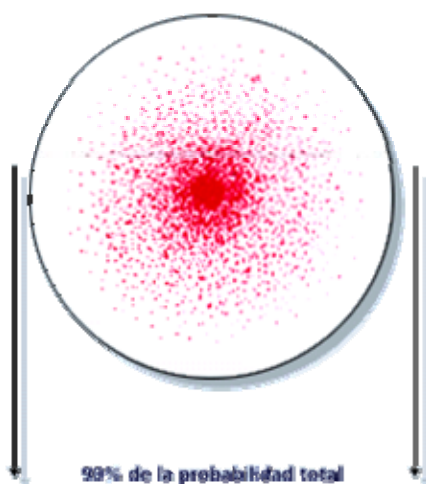


Densidad de probabilidad de presencia de un electrón en el espacio atómico



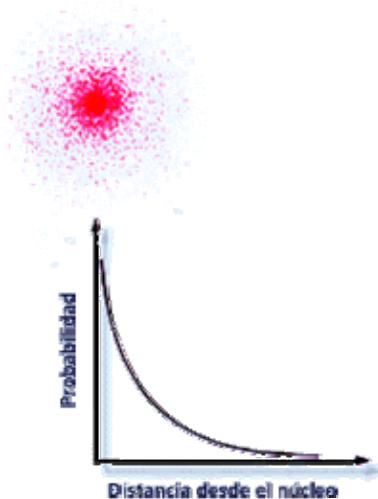
ORBITAL ψ Y PROBABILIDAD $|\psi|^2$

Dadas las limitaciones existentes para ubicar el electrón según el principio de incertidumbre y puesto que las probabilidades son siempre positivas (valores entre cero hasta uno), aunque los orbitales ψ pueden adquirir valores positivos o negativos, resulta entonces que solo el valor $|\psi(x, y, z)|^2$, el valor absoluto del cuadrado de la función ψ , posee un sentido probabilístico para un electrón en un punto dado del espacio (x, y, z) . Este valor debe ser siempre positivo comenzando desde cero. Por ejemplo, supongamos que tenemos dos posiciones en el espacio por donde puede circular un electrón, uno definido por las coordenadas (x_1, y_1, z_1) y el otro por (x_2, y_2, z_2) . Así, la probabilidad relativa de encontrar el electrón en las posiciones 1 y 2 estaría dada por el cociente

$$\frac{|\psi(x_1, y_1, z_1)|^2}{|\psi(x_2, y_2, z_2)|^2} = \frac{N_1}{N_2}$$

en que el cociente N_1/N_2 es la razón de probabilidad de encontrar el electrón en las posiciones 1 y 2. Si suponemos que, el valor para el cociente es 100, el electrón es 100 veces más probable de encontrarse en la posición 1 que en la posición 2. Sin embargo, esto no nos dice "cuando" el electrón estará allí o "como" y "por donde" llegará. Francamente, no lo sabremos nunca pero algo sí está claro: **esta "vaguedad" está de acuerdo con el Principio de Incertidumbre de Heisenberg!**

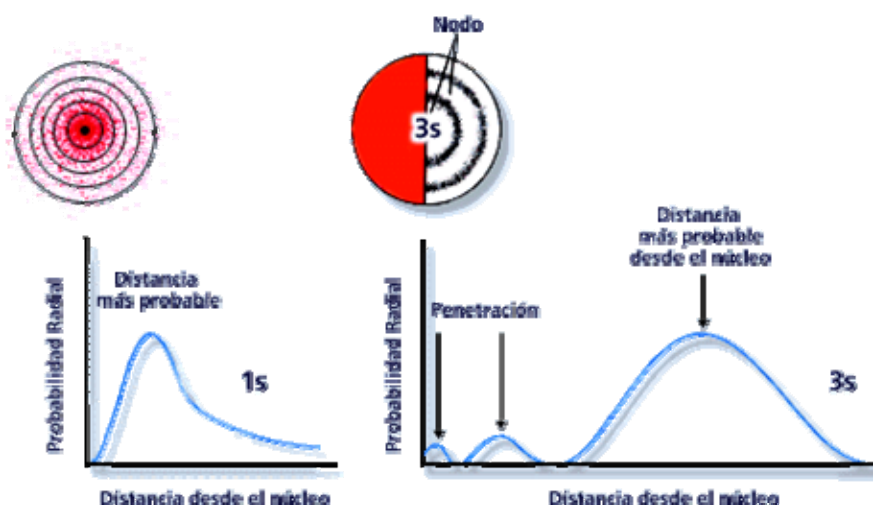
Probabilidad de ubicar un electrón dentro del átomo de Bohr



El cuadrado de la **función de onda** $|\psi(x, y, z)|^2$ se representa más conveniente como una **distribución de probabilidades**, en las que la intensidad del color indica la probabilidad que el electrón, dentro del átomo, ocupe los diferentes sitios en el espacio. En la Figura se muestra esta distribución de puntos en un átomo y, claramente, no es una órbita de Bohr sino más bien una densidad de puntos por los que, probablemente, el e- pasa. Mientras más veces el electrón visita un determinado punto, más intensidad de color aparece en esa zona. Lo difícil es fijar el valor del tamaño de este orbital para decir que más allá de un valor dado de distancia respecto del núcleo, no hay más puntos de probabilidad. una convención es declarar que por definición, en el átomo H el tamaño del orbital 1s lo da el radio de la esfera que incluye el 90 % de la probabilidad total para el electrón.

Otra manera de representar la distribución de probabilidad electrónica para el orbital **1s** es calcular los puntos a lo largo de una línea radial hacia afuera, el resultado que se muestra en la Figura, en la que se observa que la densidad de puntos disminuye en forma asintótica cuando el radio aumenta. Esto significa que la probabilidad de encontrar el e- cerca del núcleo es

comparativamente más alta que lejos del núcleo. Sin embargo, ¿qué vale esta probabilidad para un valor cualquiera del radio 'r'? La respuesta se puede dar fácilmente si se completa la figura esférica alrededor del núcleo como lo muestra la siguiente figura. Allí se ve que cada casquete para el orbital 1s (en forma de rueda) contiene puntos y estos son mayor cantidad cerca del núcleo. Sin embargo el volumen de un sector cerca del núcleo es pequeño por lo que acepta pocos puntos. A medida que el radio aumenta se ve que también aumenta el volumen del casquete pero cada vez contiene menor cantidad de puntos de probabilidad. Así, el máximo de la curva se debe a estos dos efectos contrapuestos y el gráfico de este tipo se conoce como la **distribución de probabilidad radial**. Como ejemplo, en el átomo H con el electrón en el orbital mas interno **1s**, el máximo de la probabilidad radial aparece a la distancia $r_{\text{máximo}} = 0,0529 \text{ nm} = 0,529 \text{ \AA}$, que es el valor logrado por Bohr para su órbita de $n=1$. Así, vemos que este Modelo Mecánico-ondulatorio del electrón sólo habla de valores medios, más probables, pero nunca de valores exactos.



PROBABILIDAD DE UBICAR UN ELECTRÓN DENTRO DEL ÁTOMO
 Observe cuidadosamente que el electrón no puede ingresar al núcleo por lo que la probabilidad de estar allí es NULA

NÚMEROS CUÁNTICOS n , l , m_l

Cuando se resuelve la Ecuación $H\psi = E\psi$ para encontrar la función de onda $\psi(x,y,z)$ y describir los **orbitales**, resulta que muchas soluciones existen de modo que cada una presenta **números cuánticos** que describen las propiedades de estos orbitales:

Número Cuántico Principal n que puede adquirir los valores $n=1,2,3,\dots$. Este número cuántico se relaciona directamente con el tamaño y la energía del orbital. A medida que n crece, el orbital es más grande y el electrón que lo ocupa, permanece más tiempo alejado del núcleo. Un aumento en n implica entonces un aumento en la energía del orbital. Este número cuántico corresponde al que Bohr planteó en su modelo para los orbitales esféricos.

Número Cuántico azimutal l , adquiere los valores enteros desde 0 hasta $n-1$, para cada valor de n . Este número l se relaciona directamente con la **forma** que adquiere ese orbital en el espacio. La manera de usar su significado en Química, es definirlos mediante **letras** s, p, d, f, g, ..según el valor que l adquiere:

Números Cuánticos Azimutales y sus correspondientes Orbitales Atómicos					
Valor de l	0	1	2	3	4
Letra usada	s	p	d	f	g

Número Cuántico Magnético m_l adquiere "todos" los valores comprendidos entre $-l$ y $+l$, y se relaciona con la **orientación** del orbital en el espacio, relativo a los otros orbitales en el átomo.

En resumen, estos números cuánticos pueden llegar a tomar valores como se muestra a continuación:

$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$
$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots (n-1)$ para cada n
$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$

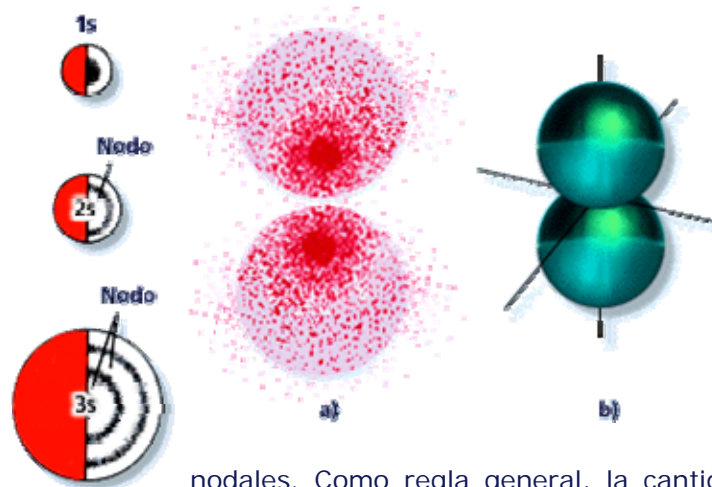
Números Cuánticos de los primeros cuatro niveles de Orbitales en el átomo H				
n	l	Designación orbital	m_l	Nº de orbitales
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
	1	2p	-1, 0, +1	3
3	0	3s	0	1
	1	3p	-1, 0, +1	3
	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5
4	0	4s	0	1
	1	4p	-1, 0, +1	3
	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5
	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7

Ejemplo

Para el nivel principal cuántico con $n=5$, determine las subcapas que tienen diferentes valores de l . Indique la designación y cantidad para cada uno de ellos.

R Para $n=5$, los valores permitidos para l son 0, 1, 2, 3, 4. Así, la designación de las subcapas son

$l =$	0	1	2	3	4
Designación	5s	5p	5d	5f	5g
Cantidad de niveles	1	3	5	7	9



ORBITALES

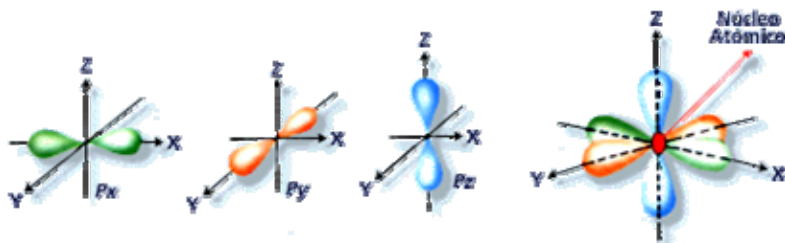
Ya vimos que el significado de un orbital está ilustrado más claramente por la distribución de probabilidad. También señalamos que una manera de representar un orbital es por la superficie que rodea el 90% de la probabilidad electrónica.

Las representaciones para los orbitales **1s**, **2s**, y **3s** se encuentran en la Figura que se presenta. Obsérvese que los orbitales **2s** y **2p** presentan zonas de alta probabilidad separadas por zonas de probabilidad nula, estas últimas llamadas nodos o superficies

nodales. Como regla general, la cantidad de $(n-1)$ nodos están presentes en los orbitales " ns ". Nosotros los representaremos como una simple esfera " cada vez más grande " dependiendo del valor del número cuántico n .

Las formas de los orbitales **2p** se muestran, en términos de la probabilidad a la izquierda (a) y la forma de superficie sólida a la derecha, (b), del orbital orientado a lo del eje z , del tamaño que contenga el 90% de los puntos de la Figura , la parte izquierda (a). Nuestra forma de describirlos de ahora en adelante, será como lo muestra la figura para los tres orbitales de esta capa que son **2p_x**, **2p_y**, **2p_z**. Obsérvese que ninguno es "esférico" como los anteriores, sino que poseen lóbulos separados por un **nodo** en el núcleo. Estos orbitales **2p** se nombran de acuerdo al eje de coordenadas (x,y,z) frente al que se desplazan.

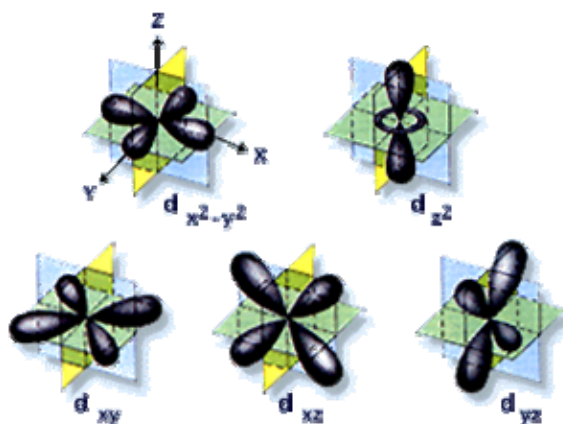
Carácter direccional de los orbitales atómicos 2p



Además, como usted lo esperará, los orbitales **3p** muestran una forma similar, aunque más grande, que las señaladas para **2p**, algo más compleja pero que no interesa en estos momentos.

No existen orbitales **d** con números cuánticos principales inferiores a $n=3$, puesto que estos deben caracterizarse por $l=2$. Las formas que tienen los cinco orbitales componentes **3d** son los que se muestran a continuación, junto con la manera que usualmente se denominan: **d_{x²-y²}**, **d_{z²}**, **d_{xy}**, **d_{yz}**, **d_{zx}**. Los orbitales **d** para $n>3$ son similares, salvo sus lóbulos que son más grandes.

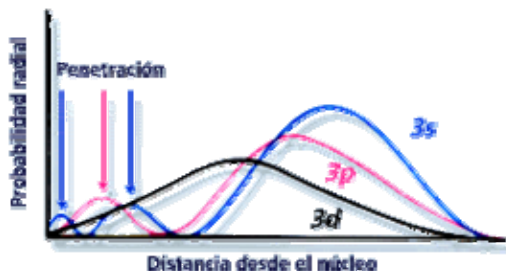
Caracter direccional de los orbitales atómicos 3d

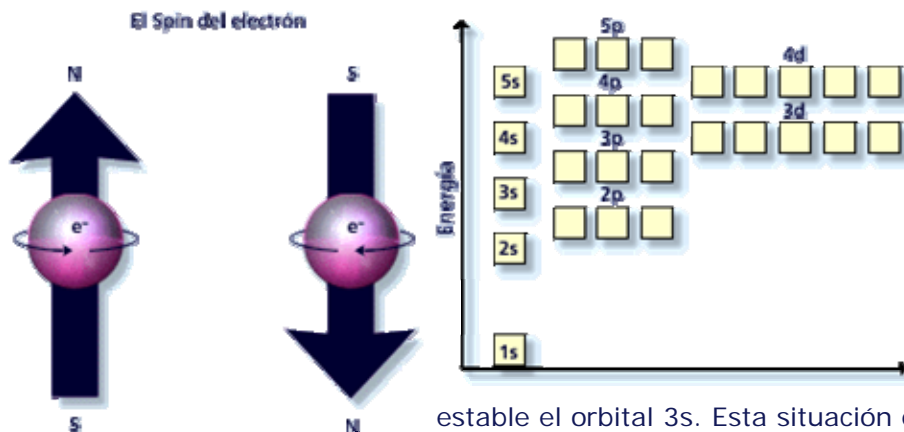


En cuanto a los orbitales **4f** estos no los mostraremos aquí, solo diremos que el la cantidad de lóbulos aumenta cada vez que el valor de el número cuántico l sube de $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$. Estos orbitales no están involucrados en la materia de este curso. Por último, solo hemos tratado la forma de estos orbitales atómicos, pero nada hemos planteado respecto a sus **energías**. Ya sabemos que para el átomo H las energías están directamente relacionadas con el número cuántico n , por lo que **en el átomo H todos los orbitales con el mismo valor de n poseen igual energía** y se dice que **son degenerados en energía**.

Esta situación no es verdad para átomos polieletrónicos, ya que al circular varios electrones en orbitas, implica que existe un " grado de penetración" de unas a las otras, como lo muestra la figura más abajo para la distribución de probabilidad radial en los orbitales **3s, 3p y 3d**. Esto significa que habrá un cierto grado de repulsión entre sí por lo que sus energías no deben ser la misma para un número cuántico $n = 3$ común a todas.

Extensión radial de los orbitales atómicos 3s, 3p, 3d





El orden experimental en que cada orbital se sitúa en una escala de energía, se muestra a continuación. A medida que la cantidad de electrones aumente al ir de un átomo a otro en la Tabla Periódica, estos orbitales se llenan de carga en sentido ascendente. Obsérvese que las energías 3s, 3p son diferentes siendo más

estable el orbital 3s. Esta situación queda claramente explicada al examinar la Figura anterior, donde se observa que el 3s tiene una buena probabilidad para que el e- circule cerca del núcleo con una atracción superior a los otros y lo mismo se puede deducir comparando los valores de esa curva en referencia a los orbitales 3p y 3d; estos últimos son los de energía más alta.

EL SPIN DEL ELECTRÓN Y EL PRINCIPIO DE PAULI

Una propiedad importante del electrón que aún no hemos considerado, es el concepto del giro del electrón alrededor de sí mismo, como lo muestra la figura siguiente. En realidad, este concepto fué desarrollada por Goudsmit y Uhlenbeck, cuando eran estudiantes de postgrado en la Universidad de Leyden, Holanda. Encontraron que un cuarto número cuántico (además de n, l y m_l) era necesario para describir los detalles de los espectros de emisión de los átomos polieletrónicos. Este nuevo número cuántico, el numero cuántico de Spin m_s , puede adquirir solo dos valores + y - que corresponden realmente a las dos posibilidades de giro alrededor de sí mismo, hacia la derecha y hacia la izquierda que se muestran. Ya que una carga que se mueve produce un campo magnético, los dos espines producen campos magnéticos con sus polos N y S opuestos.

Nuestro propósito es usar estos descubrimiento en el sentido que le dió el físico Austríaco Wolfgang Pauli(1900 - 1958) en la forma de su **Principio de Exclusión de Pauli: En un átomo cualquiera, no es posible que dos electrones puedan disponer de los mismos números cuánticos para**

(n, l, m_l, m_s)

Así, puesto que m_s solo puede adquirir **dos valores**, esto indica que **en cada orbital sólo caben 2 electrones y deben poseer spines opuestos**.

PRINCIPIO DE CONSTRUCCIÓN PARA LA TABLA PERIÓDICA

Ahora procederemos a mostrar como este modelo mecánico-ondulatorio permite explicar la disposición de los átomos en el sistema periódico. Así, **si los protones son agregados de a uno al núcleo atómico para construir diferentes elementos; de manera similar, los electrones se agregan de a uno a estos orbitales de manera simultánea con el aumento de protones**, siempre ocupando el nivel de menor energía Este principio se conoce como el **Principio de Construcción (Aufbau) del Sistema Periódico**.

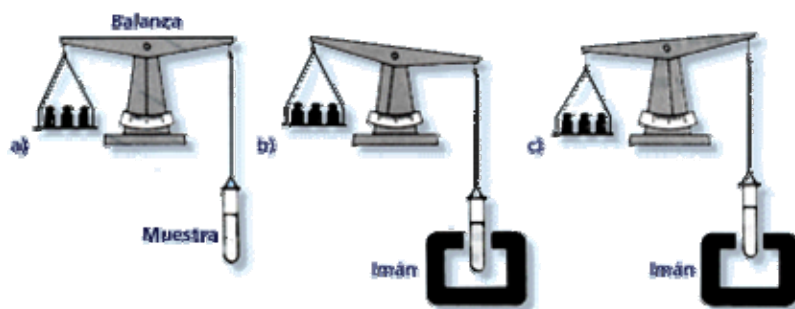
El átomo H tiene un electrón, que ocupa el orbital 1s en su estado fundamental. Así, la

electrón por flechas de dirección arriba o abajo, para destacar el sentido de giro de spin. En el elemento H, la flecha representa un electrón con un spin en una sola dirección.

La Tabla a continuación muestra el elemento He, con 2 electrones que, cuando ocupan el nivel de menor energía, forman el átomo Helio en su estado fundamental, con sus spines apareados. Allí también se muestran los átomos Li y N que son típicos en cada una de sus capas 2s y 2p .

Configuración Electrónica de Litio, Helio y Nitrógeno				
		1s	2s	2p
He	$1s^2$	↓		
Li	$1s^2 2s^1$	↓		
N	$1s^2 2s^2 2p^3$	↓	↓	

En el He, los dos electrones presentan spines opuestos y por lo tanto se dice que sus spines **están apareados**, indicando con esto que son **Diamagnéticos**. Un simple experimento muestra que esto es así, ya que al anularse los campos magnéticos, un simple Imán como lo señala la figura (c), no lo atrae y por lo tanto pesa como en (a). Esto no es así para átomos con electrones desapareados, paramagnéticos, ya que el Imán los atrae a sus polos aplicando una fuerza magnética y desestabilizando la balanza como en (b)



En este sentido, el **átomo H es Paramagnético** por disponer de electrones no apareados y por tanto influido por magnetos externos. Resumiendo,

Elementos Paramagnéticos: Presentan spin resultante en distinta magnitud, dependiendo de la cantidad de electrones no apareados.

Elementos Diamagnéticos : El spin electrónico resultante es nulo por tener todos sus electrones apareados en sus diferentes capas orbitales.

Así, de la Tabla anterior, vemos que **Li** es paramagnético, **Be** es diamagnético , **B** ($1s^2 2s^2 2p^1$) es paramagnético (un electrón no apareado), **C**($1s^2 2s^2 2p^2$) también lo es más y **N** ($1s^2 2s^2 2p^3$) lo es con mayor razón por contener una semicapa completa (la mitad de la ocupación total permitida en el orbital 2p) de electrones no apareados. Como es de suponer, este no apareamiento se debe principalmente al carácter repulsivo entre dos electrones, los que evitarán agruparse en un solo orbital en tanto dispongan de otros sitios de igual energía. Así, hemos arribado a la **regla de Hund**:

Los electrones deben ocupar todos los orbitales de un subnivel dado en forma individual, antes que se inicie el apareamiento. Estos electrones suelen tener giros paralelos.

NOTACIÓN SIMPLIFICADA

A continuación se muestra la notación simplificada que se usa para la configuración electrónica de los átomos. También tendremos oportunidad para dar cuenta de la estabilidad que se alcanza a medida que aumenta el número de electrones en cada capa. Los resultados forman la siguiente tabla.

Átomo	Orbital			Configuración
	1s	2s	2p	
${}_1\text{H}$				$1s^1$
${}_2\text{He}$	↓			$1s^2$
${}_3\text{Li}$	↓			$[\text{He}]2s^1$
${}_4\text{Be}$	↓	↓		$[\text{He}]2s^2$
${}_5\text{B}$	↓	↓		$[\text{He}]2s^22p^1$
${}_6\text{C}$	↓	↓	□□□□□	$[\text{He}]2s^22p^2$
${}_7\text{N}$	↓	↓	□□□□□□□□□	$[\text{He}]2s^22p^3$
${}_8\text{O}$	↓	↓	↓□□□□□□□□□	$[\text{He}]2s^22p^4$
${}_9\text{F}$	↓	↓	↓□□□□↓□□□□	$[\text{He}]2s^22p^5$
${}_{10}\text{Ne}$	↓	↓	↓□□□□↓□□□□↓	$[\text{He}]2s^22p^6$

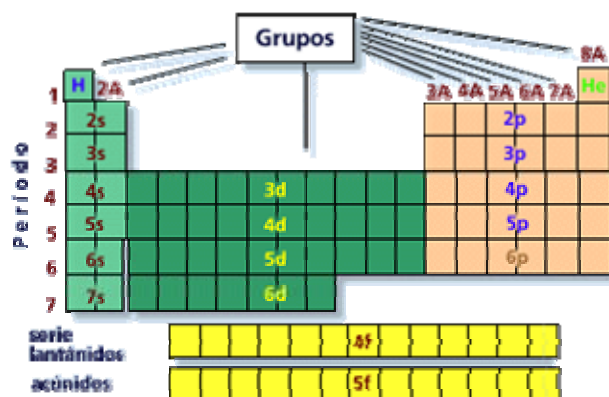
El primer nivel de energía orbital es el **1s** que puede tener un máximo de 2 electrones. Este se completa al definir el gas noble Helio ($1s^2$) que sabemos que adquiere una estabilidad especial, de manera que asociamos **capa orbital completa** con **estabilidad**. Si bien esta estabilidad es máxima cuando se adquiere la configuración de gas noble (**He, Ne, Ar, Kr, ..**), en la práctica todos los casos intermedios (elementos **Be, Mg, Ca, Zn, ..**) presentan propiedades muy particulares que se asocian a esta configuración de capas completas en sus orbitales internos. Obsérvese que todos estos elementos son **Diamagnéticos**.

Átomo	Orbital		Configuración
	3s	3p	
$_{11}\text{Na}$			$[\text{Ne}]3s^1$
$_{12}\text{Mg}$	↓		$[\text{Ne}]3s^2$
$_{13}\text{Al}$	↓		$[\text{Ne}]3s^23p^1$
$_{14}\text{Si}$	↓	□□□□	$[\text{Ne}]3s^23p^2$
$_{15}\text{P}$	↓	□□□□□□□□	$[\text{Ne}]3s^23p^3$
$_{16}\text{S}$	↓	↓□□□□□□□□	$[\text{Ne}]3s^23p^4$
$_{17}\text{Cl}$	↓	↓□□□□↓□□□□	$[\text{Ne}]3s^23p^5$
$_{18}\text{Ar}$	↓	↓□□□□↓□□□□↓	$[\text{Ne}]3s^23p^6$

También existen casos de ocupación **semicapa**, o ocupación parcial de todos los orbitales, indicando con ello que cada orbital se encuentra parcialmente ocupado con **e-** siendo todos de spin paralelo, para cumplir con **la regla de Hund**. Estos también muestran propiedades de estabilidad superior. especialmente notables son los elementos **N, P, As**, en los que se completan las semicapas " p^3 " y del elemento **Cr**, en que se completa la semicapa " d^5 asociada a s^1 ". Obsérvese en este caso que todos los orbitales componentes de ambas capas quedan parcialmente ocupados, lo que confiere especial estabilidad al elemento **Cromo**, en lugar de mantener el orbital 4s doble ocupado y solo 4 e- en el orbital **3d** como le corresponde. Esto es así porque el nivel 4s tiene una energía levemente inferior al 3d y, por lo tanto, el nivel 4s se llena antes que los electrones ocupen el 3d. Sin embargo, ante la posibilidad de poseer la máxima ocupación de acuerdo con la regla de Hund, el átomo adquiere una estabilidad especial cuando ambos orbitales tienen la ocupación de semicapa.

Átomo	Orbital			Configuración
	3d	4s	4p	
¹⁹ K				[Ar]4s ¹
²⁰ Ca		↓		[Ar]4s ²
²¹ Sc		↓		[Ar]3d ¹ 4s ²
²² Ti	□□□□□□	↓		[Ar]3d ² 4s ²
²³ V	□□□□□□□□□□	↓		[Ar]3d ³ 4s ²
²⁴ Cr	□□□□□□□□□□□□□□□□□□			[Ar]3d ⁵ 4s ¹
²⁵ Mn	□□□□□□□□□□□□□□□□□□	↓		[Ar]3d ⁵ 4s ²
²⁶ Fe	↓□□□□□□□□□□□□□□□□□□	↓		[Ar]3d ⁶ 4s ²
²⁷ Co	↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□□□	↓		[Ar]3d ⁷ 4s ²
²⁸ Ni	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□	↓		[Ar]3d ⁸ 4s ²
²⁹ Cu	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□↓			[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹
³⁰ Zn	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□	↓		[Ar]3d ¹⁰ 4s ²
³¹ Ga	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□	↓		[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹
³² Ge	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□	↓	□□□□□□	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ²
³³ As	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□	↓	□□□□□□□□□□□□	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³
³⁴ Se	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□	↓	↓□□□□□□□□□□□□	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴
³⁵ Br	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□	↓	↓□□□□□□↓□□□□□□	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵
³⁶ Kr	↓□□□□□□↓□□□□□□↓□□□□□□□□□□□□	↓	↓□□□□□□↓□□□□□□↓	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶

3. Ordenación de la Tabla Periódica según la configuración electrónica



4. TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Período	1	2																
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sa	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
★ Lantánidos	★		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb		
★★ Actínidos	★★		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No		

Las evidencias química y espectroscópica indican que las configuraciones electrónicas de Cr y Cu tienen un solo electrón en la capa 4s. Sus conjuntos de orbitales **3d** están semillenos y llenos, respectivamente. Estos casos de estabilidad especial basta para hacer que los 3d sean de menor energía relativa que los 4s. Por ejemplo, en el caso del **Cr** la energía electrónica calculada por métodos de la Mecánica Cuántica es menor (por lo tanto más estable) cuando se tiene la configuración $3d^5 4s^1$ que en la configuración $3d^4 4s^2$. Un razonamiento similar es aplicable a la configuración electrónica de Cu.

Puede parecer sorprendente que no se produzca este tipo de excepción en, por ejemplo el caso del Si que podría adquirir la configuración $3s^1 3p^3$ en lugar de la equivalente $3s^2 3p^2$. Sin embargo esto no es extraño ya que los orbitales 3s y 3p no están cercanos en la escala de energía, como sucede en los casos anteriores de 4s y 3d.

Solo cuando los orbitales **3d** se llenan a toda su capacidad (10 e-) comienza el proceso de ocupación del orbital 4p. Este proceso se encuentra claramente descrito en las tablas anteriores.

Es común separar los electrones de los átomos entre aquellos que pertenecen a **la capa de valencia** de los que están **congelados (CORE)** que son los internos del átomo. Por ejemplo, el átomo O de configuración $1s^2 2s^2 2p^4$, su capa de valencia ($n=2$), la que le da las características químicas, la forman los orbitales atómicos (OA's) $2s 2p$ y lo mismo sucede con Li (solo 2s), Be(2s)

B,C,N,F y Ne(orbitales 2s 2p). En cambio, la del Na es (3s) Al es(3s3p) etc.

Ejemplo

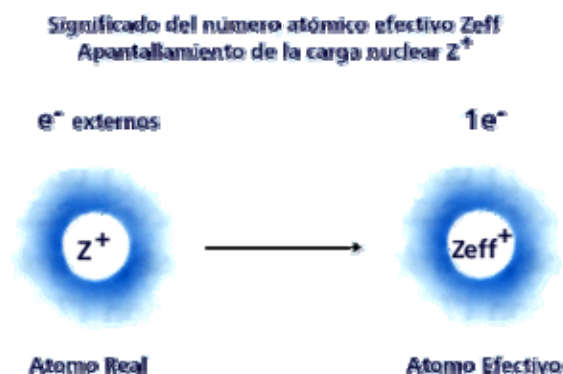
Escriba un conjunto de números cuánticos para cada uno de los electrones del átomo N

R El Nitrógeno tiene 7 e- que ocupan los orbitales de menor energía. Entonces, podemos hacer la siguiente tabla:

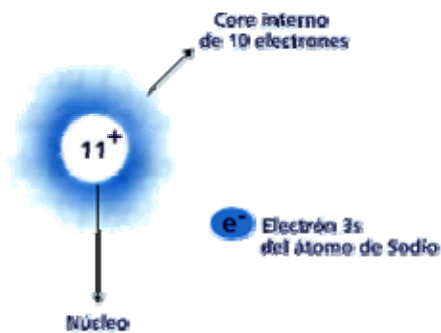
ELECTRÓN CONFIGURACIÓN	n	l	m _l	m _s	
1 y 2	1	0	0	+ 1/2	1s ²
	1	0	0	- 1/2	
3 y 4	2	0	0	+ 1/2	2s ²
	2	0	0	- 1/2	
5,6,7	2	1	-1	+ 1/2	2p ³
	2	1	0	+ 1/2	
	2	1	+1	+ 1/2	

NÚMERO ATÓMICO EFECTIVO Z_{eff} EN ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS

Hasta el momento no hemos planteado derechamente la manera como se interponen los electrones en los átomos con $Z_{\text{atómico}} > 1$. En realidad, lo que efectivamente ocurre es que la repulsión interelectrónica impide que dos de ellos ocupen el mismo lugar simultaneamente. El efecto neto es que las capas internas de electrones neutralizan la carga $+Z_{\text{atómico}}$ del núcleo de modo



que el e- externo solo observa una carga "efectiva " resultante de esta suerte de "apantallamiento de la carga nuclear". En rigor, esta situación no solo ocurre para elementos con varios orbitales internos ocupados, sino también para aquellos electrones que ocupan un mismo orbital de acuerdo con el principio de Pauli. El átomo de He como es en realidad como se plantea, el átomo "hipotético" o "efectivo" con un solo electrón que es afectado por un núcleo también "hipotético" con carga $+Z_{\text{eff}}$.



Esta simplificación nos permite tratar cada electrón individualmente, en tanto se conozcan los valores experimentales para Z_{eff} . Por ejemplo, si se quisiera investigar el elemento Na en estas condiciones, se tendría que apantallar el núcleo por los 10 e⁻ 's internos y conocer el resultado para el que ocupa el orbital 3s. Para hacer los cálculos correspondientes, desarrollemos los siguientes puntos que tocan este tema.

La carga "aparente nuclear efectiva", que llamamos Z_{eff} , es la que realmente siente el electrón en estudio. Por supuesto, en el caso del He ($Z_{\text{atom}} = +2$) se tiene que $Z < 2$ para cada electrón de modo que

$Z_{\text{eff}} = Z_{\text{atom}} - (\text{repulsión interelectrónica o apantallamiento})$

Este método nos permite tratar cada e⁻ individualmente en tanto se disponga de valores Z_{eff} para cada uno de ellos.

En un átomo con un solo electrón, de las características estudiadas anteriormente, la energía de la órbita se calcula según

$$E_n = -2,18 \cdot 10^{-18} \left[\frac{Z^2}{n^2} \right] \text{ J} \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Entonces, en nuestro **átomo hipotético** la ecuación anterior es

$$E_n = -2,18 \cdot 10^{-18} \left[\frac{Z_{\text{eff}}^2}{n^2} \right] \text{ J} \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

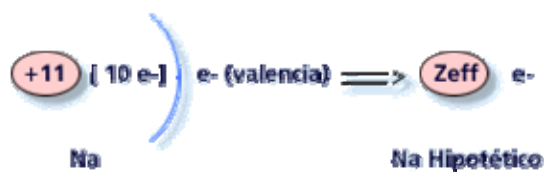
y al medir experimentalmente las Energías de Ionización y los igualamos con el valor para E_n , para cada electrón en su orbital caracterizado por el número cuántico n , obtenemos una Tabla de valores para Z_{eff} . Algunos valores de energía de ionización se muestran a continuación

Energías de Ionización sucesivas, en kJ/Mol, para los elementos del grupo 3.							
Elemento	I ₁	I ₂	I ₃	I ₄	I ₅	I ₆	I ₇
Na	495	4560					
Mg	735	1445	7730				
Al	580	1815	2740	11600			
Si	780	1575	3220	4350	16100		
P	1060	1890	2905	4950	6270	21200	
S	1005	2260	3375	4565	6950	8490	27000
Cl	1255	2295	3850	5160	6560	9360	11000
Ar	1527	2665	3945	5770	7230	8780	12000

Recordemos que la energía de un solo electrón en el átomo, es un reflejo de cuan firmemente se encuentra unido al núcleo: mientras más negativa es, mas firme su unión.

Ejemplo

Para el átomo Na ($Z_{at} = +11$) queremos estudiar el comportamiento de su electrón de valencia 3s, por lo que el modelo es como sigue:



Las Tablas de Potenciales (**P.I.**) de Ionización indican que **P.I.** (1s) = $1,39 \cdot 10^5$ kJ / mol y **P.I.** (3s) = $4,95 \cdot 10^2$ kJ / mol. Calcule Z_{eff} para ambos orbitales de este elemento.

Orbital **1s** ==> $n=1$ y sabiendo que **P.I.** = - En donde se ubica el electrón, nos queda que

$$1,39 \cdot 10^5 \text{ kJ/mol} = -E_n = [2,18 \cdot 10^{-18} N_{av}] \cdot \frac{Z_{eff}^2}{n^2} \quad \text{J}$$

Despejando Z_{eff}

$Z_{eff} = +10,3$ para el electrón en el orbital 1s congelado

Similarmemente para el orbital 3s, se obtiene

$Z_{eff} = +1,84$ para el electrón en el orbital 3s de valencia