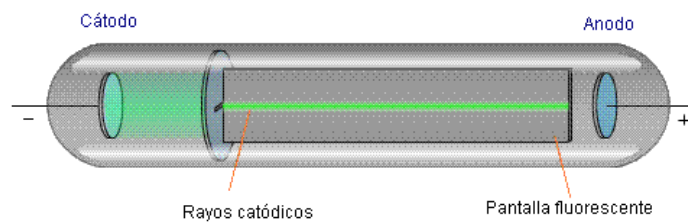


## MODELOS ATÓMICOS

Hasta finales del siglo XIX, con la teoría atómica de Dalton y la hipótesis de Avogadro podía explicarse el átomo y su comportamiento en las reacciones químicas, pero diversos experimentos han ido mostrando como los átomos están formados por diversas partículas y que por lo tanto no son indivisibles como decía Dalton.

### EL ELECTRÓN. MODELO ATÓMICO DE THOMSON

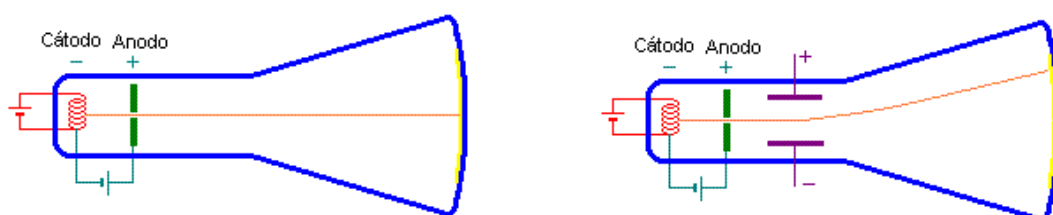
A finales del siglo XIX Geissler y Crooker realizaron varios experimentos en tubos llenos con diversos gases a muy baja presión (muy similares a los fluorescentes actuales), observando que conducían la corriente cuando se sometían a voltajes elevados.



Inicialmente se les llamó rayos catódicos porque parecían salir del cátodo (polo negativo) y posteriormente Stoney los bautizó con el nombre de electrones. Tenían las siguientes propiedades:

- Salen perpendicularmente del cátodo y se mueven en línea recta en ausencia de campos eléctricos y magnéticos
- Los campos eléctricos y magnéticos los desvían, probando que tienen carga eléctrica negativa.
- Son capaces de mover las aspas de un molinete de mica si se ponen en su camino, lo que prueba que son corpúsculos con masa
- Cuando chocan con algunas sustancias provocan su luminiscencia y producen calor, porque su energía cinética se transforma en energía térmica.
- Impresionan las películas fotográficas

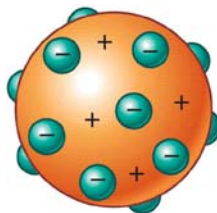
Thomson estudió los electrones en un tubo de vacío, precursor del tubo de televisión, que estaba formado por un filamento que, al calentarse con un circuito auxiliar, emite electrones por efecto termoiónico. Los electrones emitidos se aceleran hacia un ánodo perforado mediante una gran ddp y se hacen chocar sobre una pantalla de sulfuro de cinc o cualquier otra sustancia fluorescente.



Thomson, haciendo que no se desviaran al atravesar un campo eléctrico y otro magnético perpendicular, consiguió medir la relación entre la carga y la masa del electrón, por lo que recibió el premio Nóbel de física. Posteriormente Millikan (también Nóbel de física), en su famoso experimento de la gota de aceite (consiste en suspender en un campo eléctrico una gota de aceite previamente cargada) consiguió medir la carga del electrón y con ello calcular su masa. Así resulta que  $e = 1,6 \cdot 10^{-19} C$  y  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} Kg$

Modelo atómico de Thomson: Este supuso que, puesto que en el tubo se había practicado el vacío, los electrones debían provenir de los átomos del cátodo. En consecuencia los átomos no son indivisibles como decía Dalton ya que, al menos están formados por electrones y algo más bastante más pesado, puesto que la masa de los electrones es muy pequeña.

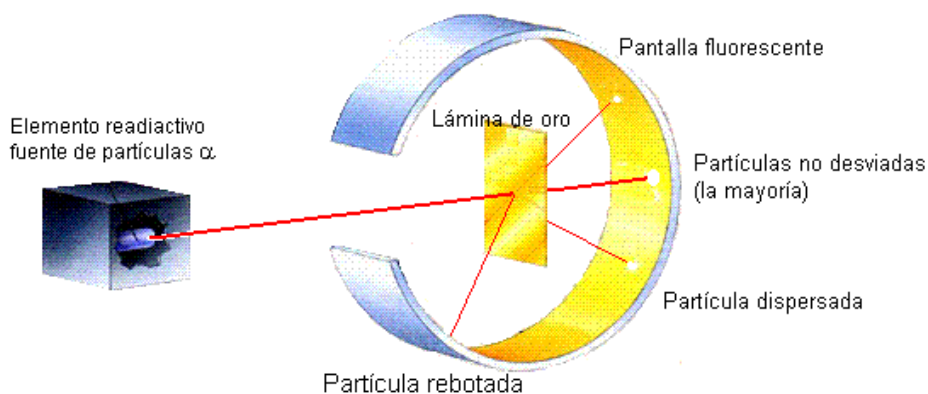
Puesto que los átomos son neutros, ese “algo más” debe tener carga positiva para compensar a la negativa de los electrones. Thomson, en una carta a un amigo suyo, hacía este mismo razonamiento y le decía que “los átomos deberían ser una esfera de materia cargada positivamente, en cuyo interior estaban incrustados los electrones, de la misma forma que las pasas en un bizcocho”. Por ese motivo a este modelo se conoce también como el pastel de pasas.



## MODELO DE RUTHERFORD

Becquerel había descubierto a final del XIX que ciertos elementos inestables, a los que se les llamó radiactivos, trataban de estabilizarse emitiendo partículas  $\alpha$ .  $\beta$  y radiación  $\gamma$ .

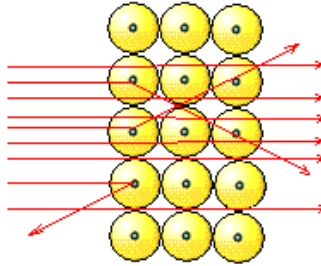
Rutherford y su ayudante Geiger estudiaban la naturaleza de las partículas  $\alpha$  haciéndolas incidir sobre una lámina muy delgada de oro y recogiéndolas sobre una pantalla fluorescente de sulfuro de cinc.



Lo que observaron es que:

- Casi todas las partículas atraviesan la lámina de oro sin desviarse
- Algunas pocas se desvían
- Algunas, muy pocas, rebotan que es lo más sorprendente.

Lo primero que se deduce es que el átomo está prácticamente hueco y por eso la mayoría de las partículas  $\alpha$  lo atraviesan sin desviarse. Debe tener una zona maciza muy pequeña cargada positivamente que es la que desvía a las partículas  $\alpha$  (que también son positivas) y debe ser muy pequeña porque solamente unas pocas son las que chocan con ella y rebotan.

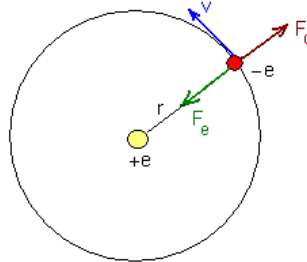


Rutherford elaboró un nuevo modelo para el átomo para explicar los resultados de su experimento, diciendo:

- El átomo está formado por dos partes: núcleo y corteza.
- El **núcleo** es la parte central, de tamaño muy pequeño, donde se encuentra toda la carga positiva y, prácticamente, toda la masa del átomo, es decir los protones y neutrones
- Girando, a gran distancia, se encuentran los electrones, que deben girar para que la fuerza centrífuga compense a la atracción eléctrica, de forma parecida al movimiento de los planetas, donde la fuerza centrífuga compensa al peso. (Como del núcleo a la **corteza** hay un espacio vacío muy grande, eso explicaría que la mayor parte de las partículas alfa atraviesan la lámina de oro sin desviarse.)
- En un átomo en estado normal, al ser neutro, tiene el mismo número de protones (+) en el núcleo que de electrones (-) en la corteza.

Rutherford descubrió los protones bombardeando nitrógeno con partículas  $\alpha$  y puesto que los protones tienen carga positiva, y en consecuencia deberían repelerse, Rutherford postuló la existencia de otra partícula de masa similar que sería la responsable de darle estabilidad. Años después Chadwick descubrió el neutrón y muchos años después Yukawa dio la primera explicación de la estabilidad de los núcleos.

De acuerdo con la idea de Rutherford, el átomo de hidrógeno está formado por un protón en el núcleo y un electrón girando a su alrededor a una distancia  $r$ , de tal manera que la fuerza de atracción eléctrica se compense con la fuerza centrífuga (SR Inercial)



$$F_{electr} = F_{centrif} \quad \Rightarrow \quad K \frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

de donde se puede despejar el radio de la órbita o bien la velocidad con la que debe girar para mantenerse:

$$v = \sqrt{\frac{Ke^2}{mr}}$$

$$r = \frac{Ke^2}{mv^2}$$

Como vemos, en el modelo de Rutherford cualquier radio es aceptable con tal que de gire con la velocidad adecuada, con lo que los espectros atómicos deberían ser continuos.

La energía del electrón en la órbita, que será la suma de la cinética más la potencial (la  $E_p$  es negativa porque las cargas del electrón y del protón tienen distinto signo:  $q=e$  y  $q'=-e$ )

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 - K \frac{e^2}{r}$$

sustituyendo  $v$

$$E = \frac{1}{2}m \left( \sqrt{\frac{Ke^2}{mr}} \right)^2 - K \frac{e^2}{r} = \frac{Ke^2}{2r} - \frac{Ke^2}{r} = -\frac{Ke^2}{2r}$$

La energía del electrón es función del radio de la órbita y aumenta con la distancia hasta hacerse cero en el infinito (ten en cuenta que es negativa).

Al modelo de Rutherford pronto se le encontraron dos fallos importantes:

- Si el electrón que es una carga gira debería radiar energía en forma de ondas electromagnéticas y por tanto iría perdiendo energía hasta caer en el núcleo.
- Puesto que todos los radios son posibles no explica que los electrones salten de unos niveles a otros y en consecuencia no puede explicar las rayas espectrales.

## PARTÍCULAS FUNDAMENTALES. CONCEPTOS PREVIOS

De acuerdo con lo anterior, en un átomo hay tres partículas fundamentales: protones y neutrones, (a los que se llama indistintamente con el nombre de nucleones porque están en el núcleo), y electrones en la corteza. Tienen las siguientes características:

	Masa (uma)	Masa (Kg)	Masa referida al electrón	Carga (C)	Carga referida al electrón
protón	1,007597	$1,67 \cdot 10^{-27}$	1836	$+1,6 \cdot 10^{-19}$	+1
neutrón	1,008982	$1,67 \cdot 10^{-27}$	1838	0	0
electrón	0,000549	$9,1 \cdot 10^{-31}$	1	$-1,6 \cdot 10^{-19}$	-1

Hoy día sabemos que de las tres partículas elementales que inicialmente se pensaba que formaban los átomos, solamente lo es el electrón. Los protones y neutrones a su vez están formados de otras partículas elementales llamadas quarks.

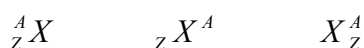
Número atómico (Z): Es el número de protones de un núcleo y es el que nos define al elemento químico. (Un átomo en estado normal tiene igual número de protones y electrones. Si pierde o gana electrones se convierte en un ión positivo o negativo del mismo elemento, pero si perdiera o ganara un protón se transformaría en otro elemento distinto, el anterior o posterior en la tabla periódica.)

Número másico (A): Es el número de protones y neutrones, es decir el número de nucleones.

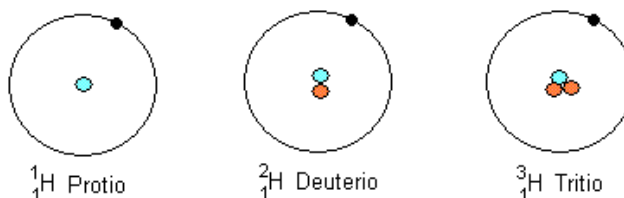
De acuerdo con esto, es evidente que el número de neutrones de un núcleo será:

$$N = Z - A$$

Los núcleos se representan con el símbolo del elemento y un número en la parte inferior que indica el número atómico (que es informativo, porque realmente es redundante) y otro número en la parte superior que indica su masa:



Isótopos: Son aquellos núcleos que tienen el mismo número de protones, y por tanto definen al mismo elemento, pero difieren en el número de neutrones y por tanto tienen distinta masa. Tienen igual Z y distinto A. El hidrógeno tiene tres isótopos:



Es importante recordar que las propiedades químicas de los elementos vienen determinadas por la disposición de los electrones de la última capa, así pues todos los isótopos de un elemento se comportan químicamente igual y en este aspecto son

indistinguibles. Sin embargo tienen distintas propiedades físicas, empezando porque tienen distinta masa y porque no todos tienen la misma estabilidad.

### Ejemplo 1:

Un isótopo del oxígeno tiene número de masa igual a 18. ¿Cuántos protones, neutrones y electrones tiene? ¿Y el ion  $O^{-2}$  de ese isótopo?

Al tratarse de oxígeno su número atómico no puede ser otro que  $Z=8$  ya que, como hemos dicho, el número atómico es el número de protones y define al elemento y viceversa. Como  $A=18$  y corresponde a la suma de protones y neutrones:

$$\begin{aligned}\text{Protones} &= Z = 8 \\ \text{Neutrones} &= A - Z = 18 - 8 = 10 \\ \text{Electrones} &= n^{\circ} \text{ Protones si es neutro} = 8\end{aligned}$$

El ion del oxígeno tiene su núcleo exactamente igual, es decir 8 protones y 10 neutrones, pero su carga eléctrica no es nula, sino que tiene dos cargas negativas, es decir que tienen 2 electrones de más, y por tanto  $8 + 2 = 10 e^{-}$ .

Masa atómica: Ya hemos visto que la mayoría de los elementos tienen varios isótopos en proporción prácticamente estable, por eso la masa atómica que se tabula se calcula haciendo la media ponderada de las masas de los isótopos según su abundancia relativa.

### Ejemplo 2:

La plata natural está formada por dos isótopos de masas 107 y 109 que se encuentran en las proporciones de 56% y 44% respectivamente. Calcular el peso atómico de la plata.

$$Pat_{Ag} = \frac{107 \cdot 56}{100} + \frac{109 \cdot 44}{100} = 107,88$$

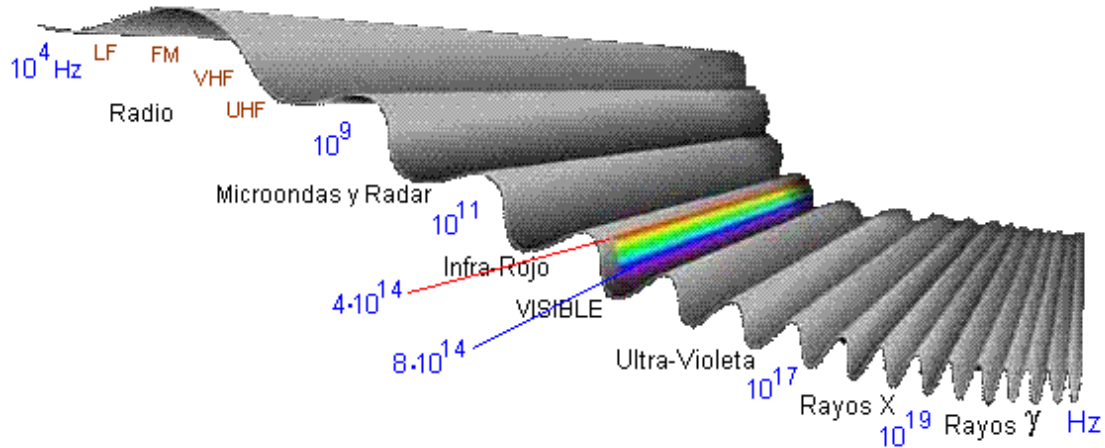
las unidades, son una/átomo o bien gr/mol

## ESPECTROS DISCONTINUOS. NIVELES DE ENERGÍA EN LOS ÁTOMOS

Ya sabemos que cuando la luz blanca se hace pasar a través de un prisma se descompone dando lugar a un espectro que contiene la totalidad de los colores desde el rojo al violeta, por lo que se llama espectro continuo, mientras que si solo hay unos pocos se llama espectro discontinuo.

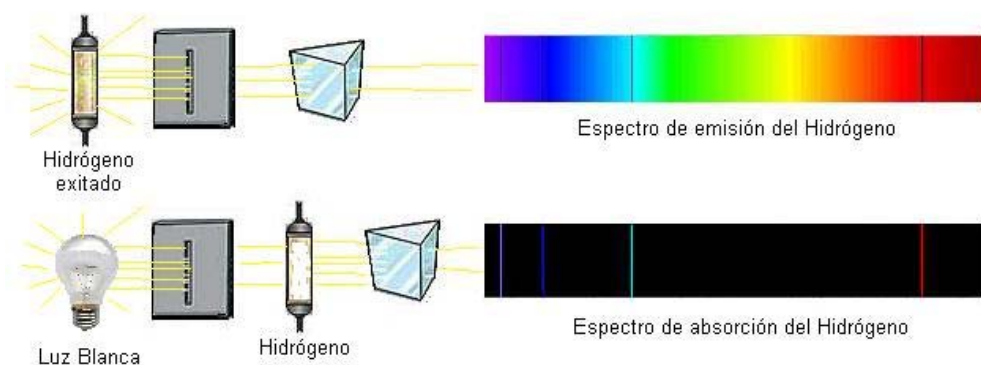
Ese fenómeno, llamado dispersión de la luz, se debe a que las distintas radiaciones que componen la luz, aunque todas tienen la misma velocidad en el vacío, tienen distinta velocidad cuando viajan a través de otro medio, por ejemplo del vidrio, de manera que las radiaciones de menor longitud de onda se desvían más y por eso se separan.

Las ondas electromagnéticas (OEM) son ondas transversales que no necesitan un medio material para propagarse. Se dividen en varios grupos según su frecuencia (o según su longitud de onda, ya que ambas están relacionadas por la velocidad de la luz  $c = \frac{\lambda}{\nu}$ )



Como puedes ver, las OEM de menor frecuencia, es decir de menor energía son las ondas de radio y las de mayor los rayos gamma. También puedes observar como hay una pequeña parte del espectro electromagnético que podemos detectar mediante el ojo. A esa zona se le llama visible y según la frecuencia de la OEM la vemos de un color u otro, de manera que realmente la diferencia entre una onda de radio, el color verde y un rayo X es simplemente su frecuencia.

Un espectro de emisión es el espectro de la luz que emite un cuerpo, mientras que si hacemos pasar la luz blanca a través del cuerpo y analizamos la luz que deja pasar, el espectro se llama de absorción. Ambos son complementarios, quiere decir que los colores que le faltan a uno son justamente los que tiene el otro.



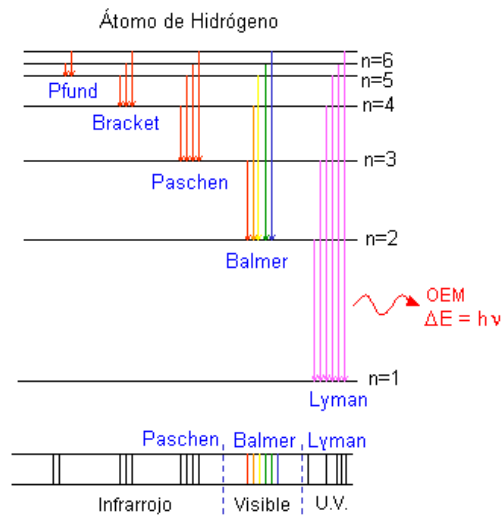
En un espectro atómico:

- El conjunto de líneas espectrales que se obtiene para un elemento concreto es siempre el mismo, incluso si el elemento forma parte de un compuesto complejo, es decir que cada elemento produce su propio espectro diferente al de cualquier otro elemento, y por lo tanto el espectro de un elemento es como si fuera su huella

digital, por eso inicialmente los químicos alemanes Kirchoff y Bunsen comenzaron a emplearlos como medio de análisis.

- Los espectros contienen rayas agrupadas en series espectrales que van desde el IR hasta el UV
- Cada serie está formada por infinitas rayas cada vez mas juntas hasta llegar al límite de la serie.

Si se descompone al luz emitida por un tubo de descarga lleno de hidrógeno, se obtiene su correspondiente espectro, en el que se pueden distinguir sus series espectrales. Una de ellas, la serie Balmer, cae dentro del visible, otra en el UV y el resto están en el IR.



El sueco Rydberg encontró empíricamente la relación que existía entre la longitud de onda de cada raya en cada una de las series:

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

- $R_H$  es la constante de Rydberg =  $1,09 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$
- $n_1$  y  $n_2$  son números enteros.
- $n_1$  determina la serie. Haciendo  $n_1=1$  se obtiene la serie Lyman, haciendo  $n_1=2$  se obtiene la serie Balmer, con  $n_1=3$  la serie Paschen, etc
- Limitando el valor de  $n_1$  para una serie concreta, el conjunto de rayas espectrales se obtiene dándole a  $n_2$  valores enteros consecutivos al valor de  $n_1$ , es decir  $n_2 = n_1+1, n_1+2, n_1+3, \dots$

Serie	$n_i$	$n_j$	Región del esp.
Lyman	1	2, 3, 4, ...	UV
Balmer	2	3, 4, 5, ...	Visible
Paschen	3	4, 5, 6, ...	IR
Brackett	4	5, 6, 7, ...	IR
Pfund	5	6, 7, 8, ...	IR



El modelo atómico de Rutherford era incapaz de explicar los espectros discontinuos de los átomos porque según éste el electrón puede girar en cualquier órbita (cualquier valor del radio es bueno) y por tanto el espectro debería ser continuo, y además porque al tratarse de una carga acelerada debería radiar OEM de la misma frecuencia que la frecuencia de revolución con lo que terminaría cayendo sobre el núcleo.

## HIPÓTESIS DE PLANCK

El físico alemán Max Planck en una conferencia el 14 de diciembre de 1900, que es una fecha histórica para la física, dijo que para poder explicar la radiación del cuerpo negro había que desechar la idea de que los cuerpos pueden absorber y emitir energía de forma continua.

Hay que admitir que la energía se absorbe y emite en forma de pequeños paquetes de energía, que llamó “cuantos” (posteriormente Einstein los llamó fotones) y su energía es proporcional a su frecuencia:

$$E = h\nu$$

$$h = \text{cte. de Planck} = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Según esto, un cuerpo puede absorber o emitir un fotón, o dos, o tres, es decir  $n \cdot h\nu$  donde  $n$  es un número entero, lo que quiere decir que “la energía está cuantizada”.

- Planck supuso que la radiación electromagnética era emitida por pequeños osciladores submicroscópicos que solo podían vibrar con múltiplos enteros de cierta frecuencia  $\nu$ , y no con cualquiera, así que radiaban energía en múltiplos de  $h\nu$ .
- Como el número de osciladores es enorme y cada uno de ellos oscila con una frecuencia distinta, el cuerpo puede emitir todas las frecuencias y el espectro es continuo.
- Planck partiendo de esta idea, absolutamente nueva, consiguió una fórmula empírica que reproducía exactamente la curva experimental de la radiación el cuerpo negro.

Planck puso los cimientos de la física moderna, pero no recibió el premio Nóbel por su descubrimiento del cuanto hasta varios años después, cuando Einstein hizo uso de éste concepto para explicar el efecto fotoeléctrico, quedando la revolucionaria idea fuera de dudas.

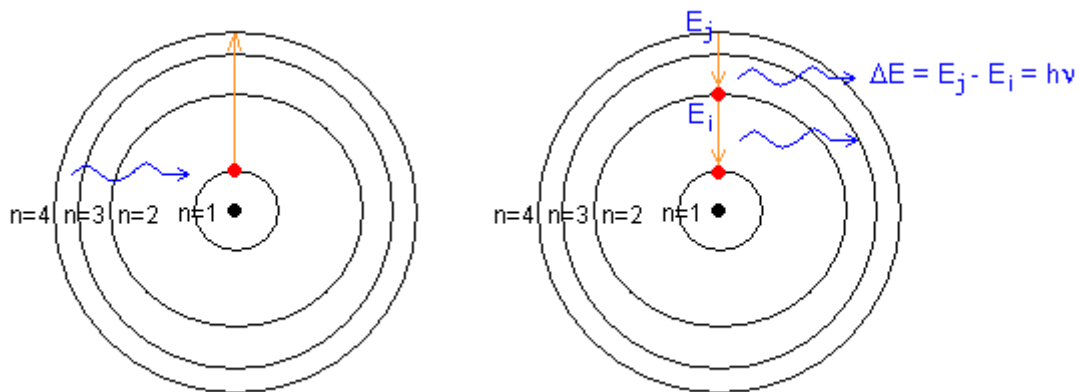
## MODELO ATÓMICO DE BOHR

La deducción teórica de la ecuación de Rydberg vino de mano de Bohr, que propuso un modelo atómico idéntico al de Rutherford, pero en el que el electrón solo puede girar en unas órbitas estacionarias, donde no emite energía, y que son aquellas en las que el momento angular del electrón es un múltiplo entero de  $h/2\pi$ .

$$l = rmv = n \frac{h}{2\pi}$$

donde  $n$  es un número entero que toma valores 1, 2, 3 ... e indica la órbita y se llama número cuántico principal.

Las transiciones electrónicas se producen absorbiendo y luego emitiendo un fotón de energía igual a la diferencia de energía entre los niveles y dan lugar a los espectros discontinuos. Así por ejemplo en el átomo de hidrógeno, que tiene un protón en su núcleo y un electrón, el electrón estará girando en el nivel  $n=1$ , que es el nivel de menor energía. Sin embargo podemos comunicar una energía a ese electrón y excitarlo, por ejemplo calentándolo, iluminándolo o estableciendo una ddp y en ese caso la energía que adquiere el electrón le hará saltar hasta una órbita más externa.



En la figura se muestra como un fotón excita al electrón, que inicialmente se encuentra en el nivel mas bajo de energía, y lo manda hasta el nivel 4. Posteriormente vuelve a su estado fundamental emitiendo un fotón correspondiente a la serie Balmer y otro a la serie Lyman.

La energía de los fotones es igual a la diferencia de energía entre los niveles entre los que salta:

$$\Delta E = E_j - E_i = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = hcR_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right)$$

$$R' = hcR_H = 2,16 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

Por ejemplo, el salto que se muestra en la figura, correspondiente a la segunda raya de la serie Balmer, corresponde a un fotón de:

$$\Delta E = E_4 - E_2 = 2,16 \cdot 10^{-18} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 4,06 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2,54 \text{ eV}$$

$$E = h\nu \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{E}{h} = \frac{4,06 \cdot 10^{-19}}{6,62 \cdot 10^{-34}} = 6,13 \cdot 10^{14} \text{ Hz (azul)}$$

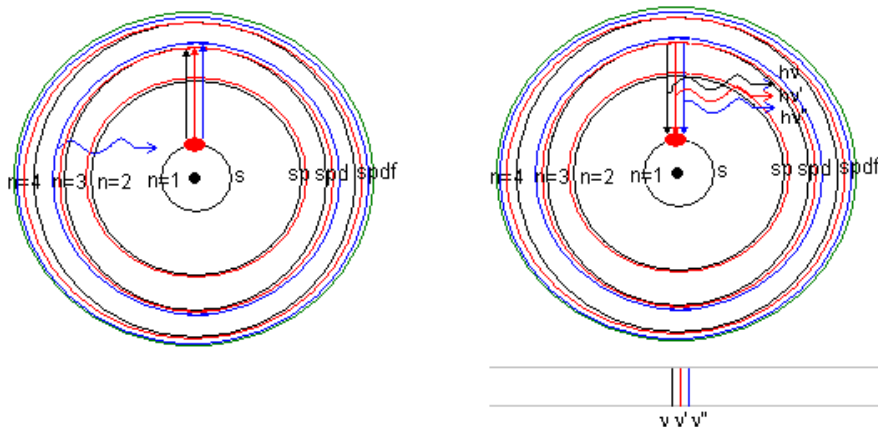
## MODELO ATÓMICO DE SOMMERFELD. NUMERO CUÁNTICO SCUNDARIO

El modelo de Bohr explicaba el espectro del átomo de hidrógeno pero no el de los demás átomos con más electrones, donde aparecían rayas desdobladas, indicando que los niveles estaban desdoblados.

Sommerfeld resolvió el problema diciendo que las órbitas podían ser circulares y elípticas y que los desdoblamientos de las rayas se debían a que los niveles estaban desdoblados en subniveles con órbitas con distintas excentricidades, introduciendo así el número cuántico secundario ( $l$ ) para designar el subnivel y que toma valores desde  $0$  hasta  $n-1$ , así:

nº cuántico principal (n)	nº cuántico secundario (l)	subniveles
n = 1	l = 0	S
n = 2	l = 0, 1	s, p
n = 3	l = 0, 1, 2	s, p, d
n = 4	l = 0, 1, 2, 3	s, p, d, f

De esta forma se explica el desdoblamiento de las rayas espectrales. Por ejemplo, cuando el electrón se excite y salte hasta el nivel  $n=3$  puede alojarse en cualquiera de los tres subniveles ( $s$ ,  $p$  y  $d$ ) que tiene, así que cuando vuelva a su estado inicial podrá emitir tres fotones de energía muy parecida, pero distinta y por eso en el espectro aparecen tres rayas muy juntas:



## HIPÓTESIS DE De BROGLIE

Durante el primer cuarto del siglo XX la física tenía un dilema sobre la naturaleza de la luz entre ondulatoria y corpuscular. Por una lado la radiación del cuerpo negro, el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y la interpretación de los espectros atómicos apuntaban hacia la naturaleza “cuántica” de la luz, mientras que los fenómenos de interferencias, difracción y polarización evidenciaban su naturaleza ondulatoria.

En 1924, Luis De Broglie en su tesis doctoral hizo el siguiente razonamiento:

- Si la luz está formada por corpúsculos, éstos se podrán caracterizar por su momento lineal como cualquier partícula:  $p=mc$  con lo que la ecuación de Einstein se podrá escribir como:

$$E = mc^2 = pc$$

- Si la luz es una onda se podrá caracterizar por su longitud de onda:

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

- Igualando ambas expresiones se deduce la relación entre la longitud de onda y el momento lineal de los fotones asociados a ella:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{o bien que} \quad \lambda = \frac{h}{mv}}$$

De Broglie hizo extensiva su hipótesis a todas las partículas en general, y en particular a los electrones diciendo: “A todo corpúsculo en movimiento se le puede asociar una onda, cuya longitud de onda es inversamente proporcional a su momento lineal”

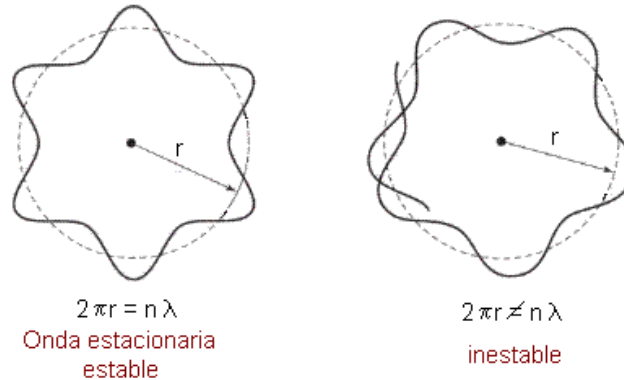
La hipótesis de De Broglie no tenía ningún apoyo experimental y por tanto debía confirmarse, es decir habría que conseguir fenómenos de difracción con electrones, lo que probaría que las partículas llevan asociada una onda.

Davisson y Germer, y poco después Thomson (hijo), consiguieron realizar experimentos de difracción con electrones haciendo incidir un haz de electrones sobre una superficie muy fina de níquel, obteniendo una figura de difracción similar a la que se obtiene por difracción de rayos X y a partir de la que podía calcularse la longitud de onda asociada a los electrones y que coincidía con la prevista por De Broglie.

De Broglie, mediante su hipótesis pudo demostrar lo que hasta entonces nadie había podido: El porqué las órbitas del modelo atómico de Bohr estaban cuantificadas, es decir que solo eran posibles aquellas en las que el momento angular del electrón es un múltiplo entero de  $h / 2\pi$

$$l = rmv = n\frac{h}{2\pi} \quad n=1, 2, 3, \dots$$

De Broglie dijo que si el electrón lleva asociada una onda, solo podrá girar en aquellas órbitas para las cuales la onda sea estacionaria, lo que solamente puede ocurrir cuando la longitud de la circunferencia sea un múltiplo entero de  $\lambda$ , porque en caso contrario la onda se autodestruiría por sucesivas interferencias:



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

Sustituyendo  $\lambda$  por el valor de De Broglie

$$2\pi r = n \frac{h}{mv}$$

organizando:

$$rmv = n \frac{h}{2\pi}$$

Una aplicación práctica de la dualidad onda-corpúsculo es el microscopio electrónico ideado por Müller. La limitación de un microscopio está en que no pueden resolverse imágenes mas pequeñas que la longitud de onda de la luz que emplea. Cuando empleamos luz del visible puede resolver hasta los 300 o 350 nm, así que no es posible ver algo que mida menos de eso.

Los rayos X en principio podrían ser una solución, porque tienen longitudes de onda entre 10 y 0,01nm, pero no valen porque son muy difíciles de enfocar y dan lugar a imágenes muy borrosas.

Los electrones sin embargo cuando se aceleran mediante un campo eléctrico pueden llegar a tener longitud de onda muy pequeñas, de hasta 0,001nm, (recuerda que de acuerdo con la expresión de De Broglie la longitud de onda es inversamente proporcional a la velocidad de los electrones  $\lambda = h / mv$ ) y los electrones son fáciles de enfocar utilizando campos eléctricos y magnéticos, como se hace en los tubos de TV.

### Ejemplo 3:

Razone si la longitud de onda de De Broglie de los protones es mayor o menor que la de los electrones en los siguientes casos:

- a) ambos tienen la misma velocidad.
- b) ambos tienen el mismo momento lineal?

a) Como sabemos la masa del protón es mucho mayor que la masa del electrón (algo más de 1800 veces mayor), por tanto si el protón y el electrón tienen la misma velocidad la longitud de onda del protón será menor:

$$\left. \begin{array}{l} \lambda_p = \frac{h}{m_p v} \\ \lambda_e = \frac{h}{m_e v} \end{array} \right\} \frac{\lambda_p}{\lambda_e} = \frac{h/m_p v}{h/m_e v} \Rightarrow \lambda_p = \lambda_e \frac{m_e}{m_p} \Rightarrow \lambda_p < \lambda_e$$

b) Si el protón y el electrón tienen el mismo momento lineal, ambos tendrán también la misma longitud de onda asociada, ya que  $\lambda = h/p$ . Evidentemente, como  $p = m_p v_p = m_e v_e$  para que ambas partículas tengan el mismo momento lineal deben tener distinta velocidad, porque tienen distinta masa.

## PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG

Como es de suponer, es imposible realizar una medida sin interaccionar de alguna manera con el sistema a medir, por ejemplo si para medir la temperatura de un líquido introducimos un termómetro en él, éste intercambiará calor con el líquido que manera que cuando alcance el equilibrio no nos dará la temperatura a la que realmente estaba el líquido. Pero claro el termómetro es muy pequeño y el error que introduce en la medida es insignificante.

En el mundo microscópico, sin embargo, los errores son más importantes. Supongamos que existiera un supermicroscopio con el que fuera posible ver el átomo de hidrógeno. Como el poder de resolución del microscopio depende de la longitud de onda empleada y es mas o menos igual a ella, resulta que tendríamos que iluminar al átomo con una luz de aproximadamente  $\lambda = 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ . Pero claro, un fotón de  $1 \text{ \AA}$  tiene una energía:

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = 6,6 \cdot 10^{-34} \frac{3 \cdot 10^8}{10^{-10}} = 1,98 \cdot 10^{-15} \text{ J} = 12375 \text{ eV}$$

Si tenemos en cuenta que el potencial de ionización (energía necesaria para arrancarle un electrón a un átomo) del átomo de hidrógeno es solo de 13,6 eV comprenderemos que la interacción con el átomo sería tan grande que de ninguna manera podríamos verlo como es en estado normal.

El principio de incertidumbre formulado por Werner Heisenberg dice que “es imposible conocer con exactitud y a la vez la posición y el momento lineal de una partícula. Cuanto mayor sea la precisión con que conocemos su posición, mayor será el error con que podemos conocer su momento lineal y viceversa, de forma que el producto de las incertidumbres siempre será mayor o igual que  $h/2\pi$ .”

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

Esta incertidumbre nada tiene que ver con los instrumentos de medida, sino que es intrínseca del hecho de medir.

Einstein extendió el principio de incertidumbre de Heisenberg a todas las parejas de magnitudes conjugadas, es decir que tuvieran las mismas dimensiones que la posición por el momento, es decir:  $ML^2T^{-1}$ , como ocurre con la energía y el tiempo, así que también puede escribirse como:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{2\pi}$$

#### Ejemplo 4:

- Calcular la longitud de onda asociada a un electrón que se mueve con una velocidad de  $6 \cdot 10^6$  m/s
- Calcular la longitud de onda asociada a una pelota de tenis de 100 g que se mueve con una velocidad de 100 m/s. Compara los resultados obtenidos.
- Si la velocidad del electrón y de la pelota estuvieran medidas con un error del 1% ¿Cuál es el error con que podría determinarse la posición del electrón y de la pelota?. Compara los resultados.

a) La velocidad del electrón se calcula teniendo en cuenta que:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 6 \cdot 10^6} = 1,22 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,22 \text{ \AA}$$

b) En el caso de la pelota, la longitud de onda asociada sería:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{0,1 \cdot 100} = 6,62 \cdot 10^{-35} \text{ m} = 6,62 \cdot 10^{-25} \text{ \AA}$$

Como puede verse, la longitud de onda del electrón es comparable a la de los rayos X y es del orden de las distancias interatómicas de los átomos en un cristal y por tanto es apropiada para producir fenómenos de difracción y poner de manifiesto las propiedades ondulatorias de la onda asociada al electrón.

Sin embargo, la longitud de onda asociada a la pelota de tenis es tan extremadamente pequeña que en la naturaleza no existe nada comparable y por tanto, en la práctica, resulta imposible poner de manifiesto la onda asociada a la pelota.

c) Supongamos ahora que las velocidades anteriores se han obtenido con un error del 1%. En el caso del electrón el error cometido habría sido de:

$$\Delta v = 6 \cdot 10^6 \cdot 0,01 = 6 \cdot 10^4 \text{ m/s}$$

Así que el error con que habríamos medido el momento lineal sería:

$$\Delta p = m\Delta v = 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 6 \cdot 10^4 = 5,46 \cdot 10^{-26} \text{ Kg} \cdot \text{m} / \text{s}$$

así que:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \geq \frac{h}{2\pi \cdot \Delta p} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{2\pi \cdot 5,46 \cdot 10^{-26}} = 1,9 \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

En el caso de la pelota:

$$\Delta v = 100 \cdot 0,01 = 1 \text{ m} / \text{s}$$

$$\Delta p = m\Delta v = 0,1 \cdot 1 = 0,1 \text{ Kg} \cdot \text{m} / \text{s}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \geq \frac{h}{2\pi \cdot \Delta p} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{2\pi \cdot 0,1} = 10^{-33} \text{ m}$$

Como vemos, en el caso del electrón la incertidumbre es del orden de las distancias interatómicas, y por lo tanto es importante, pero en el caso de la pelota es absolutamente despreciable porque no es ni siquiera del tamaño de un núcleo, es decir que a efectos prácticos podríamos decir que sí podríamos determinar con precisión la posición de la pelota.

En otras palabras, podemos decir que dada la pequeñez de la constante de Planck, la incertidumbre en nuestro mundo macroscópico es despreciable, pero no ocurre así en el mundo microscópico.

## DETERMINISMO Y PROBABILIDAD

Como consecuencia del principio de incertidumbre de Heisenberg no podemos situar al electrón en órbitas sencillas y bien definidas y además conocer su velocidad como puede hacerse en el modelo de Bohr, que nos permite calcular el radio (posición) y la velocidad (momento).

Schrodinger elaboró su mecánica cuántica ondulatoria partiendo de las ideas de De Broglie y suponiendo que los estados estacionarios de los átomos corresponden a ondas de materia estacionarias, a las que llamó función de onda  $\psi$ , que es una función de la posición y del tiempo.

El significado de la función de onda  $\psi$  es probabilístico y nos da la probabilidad de encontrar al electrón en un elemento de volumen  $dV$ :

$$P = \int_V \Psi^2 dV$$

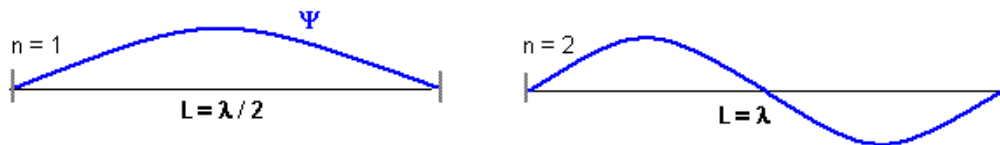
Los valores de probabilidad oscilan entre 0 y 1. Es importante recalcar que  $\psi^2$  nos da una medida de la probabilidad de encontrar al electrón en un volumen dado, es decir, no donde está, sino donde es probable que esté, y por tanto no contradice el principio de incertidumbre.



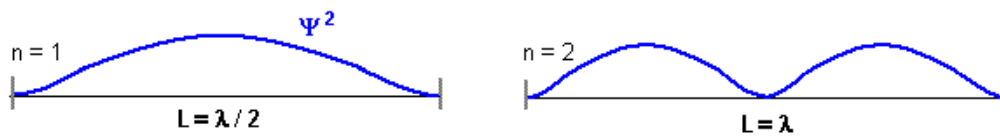
Supongamos el caso sencillo de una cuerda que está vibrando entre dos puntos. Como es natural, esos dos puntos entre los que vibra serán nodos y además solo podrá vibrar con unos determinados valores de  $\lambda$ , es decir que la longitud de onda está cuantizada ya que solo puede tomar valores para los que la longitud de la cuerda sea siempre un múltiplo entero de  $\lambda/2$

$$L = n \frac{\lambda}{2}$$

Por ejemplo dos modos posibles de vibración de la cuerda serían:



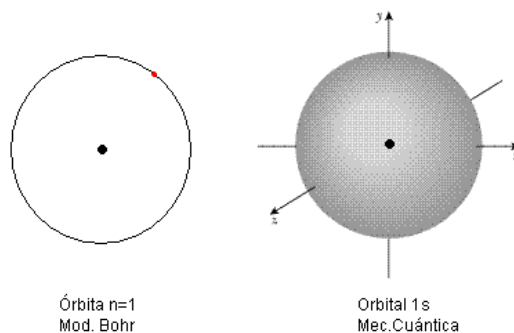
En el caso de una partícula encerrada entre esas paredes, la ecuación de esas ondas es la que se representa por  $\psi$ , y la probabilidad de encontrar a la partícula entre esas paredes viene dada por  $\psi^2$ :



Como puedes ver, para  $n=1$  es más probable que la partícula se encuentre en el centro, sin embargo una interpretación clásica daría la misma probabilidad en cualquier lugar.

Aplicando estos mismo conceptos al átomo se obtienen unas regiones de máxima probabilidad de encontrar al electrón que se llaman orbitales, por analogía con las desechadas órbitas de Bohr.

Los orbitales son regiones del espacio, alrededor del núcleo, donde hay máxima probabilidad de encontrar al electrón, por ejemplo en el desechado modelo de Bohr, el electrón del hidrógeno está girando en una órbita perfectamente definida, mientras que según el modelo de la mecánica cuántica no se puede saber exactamente donde está ni que hace, sino que hay mucha probabilidad de encontrarlo dentro de una esfera, donde la probabilidad es máxima para valores del radio predichos por Bohr:



Órbita n=1  
Mod. Bohr

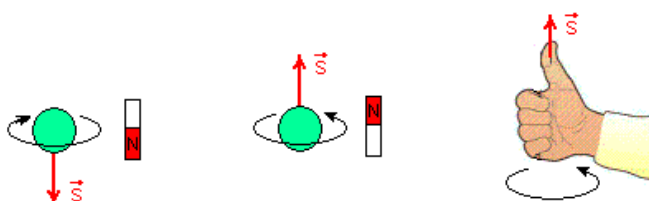
Orbital 1s  
Mec. Cuántica

## NÚMEROS CUÁNTICOS

De la ecuación de Schrodinger se deducen tres números cuánticos que definen inequívocamente cada uno de los orbitales atómicos, es decir cada orbital se define con tres números cuánticos;  $n$ ,  $l$  y  $m$ .

Los dos primeros ya fueron introducidos por Bohr y Sommerfeld. El número cuántico  $m$ , llamado también número cuántico magnético, explica el efecto Zeeman que consiste en un desdoblamiento de las rayas espectrales cuando espectro se obtiene en presencia de un campo magnético. El número cuántico magnético toma valores desde  $-l .. 0 .. +l$

En cada orbital cabe un máximo de 2 electrones y estos se distinguen mediante el número cuántico de espín, que toma valores de  $+\frac{1}{2}$  y  $-\frac{1}{2}$  e indica el sentido de giro del electrón sobre sí mismo.



Así que resumiendo tenemos:

- Número cuántico principal ( $n$ ) Indica el nivel y describe el tamaño del orbital, por ejemplo: los orbitales para los cuales  $n=2$  son más grandes que aquellos para los cuales  $n=1$ . Puede tomar cualquier valor entero empezando desde 1:  $n=1, 2, 3, 4$ , etc.
- Número cuántico secundario del momento angular orbital ( $l$ ) indica el subnivel. Puede tomar valores naturales desde 0 hasta  $n-1$  (siendo  $n$  el valor del número cuántico principal). Por ejemplo si  $n=4$ , los valores de  $l$  pueden ser:  $l=0, 1, 2, 3$ . Siguiendo la antigua terminología de los espectroscopistas, se designa a los orbitales atómicos en función del valor del número cuántico secundario,  $l$ , como:

$l = 0$  subnivel  $s$   
 $l = 1$  subnivel  $p$   
 $l = 2$  subnivel  $d$   
 $l = 3$  subnivel  $f$

- Número cuántico magnético ( $m_l$ ), determina la orientación espacial del orbital y es el que determina de definir el orbital. Puede tomar valores enteros desde  $-l$  hasta  $+l$ . Por ejemplo, si  $l=2$ , los valores posibles para  $m$  son:  $m_l=-2, -1, 0, 1, 2$
- Número cuántico de espín ( $s$ ), indica el sentido de giro del electrón y define a cada uno de los dos electrones que caben en un orbital. Toma dos valores:  $+1/2$  y  $-1/2$ .
- Un orbital queda definido por los números cuánticos  $n$ ,  $l$  y  $m$ . Mientras que un electrón necesita para quedar definido los 4 números:  $n$ ,  $l$ ,  $m$  y  $s$ .

Como ejemplo vamos a escribir todos los posibles estados de un electrón que esté en el nivel  $n=1$  y en el  $n=2$

n	l	m	s	orbital	Nº electrones posibles
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	1s	2
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2s	2
	1	-1, 0, +1	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}$	2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub> , 2p <sub>z</sub>	6

### Ejemplo 5: E4B.S2009

Conteste a las siguientes cuestiones relativas a un átomo con  $Z=7$  y  $A=14$ :

- Indique el número de protones, neutrones y electrones
- Escriba su configuración electrónica e indique el número de electrones desapareados en su estado fundamental.
- Cual es el número máximo de electrones para los que  $n=2$ ,  $l=0$  y  $m=0$  ?

a) Teniendo en cuenta que el número atómico ( $Z$ ), por definición, es el número de protones y que en número de masa ( $A$ ) es el número de protones+neutrones:

$$\begin{aligned} \text{Protones} &= Z = 7 \\ \text{Neutrones} &= A - Z = 14 - 7 = 7 \\ \text{Electrones} &= \text{nº Protones si es neutro} = 7 \end{aligned}$$

- Este apartado lo dejaremos para más adelante
- Tres números cuánticos definen un orbital, y en cualquier orbital caben como máximo 2 electrones con spines  $+1/2$  y  $-1/2$ . (por cierto que el orbital definido por los números cuánticos  $n=2$ ,  $l=0$  y  $m=0$  es el orbital 2s )

### Ejemplo 6: E1A.S2006

Dados los conjuntos de números cuánticos:  $(2,1,2, \frac{1}{2})$ ;  $(3,1,-1, \frac{1}{2})$ ;  $(2,2,1,-\frac{1}{2})$ ;  $(3,2,-2, \frac{1}{2})$

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

a) Como sabemos, los cuatro números cuánticos definen la posición de un electrón, pero deben ser coherentes con los valores que pueden tomar, así que empezaremos desde el número cuántico principal viendo los posibles valores del resto:

$$(2,1,2, \frac{1}{2}) \quad n \in (2) \rightarrow l = 0, 1$$

↓  
 $m = -1, 0, 1$

Imposible, el número cuántico  $l=1$ , no puede dar lugar a un número cuántico  $m=2$ , porque  $m$  solo puede tomar valores desde  $-l$  hasta  $+l$ .

$$(3,1,-1, \frac{1}{2}) \quad n \in (3) \rightarrow l = 0, 1, 2$$

$$\downarrow$$

$$m = (-1), 0, 1$$

$$\downarrow$$

$$s = -1/2, +1/2 \quad \text{Correcto}$$

$$(2,2,1,-\frac{1}{2}) \quad n \in (2) \rightarrow l = 0, 1$$

Imposible, el número cuántico  $l$  toma valores desde  $0$  hasta  $n-1$ , y por tanto su valor máximo sería  $1$ , nunca  $2$ .

$$(3,2,-2, \frac{1}{2}) \quad n \in (3) \rightarrow l = 0, 1, 2$$

$$\downarrow$$

$$m = (-2), -1, 0, 1, 2$$

$$\downarrow$$

$$s = -1/2, +1/2 \quad \text{Correcto}$$

b) El electrón  $(3,1,-1, \frac{1}{2})$  está en el orbital definido por  $(3,1,-1)$  que corresponde a un orbital  $3p$ .

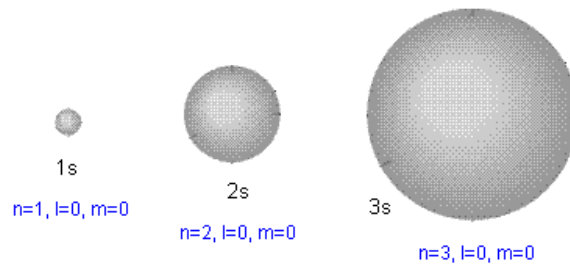
El electrón  $(3,2,-2, \frac{1}{2})$  está en el orbital  $(3,2,-2)$  que corresponde a un orbital  $3d$ .

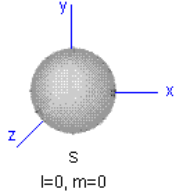
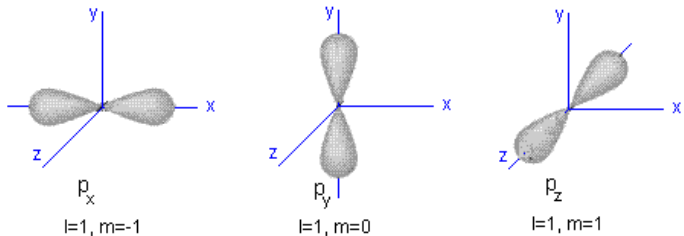
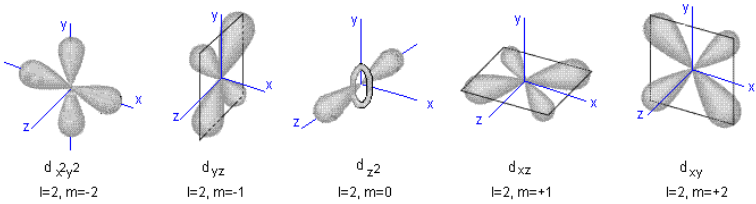
## ORBITALES ATÓMICOS

Ya hemos dicho qué se entiende por orbital y qué los define:

- Un orbital es una región del espacio, alrededor del núcleo, donde hay máxima probabilidad de encontrar al electrón
- Un orbital queda definido por los 3 números cuánticos  $n$ ,  $l$  y  $m$ .
- En cualquier orbital caben un máximo de 2 electrones con espines  $+1/2$  y  $-1/2$ .

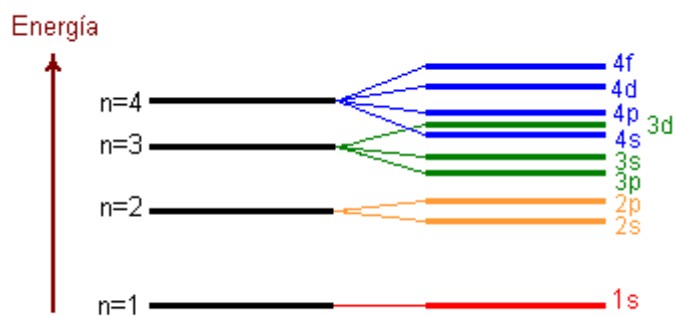
Ahora vamos a ver su forma, es la misma para todos los niveles, solo que cada vez son mayores, así por ejemplo en subnivel  $s$ , que tiene simetría esférica, de los niveles  $n=1$ ,  $n=2$  y  $n=3$  sería:



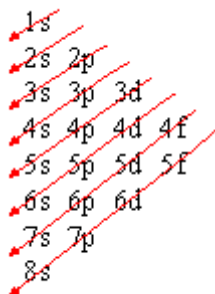
$s$ $l=0$	$m=0$ un orbital simetría esférica	
$p$ $l=1$	$m=-1, 0, 1$ tres orbitales de dos lóbulos según los ejes	
$d$ $l=2$	$m=-2, -1, 0, 1, 2$ cinco orbitales multilobulares	
$f$ $l=3$	$m=-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ siete orbitales multilobulares	

Por último nos queda ver como es la energía de los distintos orbitales:

- La energía de los nivel aumenta con el nivel, como ya sabemos por el modelo de Bohr, y por supuesto la energía de los subniveles asociados a cada nivel también va aumentando.
- Cuando un nivel se desdobra, parte de los subniveles que lo componen tienen menos energía que él, mientras que otra parte de ellos son más energéticos.
- Como los niveles cada vez están mas juntos, al desdoblarse a veces se solapan y los subniveles superiores tienen menos energía que algunos inferiores:



Para recordar el orden energético de los subniveles ayúdate del siguiente esquema, en el que cada fila representa un nivel y en él se han representado los distintos subniveles (solo los necesarios) teniendo forma simétrica. Para averiguar la energía de cada subnivel no tienes más que seguir el orden de las flechas:



Siguiendo las flechas obtendrás el orden siguiente: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s ...

## DISTRIBUCIÓN DE ELECTRONES. CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

El orden de llenado de los electrones en los átomos, llamado principio de construcción, obedece a tres reglas básicas:

- Los electrones tratan siempre de ocupar los niveles y subniveles de menor energía, lo que supone una tendencia general de la naturaleza. Para recordar el orden energético recordaremos la regla nemotécnica anterior.
- Principio de exclusión de Pauli: En cada orbital solo puede haber un máximo de dos electrones con espines opuestos, lo que se suele enunciar también como que “en un átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales”.
- Principio de máxima multiplicidad de Hund: Cuando varios electrones entran en un mismo subnivel orientan sus espines de manera que haya el máximo de electrones desapareados, es decir que sus orbitales se llenan primero con electrones del mismo espín y cuando todos los orbitales están semilLENOS en la segunda vuelta empiezan a aparearse con electrones de espín contrario.

Siguiendo estas tres sencillas reglas podemos construir una tabla de la siguiente forma:

- Representamos mediante circulitos a los orbitales
- Vamos dibujando hacia abajo los niveles y en ellos los subniveles que hay en cada uno, así como el número de orbitales que hay en cada subnivel, recordando que caben dos electrones: uno arriba con espín  $+\frac{1}{2}$  y otro abajo con espín  $-\frac{1}{2}$
- Empezamos a numerar desde arriba siguiendo el orden de llenado (regla nemotécnica) y teniendo en cuenta, que según la regla de Hund, cuando lleguemos a un subnivel con varios orbitales, primero numeramos los de arriba y luego los de abajo.
- Hemos colocado sobre cada número el elemento del mismo Número Atómico

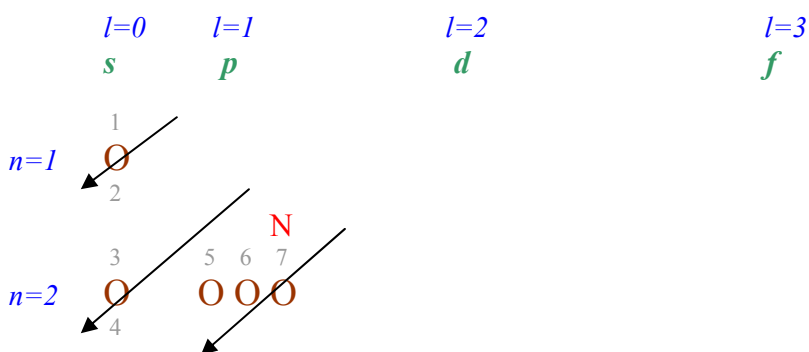
	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
$n=1$	H 1 ○ 2 He			
$n=2$	Li 3 ○ 4 Be	B C N 5 6 7 ○ ○ ○ 8 9 10 O F Ne		
$n=3$	Na 11 ○ 12 Mg	Al Si P 13 14 15 ○ ○ ○ 16 17 18 S Cl Ar	Sc Ti V Cr Mn 21 22 23 24 25 ○ ○ ○ ○ ○ 26 27 28 29 30 Fe Co Ni Cu Zn	
$n=4$	K 19 ○ 20 Ca	Ga Ge As 31 32 33 ○ ○ ○ 34 35 36 Se Br Kr	Y Zr Nb Mo Tc 39 40 41 42 43 ○ ○ ○ ○ ○ 44 45 46 47 48 Ru Rh Pd Ag Cd	La Ce Pr Nd Pm Sm Eu 57 58 59 60 61 62 63 ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ 64 65 66 67 68 69 70 Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb
$n=5$	Rb 37 ○ 38 Sr	In Sn Sb 49 50 51 ○ ○ ○ 52 53 54 Te I Xe	Lu Hf Ta W Re 71 72 73 74 75 ○ ○ ○ ○ ○ 76 77 78 79 80 Os Ir Pt Au Hg	Ac Th Pa U Np Pu Am 89 90 91 92 93 94 95 ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ 96 97 98 99 100 101 102 Cm Bk Cf Es Fm Md No
$n=6$	Cs 55 ○ 56 Ba	Tl Pb Bi 81 82 83 ○ ○ ○ 84 85 86 Po At Rn	Lr Rf 103 104 105 ○ ○ ○ ○ ○	
$n=7$	Fr 87 ○ 88 Ra	○ ○ ○		
$n=8$	○			

**Configuración electrónica:** Es una especie de fórmula electrónica que indica los electrones que tiene un elemento o ión, así como su disposición en los distintos niveles y orbitales. Para obtenerla no hay más que:

- 1 escribir la tabla vacía
- 2 empezar a contar hasta llegar al número de electrones del átomo (Su número atómico si es un átomo en estado fundamental). Una vez que nos sepamos bien la situación de cada elemento en la tabla ni siquiera necesitaremos conocer el número atómico, porque simplemente colocamos el elemento y vamos contando hasta llegar a su posición.
- 3 contar los electrones y escribirlos como sigue: un número que indica el nivel seguido de la letra que identifica al subnivel elevada a un número igual a los electrones que hay en el subnivel. (evidente mente la suma de los exponentes es el total de electrones e igual al número atómico del átomo en estado fundamental)

### Ejemplo 5b:

Escribir la configuración electrónica de un elemento, sabiendo que  $Z=7$  ¿Qué elemento es?



la configuración electrónica sería:  $1s^2 2s^2 p^3$  que obviamente corresponde a la posición que debe ocupar el nitrógeno.

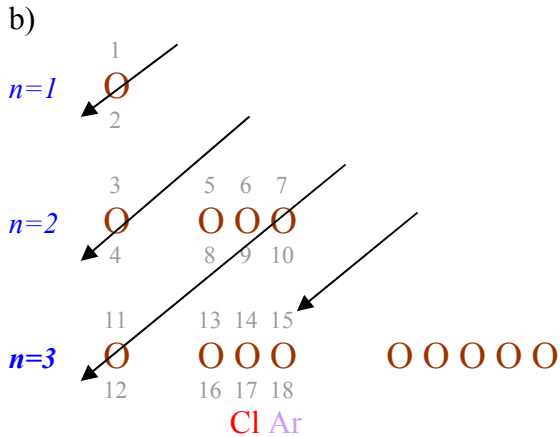


**Ejemplo 7:** E1B.S2008

Para el ión  $\text{Cl}^-$  ( $Z=17$ ) del isótopo cuyo número másico es 36:

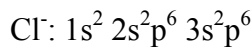
- Indique el número de protones, electrones y neutrones.
- Escriba su configuración electrónica.
- Indique los valores de los números cuánticos de uno de los electrones externos.

- a)
- |            |   |  |
|------------|---|--|
| Protones   | = | $Z = 17$                                     |
| Neutrones  | = | $A - Z = 36 - 17 = 19$                       |
| Electrones | = | $n^\circ \text{ Protones} + 1 = 17 + 1 = 18$ |



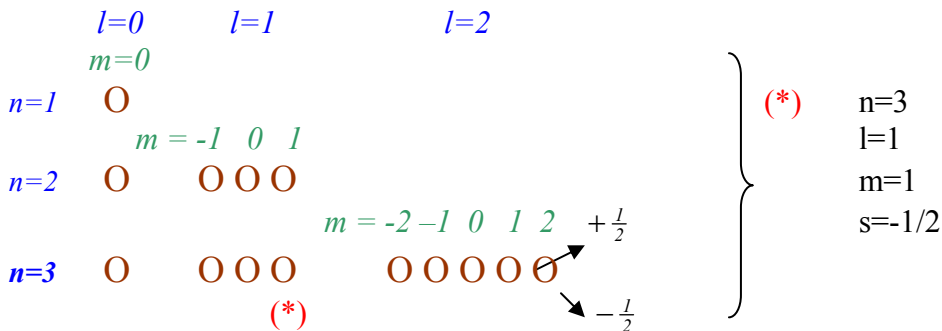
La configuración electrónica del cloro es  $\text{Cl}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Y la configuración electrónica de su ión, que tienen un electrón más es:



Que coincide con la configuración electrónica del gas noble más próximo, que en este caso es el Argón. Sin embargo, aunque el ión cloruro y el argón tengan el mismo número de electrones y la misma configuración electrónica (se dice que son isoelectrónicos) no son iguales, porque en sus núcleos siguen teniendo 17 protones el cloruro y 18 el argón, que como dijimos es lo que realmente los identifica como tales elementos.

- c) El electrón más externo, obviamente es el número 18, el que tienen de más, y sus números cuánticos, como se deduce de la figura de la tabla, que como ves aquí también te ayuda bastante, son:



### Ejemplo 8: E3B.S2007

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:

- La que no cumple el principio de exclusión de Pauli.
- La que no cumple el principio de máxima multiplicidad de Hund.
- La que, siendo permitida, contiene electrones desapareados.

En primer lugar vamos a dibujar esas configuraciones electrónicas y después respondemos a las preguntas:

a) El principio de exclusión de Pauli lo que dice es que no puede haber dos electrones con los 4 números cuánticos iguales, dicho de una forma mas simple: que no puede haber dos electrones ocupando el mismo sitio.

b) El principio de máxima multiplicidad de Hund dice que cuando varios electrones entran en un mismo subnivel, sus orbitales se llenan primero con electrones del mismo spin, es decir que primero llenaremos los de arriba y cuando haya entrado un electrón en cada orbital empezaremos a aparearlos.

Configuración electrónica	Disposición de electrones, según la c.e.	Pauli	Hund	Nº electrones desapareados
A : $1s^2 3s^1$	$n=1$ $n=2$ $n=3$	√	√	1 Litio
B : $1s^2 2s^3$	$n=1$ $n=2$ $n=3$	No puede haber 3 electrones en un subnivel s		
C : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	$n=1$ $n=2$ $n=3$	√	√	1 Cloro
D : $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^0 2p_z^0$	$n=1$ $n=2$ $n=3$	Se cumple, porque no hay 2e con los 4 nº cuánticos iguales	No se cumple porque el último electrón debería tener el mismo spin que el anterior	