

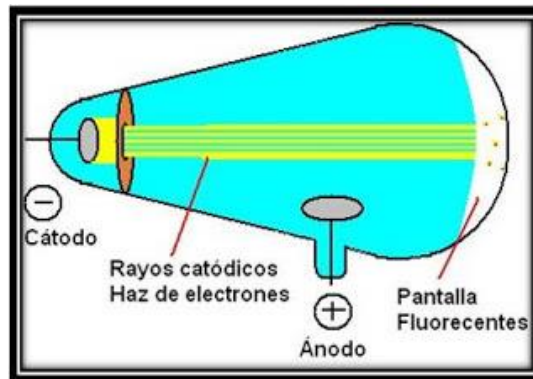
Unidad I: Teoría cuántica y estructura atómica

1.1 El átomo y sus partículas subatómicas

1.1.1 Rayos Catódicos y Rayos anódicos

Rayos catódicos

Los rayos catódicos, son corrientes de electrones que se pueden apreciar en tubos al vacío de cristal con electrodos (un cátodo, el negativo, y un ánodo, el positivo), aplicando un voltaje.



Al cubrir la capa interna del tubo de vacío correspondiente al ánodo con algún material fosforescente, esta brilla producto del impacto de los electrones.

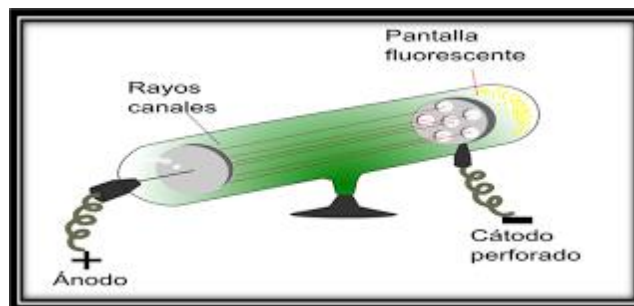


Imagen 14.- Experimento de los rayos canales

El nombre de estos rayos fue propuesto por Eugen Goldstein Imagen 15.

Fue un físico alemán, pero solo J.J. Thompson, un físico británico, fue quien determinó que estos rayos estaban compuestos de una partícula cargada negativamente, la que se nombró como "electrón".

1.1.2 Radiactividad

Radiactividad:

Es un fenómeno químico-físico por el cual los núcleos de algunos elementos químicos, llamados radiactivos, emiten radiaciones que tienen la propiedad de impresionar placas radiográficas, ionizar gases, producir fluorescencia, atravesar cuerpos opacos a la luz ordinaria, entre otros.

Debido a esa capacidad, se les suele denominar radiaciones ionizantes.

Las radiaciones emitidas pueden ser electromagnéticas, en forma de rayos X o rayos gamma, como pueden ser núcleos de helio, electrones, protones u otras.

Fenómeno que ocurre en los núcleos de ciertos elementos, inestables, que son capaces de transformarse, o decaer, espontáneamente, en núcleos atómicos de otros elementos más estables.

La radiactividad ioniza el medio que atraviesa. Una excepción lo constituye el neutrón, que no posee carga, pero ioniza la materia en forma indirecta. En las desintegraciones radiactivas se tienen varios tipos de radiación: alfa, beta, gamma y neutrones.

1.2 Base experimental de la teoría cuántica

¿Teoría cuántica?

Es una teoría física basada en la utilización del concepto de unidad cuántica para describir las propiedades dinámicas de las partículas subatómicas y las interacciones entre la materia y la radiación.

Las bases de la teoría fueron por el físico alemán Max Planck (Imagen 27), que en 1900 postuló que la materia solo puede emitir o absorber energía en pequeñas unidades discretas llamadas cuantos.

La teoría cuántica básicamente nos dice que la luz no llega de una manera continua, sino que está compuesta por pequeños paquetes de energía, a los que llamamos cuantos. Estos cuantos de energía se llaman fotones. Los fotones son las partículas “fundamentales” de la luz, así como los electrones son las partículas fundamentales de la materia, esta analogía es la que sirvió para realizar el descubrimiento del carácter cuántico de la luz.

Por esta misma analogía, años después, Broglie desarrolló la teoría que formula que la materia también tiene un carácter ondulatorio.

La carga eléctrica y la energía tienen una estructura granular (está formada por cuantos), al igual que la materia.

1.2.1 Teoría ondulatoria de la luz

Huygens (Imagen 30) en el año 1678, describe y explica lo que hoy se considera como leyes de reflexión y refracción.

Define a la luz como un movimiento ondulatorio semejante al que se produce con el sonido.

Young demostró experimentalmente el hecho paradójico que se daba en la teoría corpuscular de que la suma de dos fuentes luminosas puede producir menos luminosidad que por separado.

En una pantalla negra practica dos minúsculos agujeros muy próximos entre sí: al acercar la pantalla al ojo, la luz de un pequeño y distante foco aparece en forma de anillos alternativamente brillantes y oscuros.

Para poder describir una onda electromagnética podemos utilizar los parámetros habituales de cualquier onda (imágenes 32 y 33):

- Amplitud (A): Es la longitud máxima respecto a la posición de equilibrio que alcanza la onda en su desplazamiento.
- Periodo (T): Es el tiempo necesario para el paso de dos máximos o mínimos sucesivos por un punto fijo en el espacio.
- Frecuencia (ν): Número de oscilaciones del campo por unidad de tiempo. Es una cantidad inversa al periodo.
- Longitud de onda (λ): Es la distancia lineal entre dos puntos equivalentes de ondas sucesivas.
- Velocidad de propagación (V): Es la distancia que recorre la onda en una unidad de tiempo. En el caso de la velocidad de propagación de la luz en el vacío, se representa con la letra c.

Algunos de los fenómenos más importantes de la luz se comprenden fácilmente si se considera que tiene un comportamiento ondulatorio.

Un fenómeno de la luz identificable con su naturaleza ondulatoria es la polarización.

La luz no polarizada está compuesta por ondas que vibran en todos los ángulos, al llegar a un medio polarizador, sólo las ondas que vibran en un ángulo determinado

consiguen atravesar el medio, al poner otro polarizador a continuación, si el ángulo que deja pasar el medio coincide con el ángulo de vibración de la onda, la luz pasará íntegra, sino sólo una parte pasará hasta llegar a un ángulo de 90° entre los dos polarizadores, donde no pasará nada de luz.

1.2.2 Radiación del cuerpo negro y teoría de Planck

Un cuerpo negro hace referencia a un objeto opaco que emite radiación térmica. Un cuerpo negro perfecto es aquel que absorbe toda la luz incidente y no refleja nada.

A temperatura ambiente, un objeto de este tipo debería ser perfectamente negro (de ahí procede el término cuerpo negro). Sin embargo, si se calienta a una temperatura alta, un cuerpo negro comenzará a brillar produciendo radiación térmica.

Todos los objetos emiten radiación térmica (siempre que su temperatura esté por encima del cero absoluto, o $-273,15$ grados Celsius), pero ningún objeto es en realidad un emisor perfecto, en realidad emiten o absorben mejor unas longitudes de onda de luz que otras.

Estas pequeñas variaciones dificultan el estudio de la interacción de la luz, el calor y la materia utilizando objetos normales.

Afortunadamente, es posible construir un cuerpo negro prácticamente perfecto. Se construye una caja con algún material que sea conductor térmico, como el metal.

La caja debe estar completamente cerrada por todas sus caras, de forma que el interior forme una cavidad que no reciba luz del exterior. Entonces se hace un pequeño agujero en algún punto de la caja.

La luz que salga de ese agujero tendrá un parecido casi exacto a la luz de un cuerpo negro ideal, a la temperatura del aire del interior de la caja. Imagen 38.

A principios del siglo XX, los científicos Lord Rayleigh, y Max Planck (entre otros) estudiaron la radiación de cuerpo negro utilizando un dispositivo similar. Tras un largo estudio, Planck fue capaz de describir perfectamente la intensidad de la luz emitida por un cuerpo negro en función de la longitud de onda.

Fue incluso capaz de describir cómo variaría el espectro al cambiar la temperatura.

El trabajo de Planck sobre la radiación de los cuerpos negros es una de las áreas de la física que llevaron a la fundación de la maravillosa ciencia de la mecánica cuántica.

Lo que Planck descubrió era que a medida que se incrementaba la temperatura de un cuerpo negro, la cantidad total de luz emitida por segundo también aumentaba, y la longitud de onda del máximo de intensidad del espectro se desplazaba hacia los colores azulados.

1.2.3 Efecto fotoeléctrico

Este efecto, se trata de otro fenómeno que, al igual que la radiación de cuerpo negro, también involucra la interacción entre la radiación y la materia. Pero esta vez se trata de absorción de radiación de metales.

Heinrich Hertz (1857-1894), científico alemán, fue el primero en observar el efecto fotoeléctrico, en 1887, mientras trabajaba en la generación de ondas de radio. Informó esta observación pero no se dedicó a explicarla.

Al incidir luz ultravioleta sobre el cátodo metálico (fotocátodo) se detecta el paso de una corriente eléctrica. Se trata de electrones que abandonan el cátodo (colector) y se dirigen al ánodo a través del vacío dentro del tubo.

Los electrodos se hallan conectados a una diferencia de potencial de sólo unos pocos voltios.

La teoría electromagnética clásica considera que la radiación de mayor intensidad (o brillo, si es visible), que corresponde a ondas de mayor amplitud, transporta mayor energía.

Esta energía se halla distribuida uniformemente a lo largo del frente de onda. La intensidad es igual a la energía que incide, cada unidad de tiempo, en una unidad de superficie.

Con radiación ultravioleta de diferentes intensidades, los electrones salen del metal con la misma velocidad.

La radiación más intensa arranca mayor número de electrones. Esta observación también resultaba inexplicable.

1.2.4 Espectros de emisión y series espectrales

ESPECTROS

Cuando hacemos pasar la luz a través de un prisma óptico se produce el efecto llamado dispersión que consiste en la separación de las distintas longitudes de onda que forman el rayo incidente.

La luz blanca produce al descomponerla lo que llamamos un espectro continuo, que contiene el conjunto de colores que corresponde a la gama de longitudes de onda que la integran.

Sin embargo, los elementos químicos en estado gaseoso y sometido a temperaturas elevadas producen espectros discontinuos en los que se aprecia un conjunto de líneas que corresponden onda.

Espectros de Absorción

Cuando la luz del sol pasó por una pequeña hendidura y luego a través del prisma, formó un espectro con los colores del arco iris, tal como Fraunhofer esperaba, pero para su sorpresa, el espectro contenía una serie de líneas oscuras.

Eso es lo que ocurre cuando un elemento es calentado. En términos del modelo de Bohr, el calentar los átomos les dá una cierta energía extra, así que algunos electrones pueden saltar a niveles superiores de energía. Entonces, cuando uno de estos electrones vuelve al nivel inferior, emite un fotón en una de las frecuencias especiales de ese elemento y a eso es lo que se llama espectro de emisión.

1.3 Teoría atómica de Bohr

El modelo de Bohr está basado en los siguientes postulados, que son válidos para átomos con un solo electrón como el hidrógeno y permitió explicar sus espectros de emisión y absorción.

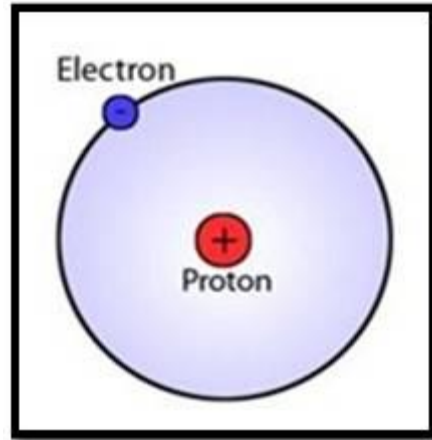


Imagen 50.- Atomo

Postulados:

1. Primer Postulado: Estabilidad del Electrón

Un electrón en un átomo se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción entre el electrón y el núcleo, obedeciendo las leyes de la mecánica clásica.

Las únicas fuerzas que actúan sobre el electrón son las fuerzas de atracción eléctrica (F_a) y la fuerza centrípeta (F_c), que es exactamente igual a la fuerza centrífuga.

2. Segundo Postulado: Orbitas o niveles permitidos

En lugar de la infinidad de órbitas posibles en la mecánica clásica, para un electrón solo es posible moverse en una órbita para la cual el momento angular L es un múltiplo entero de la constante de Planck h .

3. Tercer Postulado: Niveles Estacionarios de Energía

Un electrón que se mueva en una de esas órbitas permitidas no irradia energía electromagnética, aunque está siendo acelerado constantemente por las fuerzas atractivas al núcleo. Por ello, su energía total permanece constante.

4. Cuarto Postulado: Emisión y Absorción de Energía

Si un electrón que inicialmente se mueve en una órbita de energía E_i cambia discontinuamente su movimiento de forma que pasa a otra órbita de energía E_f se emite o absorbe energía electromagnética para compensar el cambio de la energía total. La frecuencia ν de la radiación es igual a la cantidad $(E_i - E_f)$ dividida por la constante de Planck h .

1.3.1 Teoría atómica de Bohr-Sommerfeld

En 1916, el físico alemán Arnold Sommerfeld modificó el modelo de Bohr en el sentido que las órbitas permitidas para los electrones debían ser elípticas más que circulares. Imagen 51.

El modelo de Bohr - Sommerfeld es un buen ejemplo de un tipo de evolución de las teorías científicas: un modelo antiguo es modificado para incorporar y explicar datos nuevos.

El modelo mecánico cuántico. La teoría de Bohr - Sommerfeld fue una pieza maestra de simplicidad, que explicó satisfactoriamente el espectro del hidrógeno. Sin embargo, tenía una contradicción fatal: funcionaba sólo con átomos de hidrógeno e iones que contenían sólo un electrón.

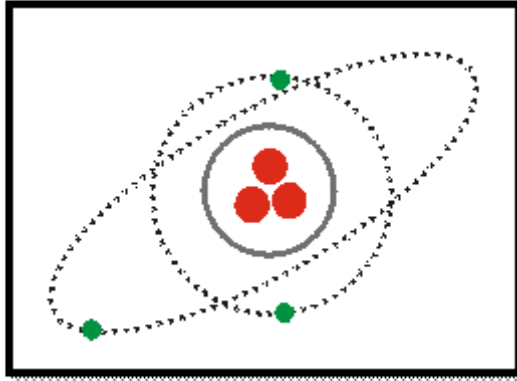


Imagen 51.- El átomo contiene órbitas circulares y elípticas.

Bohr hizo una contribución, significativa para la comprensión de los átomos y su sugerencia que la energía de un electrón en un átomo está cuantizada permanece inalterada. Pero su teoría no proporciona una descripción completa del comportamiento electrónico en los átomos.

Cuando los científicos se dieron cuenta de esto, empezaron a buscar una ecuación fundamental que pudiera describir el comportamiento y la energía de partículas submicroscópicas, la ecuación de Schrödinger.

Es importante destacar que esta ecuación incorpora ambos comportamientos, en términos de masa m , y ondulatorio, en términos de una función de onda Ψ (psi) que depende de la posición del sistema en el espacio (como la de un electrón en un átomo).

1.4 Teoría cuántica

La teoría cuántica, es una teoría física basada en la utilización del concepto de unidad cuántica para describir las propiedades dinámicas de las partículas subatómicas y las interacciones entre la materia y la radiación.

Las bases de la teoría fueron sentadas por el físico alemán Max Planck, que en 1900 postuló que la materia sólo puede emitir o absorber energía en pequeñas unidades discretas llamadas cuantos.

Otra contribución fundamental al desarrollo de la teoría fue el principio de incertidumbre, formulado por el físico alemán Werner Heisenberg en 1927, y que afirma que no es posible especificar con exactitud simultáneamente la posición y el momento lineal de una partícula subatómica. Imagen 52.



1.4.1 Principio de dualidad. Postulado de De Broglie

Louis de Broglie, era un aristócrata francés que ganó el premio Nobel de Física de 1929 por una tesis que elucidaba las propiedades ondulatorias de los orbitantes electrones. Se trató de un trabajo que ayudó a resolver una antigua paradoja al mostrar que los electrones pueden ser descritos ya sea como partículas o como ondas, según las circunstancias.

El punto de partida que tuvo Broglie para desarrollar su tesis fue la inquietante dualidad en el comportamiento de la luz, que en ciertos fenómenos se manifiesta como onda, en otros como partícula.

El principio de la dualidad descansa sobre el efecto fotoeléctrico, el cual plantea que la luz puede comportarse de dos maneras según las circunstancias:

1.- Luz como una Onda: esta es usada en la física clásica, sobre todo en óptica, donde los lentes y los espectros visibles requieren de su estudio a través de las propiedades de las ondas.

2.- Luz como Partícula: Usada sobre todo en física cuántica, según los estudios de Planck sobre la radiación del cuerpo negro, la materia absorbe energía electromagnética y luego la libera en forma de pequeños paquetes llamados fotones, estos cuantos de luz, tienen de igual manera una frecuencia, pero gracias a éstos, se pueden estudiar las propiedades del átomo.

Planck realizó varios experimentos para probar su teoría, con los cuales logró establecer que la energía de estos cuantos o fotones es directamente proporcional a la frecuencia de la radiación que los emite, estableciendo así la fórmula que decía que la energía (E) es igual a la constante de Planck(h) por la frecuencia de la radiación(f).

$$E = h \cdot f$$

Por último, dió el valor para dicha constante que quedó establecido con el siguiente valor:

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

La dualidad onda-partícula tiene consecuencias importantes a nivel subatómico, pero también sirve para explicar ciertos comportamientos experimentales de la luz y otras radiaciones, como la difracción y los fenómenos de interferencia.

La teoría de los “cuantos” fue revolucionaria para su época. Incluso el mismo Planck no creyó en la existencia real de los fotones en un principio y su aplicación al análisis de la radiación del cuerpo negro fue casi un juego mental.

Experimentos en los que la luz y los electrones se comportaban como partículas condujeron al francés Louis De Broglie en 1924 a enunciar su famosa hipótesis de

La dualidad onda corpúsculo, también llamada onda partícula, resolvió una aparente paradoja, demostrando que la luz y la materia pueden, a la vez, poseer propiedades de partícula y propiedades ondulatorias.

Una partícula ocupa un lugar en el espacio y tiene masa mientras que una onda se extiende en el espacio caracterizándose por tener una velocidad definida y masa nula. Actualmente se considera que la dualidad onda.

1.4.2 Principio de incertidumbre de Heisenberg

Principio enunciado en 1927 por el alemán Werner Heisenberg según el cual no puede ser conocida con exactitud y simultáneamente la posición y la cantidad de movimiento de un electrón.

El físico alemán Werner K. Heisenberg es conocido sobre todo por formular el principio de incertidumbre, una contribución fundamental al desarrollo de la teoría cuántica. Este principio afirma que es imposible medir simultáneamente de forma precisa la posición y el momento lineal de una partícula. Heisenberg fue galardonado con el Premio Nobel de Física en 1932. El principio de incertidumbre ejerció una profunda influencia en la física y en la filosofía del siglo XX.

El principio de incertidumbre desempeñó un importante papel en el desarrollo de la mecánica cuántica y en el progreso del pensamiento filosófico moderno.

En mecánica cuántica, la relación de indeterminación de Heisenberg o relación de incertidumbre de Heisenberg afirma que no se puede determinar, simultáneamente y con precisión arbitraria, ciertos pares de variables físicas, como son, por ejemplo, la posición y el momento lineal (cantidad de movimiento) de un objeto dado. En otras palabras, cuanto mayor certeza se busca en determinar la posición de una partícula, menos se conoce su cantidad de movimiento lineal. Este principio fue enunciado por Werner Heisenberg en 1927.

Si se preparan varias copias idénticas de un sistema en un estado determinado las medidas de la posición y el momento variarán de acuerdo con una cierta distribución de probabilidad característica del estado cuántico del sistema. Las medidas del objeto observable sufrirá desviación estándar Δx de la posición y el momento Δp verifican entonces el principio de incertidumbre que se expresa matemáticamente como:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

1.4.3 Ecuación de onda de Schrödinger

En 1926 Erwin Schrödinger formula la ecuación de onda de Schrödinger, que describe el comportamiento y la energía de las partículas submicroscópicas. Es una función análoga a las leyes de Newton para los sólidos macroscópicos que incorpora tanto el carácter de partícula (en función de la masa) como el carácter de onda en términos de una función de onda Ψ (psi).

1.4.3.1 Significado físico de la función de onda ψ

La ecuación de Schrödinger para una partícula libre describe la evolución temporal de la onda asociada a la partícula (una onda de probabilidad según la regla de Born):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi.$$

Voy a mostrar como un cambio a un sistema de coordenadas uniformemente acelerado es equivalente a considerar que la partícula está sujeta a un potencial gravitatorio uniforme, dando lugar a una curiosa realización del principio de equivalencia.

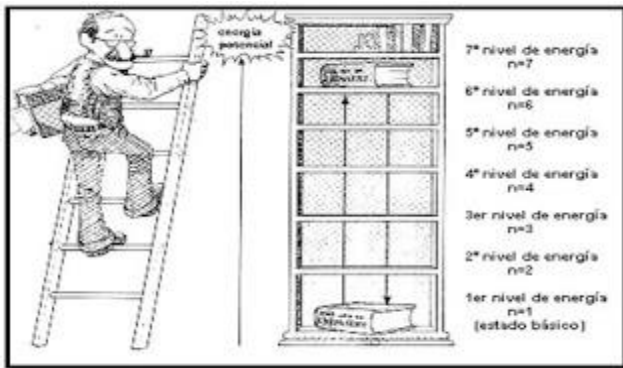
1.4.3.2 Números cuánticos y orbitales atómicos

Números cuánticos. Las expresiones matemáticas de la mecánica ondulatoria indican que el estado de energía de un electrón en un átomo se puede describir por medio de un set de cuatro números, llamados números cuánticos. Estos números describen el orbital espacial en el que el electrón se mueve en términos de (1) su posición con respecto al núcleo, (2) su forma, (3) su orientación espacial y (4) la dirección del spin (giro alrededor del propio eje) del electrón en el orbital.

El número cuántico principal, simbolizado por n , indica la distancia promedio del electrón desde el núcleo. Es una integral positiva, con valores 1, 2, 3, 4,..... y es la designación del nivel de energía principal de un orbital. El primer nivel de energía

es más cercano al núcleo y los otros se encuentran a distancias crecientes. Los electrones del primer nivel de energía tienen las energías más bajas, mientras que los de los niveles más altos tienen niveles de energía crecientes.

En algunos textos, los niveles de energía se designan por las letras K, L, M, N, etc.



El número cuántico principal, n , determina el tamaño del orbital. Puede tomar cualquier valor natural distinto de cero: $n = 1, 2, 3, 4$.

Varios orbitales pueden tener el mismo número cuántico principal, y de hecho lo tienen, agrupándose en capas. Los orbitales que tienen el mismo número cuántico principal forman una capa electrónica.

Cuanto mayor sea el número cuántico principal, mayor será el tamaño del orbital y, a la vez, más lejos del núcleo estará situado.

El número cuántico orbital, indica la forma del orbital en el que se mueve el electrón. El número de posibles formas es igual al valor del número cuántico principal n . En el n -ésimo nivel de energía hay orbitales de n formas posibles. En el primer nivel es posible un orbital de una sola forma, en el segundo son posibles de dos formas, en el tercero de tres, etc. Como ya se indicó las designaciones de los cuatro primeros números cuánticos orbitales es s, p, d, y f. Están escritos en orden de energía creciente. Así, para un nivel de energía particular, el orbital s tiene menor energía que el p, el p menor que el d y el d menor que el f. .

El número cuántico magnético:

Indica la orientación del orbital, cuya forma está dada por el número cuántico orbital, en relación a los tres ejes del espacio, en un campo magnético. Hay sólo una orientación para un orbital s, mientras que hay tres para el orbital p, cinco para el orbital d y siete para el f.

El número cuántico magnético, m , determina la orientación del orbital. Los valores que puede tomar depende del valor del número cuántico azimutal, l , variando desde $-l$ hasta $+l$.

El número cuántico de spin:

Indica la dirección de giro sobre su eje del electrón. El electrón gira sobre su eje como lo hace la tierra. Hay dos posibilidades de spin, en la dirección de giro de los punteros del reloj o en contra.

Así, cada uno de los orbitales orientados en el espacio, descritos por los tres primeros números cuánticos puede ser ocupado sólo por dos electrones, y éstos deben tener spin opuesto.

Por lo tanto, en un átomo no pueden existir dos electrones con los mismos números cuánticos. Esto se correlaciona con la observación que no existen dos electrones con exactamente la misma energía en un átomo. Consideramos el electrón como una pequeña esfera, lo que no es estrictamente cierto, puede girar en torno a sí misma, como la Tierra gira ocasionando la noche y el día. Son posibles dos sentidos de giro, hacia la izquierda o hacia la derecha.

Este giro del electrón sobre sí mismo está indicado por el número cuántico de espín, que se indica con la letra s . Como puede tener dos sentidos de giro, el número de espín puede tener dos valores: $\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$.

Podemos resumir indicando que la corteza electrónica se organiza en capas, indicadas por el número cuántico principal, n , que indica su lejanía al núcleo.

Dentro de las capas hay distintos orbitales, especificados por el número cuántico azimutal, l , y que indica la forma del orbital. El número de orbitales de cada tipo está dado por el número cuántico magnético, m , que nos señala la orientación del orbital. Además hay otro número cuántico, de espín, s , que sólo puede tomar dos valores e indica el giro del electrón sobre sí mismo.

1.5 Distribución electrónica en sistemas polielectrónicos

La ecuación de onda de Schrodinger no tiene solución exacta. Hay que introducir soluciones aproximadas: Los orbitales atómicos son semejantes a los del hidrógeno.

También se pueden emplear los mismos números cuánticos (n, l, m, l) para describir los orbitales

Sistemas con más de 1 electrón, hay que tener en cuenta:

Cuarto número cuántico (m_s)

Limitar n° electrones por orbital (P. Exclusión Pauli)

Conjunto de niveles de energía más complejo

La configuración electrónica de un átomo es la distribución de los electrones en los subniveles de energía del átomo. La configuración electrónica de un átomo se obtiene escribiendo en orden ascendente de energía los símbolos de los subniveles ocupados indicando el número de electrones que contiene.

El número de electrones que ocupan los subniveles de un átomo neutral debe ser igual al número atómico del elemento.

Para escribir la configuración electrónica de un átomo es necesario observar el principio de Aufbau, el cual establece que los electrones del átomo se van añadiendo a los subniveles en orden ascendente de energía. Es decir, cada electrón entra en el subnivel de menor energía disponible hasta que este nivel esté lleno, entonces el próximo electrón entra en el subnivel que le sigue en energía. El arreglo así obtenido corresponde al estado de más baja energía posible del átomo y se conoce como el estado raso. Cualquier otro arreglo de los electrones produce un estado de mayor energía y se le llama, en este caso, estado excitado. La secuencia correcta de los subniveles en orden ascendente de energía es: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p.

1.5.1 Principio de Aufbau o de construcción

El principio de Aufbau contiene una serie de instrucciones relacionadas a la ubicación de electrones en los orbitales de un átomo. El modelo, formulado por el físico Niels Bohr, recibió el nombre de Aufbau (del alemán Aufbauprinzip: principio de construcción) en vez del nombre del científico. También se conoce popularmente con el nombre de regla del serrucho.

Los orbitales se 'llenan' respetando la regla de Hund, que dice que ningún orbital puede tener dos orientaciones del giro del electrón sin antes de que los restantes números cuánticos magnéticos de la misma subcapa tengan al menos uno. Se comienza con el orbital de menor energía.

Primero debe llenarse el orbital 1s (hasta un máximo de dos electrones), esto de acuerdo con el número l.

Seguido se llena el orbital 2s (también con dos electrones como máximo).

La subcapa 2p tiene tres orbitales degenerados en energía denominados, según su posición tridimensional, 2px, 2py, 2pz. Así, los tres orbitales 2p puede llenarse hasta con seis electrones, dos en cada uno. De nuevo, de acuerdo con la regla de Hund, deben tener todos por lo menos un electrón antes de que alguno llegue a tener dos.

Y así, sucesivamente:

1s 2s 2p 3s 23p 64s 23d 104p 65s 24d 105p 66s 24f 145d 106p 67s 25f 146d 107p 6

El principio de exclusión de Pauli nos advierte, además, que ningún electrón en un átomo puede tener la misma combinación de números cuánticos como descripción de su estado energético con macromoléculas de hidrógeno, sin embargo se planteó que el átomo era una partícula que no existió.

Regla de las diagonales

Para llenar los orbitales correctamente, siga la dirección de la flecha tal como se muestra en la gráfica. Primero 1s, luego 2s, después sube a 2p y baja 3s, 3p y baja a 4s. En este punto, el siguiente nivel de energía más bajo no es 4p, sino que sube a 3d para luego bajar a 4p y 5s. Y así, sucesivamente.

Se le llama la regla del serrucho, debido a la acción de subir y bajar del modo descrito: 1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f 5s 5p 5d 5f 6s 6p 6d 6f 7s 7p 7d 7f.

1	$1s^2$	2
2	$2s^2 2p^6$	8
3	$3s^2 3p^6 3d^{10}$	18
4	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$	32
5	$5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14}$	32
6	$6s^2 6p^6 6d^{10} 6f^{14}$	32
7	$7s^2 7p^6 7d^{10} 7f^{14}$	32

1.5.2 Principio de exclusión de Pauli

El principio de exclusión de Pauli es un principio cuántico enunciado por Wolfgang Ernst Pauli en 1925 que establece que no puede haber dos fermiones con todos sus números cuánticos idénticos (esto es, en el mismo estado cuántico de partícula individual). Hoy en día no tiene el estatus de principio, ya que es derivable de supuestos más generales (de hecho es una consecuencia del Teorema de la estadística del spin).

Regla de exclusión de Pauli

Esta regla nos dice que en un estado cuántico sólo puede haber un electrón.

También que en una orientación deben de caber dos electrones excepto cuando el número de electrones se ha acabado por lo cual el orden que debe de seguir este ordenamiento en cada nivel es primero los de espín positivo (+1/2) y luego los negativos.

Principio de Exclusión de Pauli: “Dos electrones del mismo átomo no pueden tener los mismos números cuánticos idénticos y por lo tanto un orbital no puede tener más de dos electrones”

1.5.3 Principio de máxima multiplicidad de Hund

La regla de Hund es una regla empírica obtenida por Friedrich Hund en el estudio de los aspectos atómicos que enuncia lo siguiente:

Al llenar por lámpara orbitales de igual energía.

Los electrones se distribuyen, siempre que sea posible, con sus espines paralelos, es decir, que no se cruzan. La partícula mini atómica es más estable (tiene menos energía) cuando tiene electrones desapareados, que cuando esos electrones están apareados.

También se denomina así a la regla de máxima multiplicidad de Hund: Cuando varios electrones están descritos por orbitales degenerados, la mayor

estabilidad energética es aquella en donde los espines electrónicos están separados.

Para entender la regla de Hund hay que saber que todas las orbitales en una subcapa deben estar ocupadas por lo menos por un electrón antes de que se asigne un segundo. Imagen 3.1.



Imagen 3.1 .- Casos donde se presenta la estabilidad en un átomo.

1.5.4 Configuración electrónica de los elementos y su ubicación en la clasificación periódica

La configuración electrónica (o periódica) estamos es la descripción de la ubicación de los electrones en los distintos niveles (con subniveles y orbitales) de un determinado átomo.

Configurar significa "ordenar" o "acomodar", y electrónico deriva de "electrón"; así, configuración electrónica es la manera ordenada de repartir los electrones en los niveles y subniveles de energía.

Es la representación del modelo atómico de Schrödinger o modelo de la mecánica cuántica. Imagen 65.

Tipos de configuración electrónica

Para graficar la configuración electrónica existen cuatro modalidades, con mayor o menor complejidad de comprensión, que son:

Configuración estándar

Se representa la configuración electrónica que se obtiene usando la regla de las diagonales.

Es importante recordar que los orbitales se van llenando en el orden en que aparecen, siguiendo esas diagonales, empezando siempre por el 1s. Imagen 66.

Aplicando la regla de las diagonales, la configuración electrónica para cualquier átomo, quedara como la siguiente representación dependiendo del elemento y su numero atomico.

1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s² 3d¹⁰ 4p⁶ 5s² 4d¹⁰ 5p⁶ 6s² 4f¹⁴
5d¹⁰ 6p⁶ 7s² 5f¹⁴ 6d¹⁰ 7p⁶

Configuración condensada

Los niveles que aparecen llenos en la configuración estándar se pueden representar con un gas noble (elemento del grupo VIII A, Tabla Periódica de los elementos), donde el número atómico del gas coincida con el número de electrones que llenaron el último nivel.

Los gases nobles son He, Ne, Ar, Kr, Xe y Rn.

Configuración desarrollada

Consiste en representar todos los electrones de un átomo empleando flechas para simbolizar el spin de cada uno. El llenado se realiza respetando el principio de exclusión de Pauli y la Regla de máxima multiplicidad de Hund.

1.5.5 Principios de Radiactividad

1.6 Aplicaciones tecnológicas de la emisión electrónica de los átomos.