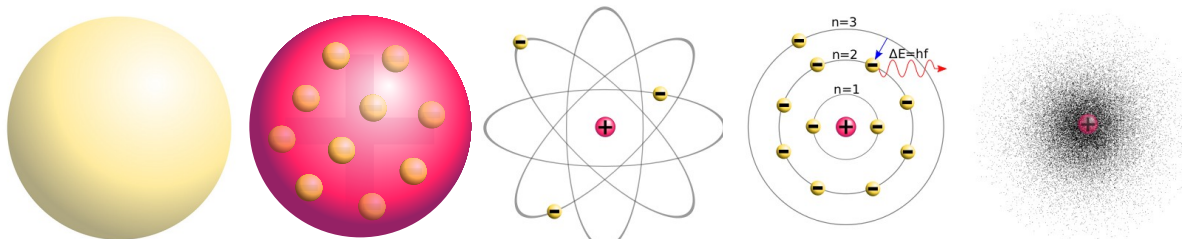




Estos pretenden ser unos apuntes de teoría, al mismo tiempo “resumen” por nivel bachillerato y por revisión de conceptos ya tratados en cursos anteriores, y amplios por el tema tratado. En Química de 2º los contenidos sobre física cuántica son amplios, con temas comunes a Física 2º: hipótesis de Planck, efecto fotoeléctrico, dualidad onda-corpúsculo, incertidumbre (cuántica), origen y evolución de los componentes del Universo (cosmología, física nuclear), y quarks (física de partículas). Se pueden ver ejercicios PAU Química asociados en www.fiquipedia.es, son simples, con pocos conceptos y fórmulas (centrados en configuración electrónica y propiedades periódicas, tratando a veces energía fotones, espectro, Rydberg, y efecto fotoeléctrico).

1. Estructura atómica. Modelos atómicos: evolución histórica y sus limitaciones

Se intenta dar primero una visión histórica global simplificada, marcando los modelos principales (no se indican Sommerfeld, Schrödinger, Dirac), indicando limitaciones que hacían necesario un nuevo modelo que sustituyese al anterior, y detallando los dos últimos grandes modelos atómicos: Bohr y el cuántico actual.



Modelo Clásico/Dalton

Thomson, [wikimedia](https://es.wikipedia.org/wiki/Modelo_de_Thomson)

Modelo Rutherford

Modelo Bohr

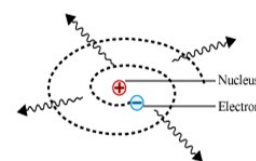
Modelo Cuántico

Hasta el modelo de Rutherford se asume conocido de cursos anteriores, y no se detalla de nuevo. En ese modelo se introduce el núcleo y su estructura ha evolucionado con el tiempo, incorporando los neutrones, detectados en 1932, y posteriormente los quarks como constituyentes de protones y neutrones, pero al hablarse de modelos atómicos, una vez que Rutherford propone el núcleo, las variaciones se encuentran en la corteza, que va a ser la responsable de las propiedades químicas de los átomos.

La idea de los átomos (a-tomo=sin partes) surge en filósofos griegos, pero no pasa a ser una teoría hasta el siglo XIX cuando Dalton establece su teoría atómica para explicar leyes ponderales de la química. Los átomos clásicos y de Dalton son indivisibles, sin estructura interna. Con el descubrimiento del electrón a finales del siglo XIX y la naturaleza eléctrica de la materia, se hace necesario ubicar los electrones en el átomo y ubicar la carga positiva para que la materia sea neutra, con lo que surge el modelo de Thomson a principios del siglo XX. Pero las investigaciones de Rutherford sobre radiactividad le llevan a realizar con Geiger y Marsden el experimento de la lámina de oro (se asume conocido), que Rutherford interpreta años más tarde proponiendo su modelo en 1911. Su modelo establece una estructura básica que aún se mantiene: un núcleo muy pequeño con carga positiva, y una corteza donde están los electrones. Los dos últimos modelos se detallan más adelante: de manera breve en el modelo de Bohr los electrones están en capas pero todavía en órbitas, se aplican algunas ideas de mecánica cuántica. En el modelo cuántico ya no hay órbitas sino orbitales, zonas con probabilidad de encontrar electrones.

Para introducir los dos últimos modelos, comenzamos detallando dos limitaciones importantes que tenía el modelo de Rutherford:

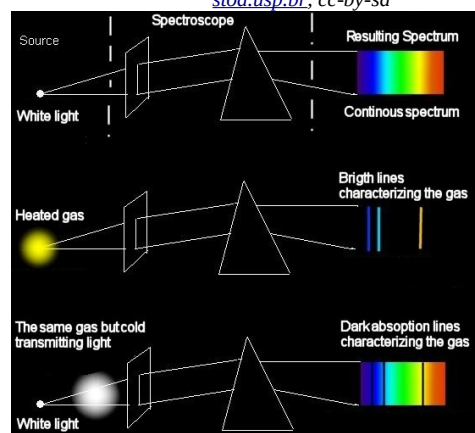
Estabilidad del átomo: según la física clásica, una partícula cargada acelerada debe emitir radiación y energía, por lo que el electrón no debería tener una órbita estable sino en espiral colisionando con el núcleo, por lo que los átomos no serían estables.



stoa.usp.br, cc-by-sa

Espectros atómicos: al aplicar un voltaje elevado a un gas, emite luz cuyo espectro solamente tiene ciertas frecuencias (λ); es discontinuo a diferencia del espectro de emisión de materia condensada (se asume conocido el concepto de espectro). Cada elemento tiene un espectro distinto, el del hidrógeno era el más sencillo, y estaba muy estudiado: varios espectroscopistas habían encontrado leyes matemáticas que seguían sus líneas espectrales, pero no había una explicación física sobre por qué era discontinuo ni el por qué de esas distribuciones de las líneas. Para las distintas agrupaciones de líneas (series), Rydberg encontró una expresión general a todas ellas. La expresión para la inversa de la longitud de onda

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right); n_i < n_j \quad \text{Cte de Rydberg: } R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$



Principios espectralis, amateurspectroscopy.com





2.2 Efecto fotoeléctrico

Descubierto por Hertz en 1887, al experimentar la emisión de ondas de radio, comprobó que si se iluminaban electrodos metálicos con luz ultravioleta, la chispa saltaba más fácil que en oscuridad.

El efecto fotoeléctrico estaba bien descrito experimentalmente pero la física clásica no lo podía explicar:

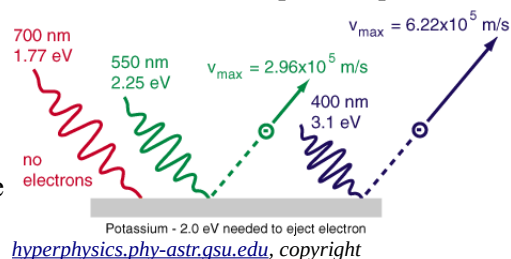
1. El efecto fotoeléctrico sólo se produce si la frecuencia de la luz incidente es igual o superior a un valor propio de cada metal, que se llama **frecuencia umbral**.

2. Al aumentar la intensidad de la luz incidente aumenta proporcionalmente el número de electrones emitidos

3. La energía cinética máxima de los electrones emitidos (medible con potencial de frenado) no depende de la intensidad de la luz incidente, pero sí depende de la frecuencia.

4. El efecto fotoeléctrico se produce “instantáneamente” tras la incidencia de la luz, aunque sea débil.

“Explicación” con física clásica: la luz al llegar al metal le transfería energía al electrón y si la energía era suficiente lo arrancaba, produciendo el efecto fotoeléctrico, por lo que asumía que si la luz era débil, no podía producirse el efecto fotoeléctrico, y que si era intensa, siempre debía producirse, lo que contradice punto 1. Cuando la frecuencia es superior a la umbral asumía que al aumentar la intensidad de la luz debía aumentar el número de electrones emitidos y su energía, lo que contradice punto 3. Si la intensidad es muy débil la luz tendrá poca energía, y habrá un retardo temporal hasta que se acumulase la energía necesaria, lo que contradice punto 4. No explica por qué hay frecuencia umbral y dependencia de la frecuencia (1, 3).



2.2.1 Luz como partícula con cuanto de energía, fotones

Einstein en 1905 (Nobel 1921 por esto, no por relatividad) explica el efecto fotoeléctrico. Partiendo de la idea de Planck de que la energía radiada está cuantizada, sugiere que la luz está formada por paquetes / cuantos de energía, **fotones**, que son partículas indivisibles, sin masa, e introduce una idea básica de interacción luz-materia, que se hace entre fotones y electrones. Lo que indica Planck y Einstein no es lo mismo, citando a Einstein “Aunque la cerveza se venda siempre en botellas de una pinta, eso no implica que la cerveza conste de porciones indivisibles de una pinta”

Explicación cuántica del efecto fotoeléctrico: un fotón tiene una energía $E=hf$, mayor según la frecuencia. Existe una energía mínima necesaria para extraer un electrón del metal, que se llama **trabajo de extracción ó función de trabajo (W_0)**. Al chocar un fotón con un electrón este absorbe su energía; si su energía es igual o superior a W_0 se produce efecto fotoeléctrico, pero si la energía es menor, no es extraído y no se produce efecto fotoeléctrico: como $E=hf$ explica la existencia de frecuencia umbral y de que el electrón sea extraído sin retardo con luz muy débil. La intensidad de la luz está asociada a la cantidad de fotones; para una frecuencia dada, si aumenta la intensidad aumentará en la misma proporción el número de electrones extraídos. Si la energía del fotón es superior a W_0 , tras el choque el exceso de energía pasará a energía cinética del electrón, por lo que se puede plantear $E_{\text{fotón}}=W_0+E_{\text{c máxima}}$, que al sustituir da la **ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico: $hf=W_0+\frac{1}{2}mv_{\text{máx}}^2$** . Esta expresión también explica que la energía cinética máxima de los electrones emitidos dependa de la frecuencia de la luz incidente.

>En problemas de efecto fotoeléctrico, las unidades de energía habituales son eV, ya que es del orden de magnitud de la energía asociada a los fotones cercanos a la luz visible y a la energía asociada a los trabajos de extracción. Un eV es la energía que gana un electrón cuando es acelerado con una diferencia de potencial de 1 V, y numéricamente $1 \text{ eV}=1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. En un flujo luminoso hay gran cantidad de fotones, que liberan gran cantidad de electrones; es habitual utilizar el concepto de mol de fotones y de electrones.

>Hablar de fotones supone retomar la teoría corpuscular cuando la teoría ondulatoria estaba aceptada, y un nuevo problema para la física clásica, explicar el carácter ondulatorio (difracción) y corpuscular de la luz; al tiempo campo electromagnético que llena todo el espacio y fotones discontinuos.

2.3 Estabilidad del átomo y espectros atómicos

El problema es el descrito como limitaciones del modelo de Rutherford.

2.3.1 Modelo atómico de Bohr

Bohr en 1913 (Nobel 1922) propone un modelo atómico que explica la estabilidad del átomo y el espectro de Hidrógeno. Lo hace partiendo de las ideas de Planck y de Einstein, aplicándolas al movimiento del electrón alrededor del núcleo, siendo las ideas básicas que los electrones describen órbitas circulares que tienen niveles de energía y momento angular cuantizados, y cuando el electrón pasa de una órbita a otra absorbe o emite un fotón con la diferencia de energía entre órbitas. Introduce el número cuántico principal n , de modo que solo

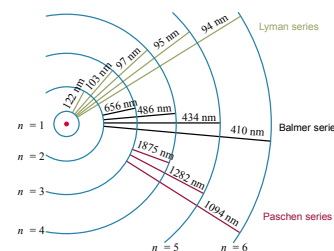




existen las órbitas para las que n es un nº entero. El modelo de Bohr considera las órbitas estacionarias, por ello los electrones no radian energía. Según el modelo de Bohr, n indica el nivel de energía / el tamaño de la órbita, de modo que si la energía en el exterior del átomo es 0, en un nivel es $E = -cte/n^2$, y la diferencia de energía asociada a un salto/transición será $\Delta E = cte(1/n_i^2 - 1/n_f^2)$, que es la expresión de Rydberg.

El mérito del modelo de Bohr es darle interpretación física a esa ecuación, obteniendo la constante de Rydberg en función de otras constantes físicas.

$$R = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c}$$



Transiciones hidrógeno, OrangeDog cc-by

2.4 Limitaciones del modelo atómico de Bohr

No explica cómo se producen los saltos cuánticos, ya que en las transiciones electrónicas el electrón pasa de una órbita a otra sin estar en ningún punto intermedio. Solamente explicaba el espectro de Hidrógeno y no explicaba fenómenos asociados como el efecto Zeeman (1897) y efecto Stark (1913), que suponen el desdoblamiento de líneas del espectro ante la presencia de un campo magnético y eléctrico respectivamente. Bohr sabía que su modelo era provisional (solamente duró 3 años), y propuso crear una **mecánica cuántica** (es la primera vez que se usa el término) que aplique a nivel atómico, y que esté basada sólo en modelos teóricos respaldados con experimentos y no en visión tradicional, ya que toda la mecánica clásica, toda nuestra intuición, e incluso nuestro vocabulario no son válidos al basarse en sistemas mucho más grandes.

2.5 Experimentos asociados a la dualidad onda corpúsculo. Hipótesis de De Broglie

> Ver "Controversia histórica sobre la naturaleza de la luz" en bloque de "óptica física" Física 2º Bach.

En 1803 Young realizó un experimento con doble rendija que confirmó que la luz sufría difracción y supuso que se aceptase mayoritariamente que era una onda. Tras la explicación del efecto fotoeléctrico surgía el problema de explicar la difracción con partículas (fotones). Aunque poco conocido, en 1909 Taylor/Thomson (Nobel 1906) realizan experimento similar con rayos de luz muy débiles, necesitando una duración continua de 3 meses de registro en la placa fotográfica (se podría asumir que pasaban pocos o un solo fotón cada vez), y aparece el patrón de interferencia. Más tarde Dirac dirá "Cada fotón interfiere con sí mismo"

> El experimento de la doble rendija con partículas se ha repetido más veces, se comenta más adelante

En 1923 Compton (Nobel 1927) descubre el "Efecto Compton"; cuando luz de alta E y f (rayos X) incide sobre electrones libres, pierde energía y disminuye f (aumenta λ). No se puede explicar con la naturaleza ondulatoria de la luz, sino como choque fotón y electrón con conservación momento (con fórmulas relativistas por ser las velocidades grandes).

En 1924 Louis De Broglie (Nobel 1929) plantea como hipótesis que la dualidad onda-corpúsculo aplica a todas las partículas, no es exclusiva de los fotones; si la luz (sin masa) contiene partículas asociadas a la onda, todas las partículas (con masa) tienen una onda "piloto" asociada. A la longitud de onda de esa onda se

llama **longitud de onda de De Broglie**, y su valor es $\lambda_{\text{De Broglie}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$ donde la v es relativista, ya que

se obtiene de igualar energía $E=pc$ (relatividad) y en $E=hf$ (Planck)

En 1927 Davisson y Germer (Davisson Nobel 1937) descubren (casualmente) la difracción con electrones, confirmando la hipótesis de De Broglie.

En 1927 Bohr propone el **principio de complementariedad**: resumido para la luz sería que a veces se puede comportar como onda, a veces como partícula como onda, pero nunca ambos en el mismo experimento. Otra manera de verlo sería que intuición no es aplicable a sistemas a escala alejada de nuestra experiencia, es posible que algunas de las conclusiones que extraigamos de los experimentos nos parezcan contradictorias, pero esto no se debe a que las conclusiones sean falsas, sino a que los conceptos que utilizamos para tratar de entenderlas no son los adecuados, porque experimentando siempre obtenemos medidas clásicas, y en cada experimento obtenemos una concreta, y los términos onda y partícula son clásicos. Enlaza con su propuesta de la necesidad de una mecánica cuántica comentada cuando propuso su modelo atómico.

> Una idea sería hablar de ondícula, ¿qué nombre usar para nombrar algo no visto nunca?

2.6 Relaciones de indeterminación / incertidumbre de Heisenberg

El principio de incertidumbre o relación de indeterminación de Heisenberg, fue enunciado cualitativamente en 1927, establece la imposibilidad de determinar simultáneamente y con precisión arbitraria, ciertos pares de variables físicas, como son la posición y el momento lineal, o la energía y el tiempo. Matemáticamente se puede enunciar de dos maneras, y por eso se habla en plural de relaciones de indeterminación

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi} \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$





Desde el punto de vista de la física clásica se asumía que una medida se debería poder hacer tan precisa como se quisiera, y la única limitación estaría en los instrumentos de medida.

Primera idea cuántica del principio de incertidumbre: Se suele confundir y explicar asociado al efecto del observador, que relaciona error en medida y perturbación: el proceso para obtener un valor de la medida supone una perturbación mayor cuanto más pequeño es el valor a medir: debe existir interacción mínima para obtener la medida. Por ejemplo al medir posición y momento lineal de un electrón, en la medida usamos un fotón que perturba al electrón, perturbación imposible de eliminar porque el fotón siempre tendrá energía, y siempre se modifican los valores a medir al realizar la medida. Heisenberg usó esta idea en un experimento mental de un microscopio rayos γ ; con fotones de λ pequeña medimos bien posición, pero tenemos alta f , p y E que perturba mucho el movimiento del electrón, y λ grande ocurre lo contrario.

Explicación cuántica del principio de incertidumbre: la idea anterior, muy habitual, no es correcta, porque el principio no está ligado a la medida y perturbación, sino a valores simultáneos de magnitudes observables, y fija un límite en el que no se pueden usar conceptos de la física clásica. En el caso de posición y momento implica que escala cuántica las partículas no siguen una trayectoria determinada, ya que eso implicaría conocer en todos los instantes simultáneamente posición y momento lineal. Dos ejemplos que muestran que la idea de trayectoria clásica no tiene sentido son los orbitales y el experimento de la doble rendija. Deja de haber determinismo clásico (no probabilístico), ya que si el electrón tuviera posición y momento con valores concretos, aunque no los pudiésemos medir, la partícula sí seguiría una trayectoria clásica, pero eso no es así. La mecánica cuántica es determinista en la evolución probabilidades de los valores medidos, pero no en valores medidos. Enlaza con la idea de abandonar realismo (la realidad tiene un valor antes de medirlo) y pasar al positivismo (lo único que podemos saber de la realidad es lo que midamos)

Es importante destacar el valor de la constante de Planck que aparece en el principio de incertidumbre, $h=6,63 \cdot 10^{-34}$ Js, lo que hace que a nivel macroscópico el principio de incertidumbre sea inapreciable.

> ¿Cómo que una partícula no tiene trayectoria? Aunque sea cierto para el electrón en el átomo, ¿cómo se explica la trayectoria de una partícula en la cámara de niebla? Lo que observamos son una secuencia de interacciones del electrón con gotas, pero entre esos puntos no se puede decir lo que ha pasado.

> El principio de Heisenberg para medida-perturbación fue reformulado por Kennard en 1927 de manera correcta para desviaciones del producto de dos magnitudes, y se cumple se mida o no.

> El concepto "observar" es realizar una medida, es una interacción de un sistema macroscópico de medida con el sistema a medir, y no implica un observador físico ni la consciencia humana.

3. Introducción a la mecánica cuántica moderna. Su importancia

Como se ha comentado se puede decir hasta la década de 1920 se realizaban correcciones y aportaban ideas, pero es entonces cuando surge una teoría física completa:

En 1925 **Heisenberg** (Nobel 1932 por "la creación de la mecánica cuántica"), Born y Jordan crean la mecánica cuántica matricial. Cualitativamente usa matrices que relacionaran números de partida y resultados, sin sentido físico visualizable cómo se llega de unos a otros. Asociable a idea de no trayectoria.

En 1926 **Schrödinger** (Nobel 1933) desarrolla la mecánica cuántica ondulatoria, enlazando con dualidad de De Broglie. Surge el concepto de ecuación de onda, cuya solución es la función de onda, imaginaria, que describe la evolución temporal de un sistema a nivel cuántico, y se aplica para describir el estado del electrón en el átomo, con lo que surge el **modelo atómico de Schrödinger**, básicamente es modelo actual.

En 1926 **Dirac** (Nobel 1933) desarrolla Mecánica Cuántica que unifica lo hecho por Heisenberg y Schrödinger. La ecuación de Dirac para el electrón revisa la de Schrödinger, contemplando relatividad y spin, y predice la existencia de antimateria: Anderson (Nobel 1936) detecta positrón en 1932 en rayos cósmicos.

En 1926 **Born** (Nobel 1954) realiza la **interpretación estadística de la función onda**; $|\Psi|^2$ es la función de densidad de probabilidad, indica la probabilidad de obtener un valor en una medida, sin una explicación causal. Esta interpretación con la posición del electrón lleva al concepto de **orbital** en el átomo.

En 1927 se celebra la **5ª Conferencia de Solvay** en Bruselas, donde se debate sobre la interpretación de la mecánica cuántica, con dos "bandos" liderados por Einstein y Bohr, buenos amigos, cuyas posturas se pueden resumir en dos frases que se suelen citar, Einstein (1926) "Dios no lanza dados" y Bohr (dudosa) "No le digas a Dios qué hacer con sus dados". Finalmente "gana" Bohr y se sientan las bases de lo que más tarde se llamará **Interpretación de Copenhague** (donde estaba el instituto donde Bohr y otros trabajaban), que es la interpretación más habitual y considerada ortodoxa, cuyas ideas básicas son:

-El estado de un sistema lo define una **función de onda Ψ** , que se "colapsa" en un valor en la medida.

-La naturaleza tiene una **descripción probabilística** (Born). Es no determinista; como no se pueden conocer con exactitud los valores actuales tampoco se puede conocer con exactitud el futuro, pero sí probabilidades.





- Principio de incertidumbre.** Visión del positivismo; no se puede decir nada de lo que pasa cuando no se observa. La pregunta “¿Donde estaba la partícula antes de que midiera la posición?” no tiene sentido.
- Principio de complementariedad.** Dualidad onda-corpúsculo de la materia. Visión centrada en describir lo observado y medido, no en describir una realidad antes de ser medida.
- Principio de correspondencia (Bohr):** la mecánica cuántica describe un sistema como la física clásica si el sistema es lo suficientemente grande. Las leyes físicas son únicas independientemente de la escala, pero a escala macroscópica la física cuántica se expresa como la física clásica.



- 1 Peter Debye (1936 Q)
 - 2 Irving Langmuir (1932 Q)
 - 3 Martin Knudsen
 - 4 Auguste Piccard
 - 5 Max Planck (1918 F)
 - 6 William L. Bragg (1915 F)
 - 7 Émile Henriot
 - 8 Paul Ehrenfest
 - 9 Marie Curie (1903 F y 1911 Q)
 - 10 Hendrik Anthony Kramers
 - 11 Edouard Herzen
 - 12 Hendrik A. Lorentz (1902 F)
 - 13 Théophile de Donder
 - 14 Paul Adrien M. Dirac (1933 F)
 - 15 Albert Einstein (1921 F)
 - 16 Erwin Schrödinger (1933 F)
 - 17 Arthur H. Compton (1927 F)
 - 18 Jules Émile Verschaffelt
 - 19 Paul Langevin
 - 20 Louis-V. de Broglie (1929 F)
 - 21 Charles-Eugène Guye
 - 22 Wolfgang Pauli (1945 F)
 - 23 Werner Heisenberg (1932 F)
 - 24 Max Born (1954 F)
 - 25 C.T. Rees Wilson (1927 F)
 - 26 Ralph Howard Fowler
 - 27 Léon Brillouin
 - 28 Niels Bohr (1922 F)
 - 29 O.W. Richardson (1928 F)
- (Eran o fueron Nobel 17)

5ª Conferencia Solvay 1927 ([original en blanco y negro](#), [participantes](#), public-domain)



3.1 Orbitales atómicos

A efectos prácticos un orbital es una zona del espacio donde hay una alta probabilidad (**Born**) de encontrar un electrón. Se pueden ver como nubes de puntos, ya que en esa zona los electrones no siguen una trayectoria, aunque se suelen representar con formas asociadas a las zonas donde la probabilidad es del 99,99%. También se pueden ver como soluciones a las ecuaciones de Schrödinger para el electrón, por lo que un orbital es una solución donde están fijados los números cuánticos n, l y m , por lo que “caben” dos electrones, ya que un electrón (fermión) en un átomo tiene que tener los cuatro números cuánticos distintos y admite dos valores del número cuántico de spin.

>Además de de orbitales atómicos, también hay orbitales moleculares, hibridación de orbitales,...

3.2 Números cuánticos

Antes del modelo cuántico se introdujeron números cuánticos de manera artificial (por ejemplo n era el tamaño de la órbita y l era la excentricidad de la órbita), pero realmente surgen asociados a las soluciones a la ecuación de Schrödinger, como parámetros con ciertos valores permitidos asociados a esas soluciones.

Nº	Descripción	Significado	Valores posibles
n	Nº cuántico principal	Tamaño del orbital	1,2,3,...
l	Nº cuántico secundario ó azimutal	Forma del orbital	0,..., $n-1$
m	Nº cuántico magnético	Orientación del orbital	-1,...,0,...,+1
s	Spin (espín en español)	Momento angular intrínseco del electrón	+1/2 y -1/2

Algunos valores de l tienen nombre propio, y es importante ver los posibles valores de m en función de l .

l	nombre	Forma	Valores de m	Nº orbitales por valor l
$l=0$	s	Esfera	$m=0$	1
$l=1$	p	Dos lóbulos	$m= -1, 0, +1$	3
$l=2$	d	Variada, “4 lóbulos”	$m= -2, -1, 0, +1, +2$	5
$l=3$	f	Variada, “6 lóbulos”	$m= -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	7

Si combinamos la idea de que n indica la capa y que l y m indican subcapas y orbitales, cabiendo dos electrones en cada orbital, podemos calcular los números de electrones que hay por capa y subcapa.





Capa (n)	Subcapas (n,l)	Orbitales (n,l,m)	nº e ⁻ subcapa	nº e ⁻ capa
n=1 (K)	s	1s	2	2
n=2 (L)	s	2s	2	8
	p	2p _x , 2p _y , 2p _z	6	
n=3 (M)	s	3s	2	18
	p	3p _x , 3p _y , 3p _z	6	
	d	3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{xz} , 3d _{z²} , 3d _{x²-y²}	10	
n=4 (N)	s	4s	2	32
	p	4p _x , 4p _y , 4p _z	6	
	d	4d _{xy} , 4d _{yz} , 4d _{xz} , 4d _{z²} , 4d _{x²-y²}	10	
	f	4f _{y³} , 4f _{x³} , 4f _{z³} , 4f _{x(z²-y²)} , 4f _{y(z²-x²)} , 4f _{z(x²-y²)} , 4f _{xyz}	14	

Se incluyen aquí las formas de estos orbitales, que se muestran también más adelante asociadas a la tabla periódica. La forma, para el mismo valor de l, varía ligeramente según aumenta n, pero se mantiene el nombre. También tienen nombre los orbitales g (l=4), h (l=6) e i (l=7), pero esos orbitales no están ocupados en átomos de elementos de la tabla periódica, solamente son ocupados cuando el átomo se excita y los electrones pasan a capas / subcapas superiores.

> Se pueden visualizar orbitales con [Orbital Viewer](#), viendo lo sorprendente de sus formas, y viendo que tienen planos nodales, zonas donde la probabilidad es cero. También se puede ver la relación cualitativa de los orbitales con ondas estacionarias en una membrana de tambor.

	s (l = 0)		p (l = 1)			d (l = 2)				f (l = 3)							
	m = 0	m = 0	m = ±1		m = 0	m = ±1		m = ±2		m = 0	m = ±1		m = ±2		m = ±3		
	s	p _z	p _x	p _y	d _{z²}	d _{xz}	d _{yz}	d _{xy}	d _{x²-y²}	f _{z³}	f _{xz²}	f _{yz²}	f _{xyz}	f _{z(x²-y²)}	f _{x(x²-3y²)}	f _{y(3x²-y²)}	
n = 1	·																
n = 2	·																
n = 3	·																
n = 4	·																

Tabla de orbitales atómicos, wikipedia, cc-by-sa, imágenes Dhatfield, public domain, realizadas con Orbital Viewer

3.3 Configuraciones electrónicas: Principio de Pauli y regla de Hund.

El término configuración electrónica hace referencia a la colocación de los electrones en la corteza de un átomo según el modelo de capas de Bohr / modelo cuántico con orbitales; nos centramos en este último.

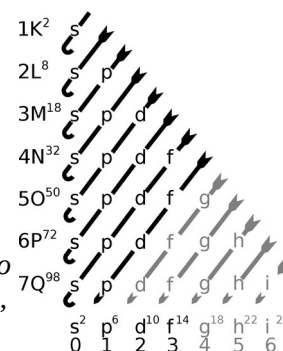
Describir la configuración electrónica implica detallar dos aspectos:

3.3.1 Reglas para la colocación de los electrones en los orbitales

La configuración electrónica se apoya en unos principios y reglas básicos:

1. Principio de la construcción (“Aufbau”). Fue formulado por Bohr, e indica que los electrones se colocan primero en los orbitales de menor energía y solamente cuando están llenos se pasa a llenar orbitales de mayor energía. Aunque históricamente parecería lógico asumir que la energía crece con el valor de n, a nivel cuántico, salvo algunas excepciones puntuales, la regla de llenado es la **regla de Madelung**, que indica que se llenan según n+l creciente. A efectos prácticos esta regla se visualiza mejor gráficamente llamándose la regla del serrucho, regla de la diagonal, o diagrama de Moeller. Cuando se indica “electrón más externo” ó “último electrón”, se hace referencia al último que se pone según la regla de la construcción, de mayor energía, más fácil de extraer, no tiene necesariamente el número n mayor.

2. Principio de exclusión de Pauli. Es un principio cuántico general que aplica a fermiones; aplicado a los electrones en el átomo indica que no puede haber en un mismo átomo dos



Wikimedia, public domain





electrones con sus cuatro números cuánticos iguales.

3. Regla de la máxima multiplicidad de Hund: si un electrón se puede colocar en varios orbitales con el mismo nivel de energía, siempre lo hará si es posible ocupando en solitario un orbital antes que emparejándose con otro electrón, maximizando la multiplicidad y el spin total.

>Se puede hacer una analogía a personas sentándose en un autobús / tren.

3.3.2 Notación de la colocación de los electrones en los orbitales

Hay dos notaciones habituales. La notación con texto es la más compacta y la más habitual, pero no refleja la ocupación de orbitales ni el cumplimiento de la regla de Hund como sí hace la de cajas. Estas notaciones son "horizontales"; a veces se indican los niveles de energía de manera vertical como escalones y sobre ellos se representan texto/cajas, pero no es habitual ni obligatorio. A veces se usan rayas horizontales y no cajas.

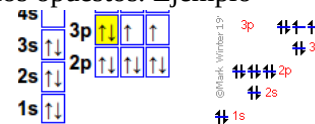
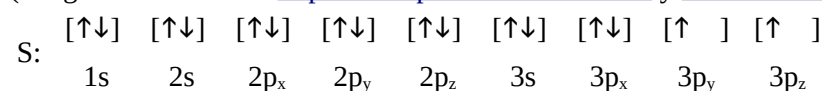
-Con texto: se indican los orbitales, por orden de energía creciente, añadiendo como superíndice el número de electrones que contienen, pero omitiendo el superíndice 1 si tienen solamente uno.

Así por ejemplo $2p^3$ indica que en la capa 2 los orbitales p tienen un total de 3 electrones.

Para abreviar es habitual en la notación en texto indicar entre corchetes el nombre de un gas noble que representa toda la configuración electrónica de ese elemento. Por ejemplo se puede indicar S: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ ó S: [Ne] $3s^2 3p^4$.

-Con cajas: se representa una caja por orbital, indicando en cada una qué orbital representa. En cada caja se representan los electrones como flechas, aceptando cada uno un máximo de dos. El sentido de la flecha en la caja simboliza el spin, por lo que en la misma caja dos flechas deben tener sentidos opuestos. Ejemplo

(imágenes tomadas de <http://www.ptable.com/#Orbital> y webelements.com).



4. Evolución histórica de la ordenación periódica de los elementos.

4.1 Tabla periódica de Mendeleev (sic). Predicciones y defectos.

Históricamente los elementos no tenían ordenación, se hacían meras agrupaciones de propiedades genéricas como su carácter metálico. En el siglo XIX surgen unas primeras ideas de ordenación con propiedades periódicas: las triadas de Dobereiner (1829) y la ley de las octavas de Newlands (1864), hasta que surge la tabla periódica de **Mendeléiev** (según RAE) (1869). Todas ellas ordenaban los elementos según masa atómica creciente. La tabla periódica de Mendeléiev fue un hito apoyándose en su intuición realizó correcciones y predicciones, correctas, por ordenar los elementos según propiedades: corrigió/revisó la masas de algunos elementos, y dejó huecos, realizando la predicción de que se encontrarían nuevos elementos, no conocidos en ese momento, que tendrían ciertas propiedades y ciertos pesos atómicos que él indicó aproximadamente. Por ejemplo predijo el eka-aluminio (Galio) y el eka-silicio (Germanio).

Pero tenía defectos, asociados al hecho de ordenar elementos según masa atómica: había casos en los que la ordenación por masa atómica y propiedades presentaba irregularidades: al ordenar por masa atómica se descolocaban por orden de propiedades (Te-I, Ar-K, Co-Ni). Además del hidrógeno, los lantánidos y los actínidos no tenían un lugar en la tabla.

4.2 Sistema periódico actual. Estructura electrónica y periodicidad.

El sistema periódico actual surge una vez que la ordenación no se realiza con la masa atómica sino con Z, el número de protones de cada elemento, que coincide con el número de electrones en estado neutro. Esta ordenación se puede realizar tras la ley de Moseley en 1913, que muestra una relación lineal entre la raíz cuadrada de l frecuencia del espectro de rayos X y la posición del elemento en la tabla.

La tabla periódica es una representación de todos los elementos conocidos, que se representan con Z creciente de izquierda a derecha y de arriba a abajo. Los elementos:

- Se colocan en filas, llamadas **periodos**, del 1 al 7, asociados al valor más alto de n donde hay electrones.
- Se colocan en columnas, llamadas **grupos**, que van del 1 al 18 (*es la nomenclatura actual IUPAC, no usar numeración en romanos más letra A ó B, nomenclatura antigua y confusa entre antigua IUPAC y CAS*), y están asociados al número de electrones de valencia, número de electrones en su última capa. Los grupos están asociados a los nombres clásicos de familias (3 a 12 serían los metales de transición):

1	2	13	14	15	16:	17	18
Alcalinos	Alcalinotérreos	Térreos	Carbonoideos	Nitrogeneideos	Anfígenos	Halógenos	Gases Nobles

Se incluye una representación de la tabla periódica con los bloques de configuración electrónica:





Es importante visualizar que en el mismo grupo los elementos, según Aufbau, terminan de la misma manera su configuración electrónica. Por ejemplo todos los gases nobles terminan en p^6 ; la agrupación por grupos es por propiedades químicas de un elemento, y éstas están determinadas por su configuración electrónica externa. La tabla periódica tiene colocaciones por convenio: He se pone en el grupo 18 de los gases nobles por tener su capa completa, aunque el bloque es el s. H se pone a veces aislado, ya que tiene propiedades intermedias entre grupo 1 y grupo 17. Los primeros elementos del bloque f a veces son Ce y Th, colocando y La y Ac en bloque d; la colocación correcta es La y Ac primeros elementos bloque f y Lu y Lr en bloque d. Los lantánidos y actínidos del bloque f se ponen en la parte inferior, simplemente para dar un formato más compacto a la tabla: si se intercalara el bloque f entre s y d como ocurre con el d entre s y p, la tabla sería muy ancha.

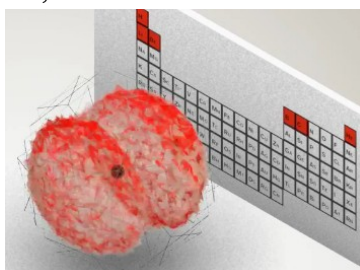
1...	s^1	s^2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
2...	s^1	s^2											p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
3...	s^1	s^2											p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
4...	s^1	s^2	d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
5...	s^1	s^2	d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
6...	s^1	s^2	d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
7...	s^1	s^2	d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
	bloque s		bloque d										bloque p					
4...			f^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^8	f^9	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}		
5...			f^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^8	f^9	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}		
			bloque f															

Bloques tabla periódica, derivado de [wikimedia, Roshan200195](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Roshan200195), cc-by-sa

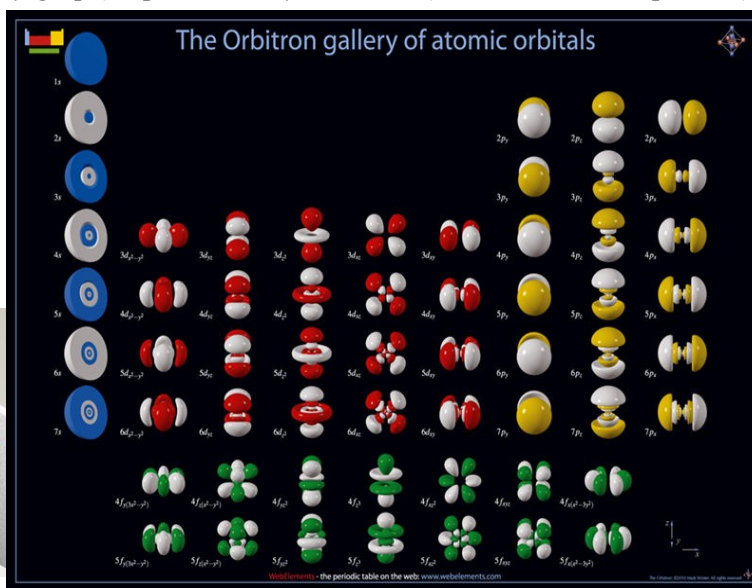
> ¿Qué memorizar de la tabla periódica? En 2º Bachillerato debe poderse identificar elemento (símbolo, nombre, "coordenadas" en la tabla: periodo y grupo) a partir de Z, y viceversa (EvAU: Z hasta 3º periodo).

> Las configuraciones electrónicas reales tienen excepciones (subcapas semillenas). (EvAU: hasta 4º periodo. Cr no es $4s^2 3d^4$ sino $4s^1 3d^5$ y Cu no es $4s^2 3d^9$ sino $4s^1 3d^{10}$) En la figura se representa toda la tabla: en parte superior izquierda se ve una versión simplificada de la agrupación en bloques, y en tabla se ven orbitales; como en cada orbital caben 2 e⁻, se ve el nº de elementos por columna.

> Video breve para visualizar ideas de configuración electrónica, construcción, orbitales y tabla periódica



<http://www.toutestquantique.fr/#atome>



<http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>, Copyright Mark Winter, University of Sheffield

4.3 Tendencias periódicas en las propiedades de los elementos.

Primero vemos las propiedades dando su definición, y luego se describen las tendencias de variación periódica en la tabla de cada propiedad. La propiedad más importante es el radio atómico: razonando la tendencia periódica de su variación se pueden razonar otras propiedades.

4.3.1 Radio atómico

Definición: una medida del tamaño del átomo, la distancia desde el núcleo hasta la parte exterior de la nube de electrones. Como la nube de electrones no tiene un límite fijo, hay varias definiciones, como el radio iónico (asociado a enlace iónico en cristal) y radio covalente (asociado a un enlace covalente).

Variación: En **grupo** aumenta al bajar, ya que al bajar aumenta Z, es mayor n, hay electrones en capas más externas, es mayor el tamaño del orbital y la distancia del los electrones el núcleo. En **periodo** disminuye al ir de izquierda a derecha, ya que de izquierda a derecha el valor máximo de n es el mismo, pero Z y carga del núcleo va aumentando, por lo que los electrones son más atraídos por el núcleo y el tamaño es menor.

> Un razonamiento detallado considera el efecto pantalla, asociado a repulsión entre electrones que reducen la atracción del núcleo. Se habla de $Z^* = Z - s$ (Z^* = carga nuclear efectiva, s = constante de efecto pantalla), habiendo reglas (Slater) para calcular s. Es importante en grupos, y a veces se considera un "core".





4.3.2 Energía de ionización (E_i , primer potencial de ionización)

Definición: energía mínima a aportar (positiva) para extraer un electrón de un átomo en estado gaseoso en su estado fundamental $X(g) \rightarrow X^+(g) + e^-$. Depende de lo ligado que esté el último electrón al núcleo.

Variación: En **grupo** disminuye al bajar, ya que aumenta el radio, el último electrón está más alejado del núcleo y menos ligado, y es necesaria menos energía para extraerlo. En **periodo** aumenta al ir de izquierda a derecha, ya que disminuye el radio, el último electrón está más cercano al núcleo y más ligado.

4.3.3 Afinidad electrónica (AE)

Definición: energía liberada al añadir un e^- a un átomo en estado gaseoso, asociada a: $X(g) + e^- \rightarrow X(g)^-$ (energía aportada para extraer un electrón de un ión con carga unidad, asociada a: $X(g)^- \rightarrow X(g) + e^-$)

El signo es confuso: según convenio termodinámico IUPAC, la energía liberada es negativa y la aportada positiva, pero al mismo tiempo [IUPAC define AE](#) como energía liberada al añadir e^- , indicando $E_{\text{inicial}} - E_{\text{final}}$, para que su valor sea “siempre” positivo, ya que se libera para la mayoría de elementos y cationes, y se aporta para pocos elementos (grupos 2 y 18) y aniones. En función de dónde se consulte se pueden ver [la mayoría de AE negativas, y alguna excepciones positivas](#), o justamente al contrario: [la mayoría de AE positivas y algunas excepciones negativas](#) (las excepciones están asociadas a tener que aportar energía para añadir un e^- , o liberar energía al extraer un e^- de un ión con carga unidad). Hay una **definición cualitativa simple y no confusa, que es la tendencia a captar un e^-** , pero el signo influye al razonar su variación, ya que con números de signo opuesto la tendencia de variación para mismos módulos es la opuesta. Ejemplos, considerando liberada positiva: F libera energía al captar un e^- ($EA \approx 328$ kJ/mol) y AE es mayor que Be en el mismo periodo, que requiere aportar energía y la tiene negativa ($EA \approx -231$ kJ/mol). F tiene menor radio atómico y más tendencia a captar un electrón (libera más energía al captarlo), tiene mayor $|AE|$, pero si se considerase negativa la energía liberada la tendría menor que Be, ya que $231 > -328$. Los gases nobles: no tienen tendencia a captar e^- , por lo hay que aportar energía y tienen todos ellos $EA < 0$ si se considera liberada positiva. Algunos elementos no tienen aniones estables, por lo que “no tienen” AE o la tienen teórica.

Variación (considerando liberada positiva): En **grupo** disminuye al bajar, aumenta el radio y disminuye la tendencia del núcleo a atraer el e^- y captarlo. En **periodo** aumenta al ir de izquierda a derecha, disminuye el radio y aumenta la tendencia a atraer el e^- y captarlo.

4.3.4 Electronegatividad

Definición: capacidad de un átomo para atraer hacia él los e^- (de especial interés en enlaces covalentes). Cualitativamente es la suma de E_i y AE: los elementos con alta E_i y con alta AE son muy electronegativos (los no metales), y los de baja E_i y baja AE lo son poco (los metales). **Ojo al caso del Hidrógeno.**

>No se puede medir de manera directa y hay varias escalas de electronegatividad: Pauling y Mulliken.

>IUPAC en normas inorgánica 2005, tabla VI, fija un orden de electronegatividad **por convenio**.

Variación: En **grupo** disminuye al bajar, aumenta el radio y disminuye la tendencia del núcleo a atraer el e^- . En **periodo** aumenta al ir de izquierda a derecha, disminuye el radio y aumenta la tendencia a atraer el e^- .

4.3.5 Carácter metálico / no metálico

Definición: Metal: tendencia a ceder electrones: baja E_i y baja AE; poco electronegativo.

No metal: tendencia a captar electrones: alta E_i y alta AE; muy electronegativo.

Variación: (excluyendo los gases nobles) los elementos en la parte superior derecha de la tabla son los de más carácter no metálico, y los de la parte inferior izquierda son los de más carácter metálico. La frontera es difusa (metaloides/semimetales): suele usarse diagonal que va de elementos B a At por su parte inferior.

4.3.6 Otras propiedades

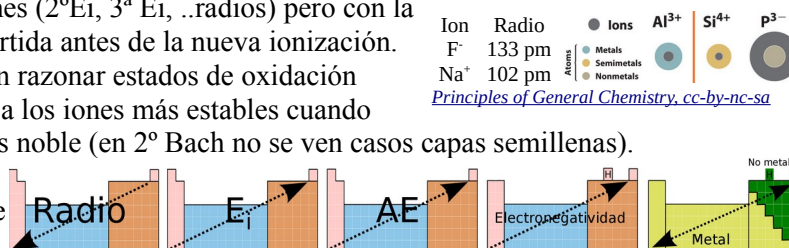
>La reactividad química se puede definir como la la tendencia un átomo a combinarse, y está asociada al carácter metálico/no metálico y la tendencia a ceder/captar electrones. La variación; ser muy reactivo en no metales es ser muy electronegativo, y en metales tener una energía de ionización muy baja.

>Se pueden hacer razonamientos para iones ($2^\circ E_i$, $3^\circ E_i$, ..radios) pero con la configuración electrónica del ion de partida antes de la nueva ionización.

>Sin entrar en conceptos redox, se pueden razonar estados de oxidación

(“valencias”) de ciertos grupos, asociado a los iones más estables cuando tienen configuraciones electrónicas de gas noble (en 2º Bach no se ven casos capas semillenas).

Resumen gráfico de variaciones: se pueden puntualizar gases nobles, signo de AE, y el H en algunos casos



>Otras propiedades, algunas de elementos como sustancias, no atómicas en www.ptable.com

>Asociado a configuración electrónica y spin, se pueden razonar propiedades ferromagnéticas de materiales.

