
Curso OpenCourseWare

QUÍMICA DE LOS MATERIALES

Javier Pozuelo de Diego

TEMA 2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ATÓMOS



Los números cuánticos

En la Mecánica Cuántica se necesitan tres números cuánticos para describir la posición de los electrones alrededor del núcleo y un cuarto número cuántico que describe el comportamiento de un electrón.

Número cuántico principal (n). Puede tomar valores $n = 1, 2, 3, \dots$

Este número está relacionado con la distancia promedio entre el núcleo y el electrón.
Mayor distancia \longleftrightarrow mayor energía \longleftrightarrow menor estabilidad

Número cuántico del momento angular (l). Puede tomar valores $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

Este número indica la forma de los orbitales

l	0	1	2	3	4	5
Nombre del Orbital	s	p	d	f	g	h

Número cuántico magnético (m_l). Puede tomar valores $m_l = -l, -(l-1), \dots, 0, \dots, (l-1), l$

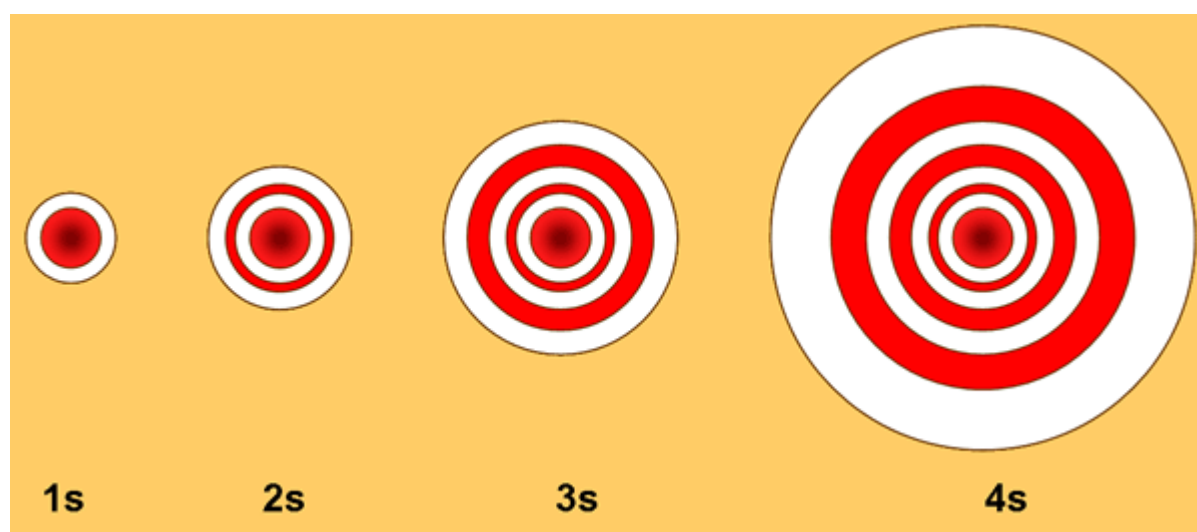
Este número describe la orientación del orbital en el espacio

Número cuántico de spin electrónico (m_s). Puede tomar dos valores $m_s = +1/2, -1/2$

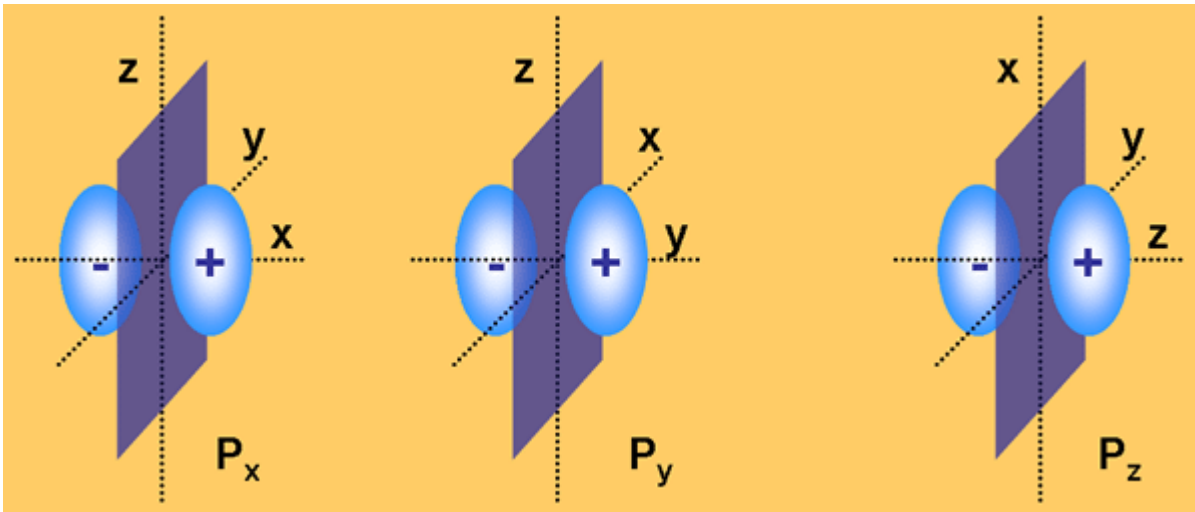
Este número describe el campo magnético que genera un electrón cuando rota sobre sí mismo.

Representación de los orbitales atómicos.

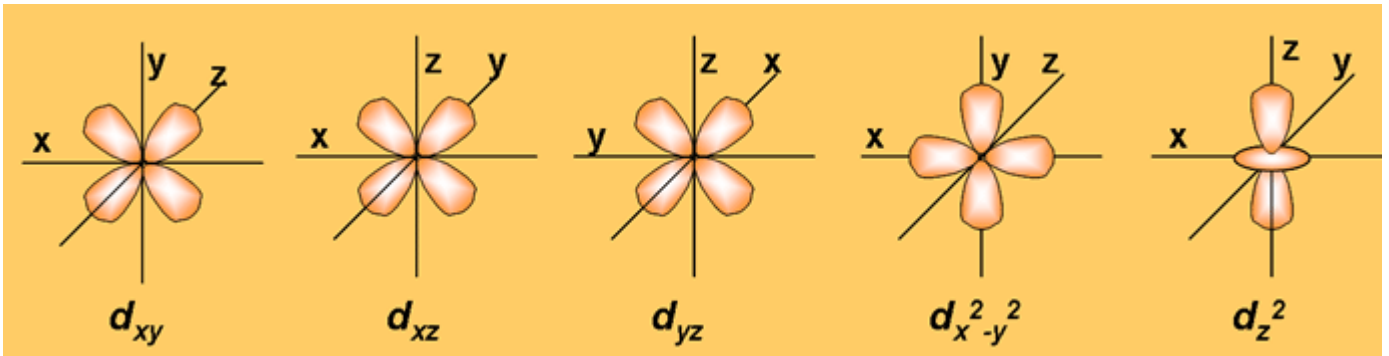
Orbitales s



Orbitales p



Orbitales d



Números cuánticos y orbitales

$n=1$	$l=0$	$m_l=0$	Orbital $1s$
-------	-------	---------	--------------

$n=2$	$l=0$	$m_l=0$	Orbital $2s$
	$l=1$	$m_l=-1$	Orbital $2p_x$
		$m_l=0$	Orbital $2p_y$
		$m_l=1$	Orbital $2p_z$

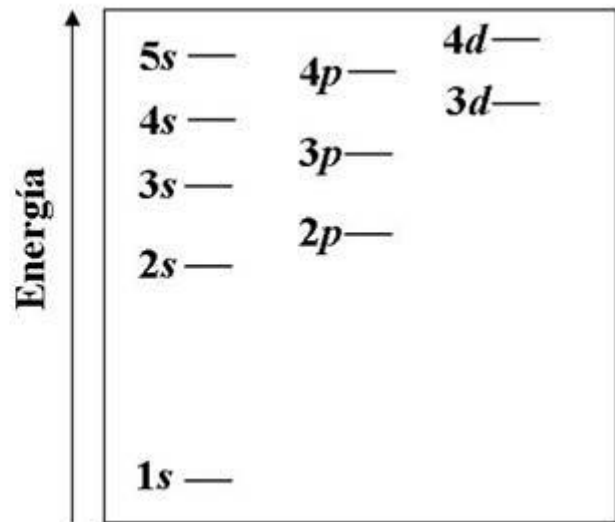
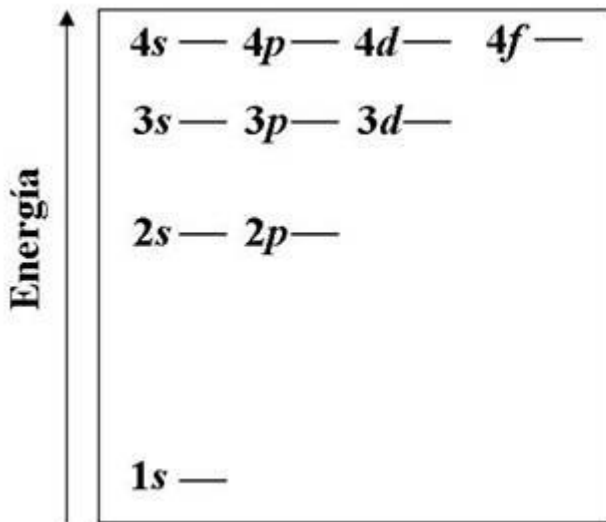
$n=3$	$l=0$	$m_l=0$	Orbital $3s$
	$l=1$	$m_l=-1$	Orbital $3p_x$
		$m_l=0$	Orbital $3p_y$
		$m_l=1$	Orbital $3p_z$
	$l=2$	$m_l=-2$	Orbital $3d_{xy}$
		$m_l=-1$	Orbital $3d_{xz}$
		$m_l=0$	Orbital $3d_{yz}$
		$m_l=1$	Orbital $3d_{x^2-y^2}$
		$m_l=2$	Orbital $3d_{z^2}$

Configuraciones electrónicas

Energía de los orbitales

Para el átomo de hidrógeno la energía está determinada por el número cuántico principal

Para el átomos polielectrónicos la energía está determinada por el número cuántico principal y por el número cuántico secundario



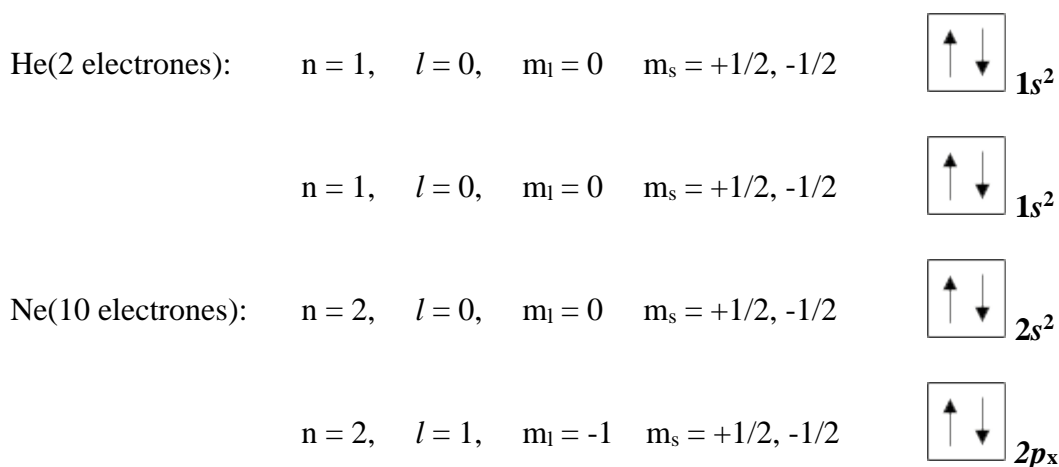
Principio de exclusión de Pauli

Dos electrones en un átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales

Si dos electrones tienen iguales n , l y m_l por tanto se encuentran en el mismo orbital

Es necesario que un electrón tenga un $m_s = +1/2$ y el otro un $m_s = -1/2$

Ejemplo:



$$n = 2, \quad l = 1, \quad m_l = 0 \quad m_s = +1/2, -1/2 \quad \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \downarrow \\ \hline \end{array} 2p_y$$

$$n = 2, \quad l = 1, \quad m_l = 1 \quad m_s = +1/2, -1/2 \quad \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \downarrow \\ \hline \end{array} 2p_z$$

La configuración electrónica será: $1s^2 2s^2 2p^6$ o bien $[He] 2s^2 2p^6$

Orden de llenado de los orbitales atómicos. Regla de Hund

El orden de llenado de los orbitales se hace en orden creciente de energía. Según se muestra en la figura.

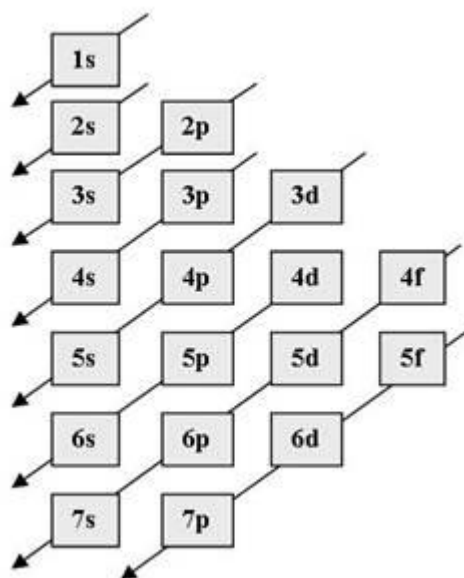
Regla de Hund

La configuración más estable en los subniveles es aquella que tenga mayor multiplicidad.

La multiplicidad se define como:

$$P = 2S + 1 \quad \text{Donde:}$$

$$S = \sum m_s$$



Supongamos 2 electrones en los orbitales p, existen dos posibilidades

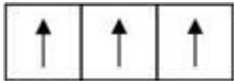
Caso a: $\begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \\ \hline \end{array} \quad S = +\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad P = 2 * 1 + 1 = 3$

Caso b: $\begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow \downarrow & & \\ \hline \end{array} \quad S = +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \quad P = 2 * 0 + 1 = 1$

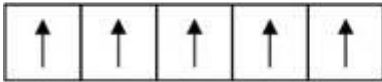
a es más estable que b

Excepciones a la regla de llenado.

Los orbitales semilleros presentan una estabilidad extra.

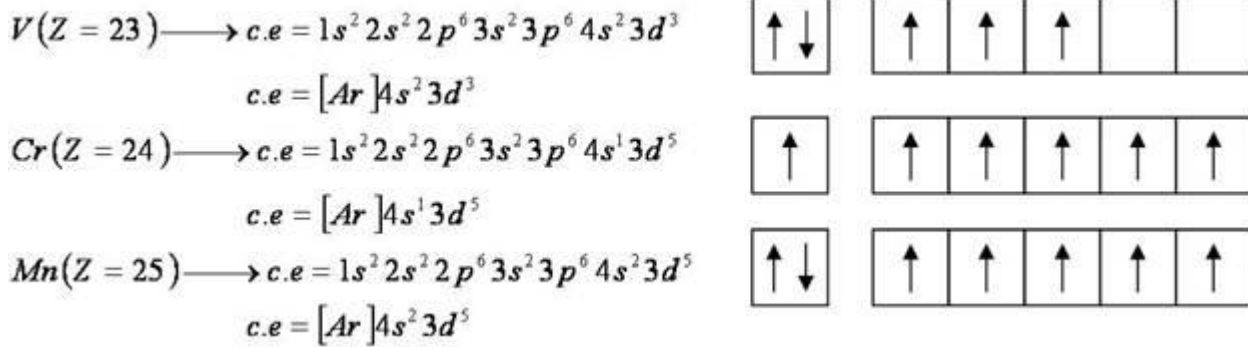


np^3 es muy estable



nd^5 es muy estable

Esto hace que en metales de transición, elementos como el Cromo llenen antes los orbitales 3d que se llene completamente el orbital 4s



Configuración electrónica de los elementos del segundo periodo.

Átomo	Z	Configuración electrónica	
Li	3	$1s^2 2s^1$	
Be	4	$1s^2 2s^2$	
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	
N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	

Configuración electrónica de Metales de Transición.

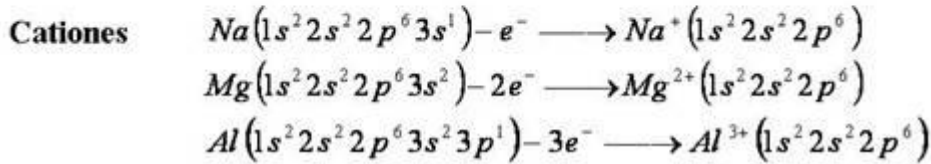
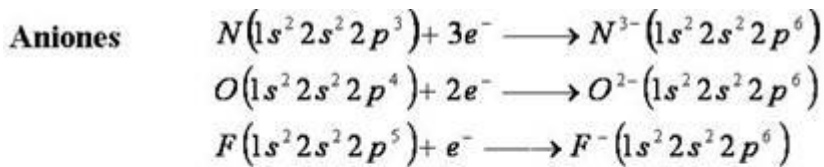
Sc:	[Ar]	\uparrow						$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d ¹ 4s ²
Ti:	[Ar]	\uparrow	\uparrow					$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d ² 4s ²
V:	[Ar]	\uparrow	\uparrow	\uparrow				$\uparrow\downarrow$	[Ar]3d ³ 4s ²
Cr:	[Ar]	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow		\uparrow	[Ar]3d ⁵ 4s ¹
Mn:	[Ar]	\uparrow	\uparrow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

La tabla periódica y las configuraciones electrónicas

Bloque s										Bloque p														
1s 1 H																5 B	6 C	7 N	8 O	9 F				
3 Li	4 Be											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl								
										Bloque d														
11 Na	12 Mg	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br						
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I								
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At								
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt																
										Bloque f														
										58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb		
										90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No		

La configuración electrónica en iones monoatómicos

Los electrones se añaden o se quitan de subniveles del nivel de energía más alto.



Propiedades periódicas

Radios atómicos

Se define como la distancia más corta entre dos átomos contiguos de una sustancia elemental

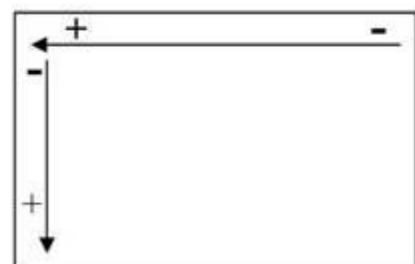
I	II	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII
						H=0.037	He=0.037
Li 0.152	Be 0.111	B 0.088	C 0.077	N 0.070	O 0.066	F 0.064	Ne=0.070
Na 0.186	Mg 0.160	Al 0.143	Si 0.117	P 0.110	S 0.104	Cl 0.099	Ar 0.094
K 0.231	Ca 0.197	Ga 0.122	Ge 0.122	As 0.121	Se 0.117	Br 0.114	Kr 0.109
Rb 0.244	Sr 0.215	In 0.162	Sn 0.140	Sb 0.141	Te 0.137	I 0.133	Xe 0.130
Cs 0.262	Ba 0.217	Tl 0.171	Pb 0.175	Bi 0.146	Po 0.165	At	Rn 0.140

Disminuye en un mismo periodo de izquierda a derecha

Al aumentar el número de electrones y de protones hace que aumenten las fuerzas atractivas

Aumenta en un mismo grupo de arriba abajo.

Al aumentar el número de niveles energéticos aumenta el tamaño.



Radio iónico

Su variación en la tabla periódica es equivalente al de los radios atómicos.

Un anión, al ganar electrones presenta un aumento en la repulsión entre los electrones, lo que hace que el radio aniónico sea mayor que el atómico.


Li ⁺ 0.060	Be ²⁺ 0.031			
Na ⁺ 0.095	Mg ²⁺ 0.065	Al ³⁺ 0.050		
K ⁺ 0.133	Ca ²⁺ 0.099	Ga ³⁺ 0.062	O ²⁻ 0.144	F ⁻ 0.136
Rb ⁺ 0.148	Sr ²⁺ 0.113	In ³⁺ 0.081	S ²⁻ 0.184	Cl ⁻ 0.181
Cs ⁺ 0.169	Ba ²⁺ 0.135	Tl ³⁺ 0.095	Se ²⁻ 0.198	Br ⁻ 0.195
			K 0.221	I ⁻ 0.216

Un catión, al perder electrones presenta una disminución de la repulsión entre los electrones, lo que hace que el radio del catión sea menor que el atómico.

Energía de ionización

Es la energía necesaria para arrancar un electrón de un átomo en estado gaseoso.

En general, la energía de ionización varía de la forma:



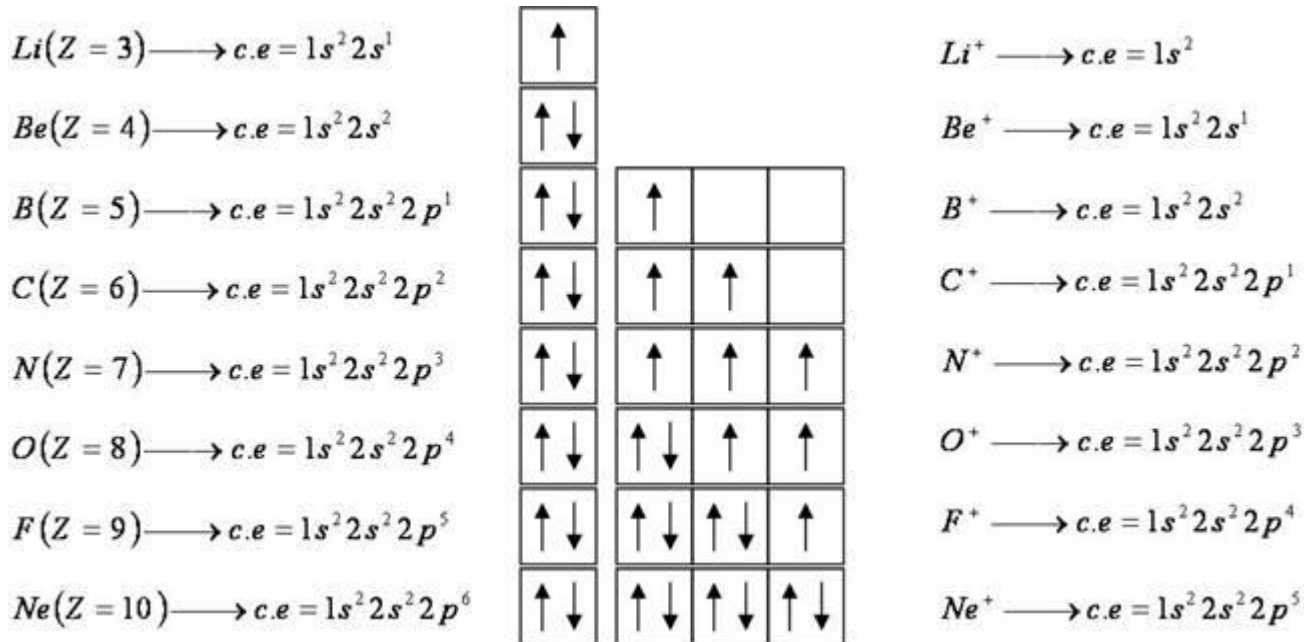
Li	Be
520	900
Na	Mg
496	738
K	Ca
419	590
Rb	Sr
403	550
Cs	Ba
376	503

				H	He
				1312	2372
B	C	N	O	F	Ne
801	1086	1402	1314	1681	2081
Al	Si	P	S	Cl	Ar
578	786	1012	1000	1251	1520
Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
579	762	944	941	1140	1351
In	Sn	Sb	Te	I	Xe
558	709	832	869	1009	1170
Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
589	716	703	812		1037

Este comportamiento es cierto para los elementos del mismo grupo. Al descender en el grupo los electrones se encuentran en niveles energéticos superiores, están más alejados de los núcleos y por tanto es más sencillo arrancarlos.

En los elementos del mismo periodo este comportamiento no es siempre cierto, si bien al desplazarse hacia la derecha en un mismo periodo, al existir más electrones en los mismos orbitales estos están más atraídos por el núcleo y por tanto es más difícil arrancarle un electrón.

Observemos los elementos del segundo periodo.

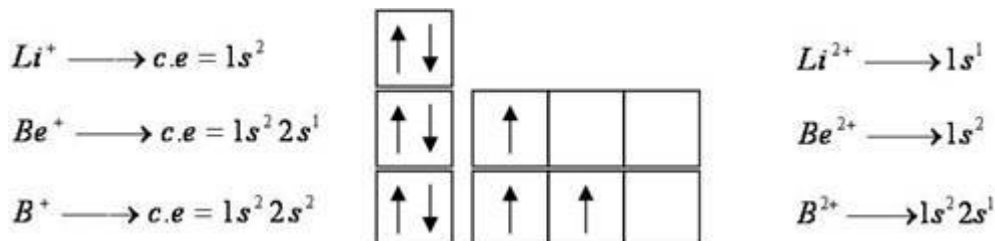


El Berilio tiene una energía de ionización mayor que el Boro. El Berilio tiene su última capa totalmente ocupada por lo que es muy estable y por ello para arrancar un electrón es necesario aplicarle mucha energía. Boro si pierde un electrón se transforma en B⁺ con una configuración electrónica similar a la del Berilio, estable, por lo que es necesario aplicarle menos energía para transformarlo en B⁺.

El Nitrógeno tiene una energía de ionización mayor que el Oxígeno. El Nitrógeno tiene los orbitales p semicupados por lo que es muy estable y por ello para arrancar un electrón es necesario aplicarle mucha energía. Oxígeno si pierde un electrón se transforma en O⁺ con una configuración electrónica similar a la del Nitrógeno, estable, por lo que es necesario aplicarle menos energía para transformarlo en O⁺.

Energía de ionización de cationes

Supongamos los tres primeros cationes del segundo periodo que hemos estudiado anteriormente: Li⁺, Be⁺ y B⁺.



El Li^+ tiene su última capa completa por lo que es muy estable, el Be^+ si pierde un electrón tendrá su última capa completa por lo que adquirirá una alta estabilidad y el B^+ no adquirirá una estabilidad especial, por lo que:

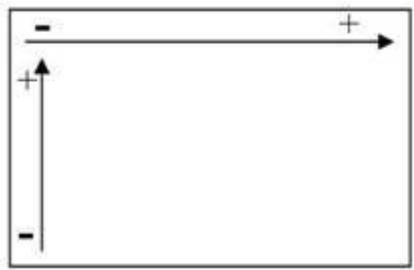
$$EI(\text{Li}^+) > EI(\text{B}^+) > EI(\text{Be}^+)$$

En general, todos los átomos tienden a adquirir la configuración electrónica del gas noble más cercano.

Afinidad Electrónica.

Es la energía que se desprende cuando un átomo en estado gaseoso acepta un electrón

En general, la Afinidad Electrónica varía de la forma:



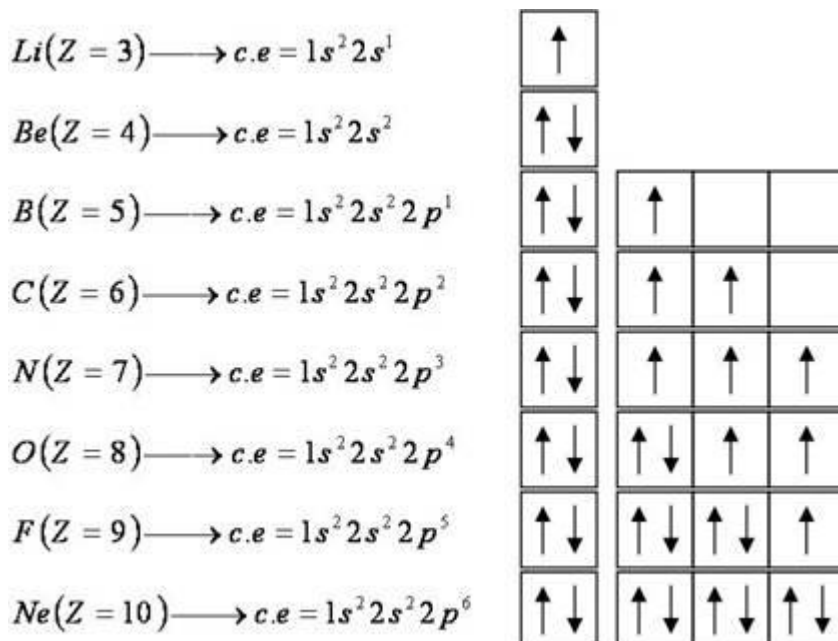
Li 60	Be ≤ 0
Na 53	Mg ≤ 0
K 48	Ca 2.4
Rb 47	Sr 4.7
Cs 45	Ba 14

				H 73	He < 0
B 27	C 122	N 0	O 141	F 328	Ne < 0
Al 44	Si 134	P 72	S 200	Cl 349	Ar < 0
Ga 29	Ge 118	As 77	Se 195	Br 325	Kr < 0
In 29	Sn 121	Sb 101	Te 190	I 295	Xe < 0
Tl 30	Pb 110	Bi 110	Po	At	Rn < 0

Este comportamiento es cierto para los elementos del mismo grupo, excepto para los elementos del grupo 2 y los del grupo del nitrógeno. Al descender en el grupo los electrones se encuentran en niveles energéticos superiores, están más alejados de los núcleos, los núcleos atraen menos a los electrones y por tanto desprenden menos energía al aceptar un nuevo electrón.

Al desplazarse hacia la derecha en un mismo periodo, al existir más electrones en los mismos orbitales estos están más atraídos por el núcleo y por tanto es más fácil que atraigan a un nuevo electrón un electrón.

Observemos los elementos del segundo periodo.



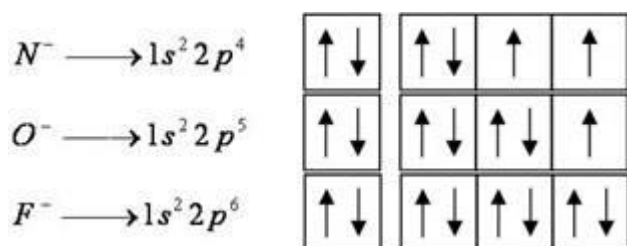
El Berilio y el nitrógeno tienen sus orbitales ocupados y semioocupados respectivamente, esto hace que sean muy estables y desprendan poca o ninguna energía al aceptar un nuevo electrón.

El carbono desprende una energía considerablemente alta, esto es debido a que al adoptar un nuevo electrón adquiere una configuración electrónica con los últimos orbitales semioocupados. Esta es una configuración muy estable y por tanto la afinidad electrónica del carbono es tan alta.

Afinidad Electrónica de los aniones

Supongamos los tres últimos aniones del segundo periodo que hemos estudiado anteriormente: N^- , O^- y F^- .

Sus configuraciones electrónicas serán:



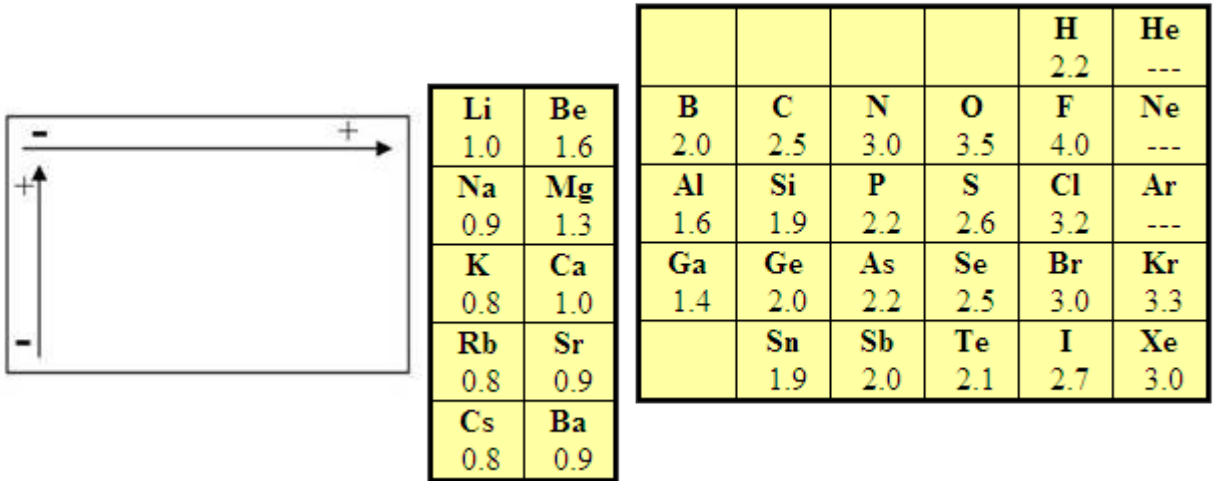
El F^- tiene su última capa completa por lo que es muy estable, el O^- si gana un electrón tendrá su última capa completa por lo que adquirirá una alta estabilidad y el N^- no adquirirá una estabilidad especial, por lo que:

$$AE(O^-) > AE(N^-) > AE(F^-)$$

Electronegatividad:

Marca la capacidad de un átomo a atraer electrones.

En general, la Electronegatividad varía de la forma:



Al descender en un mismo grupo, los electrones están más alejados del núcleo por lo que las fuerzas de atracción son menores.

Al desplazarnos a la derecha en un mismo periodo, los electrones están mas cerca del núcleo y más atraídos por él.