

## TEMA 1: ESTRUCTURA ATÓMICA Y CLASIFICACIÓN PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

1	Números que identifican a los átomos .....	34
2	Radiación electromagnética. Ondas.....	35
3	Espectros atómicos .....	36
3.1	Orígenes de la mecánica cuántica. Hipótesis de Plank. ....	36
3.2	Confirmación de la hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico.....	37
3.3	Espectros de emisión. ....	39
3.4	Espectro del átomo de hidrógeno.....	40
4	El modelo atómico de Bohr .....	41
4.1	Refinamientos del modelo atómico de Bohr. Efecto Zeeman. Modelo de Sommerfeld .....	45
5	Mecánica cuántica:.....	46
5.1	La naturaleza dual del electrón. Dualidad onda-corpúsculo (De Broglie, 1924).....	46
5.2	Principio de incertidumbre (Heisenberg, 1927).....	47
6	Modelo mecano-cuántico .....	48
6.1	Números cuánticos y niveles de energía.....	49
6.2	Tipos de orbitales .....	51
6.3	Estructura electrónica de los átomos.....	52
7	Sistema periódico de los elementos .....	54
7.1	Historia: .....	54
7.2	Sistema periódico actual .....	55
8	Variación periódica de las propiedades de los elementos.....	57
8.1	Radio atómico: .....	57
8.2	Energía de ionización (E.I.): .....	59
8.3	Afinidad electrónica (A.E.).....	60
8.4	Electronegatividad (E.N.).....	60
9	EJERCICIOS PARA CLASE .....	62

## 1 Números que identifican a los átomos

- **Nº atómico (Z, del alemán *Zahl*, número):** Introducido por Moseley en 1.913 para indicar el nº de cargas positivas de un átomo, es decir, el nº de protones. Todos los átomos de un elemento tienen igual Z, es decir, es lo que nos permite "**identificar**" a un átomo (no el nº de electrones, que puede variar en los iones, o el nº de neutrones que puede variar en los isótopos).
- **N, número de neutrones:** Puede variar de un átomo a otro de un mismo elemento por la existencia de los **isótopos**, átomos del mismo elemento (igual Z) pero con diferente masa (distinta N).
- **Numero másico (A, del alemán *Atomgewicht*, peso atómico, aunque no es exactamente lo mismo, ojo) es el número de protones y neutrones que tiene un átomo.  $A=Z+N$**



Notas importantes:

- La mayoría de los elementos presentan varios isótopos (sólo 21 elementos, como el Na o el Be tienen un único isótopo natural). El Hidrógeno tiene 3, con N=0 (protio), N=1 (deuterio) y N=2 (tritio). Se suelen representar con el nombre del elemento y separado por un guion el número másico: hidrógeno-1, hidrógeno-2 e hidrógeno-3. El carbono tiene 2, C-12 y C-14 (inestable).
- La masa atómica atribuida a cada elemento y necesaria para cálculos estequiométricos es una media de la masa de los isótopos de ese elemento, pero no una media aritmética simple, sino la media ponderada teniendo en cuenta la riqueza de cada isótopo en la naturaleza.

Ejemplos:

La masa atómica media ponderada de los isótopos del oxígeno  ${}^{16}\text{O}$ ,  ${}^{17}\text{O}$  y  ${}^{18}\text{O}$ :

$$\frac{15,99491u \times 99,762 + 16,99913u \times 0,038 + 17,99916u \times 0,200}{100} = 15,9993u$$

El cloro natural está constituido por dos isótopos:

—  ${}^{35}\text{Cl}$  de masa atómica 34,968852·u y porcentaje de abundancia 75,77%.

—  ${}^{37}\text{Cl}$  de masa atómica 36,965903·u y abundancia isotópica 24,23%.

Por lo que la masa atómica media ponderada de los isótopos del cloro  ${}^{35}\text{Cl}$  y  ${}^{37}\text{Cl}$ :

$$\frac{34,968852u \times 75,77 + 36,965903u \times 24,23}{100} = 35,452737u$$

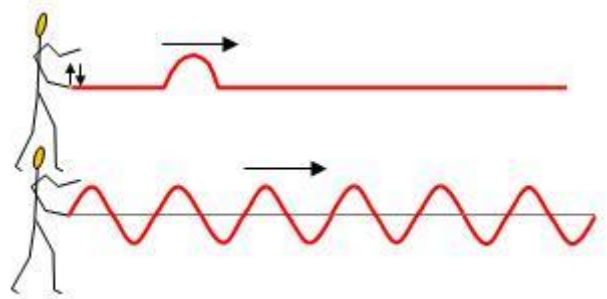
- La masa de los isótopos es algo menor que la suma de las masas de sus protones y neutrones (y electrones, aunque esta sea casi despreciable), debido al llamado "defecto de masa" o energía de enlace, la masa perdida al formarse el átomo, que es más estable que los nucleones aislados:  $E=\Delta m \cdot c^2$  (Einstein)



EJERCICIOS AL FINAL DEL TEMA (Apartado 9.1 de la página 62)

## 2 Radiación electromagnética. Ondas.

El estudio de la estructura interna de los átomos se realiza habitualmente mediante el empleo de técnicas experimentales en las que ondas electromagnéticas interaccionan con ellos. En física, una onda consiste en la **propagación de una perturbación** de alguna propiedad que se produce en un punto (**foco**) y se propaga por el espacio, bien por un medio físico (**onda mecánica**), como por ejemplo la altura de una cuerda que hacemos oscilar y está fija por su otro extremo, o los cambios de presión (ondas de sonido), bien por el vacío, como **las ondas electromagnéticas**, que consiste en un campo eléctrico y campo magnético perpendiculares entre si propagándose por el espacio. Toda onda implica un **transporte de energía sin transporte de materia**.



En todas las ondas, mecánicas o electromagnéticas, podemos encontrar los parámetros característicos que nos permiten describir las ondas:

- Una **oscilación** es una vibración que da lugar a una onda de longitud  $\lambda$ . La **longitud de onda ( $\lambda$ )** es la distancia existente entre dos máximos o dos mínimos sucesivos de una onda. Se suele expresar en metros (m), centímetros (cm), nanómetros ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ) o angstroms ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ). En **espectroscopia** se usa más que la longitud de onda su inverso, **el número de ondas ( $k$ )**, que es el número de ondas que contiene una unidad de longitud. Su unidad habitual es  $\text{m}^{-1}$ . En el estudio de las ondas en **física** es más habitual denominar número de ondas a las ondas que caben en  $2\pi$ , es decir, en física  $k=2\pi/\lambda$ , con las mismas unidades.
- Otra magnitud importante es el **período (T)**, que es el tiempo que tarda la oscilación en producir una onda completa, o dicho de otra forma, lo que tarda la onda en recorrer toda su longitud  $\lambda$ . Su unidad básica es el segundo, s. Relacionada con el período esta la **Frecuencia (f o  $\nu$ , la letra griega nu)**, que es el número de oscilaciones que pasan por cada punto en la unidad de tiempo (o el nº de ondas que se forman por segundo). Su unidad es  $\text{s}^{-1}$ , que también se denomina hertzio (**Hz**). La relación período-frecuencia es  **$T = 1/f$**  (si una onda tarda T en formarse, en 1 segundo se formarán  $1/T$ , o sea, f ondas/s).
- La **velocidad de propagación** de una onda es la velocidad con la que se propaga por el espacio. Si una onda tarda T segundos en formarse y en ese tiempo recorre  $\lambda$  m, su velocidad será  $v = \lambda/T = \lambda f$ . Las ondas que nosotros estudiaremos, **las electromagnéticas**, son capaces de viajar en el vacío (en el aire su velocidad es prácticamente la misma) a  $300000 \text{ km/s}$ , o sea,  $3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ . A ese valor, la velocidad de la luz en el vacío, se le designa por  $c=3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ . Por tanto, para las ondas electromagnéticas en el aire  **$c=\lambda f$** .

Centrándonos en las ondas electromagnéticas las hay de una enorme variedad y se suelen clasificar por su frecuencia, que ya veremos nos informa de la energía que pueden transportar (y su peligrosidad, si ésta es muy alta). El **espectro electromagnético** es un continuo formado por el conjunto de las radiaciones electromagnéticas. No solo está formado por las ondas que percibimos sensorialmente (luminosas) sino por otras ondas llamadas microondas, infrarrojas, ultravioletas, rayos X, rayos gamma y rayos cósmicos. De menor a mayor frecuencia se clasifican en:

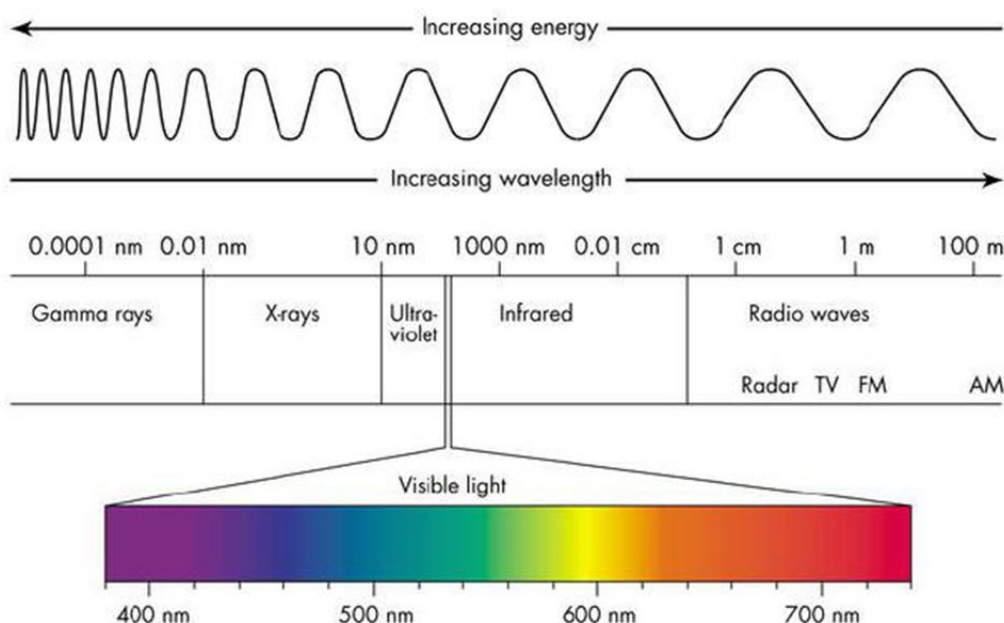
- Ondas de radio: de menor frecuencia (y por tanto mayor longitud de onda,  $\lambda$ , ya que como  $c=\lambda f$ ,  $\lambda=c/f$ ). Sus frecuencias



van desde los khz (AM,  $\lambda \approx 100$  m) hasta los MHz (FM,  $\lambda \approx 1$  m), así como ondas de TV, de radar y el microondas.

color	Rango de $\lambda$
violeta	380-450 nm
azul	450-495 nm
verde	495-570 nm
amarillo	570-590 nm
anaranjado	590-620 nm
rojo	620-750 nm

- Luz visible: la luz blanca que vemos, cuya  $\lambda$  está entre 400 y 700 nm ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ). Dicha luz puede descomponerse en colores al pasar por un prisma triangular. Cada color tiene asociado una frecuencia ( $f$ ), y por tanto, una longitud de onda  $\lambda$ , aunque tradicionalmente se distinguen 7 colores (los del arco iris), pero en realidad hay infinitos colores. Es interesante recordar que la de **menor frecuencia** (y por tanto de menor energía) es el **rojo** (y por debajo de esta, a menor  $f$ , no visible, está el **infrarrojo, IR**) y la de mayor frecuencia es la **violeta** (y de mayor aún el **ultravioleta, UV**, de la que debemos proteger la piel por su alta energía)
- A partir de aquí, las energías de las ondas electromagnéticas empiezan a ser peligrosas. Los rayos X y los gamma  $\gamma$ , procedentes de la desintegración radiactiva (recuerda  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ ) son muy energéticos y la exposición del cuerpo humano a estos rayos muy dosificada.



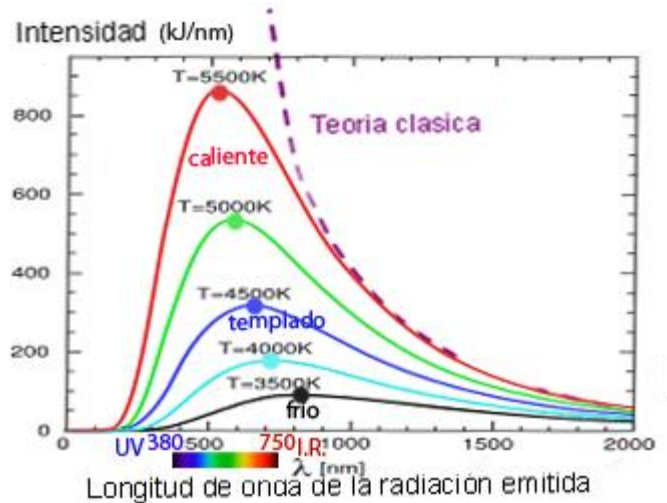
### 3 Espectros atómicos

#### 3.1 Orígenes de la mecánica cuántica. Hipótesis de Plank.

Estudiemos brevemente el fenómeno que revolucionó la física del siglo XX, el estudio del cuerpo negro. Un **cuerpo negro** es un objeto teórico o ideal que absorbe toda la luz y toda la energía radiante que incide sobre él. Al no reflejar nada de la radiación incidente su color sería negro, de ahí su nombre. Al ser un absorbedor perfecto también es un emisor perfecto, cuando lo calentamos. Al calentarlo emite radiación, toda la que produce. Por ello, a pesar de su nombre, el cuerpo negro caliente emite luz y constituye un sistema físico idealizado para el estudio de la emisión de radiación electromagnética. La luz emitida por un cuerpo negro se denomina **radiación de cuerpo negro**.

Es posible estudiar objetos en el laboratorio con comportamiento muy cercano al del cuerpo negro. Para ello se construye un horno recubierto de negro de carbono en su interior y al que se le practica un pequeño orificio. La cámara absorbe muy poca energía del exterior, ya que ésta solo puede incidir por el reducido agujero. Sin embargo, la cavidad caliente irradia energía como un cuerpo negro. La luz emitida depende de la temperatura del interior de

la cavidad, produciendo el espectro de emisión de un cuerpo negro. La figura lateral ilustra la intensidad de la radiación del cuerpo negro en función de su longitud de onda para varias temperaturas de dicho cuerpo. Se observa en las curvas un máximo de emisión que tiene mayor frecuencia (menor  $\lambda$ ) a mayor temperatura. Se intentó explicar mediante los argumentos de física clásica suponiendo que los **átomos de las paredes vibran y al ser cargas aceleradas emiten ondas electromagnéticas**. Dicha teoría funcionaba razonablemente a bajas frecuencias (longitud de onda alta, la línea discontinua de la figura lateral), pero a altas, a partir del UV, la energía irradiada sería infinita si dicho modelo fuese correcto (a este fallo de la teoría se le denomina **"catástrofe del UV"** y es sólo una catástrofe teórica)



En 1901, y a fin de explicar estos fenómenos, **Max Planck** (1858-1947) sugiere que los átomos de las paredes del cuerpo negro se comportan como osciladores armónicos de frecuencia de oscilación ( $f$ ) dada pero, en contra de las leyes clásicas de la Física que suponían que cada átomo puede absorber o emitir energía radiante de forma continua, Planck afirma que cada átomo sólo pueden absorber o emitir energía en cantidades discretas, en "paquetes", cuyo valor es proporcional a su frecuencia de vibración.

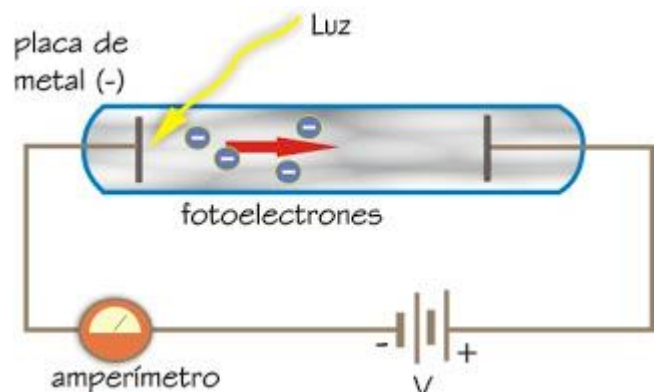
**Planck supone que la energía que emite o absorbe un átomo está formada por pequeños paquetes energéticos denominados cuantos o fotones. La energía de cada uno de los cuantos emitidos o absorbidos por un átomo viene dada por  $E=hf$**

Donde  $f$  es la frecuencia con la que oscila el átomo, y  $h$  una constante característica para todos los osciladores atómicos cuyo pequeñísimo valor es de  $6,626 \cdot 10^{-34}$  J·s (denominada **constante de Planck** en honor suyo). Ya que la energía del átomo puede aumentar o disminuir solo en cantidades enteras  $hf$ , **eso significa que la energía de la radiación es discontinua y está cuantizada** en la forma  $E = n \cdot hf$ , donde  $n$  es un número entero y positivo. Estos cuantos o fotones de energía radiante son tan pequeños que en el mundo macroscópico la energía nos parece continua, de manera análoga a lo que ocurre con la materia; pero en realidad ambas son discontinuas.

### 3.2 Confirmación de la hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico.

El **efecto fotoeléctrico** consiste en la capacidad que tienen algunos metales (especialmente los alcalinos) de emitir electrones al ser sometidos a la irradiación de luz (este efecto se usa hoy día para evitar que se cierren las puertas del ascensor cuando alguien pasa, por ejemplo). Fue estudiado experimentalmente por **Hertz**, que encontró varias leyes que lo describen. Las más importantes son:

- Para que se produzca dicho efecto, la  $f$  de la luz monocromática empleada debe ser superior a la  $f$  umbral ( $f_0$ ), típica de cada metal. Si la frecuencia es mayor, los electrones liberados llegan al ánodo positivo con una velocidad  $v$ , mayor cuanto mayor es la frecuencia
- Por muy intensa que sea la luz, si la frecuencia no es la adecuada, no se producirá efecto. La



intensidad de la luz influye sólo en la intensidad de la corriente eléctrica que recorre el circuito y no en la velocidad de los electrones emitidos.

Estas leyes no encontraban explicación usando la teoría clásica, que afirmaba que la magnitud que está relacionada con la energía de una onda es su intensidad. El efecto fotoeléctrico debería ocurrir a partir de una cierta intensidad de luz y la frecuencia no debería influir en este proceso.

Utilizando la teoría de los cuantos de Planck, **Einstein** sugirió una explicación para este fenómeno: supuso que la luz tenía naturaleza corpuscular, es decir, que está formada por fotones, que son partículas cuya energía es un cuanto de energía,  $E_{\text{fotón}}=hf$ .<sup>1</sup> El efecto fotoeléctrico se produce porque un fotón, de energía  $hf$ , choca contra el electrón más externo, que se encuentra atraído por el núcleo atómico y al que hay que aplicarle una energía (que llamaremos trabajo de extracción,  $W_{\text{extracción}}$ , o Energía de Ionización, E.I.) si queremos arrancarlo de la atracción nuclear. El fotón desaparece en el choque y comunica toda su energía al electrón, pero lo arrancará si  $hf > W_{\text{extracción}}$ . De ahí la importancia de la frecuencia. Si la energía del fotón era justo la necesaria para arrancar al electrón, con la frecuencia umbral,  $f_0$ , toda su energía se gastará en arrancar el electrón y por tanto  $W_{\text{extracción}}=hf_0$ . Si el fotón tiene más energía que  $hf_0$ , el resto de energía comunicada al electrón se invierte en energía cinética al electrón. Se puede medir esta energía cinética y comprobar que ésta aumenta al aumentar la  $f$  de la luz empleada. De esta forma, al incrementar la intensidad de la luz incidente solo aumenta el número de fotones que llegan a la superficie del metal y así, tras chocar con ellos, solo se desprenden más electrones, pero con la misma energía cinética. Por lo tanto, la energía cinética de los electrones arrancados solo dependería de la frecuencia de la luz incidente, de acuerdo con la ecuación propuesta por Einstein:

**luz: compuesta por partículas llamadas fotones, cuya energía es un cuanto:  $E = hf$ .**

**Esa energía se invierte en arrancar el electrón (E.I. o  $W_{\text{extracción}}$ ) y el resto en  $E_{\text{cinética}} = \frac{1}{2}mv^2$**

$$\text{Según sea } f \begin{cases} \text{si } f < f_0 \text{ entonces no hay efecto} \\ \text{si } f = f_0 \text{ la energía es la justa para arrancar el electron } hf_0 = E.I. \\ \text{Si } f > f_0 \text{ entonces } hf = E.I. + \frac{1}{2}mv^2 = hf_0 + \frac{1}{2}mv^2 \end{cases}$$

$$hf = hf_0 + \frac{1}{2}mv^2 \text{ (Ecuación de Einstein del efecto fotoeléctrico)}$$



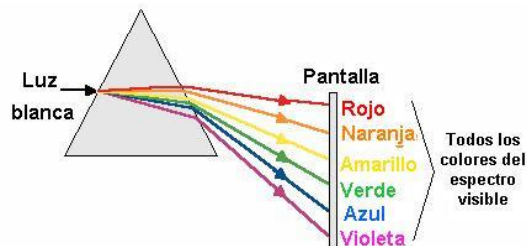
**EJERCICIOS AL FINAL DEL TEMA (Apartado 9.2 de la página 62)**

<sup>1</sup> Por ejemplo, la energía de un fotón rojo, de  $f=4,9 \cdot 10^{14}$  Hz, por ejemplo, sería  $E=hf=6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 4,9 \cdot 10^{14}=3,25 \cdot 10^{-19}$  J. Su valor es muy pequeño y por eso en este tema es muy habitual usar una unidad más pequeña que el J, el denominado **electronvoltio** (eV), que equivale al valor de la carga del electrón ( $e=1,6 \cdot 10^{-19}$  C) en J, es decir,  $1 \text{ eV}=1,6 \cdot 10^{-19}$  J. El fotón, en esas unidades, tendría una energía de  $3,25 \cdot 10^{-19} \text{ J} \cdot \frac{1 \text{ eV}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}} = 2,03 \text{ eV}$



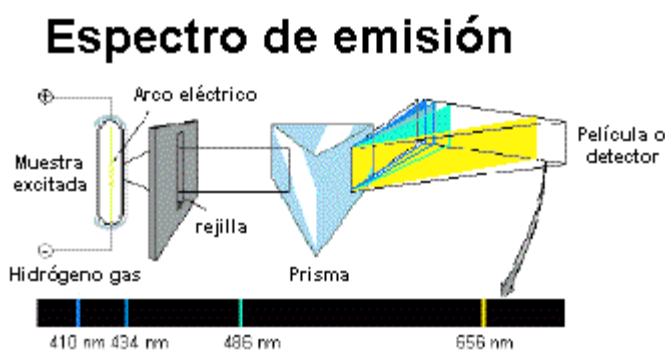
### 3.3 Espectros de emisión.

Fue Newton el primero en observar la descomposición de la luz blanca al pasar por un **prisma óptico** (objeto de vidrio de forma triangular). Este fenómeno, conocido como **dispersión refractiva** o **dispersión** (Un caso especial de la refracción, el cambio de dirección de propagación que sufre cualquier onda al cambiar de medio y que suele aparecer relacionado con la reflexión) se debe a la peculiaridad de la luz, que está formada por ondas de distintas longitudes de onda  $\lambda$  y que viajan todas a la misma velocidad en el vacío, todas a  $c \approx 3 \cdot 10^8$  m/s. Pero al cambiar de medio, al entrar en el vidrio, cada color se mueve dentro de él a una velocidad distinta, con lo que cada uno sufre un ángulo de refracción distinto y eso es lo que da lugar a la separación de colores<sup>2</sup>. Newton dividió el espectro en siete colores llamados rojo, anaranjado, amarillo, verde, azul, añil y violeta.



Podemos estudiar la luz desprendida por una sustancia al ser calentada. Así, una barra de hierro calentada al "rojo" o al "blanco" incandescente, recién sacada de la fuente de calentamiento, emite un resplandor característico. Este resplandor es la parte del espectro visible para el ojo humano. El calor de esta misma barra representa otra parte de su espectro de emisión: la región infrarroja. Los espectros de emisión **de los sólidos calentados** tienen una característica común con el espectro solar: ambos son continuos; esto es, todas las longitudes de onda de la luz visible están representadas en estos espectros. Si hacemos pasar la luz emitida por un prisma obtendremos todos los colores.

Pero la situación es muy distinta si aplicamos energía (en forma de descarga eléctrica, por ejemplo) a una muestra de átomos que estén en estado gaseoso (bien porque sea un gas, como el  $H_2$ , o porque se vaporice al aplicar la descarga, como el Hg en una ampolla cerrada y o el Fe entre 2 barras de carbono grafito entre las que salta una chispa eléctrica). Esa muestra desprende un haz de luz de un determinado color, pero lo más interesante empieza al pasar esa luz por un prisma. Al dispersarse la luz NO aparecen todos los colores, sino sólo unos pocos, que formarán unas rayas de colores al ser proyectados sobre una película fotográfica.

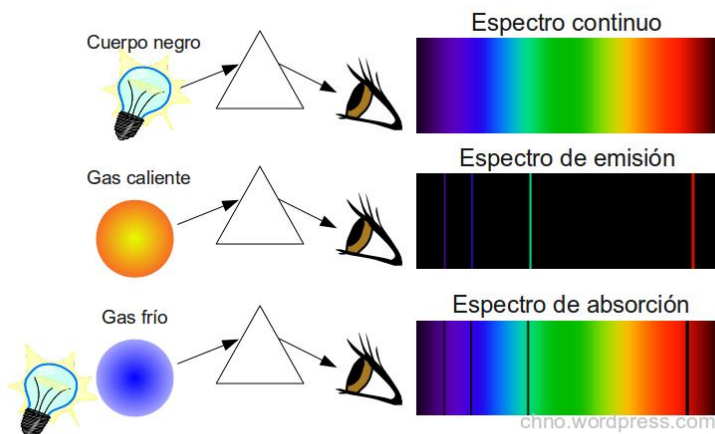


Este hecho, **el patrón de rayas que se obtiene al dispersar la luz procedente de una muestra en estado gaseoso que ha sido sometida a una descarga eléctrica por un prisma de vidrio**, se denomina **espectro atómico de emisión** y es muy importante porque viene a ser el DNI de cada elemento. Cada elemento tiene un espectro de emisión único. Las líneas características de un espectro atómico se emplean en el análisis químico para identificar átomos desconocidos, de la misma forma en que las huellas digitales sirven para identificar a una persona. Cuando las líneas del espectro de emisión de un elemento conocido coinciden exactamente con las de una muestra desconocida, es posible establecer la identidad de esta muestra.

<sup>2</sup> La explicación a la refracción de los colores tiene que ver con la ley de Snell, que afirma que:  $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$ , siendo  $n_1$  y  $n_2$  los índices de refracción de la luz en cada medio (el cociente entre la velocidad de la luz en el vacío,  $c$ , y la velocidad de la luz en el medio,  $v$ .  $n = c/v$  y como  $v < c$ ,  $n \geq 1$ ) y  $\theta_1$  y  $\theta_2$  los ángulos que los rayos original y refractado forman con la normal a la superficie de separación, respectivamente. Cada color, cada  $\lambda$ , tiene su propia velocidad en el vidrio y por tanto su propio índice de refracción  $n$ .

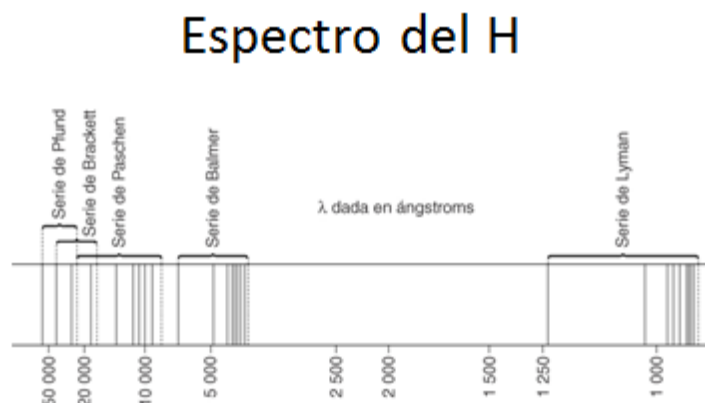
El aparato para obtener estos espectros se denomina **espectroscopio** y fue desarrollado por Robert Bunsen (1811-1899) y Gustav Kirchhoff (1824-1887) a finales del s XIX. Su funcionamiento es muy sencillo: la luz emitida por esa muestra gaseosa se pasa por un colimador (una fija rejilla) y por un prisma óptico y las rayas descompuestas se proyectan sobre una película fotográfica o cámara digital o sobre una regleta con una escala graduada de frecuencias (o longitudes de onda). Bunsen y Kirchhoff lo utilizaron para identificar elementos: En 1860, descubrieron un nuevo elemento y lo llamaron cesio (en latín, "caesius" significa azul cielo" debido a las líneas azules características de su espectro). En 1861 descubrieron el rubidio de forma parecida (en latín, "rubidius" significa el rojo más oscuro). Y otro elemento más, que caracterizaron por su espectro fue el helio (en griego, "helios" significa el sol). Su espectro se observó durante el eclipse solar de 1868, pero el helio no se aisló en la Tierra hasta 27 años más tarde.

Otra forma de estudiar esos espectros son los denominados **espectros de absorción**, que consisten en hacer pasar la luz continua de un cuerpo incandescente (que, por tanto, contiene todas las frecuencias) por una muestra de gas que absorbe justo las frecuencias que emitía al ser calentada, por lo que al descomponer la luz que ha atravesado la muestra observaremos un espectro continuo al que le faltan justo la rayas del espectro de emisión.



### 3.4 Espectro del átomo de hidrógeno.

El espectro atómico del hidrógeno ha sido uno de los espectros atómicos más intensamente estudiados. Se obtiene usando un tubo de vidrio cerrado que contiene gas hidrógeno a una presión muy baja, que conectamos a una fuente de alta tensión para producir una descarga eléctrica. La luz de una lámpara de hidrógeno se ve de color púrpura rojizo. La longitud de onda principal de esta luz es la luz roja de 656,3 nm. Sin embargo, en el **espectro visible** del hidrógeno atómico aparecen otras tres líneas: una línea azul verdosa a 486,1 nm, una línea violeta a 434,0 nm, y otra línea violeta a 410,1 nm. En la figura siguiente se ve dicho espectro, con las longitudes de ondas





expresadas en **Angstrom, Å** (1 Å=10<sup>-10</sup> m; 1 nm=10<sup>-9</sup> m=10 Å)

**Balmer** encontró en 1885, mediante la técnica de prueba y error, que estas líneas obtenidas en la zona visible se relacionaban mediante la siguiente expresión matemática:

$k = \frac{1}{\lambda} = 1,097 \cdot 10^7 \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right) m^{-1}$  (Siendo m=3, 4, 5... para cada raya del espectro). Se pueden comprobar los valores de las líneas visibles del espectro dados antes usando m=3, 4, 5, etc. Posteriormente, fueron descubiertas otras series<sup>3</sup> de líneas en las zonas ultravioleta del espectro y en la infrarroja. Johannes Robert **Rydberg** (1854-1919), físico sueco, generalizó la ecuación de Balmer comprobando que todas las líneas del espectro se relacionaban por la ecuación  $k = \frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) m^{-1}$ , siendo R<sub>H</sub> la denominada **constante de Rydberg para el hidrógeno**, de valor 1,097·10<sup>7</sup> m<sup>-1</sup> y siendo m y n enteros a partir del 1, tal que m>n. El primer número n indica la **serie** y el **orden de m el número de línea**. Así, si n=2 y m=5 sería una línea de la serie de Balmer (n=2), concretamente la 3ª (m=3, 4, 5... y 5 es el 3er. valor)

Serie	Zona	Valores de n y m	
Lyman	<b>Ultravioleta</b> (91,2 nm < λ < 121,6 nm)	n=1 y m=2, 3, 4 ...	$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{m^2} \right) m^{-1}$ (m=2,3,4 ...)
Balmer	<b>Visible</b> (364,7 nm < λ < 656,5 nm)	n=2 y m=3, 4, 5 ...	$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right) m^{-1}$ (m=3,4,5 ...)
Pashen	Infrarrojos	n=3 y m=4, 5, 6 ...	$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{m^2} \right) m^{-1}$ (m=4,5,6 ...)
Brackett	Infrarrojos	n=4 y m=5, 6, 7 ...	$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{m^2} \right) m^{-1}$ (m=5,6,7 ...)
Pfund	Infrarrojos	n=5 y m=6, 7, 8 ...	$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{m^2} \right) m^{-1}$ (m=6,7,8 ...)

El espectro atómico del Hidrógeno es algo característico de ese átomo por lo que es razonable pensar que depende de la distribución electrónica en el átomo. Por tanto, sería muy importante el poder interpretar las líneas del espectro de emisión de los átomos para conocer su relación con la estructura electrónica. El espectro del átomo de Hidrógeno no se podía explicar con la teoría clásica de la radiación.



### EJERCICIOS AL FINAL DEL TEMA (Apartado 9.3 de la página 62)

## 4 El modelo atómico de Bohr.

En 1913 Niels Bohr propone el primer modelo "cuántico" del átomo de hidrógeno. En este modelo se interpreta el hecho experimental del espectro del átomo de hidrógeno, es decir, el por qué los átomos emiten o absorben luz a unas determinadas frecuencias o longitudes de onda. El modelo se puede resumir en tres postulados:

1. En un átomo, el electrón solo puede tener ciertos estados de movimiento definidos y estacionarios; en cada uno de ellos tiene una energía fija y determinada.
2. Las únicas órbitas que son estables o estacionarias son aquellas en las que se cumple que el momento angular del electrón, L<sup>4</sup>, es un múltiplo de la constante de Planck h dividido por 2π :

<sup>3</sup> Una serie espectral es un conjunto de líneas de idéntico aspecto de tal forma que al crecer el nº de ondas (o la frecuencia) se van aproximando entre sí, al mismo tiempo que disminuye gradualmente su intensidad. Al final de la serie existe una acumulación de infinitas líneas cada vez más débiles que se denomina *límite de la serie*.

<sup>4</sup> El momento angular de una partícula es una magnitud física muy usada en movimientos rotatorios y se define, a efectos de un movimiento circular, como el producto del radio de giro por la cantidad de movimiento, p, que te recuerdo era mv. O sea, para el movimiento circular L=r·p=r·mv

$$L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

3. Si un electrón pasa de un estado estacionario superior a otro inferior emite un fotón y si lo hace de un estado estacionario inferior a otro superior absorbe un fotón, siendo la ecuación:

$$\Delta E = E_m - E_n = \pm hf. \text{ (Según absorba o emita energía)}$$

Física del movimiento circular: Antes de empezar a calcular las magnitudes del átomo de Bohr (radio de giro, energía, etc), es bueno recordar ciertos conceptos de física ligados al movimiento circular. La 2ª ley de Newton, o ley fundamental de la **dinámica**, establece que  $F=ma$ . Si recuerdas, la aceleración tiene dos componentes, la **aceleración tangencial**,  $a_t$ , que mide cambios en el módulo de la velocidad (y será 0 en el MCU que realiza el electrón alrededor del núcleo, al no cambiar la velocidad de módulo) y la **aceleración normal o centrípeta**,  $a_n$ , que mide cambios en la dirección (Como  $v$  cambia continuamente de dirección, al ser tangente a la trayectoria, incluso en el MCU  $a_n$  no será cero). Esta componente de la aceleración, la  $a_n$ , apunta hacia el centro de giro y es perpendicular a  $v$  (que es tangente a la trayectoria). Por eso, en el MCU  $F=ma_n$ . La **F es la resultante de todas las fuerzas**, también apuntará hacia el centro (que es donde se encontrará el núcleo atómico), y sería la suma de las fuerzas gravitatoria y eléctrica, pero como  $G$  (recuerda,  $F_{grav}=Gm_1m_2/r^2$ ) tiene un valor tan pequeño y  $m_1$  y  $m_2$  son también muy pequeñas, la despreciaremos, y nos quedaremos con la  **$F_{elec}=Kq_1q_2/r^2$** , siendo  $K=9 \cdot 10^9$  (S.I.)

En cuento a la **energía**, por el mismo motivo sólo tendremos en cuenta la  **$E_p$  eléctrica**, cuya expresión era  **$E_p=Kq_1q_2/r$**  (su fórmula es como la de la fuerza pero desaparece el cuadrado del denominador). Recuerda que como la fuerza eléctrica, al igual que la gravitatoria, son conservativas, la **energía mecánica del electrón**,  $E_m$ , definida como suma de la  **$E_{cinética}=1/2mv^2$**  y la energía potencial eléctrica,  $E_p$ , debe permanecer constante (de ahí el nombre de conservativas para estas fuerzas)

Radio de las órbitas permitidas:

Planteamos la ley fundamental de la dinámica, donde  $q_1=+e$  (el protón del núcleo) y  $q_2=-e$  (electrón). No ponemos los signos porque, al ser  $F$  una magnitud vectorial sólo estamos interesados en su módulo:

$$F_{electrica} = K_e \frac{e^2}{r^2} = m_e a_{centripeta} = m_e \frac{v^2}{r}; m_e v^2 = K_e \frac{e^2}{r}; v^2 = K_e \frac{e^2}{m_e r}$$

Lo combinamos con el 2º principio de Bohr, de cuantización del momento angular.

$$L = rm_e v = n \frac{h}{2\pi}; v = \frac{nh}{2\pi r m_e}; elevamos al cuadrado v^2 = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e^2 r^2}$$

Si igualamos  $v^2$  en las dos expresiones anteriores se elimina la velocidad y obtenemos la expresión para el radio:

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e K_e e^2}$$

$$r = \frac{n^2 \cdot (6,626 \cdot 10^{-34} J \cdot s)^2}{(4 \cdot \pi^2 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} kg \cdot 9 \cdot 10^9 \frac{Nm^2}{C^2} \cdot (1,602 \cdot 10^{-19} C)^2)} = 0,529 \cdot 10^{-10} \cdot n^2 m = \mathbf{0,529 \cdot n^2 \text{ \AA}}$$

Estos serían los radios de las distintas órbitas posibles del electrón.

Energía de cada órbita:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_m = E_{cinética} + E_{pot.electrica} = \frac{1}{2}m_e v^2 - K_e \frac{e^2}{r} \\ \text{de la primera ecuación } m_e v^2 = K_e \frac{e^2}{r} \end{array} \right\} E_m = -\frac{1}{2}K_e \frac{e^2}{r}$$

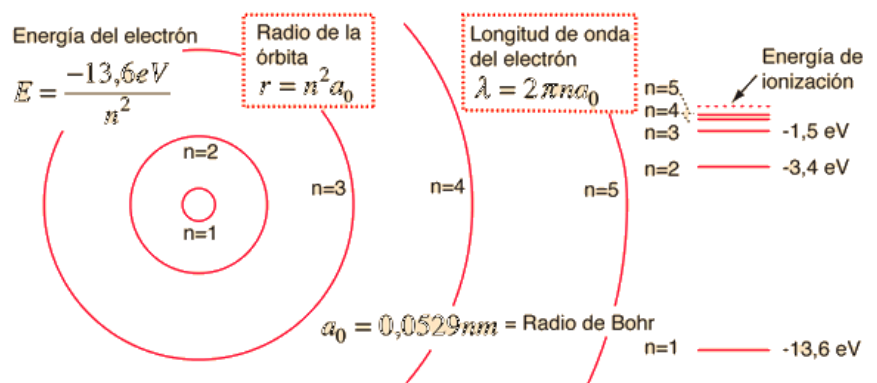
Si sustituimos r por el valor hallado anteriormente:

$$E_m = -\frac{1}{n^2} \left[ \frac{2K_e^2 m_e e^4 \pi^2}{h^2} \right]$$

$$E_m = -\frac{1}{n^2} \left[ \frac{2 \cdot (9 \cdot 10^9 \frac{Nm^2}{C^2})^2 (1,602 \cdot 10^{-19}C)^4 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} kg \cdot \pi^2}{(6,626 \cdot 10^{-34} J \cdot s)^2} \right] = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18} J}{n^2} \frac{1 eV}{1,602 \cdot 10^{-19} J} = -\frac{1}{n^2} \cdot 13,6 eV$$

Esa es la energía de cada órbita. Según el principio de mínima energía, el electrón del átomo de hidrógeno debe estar en el nivel más bajo de energía (-13,6 eV, para n=1) y un radio de  $0,529 \cdot 10^{-10} m$ .

Antes de proseguir podemos hacer un alto y plantearnos ¿Por qué la energía de todas las órbitas es negativa? o dicho de otra manera ¿qué situación física representa el nivel 0 de energía, una  $E_{mecánica} = 0$ ? Es fácil averiguarlo. Si la energía mecánica del protón y del electrón que forman el átomo de hidrógeno fuese cero debe ser porque su energía cinética es cero (ambos estarían en reposo) y porque su energía potencial es cero (y eso sólo ocurrirá cuando  $r = \infty$ , es decir, cuando ambas partículas estén tan alejadas que no sientan atracción eléctrica). Tendríamos a ambas partículas en reposo e infinitamente separadas. ¿Qué significará, entonces, que la  $E_m$  de todas las órbitas sea negativa?. Pues que esa situación, el electrón girando alrededor del núcleo en cualquier órbita, es energéticamente más favorable que la separación infinita de ambas partículas y ya sabemos que los sistemas buscan tener la menor energía posible, por eso el electrón elegirá la 1ª orbita para girar.



Éxitos de la teoría de Bohr:

**-Energía de ionización:** El valor obtenido para la energía del estado fundamental, -13,6 eV, puede comprobarse a través de la denominada **energía de ionización**, que es la energía mínima necesaria para ionizar un mol de átomo de hidrógeno en estado gaseoso. Es la energía asociada al proceso  $H \rightarrow H^+ + 1e^-$  para un mol de átomos y su valor experimental es 1310 kJ/mol. Si lo convertimos a eV/átomo

$$1310 \frac{kJ}{mol} \cdot \frac{1 mol}{N_A \text{ átomos}} \cdot \frac{10^3 J}{1 kJ} \cdot \frac{1 eV}{1,6 \cdot 10^{-19} J} = 13,6 eV$$

Desde un punto de vista físico, ionizar un átomo de hidrógeno consistirá en comunicarle al electrón la energía necesaria para separarlo del protón que forma el núcleo a una distancia infinita y que adquiera una energía igual a 0, por lo que si en la 1ª órbita tiene una energía de -13,6 eV y queremos que llegue a 0 debemos aportarle +13,6 eV (el + indica "aportada al sistema"), valor que coincide con el experimental. Un éxito de la teoría de Bohr.

**-Explicación de los espectros atómicos:** Si un electrón salta de un estado estacionario inferior  $E_n$  a otro superior  $E_m$  absorbe un fotón. Y si salta de un estado estacionario superior  $E_m$  a otro inferior  $E_n$  emite un fotón ( $n < m$ )

- $\Delta E = E_m - E_n = +hf$  al pasar de  $m$  a  $n$  (decaimiento de electrón excitado de un nivel  $m$  al  $n$ )
- $\Delta E = E_n - E_m = -hf$  al pasar de  $n$  a  $m$  (excitación de un electrón del nivel  $n$  al  $m$ )

Con el tercer postulado se podía explicar la ecuación que relaciona las líneas del espectro del átomo de hidrógeno. Así cada línea del espectro significa el salto del electrón desde una órbita a otra. Por ejemplo, si el electrón salta desde la órbita  $m$ , a la que ha sido excitado previamente por una descarga eléctrica, a la  $n$ , no necesariamente el estado fundamental, ya que puede volver a hacer un segundo o más saltos hasta llegar al fundamental, emite un fotón:

$$\Delta E = E_m - E_n = hf$$

$$\Delta E = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18} J}{m^2} + \frac{2,18 \cdot 10^{-18} J}{n^2} = 2,18 \cdot 10^{-18} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = hf = h \frac{c}{\lambda} = hck$$

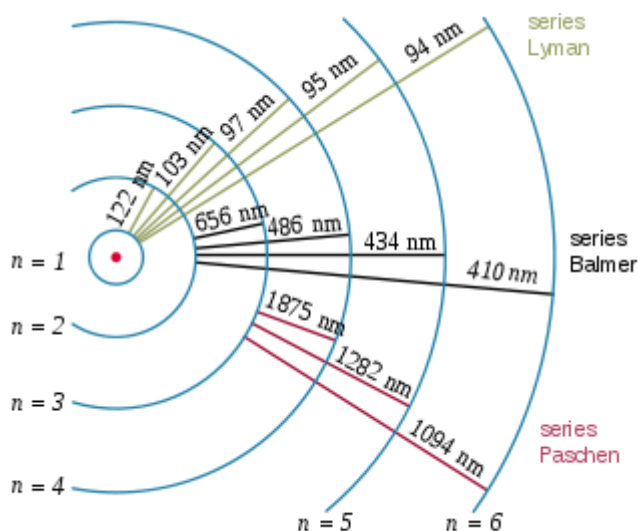
$$k = \frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc} = \frac{2,18 \cdot 10^{-18} J}{(6,602 \cdot 10^{-34} J \cdot s \cdot 3 \cdot 10^8 ms^{-1})} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = 10973758 m^{-1} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Que es la fórmula de Rydberg. Las aportaciones del *modelo atómico de Bohr* fueron las siguientes:

1. Aplica por primera vez el fenómeno de la *cuantización* del momento angular del electrón y a la energía del electrón en su órbita.
2. Explica con gran detalle los resultados experimentales del espectro del átomo de Hidrógeno. En primer lugar, obtiene teóricamente la constante de Rydberg,  $R_H$ , que es un resultado experimental. En segundo lugar, interpreta las líneas del espectro como saltos del electrón desde una órbita a otra.

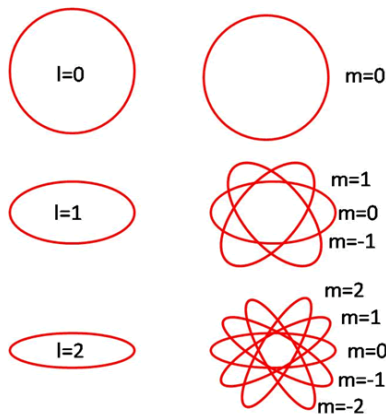
Los fallos del modelo atómico de Bohr se pueden resumir en:

1. No explica los fundamentos físicos para considerar que el momento angular del electrón en la órbita está cuantizado.
2. Tiene un error básico: al ser el electrón una carga y tener aceleración (debida al giro) emite una onda electromagnética que transporta energía, que saldría del propio electrón. Iría perdiendo velocidad hasta caer. (Toda carga acelerada crea un  $E$  variable que a su vez produce un  $B$  inducido que a su vez genera un  $E$ . En suma, una onda electromagnética)
3. No explica correctamente los espectros de los átomos polielectrónicos.



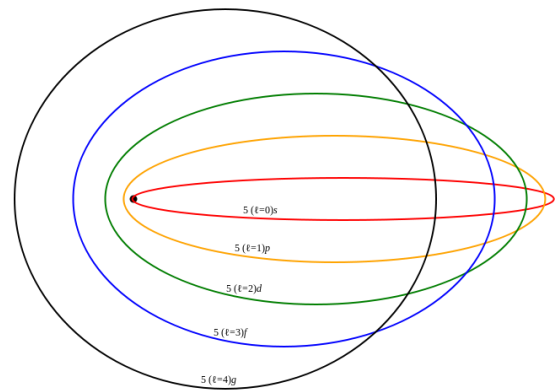
EJERCICIOS AL FINAL DEL TEXTO (Apartado 9.4 de la página 62)

### 4.1 Refinamientos del modelo atómico de Bohr. Efecto Zeeman. Modelo de Sommerfeld



Cuando se pudieron utilizar espectroscopios de mayor poder de resolución se observó un desdoblamiento de las rayas únicas de los primeros espectros (en el caso de hidrógeno, cada línea aparece como una pareja de líneas o *doblete*) y esto le hizo a **Sommerfeld**, en 1916, ampliar el modelo de Bohr, indicando que no sólo podría haber órbitas circulares, sino también elípticas, para cuya definición hace falta introducir un segundo número cuántico, **l**, o **número cuántico secundario**, cuyos valores pueden ir desde cero hasta (n-1). El número cuántico l era denominado así porque nacía de cuantizar las posibles excentricidades de las órbitas elípticas a través de sus momentos angulares, magnitud física designada por  $\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$ .

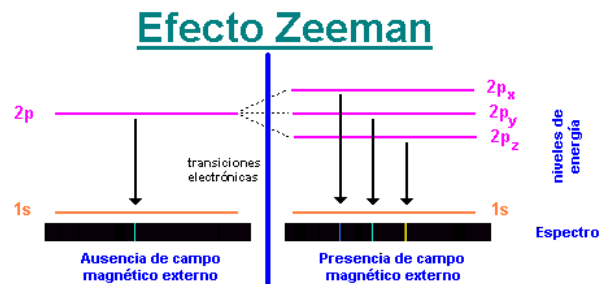
Cuando se aplica un **campo magnético externo**, las líneas espectrales se desdoblán en múltiples líneas estrechamente espaciadas. Observado por primera vez por Pieter **Zeeman** (y llamado en su honor **Efecto Zeeman**), esta división se atribuye a la interacción entre el campo magnético y el momento de dipolo magnético asociado con el momento angular orbital (dicho de otra manera: El electrón al girar, como es una carga acelerada, produce un campo magnético que en presencia de uno externo interacciona con él). En ausencia del campo magnético, las energías del hidrógeno dependen sólo de n, y las emisiones se producen en una sola longitud de onda. Igual ocurre al aplicar un campo eléctrico (**Efecto Stark**).



Para explicar ambos efectos hubo que introducir la posibilidad de que sólo fueran posibles unas ciertas orientaciones en el espacio, por la que habría que introducir un tercer número cuántico, **m<sub>l</sub>**, **número cuántico magnético**, que cuantifica estas orientaciones y puede tomar los valores de +l, +(l-1),...0...-(l-1), -l. Estos valores cuantizan la proyección del momento angular a lo largo del eje Z e indican, por tanto, la inclinación de los planos orbitales.

El desdoblamiento de las líneas observado en algunos espectros (por ejemplo, los espectros de los metales alcalinos)

se justificó suponiendo que dentro de cada órbita, el electrón **podía tener un giro sobre sí mismo** en dos posibles sentidos, por lo que se introdujo un nuevo número cuántico, **s**, o **de spin**<sup>5</sup> con valores de +1/2 ó -1/2, para cuantificar su momento angular de rotación. Este número fue propuesto por dos físicos, **Goudsmit y Uhlenbeck**. El spin proporciona una medida del momento angular intrínseco de toda partícula. En contraste con la mecánica clásica, donde el momento angular se asocia a la rotación de un objeto extenso, el spin es un fenómeno exclusivamente cuántico, que no se puede relacionar de forma directa con una rotación en el espacio. La intuición de que el spin corresponde al momento angular debido a la rotación de la partícula en torno a su propio eje sólo debe tenerse como una imagen mental útil, puesto que, tal como se deduce de la teoría cuántica relativista, el spin



<sup>5</sup> Al aplicar un campo magnético cuando se hacía un espectro atómico de determinados átomos, además de tripletes, se obtenían 4, 6 e incluso más líneas. Este efecto era conocido como "efecto Zeeman anómalo" y en realidad su explicación tiene que ver con un desdoblamiento añadido debido al spin del electrón.

no tiene una representación en términos de coordenadas espaciales, de modo que no se puede referir ningún tipo de movimiento.

De esta forma, se puede definir el estado del electrón mediante un conjunto de cuatro números cuánticos,  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  y  $s$ . A pesar de todo, este modelo sólo es adecuado para interpretar las propiedades del átomo de hidrógeno y de los llamados hidrogenoides (núcleos rodeados de un solo electrón como el  $\text{He}^+$ ). Como vemos todas estas ideas son "parches" al modelo de Bohr. Se veía que la mecánica tradicional, la de Newton, la clásica, hacía aguas al trabajar con los electrones. Eso llevó a la mecánica cuántica.

---

## 5 Mecánica cuántica:

---

Además de las ideas originales de Max Planck y la confirmación de Einstein en el efecto fotoeléctrico, la mecánica cuántica se construyó usando otros 2 principios importantes:

### 5.1 La naturaleza dual del electrón. Dualidad onda-corpúsculo (De Broglie, 1924)

Como hemos visto anteriormente, la naturaleza de la luz no es fácilmente analizable a no ser que la consideremos de tipo ondulatorio a fin de explicar ciertos fenómenos (como la reflexión, refracción, difracción, etc.) o de tipo corpuscular al pretender hacerlo con otros fenómenos (como el efecto fotoeléctrico, etc.).

A partir de este comportamiento anómalo, en 1923 Louis De Broglie plantea que si la luz está formada por partículas (fotones las denominó Einstein) tendrán una energía:  $E=mc^2$  (ecuación procedente de la teoría de la relatividad del propio Einstein)

De Broglie se planteó que en los fotones:

$$E = mc^2 = mc \cdot c = pc \quad (p=\text{cantidad de movimiento}=mv. \text{ En la luz en el vacío, como } v=c, p=mv=mc)$$

Usando la teoría de Planck:

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

Combinando ambas:

$$pc = \frac{hc}{\lambda}; \lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{para el fotón})$$

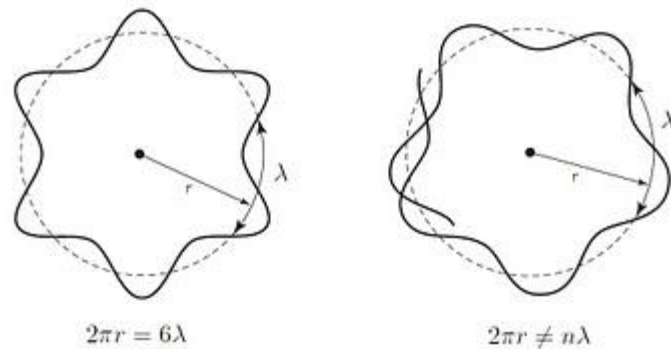
Luis de Broglie pensó que esa fórmula, deducida para los fotones, podría ser válida para cualquier partícula, que llevaría asociada una onda cuya  $\lambda$  vendría dada por:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (\text{para cualquier partícula})$$



Esta es la conocida como ecuación de la **dualidad onda-corpúsculo: toda partícula lleva una onda asociada cuya longitud de onda viene dada por la ecuación anterior**. Los efectos ondulatorios de las partículas macroscópicas son despreciables, al ser  $mv$  muy alto y  $\lambda$  muy pequeño (difícil de detectar por difracción, por ejemplo)

Así, los electrones, cuya masa es muy pequeña, tienen una onda asociada apreciable. El discutido segundo postulado de Bohr puede explicarse a partir de esta idea: una órbita será posible cuándo la onda electrónica sea



estacionaria, y esto ocurre, como puede verse en la imagen adyacente, cuando la longitud de la órbita sea un múltiplo entero de la longitud de onda electrónica (así su final se solapará con su principio y la onda será estacionaria y parecerá no moverse). Si  $r$  es el radio de su órbita:  $2\pi r = n\lambda$ , sien " $n$ " un número natural. Si sustituimos  $\lambda$  por su valor  $h/mv$ , nos quedaría  $mvr = nh/2\pi$  (2º postulado de Bohr)

## 5.2 Principio de incertidumbre (Heisenberg, 1927).

Con el descubrimiento del comportamiento ondulatorio de los electrones surgió otro problema: ¿cómo se podía precisar la "posición" de una onda? Es imposible saber su posición exacta debido a que se extiende en el espacio.

Para describir el problema que significa localizar una partícula subatómica que se comporta como onda, Werner Heisenberg formuló una teoría que ahora se conoce como **principio de incertidumbre**: *es imposible conocer con total precisión y simultáneamente el momento lineal  $p$  ( $p = \text{cantidad de movimiento} = mv$ ) y la posición de una partícula simultáneamente. Expresado en forma matemática:*

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \text{ siendo } \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

donde  $\Delta x$  y  $\Delta p$  son las incertidumbres (los errores absolutos) en la medición de la posición y el momento lineal de la partícula, respectivamente. La importancia de la ecuación anterior radica en que nos impone unos límites al conocimiento exacto y simultáneo de 2 magnitudes tan importantes para la mecánica como  $p$  y  $x$ . Por muy bien que diseñemos un experimento el producto de los errores cometidos en determinar  $x$  y  $p$ , que son  $\Delta x$  y  $\Delta p$  respectivamente, serán en el mejor de los casos iguales a  $h/4\pi$  y en la mayoría de los casos mayor (de ahí el signo  $\geq$ ). Por tanto, medir el momento de una partícula con mayor precisión (es decir haciendo de  $\Delta p$  una cantidad pequeña) significa que la posición debe ser comparativamente menos precisa (es decir,  $\Delta x$  aumentará). De manera similar, si la posición de la partícula se conoce con mayor precisión, la medición de su momento será menos precisa.

Al aplicar el principio de incertidumbre de Heisenberg al átomo de hidrógeno, se puede ver que en realidad el electrón no viaja en la órbita alrededor del núcleo con una trayectoria bien definida, como suponía Bohr. Si así fuera, podría ser factible determinar simultáneamente, y con exactitud, la posición del electrón (a partir del radio de la órbita) y su momento (mediante su energía cinética), con lo cual se violaría el principio de incertidumbre

También puede justificarse este principio afirmando que para observar algo hay que "perturbarlo" en cierto grado; es imposible efectuar una medida sin interactuar con el sistema que se desea medir. En el mundo macroscópico esta perturbación es despreciable, mientras que en el microscópico no ocurre así. Si, por ejemplo, queremos ver un electrón, es preciso que un fotón de luz interactúe con él, pero en ese mismo momento su velocidad se verá

alterada por ese choque. Cuanto menor sea el tamaño de la partícula a observar, menor ha de ser también la longitud de la onda que se debe utilizar en el experimento para poder visualizarla adecuadamente; eso significa que la radiación utilizada será de mayor frecuencia y por tanto mayor energía (recuerda que la energía del fotón es  $hf$ ) y alterará más la cantidad de movimiento de partícula en cuestión.

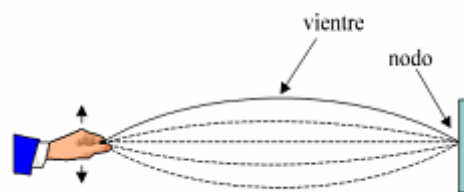
Esta indeterminación obedece, según la interpretación moderna, a una inexistencia real de valores concretos de ambas magnitudes, existiendo sólo valores permitidos con una probabilidad cada uno. Teniendo esto en cuenta, a partir de entonces en la rama atómica solo se trabaja con valores estadísticos, probabilísticos.



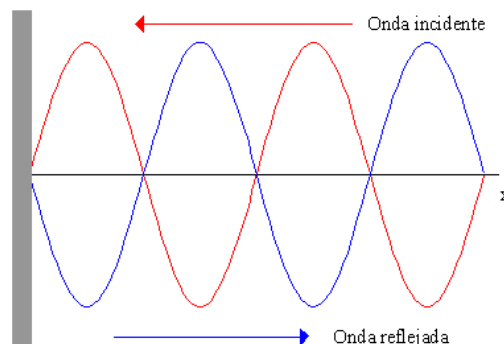
EJERCICIO AL FINAL DEL TEMA (Apartado 9.5 de la página 63)

## 6 Modelo mecano-cuántico

Basándose en la idea anterior, en la hipótesis de De Broglie que afirmaba que el electrón llevaba una onda asociada, si queremos que el electrón no pierda ni gane energía es necesario que ésta sea estacionaria. Una onda estacionaria es aquella que no vibra en algunos puntos (nodos) y por tanto no propaga energía (ya que si un punto nunca vibra, no tiene energía ni la deja pasar a su través). Podemos visualizar una onda estacionaria como la que se forma en una cuerda tensa sujeta a ligaduras por sus extremos (como en un violín). En ella podemos observar que, al hacerla vibrar en un extremo, se produce una onda que se desplaza a lo largo de ella hasta alcanzar el otro extremo y posteriormente es reflejada hacia atrás interfiriendo con las ondas de ida, como vemos en la ilustración. Se trata de ondas estacionarias, que se pueden describir por medio de una ecuación matemática, llamada ecuación de ondas.



Partiendo de esta idea y de la teoría cuántica de Planck, **Schrödinger**, en 1926, efectúa un tratamiento matemático que le permite estudiar el comportamiento del electrón en el átomo, así como calcular sus valores energéticos. Para ello, emplea una ecuación en la que aparece una función matemática, denominada **función de onda,  $\psi$** , que es lo único que podemos conocer sobre el sistema y que será capaz de describir la evolución de la posición del electrón en el entorno atómico en que se halla. Su tratamiento físico-matemático conduce a la llamada ecuación de ondas que escrita en forma simbólica es:



$$H\psi = E\psi$$

en donde H representa un operador matemático (denominado Hamiltoniano del sistema) relacionado con las energías cinética y potencial del electrón en cuestión. O en su forma desarrollada (sólo se indica aquí para apreciar su complejidad, no para aprenderla) para el átomo de hidrógeno la ecuación de ondas quedaría:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - K \frac{Ze^2}{r} \psi = \left( -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - K \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = E\psi$$

La ecuación de ondas nos indica que si operamos adecuadamente la función de onda del electrón, obtendremos la misma función multiplicada por un número que corresponde a la energía de dicho electrón.

Aunque la función de onda  $\psi$  no tiene ningún significado físico real, su cuadrado  $\psi^2$  es una medida directa de la probabilidad de encontrar el electrón en una determinada zona del espacio. En el intervalo de distancias al núcleo en el que  $\psi^2$  alcanza un valor por encima del 90%-95% podemos encontrar con bastante seguridad el electrón, por lo que podemos representarlo mediante un contorno volumétrico al que llamamos orbital atómico.

**Orbital atómico** es la zona del espacio donde existe una gran probabilidad de encontrar el electrón. Este valor de probabilidad se cifra arbitrariamente en, al menos, el 90%-95%.

### 6.1 Números cuánticos y niveles de energía

Pero no todas las soluciones derivadas de la aplicación de esta ecuación conducen a resultados reales; para ello es preciso condicionarla con unos **parámetros restrictivos o condiciones de contorno** a fin de que el problema tenga significado físico. Estos parámetros reciben el nombre de **números cuánticos** y, por su analogía con los obtenidos en el modelo de Bohr y sus modificaciones, se simbolizan de la misma manera.

Los números cuánticos solo pueden tomar los mismos valores que anteriormente estudiamos, para que la solución de la ecuación de Schrödinger sea aceptable en cada caso.

Vamos a estudiar cada uno de ellos:

#### El número cuántico principal (n)

Puede tomar valores enteros de 1, 2, 3, etc. En el átomo de hidrógeno, el valor de n define la energía de un orbital, mientras que para átomos polielectrónicos en la energía también influye el l, como veremos luego. El número cuántico principal también se relaciona con la distancia promedio del electrón al núcleo en un determinado orbital (el tamaño del orbital). Cuanto más grande es el valor de n, mayor es la distancia promedio entre un electrón en el orbital respecto al núcleo y, en consecuencia, el orbital es más grande. n proviene de cuantizar la energía y el radio (en los hidrogenoides), como en el modelo de Bohr, siendo

$$E_m = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18}}{n^2} \text{ (J, Julios) y } r = 0,529 \cdot 10^{-10} \cdot n^2 \text{ (m, metros)}$$

#### El número cuántico secundario u orbital (l)

Expresa la "forma" de los orbitales. Los valores de l dependen del valor del número cuántico principal, n. Para cierto valor de n, l tiene todos los valores enteros posibles desde 0 hasta (n-1). Para n= 1 sólo existe un posible valor de l; es decir, l= n-1 = 1 - 1 = 0. Si n= 2, l puede tener dos valores: 0 y 1. Si n= 3, l puede tener tres valores: 0, 1 y 2. El valor de l se designa con las letras s, p, d,...de la siguiente forma:

Valor de l	0	1	2	3	4	5
Nombre del orbital	s	p	d	f	g	h

Por tanto, si l =0, tenemos un orbital s, si l =1, tenemos un orbital p, y así sucesivamente. <sup>6</sup>

l es el número resultante de cuantizar el momento angular (de ahí su símbolo), de tal forma que para cada valor de n el módulo del momento angular,  $|\vec{L}|$ , sólo puede tomar los valores  $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$

<sup>6</sup> La secuencia especial de letras (s, p y d) tiene origen histórico. Los físicos que estudiaron los espectros de emisión atómica intentaban relacionar las líneas espectrales detectadas con los estados de energía asociados a las transiciones. Observaron que algunas líneas eran finas (sharp, en inglés), otras eran más bien difusas (diffuse), y algunas eran muy intensas y se referían a ellas como principales (principal). Por esta razón, asignaron las letras iniciales del adjetivo que calificaba a cada línea con dichos estados de energía. Sin embargo, después de la letra d, el orbital se designa siguiendo un orden alfabético, comenzando con la letra f (para el estado fundamental)

**Numero cuántico magnético ( $m_l$  o  $m$ )**

El número cuántico magnético ( $m$ ) describe la orientación del orbital en el espacio. Dentro de un subnivel, el valor de  $m_l$  depende del valor que tenga el número cuántico del momento angular,  $l$ . Para cierto valor de  $l$  existen  $(2l + 1)$  valores enteros de  $m$ , como sigue:

$$-l, -(l-1), -(l-2), \dots, 0, \dots, (l-2), (l-1), +l$$

Si  $l = 0$ , entonces  $m = 0$ . Si  $l = 1$ , entonces existen  $[(2 \times 1) + 1]$ , o tres valores de  $m_l$ , es decir,  $-1, 0$  y  $1$ . Si  $l = 2$ , hay  $[(2 \times 2) + 1]$ , o cinco valores de  $m$ , es decir,  $-2, -1, 0, 1$  y  $2$ .

El conjunto de orbitales que tienen el mismo valor de  $n$  se conoce comúnmente como nivel o capa. Los orbitales que tienen los mismos valores de  $n$  y  $l$  se conocen como **subnivel o subcapa**. Por ejemplo, el nivel con  $n = 2$  está formado de dos subniveles,  $l = 0$ , y  $1$  (los valores permitidos para  $n = 2$ ). Éstos corresponden a los subniveles  $2s$  y  $2p$ , donde  $2$  expresa el valor de  $n$ , y  $s$  y  $p$  se refieren al valor de  $l$ . El número de valores que tenga  $m$  indica el número de orbitales presentes en un subnivel con cierto valor de  $l$ .

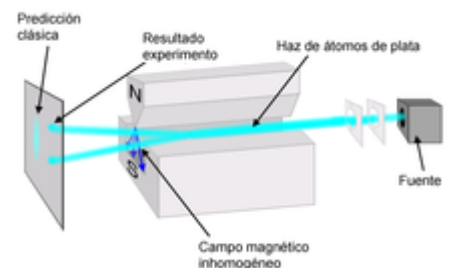
$m$  es el número resultante de cuantizar la proyección del  $\vec{L}$  sobre el eje  $z$ , denominada  $L_z$ , que sólo puede tomar los valores  $L_z = m_l h / 2\pi$ . Esto impone unas orientaciones posibles a  $\vec{L}$  y por tanto a los orbitales.

**Numero cuántico de spin ( $s$  o  $m_s$ )**

Los experimentos realizados con los espectros de emisión de los átomos de sodio e hidrógeno indicaban que las líneas del espectro de emisión se podían separar aplicando un campo magnético externo. Los físicos sólo pudieron explicar estos resultados suponiendo que los electrones se comportan como pequeños imanes. Si nos imaginamos que los electrones giran sobre su propio eje, como lo hace la Tierra, es factible explicar sus propiedades magnéticas.

Según la teoría electromagnética, cuando gira una carga se genera un campo magnético, y este movimiento es el responsable de que el electrón se comporte como un imán. El electrón puede girar en sentido de las agujas del reloj o en sentido contrario. Para tomar en cuenta el espín del electrón es preciso añadir un cuarto número cuántico, conocido como número cuántico de espín del electrón ( $s$  o  $m_s$ ), que toma valores de  $+1/2$  o  $-1/2$ .

Las investigaciones de Otto Stern y Walther Gerlach, en 1924, ofrecieron pruebas concluyentes del espín del electrón. El diseño experimental básico se muestra en la figura. En un horno caliente se genera un rayo de átomos gaseosos de plata,  $Ag$  ( $[Kr] 4d^{10} 5s^1$ ) y se hace pasar a través de un campo magnético no homogéneo. La interacción entre el electrón  $5s^1$  y el campo magnético desvía al átomo de su trayectoria rectilínea. Como el movimiento de espín es completamente aleatorio, los electrones presentes en la mitad de los átomos van a girar en una dirección y esos átomos se desvían en un sentido; los electrones de la otra mitad de los átomos girarán en sentido opuesto y estos átomos se desviarán en el sentido opuesto. Como consecuencia, en la pantalla de detección se observan dos manchas de la misma intensidad. El modelo clásico predice una mancha continua entre ambos extremos.



## Resumen de los números cuánticos

Número cuántico	Símbolo	Valores posibles	Cualidad que cuantiza
Principal	<b>n</b>	1, 2, 3, ...	Energía
Secundario u orbital	<b>l</b>	0, 1, 2, ..., n-1	Forma del orbital (y energía en átomos polieletrónicos)
Magnético	<b>m o m<sub>l</sub></b>	-l, -(l-1), -1, 0, 1, ..., l-1, +l	Orientación espacial (y energía cuando hay $\vec{B}$ externo)
Spin	<b>s o m<sub>s</sub></b>	+1/2, -1/2	"giro" del electrón

## 6.2 Tipos de orbitales

Veremos ahora un formalismo muy empleado en química para construir las configuraciones electrónicas, es decir, la disposición de los átomos. Se construyen los orbitales vacíos<sup>7</sup> y se van llenando con electrones.

Un **orbital** está definido por cada conjunto de números cuánticos (n, l, m). Así, el orbital 1s será el (1,0,0).

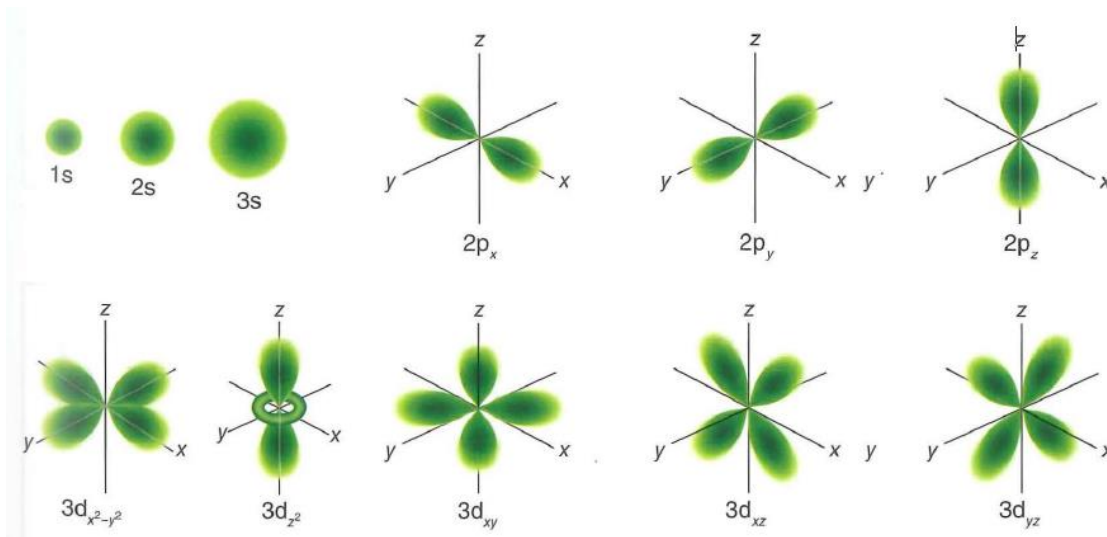
Como la energía en los átomos polieletrónicos depende de n y l, los orbitales con igual valor de n y l, pero distinto valor de m (los que forman una subcapa) se dice que están **degenerados**, tienen la misma energía y sólo se diferencian en la orientación espacial.

Los electrones irán ocupando los orbitales teniendo los cuatro números cuánticos citados antes, los 3 primeros (n, l y m) del orbital que ocupan y el cuarto, genuino suyo, el spin.

El valor que tome el número cuántico l nos da el tipo de los orbitales. Así, podemos distinguir:

- Orbitales **de tipo s** serán aquellos con l = 0.
- Orbitales **de tipo p** serán aquellos con l = 1, por lo que existirán tres de ellos, pues m podrá valer + 1, 0, - 1, y se nombrarán según los ejes sobre los que se orientan: p<sub>x</sub>, p<sub>y</sub> y p<sub>z</sub>
- Orbitales **de tipo d** serán aquellos con l = 2, por lo que existirán cinco de ellos, pues m podrá valer + 2, + 1, 0, - 1, - 2, nombrándose según los ejes en los que se orientan: d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>, d<sub>z<sup>2</sup></sub>, d<sub>xy</sub>, d<sub>xz</sub> d<sub>yz</sub>
- Orbitales **de tipo f** serán aquellos con l = 3, por lo que existirán siete de ellos.

<sup>7</sup> Se usa la idea de que la función de onda se puede escribir como producto de 2 funciones, una que contiene la parte espacial (n,l,m) por otra que contiene el spin (s). La primera sería el orbital y las 2 completarian la  $\Psi$  del electrón. A veces este lenguaje producirá expresiones como "un orbital vacío", que no tiene sentido físico estricto.



También es posible postular orbitales de tipo g, h ... pero no los consideraremos aquí, pues los elementos conocidos, en su estado fundamental, no llegan en ningún caso a tener electrones que cumplan dichas condiciones cuánticas.

En la Figura se pueden ver las formas de algunos tipos de orbitales (es decir, las superficies límite de probabilidad espacial) que, como se observa, son esféricas para los orbitales s y lobulares para los demás. En el origen de coordenadas se encuentra el núcleo del átomo.

Todos los orbitales de cada nivel tienen el mismo valor de número n. A medida que aumenta el valor de n, aunque se mantiene la forma, aumenta también el volumen del orbital

	<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	<i>s</i>
<b>1s</b>	1	0	0	±1/2
<b>2s</b>	2	0	0	±1/2
<b>2p</b>	2	1	-1,0,1	±1/2
<b>3s</b>	3	0	0	±1/2
<b>3p</b>	3	1	-1,0,1	±1/2
<b>3d</b>	3	2	-2,-1,0,1,2	±1/2
<b>4s</b>	4	0	0	±1/2
<b>4p</b>	4	1	-1,0,1	±1/2
<b>4d</b>	4	2	-2,-1,0,1,2	±1/2
<b>4f</b>	4	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	±1/2

### 6.3 Estructura electrónica de los átomos.

**Cada electrón viene determinado por 4 números cuánticos:** n, l, m (o  $m_l$ ) y s (o  $m_s$ ): los tres primeros determinan cada orbital, y el cuarto "s" sirve para diferenciar a cada uno de los dos  $e^-$  que componen el mismo.

La idea que se emplea para ir construyendo las configuraciones electrónicas de cada átomo es muy peculiar. Se supone que existen los orbitales en los átomos (y de hecho, a veces hablaremos de orbitales vacíos), contruidos con los 3 primeros números cuánticos: n, l y m. A continuación se van llenando de electrones, según las reglas que veremos a continuación, electrones que al entrar en el orbital heredan los 3 números cuánticos anteriores y ellos aportan el de spin,  $m_s$  o s. Este modo de representar la realidad tiene algún inconveniente (si no hay un electrón, no hay un orbital. No tiene sentido hablar de "orbitales vacíos"), pero permite entender muy bien las configuraciones electrónicas y es universalmente aceptado. A veces se denomina "modelo de cajas", por lo de representar a los orbitales como cajas vacías. A los electrones se les representa a veces como  $\uparrow$  (spin +1/2) y  $\downarrow$  (spin -1/2)

Vamos a escribir estructuras electrónicas de los átomos **en su estado fundamental, el de menor energía**. Será la que tenga el átomo ordinariamente. Los electrones se van situando en los distintos orbitales siguiendo los siguientes principios:

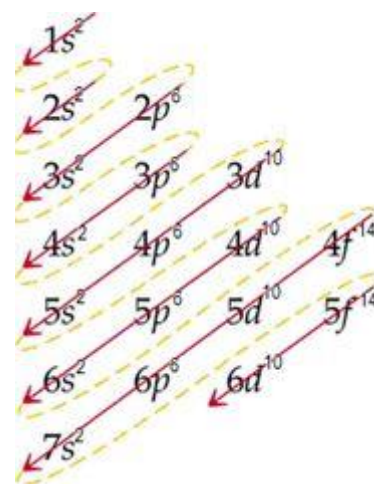
- Principio de exclusión de Pauli:** "No puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales". Eso implica que en cada orbital sólo caben 2 electrones como máximo, ya que al ocupar el electrón el orbital "hereda" los 3 números cuánticos de éste (n, l, m) y añade un 4º, el de spin, s, con



valores 1/2 y -1/2. Sólo puede haber 2 electrones en cada orbital, uno sería el (n, l, m, 1/2) y otro el (n, l, m, -1/2). Un tercer electrón que entrase en ese orbital repetiría los 4 números cuánticos.

2. **Principio de la mínima energía: Los electrones ocuparán primero los orbitales con menos energía.**

De forma aproximada, y para la mayoría de los elementos, se cumple que los valores relativos de energía se pueden obtener al sumar los números (n + l), de forma que cuanto mayor sea esta suma, mayor será la energía del orbital; a igualdad de valores (n + l) entre dos orbitales, tendrá mayor energía el de mayor número n. Esta regla, denominada a veces como **regla n+l**, es empírica, se obtiene a partir de los valores experimentales obtenidos de los espectros atómicos. Esta regla se recuerda fácilmente con el **diagrama de Möeller**<sup>8</sup>, como el de la figura lateral.



3. **Principio de máxima multiplicidad de Hund:** Los electrones, al ocupar orbitales con el mismo valor de l pero distinto valor de m (de la misma subcapa), se colocan de manera **que su desapareamiento sea el mayor posible** (ocupan el mayor número de orbitales con distinto valor de m); los electrones no apareados se colocan con sus spines paralelos. La justificación de esta regla está muy relacionada con la anterior. Es energéticamente más favorable (por minimizar las repulsiones electrónicas) que los electrones estén separados en los distintos orbitales de una subcapa. Así, el C es  $1s^2 2p_x^1 2p_y^1$  y no  $1s^2 2p_x^2$

Hay que dejar claro que de las tres reglas anteriores, **la única que es una prohibición absoluta es el principio de Pauli**. Es absolutamente imposible colocar 3 electrones en un mismo orbital. Pero en un **estado excitado de un átomo** (con más energía que el estado más estable, el **estado fundamental**) sí que pueden encontrarse electrones incumpliendo el principio de misma energía y de máxima multiplicidad, como veremos cuando justifiquemos las valencias de los halógenos. Un estado excitado del C puede ser:  $C^* : 1s^2 2s^1 2p^1 2p^1 2p^1$  (no cumple mínima energía) y un estado excitado del N puede ser  $N^* : 1s^2 2s^2 2p^2 2p^1$  (no cumple Hund)

Siguiendo estas reglas podemos construir las configuraciones electrónicas de todos los elementos conocidos<sup>9</sup>, aunque como todas las reglas generales pueden aparecer algunas irregularidades. Las más frecuentes se dan entre los metales de transición que en algunos casos son más estables con la capa d semillena ( $d^5$ ) o llena ( $d^{10}$ ). Por ejemplo, el  ${}_{24}Cr$  y el  ${}_{29}Cu$ , ambos en el cuarto período:

Los metales de transición 4d, 5d, 4f y 5f presentan una diversidad de anomalías, de las cuales sobresalen por su importancia las de la Plata ( ${}_{47}Ag$ ) y el Oro ( ${}_{79}Au$ ), similares a la del cobre al estar en el mismo grupo. El nº de electrones desapareados de un elemento tiene una influencia directa en las propiedades magnéticas del elemento. Sin entrar en muchos detalles por lo complejo del tema, si un elemento tiene todos sus electrones apareados, estando sus orbitales completamente llenos, es **diamagnética** (en presencia de un imán no sienten ninguna atracción magnética o incluso siente una débil repulsión), como el Be ( $1s^2 2s^2$ ) o el Au y la Ag, mientras que si tienen uno o varios electrones desapareados, con orbitales incompletos, son **paramagnéticas**

	Configuración esperada	Configuración real
${}_{24}Cr$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$
${}_{29}Cu$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

<sup>8</sup> En muchos textos se la denomina regla de Madelung o de Klechkowski. Véase <https://goo.gl/T6A1Uc>

<sup>9</sup> Para construir los iones los electrones se extraen, en primer lugar, de la capa más externa (orbital con mayor n).

(atraídas por un imán, aunque sea débilmente), como el Al ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ ). Si son fuertemente atraídas se denominan **ferromagnéticas** y son el Fe, Ni y Co, con 4, 2 y 3 electrones **d** desapareados<sup>10</sup>.

El número máximo de orbitales en cada nivel energético es  $n^2$ , mientras que el número máximo de electrones en cada nivel es  $2n^2$



## EJERCICIOS AL FINAL DEL TEMA (Apartado 9.6, en la página 63)

## 7 Sistema periódico de los elementos

### 7.1 Historia:

- Johann W. **Döbereiner** en 1829 realiza la primera clasificación sistemática. Observó relación entre masas atómicas de algunos elementos al agruparlos en triadas. En las "triadas de elementos" la masa atómica del elemento intermedio era aproximadamente la media aritmética de las de los extremos. Ej: Cl-Br-I (35, 80 y 127) ; S-Se-Te (32, 79 y 127) ; Li-Na-K (7-23-39). Es la primera idea de familia o grupo.
- John **Newlands** en 1864 estableció la "ley de las octavas", que indicaba que si se disponían algunos elementos en orden creciente de masas atómicas, los siete primeros tenían propiedades diferentes, pero a partir del octavo, se repetían las propiedades del primero. A partir del Ca dejaba de cumplirse.

1	2	3	4	5	6	7
<b>Li</b> 6,9	<b>Be</b> 9,0	<b>B</b> 10,8	<b>C</b> 12,0	<b>N</b> 14,0	<b>O</b> 16,0	<b>F</b> 19,0
<b>Na</b> 23,0	<b>Mg</b> 24,3	<b>Al</b> 27,0	<b>Si</b> 28,1	<b>P</b> 31,0	<b>S</b> 32,1	<b>Cl</b> 35,5
<b>K</b> 39,0	<b>Ca</b> 40,0					

- En 1869, el ruso Dmitri Ivánovich **Mendeléyev** publicó su primera Tabla Periódica en Alemania. Un año después lo hizo Julius Lothar **Meyer**. Ambos se basaron en la variación periódica que con la masa atómica experimentaban algunas de sus propiedades químicas o físicas. Por ésta fecha ya eran conocidos 63 elementos de los 90 que existen en la naturaleza. La clasificación la llevaron a cabo los dos químicos de acuerdo con los criterios siguientes:
  - Colocaron los elementos **por orden creciente de sus masas atómicas**.
  - Situaron en el mismo grupo elementos que tenían **propiedades comunes** como la valencia, dejando huecos cuando el elemento no tenía las propiedades esperadas.

La primera clasificación periódica de Mendeléyev no tuvo buena acogida al principio. Después de varias modificaciones publicó en el año 1872 una nueva tabla periódica constituida por ocho columnas desdobladas en dos grupos cada una, que al cabo de los años se llamaron familia A y B. En su nueva tabla consigna las fórmulas

<sup>10</sup> ¿Qué ocurre, sin embargo, con el Mn o el Cr? De acuerdo con su estructura, con cinco electrones desapareados, debería esperarse una magnetización incluso superior a la mostrada por el Fe. Así ocurre con un átomo aislado. Sin embargo, en una muestra sólida de Mn, los átomos se sitúan en la red de tal modo que los momentos magnéticos de cada átomo se oponen a los de su vecino, lo que, globalmente, anula la magnetización. Este fenómeno se denomina antiferromagnetismo.

generales de los hidruros y óxidos de cada grupo y por tanto, implícitamente, las valencias de esos elementos. Los números de cada grupo coinciden, de manera aproximada, con la valencia máxima de cada elemento.

Esta tabla fue completada a finales del siglo XIX con un grupo más, el grupo cero, constituido por los gases nobles descubiertos durante esos años en el aire. El químico ruso no aceptó en principio tal descubrimiento, ya que esos elementos no tenían cabida en su tabla. Pero cuando, debido a su inactividad química (valencia cero), se les asignó el grupo cero, la Tabla Periódica quedó más completa.

El gran mérito de Mendeléyev consistió en pronosticar la existencia de elementos. Dejó casillas vacías para situar en ellas los elementos cuyo descubrimiento se realizaría años después. Incluso pronosticó las propiedades de algunos de ellos: el galio (Ga), al que llamó eka-aluminio por estar situado debajo del aluminio; el germanio (Ge), al que llamó eka-silicio; el escandio (Sc); y el tecnecio (Tc), que, aislado químicamente a partir de restos de un sincrotrón en 1937, se convirtió en el primer elemento producido de forma predominantemente artificial.

En todo caso, dicha ordenación presentaba algunos defectos:

- ✓ No existía en ella un lugar adecuado para el hidrógeno, pues por sus propiedades físicas o químicas podría ir con los halógenos o con los alcalinos.
- ✓ Algunas parejas de elementos debían colocarse en orden inverso al de sus masas atómicas crecientes si se pretendía mantener la correspondencia de propiedades en su columna (por ejemplo: cobalto-níquel, telurio-yodo, etc.).
- ✓ No se había previsto sitio en la tabla para los lantánidos ni para los actínidos.
- ✓ No existía una separación clara entre metales y no metales (el mismo grupo para el oxígeno y el wolframio, para el flúor y el manganeso, etc.).

## 7.2 Sistema periódico actual

En 1912, **Henry Moseley** (1887-1915), trabajando con los espectros de rayos X de los elementos conocidos, observó que los valores de sus frecuencias características de absorción ( $f$ ) seguían una determinada ordenación secuencial que era función del número atómico ( $Z$ ) de dichos elementos. Dicha relación podía expresarse mediante una ecuación de tipo empírico:  $f=a(Z-b)^2$ , donde  $a$  y  $b$  eran dos constantes diferentes. Esta expresión permitió calcular el nº atómico  $Z$  de todos los elementos conocidos. A la vista de la importancia del número atómico en la estructura íntima de los átomos (fue más tarde cuando se determinó que dicho número coincidía con el de protones del átomo), se pensó que la **ordenación secuencial de los elementos debía hacerse mejor en orden creciente de números atómicos y no de masas atómicas**. A partir de esa idea surge **el sistema periódico actual** debido a Alfred Werner (1866-1919) y Friedrich Adolf Paneth (1887-1958), que consta de 18 columnas o grupos y siete filas o periodos.

En cada grupo se colocan los elementos de propiedades análogas, y cada periodo se construye colocando elementos que aumentan en una unidad el número atómico del elemento precedente.

- 18 columnas o grupos: Tienen propiedades químicas similares. Son las columnas.
- 7 periodos: Son las filas y las hay muy cortas, con 2 elementos (el periodo 1), cortas, con 8 elementos (periodos 2 y 3), largas, con 18 elementos (periodos 4 y 5) y ultralargas, con 32 elementos (6 y 7, éste último incompleto)

A grandes rasgos, la tabla periódica se divide en:

Grupo→	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓ Período																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	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	36 Kr
5	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	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba		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	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra		104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo
Lantánidos	57 La	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	71 Lu			
Actínidos	89 Ac	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	103 Lr			

**Metales:** Ocupan casi tres cuartas partes de él y están situados en su zona central e izquierda. Tienen tendencia a perder electrones al combinarse con los no metales. Sus valencias serán, por tanto, positivas.

**No metales:** Son unos pocos que ocupan la parte derecha del sistema periódico (excepto la última columna) . Tienen tendencia a ganar electrones cuando se combinan con los metales. Sus valencias son, en general, negativas.

**Semimetales o metaloides:** Se trata de unos pocos elementos (B, Si, Ge, As, Sb, Te y Po ) situados sobre una franja diagonal que separa los metales de los no metales. Sus propiedades son intermedias entre ambos.

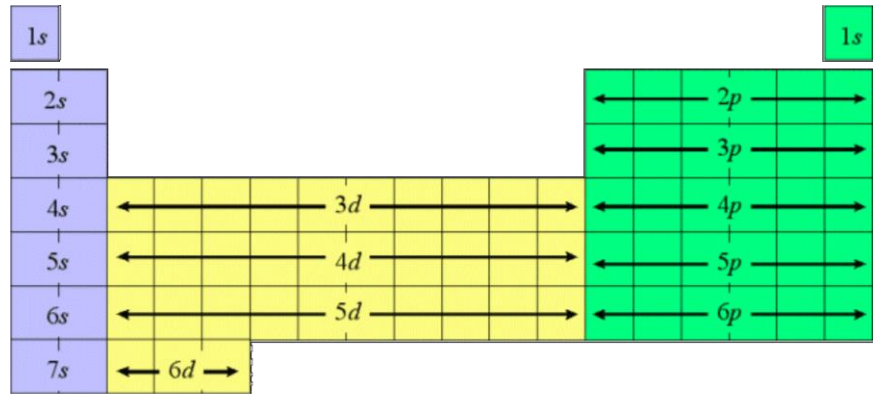
La distribución de familias de elementos en el sistema periódico es:

- **Elementos representativos**, formados por las familias de la tabla lateral, son los que forman la mayoría de los compuestos que estudiamos. Se denominan representativos por el gran cambio en las propiedades químicas que se produce al cambiar de grupo en ellos.
- **Elementos de transición o metales de transición**, formados por los grupos 3 al 12. Se sitúan en el centro del sistema periódico. Se denominan así porque la columna en la que se encuentran no determina sus propiedades químicas, sino que todos tienen propiedades muy similares.
- **Elementos de transición interna**, formados por las familias de lantánidos y actínidos, de 14 elementos cada una. Se colocan en dos filas habitualmente fuera del entorno general. También son conocidos como tierras raras.
- El **hidrógeno** queda fuera de estas consideraciones, aunque por tener un solo electrón, que está alojado en el orbital 1s, suele colocarse por esa similitud encima del grupo de los alcalinos.

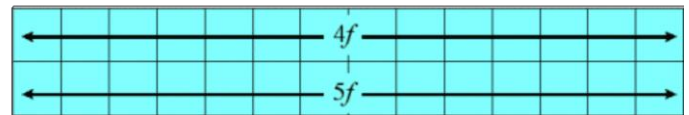
Nombre del grupo	Nº del grupo
<b>Alcalinos</b>	Grupo 1 (antiguo IA)
<b>Alcalinotérreos</b>	Grupo 2 (antiguo IIA)
<b>Térreos o boroideos</b>	Grupo 13 (antiguo IIIA)
<b>Carbonoideos</b>	Grupo 14 (antiguo IVA)
<b>Nitrogenoideos</b>	Grupo 15 (antiguo VA)
<b>Anfígenos</b>	Grupo 16 (antiguo VIA)
<b>Halógenos</b>	Grupo 17 (antiguo VIIA)
<b>Gases nobles o inertes</b>	Grupo 18 (antiguo 0)

Las propiedades químicas de los elementos, y buena parte de las físicas, dependen de los electrones del último nivel, por lo que la colocación de los elementos en la tabla periódica estará relacionada con la estructura electrónica de esa última capa, la denominada **capa de valencia**.

Si observamos el sistema periódico, veremos que todos los elementos del mismo grupo tienen el mismo número de electrones en el último nivel, es decir, idéntica configuración electrónica externa, responsable de sus propiedades químicas. También se observa que al completar un periodo pasamos a rellenar con electrones un nuevo nivel energético.



La estructura de última capa o nivel puede resumirse así:



- Alkalinos .....  $ns^1$
- Alcalinotérreos .....  $ns^2$
- Boroideos .....  $ns^2 p^1$
- Carbonoideos .....  $ns^2 p^2$
- Nitrogenoideos .....  $ns^2 p^3$
- Anfígenos .....  $ns^2 p^4$
- Halógenos .....  $ns^2 p^5$
- Gases nobles .....  $ns^2 p^6$
- Elementos de transición .....  $(n-1)d^{\text{variable}} ns^2$
- Elementos de transición interna  $(n-2)f^{\text{variable}} (n-1)d^1 ns^2$



**EJERCICIOS AL FINAL DEL TEMA (Apartado 9.7, en la página 64)**

## 8 Variación periódica de las propiedades de los elementos

### 8.1 Radio atómico:

Habitualmente se considera que los átomos tienen forma esférica, por lo que la medida de su tamaño se puede relacionar con el radio de dicha esfera. Pero el tamaño también depende de la proximidad de los átomos vecinos (por las fuerzas electrostáticas presentes entre ellos) y de los enlaces que forme con ellos. Utilizando diversas técnicas, se obtienen las distancias internucleares a partir de las cuales podemos calcular los radios atómicos.

































Se considera **radio atómico de los metales** a la mitad de su distancia internuclear. Por ejemplo, para el potasio en estado sólido, la distancia obtenida entre dos átomos vecinos en el cristal es de 4,70 Å, por lo que su radio atómico será de 2,35 Å. Algunos autores lo llaman **radio metálico**.

El **radio atómico de los no metales** se considera como la mitad de la longitud de enlace molecular. Por ejemplo, el bromo tiene como longitud de su molécula 2,22 Å, por lo que se asigna el valor de 1,11 Å para su radio atómico. Algunos autores lo llaman **radio covalente**.

También se habla de **radio iónico, como el radio de los iones**. Por difracción de rayos X en un cristal se pueden determinar las distancias internucleares. Si uno de los iones es muy pequeño (el Li en el LiI) podemos asumir que



los iones  $I^-$  se tocan y por tanto el radio iónico del  $I^-$  sería la mitad de la distancia entre 2 núcleos de  $I^-$ . Estos datos permiten deducir otros radios iónicos.

Li  152	Li <sup>+</sup>  60	Be  111	Be <sup>2+</sup>  31	O  62	O <sup>2-</sup>  140	F  54	F <sup>-</sup>  136
Na  186	Na <sup>+</sup>  95	Mg  160	Mg <sup>2+</sup>  65	S  104	S <sup>2-</sup>  190	Cl  99	Cl <sup>-</sup>  181
K  231	K <sup>+</sup>  133	Ca  197	Ca <sup>2+</sup>  99	Se  117	Se <sup>2-</sup>  202	Br  114	Br <sup>-</sup>  187
Rb  244	Rb <sup>+</sup>  148	Sr  215	Sr <sup>2+</sup>  113	Te  135	Te <sup>2-</sup>  222	I  133	I <sup>-</sup>  212

¿Cómo varía el radio atómico a lo largo de la tabla periódica? Una inspección del gráfico anterior nos indica que disminuye a medida que avanzamos en un período y aumenta al bajar en un grupo, es decir, crece hacia abajo y hacia la izquierda en la tabla periódica (esta es la tendencia, no su explicación, OJO). ¿Qué explicación podemos dar a estos hechos?

- A lo largo de un período, el electrón diferenciador entra en un orbital ns o np, con idéntico nº cuántico principal que el electrón diferenciador del elemento anterior, por lo que, como el tamaño de un orbital depende básicamente de n, ambos elementos tendrían un radio similar, pero al pasar de un elemento a otro aumenta la carga nuclear en un protón, con lo cual aumentará ligeramente la atracción nuclear, produciéndose una pequeña contracción en el radio atómico al avanzar en el período.
- Si descendemos en un grupo, al aumentar el período aumenta el número cuántico principal de los electrones de la última capa, con lo que aumenta el tamaño. Podríamos pensar también en que este efecto puede ser contrarrestado de alguna manera por el aumento de la carga nuclear al aumentar Z, pero las capas llenas de electrones interiores (los niveles con n menores que el último electrón) producen un gran "apantallamiento" en la fuerza eléctrica, debido a que ellos mismos repelen a los electrones de la corteza, haciendo que el electrón cortical experimente una fuerza eléctrica de atracción nuclear menor de la esperada.

En el caso del radio iónico, que correspondería al del átomo que ha ganado o perdido electrones, es preciso tener en cuenta otras consideraciones:

- Los elementos que formen **iones positivos** tendrán un radio menor que **el del átomo neutro**, pues habrá una contracción de la nube electrónica propiciada por el predominio de fuerzas nucleares atractivas sobre ella (los electrones se repelen menos entre sí al haber menos que en el átomo neutro). Esta contracción será mayor a mayor carga positiva del ion.
- Los elementos que **formen iones negativos** tendrán un radio mayor que **el del átomo neutro**, pues habrá una expansión de la nube electrónica propiciada por la mayor repulsión interelectrónica. Esta expansión será mayor cuanto mayor sea la carga negativa del ion.



- Para iones derivados de elementos de diferentes grupos, la comparación solo tiene significado si se trata de **iones isoelectrónicos**; en este caso, dentro de un periodo, tanto los radios catiónicos como los aniónicos **disminuyen a medida que aumenta Z**, ya que si la disposición electrónica es la misma el tamaño disminuirá al aumentar el nº de protones del núcleo, Z.

## 8.2 Energía de ionización (E.I.):

La **energía de ionización, o potencial de ionización, se define como la energía mínima necesaria para arrancar un electrón de un átomo gaseoso en su estado fundamental, transformándolo en un ion positivo. Se expresa siempre referida a un mol de átomos y se representa por E.I.** Para un elemento cualquiera (A), el proceso que tiene lugar es:  $A(g) + E.I. \rightarrow A^+(g) + e^-$ .

También existen las llamadas energías de ionización sucesivas (2ª E.I., 3ª E.I....) que son las necesarias para ir quitando el 2º electrón, el 3º electrón y electrones sucesivos del átomo ya ionizado.

Estas energías son cada vez mayores y en absoluto iguales a la primera, puesto que a medida que desaparecen los electrones hay una contracción en el tamaño del ion y, por ello, se precisará más gasto energético para arrancarlos. Además, cuando cambiamos de nivel al arrancar el electrón el gasto energético será mucho más elevado pues es preciso vencer también la mayor interacción del núcleo por su mayor proximidad, siguiendo la conocida ley de Coulomb para la atracción electrostática de cargas. Así, la 1ª E.I. del Na (electrón 3s<sup>1</sup>) es 495,8 kJ/mol y pasa a ser 4562 kJ/mol (casi 10 veces más) la 2ª E.I. (electrón 2s<sup>2</sup>), mientras que la 3ª E.I. es 6910 kJ/mol, 1,3 veces la anterior.

- Si comparamos los elementos de un mismo periodo, vemos que las **energías de ionización aumentan a medida que nos desplazamos hacia la derecha** puesto que aumenta el valor de la carga nuclear sin que varíe el orbital en el que introducimos el electrón diferenciador (de hecho disminuye el radio atómico, como vimos antes). Los electrones son atraídos con más fuerza y necesitamos aplicar más energía para arrancarlos.

También podemos justificarlo en términos de la regla del octeto, más químico que físico: Arrancar un electrón a un alcalino hace que éste adquiera la estructura electrónica de gas noble, aportándole gran estabilidad, por lo que el proceso requerirá poca energía. En cambio, arrancar un electrón a un gas noble, máximo exponente de la estabilidad química, será una tarea energéticamente muy exigente.

- **Si bajamos en un grupo observamos que decrece dicha energía de ionización**, pues el efecto de la atracción nuclear también decrece al aumentar el radio atómico, es decir, la distancia al núcleo, según lo indicado por la Ley de Coulomb.

H 1.312																			He 2.372
Li 520	Be 899											B 801	C 1.086	N 1.402	O 1.314	F 1.681	Ne 2.081		
Na 497	Mg 738											Al 578	Si 786	P 1.012	S 1.000	Cl 1.251	Ar 1.521		
K 419	Ca 590	Sc 631	Ti 658	V 650	Cr 653	Mn 717	Fe 759	Co 758	Ni 737	Cu 745	Zn 906	Ga 579	Ge 762	As 947	Se 941	Br 1.140	Kr 1.351		
Rb 403	Sr 549	Y 616	Zr 660	Nb 664	Mo 685	Tc 702	Ru 711	Rh 720	Pd 805	Ag 731	Cd 868	In 558	Sn 709	Sb 834	Te 834	I 1.008	Xe 1.170		
Cs 376	Ba 503	La 538	Hf 675	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 878	Pt 870	Au 890	Hg 1.007	Tl 589	Pb 716	Bi 703	Po 812	At 920	Rn 1.037		

1ª energía de ionización (kJ/mol de átomos)

### 8.3 Afinidad electrónica (A.E.)

La afinidad electrónica o electroafinidad es la energía liberada cuando un átomo gaseoso en su estado fundamental incorpora un electrón libre, transformándose así en un ion negativo. Se refiere siempre a un mol de átomos. El proceso que tiene lugar se puede representar como:  $A(g) + e^- \rightarrow A^-(g) + A.E.$

En este proceso se pueden dar dos posibilidades:

- En la mayoría de los casos el proceso es exotérmico y, por tanto, energéticamente favorable.  
Ejemplo:  $F(g) + e^- \rightarrow F^-(g) + 328 \text{ kJ/mol}$
- En otros casos es endotérmico, el elemento no desea espontáneamente adicionar ese electrón.  
Ejemplo:  $Be(g) + e^- + 240 \text{ kJ/mol} \rightarrow Be^-(g)$

Aquí también existen las afinidades electrónicas sucesivas, pero es preciso indicar que en todos los casos se requerirá un determinado aporte de energía, pues los electrones ya captados ejercen una fuerza de repulsión sobre los nuevos electrones que pudieran capturarse.

Los valores experimentales obtenidos para la electroafinidad son bastante caóticos y desordenados en relación con la ordenación periódica, aunque se pueden apreciar los mismos patrones que en la energía de ionización:

- La afinidad electrónica **no tiene un comportamiento totalmente regular a lo largo de un período aunque en general aumenta con Z**. El elemento alcalino,  $ns^1$ , acepta un segundo electrón en dicho orbital desprendiendo energía, pero en el alcalino-terreo siguiente es necesario aportar energía para introducir un electrón extra, que irá a un nivel de energía  $ns^2np^1$ , rompiendo la gran estabilidad de una capa  $ns$  llena. A partir de aquí se cumple la tendencia (aumenta al aumentar Z en el mismo período) al ir pareciéndose cada vez más la configuración electrónica a la del nitrogenoideos, de capa semillena y gran estabilidad,  $ns^2 np_x^1 np_y^1 np_z^1$ . Este elemento no desea el electrón extra y es necesario aportarle energía. A partir de aquí volvemos a la tendencia anterior según la configuración electrónica se acerca a la de gas noble.

En resumen, el alcalino tiene poca tendencia a tomar un electrón que no le aporta nada especial (de hecho, desea perder el que tiene) mientras que el halógeno del mismo periodo completará su octeto con el electrón extra, por lo que desprenderá una gran energía. La variación entre uno y otro es gradual a medida que avanza el período.

- **A medida que bajamos en un grupo la afinidad disminuye** porque el átomo es más grande y por tanto atrae al electrón extra con menos intensidad, liberando menos energía al capturarlo.

### 8.4 Electronegatividad (E.N.)

Electronegatividad es la tendencia que tiene un elemento para atraer hacia sí el par electrónico del enlace compartido con otro. Es, por tanto, una propiedad de los átomos enlazados químicamente entre sí.

Todo elemento con gran electroafinidad y potencial de ionización tendrá también alto el valor de su electronegatividad; por tanto, esta aumentará de izquierda a derecha en un periodo y disminuirá al bajar en un grupo. Esta veremos que es la escala de Mulliken, hoy día muy poco usada pero muy intuitiva.

1											13	14	15	16	17	18	
H 2,1											B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0		
Li 1,0	Be 1,5											Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0	
Na 0,9	Mg 1,2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8	
K 0,8	Ca 1,0	Sc	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,9	Ni 1,9	Cu 1,9	Zn 1,6						
Rb 0,8	Sr 1,0	Y	Zr 1,4	Nb 1,6	Mo 1,8	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,2	Pd 2,2	Ag 1,9	Cd 1,7	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5	
Cs 0,7	Ba 0,9	La-Lu 1,0-1,2	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,9	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,2	
Fr 0,7	Ra 0,9																

Las electronegatividades no pueden medirse si no es de forma

comparativa entre las capacidades de los elementos. Existen varias escalas relativas:

- La escala Mulliken es una escala para la electronegatividad de los elementos químicos, desarrollada por Robert S. Mulliken en 1934. Dicha escala se basa en promediar la afinidad electrónica A.E. (magnitud que puede relacionarse con la tendencia de un átomo a adquirir carga negativa) y los potenciales de ionización de sus electrones de valencia P.I. o E.I. (magnitud asociada con la facilidad, o tendencia, de un átomo a adquirir carga positiva). Las unidades empleadas son el kJ/mol:

$$c_M = \frac{A.E + P.I.}{2}$$

En esta escala, por ejemplo, el F tiene una E.N. de 4,42 y el H de 3,06

- La escala de Pauling, la más empleada, que relaciona la electronegatividad con las energías de enlace. Define la diferencia de electronegatividades entre dos elementos A y B como una relación matemática entre la energía de enlace (o energía de disociación) de la molécula A-B y de las moléculas A-A y B-B<sup>11</sup>. Como sólo define valores relativos, diferencias de valores, para establecer una escala absoluta debe dar un valor arbitrario a un elemento. El elemento escogido fue el H, que forma enlaces covalentes con multitud de elementos, al que se asignó el valor 2,1 (posteriormente revisado a 2,2 en las tablas más modernas). Así, el flúor es el elemento más electronegativo y presenta un valor de 4,0 mientras que el cesio es el menos electronegativo al ser su valor de 0,7. Todos los demás elementos tienen un valor intermedio entre estos dos. [http://es.wikipedia.org/wiki/Escala\\_de\\_Pauling](http://es.wikipedia.org/wiki/Escala_de_Pauling)

En ambos casos podemos justificar que la electronegatividad crecerá hacia arriba y hacia la derecha en la tabla periódica si tenemos en cuenta que según nos movemos en esas direcciones el radio atómico disminuye, por los motivos antes comentados, por lo que la atracción del núcleo hacia los electrones compartidos del enlace será mayor.

<sup>11</sup> La diferencia de electronegatividad entre el átomo A y el B se define como:

$$E.N.(A) - E.N.(B) = (eV)^{-1/2} \sqrt{E_{disociación}(A-B) - [E_{disociación}(A-A) + E_{disociación}(B-B)]/2}$$

Donde las E<sub>disociación</sub> son las energías de disociación, de ruptura del enlace, de los enlaces A-B, A-A y B-B, expresadas en electronvoltios (eV). Para que el resultado sea adimensional se ha añadido el (eV)<sup>-1/2</sup>. Por ejemplo, la diferencia de electronegatividad entre el hidrógeno y el bromo es 0,73 (energías de disociación: H-Br, 3,79 eV; H-H, 4,52 eV; Br-Br 2,00 eV)

Relacionado con la electronegatividad está el llamado **carácter metálico**, otra propiedad periódica. Un elemento tendrá un gran carácter metálico si tiene gran tendencia a perder los electrones de su enlace con otro, es decir, si tiene baja electronegatividad y suele formar cationes metálicos. Aunque es una propiedad relativa (depende del átomo con el que forma el enlace), al igual que la electronegatividad, se consideran elementos metálicos aquellos que en esta escala tienen electronegatividad hasta 2,0. La electronegatividad del hidrógeno es 2,2, por lo que podemos definir como metales, de manera muy aproximada, aquellos elementos que tienen electronegatividades inferiores a la del hidrógeno; no metales, los que la superan; y semimetales, los que se comportan, en cuestión de electronegatividad, como el hidrógeno.



## EJERCICIOS AL FINAL DEL TEMA (Apartado 9.79.8 en la página 65)

### 9 EJERCICIOS PARA CLASE

#### 9.1 Numero atómico. Numero másico. Isótopos. Masa atómica media

- 1.- **(47-J09)** El vanadio, de número atómico 23, se encuentra en la naturaleza formando dos isótopos con masas iguales a 50 y 51 uma.
- Determinar el número de neutrones y de protones que tiene cada uno de los isótopos. (0,6 puntos)
  - Escribir la configuración electrónica del vanadio. (0,6 puntos)
  - Calcular la abundancia relativa de los dos isótopos si la masa atómica, que aparece en las tablas periódicas, del vanadio es igual a 50,94 uma. (0,8 puntos)

#### 9.2 Hipótesis cuántica. Efecto fotoeléctrico

- 2.- **(MGE1)** La energía necesaria para ionizar un átomo de sodio es de 5,1 eV. Si se dispone de energía luminosa para lograrlo, ¿cuál es la frecuencia mínima de la luz necesaria para ello? ¿A qué zona del espectro corresponde? Si se emplease una energía de  $8,2 \cdot 10^{-9}$  J ¿qué cantidad de átomos podríamos ionizar?  
**S:  $1,2 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ , Ultravioleta,  $10^{10}$  átomos**
- 3.- **(MGE2)** La energía necesaria para arrancar un electrón de cierto metal es de  $8,2 \cdot 10^{-19}$  J. ¿Causarla fotoemisión de electrones una radiación de longitud de onda de 2 000 Å? En caso afirmativo, calcula la energía cinética con la que saldría ese electrón.  
**S:  $9,9 \cdot 10^{-19}$  J, si,  $1,7 \cdot 10^{-19}$  J**
- 4.- **(MGA1)** La longitud de onda de un fotón de luz roja es  $6,5 \cdot 10^{-7}$  m. Calcula su frecuencia y número de ondas. ¿Qué energía tendrían 3 moles de fotones de luz roja?
- 5.- **(MGA2)** Un elemento emite una energía de 20 eV tras ser calentado. ¿Cuál es la frecuencia, la longitud de onda y la zona del espectro a las que corresponde dicha radiación?
- 6.- **(MGA3)** Cuando se ilumina la superficie de un cierto metal con una luz de 1500 Å de longitud de onda, emite electrones con una energía cinética de 3 eV. ¿Cuál es el valor de la frecuencia umbral de este metal?
- 7.- **(MGE3)** El cátodo de una célula fotoeléctrica se ilumina simultáneamente con dos radiaciones monocromáticas:  $\lambda_1 = 228$  nm y  $\lambda_2 = 524$  nm. El trabajo de extracción de un electrón de este cátodo es  $W = 3,4$  eV. ¿Cuál de las radiaciones produce efecto fotoeléctrico? ¿Cómo variar la velocidad de salida de los electrones al duplicar la intensidad de la radiación luminosa incidente?

#### 9.3 Espectros de emisión. Series espectrales del hidrógeno

- 8.- **(MGE4)** Indica qué línea de la serie de Lyman aparece a una longitud de onda de 103 nm.  
**S: segunda línea**

#### 9.4 Modelo atómico de Bohr. Explicación de los espectros atómicos

- 9.- **(MGE5)** El electrón excitado del átomo de hidrógeno vuelve a su estado fundamental tras emitir un fotón cuya longitud de onda es de 1250 Å. Calcula la diferencia energética en eV entre los niveles de movimiento del electrón.

**S: 9,9 eV**

- 10.- (MGE6) Calcula la energía de ionización del átomo de hidrógeno siguiendo la teoría de Bohr.

**S: 1320 kJ/mol**

- 11.- (MGE7) El átomo de Bohr emite un fotón de 10,2 eV al pasar su electrón de un estado excitado al fundamental cuya energía es de -13,6 eV. Indica cuál era ese estado excitado.

**S: n=2**

- 12.- (MGA4) Calcula el radio y la energía de la primera órbita del electrón siguiendo el modelo de Bohr.

- 13.- (MGA5) Calcula la variación de energía que experimenta el electrón del átomo de hidrógeno cuando pasa del primer al cuarto nivel. ¿Esta energía es absorbida o emitida?

- 14.- (MGA6) Indica el máximo número de líneas que se pueden observar en un espectro de emisión si los saltos entre niveles posibles fueran entre los niveles  $n = 1$  y  $n = 3$ .

- 15.- (MGA7) Se ha observado que los átomos de hidrógeno en su estado natural son capaces de absorber radiación ultra-violeta de 1216 Å. ¿A qué transición electrónica corresponde esta absorción?

- 16.- (MGA8) Un electrón de un átomo de hidrógeno salta desde el estado excitado de un nivel de energía de número cuántico principal  $n = 3$  a otro de  $n = 1$ . Calcula la energía y la frecuencia de la radiación emitida, expresadas en  $\text{kJ mol}^{-1}$  y en Hz, respectivamente.

### 9.5 Mecánica cuántica. Hipótesis de De Broglie. Principio de incertidumbre de Heisemberg.

- 17.- (MGE8) Calcula la longitud de onda de un neutrón emitido en un proceso de fisión, si su energía es de 0,16 eV. Si la partícula emitida fuera otra de masa mayor, ¿cómo sería su longitud de onda? (masa del neutrón =  $1,67 \cdot 10^{-27}$  kg).

**S:  $2,6 \cdot 10^{-20}$  J,  $7,1 \cdot 10^{-11}$  m**

- 18.- Calcule la longitud de onda de la "partícula" en los siguientes dos casos: a) El servicio más rápido en el tenis es de unos 240 km/h o 68 m/s. Calcule la longitud de onda asociada a una pelota de tenis de  $6,0 \cdot 10^{-2}$  kg que viaja a esta rapidez. b) Calcule la longitud de onda asociada a un electrón ( $9,1094 \cdot 10^{-31}$  kg) que se desplaza a 68 m/s.

**S.  $1,6 \cdot 10^{-34}$  m (indetectable, el radio atómico es  $\approx 10^{-10}$  m) y  $1,1 \cdot 10^{-5}$  m (infrarojo)**

### 9.6 Orbitales atómicos. Números cuánticos. Configuraciones electrónicas.

- 19.- (MGA9) Indica todas las posibles combinaciones de números cuánticos que se pueden presentar en el nivel  $n=4$ .

- 20.- (MGA10) Comenta el sentido físico de los cuatro números cuánticos.

- 21.- (MGA11) Escribe la combinación de números cuánticos correspondientes a:

a) un electrón 5p. b) un electrón 3d. c) un electrón 1s. d) un electrón 4f.

- 22.- (MGE9) Responde, razonadamente, a las siguientes preguntas:

a) ¿La ecuación matemática que representa la función de onda  $\psi$  se corresponde con el orbital atómico?

b) Indica, justificando brevemente la respuesta, si es válida la siguiente combinación de números cuánticos: (3, 0, -1, +1/2).

c) Indica los números cuánticos (n, l, m, s) de todos los electrones que pueden encontrarse en un orbital 5p.

**S:  $|\psi^2|$  es la probabilidad; b) no; c) (5,1,0,  $\pm 1/2$ ), (5,1,1,  $\pm 1/2$ ) y (5,1,-1,  $\pm 1/2$ )**

- 23.- (MGA12) Dados los siguientes grupos de números cuánticos: (3, 2, 0); (2, 3, 0); (3, 3, 2) (3, 0, 0); (2, -1, 1); (4, 2, 0). Indica: a) cuáles no son permitidos y por qué. b) los orbitales atómicos de los grupos cuyos números cuánticos sean posibles.

- 24.- (MGA13) Indica los números cuánticos de los siguientes orbitales y ordénalos en forma creciente de energías: 4f, 3d, 5s, 4p.

- 25.- (MGA14) Responde razonadamente: a) ¿Los orbitales  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$  tienen la misma energía? b) ¿Por qué el número de orbitales d es 5?

- 26.- (MGA10) Dadas las siguientes configuraciones electrónicas:  $1s^2 2s^2$ ;  $1s^2 2s^2 2p^6$ ;  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ , indica: ¿a qué átomos neutros corresponden?, ¿a qué iones monopositivos?, ¿a qué iones mononegativos?

**S: Be, Ne y S; B<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup> y Cl<sup>+</sup>; Li<sup>-</sup>, F<sup>-</sup> y P<sup>-</sup>**



- 27.- (MGA15) Responde, razonadamente, a las siguientes preguntas:  
 a) Escribe las configuraciones electrónicas del átomo e iones siguientes: Al ( $Z = 13$ );  $\text{Na}^+$  ( $Z = 11$ );  $\text{O}^{2-}$  ( $Z = 8$ ).  
 b) ¿Cuál o cuáles tienen electrones desapareados?
- 28.- (MGA16) Indica los números cuánticos de los siguientes orbitales y ordénalos en forma creciente de energías: 4f, 3d, 5s, 4p.
- 29.- (9-J07) Conteste razonadamente a los siguientes apartados:  
 a) Escriba las configuraciones electrónicas en su estado fundamental de: nitrógeno ( $Z = 7$ ), magnesio ( $Z = 12$ ), ión hierro (III) ( $Z = 26$ ). (1 punto)  
 b) Enuncie el Principio de máxima multiplicidad de Hund. (0,5 puntos)  
 c) Indique los electrones desapareados que existen en cada uno de los átomos e iones del primero de los apartados. (0,5 puntos)
- 30.- (206-J16) Un conjunto de orbitales determinado se define con los números cuánticos  $n = 3$  y  $l = 2$ .  
 a. ¿Cuál es el nombre de esos orbitales atómicos? (0,5 puntos)  
 b. ¿Cuántos orbitales hay en ese conjunto? (0,5 puntos)  
 c. Escriba todos los valores permitidos de  $m_l$ . (0,5 puntos)  
 d. Escriba un grupo de números cuánticos que describa un electrón en un orbital atómico 5s. (0,5 puntos)
- 31.- (39-S08) En relación con los números cuánticos:  
 a) Defina el principio de exclusión de Pauli. (0,6 puntos)  
 b) ¿Qué define cada conjunto de números cuánticos  $n$ ,  $l$  y  $m_l$ ? Razonando la respuesta deduzca si pueden existir, en un átomo, más de un electrón con los siguientes números cuánticos:  
 $n = 2$ ,  $l = 1$  y  $m_l = 0$ . (0,7 puntos)  
 c) En un átomo cuántos electrones, como máximo, pueden tener los siguientes valores de los números cuánticos  $n = 3$  y  $l = 2$ ? ¿Qué define cada conjunto de números cuánticos  $n$  y  $l$ ? (0,7 puntos)
- 32.- (54-S09) En relación con los números cuánticos:  
 a. Defina los números cuánticos, su significado y posibles valores. (1,6 puntos)  
 b. Deduzca que valores de  $n$ ,  $l$  y  $m$  puede tener cada orbital de la subcapa "5d" (0,4 puntos)
- 33.- (57-S09) Dados los elementos A, B y C de números atómicos 19, 13 y 35, respectivamente, indique justificándolo:  
 a. La configuración electrónica ordenada de cada uno de ellos. (0,6 puntos)  
 b. La naturaleza de los enlaces de los compuestos que responden a: A-C; B-B; C-C. (0,9 puntos)  
 c. Enuncie el principio de máxima multiplicidad de Hund. (0,5 puntos)
- 34.- (67-J10) Responda razonadamente las siguientes cuestiones:  
 a) ¿Es posible que los números cuánticos para un electrón situado en un orbital 2p sean  $(2, 0, 0, 1/2)$ ? (0,4 puntos).  
 b) Indique dos posibles combinaciones de números cuánticos, por elemento, para el electrón de valencia de los átomos de Na y K. (0,8 puntos). c) Defina momento dipolar de enlace y momento dipolar de una molécula. Explique cada caso con un ejemplo. (0,8 puntos).
- 35.- (99-SE10) Responda razonadamente a las siguientes cuestiones:  
 a. Escriba la configuración electrónica, completa y ordenada, de los siguientes átomos o iones: Al,  $\text{Na}^+$  y  $\text{O}^{2-}$ . (1,2 puntos).  
 b. Deduzca cuáles de las especies anteriores son isoelectrónicas. (0,4 puntos).  
 c. Indique cuál de ellos tiene electrones desapareados y qué valores pueden tener los números cuánticos del electrón más externo. (0,4 puntos).
- 36.- (101-J11) En los siguientes átomos: Be, O, Al y Ni.  
 a) Escriba su configuración electrónica ordenada. (0,8 puntos)  
 b) Escriba para cada uno, los cuatro números cuánticos de su electrón diferenciador. (Electrón que le diferencia del átomo de número atómico anterior). (0,8 puntos)  
 c) ¿Cuántos electrones de valencia tiene cada uno? (0,4 puntos)

## 9.7 Tabla periódica de los elementos

- 37.- (MGA17) Dados los siguientes elementos: Na, Fe, S, I, U, As, Br, Sn, Lu, K y Ra, responde: ¿a qué familias pertenecen? ¿Algunos se hallan en el mismo periodo o en el mismo grupo? ¿Cuáles son elementos representativos?





- a) De los siguientes elementos: Na, K, Ca y Mg ¿Cuál es el que presenta una mayor energía de ionización? (0,6 puntos)
- b) ¿Cuál de los siguientes elementos, Ar, I, Li, Cl y Br, presenta un valor más elevado en su segunda energía de ionización? (0,6 puntos)
- c) Coloque las siguientes especies en orden creciente de sus radios iónicos: Cl<sup>-</sup>; K<sup>+</sup>; Ca<sup>2+</sup> y Mg<sup>2+</sup>. (0,8 puntos)
- 50.- (53-S09)** En relación con la energía de ionización:
- a. Defina la primera energía de ionización. (0,7 puntos)
- b. Que grupo de la tabla periódica es el más estable respecto a la pérdida de un electrón. Justifique la respuesta. (0,7 puntos)
- c. Escriba claramente los nombres y los símbolos de los elementos que constituyen el grupo deducido en el apartado b. (0,6 puntos)
- 51.- (88-S10)** Responda a las preguntas siguientes:
- a. Escriba las configuraciones electrónicas de los iones Cl<sup>-</sup> y K<sup>+</sup>. (0,6 puntos).
- b. Razone cuál de los dos iones tiene mayor radio. (0,7 puntos).
- c. Razone cuál de los dos elementos, cloro y potasio, tiene mayor energía de ionización. (0,7 puntos).
- 52.- (95-SE10)** Responda razonadamente a las siguientes cuestiones:
- a. Defina el concepto de energía de ionización de un elemento. (0,6 puntos).
- b. Justifique por qué la primera energía de ionización disminuye al bajar en un grupo de la tabla periódica. (0,7 puntos).
- c. Ordene de mayor a menor la energía de ionización de los elementos cloro, argón y potasio. (0,7 puntos).
- 53.- (112-S11)** Tomando como ejemplo los elementos del 2º período analice razonadamente, en función del aumento del número atómico:
- a. La variación del radio atómico. (1,0 puntos)
- b. La variación de la primera energía de ionización. (1,0 puntos)
- 54.- (126-J12)** Conteste razonadamente las siguientes cuestiones:
- a) Ordene los siguientes átomos en orden decreciente de su radio atómico: sodio, aluminio, fósforo, flúor, calcio y magnesio. (0,7 puntos)
- b) Ordene los siguientes iones en orden creciente de su radio iónico; N<sup>3-</sup>, Na<sup>+</sup>, F<sup>-</sup>, Mg<sup>2+</sup>, O<sup>2-</sup>. (0,6 puntos)
- c) Ordene los siguientes átomos en orden creciente respecto a su primera energía de ionización; sodio, aluminio, azufre, flúor y cesio. (0,7 puntos)
- 55.- (136-S12)** Responda razonadamente las siguientes cuestiones:
- a) Ordene de menor a mayor tamaño las siguientes especies químicas: Na<sup>+</sup>, Ne, O<sup>2-</sup>, Mg<sup>2+</sup> y F<sup>-</sup>. (1,0 puntos)
- b) Defina primera energía de ionización y asigne los siguientes valores expresados en kJ/mol: 496; 738; 1314 y 1681 a los elementos F, Mg, Na y O. (1,0 puntos)
- 56.- (146-J13)** Dados los elementos: N, F, Na, Si, cuyos números másicos son 14, 19, 23 y 28 respectivamente:
- a) Escriba su configuración electrónica ordenada. (0,8 puntos)
- b) Indique el número de protones, neutrones y electrones de cada uno. (0,4 puntos)
- c) Ordénelos de menor a mayor electronegatividad, razonando la respuesta. (0,4 puntos)
- d) Ordénelos de menor a mayor radio atómico, razonando la respuesta. (0,4 puntos)
- 57.- (166-J14)** Responda las siguientes cuestiones:
- a. Escriba la configuración electrónica ordenada de un átomo de estroncio (<sup>38</sup>Sr) en su estado fundamental. (0,5 puntos)
- b. Explique qué ión tiene tendencia a formar este elemento. (0,5 puntos)
- c. Compare el tamaño del átomo con el del ión. Explique cuál tiene mayor radio. (0,5 puntos)
- d. Explique si la energía de ionización del estroncio es mayor o menor que la del calcio. (0,5 puntos)
- 58.- (171-S14)** Responda razonadamente a las siguientes cuestiones:
- a. Escriba la configuración electrónica ordenada del As. (0,2 puntos)
- b. Para el átomo de As, ¿cuántos electrones hay con números cuánticos l = 1 y m = +1? ¿Y con l = 0 y s = +1/2? (0,8 puntos)
- c. Los iones H<sup>-</sup> y Li<sup>+</sup> son isoelectrónicos pero el ión H<sup>-</sup> es mucho más grande que el ión Li<sup>+</sup>. Explique la causa de esta diferencia. ¿Cuál sería el tamaño relativo del He frente a las citadas especies iónicas? ¿Por qué? (1,0 puntos)