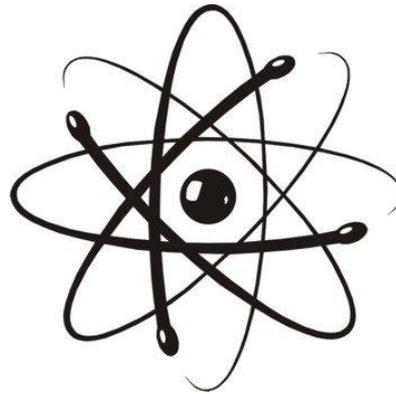


Configuración electrónica



Números cuánticos

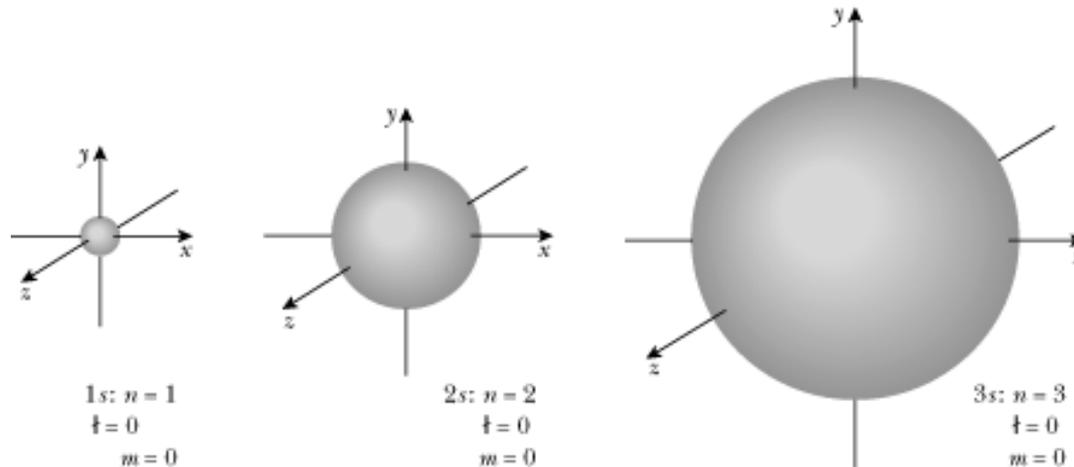


- El número cuántico principal (n) describe el tamaño del orbital, por ejemplo: los orbitales para los cuales $n=2$ son más grandes que aquellos para los cuales $n=1$. Puede tomar cualquier valor entero empezando desde 1: $n=1, 2, 3, 4$, etc
- El número cuántico del momento angular orbital (l) describe la forma del orbital atómico. Puede tomar valores naturales desde 0 hasta $n-1$ (siendo n el valor del número cuántico principal). Por ejemplo si $n=5$, los valores de l pueden ser: $l=0, 1, 2, 3, 4$.
 - $l=0$ orbital **s** (*sharp*)
 - $l=1$ orbital **p** (*principal*)
 - $l=2$ orbital **d** (*diffuse*)
 - $l=3$ orbital **f** (*fundamental*)
- El número cuántico magnético (m_l), determina la orientación espacial del orbital. Se denomina magnético porque esta orientación espacial se acostumbra a definir en relación a un campo magnético externo. Puede tomar valores enteros desde $-l$ hasta $+l$. Por ejemplo, si $l=2$, los valores posibles para m son: $m_l=-2, -1, 0, 1, 2$.
- El número cuántico de espín (s), sólo puede tomar dos valores: $+1/2$ y $-1/2$.

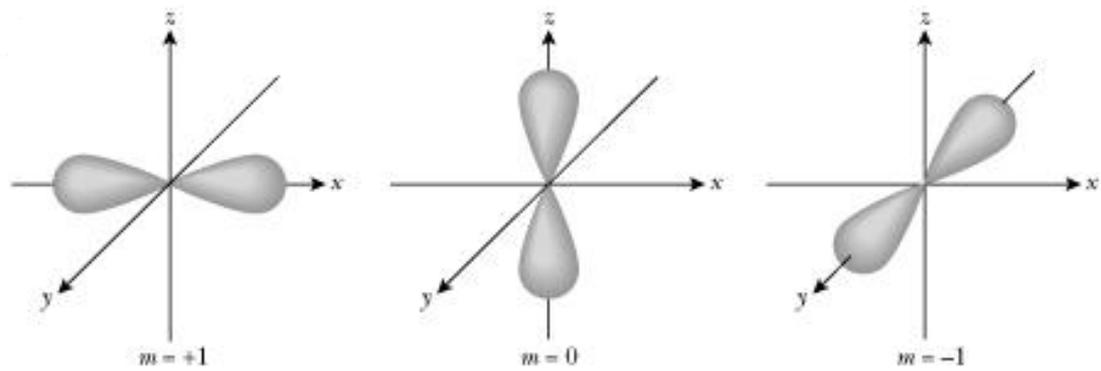


Forma y tamaños de los orbitales

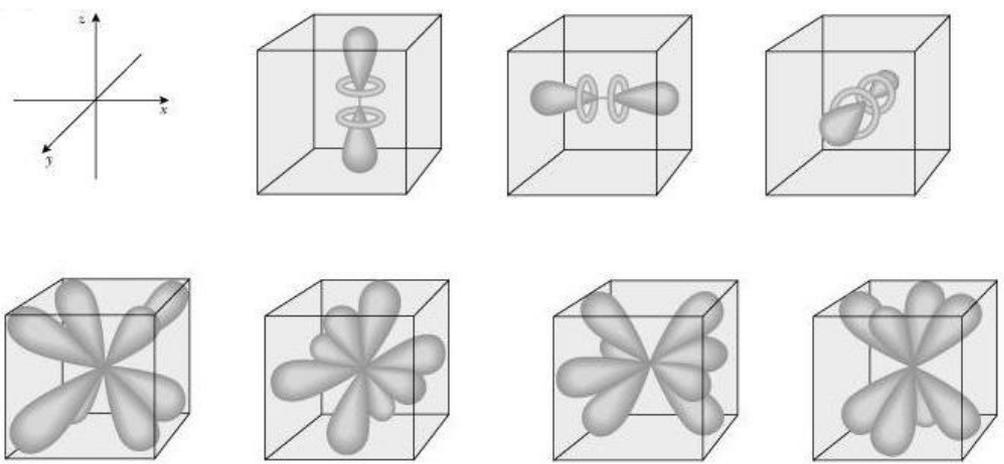
- La imagen de los orbitales empleada habitualmente por los químicos consiste en una representación del orbital mediante superficies límite que engloban una zona del espacio donde la probabilidad de encontrar al electrón es del 99%. La extensión de estas zonas depende básicamente del número cuántico principal, n , mientras que su forma viene determinada por el número cuántico secundario, l .
- Los orbitales s ($l=0$) tienen forma esférica. La extensión de este orbital depende del valor del número cuántico principal, así un orbital $3s$ tiene la misma forma pero es mayor que un orbital $2s$.



- Los **orbitales p** ($l=1$) están formados por dos lóbulos idénticos que se proyectan a lo largo de un eje. La zona de unión de ambos lóbulos coincide con el núcleo atómico. Hay tres orbitales p ($m=-1$, $m=0$ y $m=+1$) de idéntica forma, que difieren sólo en su orientación a lo largo de los ejes x, y o z.



- Los **orbitales f** ($l=3$) también tienen un aspecto multilobular. Existen siete tipos de orbitales f (que corresponden a $m=-3$, -2 , -1 , 0 , $+1$, $+2$, $+3$).

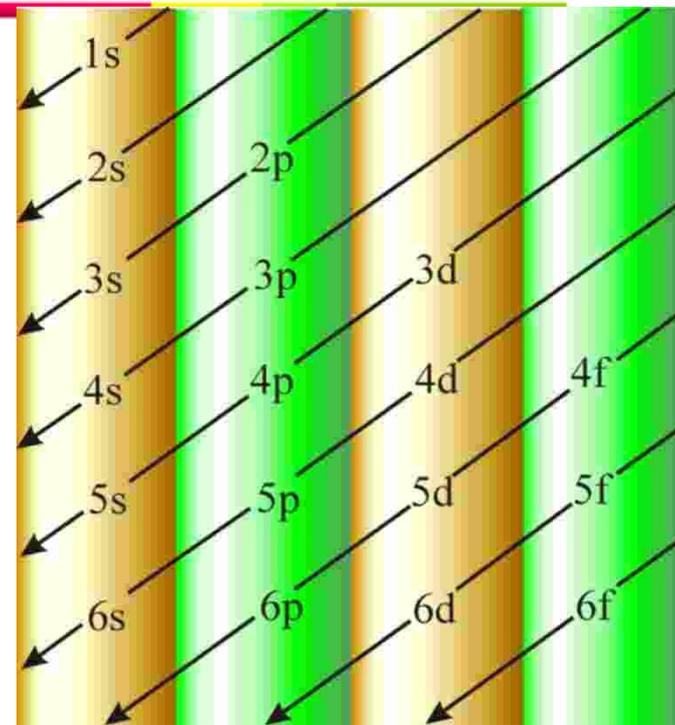


Configuraciones electrónicas

- Escribir la configuración electrónica de un átomo consiste en indicar cómo se distribuyen sus electrones entre los diferentes orbitales en las capas principales y las subcapas. Muchas de las propiedades físicas y químicas de los elementos pueden relacionarse con las configuraciones electrónicas.
- Esta distribución se realiza apoyándonos en tres reglas: *energía de los orbitales*, *principio de exclusión de Pauli* y *regla de Hund*.



Empezando por la línea superior, sigue las flechas y el orden obtenido es el mismo que en la serie anterior.



1. Los electrones ocupan los orbitales de forma que se minimice la energía del átomo. El orden exacto de llenado de los orbitales se estableció experimentalmente, principalmente mediante estudios espectroscópicos y magnéticos, y es el orden que debemos seguir al asignar las configuraciones electrónicas a los elementos. El orden de llenado de orbitales es:



Para recordar este orden más fácilmente se puede utilizar el diagrama siguiente:



- Debido al límite de dos electrones por orbital, la capacidad de una subcapa de electrones puede obtenerse tomando el doble del número de orbitales en la subcapa. Así, la subcapa *s* consiste en *un* orbital con una capacidad de *dos* electrones; la subcapa *p* consiste en *tres* orbitales con una capacidad total de *seis* electrones; la subcapa *d* consiste en *cinco* orbitales con una capacidad total de *diez* electrones; la subcapa *f* consiste en *siete* orbitales con una capacidad total de *catorce* electrones.

SUBNIVEL	Nº ORBITALES	Nº MÁXIMO DE ELECTRONES	Nº TOTAL DE ELECTRONES DE LA CAPA
<i>s</i>	1	2	2
<i>s</i>	1	2	8
<i>p</i>	3	6	
<i>s</i>	1	2	18
<i>p</i>	3	6	
<i>d</i>	5	10	
<i>s</i>	1	2	32
<i>p</i>	3	6	
<i>d</i>	5	10	
<i>f</i>	7	14	

- En un determinado átomo los electrones van ocupando, y llenando, los orbitales de menor energía; cuando se da esta circunstancia el átomo se encuentra en su *estado fundamental*. Si el átomo recibe energía, alguno de sus electrones más externos pueden saltar a orbitales de mayor energía, pasando el átomo a un *estado excitado*.



2. Principio de exclusión de Pauli.

En un átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales.

Los tres primeros números cuánticos, n , l y m_l determinan un orbital específico. Dos electrones, en un átomo, pueden tener estos tres números cuánticos iguales, pero si es así, deben tener valores diferentes del número cuántico de espín. Podríamos expresar esto diciendo lo siguiente: en un orbital solamente puede estar ocupado por dos electrones y estos electrones deben tener espines opuestos.

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	3s	3p _x	3p _y	3p _z

3. Regla de Hund.

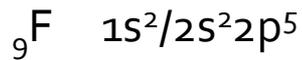
Al llenar orbitales de igual energía (los tres orbitales p, los cinco orbitales d, o los siete orbitales f, los electrones se distribuyen, siempre que sea posible, con sus espines paralelos, es decir, desapareados.

Ejemplo:

La estructura electrónica del ${}_7\text{N}$ es: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$



Por ejemplo el Flúor con $Z = 9$, acomoda sus nueve electrones entre el primer y el segundo nivel, eso se representa en una configuración condensada.



En una representación de configuración desarrollada, desde el acomodo del primer electrón, hasta el electrón número nueve, el llenado se haría de la siguiente forma:



↑				
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑			
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑↓			
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑↓	↑		
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑↓	↑	↑	
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑↓	↑	↑	↑
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z

EL PRINCIPIO AUFBAU O DE CONSTRUCCIÓN



Para escribir las configuraciones electrónicas utilizaremos **el principio aufbau**. *Aufbau* es una palabra alemana que significa "construcción progresiva".

Por ejemplo:

Como sería la configuración electrónica para $Z=11-18$, es decir, desde Na hasta el Ar. Cada uno de estos elementos tiene las subcapas $1s$, $2s$ y $2p$ llenas. Como la configuración $1s^2 2s^2 2p^6$ corresponde a la del neón, la denominamos "configuración interna del neón" y la representamos con el símbolo químico del neón entre corchetes, es decir, $[\text{Ne}]$. Los electrones que se sitúan en la capa electrónica del número cuántico principal más alto, los más exteriores, se denominan **electrones de valencia**. La configuración electrónica del Na se escribe en la forma denominada "*configuración electrónica abreviada interna del gas noble*" de la siguiente manera:

Na: $[\text{Ne}]3s^1$ (consta de $[\text{Ne}]$ para la configuración interna del gas noble y $3s^1$ para la configuración del electrón de valencia).



- De manera análoga, podemos escribir la configuración electrónica para Mg, Al, Si, P....
- **Mg: [Ne]3s²**
- **Al: [Ne]3s²3p¹**
- **Si: [Ne]3s²3p²**
- **P: [Ne]3s²3p³**
- **S: [Ne]3s²3p⁴**
- **Cl: [Ne]3s²3p⁵**
- **Ar: [Ne]3s²3p⁶**