

J. J. Thomson (1856-1940)

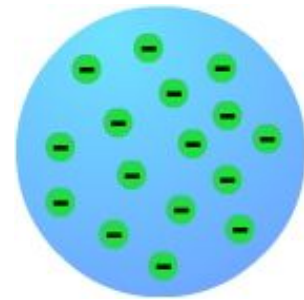
En **1897** los experimentos realizados sobre la conducción de la electricidad por los gases dieron como resultado el descubrimiento de una nueva partícula con carga negativa: el electrón.

J.J Thomson propone entonces el primer modelo de átomo:

Los electrones (pequeñas partículas con carga negativa) se encuentran incrustados en una nube de carga positiva. La carga positiva de la nube compensa exactamente la negativa de los electrones siendo el átomo eléctricamente neutro.

Primer modelo de átomo compuesto (Thomson, 1897)

Los electrones, diminutas partículas con carga eléctrica negativa, están incrustadas en una nube de carga positiva de forma similar a las pasas en un pastel (modelo de "pastel de pasas")

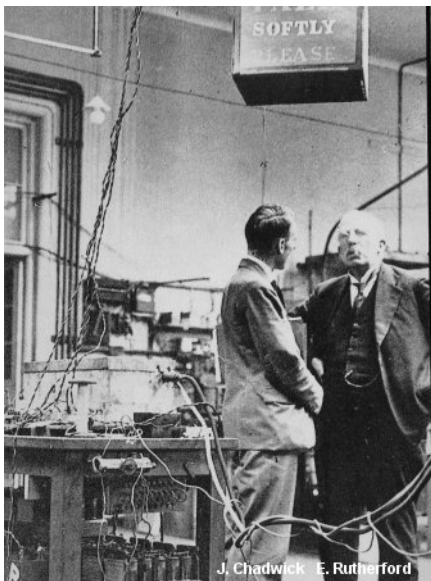
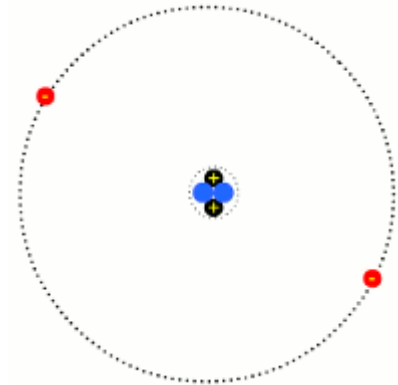


Modelo de átomo planetario (Rutherford, 1911)

E. Rutherford realiza en **1911** un experimento crucial con el que trataba de comprobar la validez del modelo atómico de Thomson.

Partículas alfa (α), procedentes de un material radiactivo, se aceleran y se hacen incidir sobre una lámina de oro muy delgada, visualizándose la dirección en la que emergen tras atravesar los átomos de la lámina.

El análisis de los resultados obtenidos lleva a Rutherford a proponer la existencia de un núcleo (muy pequeño en relación con el volumen total del átomo) en el que se concentra la práctica totalidad de la masa del átomo, y cuya carga positiva compensará la negativa de los electrones corticales que girar alrededor del núcleo de forma análoga a como los planetas orbitan alrededor del Sol (modelo planetario).



J. Chadwick E. Rutherford

En 1918 el propio Rutherford consideró que los núcleos de hidrógeno (que habían sido identificados en reacciones nucleares) deberían de ser una partícula fundamental que se encontraría alojada en los núcleos de los átomos, proponiendo el nombre de **protón** para dicha partícula.

El **neutrón** fue propuesto también por Rutherford en 1920, siendo identificado por J. Chadwick en 1932 como producto de la reacción nuclear producida al bombardear núcleos de berilio con partículas alfa.

El diámetro de un átomo típico es del orden de 10^{-10} m (0,1 nm), mientras que el núcleo atómico es 10 000 veces más pequeño (10^{-14} m). Los protones y neutrones tienen un diámetro del orden de 10^{-15} m, y el diámetro del electrón es del orden de 10^{-18} m .

E. Rutherford (de frente) y J. Chadwick (de lado) en el laboratorio.

La crisis del modelo de Rutherford



J.C. Maxwell (1831 -1879)

J. C. Maxwell, apoyándose en trabajos anteriores de Oersted, Faraday y Ampere, que relacionaban electricidad y magnetismo, dio forma matemática a **la teoría electromagnética** durante la década de 1860. Dicha teoría predecía la existencia de ondas electromagnéticas.

El hecho de que las ondas electromagnéticas se propagaran con idéntica velocidad que la luz llevó a la consideración de que **la luz misma no es más que una onda electromagnética**. La teoría de Maxwell unificaba así óptica y electromagnetismo.

Existen una gran variedad de ondas electromagnéticas que van desde los rayos gamma, muy energéticos y fuertemente ionizantes (son capaces de arrancar electrones de los átomos produciendo iones), hasta las ondas de radio en el extremo opuesto del espectro.

Hertz confirmó en 1888 la predicción de Maxwell al generar y recibir ondas electromagnéticas en el laboratorio.

El modelo de átomo planetario propuesto por Rutherford mostró pronto algunos inconvenientes teóricos que lo hacían inviable:

- **Contradecía la teoría electromagnética de Maxwell.** Según esta teoría una carga eléctrica acelerada debería de emitir ondas electromagnéticas.

Un electrón al girar en círculos alrededor del núcleo debería emitir, por tanto, ondas electromagnéticas. **Dicha emisión provocaría una pérdida de energía que haría que el electrón describiera órbitas de radio decreciente hasta caer sobre el núcleo.** El modelo atómico de Rutherford era, por tanto, inviable desde el punto de vista de la física clásica.

- **No daba una explicación satisfactoria a los espectros atómicos.** Si encerramos en un tubo hidrógeno o helio y sometemos el gas a voltajes elevados, el gas emite luz. Si hacemos pasar esa luz a través de un prisma, los colores que la constituyen se separan dándonos el espectro de la luz analizada.

Pronto se concluyó que la emisión de luz podría deberse a que los electrones absorbían energía de la corriente eléctrica y saltaban a órbitas superiores para, a continuación, volver a caer a las órbitas más próximas al núcleo emitiendo el exceso de energía en forma de energía luminosa.

Esta interpretación conducía, sin embargo, a afirmar que los espectros deberían de ser continuos, ya que al existir órbitas de cualquier radio (y energía) todos los saltos son posibles. La experiencia, por el contrario, mostraba que los espectros de los átomos son discontinuos. Constan de rayas de diversos colores sobre un fondo negro (ver imagen).



Espectro continuo. Se observan todos los colores que el ojo puede percibir.



Espectros de emisión de H (arriba) y del He (abajo). No son continuos. Constan de rayas de diversos colores separadas por amplias zonas negras en las que no se observa luz.

El inicio de la Física Cuántica. Modelo atómico de Bohr

Con el fin de resolver los problemas acumulados sobre el modelo de átomo planetario, y para explicar el espectro del átomo de hidrógeno, Niels Bohr propone en 1913 un nuevo modelo atómico sustentado en tres postulados:

- Cualquiera que sea la órbita descrita por un electrón, éste no emite energía.** Las órbitas son consideradas como **estados estacionarios de energía**. A cada una de ellas le corresponde una energía, tanto mayor, cuanto más alejada se encuentre del núcleo.
- No todas las órbitas son posibles.** Únicamente pueden existir aquellas órbitas para las cuales el momento angular del electrón sea un múltiplo entero de $h/2\pi = \hbar$ (léase "hache cruzada").

$$m v r = n \frac{h}{2\pi}$$

NOTA

El momento angular (L) de una partícula incluye las magnitudes que caracterizan a una partícula que gira: su masa, su velocidad y la distancia al centro de giro. Para una partícula de masa m que gire con velocidad v describiendo una circunferencia de radio r , el momento angular viene dado por: $L = m v r$.



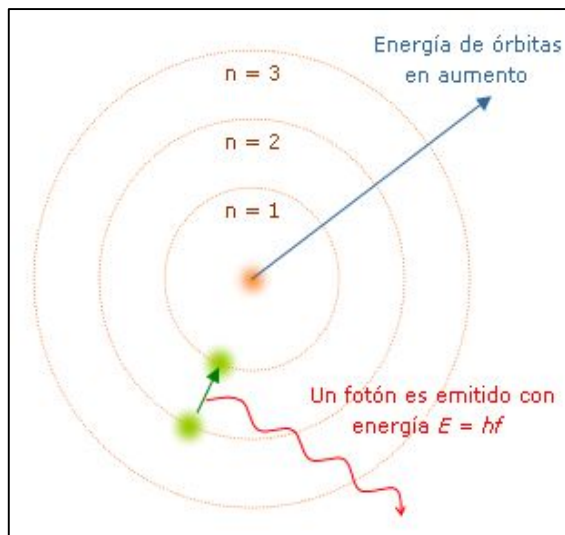
Niels Bohr (1885-1962)

El número, n , que determina las órbitas posibles, se denomina **número cuántico principal**. Las órbitas que se correspondan con valores no enteros del número cuántico principal, **no existen**.

- La energía liberada al caer un electrón desde una órbita superior, de energía E_2 , a otra inferior, de energía E_1 , se emite en forma un cuanto de luz (fotón). La frecuencia (f) del cuanto viene dada por la expresión:**

$$E_2 - E_1 = h f$$

h (constante de Planck) = $6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s



Modelo atómico de Bohr (1913)

Los cálculos basados en los postulados de Bohr daban excelentes resultados a la hora de interpretar el espectro del átomo de hidrógeno, pero hay que tener en cuenta que contradecían algunas de las leyes más asentadas de la Física:

- El primer postulado iba en contra de la teoría electromagnética de Maxwell**, ya que según esta teoría cualquier carga eléctrica acelerada debería de emitir energía en forma de radiación electromagnética.
- El segundo postulado era aún más sorprendente. En la física clásica era inaceptable suponer que el electrón no pudiera orbitar a determinadas distancias del núcleo, o que no pudiera tener determinados valores de energía.** La afirmación era equivalente a suponer que un objeto que describe circunferencias atado a una cuerda, no puede describir aquellas cuyo radio no sea múltiplo de dos (por ejemplo).
- El tercer postulado afirmaba que la luz se emitía en forma de pequeños paquetes o cuantos**, lo cual a pesar de que ya había sido propuesto por Planck en 1900, no dejaba de sorprender en una época en la que la idea de que la luz era una onda estaba firmemente arraigada.

El átomo de Bohr era, simplemente, un síntoma de que la física clásica, que tanto éxito había tenido en la explicación del mundo macroscópico, no servía para describir el mundo de lo muy pequeño, el dominio de los átomos.

Posteriormente, en la década de 1920, una nueva generación de físicos (Schrödinger, Heisenberg, Dirac...) elaborarán una nueva física, la Física Cuántica, destinada a la descripción de los átomos, que supuso una ruptura con la física existente hasta entonces.

Estudiando la distribución de líneas del espectro visible del hidrógeno **Balmer** en 1885 había deducido, de forma empírica, que la posición de las líneas respondía a la siguiente fórmula matemática:

$$f = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right); R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}; n = 3, 4, \dots$$



La ley de Coulomb nos permite calcular la fuerza con la que un electrón (de carga e) es atraído por el núcleo de carga Ze (el número de protones, o cargas positivas del núcleo, viene dado por el número atómico, Z):

$$F = k \frac{(Ze) e}{r^2} = k \frac{Ze^2}{r^2} \quad (Z = 1 \text{ para el átomo de H})$$

Imponiendo la condición para que el electrón describa una circunferencia obtenemos:

$$\begin{aligned} F_N &= m a_N \\ k \frac{Ze^2}{r^2} &= m \frac{v^2}{r} \\ k Ze^2 &= m v^2 r \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta el segundo postulado de Bohr, tenemos:

$$\begin{aligned} m^2 v^2 r^2 &= n^2 \frac{h^2}{4\pi^2}; \quad m v^2 r = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m r} \\ k Z e^2 &= n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m r}; \quad r = \left(\frac{h^2}{4\pi^2 m k Z e^2} \right) n^2; n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Esta expresión permite calcular el radio de las **órbitas permitidas**. Como se puede observar **existe una condición de cuantización**, impuesta por los valores permitidos de **n** (número cuántico). De esta manera son posibles las órbitas para las cuales **n** tenga valores enteros, mientras que no existen aquellas órbitas para las cuales **n** no sea entero.

La frecuencia de las líneas que aparecen en el espectro puede ser calculada ahora si tenemos en cuenta la cuantización de las órbitas:

La energía de un electrón que orbita alrededor de un núcleo, con carga Ze, viene dada por:

$$E = E_c + E_p = -\frac{1}{2} k \frac{Z e^2}{r}$$

Introduciendo el valor del radio obtenido para las órbitas posibles obtenemos:

$$E = E_c + E_p = -\frac{1}{2} k \frac{Z e^2}{r} = -\frac{1}{2} k \frac{Z e^2}{\left(\frac{h^2}{4\pi^2 m k Z e^2} \right) n^2} = -\left(\frac{2\pi^2 m k^2 Z^2 e^4}{h^2} \right) \frac{1}{n^2}$$

Sustituyendo el valor obtenido para la energía en la expresión que da la frecuencia de la luz emitida (tercer postulado) tenemos:

$$h f = E_2 - E_1 = \left(\frac{2\pi^2 m k^2 Z^2 e^4}{h^2} \right) \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad f = \left(\frac{2\pi^2 m k^2 Z^2 e^4}{h^3} \right) \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Considerando que $n_1 = 2$ para el espectro visible del átomo de hidrógeno (lo que equivale a decir que la luz visible del espectro del hidrógeno se emite cuando los electrones caen desde órbitas superiores a la segunda orbita), tenemos que las frecuencias observadas deberían responder a la expresión:

$$f = \left(\frac{2\pi^2 m k^2 Z^2 e^4}{h^3} \right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

La expresión obtenida concuerda con la obtenida experimentalmente por Balmer (ver más arriba) haciendo:

$$R = \frac{2\pi^2 m k^2 Z^2 e^4}{h^3}$$

En espectroscopía se utiliza una fórmula similar a la mostrada más arriba, conocida con el nombre de **fórmula de Rydberg**. La única diferencia es que se calcula el inverso de la longitud de onda o número de onda.

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

La constante R_H para el átomo de hidrógeno, llamada **constante de Rydberg**, vale: $1,0967757 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

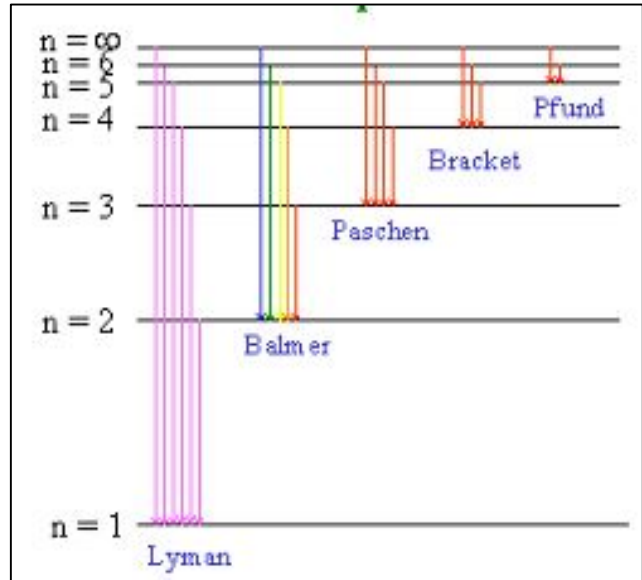
Con esta fórmula se pueden calcular las distintas líneas para el espectro del átomo de hidrógeno que se pueden clasificar en distintas series.

Serie de Lyman. Constituida por las líneas que aparecen cuando los electrones caen desde órbitas superiores a **la primera órbita** ($n_1 = 1$; $n_2 = 2, 3, 4 \dots$). Las líneas de esta serie se sitúan en el **ultravioleta**.

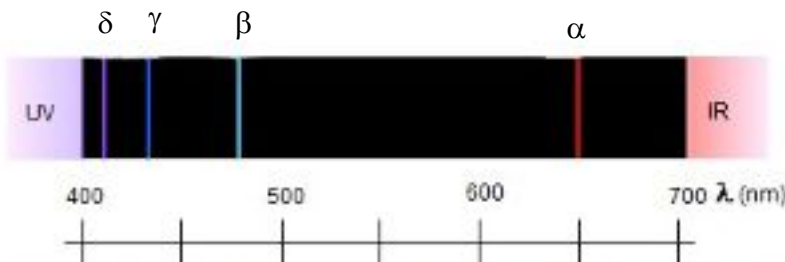
Serie de Balmer. Formada por el conjunto de líneas obtenidas cuando los electrones caen desde órbitas superiores a **la segunda órbita** ($n_1 = 2$; $n_2 = 3, 4, 5 \dots$). Las líneas de esta serie se sitúan en el **visible**.

Serie de Paschen. Integrada por el conjunto de líneas obtenidas cuando los electrones caen desde órbitas superiores a **la tercera órbita** ($n_1 = 3$; $n_2 = 4, 5, 6 \dots$). Las líneas de esta serie se sitúan en el **infrarrojo**.

También existen las **series de Brackett y Pfund**, situadas también **en el infrarrojo** y formadas por el conjunto de líneas que se obtienen al caer a **la cuarta órbita** ($n_1=4$) **y a la quinta órbita** ($n_1=5$), **respectivamente**.



Se calculan a continuación las longitudes de las líneas correspondientes a la serie de Balmer para el hidrógeno.



Línea	Long. onda (nm)
H _α	656,3 (rojo)
H _β	486,1 (azul-verde)
H _γ	434,1 (violeta)
H _δ	410,3 (violeta)

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_\alpha} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 0,15233 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_\alpha = 6,5647 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 656,5 \text{ nm}$$

$$\frac{1}{\lambda_\beta} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 0,20565 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_\beta = 4,8626 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 486,3 \text{ nm}$$

$$\frac{1}{\lambda_\gamma} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right) = 0,23033 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_\gamma = 4,3416 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 434,2 \text{ nm}$$

$$\frac{1}{\lambda_\delta} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{6^2} \right) = 0,24373 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_\delta = 4,1029 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 410,3 \text{ nm}$$

Como se puede observar la concordancia con las medidas experimentales (tabla) es muy buena.

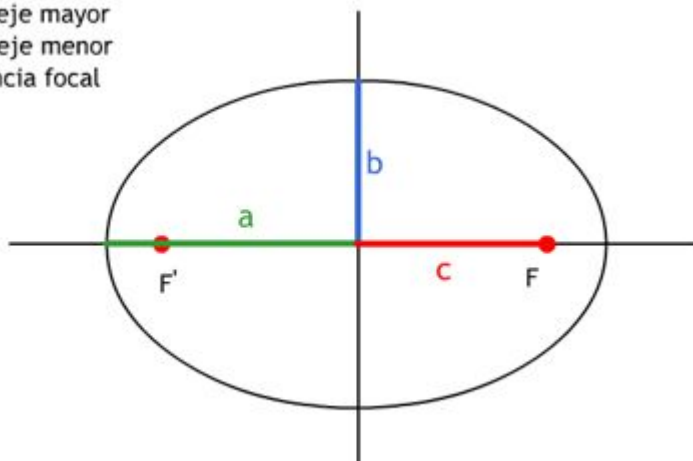
Extensión de Sommerfeld. Órbitas elípticas

Sommerfeld (en 1916) perfeccionó el átomo de Bohr considerando que si el electrón está sometido a una fuerza inversamente proporcional al cuadrado de la distancia (ley de Coulomb), **debería de describir una elipse**, no una circunferencia.

Según la teoría desarrollada por Bohr un electrón no puede poseer valores arbitrarios de energía cuando orbita alrededor del núcleo, hay valores permitidos y valores prohibidos, ya que existen órbitas permitidas y otras que están prohibidas.. **La energía está "cuantizada"**.

Para fijar una elipse necesitamos determinar fijar dos parámetros: el valor del semieje mayor y el del semieje menor.

a = semieje mayor
b = semieje menor
c = distancia focal



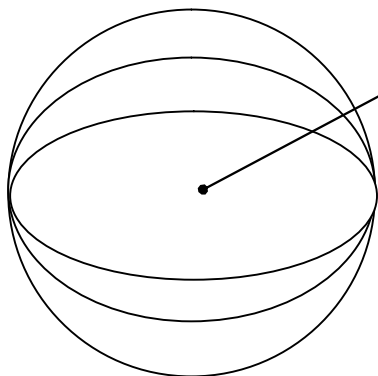
Los parámetros más importantes de la elipse son:

- El semieje mayor, a.**
- El semieje menor, b.**
- La distancia focal, c.**

El eje mayor tendrá por tanto una longitud igual a 2a, el menor a 2b y la distancia entre focos será igual a 2c

Por tanto, para determinar las posibles órbitas elípticas necesitamos dos números cuánticos:

- n : Número cuántico principal.** Cuantiza (fija) el semieje mayor.
- l : Número cuántico secundario.** Cuantiza (fija) el semieje menor.



Con el mismo valor del radio (semieje mayor de la elipse), existen muchas elipses que se diferencian en su excentricidad (distinto valor del semieje menor).

El número cuántico principal, **n**, fija el valor del semieje mayor.

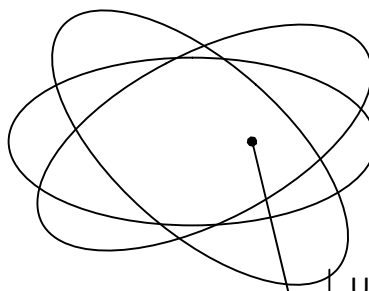
El número cuántico secundario, **l**, fija el valor del semieje menor.

El número cuántico secundario solamente puede tomar los valores enteros comprendidos entre cero y n-1:

$l = 0, 1, 2, 3 \dots (n-1)$

Si consideramos un espacio tridimensional, vemos que las elipses (órbitas electrónicas) pueden adquirir diversas orientaciones.

Otro número cuántico, **m_l , número cuántico magnético**, fija (cuantiza) las orientaciones permitidas.



El número cuántico magnético adquiere valores enteros comprendidos entre -l y +l (incluyendo el valor cero).

$m_l = -l \dots 0 \dots +l$

Una misma elipse (órbita) puede tener muchas orientaciones en el espacio.

El número cuántico magnético fija las orientaciones permitidas

Las órbitas posibles, en consecuencia, quedan fijadas por tres números cuánticos:

n : Número cuántico principal.

- Cuantiza (fija) el semieje mayor de la órbita (elipse).
- Valores: $n = 1, 2, 3 \dots$

l : Número cuántico secundario.

- Cuantiza (fija) el radio menor de la órbita (elipse).
- Valores: $l = 0, 1, 2, 3 \dots (n-1) \dots$

m_l : Número cuántico magnético.

- Cuantiza (fija) la orientación de la órbita en el espacio.
- Valores: $m_l = -l \dots 0 \dots +l$

A cada órbita, determinada por los tres números cuánticos, le corresponde un valor de energía.

Ejemplo 1 (Oviedo. 2010-2011)

De los siguientes conjuntos de números cuánticos, indique los que son posibles y los que no son posibles. Justifique la respuesta.

a) $n = 3; l = 3; m_l = 0$. b) $n = 2; l = 1; m_l = 0$. c) $n = 6; l = 5; m_l = -1$ d). $n = 4; l = 3; m_l = -4$

Solución:

a) Para $n = 3$ los valores posibles de l son: 0, 1, 2. En el enunciado aparece el valor $l = 3$ que no está permitido. **Incorrecto.**

b) Valores permitidos para los tres números cuánticos

n	l	m_l
2	0	0
2	1	-1
		0
		1

Correcto

c) Para $n = 6$; $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. En el enunciado aparece el valor $l = 5$ que está permitido. Como m_l adquiere los valores enteros entre -5 y $+5$, incluyendo el cero, los valores son **correctos**.

d) Para $n = 4$; $l = 0, 1, 2, 3$. En el enunciado aparece el valor $l = 3$ que está permitido, pero como m_l adquiere los valores enteros entre -3 y $+3$ incluyendo el cero, los valores son **incorrectos**, ya que m_l no puede valer -4 .

Si ahora consideramos al electrón como una partícula situada en determinada órbita, a la energía de la órbita hemos de sumar una energía propia del electrón (podemos imaginar el electrón como una partícula que gira sobre su propio eje). Esta energía está también cuantizada (es decir, no puede tomar cualquier valor) y es función de un cuarto número cuántico, m_s , llamado "**número cuántico de spin**".

En resumen, la energía de un electrón situado en una órbita es función de cuatro números cuánticos: tres que fijan el valor de la energía de la órbita considerada: n, l y m_l , y el número cuántico de spin, m_s , que cuantiza la energía propia del electrón:

$$E_{\text{Electrón}} = f(n, l, m_l, m_s)$$

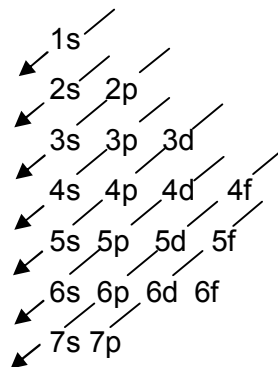
Una vez que conocemos los distintos niveles de energía en los que pueden situarse los electrones el siguiente paso será calcular su energía y ordenarlos según un orden creciente. Cuando se trata de hacer eso se comprueba que **en condiciones normales (ausencia de campos magnéticos) los valores de energía dependen únicamente de los valores de los números cuánticos n y l . Es decir, aquellos estados de energía que difieren en el valor de m_l tienen la misma energía (se dice que son degenerados).**

Por razones históricas los niveles con $l=0$ se nombran como "s"; "p" cuando $l=1$; "d" si $l=2$, y "f" para $l=3$.

Energía	n	l	m_l	nivel
$E_{(1,0,0)}$	1	0	0	s
$E_{(2,0,0)}$	2	0	0	s
$E_{(2,1,-1)}$	2	1	-1	p
$E_{(2,1,0)}$			0	p
$E_{(2,1,1)}$			1	p

} Estados degenerados (iguales valores de n y l)

Para recordar el orden de energía (de menor a mayor) se recurre al llamado **diagrama de Möeller**:



Se puede observar que a partir de la tercera capa estados con un valor de n superior (por ejemplo el 4s) pueden tener menos energía que otros con un valor de n inferior (por ejemplo el 3d).

En general, cuanto mayor es $n+l$, mayor es la energía.

A la hora de ir llenando con electrones los distintos estados de energía disponibles hay que tener en cuenta el llamado **Principio de Exclusión de Pauli**:

No pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales

Podemos determinar el número máximo de electrones que pueden situarse en un nivel energético dado aplicando el principio de Exclusión de Pauli:

Para $n = 1$ (primera órbita), l sólo puede tomar un valor: $l = 1 - 1 = 0$. En consecuencia $m_l = 0$ y $s = +1/2$ y $-1/2$. Luego para la primera órbita existen dos posibles valores de energía **para el electrón**:

Energía	n	l	m_l	m_s
$E_{(1,0,0,1/2)}$	1	0	0	+1/2
$E_{(1,0,0,-1/2)}$				-1/2

Para $n = 2$ (segunda órbita), l puede tomar valores desde cero hasta $l = 2 - 1 = 1$. Por tanto: $l = 0, 1$.

- Para $l = 0$, y según lo visto más arriba, existen dos posibles valores de energía:

Energía	n	l	m_l	m_s
$E_{(2,0,0,1/2)}$	2	0	0	+1/2
$E_{(2,0,0,-1/2)}$				-1/2

- Para $l=1$, m_l puede tomar tres valores: -1, 0, 1, y teniendo en cuenta los dos valores posibles para el número cuántico de spin, tendremos un total de seis estados de energía distintos:

Energía	n	l	m_l	m_s
$E_{(2,1,-1,1/2)}$	2	1	-1	+1/2
$E_{(2,1,-1,-1/2)}$				-1/2
$E_{(2,1,0,1/2)}$			0	+1/2
$E_{(2,1,0,-1/2)}$				-1/2
$E_{(2,1,1,1/2)}$			1	+1/2
$E_{(2,1,1,-1/2)}$				-1/2

Para $n=3$ (tercera órbita), l puede tomar valores desde cero hasta $l=3-1=2$. Por tanto, tres valores: $l=0, 1$ y 2

- Para $l=0$ y $l=1$ ya se ha visto que son posibles dos y seis estados de energía. Para $l=2$, m_l puede tomar cinco valores: -2, -1, 0, +1, +2, y teniendo en cuenta los dos valores posibles para el número cuántico de spin, tendremos un total de diez estados de energía distintos.

Para $n=4$ (cuarta órbita), l puede tomar valores desde cero hasta $l=4-1=3$. Cuatro valores: $l=0, 1, 2$ y 3

- Para $l=3$ m_l puede tomar siete valores: -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, y teniendo en cuenta los dos valores posibles para el número cuántico de spin, tendremos un total de catorce estados de energía distintos.

Se concluye que **en un estado "s" puede haber como máximo dos electrones, seis en uno "p", diez en un "d" y catorce en un "f"**

l	Nivel	Max. e
0	s	2
1	p	6
2	d	10
3	f	14

Ejemplo 2 (Oviedo. 2011-2012)

Deduzca el número máximo de electrones en un átomo que pueden tener los siguientes números cuánticos: a) $n=2$; $m_l=0$; b) $l=2$; $m_s=-1/2$

Solución:

a) Para $n=2$; $l=0,1$, y teniendo en cuenta los valores posibles de m_l (0 para $l=0$ y -1,0,+1 para $l=1$), existen dos órbitas o niveles de energía con $n=2$ y $m_l=0$:

(2,0,0) y (2,1,0). Como cada nivel puede ser ocupado por dos electrones con spin contrario tendremos un total de **cuatro electrones**.

b) Para $l=2$; $n=3, 4, 5, 6, 7$ y $m_l=-2, -1, 0, +1, +2$ que hacen un total de 25 órbitas o niveles energéticos. Como está fijado el valor de m_s **podrán existir 25 electrones**

Configuración electrónica de los átomos

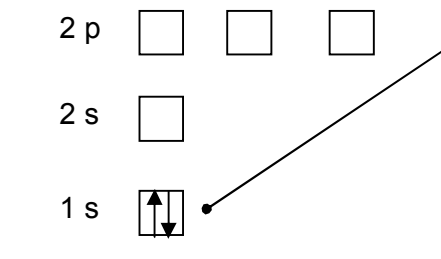
Con todos estos datos la configuración electrónica de un átomo (esto es, la distribución de sus electrones entre los estados de energía posibles) se obtiene siguiendo las siguientes normas:

- Para obtener la configuración electrónica de un átomo:**
1. **Considerar el número de electrones que se deben distribuir.** Recordar que el número de electrones en un átomo neutro viene dado por el número atómico Z.
 2. **Los electrones se van distribuyendo entre los estados de energía posibles llenando primero los de menor energía.** Cuando un nivel se complete, pasar al siguiente (recordar el principio de exclusión y para establecer el orden de llenado usar el diagrama de Møeller).
 3. **La configuración final debe darse ordenada por capas.**

Ejemplos		
S	Z = 16	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^4$
Ar	Z = 18	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6$
Ti	Z = 22	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^2 3 d^2 = 1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 d^2 4s^2$
Ga	Z = 31	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^2 3 d^{10} 4 p^1 = 1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 d^{10} 4s^2 p^1$
Br	Z = 35	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^2 3 d^{10} 4 p^5 = 1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 d^{10} 4s^2 p^5$

Si queremos afinar un poco más en la configuración electrónica deberemos usar el **Principio de Máxima Multiplicidad o Regla de Hund que establece que a la hora de ocupar estados de energía degenerados (por ejemplo los tres estados "p") los electrones tienden a situarse en ellos con idéntico spin.**

Apliquemos esto para el átomo de nitrógeno (Z=7). Representaremos los estados posibles por cuadrados y el valor del spin por una flecha que apunta hacia arriba cuando el spin valga +1/2 y hacia abajo cuando valga -1/2

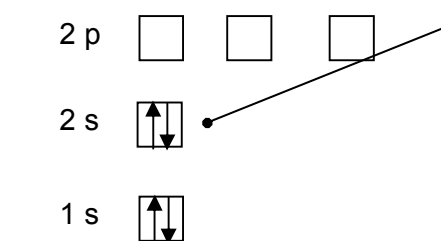


Los dos primeros electrones se sitúan en el estado de energía más bajo. Como han de respetar el principio de exclusión se colocan con "espines contrarios".

Los valores de los números cuánticos serán (n, l, m_l, m_s):

$$(1, 0, 0, +1/2)$$

$$(1, 0, 0, -1/2)$$

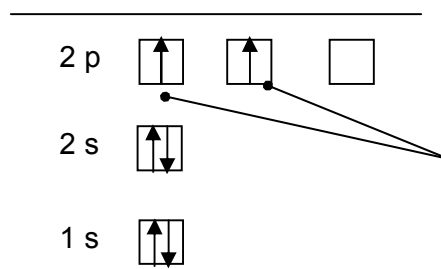


Los dos siguientes electrones se sitúan en el siguiente estado de energía. Para respetar el Principio de Exclusión se colocan con "espines contrarios".

Los valores de los números cuánticos serán (n, l, m_l, m_s):

$$(2, 0, 0, +1/2)$$

$$(2, 0, 0, -1/2)$$

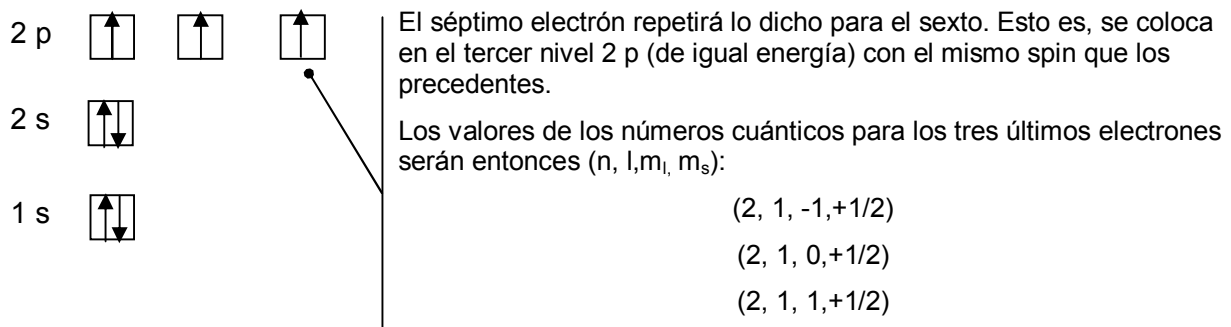


El quinto electrón puede situarse en cualquiera de los tres niveles 2p, ya que son degenerados. Supongamos que se sitúa en el primero (2,1, 0, +1/2). El próximo electrón tiene ahora dos posibilidades: situarse en ese mismo estado, para lo cual debería de "invertir" su spin para no tener los cuatro números cuánticos iguales, o situarse en otro nivel 2p con el mismo spin. Esta última es la opción energéticamente más favorable (regla de Hund).

Los valores de los números cuánticos para los electrones quinto y sexto serán entonces (n, l, m_l, m_s):

$$(2, 1, -1, +1/2)$$

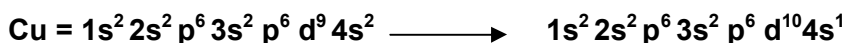
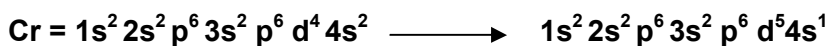
$$(2, 1, 0, +1/2)$$



Sabemos que la configuración ns^2p^6 (configuración de gas noble) en la última capa es especialmente estable.

Aunque la estabilidad es considerablemente menor que la correspondiente a la estructura de gas noble, también presentan una estabilidad considerable las estructuras que se corresponden con los niveles p o d llenos o semilLENOS. Para alcanzarlas algunos elementos pueden promocionar electrones desde niveles de energía inferior a niveles superiores. **Este efecto se observa, sobre todo, entre los metales de transición**, en los cuales los niveles (n-1) d y ns están muy próximos energéticamente.

Ejemplos:



Este efecto es muy importante en la química del carbono el cual, a pesar de tener como estructura teórica $1s^2 2s^2 p^2$, presenta la configuración $1s^2 2s^1 p^3$ en la mayoría de sus combinaciones. La energía empleada en promocionar un electrón de un nivel 2s al 2p se compensa con creces al formar cuatro enlaces covalentes en vez de dos.

Ejemplo 3 (Oviedo. 2011-2012)

A continuación se enumeran cuatro combinaciones de números cuánticos escritos siguiendo el orden {n, l, m_l, m_s}. Indique las combinaciones que están permitidas y las que no lo están, justificando su respuesta: a) {1, 1, 1, 1/2}; b) {2, 1, 0, 1/2}; c) {3, 2, 1, 0}; d) {2, 1, -2, 1/2}

Solución:

a) Para n=1; l=0. Luego esta combinación no es posible. **Incorrecto.**

b) Para n=2 ; l= 0,1. Los valores de m_l (-1, 0, +1) y m_s (-1/2, + 1/2) también son posibles. **Correcto.**

c) Para n=3 ; l= 0,1, 2. El valores de m_l es correcto, pero m_s no puede tomar el valor 0. **Incorrecto.**

d) Para n=2 ; l= 0,1. El valores de m_l es incorrecto, ya que sólo puede tomar los valores -1, 0, +1. **Incorrecto.**

Ejemplo 4 (Oviedo. 2011-2012)

Indique un valor aceptable para el número cuántico cuyo valor falta en el conjunto: n = 3, l = ¿?, m_l = 2. Justifique la respuesta. A partir de los valores de los números cuánticos n y l del conjunto anterior, indique el tipo de orbital que representan.

Solución:

Para n = 3 ; l = 0, 1, 2

Si m_l = 2, l = 2, ya que entonces m_l = - 2, -1, 0, +1, +2

Luego l = 2