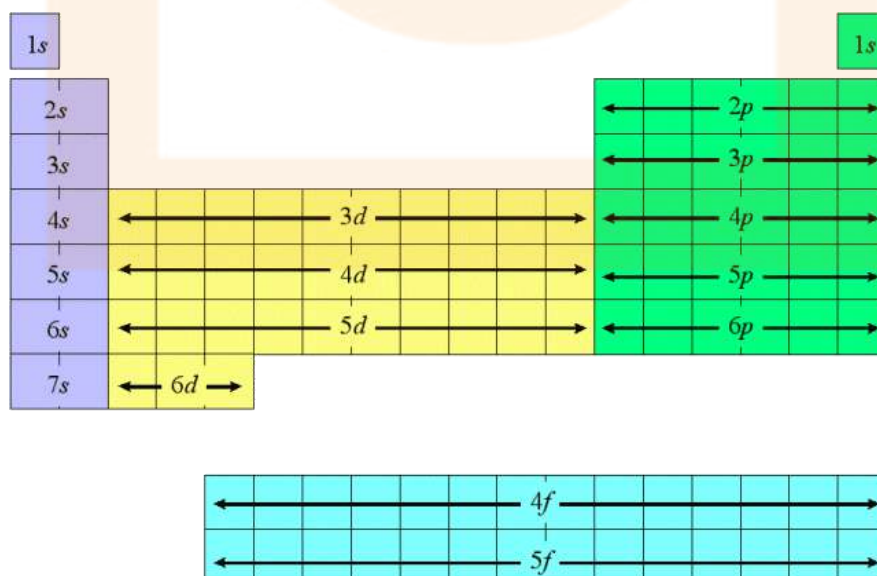
El Calcio con 20 electrones completará el orbital 4s y el siguiente elemento con 21 electrones, el escandio, se empezará a llenar los orbitales 3d. Como hay 5 orbitales 3d en el cuarto período de la tabla periódica aparecen 10 elementos (del Sc al Zn) más que en los períodos anteriores. A estos elementos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

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



### 10.3.-Configuración Electrónica y la Tabla Periódica

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







- A la izquierda, están los metales alcalinos y alcalinotérreos, donde se están llenando los orbitales s.
- A mano derecha, están los grupos del 13 a 18, en los cuales se están llenando los orbitales p.
- En la mitad de la tabla periódica, están los metales de transición, en los cuales se están llenando los orbitales d.
- Debajo de los metales de transición están las dos filas de elementos en los cuales se están llenando los orbitales f; los lantánidos y los actínidos.

En resumen:

- 2, 6, 10 y 14 son el número de electrones que pueden albergar los orbitales **s**, **p**, **d** y **f** respectivamente (que corresponden al número cuántico del momento angular  $l=0,1,2,3$ )
- El primer subnivel de orbitales s es el 1s, del subnivel p es el 2p, del subnivel d es el 3d y del subnivel f es el 4f. (es decir no existen los orbitales 1p, 1d, 2d, 1f, 2f y 3f).



### Ejercicios Tema 2: Estructura de la materia.

QUÍMICA 2º BACHLLERATO.

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

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

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

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

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

6.-Escribe las configuraciones electrónicas de los siguientes elementos o iones:  
Cu ( $Z = 29$ ) Cl<sup>-</sup> ( $Z = 17$ ) Fe<sup>2+</sup> ( $Z = 26$ )

7.-Dados los elementos de números atómicos 17, 20 y 55, escribir para cada uno:

- Configuración electrónica.
- Símbolo.
- Ión más estable y su configuración electrónica.

8. Considera la configuración electrónica siguiente:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$ .

- ¿A qué elemento corresponde?
- ¿Cuál es su situación en el sistema periódico?
- Indica los valores de los números cuánticos del último electrón que entra a formar parte de su configuración electrónica.
- Nombre de dos elementos cuyas propiedades sean semejantes a éste. Razónalo.

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

10.- De las siguientes proposiciones, referentes a la teoría de Bohr para el átomo de hidrógeno, señala las que consideras correctas:

- Las órbitas del electrón son circulares y pueden tener cualquier radio.
- La velocidad del electrón aumenta al aumentar el radio de la órbita.
- El electrón sólo puede ocupar determinadas órbitas estacionarias, que están cuantizadas.
- La energía asociada a las órbitas del electrón es proporcional al radio de la órbita.
- Si el electrón pasa de una órbita a otra tiene que emitir o absorber energía.
- La diferencia entre los distintos niveles de energía es constante.

11. Dadas la configuración electrónica  $1s^2, 2s^2 2p^6, 3s^2 3p^6, 5s^1$  de un elemento, cuyo símbolo representaremos por X, se puede deducir que:

- Su número atómico es 19.
- El átomo de X se encuentra en su estado fundamental.
- El átomo de X se encuentra en un estado excitado.
- Al pasar el electrón desde el orbital 4s al 5s se emite energía luminosa, que da lugar a una línea del espectro.

Sol:i) Depende si es un átomo neutro; ii) No; iii) si; iv) no

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



átomos e iones:

Na<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Al, Al<sup>3+</sup>, O, O<sup>2-</sup>, Cl

13. La configuración electrónica de un átomo neutro es  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ .

- ¿Cuál es el número atómico del elemento al que corresponde dicho átomo?
- ¿En qué grupo del sistema periódico debe encontrarse?

14. Supongamos cuatro electrones de un átomo, representados por sus cuatro números cuánticos:

Electrón 1 (4, 1, -1, -1/2)

Electrón 2 (3, 1, 2, +1/2)

Electrón 3 (1, 0, 0, +1/2)

Electrón 4 (4, 2, 0, -1/2)

Dar contestación razonada a las siguientes cuestiones:

- ¿Son correctos todos los cuartetos de números cuánticos, o hay alguno(s) imposible(s)?
- Ordenar los electrones según el criterio de energía creciente.
- Indicar el tipo de orbital atómico en que se encuentra cada electrón "correcto".

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

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

17.-Indica los números cuánticos de cada uno de los 3 últimos e<sup>-</sup> del P.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Soluciones:



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

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

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

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

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

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

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

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

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

9.- 33,125·10<sup>-17</sup> J.

15.-

- Si tienen la misma energía. Sólo al aplicar un campo magnético se desdoblan según la dirección de éste.
- Por que en orbitales d ( $l=2$ ) y  $m$  toma cinco valores posibles:  $-2, -1, 0, +1$  y  $+2$  correspondientes a los cinco orbitales.

16.-

- 3,0,3: No permitido. Pues si  $l=0$ , entonces  $m$  solo puede tomar el valor 0. ( $-1$   $l=1$   $m=0$   $l=2$   $m=3$ ).
- 3,2,-2: Sí permitido. Puesto que  $l < n$  y  $l=2$ , con lo que  $m$  puede tomar los valores:  $-2, -1, 0, +1$  y  $+2$ .

17.-

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

$n = 3; l = 1; m = -1; s = -1/2; n = 3; l = 1; m = 0; s = -1/2; n = 3; l = 1; m = +1; s = -1/2;$

18.-

$n = 1; l = 0; m = 0; s = -1/2;$	$n = 1; l = 0; m = 0; s = +1/2;$	
$n = 2; l = 0; m = 0; s = -1/2;$	$n = 2; l = 0; m = 0; s = +1/2;$	
$n = 2; l = 1; m = -1; s = -1/2;$	$n = 2; l = 1; m = 0; s = -1/2;$	$n = 2; l = 1; m = +1; s = -1/2;$
$n = 2; l = 1; m = -1; s = +1/2;$	$n = 2; l = 1; m = 0; s = +1/2;$	$n = 2; l = 1; m = +1; s = +1/2;$
$n = 3; l = 0; m = 0; s = -1/2;$	$n = 3; l = 0; m = 0; s = +1/2;$	
$n = 3; l = 1; m = -1; s = -1/2;$	$n = 3; l = 1; m = 0; s = -1/2;$	$n = 3; l = 1; m = +1; s = -1/2;$
$n = 3; l = 1; m = -1; s = +1/2;$	$n = 3; l = 1; m = 0; s = +1/2;$	$n = 3; l = 1; m = +1; s = +1/2;$



$$= +\frac{1}{2};$$

$$n = 4; l = 0; m = 0; s = -\frac{1}{2}; \quad n = 4; l = 0; m = 0; s = +\frac{1}{2};$$

$$n = 3; l = 2; m = -2; s = -\frac{1}{2}; \quad n = 3; l = 2; m = -1; s = -\frac{1}{2}$$

19.-

Z (Mo) = 42. Configuración electrónica: [Kr] 5s<sup>2</sup> 4d<sup>4</sup>

$$n = 5; l = 0; m = 0; s = -\frac{1}{2}; \quad n = 5; l = 0; m = 0; s = +\frac{1}{2};$$

$$n = 4; l = 2; m = -2; s = -\frac{1}{2}; \quad n = 4; l = 2; m = -1; s = -\frac{1}{2};$$

$$n = 4; l = 2; m = 0; s = -\frac{1}{2}; \quad n = 4; l = 2; m = +1; s = -\frac{1}{2};$$

20.-

a) (3, -1, 1, -1/2); **NO.** Porque l no puede tomar valores negativos.

b) (3, 2, 0, 1/2); **SÍ.** l < n; -1, 0, +1; s (-1/2, 1/2). Orbital 3d

c) (2, 1, 2, 1/2); **NO.** Porque m > l

d) (1, 1, 0, -1/2). **NO.** Porque l = n y debe ser menor.

21.-

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

b) (3, 1, 2, 1/2); **NO.** Porque m > l

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

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

22.-

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{5,89 \times 10^{-7} \text{ m}} = 5,1 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$\Delta E = h \times \nu = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s} \times 5,1 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} \times \frac{1 \text{ eV}}{1,602 \times 10^{-19} \text{ J}} = 2,1 \text{ eV}$$

23.-

$$E = n \times h \times \nu = 0,2 \times 6,02 \times 10^{23} \times 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s} \times 60 \text{ s}^{-1} = 4,8 \times 10^{-9} \text{ J}$$

24.-

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{4,8 \times 10^{-7} \text{ m}} = 6,25 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$E_{\text{cin.e}^-} = h \times (\nu - \nu_0) = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s} \times (6,25 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} - 5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}) = 8,28 \times 10^{-20} \text{ J}$$

$$E_{\text{cinética}} = n \times E_{\text{cin.e}^-} = 6,02 \times 10^{23} \times 8,28 \times 10^{-20} = 49860 \text{ J}$$

25.-

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

$$d) E(1 \text{ mol}) = n \times E_{\text{foton}} = 6,02 \times 10^{23} \times 3,6 \times 10^{-19} \text{ J} = 217,6 \text{ kJ}$$



26.-

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

27.-

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

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

**TEMA 2: PROPIEDADES DE LA MATERIA. SELECTIVIDAD**

Siempre aparecen en la cuestión nº 2. Por lo tanto se puntúan con hasta un máximo de 1,5 puntos.

**SELECTIVIDAD 2001**

1. **a)** Escriba las configuraciones electrónicas del átomo e iones siguientes: Al (Z=13), Na<sup>+</sup> (Z=11), O<sup>2-</sup> (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<sup>2+</sup>, Y<sup>2+</sup> y Z<sup>2-</sup>? Justifique las respuestas.

3. 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.

**SELECTIVIDAD 2002**

4.- **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?

5.- **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.

6.- Razone si las siguientes configuraciones electrónicas son posibles en un estado fundamental o en un estado excitado:

a) 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup> 3s<sup>1</sup>.

b) 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>1</sup>.

c) 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 2d<sup>10</sup> 3s<sup>2</sup>.

**SELECTIVIDAD 2003**

7. **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.

8. Dadas las siguientes configuraciones electrónicas de la capa de valencia:

1) ns1 2) ns2 np4 3) ns2 np6



- 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.

### SELECTIVIDAD 2004

9. 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.

### SELECTIVIDAD 2005

10. 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.

11. Dadas las siguientes configuraciones electrónicas externas:

$ns^1$ ;  $ns^2np^1$ ;  $ns^2np^6$

- 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.

12. 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.

13. 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.

### SELECTIVIDAD 06

14. 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.

15. 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.

16. Dadas las configuraciones electrónicas:

A :  $1s^2 3s^1$  ; B :  $1s^2 2s^3$  ; C :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ ; D :  $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^0 2p_z^0$

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.

### SELECTIVIDAD 07

17. Dados los conjuntos de números cuánticos: (2, 1, 2, 1/2); (3, 1, -1, 1/2); (2, 2, 1, -1/2); (3, 2, -2, 1/2)

- a) Razone cuáles no son permitidos.
- b) Indique en qué tipo de orbital se situaría cada uno de los electrones permitidos.

18. La configuración electrónica de la capa de valencia de un elemento A es  $3s^2 p^5$ .



- 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.

19. 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 el elemento X posee electrones desapareados.

### SELECTIVIDAD 2008

20.- 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.

21.-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.