

## TEMA 2

# ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS



MARÍA PILAR RUIZ OJEDA  
BORJA MUÑOZ LEOZ

### Contenidos:

---

1. Introducción
2. Modelo de Thomson
3. Modelo de Rutherford
4. La luz y las ondas electromagnéticas
5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos
6. Cuantización de la REM. La Teoría Cuántica de Planck
7. Modelo de Böhler para el átomo de hidrógeno
8. El efecto fotoeléctrico. Naturaleza dual de la luz
9. Hipótesis de De Broglie
10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos
11. Configuraciones de átomos multielectrónicos
12. Resumen del Tema

## Bibliografía

---

### Libros de Teoría y Problemas

- Chang R. Química. McGraw Hill. México, 2010. Cap. 7
- Petrucci R. H., Harwood W.S. Química General. Prentice Hall. Madrid, 2011. Cap. 8
- Reboiras M.D. Química. La Ciencia Básica. Thomson. Madrid, 2005. Cap. 8

### Libros de Problemas Resueltos

- Fernández M.R., Fidalgo J.A. 1000 Problemas de Química General. Everest. León, 1996.
- Reboiras M.D. Problemas Resueltos de Química. La Ciencia Básica. Thomson. Madrid, 2007.

## Webs de Interés

---

### Tabla Periódica:

- [http://www.mcgraw-hill.es/bcv/tabla\\_periodica/mc.html](http://www.mcgraw-hill.es/bcv/tabla_periodica/mc.html)
- <http://www.lenntech.com/espanol/tabla-periodica.htm>
- [www.fundacionquimica.org/tabla\\_periodica.php](http://www.fundacionquimica.org/tabla_periodica.php)

### Ejercicios de Química:

- [Chang R. Química. 8ª edición:](#)  
[http://highered.mcgraw-hill.com/sites/0072512644/student\\_view0/](http://highered.mcgraw-hill.com/sites/0072512644/student_view0/)
- [Brown T.L., LeMay H.E. Química. La Ciencia Central 7ª edición:](#)  
[http://cwx.prenhall.com/bookbind/pubbooks/blb\\_la/](http://cwx.prenhall.com/bookbind/pubbooks/blb_la/)

### Vídeos de Estructura Atómica:

- <http://www.educaplus.org/games.php?cat=76&page=2&page=1>

## 1. Introducción

---

Algunas cuestiones que nos planteamos en este tema son:

- ¿Cómo son los átomos por dentro?
- ¿Qué partículas los constituyen? ¿Cómo se distribuyen?
- ¿Qué modelos se han propuesto a lo largo de la historia de la ciencia para interpretar su estructura interna?
- ¿Qué es la Mecánica-Cuántica?
- ¿Cómo se construyen las configuraciones electrónicas de los átomos?

## 1. Introducción

---

- En el **siglo XIX** los intentos para entender cómo son los átomos y las moléculas fracasaron porque aplicaban las leyes de la física clásica a los sistemas **microscópicos** (átomos y moléculas).
- Así, se consideraba que la **energía** se podía absorber o emitir en cualquier cantidad.
- Los trabajos de **Planck (1900)** mostraron que la energía sólo se puede liberar o absorber en ciertas cantidades, llamadas **cuantos**. La teoría cuántica de Planck revolucionó la física clásica.

## 1. Introducción

---

A finales del siglo XIX, en los experimentos con tubos de descarga, se descubrió la existencia de electrones y protones en los átomos de cualquier elemento.

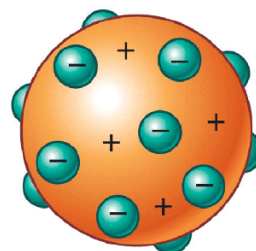
La pregunta que a continuación se formularon los científicos fue:

¿Cómo se distribuyen estas partículas en el átomo?

## 2. Modelo Atómico de Thomson

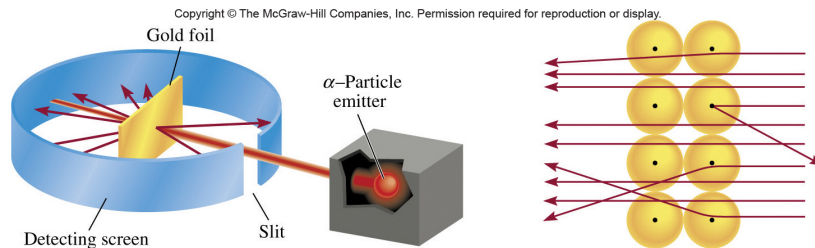
---

- La primera teoría sobre la estructura atómica la formuló **Thomson** en 1904.
- Supuso que el átomo era una esfera de carga positiva, formada por los protones, y que los electrones, para garantizar la neutralidad, se encontraban embebidos como las pasas en un puding. (**Modelo del puding de pasas**).



### 3. Modelo Atómico de Rutherford

Rutherford, persuadido de la lógica del Modelo de Thomson, realizó un experimento esperando que confirmara su validez:

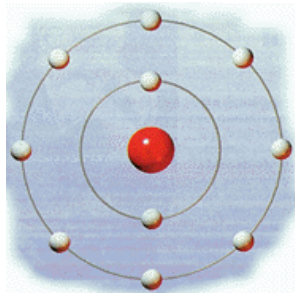


Obtuvo resultados totalmente inesperados. Todas las partículas  $\alpha$  debían atravesar la lámina de oro sin desviarse, puesto que la distribución de carga era homogénea. Sin embargo, **algunas partículas  $\alpha$  se desviaban ángulos importantes.**

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

### 3. Modelo Atómico de Rutherford

- El átomo es una partícula esencialmente hueca con un **núcleo central muy pequeño** que concentra toda la carga positiva (**protones**) y casi toda la masa.
- Los **neutrones** también se encuentran en el **núcleo**.
- Los **e<sup>-</sup>** giran entorno al mismo, a grandes distancias.



**Modelo Nuclear de Rutherford**

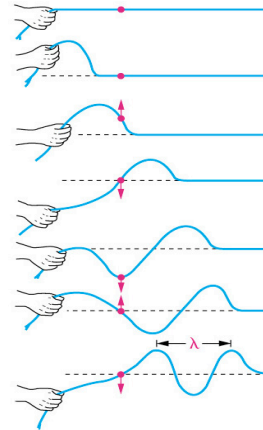
OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

9

## 4. La Luz y las Ondas Electromagnéticas

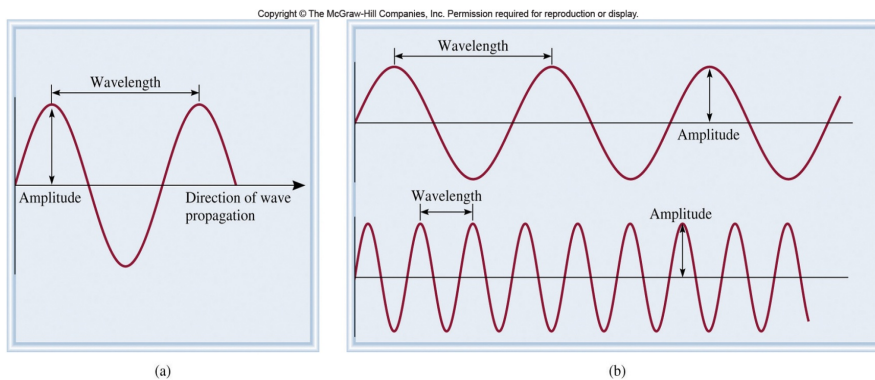
Para entender diferentes aspectos de este tema es conviene conocer, previamente, la naturaleza de la luz.

- Una onda es una perturbación vibracional que transmite energía.
- Transmite energía, pero no materia.
- Propiedades de las ondas son:
  - Frecuencia
  - Longitud de onda
  - Amplitud



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

## 4. La Luz y las Ondas Electromagnéticas



Frecuencia,  $\nu$   
Longitud de onda,  $\lambda$   
Amplitud,  $A$

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

11

## 4. La Luz y las Ondas Electromagnéticas

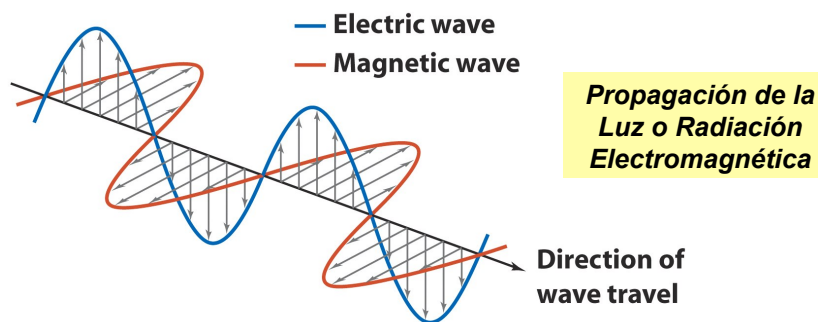
- **Frecuencia ( $\nu$ , nu):** número de ondas que pasan por un punto determinado por segundo.
- **Longitud de onda ( $\lambda$ , lambda):** longitud entre puntos iguales de ondas sucesivas.
- **La amplitud** es la longitud vertical de la línea media de una onda a su cresta o valle.
- **Velocidad de la luz ( $c$ ) =  $3,00 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$**
- **Relaciones entre  $c$ ,  $\lambda$  y  $\nu$ :**

$$c = \lambda \nu$$

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

## 4. La Luz y las Ondas Electromagnéticas

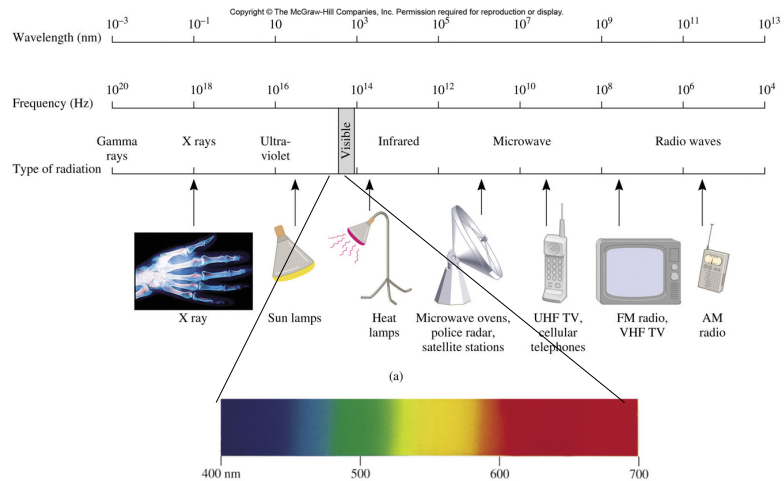
La **luz** o **radiación electromagnética**, REM, es una forma de transmisión de energía en la que los campos eléctrico y magnético se propagan como ondas a través de un medio material o del espacio vacío.



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

## 4. La Luz y las Ondas Electromagnéticas

La luz recibe diferentes nombres según su  $\lambda$  ó  $\nu$

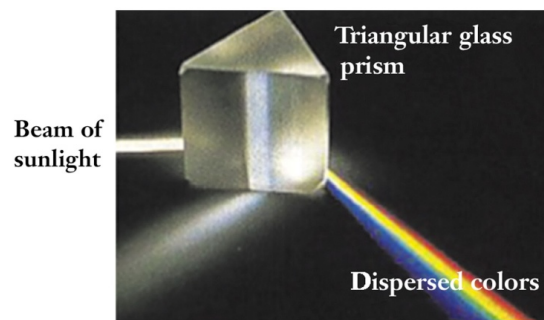


OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

14

## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

**Espectro** es el conjunto de radiaciones de distinta  $\nu$  en que puede descomponerse una radiación compleja.



**Espectro continuo de la luz blanca**

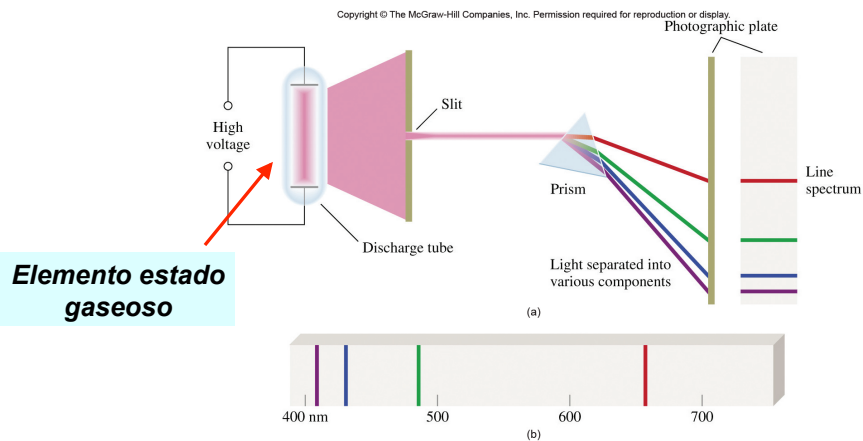
OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

15



## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

### Espectro discontinuo o de rayas de la luz emitida por un elemento en estado gaseoso



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

16

## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

- Los **espectros de rayas o atómicos** se producen cuando se analiza la luz, absorbida o emitida, por un gas o vapor en estado **atómico**. Cada raya aparece a una  $\nu$  o  $\lambda$  bien definida. Los átomos se comportan como si sólo pudieran absorber o emitir determinadas frecuencias.
- Se habla de un **espectro de absorción o emisión** según que la luz analizada por el sistema de dispersión (prisma) haya sido absorbida o emitida por la muestra.

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

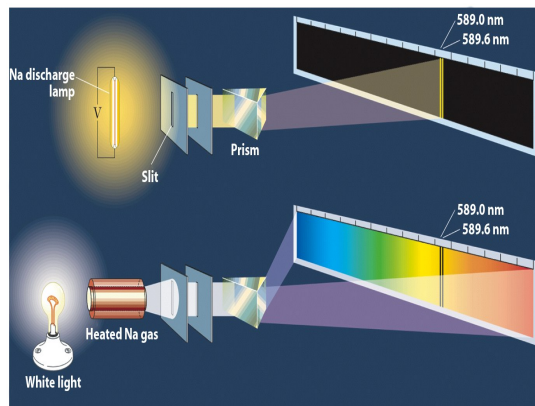
17

## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

Espectro Atómico de **Emisión**

Los espectros atómicos de emisión y absorción son idénticos.

Espectro Atómico de **Absorción** (las rayas son negras porque la luz ha sido absorbida a esa  $\lambda$ )

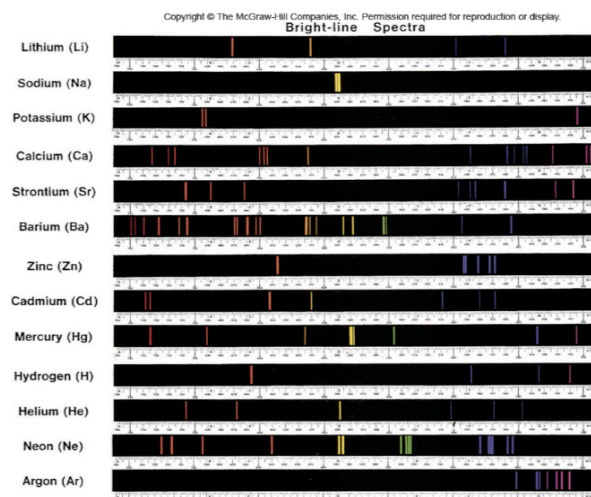


## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

- Las rayas espectrales de **un elemento químico** son siempre las mismas. Por eso se dice que su espectro de rayas (de absorción o emisión) es su “**huella digital**”.
- Esto permitió descubrir **nuevos elementos** cuando se hallaban rayas en una luz compleja, que no se correspondían con los elementos conocidos.
- Así, se descubrió el **He** al analizar la luz solar. De ahí su nombre.

## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

### Espectros Atómicos (emisión) de varios elementos



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

20

## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

**Ejercicio (facilón):** A continuación se da el espectro de rayas obtenido al analizar la luz irradiada por una estrella X, y el espectro del hidrógeno. ¿Habrá hidrógeno en la estrella X?



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

21

## 5. Dispersión de la Luz. Espectros Atómicos

- **En conclusión**, los espectros atómicos tenían mucha importancia porque reflejaban la estructura interna de los átomos, que es propia de cada elemento.
- Cabía pensar que, estudiando las rayas de los espectros, se podría obtener información acerca de la **organización de los electrones** en los átomos. Por eso se estudiaron intensamente a finales del siglo XIX.
- Podríamos poner un símil de medicina: los equipos médicos pueden conocer el estado interno de un paciente analizando sus radiografías, sus ecografías, el escáner, ....
- **El hidrógeno** tiene el espectro más sencillo de todos los elementos, ya que sus átomos son los más sencillos de todos: sólo tienen un electrón.

## 6. Cuantización de la REM. Teoría Cuántica de Planck

En 1900, Max Planck planteó una teoría muy novedosa.



Max Planck, 1900

Los átomos y moléculas pueden emitir (o absorber) energía sólo en cantidades discretas, en pequeñas porciones o **cuantos**.

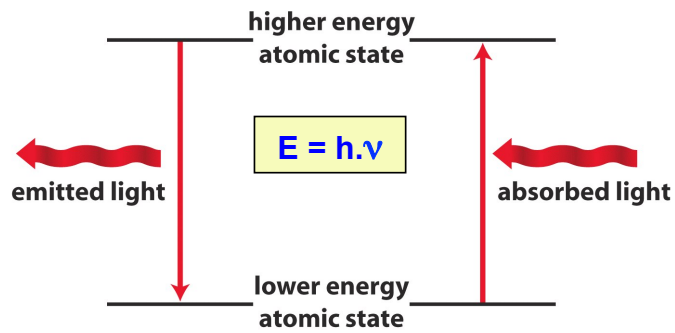
**Un cuanto** es la mínima cantidad de energía que puede ser emitida (o absorbida) en forma de REM. Esa energía viene dada por:

$$E = h \cdot \nu \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

**La energía, como la materia, es discontinua.**

## 6. Cuantización de la REM. Teoría Cuántica de Planck

---



## 6. Cuantización de la REM. Teoría Cuántica de Planck

---

**Cuestión:** ¿Qué casos conoces de la vida cotidiana que estén cuantizados?

## 7. Modelo de Böhrr para el Átomo de Hidrógeno

---

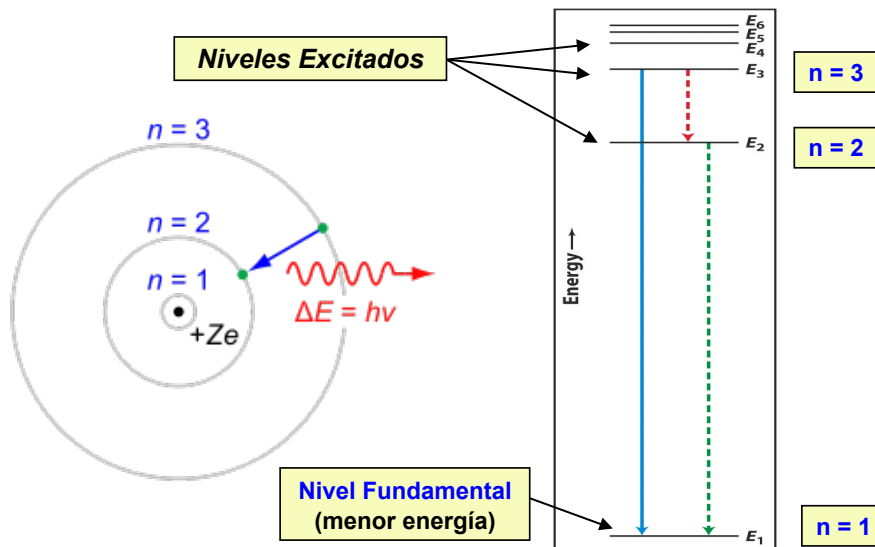
- El modelo atómico de **Rutherford** tuvo pronto graves dificultades porque no podía explicar los espectros atómicos o de rayas. No tenía en cuenta la cuantización de la energía.
- En 1913, **Niels Böhrr** aplicó la teoría cuántica de Planck (1900) para **explicar satisfactoriamente el espectro del átomo de H**.
- Este modelo se basa en:

## 7. Modelo de Böhrr para el Átomo de Hidrógeno

---

1. El electrón del átomo de H se mueve en **órbitas circulares**.
2. Sólo pueden existir determinadas órbitas. Las **órbitas están seleccionadas por un número n: número cuántico principal (n = 1, 2, 3, 4, ...)**.
3. Cada órbita tiene asociada una **energía** que depende del número cuántico **n**.
4. Un átomo de H sólo **emite/absorbe** un fotón de energía **hν** cuando el electrón pasa de un nivel de mayor/menor energía a otro de menor/mayor.

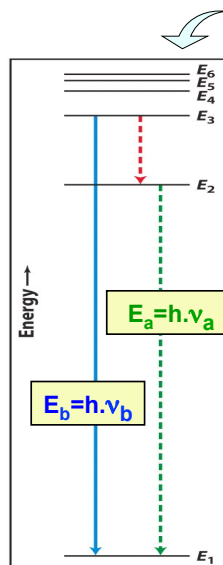
## 7. Modelo de Bóhr para el Átomo de Hidrógeno



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

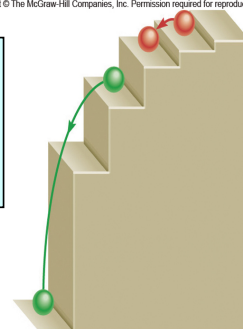
28

## 7. Modelo de Bóhr para el Átomo de Hidrógeno



Niveles de energía correspondientes a las órbitas de Bóhr, según que  $n = 1, 2, 3, 4, \dots \infty$ .  
En las transiciones se emiten fotones de luz cuya energía es:  $\Delta E = E_f - E_i = h \cdot \nu$

*Analogía mecánica de los procesos de emisión.  
La pelota puede estar en cualquier peldaño, pero no entre ellos.*



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

29

## 7. Modelo de Böhrr para el Átomo de Hidrógeno

### Éxito del modelo de Böhrr

1. Introdujo (de forma artificiosa) el número cuántico principal,  $n$ , que cuantizaba el tamaño y la energía de cada órbita.
2. Explicaba satisfactoriamente el espectro del H.

### Limitaciones del modelo de Böhrr

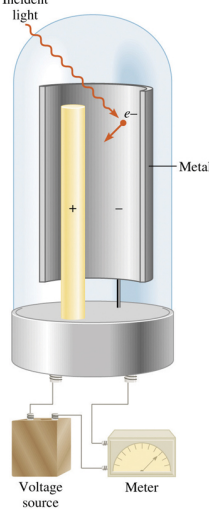
1. Sólo era adecuado para explicar el espectro del H, pero no explicaba los espectros de otros elementos.
2. El modelo de Böhrr era artificioso, sin la debida fundamentación teórica.

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

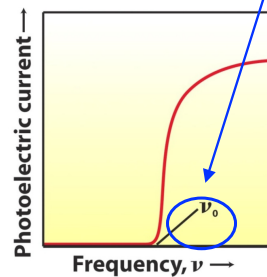
30

## 8. El Efecto Fotoeléctrico

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



**Descripción del fenómeno:** Cuando incide luz sobre una superficie metálica limpia, la superficie emite  $e^-$ . Para cada metal hay una **frecuencia mínima** de luz,  $\nu_0$ , por debajo de la cual no se emiten  $e^-$



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

31



## 8. El Efecto Fotoeléctrico

### Interpretación de Einstein del Efecto Fotoeléctrico:

- En 1905, Einstein explicó el efecto fotoeléctrico recurriendo a la teoría cuántica de Planck (1900).
- Supuso que la luz que llega a la superficie del metal es un chorro de **fotones**, que actúan como pequeñísimas **partículas** que transportan un cuanto de energía de valor  $E=h\cdot\nu$
- Cuando un fotón choca con el metal, su energía se transfiere a un electrón de la superficie del metal.
- Se requiere cierta cantidad de energía para que el electrón venza las fuerzas de atracción que lo mantienen unido al metal.

## 8. El Efecto Fotoeléctrico

- Si los fotones tienen menos energía que la necesaria, el electrón no puede escapar.
- Si el fotón tiene suficiente energía logra arrancar el electrón y se produce la emisión.
- Esta interpretación suponía que la luz tenía, además de la reconocida naturaleza ondulatoria, una naturaleza corpuscular adicional.
- Por eso se dice que la luz tiene una **naturaleza dual**, como onda y como corpúsculo.

## 8. El Efecto Fotoeléctrico

---

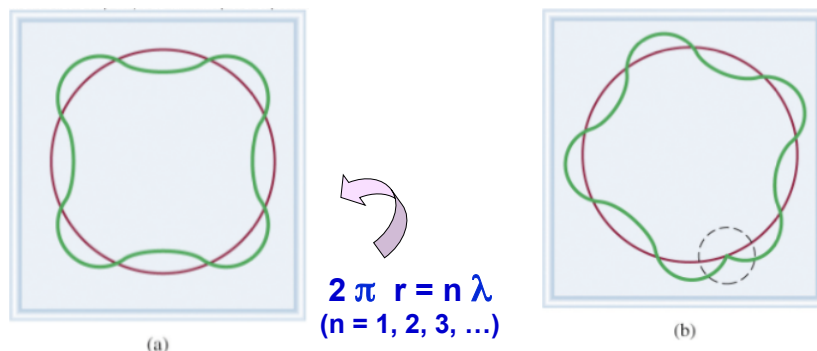
- La interpretación corpuscular de la **luz** de Einstein colocaba a los científicos en un dilema:
  - Por un lado, explicaba el efecto fotoeléctrico.
  - Por otro, era incongruente con la probada naturaleza ondulatoria de la luz.
- Estas ideas fueron difíciles de aceptar, porque hasta entonces **ambos conceptos, onda y corpúsculo, eran antagónicos**.
- Desde entonces se considera que la luz posee ambas propiedades: **corpuscular y ondulatoria**. Dependiendo del experimento, la luz muestra una u otra propiedad de manera más patente.

## 9. La Hipótesis de De Broglie

---

- En 1924, De Broglie razonó que si las ondas de luz se pueden comportar como partículas (fotones), las partículas (como los electrones en un átomo) también pueden tener propiedades ondulatorias.
- Según De Broglie, un electrón en un átomo se comporta como una onda estacionaria.

## 9. La Hipótesis de De Broglie



Órbita estacionaria o estable

Órbita no estable

## 9. La Hipótesis de De Broglie

En resumen:

- **Dualidad onda-partícula de la luz:**
  - Einstein sugirió que la luz se comporta en ocasiones como un haz de **partículas**. Así, se podía explicar el efecto fotoeléctrico.
  - Sin embargo, la difracción o la reflexión de los fotones (luz) son fenómenos típicamente **ondulatorios**.
- **De Broglie, 1924:**
  - Propuso que las partículas pequeñas de materia, como los **electrones**, a veces pueden mostrar **propiedades de ondas**.

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

- Estos antecedentes prepararon la escena para una nueva teoría más amplia de la estructura atómica.
- Se reconoce la naturaleza ondulatoria del electrón y su comportamiento se describe en términos apropiados para las ondas.
- Así, en 1926 **Schrödinger** desarrolló la **Mecánica Cuántica Ondulatoria** para describir el movimiento ondulatorio de los electrones en un átomo.
- La Mecánica Cuántica Ondulatoria requiere un **desarrollo matemático complejo** y tiene un **fuerte carácter probabilístico**.

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

- La resolución de la ecuación de Schrödinger (Ecuación de Onda) da como soluciones una serie infinita de funciones matemáticas llamadas **funciones de onda** u **orbitales**,  $\psi$ .
- **Principio de Heisenberg**: no es posible conocer ni la posición ni la velocidad de un electrón en un átomo, sólo la probabilidad de encontrarlo en un punto del espacio. Esa probabilidad viene dada por  $\psi^2$ .
- **Los orbitales** dependen de 3 números cuánticos:  $n$ ,  $l$ ,  $m$ . **Cada trío ( $n, l, m$ ) define un orbital**.

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

- **Número cuántico principal:**  $n = 1, 2, 3\dots$

Quantiza o selecciona el **tamaño** del orbital y la mayor parte de la **energía**. Define la capa cuántica.

- **Número cuántico azimutal:**  $l = 0, 1, 2\dots(n-1)$

Este número cuántico define la **forma** de los subniveles o subcapas y una parte de la energía.

$$l = 0 \rightarrow s \quad l = 2 \rightarrow d \quad l = 4 \rightarrow g$$

$$l = 1 \rightarrow p \quad l = 3 \rightarrow f \quad \dots$$

- **Número cuántico magnético:**

Quantiza la **orientación espacial** de los orbitales.

$$m = -l \dots -2, -1, 0, 1, 2 \dots +l$$

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

40

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

- **Ejemplo:** Para  $n=3$

$$l = 0 \text{ (s)} \Rightarrow m = 0 \Rightarrow \text{1 orbital 3s}$$

$$l = 1 \text{ (p)} \Rightarrow m = +1, 0, -1 \Rightarrow \text{3 orbitales 3p}$$

$$l = 2 \text{ (d)} \Rightarrow m = +2, +1, 0, -1, -2 \Rightarrow \text{5 orbitales 3d}$$

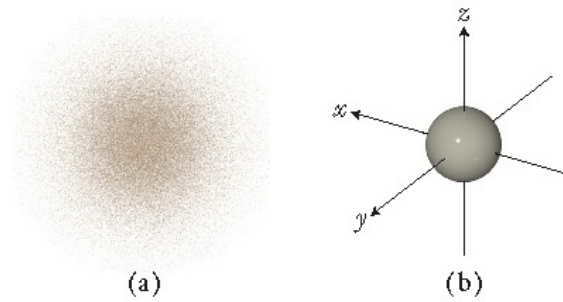
- Todos los orbitales que poseen el mismo valor de  $n$  forman una **capa cuántica** o **nivel**. Pe. los orbitales que tienen  $n=3$  están en la tercera capa o nivel.
- Todos los orbitales con los mismos valores de  $n$  y  $l$  están en la misma **subcapa** o **subnivel**.

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

41

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

### Forma de los Orbitales S



M. Jöhl. *Química e investigación criminal*  
© Copyright Editorial Reverté - 2008

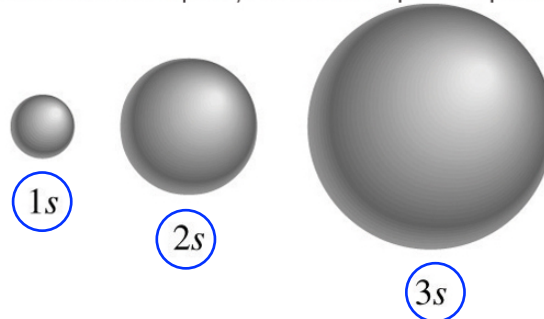
OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. *Fundamentos Químicos de la Ingeniería*

42

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

### Forma y tamaño relativo de los Orbitales S

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

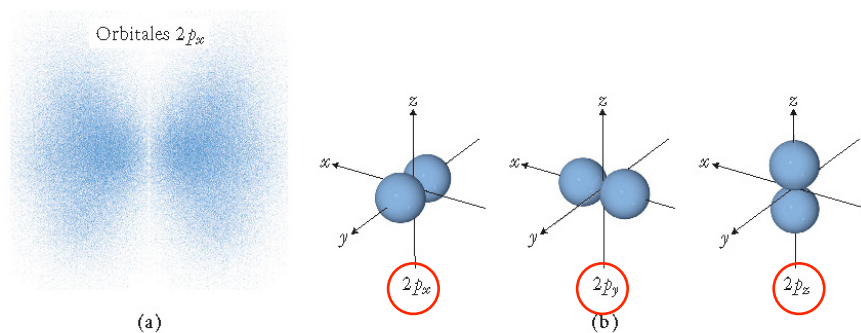


OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. *Fundamentos Químicos de la Ingeniería*

43

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

### Forma de los Orbitales p



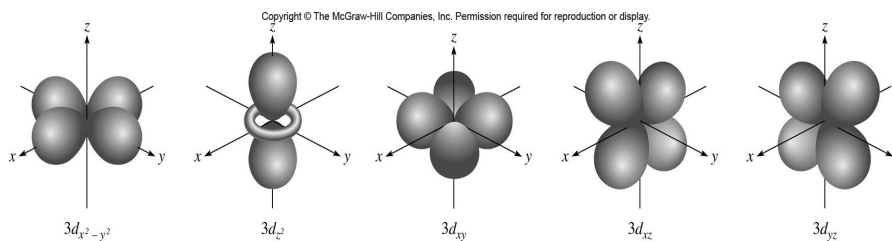
M. Jöhl. *Química e investigación criminal*  
© Copyright Editorial Reverté - 2008

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. *Fundamentos Químicos de la Ingeniería*

44

## 10. Mecánica Cuántica y Orbitales Atómicos

### Forma de los Orbitales d

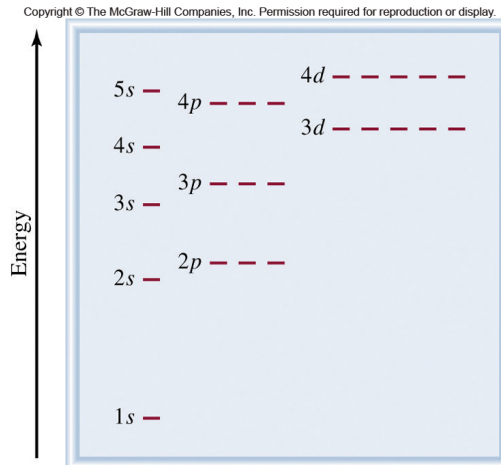


OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. *Fundamentos Químicos de la Ingeniería*

45

## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

### Niveles de energía en átomos multielectrónicos



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

46

## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

- **¿Qué es una configuración?**  
La distribución de los electrones de un átomo en sus orbitales.
- **¿Qué es una configuración fundamental?**  
Aquella que tiene la menor energía.
- **¿Con qué criterio se colocan los electrones en un átomo para obtener su configuración fundamental?**

**Criterio de mínima energía:** Primero se ocupan los orbitales de menor energía:  $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < \dots$

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

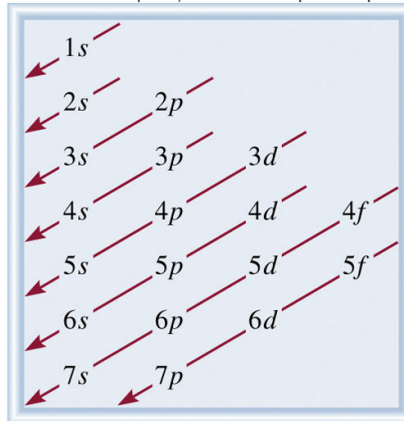
47



## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

**Regla nemotécnica para construir la configuración electrónica de cualquier elemento.**

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

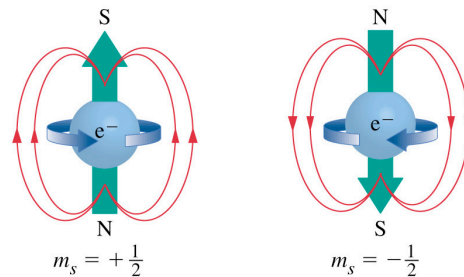
48

## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

### ■ ¿Cuántos electrones caben en un orbital?

**Principio de Exclusión de Pauli:** En un átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales. Por tanto:

**En un orbital sólo caben 2 e<sup>-</sup> (s=+1/2, s=-1/2)**



OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

49

## 11. Configuraciones de Átomos Multieletrónicos

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

He



$1s^2$

(a)



$1s^2$

(b)



$1s^2$

(c)

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

He



$1s^2$

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

50

## 11. Configuraciones de Átomos Multieletrónicos

### MUY IMPORTANTE

- Un **orbital** está definido por 3 números cuánticos:

**(n, l, m)**

- El estado de un **electrón** queda definido por 4 números cuánticos:

**(n, l, m, s)**

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

51

## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

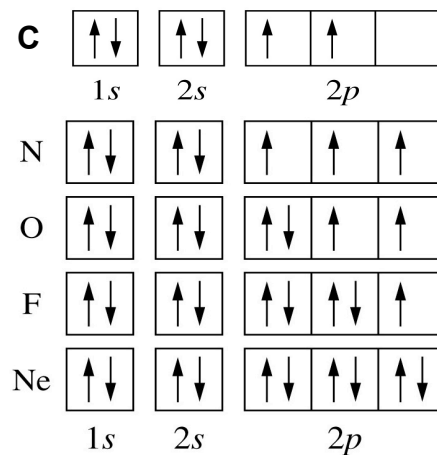
- ¿Cómo se colocan los electrones en los subniveles p, d, f, ...?

### Regla de Hund:

La configuración más estable en los subniveles (u orbitales degenerados) es la que tiene el mayor número de electrones con los espines paralelos.

## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

### Llenado de los orbitales p (Reglas de Hund)



## 11. Configuraciones de Átomos Multieletrónicos

### Llenado de los orbitales d (Reglas de Hund)

Sc: [Ar]	$\uparrow$ $\square$ $\square$ $\square$ $\square$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>
Ti: [Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ $\square$ $\square$ $\square$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>
V: [Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\square$ $\square$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>
Cr: [Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow$	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>
Mn: [Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>
Fe: [Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>
Co: [Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>
Ni: [Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>
Cu: [Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>
Zn: [Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>

3d                      4s

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

54

## 11. Configuraciones de Átomos Multieletrónicos

### ■ Capa cuántica de VALENCIA:

Es la capa con mayor n

### ■ Electrones de VALENCIA:

Son los más externos, los de la capa de valencia

### ■ Configuración electrónica de VALENCIA:

Muestra los e<sup>-</sup> de valencia: C (Z=6) [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

55

## 11. Configuraciones de Átomos Multieletrónicos

### EJERCICIO

De las configuraciones electrónicas siguientes, ¿cuales corresponden a un estado fundamental, cuales a un estado excitado y cuales a un estado imposible?

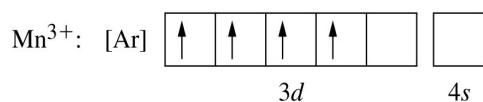
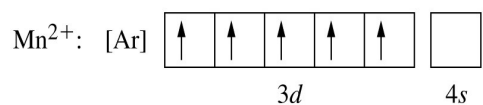
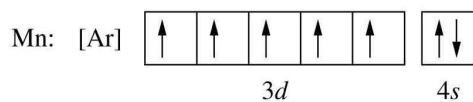
- a) Li ( $1s^2 2s^1$ )                      b) S ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^7$ )  
c) Be ( $1s^2 2s^1 2p^1$ )                    d) Sc ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$ )  
e) H ( $1s^2$ )                                f) C ( $1s^2 2s^2 2p^1 2d^1$ )  
g) N ( $1s^2 2s^2 2p^3$ )

## 9. Propiedades Magnéticas

- **Átomos o iones diamagnéticos:**
  - Todos los electrones están **apareados**.
  - Una especie diamagnética es débilmente repelida por un campo magnético.
- **Átomos o iones paramagnéticos:**
  - Tienen electrones **desapareados**.
  - Los electrones desapareados inducen un campo magnético que hace que el átomo o ión sea atraído por un campo magnético externo.

## 9. Propiedades Magnéticas

### Átomos e iones con electrones desapareados



## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

### EJERCICIO

De los siguientes átomos, dí cuales son diamagnéticos y cuales paramagnéticos:

- a) Li (Z=3)                      b) Mg (Z=12)
- c) S (Z=16)                      d) Fe (Z=26)
- e) Zn (Z=30)

## 11. Configuraciones de Átomos Multieletrónicos

### ■ Electrón Diferenciador:

- El último electrón en colocarse
- Diferencia del elemento anterior y posterior

### ■ Irregularidades: CORRESPONDE ES



### ■ ¿Por qué?

Orbitales con Energías parecidas:  $E_{4s} \sim E_{3d}$

Orbitales d llenos y semillenos: **Muy Estables**

## 11. Configuraciones de Átomos Multieletrónicos

Configuraciones de los Gases Nobles:  $ns^2 np^6$ . Son muy estables y por eso los gases nobles no reaccionan con otros elementos, prácticamente.

- Helio (He)  $1s^2$
- Neón (Ne)  $1s^2 2s^2 2p^6$
- Argón (Ar)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
- Kriptón (Kr)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$
- Xenón (Xe)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$   
 $5s^2 4d^{10} 5p^6$

## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

### EJERCICIO

Escribe la configuración electrónica de las siguientes especies:

Ne	K <sup>+</sup>	Cl <sup>-</sup>
Al	Al <sup>3+</sup>	Ti
O <sup>-2</sup>	Ar	F <sup>-</sup>

Dí cuáles de estas especies son isoelectrónicas entre ellas.

## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

### Configuraciones electrónicas de los grupos 1A y 2A

Group 1A	Group 2A
Li [He]2s <sup>1</sup>	Be [He]2s <sup>2</sup>
Na [Ne]3s <sup>1</sup>	Mg [Ne]3s <sup>2</sup>
K [Ar]4s <sup>1</sup>	Ca [Ar]4s <sup>2</sup>
Rb [Kr]5s <sup>1</sup>	Sr [Kr]5s <sup>2</sup>
Cs [Xe]6s <sup>1</sup>	Ba [Xe]6s <sup>2</sup>
Fr [Rn]7s <sup>1</sup>	Ra [Rn]7s <sup>2</sup>



## 11. Configuraciones de Átomos Multielectrónicos

TABLA 9.2 Configuraciones electrónicas de algunos grupos de elementos

Grupo	Elemento	Configuración
1	H	$1s^1$
	Li	$[\text{He}]2s^1$
	Na	$[\text{Ne}]3s^1$
	K	$[\text{Ar}]4s^1$
	Rb	$[\text{Kr}]5s^1$
	Cs	$[\text{Xe}]6s^1$
17	Fr	$[\text{Rn}]7s^1$
	F	$[\text{He}]2s^2 2p^5$
	Cl	$[\text{Ne}]3s^2 3p^5$
	Br	$[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^5$
	I	$[\text{Kr}]4d^{10} 5s^2 5p^5$
18	At	$[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$
	He	$1s^2$
	Ne	$[\text{He}]2s^2 2p^6$
	Ar	$[\text{Ne}]3s^2 3p^6$
	Kr	$[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^6$
	Xe	$[\text{Kr}]4d^{10} 5s^2 5p^6$
Rn	$[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$	

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

64

## 12. Resumen del Tema

- A finales del siglo XIX se descubrieron los espectros atómicos de los elementos. Constituían un conjunto de rayas que identificaban al elemento y que permitieron descubrir numerosos elementos, desconocidos hasta entonces.
- La teoría cuántica de Planck establece que los átomos y moléculas emiten energía radiante en cantidades discretas (cuantos) y no en forma continua:  $E = h \cdot \nu$
- El modelo que desarrolló Böhrr para el átomo de Hidrógeno, explicaba adecuadamente el espectro de ese elemento.
- Con la teoría cuántica, Einstein explicó el efecto fotoeléctrico y propuso que la luz se comporta como un chorro de partículas (fotones). Planteó la dualidad onda-corpúsculo de la luz.

OCW 2011 © M<sup>a</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

65

## 12. Resumen del Tema

---

- De Broglie trasladó estas ideas a las partículas, de manera que cualquier partícula material debía tener asociada una onda.
- La ecuación de onda de Schrödinger describe los movimientos y energías de los electrones en un átomo. Esta ecuación revolucionó la física.
- Las funciones  $\psi$ , soluciones de la ecuación de onda, se llaman orbitales y dependen de 3 números cuánticos:  $n$ ,  $l$  y  $m$ . El valor de  $\psi$  representa la probabilidad de encontrar al electrón de un átomo en un punto del espacio. Hay orbitales  $s$ ,  $p$ ,  $d$ , ... cada uno de los cuales tiene una forma, tamaño y energía que le son propios.

## 12. Resumen del Tema

---

- El estado de un electrón viene dado por 4 números cuánticos: ( $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $s$ ).
- Para hallar la configuración fundamental de un átomo de un elemento se precisan tener en cuenta los siguientes criterios:
  - 1) Llenado de orbitales por orden creciente de energías.
  - 2) El Principio de Exclusión de Pauli.
  - 3) Las Reglas de Hund.