



Estructura de los átomos: Estructura electrónica



Modelos atómicos

Después de los modelos iniciales de Thomson y Rutherford, en los que los electrones podían tener cualquier energía, una serie de hechos experimentales llevaron a los átomos la cuantización de la energía:

- **Radiación del cuerpo negro** (partículas de energía o fotones, ecuación de Planck $E=h\nu$).
- **Efecto fotoeléctrico** (emisión de electrones por metales al incidir luz, premio Nobel a Einstein).
- **Espectros atómicos** (emisión de radiación electromagnética por parte de los átomos).

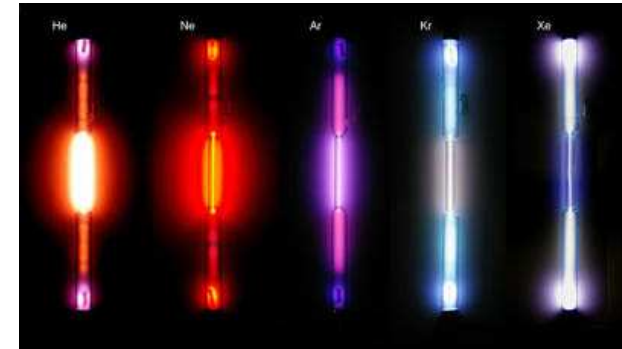


Imagen 1 [Alchemist-hp](#), Creative commons

Modelo de Bohr-Sommerfeld

Proponiendo tres postulados y aplicando los principios de la física clásica, Bohr explicó el espectro del átomo de hidrógeno, surgiendo el número cuántico principal. La modificación de Sommerfeld introdujo los números cuánticos secundario y magnético para explicar el desdoblamiento de algunas líneas espectrales.

Números cuánticos

La situación y energía del electrón en el átomo de hidrógeno viene dada por tres números cuánticos:

n, número cuántico **principal**, que toma valores enteros 1, 2, 3, ...

l, número cuántico **secundario**, que toma valores desde 0 hasta n-1.

m, número cuántico **magnético**, que para cada valor de l toma valores de -l, ..., 0, ..., +l.



Mecánica cuántica ondulatoria

La explicación de la situación de los electrones en el átomo cambió radicalmente al surgir dos nuevos hechos experimentales:

- La **dualidad onda-partícula de De Broglie**: hay que tener en cuenta la onda asociada a las partículas cuando éstas son muy pequeñas y se mueven a gran velocidad, como es el caso del electrón en el átomo.
- El **principio de incertidumbre de Heisenberg**: no se puede conocer a la vez con total exactitud la posición y la velocidad del electrón (o su energía), ya que cuanto mejor se conoce una de esas magnitudes, peor se conoce la otra.

Ecuación de onda de Schrödinger

La mecánica cuántica ondulatoria propone la resolución de la ecuación de onda para obtener las posibles situaciones del electrón en el átomo (funciones orbitales u orbitales).

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

Labels in the diagram:
- "Segunda derivada con respecto a x" points to $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$.
- "Función de onda de Schrödinger" points to ψ .
- "Energía" points to E .
- "Energía potencial" points to V .
- "Posición" points to x in the denominator of the derivative.

Imagen 2 Elaboración propia

Las soluciones de la ecuación de onda dependen de tres números cuánticos, que son precisamente los mismos y con los mismos valores que los obtenidos aplicando el modelo de Bohr.



Órbitas y orbitales

Utilizando el concepto de órbita (Bohr) se conoce cada una de las posibles situaciones del electrón y su energía, mientras que con el concepto de orbital (mecánica cuántica ondulatoria de Schrödinger) no se pueden conocer a la vez, y se habla de zonas del espacio en las que es muy probable encontrar al electrón.

Números cuánticos y características de los orbitales

n	Tamaño y energía Al aumentar n, el orbital es más grande y tiene más energía
l	Forma y energía s: esférico; p: doble lóbulo; d: cuatro lóbulos; f: ocho lóbulos Al aumentar l la energía aumenta un poco
m	Orientación p_x, p_y, p_z : orientados según los respectivos ejes

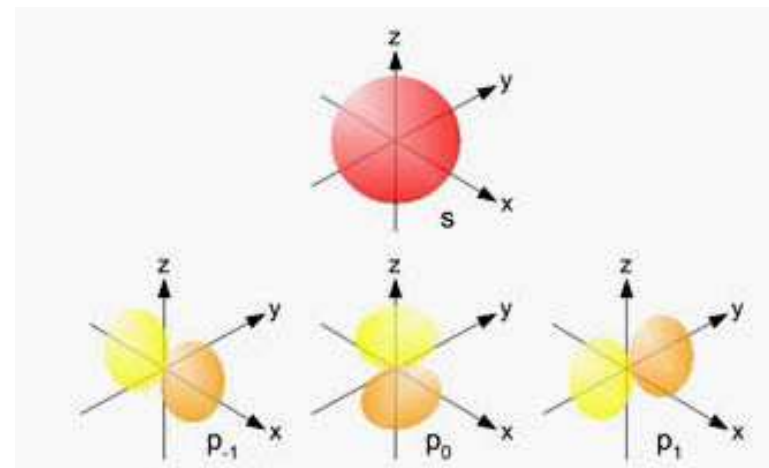


Imagen 3 [Haade](#), GNU free

Nombre de los orbitales

Se nombran según sea el valor de n (1, 2, 3 ..), de l (s si l=0, p si l=1, d si l=2 y f si l=3) y de m (p_x, p_y, p_z).

n	l	m	orbital
1	0	0	1s
2	0	0	2s
	1	-1,0,1	2p ($2p_x, 2p_y, 2p_z$)
3	0	0	3s
	1	-1,0,1	3p ($3p_x, 3p_y, 3p_z$)
	2	-2,-1,0,1,2	3d
4	0	0	4s
	1	-1,0,1	4p ($4p_x, 4p_y, 4p_z$)
	2	-2,-1,0,1,2	4d
	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	4f



El número cuántico de spin

Además de los números cuánticos n , l y m , que definen cada uno de los orbitales, para caracterizar la situación de un electrón hace falta un cuarto número cuántico s , llamado de spin, relacionado con una propiedad del electrón que puede tener dos valores, $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$.

Para escribir estructuras electrónicas

1. Se llenan los orbitales de menor energía posible (principio de mínima energía).
2. En cada orbital solamente pueden situarse dos electrones (principio de exclusión de Pauli).
3. Los orbitales degenerados, de la misma energía, (p, d, f), primero se semillenan y después se terminan de llenar (principio de máxima multiplicidad de Hund).

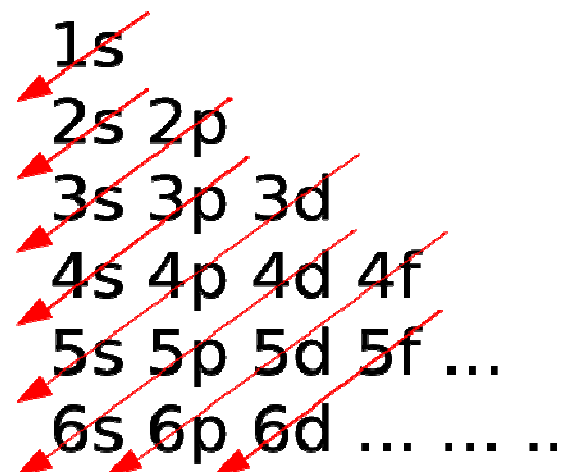


Imagen 4 [Sharayanan](#), Creative commons

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d

Algunas estructuras en el estado fundamental

O: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y 2p_z$

Al: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x$

Cl: $[\text{Ne}] 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z$ (o bien $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$)

Rb: $[\text{Kr}] 5s$