

1 La estructura electrónica de los átomos

- 1.1 La estructura del átomo
- 1.2 La luz: frecuencia, cuantos y efecto fotoeléctrico
- 1.3 El espectro del hidrógeno atómico. El modelo de Bohr y sus ampliaciones
- 1.4 El modelo mecano-cuántico. La ecuación de Schrödinger
- 1.5 El átomo de hidrógeno en el modelo mecano-cuántico. Forma de los orbitales atómicos
- 1.6 Los átomos polielectrónicos
- 1.7 Configuraciones electrónicas de los átomos polielectrónicos en su estado fundamental
- 1.8 Periodicidad de algunas propiedades físicas

1.1 La estructura del átomo

Tabla 1.1. Las partículas subatómicas

Nombre	Símbolo	Masa	Carga	Descubrimiento
protón	p	$1,673 \cdot 10^{-27}$ kg	$+1,602 \cdot 10^{-19}$ C	Goldstein, 1886
electrón	e	$9,109 \cdot 10^{-31}$ kg	$-1,602 \cdot 10^{-19}$ C	Thomson, 1897
neutrón	n	$1,675 \cdot 10^{-27}$ kg		Chadwick, 1932

El modelo atómico de Rutherford. En 1911, **Rutherford, Geiger y Marsden** estudian las trayectorias de las partículas α disparadas contra láminas de diferentes materiales (figura 1.1). De acuerdo con los resultados obtenidos, Rutherford propone un modelo de átomo (figura 1.2) caracterizado por la existencia de un núcleo central con una carga positiva idéntica a la negativa de los electrones, que están fuera del núcleo, y que contiene el 99,9% de la masa total del átomo en sólo el 0,01% de su diámetro ($d \approx 1 \cdot 10^6$ toneladas/cm³).

Figura 1.1. Dispositivo experimental de Rutherford para la medida de la dispersión de partículas α , mediante láminas metálicas muy delgadas. La fuente de partículas α es el polonio radiactivo colocado en el interior de un bloque de plomo, que sirve para proteger de las radiaciones y para seleccionar un haz de partículas. La lámina de oro que se utilizó tenía un espesor de 0,00006 cm. La mayoría de las partículas pasaban con poca o ninguna desviación, a. Unas pocas se desviaban ángulos grandes, b, y, ocasionalmente, alguna partícula era despedida por la lámina, c.

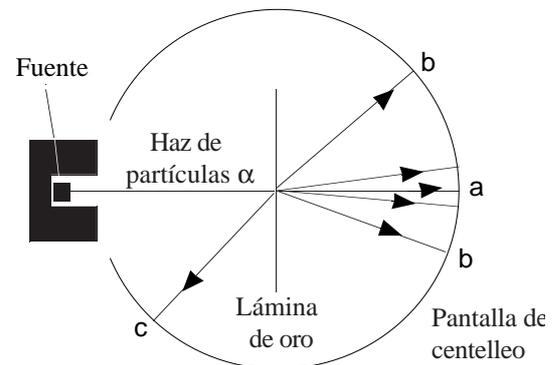
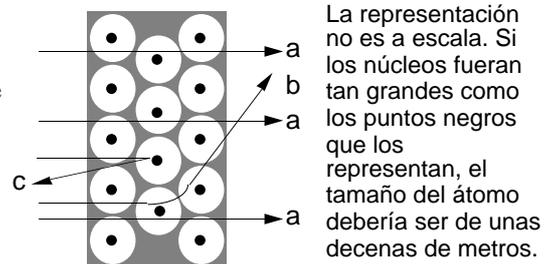


Figura 1.2. Interpretación del experimento de Rutherford. La mayor parte del espacio de un átomo está casi "vacío" ya que sólo está ocupado por livianos electrones. Toda la carga positiva del átomo y casi toda su masa se encuentra en su centro, en un núcleo muy denso y pequeño. La mayoría de las partículas α con carga positiva (a) atraviesan el átomo por el espacio desocupado sin experimentar desviaciones. Algunas (b) se acercan a los núcleos y se desvían al ser repelidas por su carga positiva. Sólo unas pocas llegan a acertar (c) en un núcleo y salen despedidas hacia atrás.



Nucleones. El núcleo atómico está constituido por protones y neutrones, que por ello se llaman *nucleones*. El *número atómico* (Z) de un átomo es el número de protones, que es igual al de electrones en el átomo neutro. El *número neutrónico* (N) es el número de neutrones. Cada elemento se diferencia del resto por su número atómico. El *número másico* (A) de un átomo es el número de nucleones, $A = Z + N$.

Isótopos. Un elemento puede contener núcleos de diferente número másico, es decir, puede contener diferentes *isótopos* de diferente masa atómica (ver tabla 1.2). En un elemento natural, la *abundancia isotópica relativa* de los distintos isótopos en la naturaleza suele ser casi constante y recibe el nombre de *abundancia isotópica natural*. Lo que normalmente se llama masa atómica de un elemento, es una *masa atómica promedio* de las masas de sus isótopos naturales en relación a su abundancia relativa.

Tabla 1.2. Algunos elementos con varios isótopos

<u>Nombre</u>	<u>Símbolo</u>	<u>Número atómico (Z)</u>	<u>Número neutrónico (N)</u>	<u>Número másico (A)</u>	<u>Masa</u>	<u>Abundancia, %</u>
Hidrógeno-1	^1H	1	0	1	$1,674 \cdot 10^{-24}$ g, 1,008 u	99,985
Deuterio	^2H o D	1	1	2	$3,344 \cdot 10^{-24}$ g, 2,014 u	0,015
Tritio	^3H o T	1	2	3	$1,674 \cdot 10^{-24}$ g, 3,016 u	muy inestable
Carbono-12	^{12}C	6	6	12	$1,9926 \cdot 10^{-23}$ g, 12 u exactas	98,90
Carbono-13	^{13}C	6	7	13	$2,159 \cdot 10^{-23}$ g, 13,00 u	1,10
Cloro-35	^{35}Cl	17	18	35	$5,807 \cdot 10^{-23}$ g, 34,97 u	75,77
Cloro-37	^{37}Cl	17	20	37	$6,138 \cdot 10^{-23}$ g, 36,97 u	24,23
Uranio-235	^{235}U	92	143	235	$3,902 \cdot 10^{-22}$ g, 235,0 u	0,72
Uranio-238	^{238}U	92	146	238	$3,953 \cdot 10^{-22}$ g, 238,05 u	99,27

1.2 La luz: frecuencia, cuantos y efecto fotoeléctrico

Naturaleza ondulatoria de la luz. La luz es una radiación electromagnética, es decir, una onda de campos eléctricos y magnéticos. La frecuencia (ν) es el número de ciclos por unidad de tiempo. Su unidad del SI es el hertzio (Hz), que equivale a un ciclo/s. La longitud de onda (λ) es la distancia entre picos. La relación entre frecuencia y longitud de onda es $\lambda = c/\nu$, donde c es la velocidad de la luz. La frecuencia de una luz determina su color. Sólo es visible una parte del espectro electromagnético (figura 1.3).

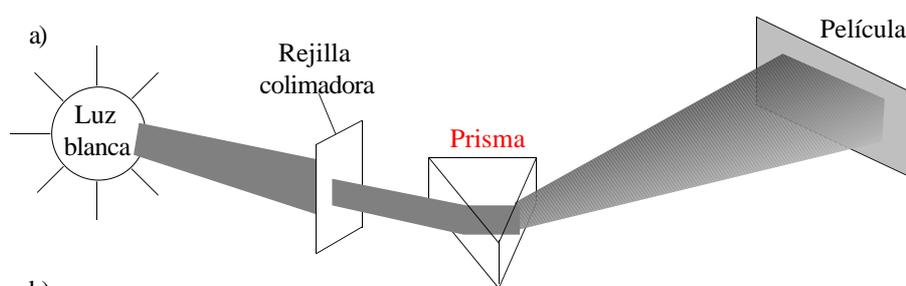
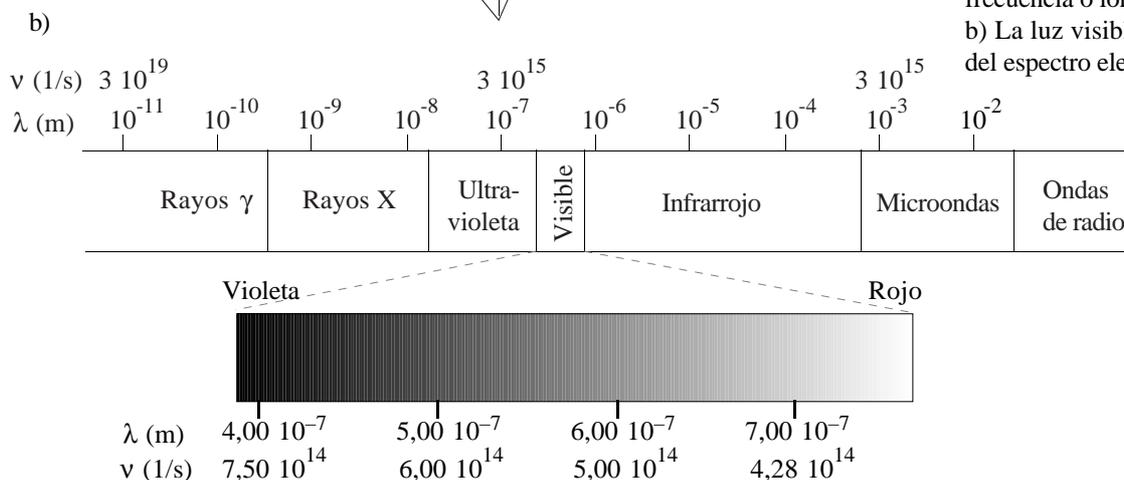


Figura 1.3. a) La luz blanca es una mezcla de radiaciones de todas las longitudes de onda de la luz visible. Si un rayo estrecho se pasa a través de un prisma, se separa en un espectro continuo de todas las longitudes de onda que componen la luz visible. El color de una luz depende de su frecuencia o longitud de onda. b) La luz visible es sólo una porción del espectro electromagnético.



La luz como un haz de partículas. En 1900, **Max Planck** estudia la radiación emitida por un cuerpo negro y observa que es como si ésta fuera emitida en porciones $E = h\nu$, donde h es la constante de Planck ($6,63 \cdot 10^{-34}$ J s). En 1906, **Einstein** estudia el efecto fotoeléctrico (figura 1.4) y propone que la luz puede ser considerada como un haz de partículas o como una onda, con una relación $E = h\nu$ entre la energía cinética de cada partícula y la frecuencia de la onda. Una partícula de luz es un *fotón* y su energía es un *cuanto* de energía. Al chocar la luz con un electrón, ésta le transmite la energía de un fotón ($h\nu$).

1.3 El espectro del hidrógeno atómico. El modelo de Bohr y sus ampliaciones

El espectro del hidrógeno atómico. Cuando se pasa una corriente eléctrica a través de un gas en un tubo a presión muy baja, se emite una luz cuyo espectro no es continuo sino a líneas (figura 1.5). Cada gas da un espectro característico. Al estudiar el espectro del hidrógeno, se encontró una relación matemática en-

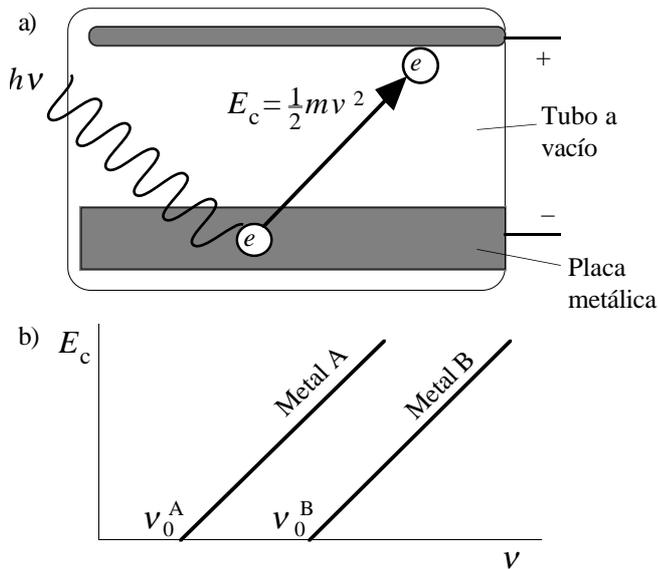


Figura 1.4. a) Efecto fotoeléctrico. Cuando una radiación electromagnética de frecuencia suficiente choca contra la superficie de un metal (electrodo negativo) en el interior de un tubo con vacío, se desprenden electrones del metal y crean una corriente eléctrica. Esta corriente crece con la intensidad de la radiación. b) La gráfica relaciona la energía cinética de salida de los electrones con la frecuencia de la luz. Para cada metal, hay una frecuencia umbral por debajo de la cual la luz no es capaz de arrancar electrones de la placa metálica. A partir de dicha frecuencia umbral, la energía cinética aumenta linealmente con la frecuencia. La pendiente de la recta es la misma para todos los metales. Este fenómeno puede explicarse suponiendo que la luz está compuesta de fotones de energía $h\nu$. Cada fotón puede transmitir su energía a un sólo electrón durante la colisión. La frecuencia umbral es la frecuencia mínima que debe tener una luz para que la energía de sus fotones sea suficiente para arrancar un electrón del metal (por ello depende del metal).

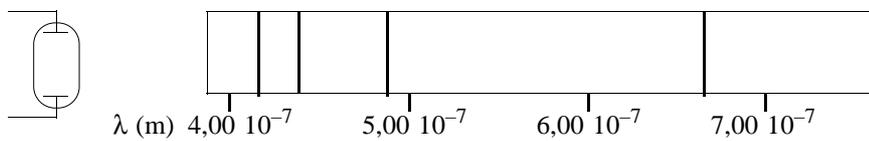


Figura 1.5. La luz que emite un tubo de descarga relleno de un gas está compuesta por frecuencias discretas y da un *espectro de líneas*.

entre las frecuencias de sus líneas (\mathcal{R} es la constante de Rydberg y vale $3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$):

$$\nu = \mathcal{R} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Serie de Lyman	$n_1 = 1$	$n_2 = 2, 3, 4, 5, \dots$	Serie de Brackett	$n_1 = 4$	$n_2 = 5, 6, 7, 8, \dots$
Serie de Balmer	$n_1 = 2$	$n_2 = 3, 4, 5, 6, \dots$	Serie de Pfund	$n_1 = 5$	$n_2 = 6, 7, 8, 9, \dots$
Serie de Pashen	$n_1 = 3$	$n_2 = 4, 5, 6, 7, \dots$			

El modelo de Bohr. Bohr propone que los electrones giran en torno al núcleo en órbitas circulares. En 1913, sugiere que la energía eléctrica mueve los electrones a una órbita superior y que la emisión de luz se produce al caer los electrones a una órbita de menor energía. Además propone que “un electrón siempre absorbe o emite energía en cuantos *completos* de $h\nu$ ” (primer postulado). Como la luz emitida no contiene todas las frecuencias, Bohr sugiere que no todas las órbitas son posibles para un electrón y, en concreto, propone que “las únicas órbitas en que se puede mover un electrón son aquellas en las que su momento angular es $nh/2\pi$, donde n es un número entero. Cuando un electrón se encuentra en estas órbitas, no emite energía” (segundo postulado). El número n se llama *número cuántico principal*.

Recuadro 1.1. Modelo de Bohr: Deducción del radio y energía de las órbitas

La fuerza centrípeta asociada al giro de un electrón en una órbita circular vale

$$F_{\text{centrípeta}} = m_e \frac{v^2}{r} \quad (m_e = \text{masa del electrón}, v = \text{velocidad}, r = \text{radio de la órbita})$$

La fuerza de atracción electrostática entre el electrón y el núcleo vale

$$F_{\text{elect.}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \quad (Z = \text{número atómico}, Z = 1 \text{ para el hidrógeno}, e = \text{carga del electrón})$$

Si el electrón gira estacionariamente, ambas fuerzas tienen que ser iguales, $m_e \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$

Despejando la velocidad, $v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m_e r}}$ Velocidad que, según la mecánica clásica, debe de tener un electrón para moverse estacionariamente en una órbita de radio r .

Para que en su giro el electrón no emita ninguna radiación electromagnética, el segundo postulado de Bohr señala que el momento angular debe de ser igual a momento angular: $mvr = m \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m_e r}} r = \frac{nh}{2\pi}$

Despejando r , $r = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} \frac{n^2}{Z} = a_0 \frac{n^2}{Z}$ Radio de las únicas órbitas admitidas por el 2º postulado de Bohr. La constante a_0 recibe el nombre de radio de Bohr y vale $0,529 \text{ \AA}$.

La energía potencial de cada órbita viene dada por $E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r} = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \frac{Z^2}{n^2} = -21,8 \cdot 10^{-19} \frac{Z^2}{n^2}$ julios

A partir de estos postulados (ver recuadro 1.1), Bohr calculó el radio (figura 1.6) y la energía (figura 1.7) de las órbitas de un electrón para el átomo de hidrógeno. Además (ver recuadro 1.2), dedujo la ecuación de las líneas del espectro del hidrógeno y el valor de la constante de Rydberg. Posteriormente se han propuesto otros números cuánticos para explicar nuevas observaciones experimentales en los espectro atómicos (tabla 1.3).

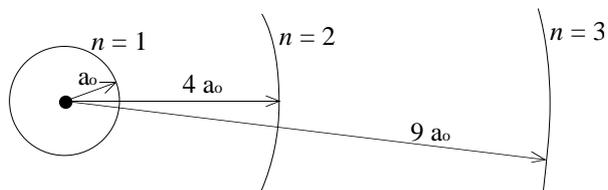


Figura 1.6. Distancia relativa entre las tres primeras órbitas atómicas del hidrógeno, según el modelo de Bohr. Obsérvese que la diferencia de distancia entre órbitas sucesivas es cada vez mayor al aumentar n . La distancia entre la primera órbita y el núcleo (a_0) es igual a 0,529 Å.

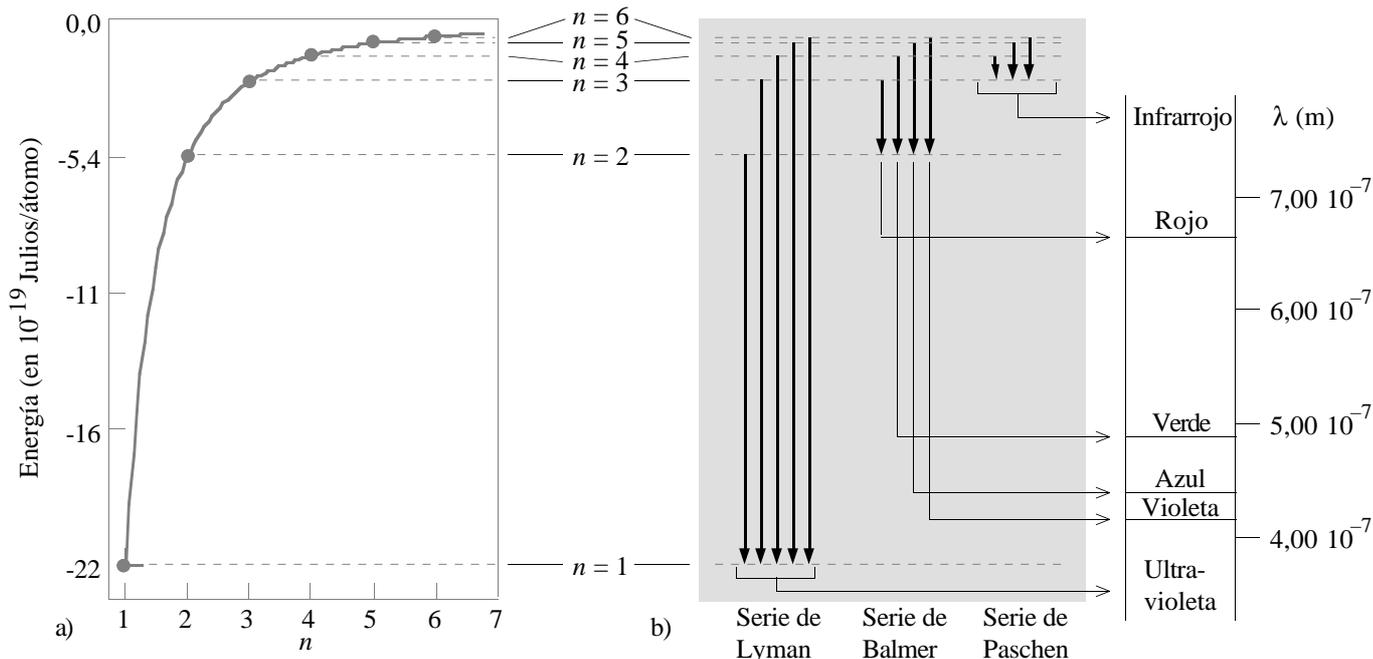


Figura 1.7. a) Gráfica de la energía de los orbitales atómicos del hidrógeno en función de n . Obsérvese que la diferencia de energía entre estados de energía sucesivos es cada vez más pequeña al aumentar n .

b) Algunas de las transiciones electrónicas que pueden ocurrir en un átomo excitado de hidrógeno. La serie de Lyman se debe a transiciones hasta $n = 1$ que, al ser las de mayor energía, dan las rayas de menor longitud de onda (región ultravioleta). Las líneas de la serie de Balmer aparecen en el visible, debiéndose la de mayor longitud de onda (la roja) a una transición desde $n = 3$ a $n = 2$.

Recuadro 1.2 Modelo de Bohr: Deducción del espectro del hidrógeno atómico

Un electrón absorbe o emite energía al saltar de una órbita a otra ($Z = 1$):

$$E_2 - E_1 = \frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{Energía emitida o absorbida por un electrón al pasar de una órbita 1 a una órbita 2, en el átomo de hidrógeno.}$$

El primer postulado de Bohr propone que cada electrón en una transición emite o absorbe un único cuanto de luz, por lo que la frecuencia de la radiación emitida o absorbida vendrá dada por la relación de Planck:

$$E_{\text{fotón}} = E_2 - E_1; \quad h\nu = \frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right); \quad \nu = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 3,29 \cdot 10^{15} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{ segunc}$$

Tabla 1.3. Números cuánticos del átomo de hidrógeno

<u>Símbolo y valores</u>	<u>Nombre del número cuántico</u>	<u>Nombre de conjunto</u>	<u>Sinónimos</u>	<u>Describe</u>
n	principal	nivel o capa	$K (n = 1), L (2), M (3), N (4)$, etc	tamaño y energía orbital
$l = 0$ a $n-1$	azimutal*	subnivel o subcapa	$s (l = 0), p (1), d (2), f (3)$, etc	forma del orbital
$m_l = -l$ a $+l$	magnético orbital	orbital** de una subcapa		orientación del orbital
$m_s = \pm 1/2$	magnético de espín			orient. espín de electrón

*También llamado momento angular orbital; **órbita en el lenguaje de Bohr, orbital en el de la mecánica cuántica.

1.4 El modelo mecano-cuántico. La ecuación de Schrödinger

La dualidad partícula-onda. En 1924, de Broglie propone que cualquier partícula (un electrón, por ejemplo) puede considerarse como una onda con $\lambda = h/mv$ (tabla 1.4). En 1927, Davisson y Germer observan la difracción de un haz de electrones en una lámina metálica (la difracción es una propiedad característica de las ondas).

Tabla 1.4. Longitudes de onda de partículas

Partícula	Masa (kg)	Velocidad (m s ⁻¹)	Longitud de onda (Å)
Electrón libre gaseoso (300 K)	9,11 10 ⁻³¹	1,17 10 ⁵	63
Electrón libre gaseoso (200 10 ³ K)	9,11 10 ⁻³¹	3,00 10 ⁶	2,4
Electrón del átomo de H (n = 1)	9,11 10 ⁻³¹	2,19 10 ⁶	3,3
Átomo de He gaseoso (300 K)	6,64 10 ⁻²⁷	1370	0,73
Pelota de Tenis	0,10	20	3,3 10 ⁻²⁴

Principio de incertidumbre. Formulado en 1927 por Heisenberg, dice que no se puede conocer con total precisión la posición y la velocidad de una partícula a la vez: $\Delta x \Delta p \geq h/4\pi$, donde Δx es la imprecisión en la posición y Δp la imprecisión en la cantidad de movimiento (mv). La mecánica cuántica no habla de trayectoria o posición sino de probabilidad de encontrar el electrón en una región del espacio.

Ejemplo. Imprecisión mínima en la posición de partículas cuya imprecisión en la velocidad es del 1%

Partícula	Masa (kg)	Velocidad (ms ⁻¹)	Imprecisión mínima en la posición (m)
Automóvil	1000	28 (100 km/h)	10 ⁻³⁷
Electrón del átomo de H (n = 1)	9,11 10 ⁻³¹	2,19 10 ⁶	26 Å, el radio de la órbita de 0,529 Å

La ecuación de Schrödinger. En 1926, Schrödinger propone representar el comportamiento del electrón mediante una ecuación de ondas. El electrón en el átomo está aprisionado por el campo eléctrico producido por el núcleo. Schrödinger propuso que las ondas de los electrones en tal situación eran estacionarias (figura 1.8). Sólo las ondas estacionarias cuya amplitud se anula en los extremos, son estables con el tiempo. En un espacio de una dimensión (figura 1.9), estas ondas estables pueden ser caracterizadas mediante un número entero. Esta misma condición, al imponerla a la función de onda del electrón que se mueve en un espacio de tres dimensiones, dará origen a tres números cuánticos.

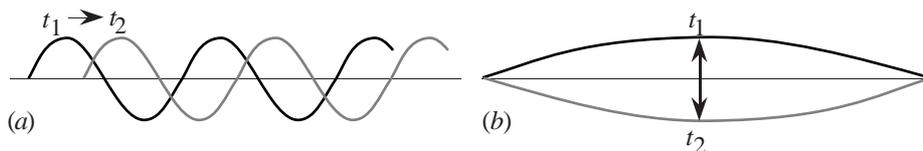


Figura 1.8. (a) Una onda no estacionaria se "desplaza" con el tiempo. (b) Una cuerda de una guitarra vibrando es un ejemplo de onda estacionaria.

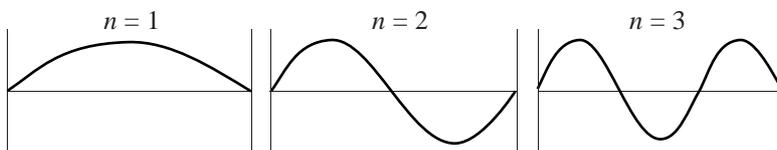


Figura 1.9. En un espacio de una dimensión, las ondas estacionarias estables (aquellas cuya amplitud es nula en los extremos) se pueden caracterizar mediante un número cuántico.

La amplitud de la onda estacionaria en un punto x del espacio se puede definir mediante una función representa como $\psi(x)$. El valor de ψ^2 en un punto da la densidad de probabilidad en dicho punto. El producto $\psi^2 dV$ da la probabilidad de encontrar electrón dentro del volumen infinitesimal dV . La probabilidad de encontrarlo en un volumen V es

$$\int_V \psi^2 dV$$

1.5 El átomo de hidrógeno en el modelo mecano-cuántico. Forma de los orbitales atómicos

Cuando se aplica la ecuación de Schrödinger al caso del electrón en un átomo de hidrógeno, se observa que los estados posibles para un electrón se describen mediante tres números cuánticos (n , l y m_l). Hay un cuarto número cuántico (m_s) que sólo aparece al considerar efectos relativistas. Sus valores posibles coinciden con los del modelo de Bohr (tabla 1.5).

Parte Angular

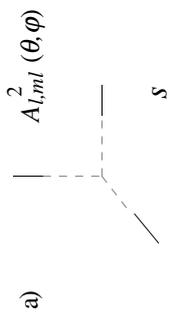
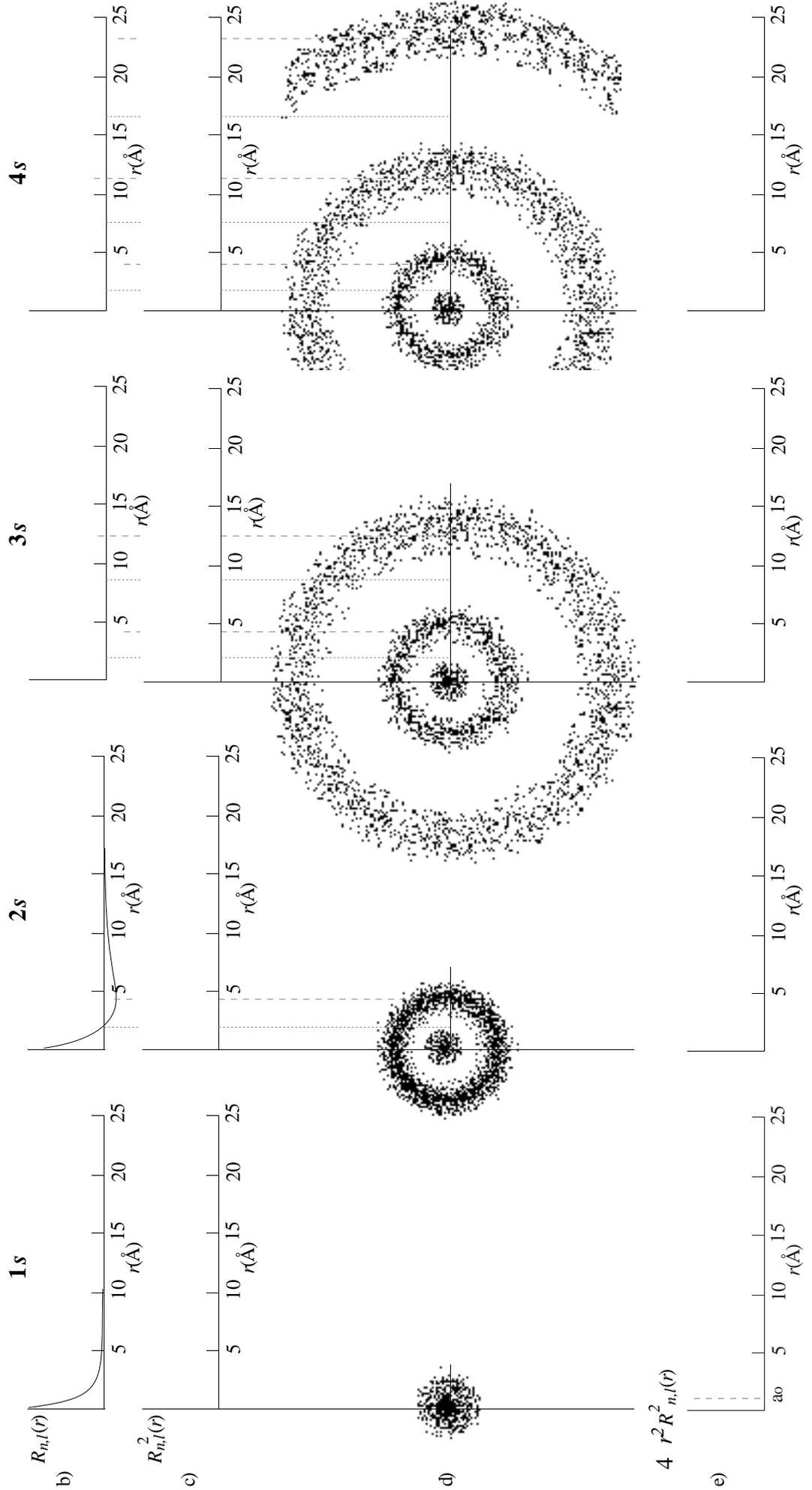


Figura 1.10. Representación de las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuando $l = 0$ (orbitales s).

- a) La parte angular de la función de onda y su cuadrado son constantes. Los orbitales s son esféricos, por lo que se dice que no son direccionales.
- b) Gráfica de la parte radial en función de la distancia al núcleo. La función de onda tiene $n-1$ nodos (lugares donde se hace cero).
- c) Gráfica de la densidad puntual de probabilidad en función de la distancia al núcleo. Para los orbitales s , la densidad de probabilidad es máxima en el núcleo. Además de este máximo absoluto, cada orbital s tiene otros $n-1$ máximos relativos y $n-1$ distancias a las que la densidad de probabilidad es nula.
- d) Si imaginamos el electrón como una nube, su forma en cada orbital sería aproximadamente la representada en la figura. En un espacio en tres dimensiones, los nodos de la función radial se convierten en *superficies nodales esféricas*. Un orbital s tiene $n-1$ *superficies nodales esféricas*.
- e) Gráfica de la densidad radial de probabilidad (proporcional a la probabilidad de encontrar el electrón a una distancia dada del núcleo). Para un electrón en un orbital $1s$, la mayor probabilidad de encontrar el electrón es a una distancia igual al radio de Bohr ($a_0 = 0,529 \text{ \AA}$).

Parte Radial



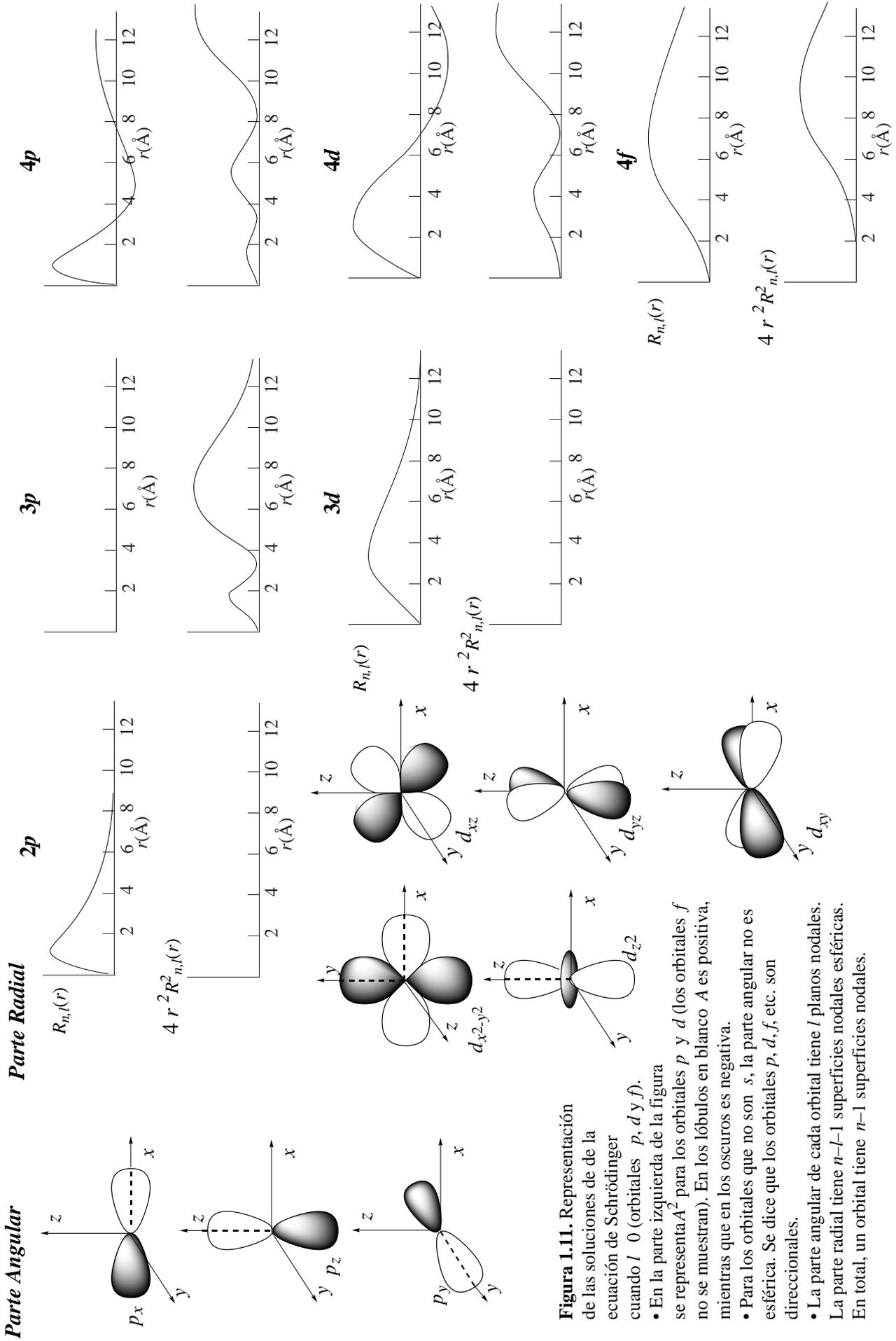


Figura 1.11. Representación de las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuando $l = 0$ (orbitales p , d y f).

- En la parte izquierda de la figura se representa A^2 para los orbitales p y d (los orbitales f no se muestran). En los lóbulos en blanco A es positiva, mientras que en los oscuros es negativa.
- Para los orbitales que no son s , la parte angular no es esférica. Se dice que los orbitales p , d , f , etc. son direccionales.
- La parte angular de cada orbital tiene l planos nodales. La parte radial tiene $n-l-1$ superficies nodales esféricas. En total, un orbital tiene $n-1$ superficies nodales.

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger, cuando se expresan en coordenadas polares (r, θ, φ), se pueden descomponer en una *parte radial* (que sólo depende del radio) y otra *angular* (que sólo depende de los ángulos), lo que simplifica su estudio: $\psi_{n,l,m_l}^2(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}^2(r) \cdot A_{l,m_l}^2(\theta, \varphi)$. La parte radial no varía con m_l mientras que la angular no varía con n . Las figuras 1.10 y 1.11 describen la distribución espacial del electrón en los distintos estados de energía posibles para el átomo de hidrógeno. Cada estado de energía, descrito por un trío de números cuánticos n, l y m_l , recibe el nombre de *orbital*.

Penetración y difusión de orbitales. Estos conceptos se explican en la figura 1.12.

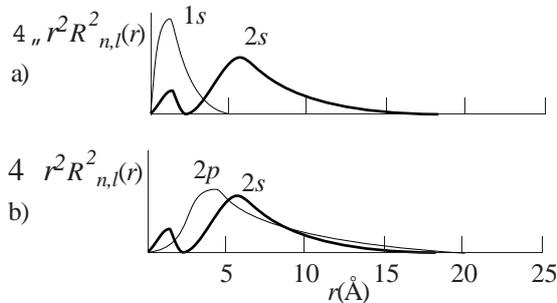


Figura 1.12. a) El orbital $2s$ es más difuso que el $1s$, su densidad electrónica está más extendida. La difusión de los orbitales aumenta con su número cuántico principal.

b) El orbital $2s$ tiene una mayor concentración electrónica en zonas muy cercanas al núcleo que el $2p$, por lo que se dice que el orbital $2s$ es más penetrante que el $2p$. El orden de penetrabilidad de los orbitales es $s > p > d > f$. Los orbitales más penetrantes se ven más afectados por el aumento en la carga nuclear.

1.6 Los átomos polieletrónicos

Principio de Aufbau. La ecuación de Schrödinger es irresoluble de forma exacta para átomos polieletrónicos. Una aproximación que se suele hacer es suponer que cada electrón se mueve como si estuviera solo en el átomo bajo el influjo de una carga nuclear llamada *carga nuclear efectiva* (Z^*) (figura 1.13).

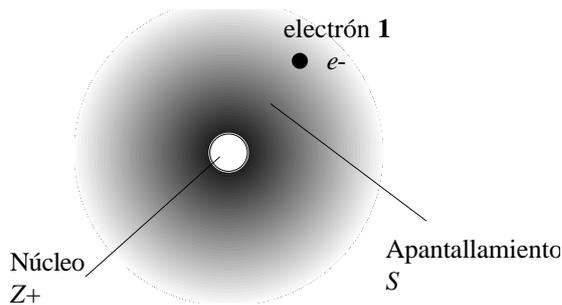


Figura 1.13. En una primera aproximación, podemos suponer que el electrón **1** “ve” al resto de electrones como una *nube media en el tiempo y esférica*. Como la nube se supone esférica, el campo eléctrico que ve **1** es el mismo que vería si fuera el único electrón de un átomo de carga nuclear Z^* , cuyo valor fuera igual a la *carga nuclear real* (Z) menos el *apantallamiento* (S) que sobre dicha carga ejerce el resto de electrones. Z^* recibe el nombre de *carga nuclear efectiva*.

El resultado de esta imagen simple es que un átomo polieletrónico se puede considerar formado por orbitales hidrogenoides, pero de más baja energía por la mayor carga nuclear. El estado fundamental de un átomo se obtiene llenando estos orbitales por orden creciente de energía (*principio de Aufbau*).

Principio de exclusión de Pauli. “Dos electrones de un átomo no pueden tener los mismos valores para los cuatro números cuánticos”.

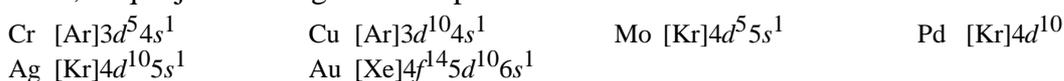
Orden de llenado de orbitales. Como consecuencia de la distinta penetrabilidad de los distintos tipos de orbitales, al aumentar el número atómico, a veces se altera el orden relativo de sus energías (figura 1.14) y, por tanto, el de su llenado. Sin embargo, como regla general, los orbitales se llenan por orden creciente de $n + l$ y, a igual $n + l$, por valores crecientes de n .

Regla de Hund. “Para una configuración dada, el estado más estable es aquél con el máximo número de electrones desapareados”.

1.7 Configuraciones electrónicas de los átomos polieletrónicos en su estado fundamental

Las reglas anteriores permiten deducir las configuraciones electrónicas fundamentales (tabla 1.6) de los átomos polieletrónicos, salvo las excepciones entre los metales de transición detalladas a continuación:

• Los estados con subniveles completos o completos a mitad (o totalmente vacíos) tienen una especial estabilidad, lo que justifica algunas excepciones en el llenado de orbitales:



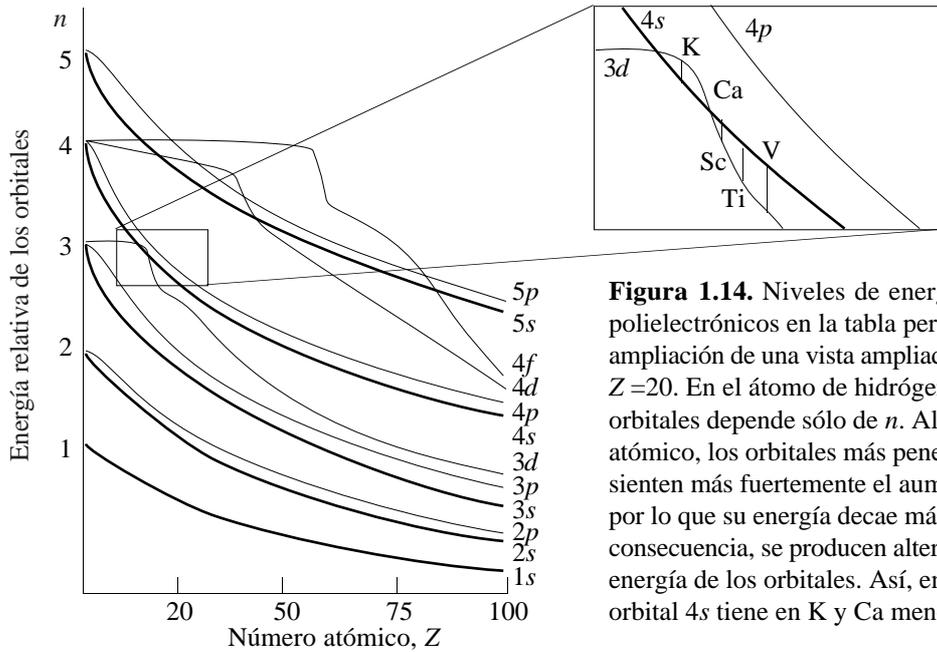


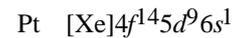
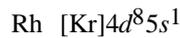
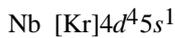
Figura 1.14. Niveles de energía de los átomos polielectrónicos en la tabla periódica. Se muestra una ampliación de una vista ampliada del orden alrededor de $Z = 20$. En el átomo de hidrógeno, la energía de los orbitales depende sólo de n . Al aumentar el número atómico, los orbitales más penetrantes ($s > p > d > f$) sienten más fuertemente el aumento de la carga nuclear, por lo que su energía decae más rápidamente. Como consecuencia, se producen alteraciones en el orden de energía de los orbitales. Así, en la zona expandida, el orbital 4s tiene en K y Ca menos energía que el 3d.

Tabla 1.6. Configuraciones electrónicas de los átomos en el estado fundamental*

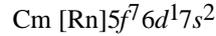
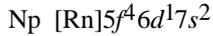
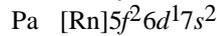
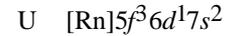
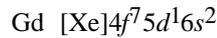
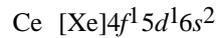
Z	Sím.	Configuración	Z	Sím.	Configuración	Z	Sím.	Configuración
1	H	$1s^1$	35	Br	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^5$	69	Tm	$[\text{Xe}]4f^{13}6s^2$
2	He	$1s^2$	36	Kr	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^6$	70	Yb	$[\text{Xe}]4f^{14}6s^2$
3	Li	$[\text{He}]2s^1$	37	Rb	$[\text{Kr}]5s^1$	71	Lu	$[\text{Xe}]4f^{14}5d^16s^2$
4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

* Estas configuraciones han sido obtenidas experimentalmente para los átomos en fase gaseosa.

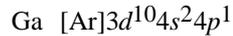
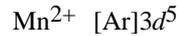
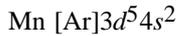
- En los casos anteriores y siguientes, influye también la pequeña diferencia de energía entre los niveles $(n-1)d$ y ns :



- En los lantánidos y actínidos, se observan excepciones similares para los orbitales $(n-2)f$ y $(n-1)d$.



- Al formar cationes, los electrones se sacan primero de los orbitales np , luego ns y finalmente $(n-1)d$.



1.8 Periodicidad de algunas propiedades físicas

El sistema periódico: bloques, períodos y grupos. En 1871, **Mendeleev** (1834–1907) propone su tabla en base a las repeticiones periódicas que observó en las propiedades químicas de los elementos ordenados por su masa atómica (ahora sabemos que es ordenados por su número atómico). En su forma actual (ver tablas), la tabla periódica está compuesta por 7 *periodos* horizontales, 18 *grupos* verticales y otro grupo constituido por 2 *series* de elementos (lantánidos y actínidos). Los grupos se numeran del 1 al 18. Los grupos 1–2 forman el bloque *s*, los grupos 3–12, el bloque *d*, los grupos 13–17, el bloque *p*, y los lantánidos y actínidos el bloque *f*.

Radio atómico. La figura 1.15 muestra que:

- el radio aumenta al descender por un grupo, pues aumenta el número de capas llenas.
- el radio disminuye a lo largo del período, pues aumenta la carga nuclear efectiva (Z^*) que soportan los electrones externos. Este aumento se debe a que la carga nuclear (Z) aumenta una unidad al pasar de un elemento al siguiente pero el apantallamiento lo hace mucho más débilmente ya que los electrones de una misma capa se apantallan muy mal entre sí.
- el comportamiento anterior se invierte en los metales de transición a partir del quinto elemento, ya que los electrones internos $(n-1)d$ apantallan bien a los más externos ns .
- la contracción de los lantánidos es la responsable de que los metales de transición externa de la segunda serie tengan tamaño similar a los de la tercera serie.

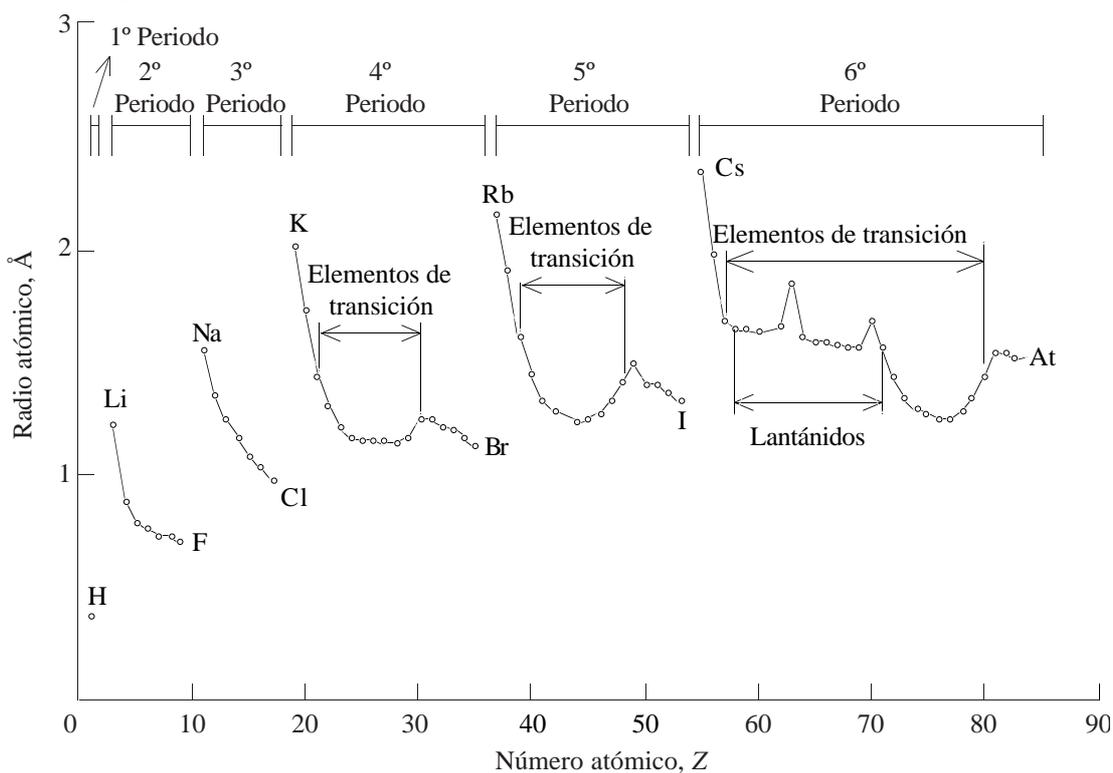


Figura 1.15. Gráfica de radios atómicos para los primeros 86 elementos.

En la figura 1.16 se comparan los radios de algunos átomos con los de sus iones.

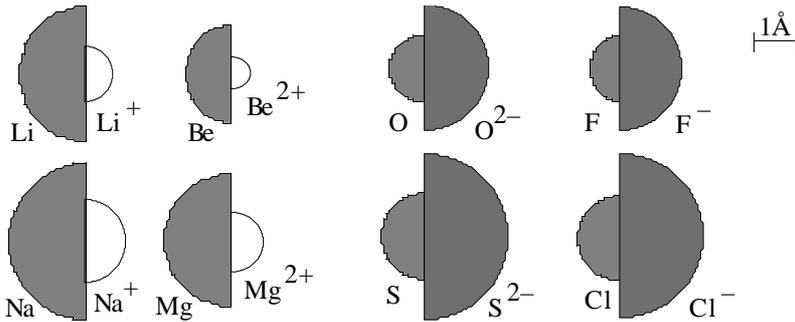


Figura 1.16. Los radios iónicos y atómicos de algunos elementos. Obsérvese que los cationes son menores que sus correspondientes átomos, pero los aniones son más grandes.

Energía de ionización. Es la energía mínima necesaria para sacar un electrón de un átomo gaseoso en su configuración fundamental. La *primera* energía de ionización es la energía necesaria para sacar el primer electrón ($A(g) \rightarrow A^+(g) + e^-$), la *segunda* energía de ionización, el segundo ($A^+(g) \rightarrow A^{2+}(g) + e^-$), etc.

El comportamiento periódico de las energías de ionización es inverso al del radio atómico (figuras 1.17 y 1.18): disminuye al bajar en un grupo y aumenta a lo largo de un periodo. Existen ciertas irregularidades que pueden ser justificadas por la estabilidad de los subniveles llenos o llenos a mitad.

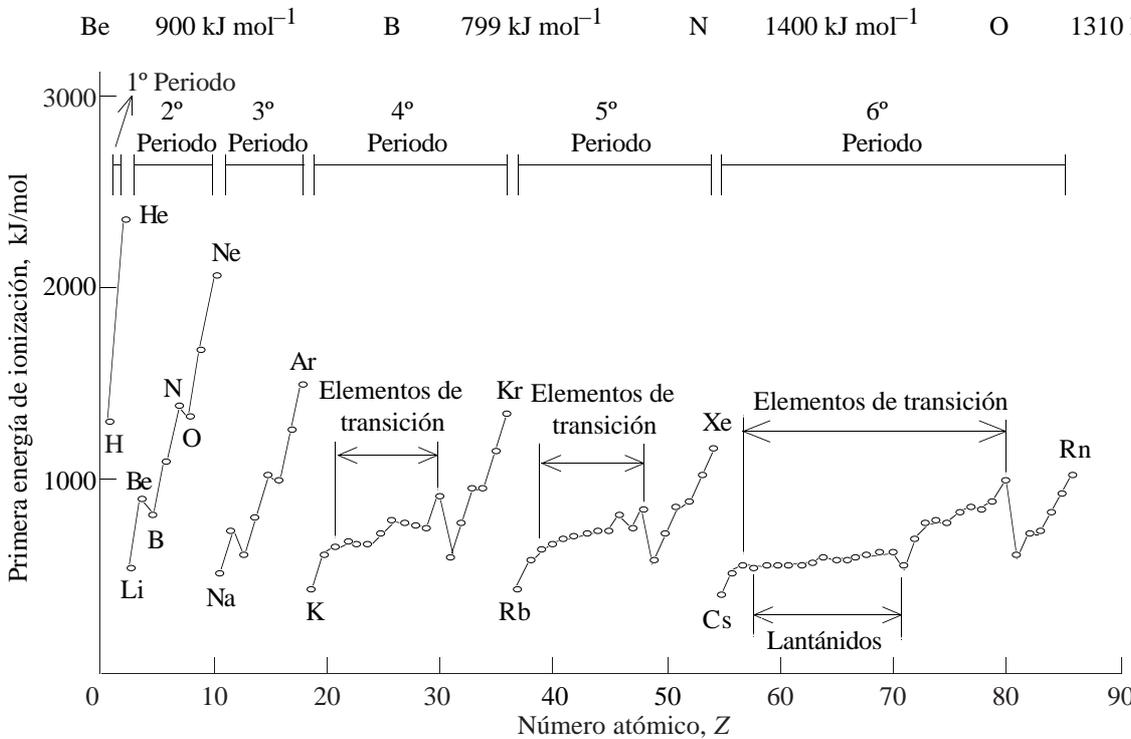


Figura 1.17. Gráfica de las primeras energías de ionización para los primeros 86 elementos.

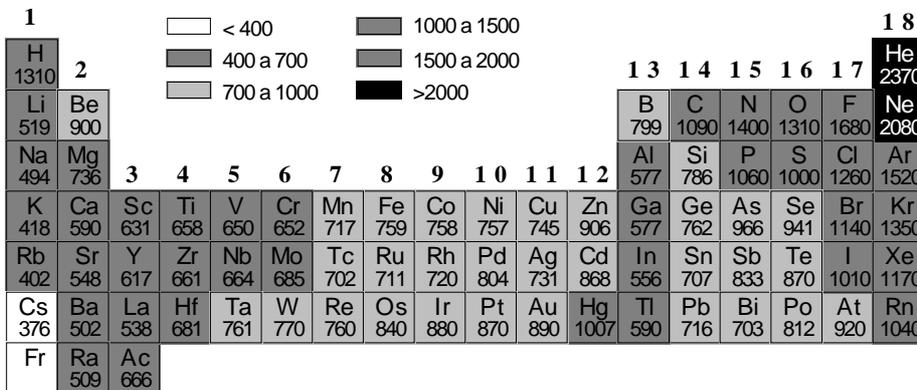


Figura 1.18. Variación de la primera energía de ionización (en kilojulios por mol) en los grupos principales y de transición externa de la tabla periódica.

Las segundas energías de ionización son siempre mayores que las primeras. Arrancar un electrón de un átomo o ión con configuración externa de gas noble (ns^2np^6) cuesta muchísima energía.

He	2372 kJ mol ⁻¹ (primera)			
Li	519 kJ mol ⁻¹ (primera)	7300 kJ mol ⁻¹ (segunda)		
Be	900 kJ mol ⁻¹ (primera)	1760 kJ mol ⁻¹ (segunda)	14800 kJ mol ⁻¹ (tercera)	
B	799 kJ mol ⁻¹ (primera)	2420 kJ mol ⁻¹ (segunda)	3660 kJ mol ⁻¹ (tercera)	25000 kJ mol ⁻¹ (cuarta)

Afinidad electrónica. La afinidad electrónica (*EA*) de un átomo es la energía que se *desprende* en el proceso $A(g) + e^- \rightarrow A^-(g)$. Un átomo tiene una alta afinidad electrónica cuando el proceso anterior es muy exotérmico. Con la excepción de los gases nobles, los elementos con altas energías de ionización tienen altas afinidades electrónicas. Sin embargo, el comportamiento periódico de las afinidades electrónicas es más complejo que el de las energías de ionización (figura 1.19). Las *segundas* afinidades son siempre endotérmicas. Así para el oxígeno, $EA_1 = -\Delta H_{EA1} = +142 \text{ kJ mol}^{-1}$, $EA_2 = -\Delta H_{EA2} = -844 \text{ kJ mol}^{-1}$.

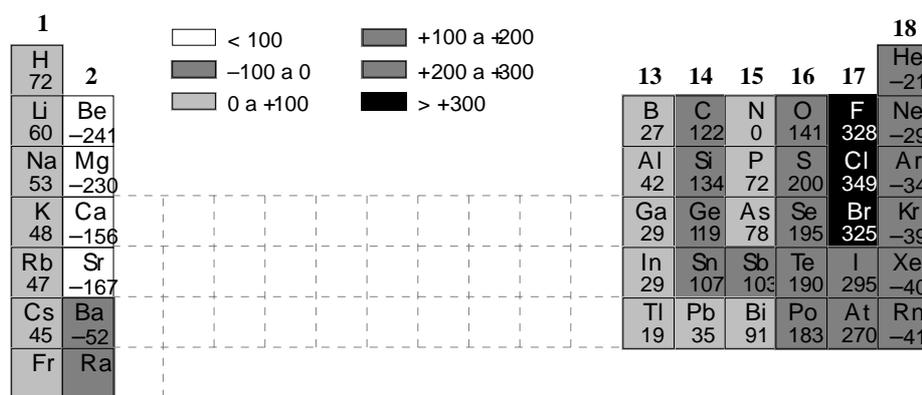


Figura 1.19. Variación de la primera electroafinidad (en kilojulios por mol) en los grupos principales de la tabla periódica.

Bibliografía

Atkins, págs. 46–55 y 231–275; Dickerson, págs. 1–9 y 250–348; Masterton, págs. 30–43 y 181–238; Russell, págs. 105–182; Whitten, págs. 86–143.

Bibliografía complementaria

- 1 S. Weinberg, “Partículas subatómicas”, Prensa Científica, **1985**, 206 páginas, ISBN 84-7593-015-8.
- 2 S. Hawking, “Una breve historia del tiempo”, **1989**.
- 3 T. Hey, P. Walters, “El universo cuántico”, Alianza Editorial, Madrid, **1989**, 211 págs.
- 4 R. P. Feynman, “¿Está Vd. de broma, sr. Feynman?”, Alianza Editorial, Madrid, **1987**, 403 págs.
- 5 R. P. Feynman, “¿Qué te importa lo que piensen los demás?”, Alianza Editorial, Madrid, **1990**, 290 págs.

Seminarios

- 1.1 Di cuántos protones, neutrones y electrones hay en el:
 - a) nitrógeno–14; b) nitrógeno–15; c) tántalo–179; d) uranio–234; e) sodio–23 monopositivo; f) oxígeno–16 dinegativo.
 - 1.2 ¿Cuáles de los siguientes pares son isótopos?:
 - a) $^2\text{H}^+$ y ^3H ; b) ^3He y ^4He ; c) ^{12}C y $^{14}\text{N}^+$; d) ^3H y $^4\text{He}^-$.
 - 1.3 ¿Por qué el número másico *A* y la masa relativa de un átomo no son iguales?
 - 1.4 Si se desplazan a la misma velocidad, ¿quien tiene mayor longitud de onda, un electrón o un protón?
-
- el átomo de hidrógeno**
- 1.5 ¿Cómo puede un electrón pasar a un estado excitado?.
 - 1.6 ¿Cuáles son los cuatro números cuánticos de un electrón en el átomo de hidrógeno? ¿Cuáles son los valores permitidos para cada uno de ellos?
 - 1.7 ¿Cuál es la principal diferencia entre una órbita de Bohr y un orbital en mecánica cuántica?.

- 1.8 Da el valor del momento cuántico azimutal y di cuántos orbitales tiene cada una de las siguientes subcapas:
a) $3s$, b) $4p$, c) $5p$, d) $3d$, e) $2s$, f) $5s$, g) $4f$.
- 1.9 ¿Cuántos orbitales hay en cada una de las siguientes capas o subcapas?
a) capa $n = 1$, b) capa $n = 2$, c) capa $n = 3$, d) subcapa $3d$, e) subcapa $4p$.
- 1.10 ¿Cuáles de los siguientes orbitales no pueden existir?
a) $2d$, b) $5p$, c) $3f$, d) $10s$, e) $1p$, f) $4f$, g) $4g$, h) $4d$.
- 1.11 Di cuántos nodos radiales (esféricos) y angulares tiene cada uno de los siguientes orbitales:
a) $4s$, b) $3d$, c) $2p$, d) $5p$.
- 1.12 Di qué es lo que entiendes por orbital.
- 1.13 ¿Cómo es la densidad de probabilidad para un orbital p_z en un punto de coordenadas radiales $r = 1 \text{ \AA}$, $\theta = 90^\circ$, $\phi = 45^\circ$?
- 1.14 ¿En qué dirección o direcciones es máxima la probabilidad de encontrar un electrón para un orbital:
a) s , b) p_x , c) d_{xy} , d) $d_{x^2-y^2}$?

átomos polieletrónicos

- 1.15 ¿Están siempre en el mismo orden los niveles de energía de los distintos orbitales, independientemente del átomo que se considere?
- 1.16 ¿Qué dice la regla de Hund? ¿Se puede sugerir alguna sencilla explicación física para el hecho de que los tres electrones $2p$ de un átomo de nitrógeno prefieran tener valores diferentes de sus números cuánticos magnéticos?
- 1.17 Escribe el símbolo y el nombre del elemento de número atómico más bajo que tenga:
a) un electrón p ; b) un subnivel p completo; c) un electrón f ; d) cinco electrones d .
- 1.18 Escribe la configuración electrónica en el estado fundamental de los siguientes átomos:
a) Li, b) C, c) Kr, d) Si, e) Co, f) Br, g) Sr, h) As, i) V, j) Cr, k) Nb, l) Fe, m) Au, n) Tl.
- 1.19 Escribe la configuración electrónica en el estado fundamental de los siguientes iones:
a) S^{2-} , b) Rb^+ , c) N^{3-} , d) Mg^{2+} , e) Ti^{4+} , f) Cl^- , g) Ga^{3+} , h) Fe^{2+} , i) Fe^{3+} , j) Tl^+ , k) Au^{3+} .
- 1.20 Di cuál de los siguientes átomos o iones debe ser paramagnético en su estado fundamental:
a) Li, b) Mg, c) S, d) Zn, e) Ba, f) Re, g) Cu^{2+} , h) Fe^{3+} .
- 1.21 ¿Cuáles de los siguientes átomos no tienen distribuciones esféricas totales de la nube de carga electrónica?:
a) Na, b) O, c) Ca, d) Xe, e) Cr, f) Mn.

propiedades periódicas

- 1.22 Define los siguientes términos: período, grupo, elemento representativo, elemento de transición, lantánido, metal alcalino, energía de ionización, afinidad electrónica.
- 1.23 ¿Qué ion crees que tendrá menor radio, Fe^{2+} o Fe^{3+} ?
- 1.24 Ordena los siguientes iones en orden decreciente de radio: Se^{2-} , S^{2-} , Te^{2-} , O^{2-} .
- 1.25 Las siguientes partículas son isoelectrónicas, es decir, tienen la misma configuración electrónica. Ordénalas según su radio decreciente: Ne, F^- , Na^+ , O^{2-} , Mg^{2+} .
- 1.26 La primera energía de ionización de un átomo es aquella que hay que suministrarle para arrancar el primer electrón, la segunda es la que hay que suministrarle para arrancar el segundo electrón, etc. ¿Por qué es mayor la segunda energía de ionización que la primera?
- 1.27 En cada uno de los siguientes pares de átomos, indicar cuál tiene la (primera) energía de ionización más alta, y cuál la afinidad más alta:
a) S y P, b) Al y Mg, c) Ar y K, d) K y Rb.

1.28 Di cuáles de las siguientes afirmaciones son ciertas:

- El ion Na^+ es menor que el ion K^+ .
- El ion Na^+ es menor que el átomo de Na.
- El ion F^- es menor que el átomo de F.
- Los iones de los metales alcalinos son más pequeños que los iones de los metales alcalino-térreos del mismo período.
- La energía de ionización crece al bajar en el grupo.
- Una razón por la que el helio no es reactivo es por su alta energía de ionización.
- La primera energía de ionización del cesio es mayor que la del bario.
- La primera energía de ionización del He^+ es la misma que la segunda del átomo de Helio.
- La afinidad electrónica de un catión es mayor que la del átomo correspondiente.

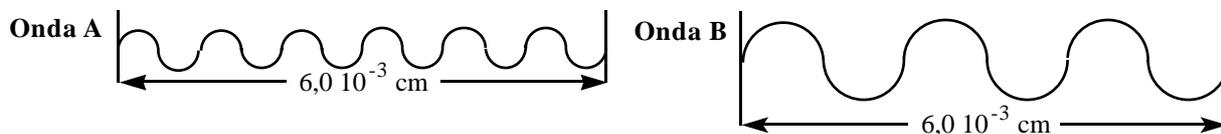
Problemas

isótopos, partículas elementales

- El cobre contiene dos isótopos: 69,09% de cobre-63 ($M_r = 62,9298$) y 30,91% de cobre-65 ($M_r = 64,9278$) ¿Cuál es la masa relativa (M_r) promedio del cobre?
- El carbono contiene dos isótopos: 98,89% de carbono-12 (su M_r es exactamente 12) y 1,11% de carbono-13 ($M_r = 13,003$) ¿Cuál es la masa relativa (M_r) promedio del carbono?

naturaleza ondulatoria de la luz

- Si el dibujo representa dos ondas electromagnéticas A y B situadas en la región del infrarrojo, calcula:
 - Su longitud de onda y su frecuencia ($c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$).
 - El tiempo en que ambas recorrerán la distancia marcada.



- Calcula la frecuencias de cada una de las radiaciones siguientes ($c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$):
 - radiación infrarroja de $\lambda = 10^{-4} \text{ m}$;
 - radiación ultravioleta de $\lambda = 3 \cdot 10^{-8} \text{ m}$;
 - radiación infrarroja de $\lambda = 5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$.

longitud de onda y cuantos de energía

- El efecto fotoeléctrico (figura 1.4) se utiliza en algunos dispositivos de alarma contra robo. El rayo de luz incide sobre el cátodo (-) y arranca electrones de su superficie. Estos electrones son atraídos hacia el ánodo (+), y el circuito eléctrico se cierra por medio de una batería. Si el rayo de luz se encuentra bloqueado por el brazo de un ladrón, el circuito eléctrico se rompe y salta el sistema de alarma. ¿Cuál es la máxima longitud de onda que se podría utilizar en un sistema de alarma si el cátodo de la célula es de wolframio y los electrones son arrancados del mismo con una energía cinética de $8,0 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ cuando la longitud de onda de la luz incidente es de exactamente $1,25 \cdot 10^3 \text{ \AA}$? ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$, $c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$).
- La longitud de onda umbral o crítica del efecto fotoeléctrico para el litio es 5200 \AA . Calcula la velocidad de los electrones emitidos como resultado de la absorción de luz de 3600 \AA ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$, $c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$).
- Calcula la longitud de onda, en nanómetros, de la línea de la serie de Balmer que resulta de la transición de $n = 3$ a $n = 2$ [R vale $3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$]. ¿En qué región del espectro electromagnético (figura 1.3) aparecerá?
- La energía de ionización para el hidrógeno es la que debe absorber para separar el electrón, cuando éste

está en el estado fundamental, $H(g) \rightarrow H^+(g) + e^-$. Calcula, a partir de la ecuación de Balmer, la energía de ionización del hidrógeno atómico gaseoso ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $\mathcal{R} = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$).

ecuación de de Broglie

- 1.9 Calcula la longitud de onda de
- un electrón que se desplaza a $3,0 \cdot 10^7 \text{ m s}^{-1}$ [$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$].
 - una pelota de 140 g que se mueve a 160 km/h.
- 1.10 Calcula la longitud de onda de:
- un electrón cuya energía es 10 keV [$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$].
 - una partícula de masa 125 g cuya velocidad es de 45 m/s.
-
- 1.11 Calcula la frecuencia de la luz necesaria para ionizar átomos de litio si la primera energía de ionización del litio es 520 kJ mol^{-1} ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$).
- 1.12 Se puede usar luz de 590 nm ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) de longitud de onda para excitar el electrón 3s del sodio a un orbital 3p. Dado que la energía de ionización del sodio en su estado fundamental es 494 kJ mol^{-1} , ¿cuál será la energía de ionización del átomo en su estado excitado $[\text{Ne}]3p^1$ ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$).
- 1.13 La máxima longitud de onda de luz que puede expulsar un electrón de un ion Li^- y conseguir la formación de un átomo de litio neutro es 2000 nm. Calcula la entalpía de afinidad electrónica del litio ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$).

Soluciones a los seminarios

- 1.1 Protones, neutrones, electrones: a) 7, 7, 7; b) 7, 8, 7; c) 73, 106, 73; d) 92, 92, 142; e) 11, 12, 10; f) 8, 8, 10.
- 1.2 a) y b).
- 1.3 Se trata de dos conceptos diferentes. El número másico (Z) es, por definición, un número *entero* igual al número total de nucleones, mientras que la masa relativa es un número decimal igual a la relación entre la masa de la partícula considerada y la doceava parte de la masa de un átomo de carbono-12. Sin embargo, existe una relación *accidental*, y es que, como la masa relativa del protón y del neutrón son cercanas a la unidad y la del electrón es muy pequeña, el valor de de la masa relativa de un átomo es cercano al valor de su número másico.
- 1.4 Un electrón ya que su masa es menor.
- 1.5 Con una radiación electromagnética de frecuencia adecuada ($E = h\nu$).
- 1.6 Ver tabla 1.3.
- 1.7 En el modelo de Bohr, una órbita tiene una trayectoria y una energía definidas. En el modelo cuántico, el orbital tiene una energía, pero no una trayectoria, definidas.
- 1.8 Número de orbitales de una subcapa $= 2l + 1$: a), e) y f) $l = 0$, 1 orbital; b) y c) $l = 1$, 3 orbitales; ; d) $l = 2$, 5 orbitales; e) $l = 3$, 7 orbitales.
- 1.9 a) 1 orbital; b) 4 orbitales; c) 9 orbitales; d) 16 orbitales.
- 1.10 No pueden existir a), c), e) y g).
- 1.11 Nodos radiales $= n - l - 1$, nodos angulares $= l$, nodos totales $= n - 1$. a) 3 y 0; b) 0 y 2; c) 0 y 1; d) 3 y 1.
- 1.12 Un orbital, en sentido puro, es cada uno de los estados de energía electrónicos de un átomo o ión monoeléctrico, como el átomo de hidrógeno. En un átomo polielectrico, cada electrón *no* tiene en realidad un estado de energía independiente. Sin embargo, una aproximación que se realiza es suponer que sí son independientes (*aproximación orbital*), y, por extensión, a cada estado de energía de *un electrón* en un átomo polielectrico, se le llama *orbital*.
- 1.13 Nula.
- 1.14 a) En todas las direcciones la probabilidad es la misma; b) en el eje x ; c) en las bisectrices de los ejes x e y ; d) en los ejes x e y .
- 1.15 No. Ver figura 1.14.
- 1.16 Al colocar los tres electrones en tres orbitales distintos cuya mayor densidad se sitúa en distintas regiones del espacio, se minimizan las repulsiones interelectrónicas.
- 1.17 a) B; b) Ne; c) Ce (no el La, ya que su configuración electrónica es anómala, ver 1.7).
- 1.18 a) $[\text{He}]2s^1$; b) $[\text{He}]2s^22p^2$; c) $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^6$; d) $[\text{Ne}]3s^23p^2$; e) $[\text{Ar}]3d^74s^2$; f) $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^5$; g) $[\text{Kr}]5s^2$; h) $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^3$; i) $[\text{Ar}]3d^34s^2$; j) $[\text{Ar}]3d^54s^1$; k) $[\text{Kr}]4d^45s^1$; l) $[\text{Ar}]3d^64s^2$; m) $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^1$; n) $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$.
- 1.19 a) $[\text{Ne}]3s^23p^6 = [\text{Ar}]$; b) $[\text{Kr}]$; c) $[\text{He}]2s^22p^6 = [\text{Ne}]$; d) $[\text{Ne}]$; e) $[\text{Ar}]$; f) $[\text{Ne}]3s^23p^6 = [\text{Ar}]$; g) $[\text{Ar}]3d^{10}$; h) $[\text{Ar}]3d^6$; i)

- [Ar]3d⁵; j) [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²; k) [Xe]4f¹⁴5d⁸.
- 1.20 En negrita, los orbitales en los que hay electrones desapareados: a) [He]**2s¹**, paramagnético (1 electrón desapareado); b) [Ne]3s², diamagnético; c) [Ne]3s²**3p⁴**, paramagnético (2 electrones desapareados); d) [Ar]3d¹⁰4s², diamagnético; e) [Xe]6s², diamagnético; f) [Xe]4f¹⁴**5d⁵**6s², paramagnético (5 electrones desapareados); g) [Ar]**3d⁹**, paramagnético (1 electrón desapareado); h) [Ar]**3d⁵**, paramagnético (5 electrones desapareados).
- 1.21 Sí tienen distribución esférica: a) [Ne]3s¹; c) [Ar]4s²; d) [Kr]4d¹⁰5s²5p⁶; e) [Ar]3d⁵4s¹; f) [Ar]3d⁵4s².
No tienen distribución esférica: b) [He]2s²2p⁴.
- 1.22 Ver teoría.
- 1.23 Fe³⁺, porque tiene menos electrones y además los electrones que quedan son más atraídos por la carga nuclear al haber menos repulsiones (apantallamiento) entre ellos.
- 1.24 $r(\text{Te}^{2-}) > r(\text{Se}^{2-}) > r(\text{S}^{2-}) > r(\text{O}^{2-})$.
- 1.25 Al tener los mismos electrones, el tamaño dependerá de lo fuertemente que sean atraídos por el núcleo, es decir, de la carga nuclear: $r(\text{O}^{2-}) > r(\text{F}^-) > r(\text{Ne}) > r(\text{Na}^+) > r(\text{Mg}^{2+})$.
- 1.26 Porque al arrancar un electrón, los electrones que quedan son más atraídos por la carga nuclear al haber menos repulsiones (apantallamiento) entre ellos.
- 1.27 Ver 1.9.
- 1.28 Ciertas: a), b), f), h), i). Falsas: c), d), e), g).

Soluciones a los problemas

- 1.1 $M_r = 63,547$.
- 1.2 $M_r = 12,01$.
- 1.3 a) Onda A: $\lambda = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$, $\nu = 3,0 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$,
onda B: $\lambda = 2,0 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$, $\nu = 1,5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$;
b) $t = 2,0 \cdot 10^{-13} \text{ s}$.
- 1.4 a) $\nu = 1 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$; b) $\nu = 10 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$; c) $\nu = 6 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$.
- 1.5 $\lambda = 2,51 \cdot 10^3 \text{ \AA}$.
- 1.6 $\nu = 6,09 \cdot 10^5 \text{ m s}^{-1}$.
- 1.7 a) $\lambda = 656,3 \text{ nm}$. Aparecerá en el visible.
- 1.8 $E = 1320 \text{ kJ}$ para 1 mol de hidrógeno.
- 1.9 a) $\lambda = 2,4 \cdot 10^{-11} \text{ m}$; b) $\lambda = 1,06 \cdot 10^{-34} \text{ m}$.
- 1.10 a) $\lambda = 1,23 \cdot 10^{-11} \text{ m}$; b) $\lambda = 1,18 \cdot 10^{-34} \text{ m}$.
- 1.11 $\nu = 1,30 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$.
- 1.12 $4,84 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ por átomo, 291 kJ por mol.
- 1.13 $-9,94 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ por átomo, $-59,9 \text{ kJ}$ por mol.