



Casa abierta al tiempo

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**  
Unidad Xochimilco

# UNIDAD II

Números cuánticos y la configuración  
electrónica de los átomos

Dra. Cristina Iuga

Universidad Autónoma Metropolitana

Unidad Xochimilco

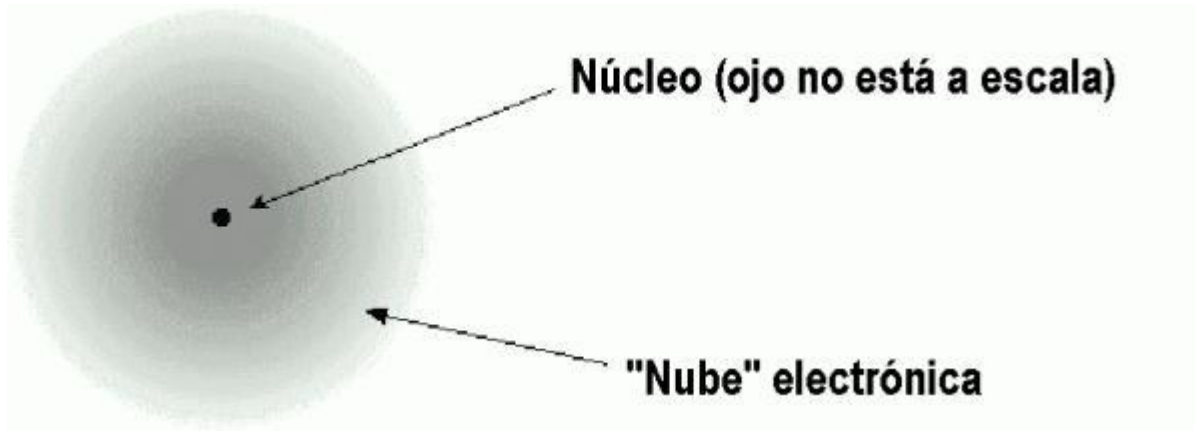
# ORBITALES ATÓMICOS Y NÚMEROS CUÁNTICOS

The diagram shows the Schrödinger equation  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ . A green box labeled "Hamiltonian" has a line pointing to the  $\hat{H}$  term. A yellow box labeled "Wave function" has a line pointing to the  $\Psi$  term on the left side of the equation. A blue box labeled "Energy" has a line pointing to the  $E$  term on the right side of the equation.

La solución de la ecuación de Schrödinger es exacta para el átomo de H (y otros átomos hidrogenoides) y produce un conjunto de funciones de onda, con sus correspondientes energías. A estas funciones de onda se les conoce como ***orbitales***.

Un orbital atómico es la función de onda de un electrón en un átomo.

Esta función se corresponde a un espacio tridimensional (NO es una órbita).



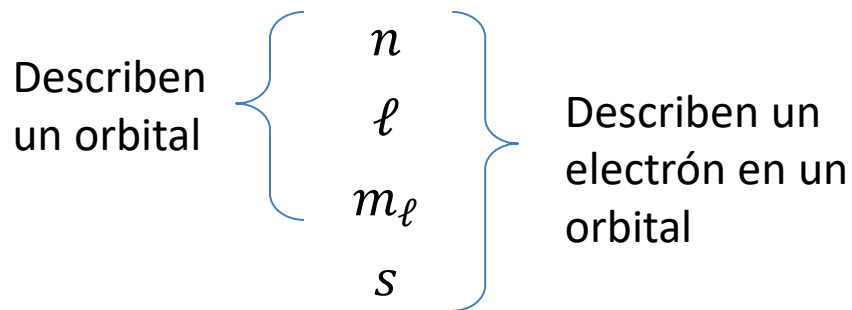
- Los orbitales atómicos son descripciones matemáticas de la probabilidad de encontrar en un lugar determinado los electrones de un átomo o molécula.
- Se emplean 3 números cuánticos para describir cada orbital  $(n, \ell, m_\ell)$
- Cada orbital se etiqueta como:

$$\Psi_{n,\ell,m_\ell}$$

# NÚMEROS CUÁNTICOS

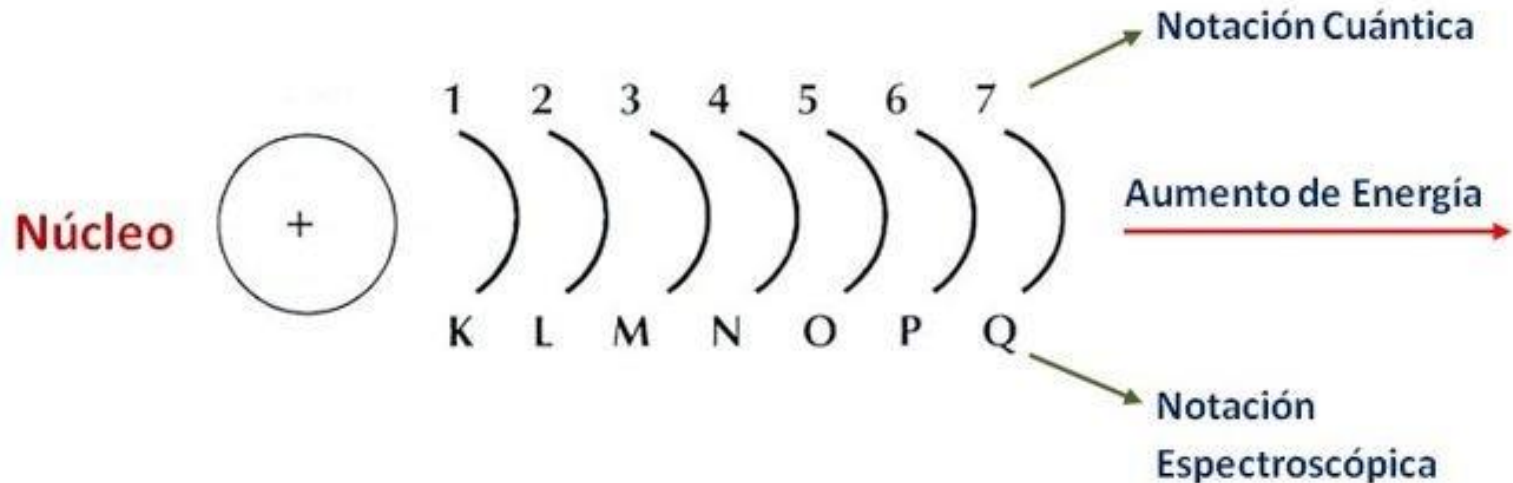
Las soluciones de la ecuación de onda del electrón dependen de cuatro parámetros:  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  y  $s$ .

Número cuántico	Nombre	Define
$n$	Número cuántico principal	Energía y tamaño del orbital
$l$	Número cuántico orbital	Forma del orbital
$m_l$	Número cuántico magnético	Orientación espacial del orbital
$s$	Número cuántico de spin	Espín del electrón






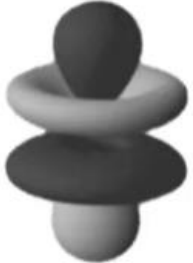
# Número cuántico principal " $n$ "

- Determina el nivel principal de energía del orbital.
- Puede ser cualquier entero positivo:  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$
- Determina el tamaño de los orbitales, por tanto, la distancia al núcleo de un electrón vendrá determinada por este número cuántico.



# Número cuántico orbital " $\ell$ "

- Determina el subnivel de energía y la forma del orbital, con el momento angular y con la energía del orbital en donde se encuentra localizado el electrón.
- Los valores que puede tomar dependen del número cuántico principal ( $n$ ), y puede ser desde 0 hasta  $n-1$ .

Valor de $\ell$	0	1	2	3
Subnivel de energía	<b><i>s</i></b> (Sharp, definido)	<b><i>p</i></b> (principal)	<b><i>d</i></b> (difuso)	<b><i>f</i></b> (fundamental)
Forma del orbital				

# Número cuántico secundario " $\ell$ "

Si	$n = 1$	$\ell = 0$	→	<i>orbital 1s</i>
Si	$n = 2$	$\ell = 0$	→	<i>orbital 2s</i>
		$\ell = 1$	→	<i>orbital 2p</i>
Si	$n = 3$	$\ell = 0$	→	<i>orbital 3s</i>
		$\ell = 1$	→	<i>orbital 3p</i>
		$\ell = 2$	→	<i>orbital 3d</i>
Si	$n = 4$	$\ell = 0$	→	<i>orbital 4s</i>
		$\ell = 1$	→	<i>orbital 4p</i>
		$\ell = 2$	→	<i>orbital 4d</i>
		$\ell = 3$	→	<i>orbital 4f</i>

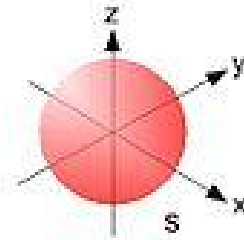
# Número cuántico magnético " $m_\ell$ "

- Indica la orientación del orbital.
- Los valores que toma dependen del número cuántico secundario  $\ell$ , y son desde  $-\ell$  hasta  $\ell$ .

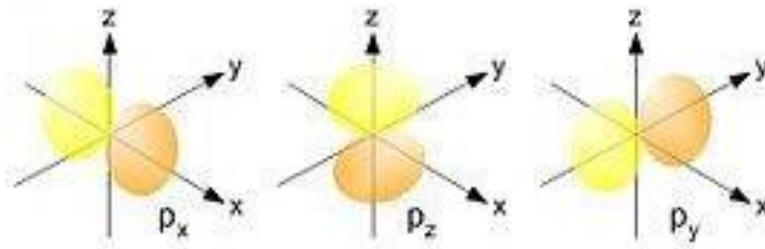
$n$	Posibles valores de $\ell$	Subcapa	Posibles valores de $m_\ell$	Número de orbitales en la subcapa	Número total de orbitales en la capa
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	-1, 0, 1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	-1, 0, 1	3	
	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	-1, 0, 1	3	
	2	4d	-2, -1, 0, 1, 2	5	
	3	4f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7	



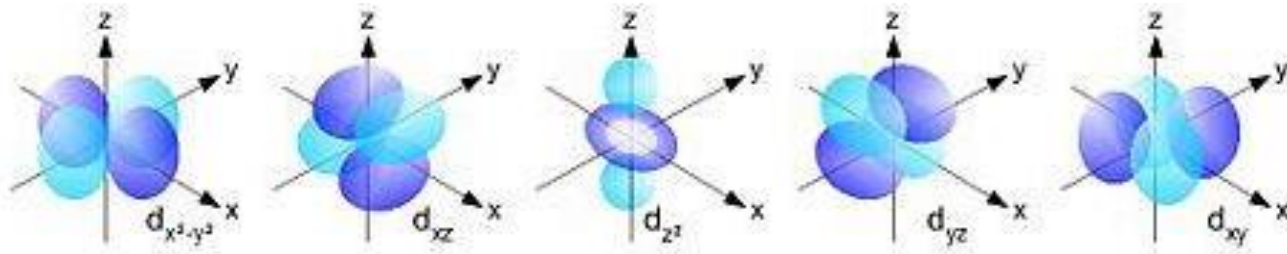
Si  $\ell = 0$ , entonces  $m_\ell = 0$



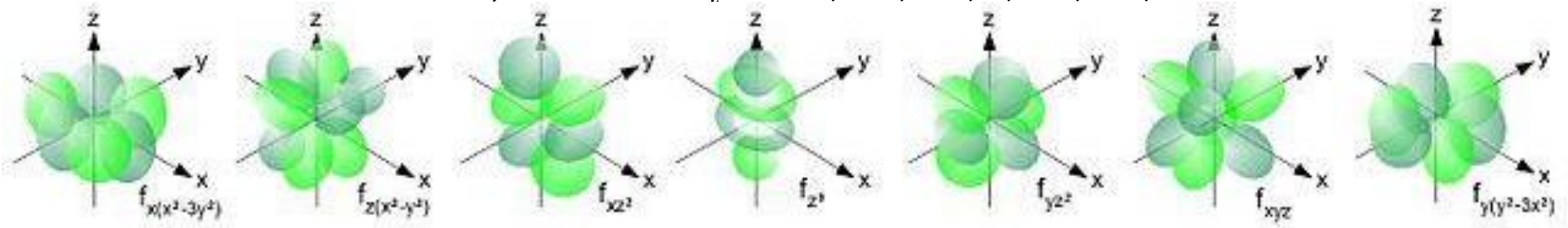
Si  $\ell = 1$ , entonces  $m_\ell = -1, 0, +1$



Si  $\ell = 2$ , entonces  $m_\ell = -2, -1, 0, +1, +2$



Si  $\ell = 3$ , entonces  $m_\ell = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$

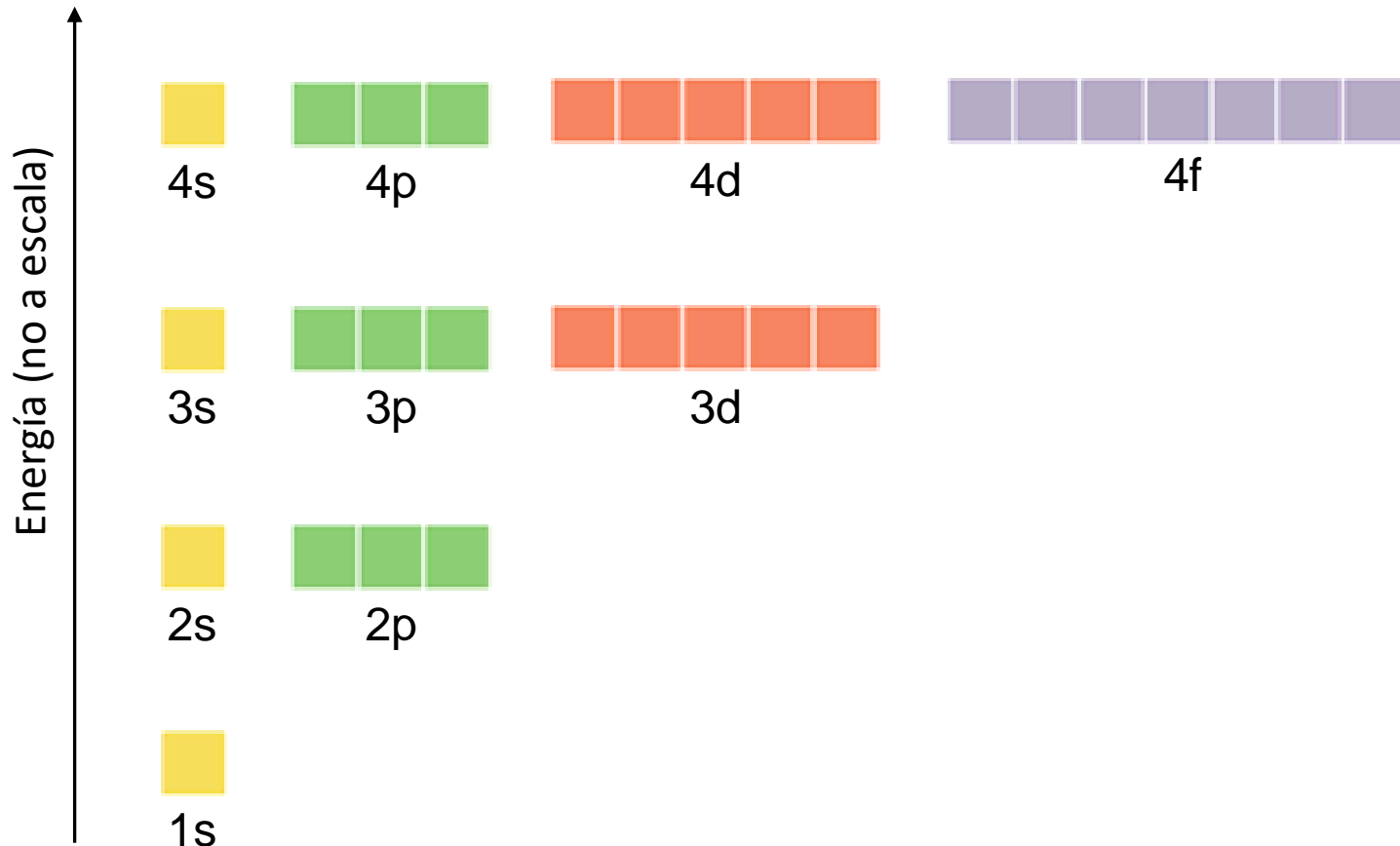


# CAPAS Y SUBCAPAS ELECTRÓNICAS

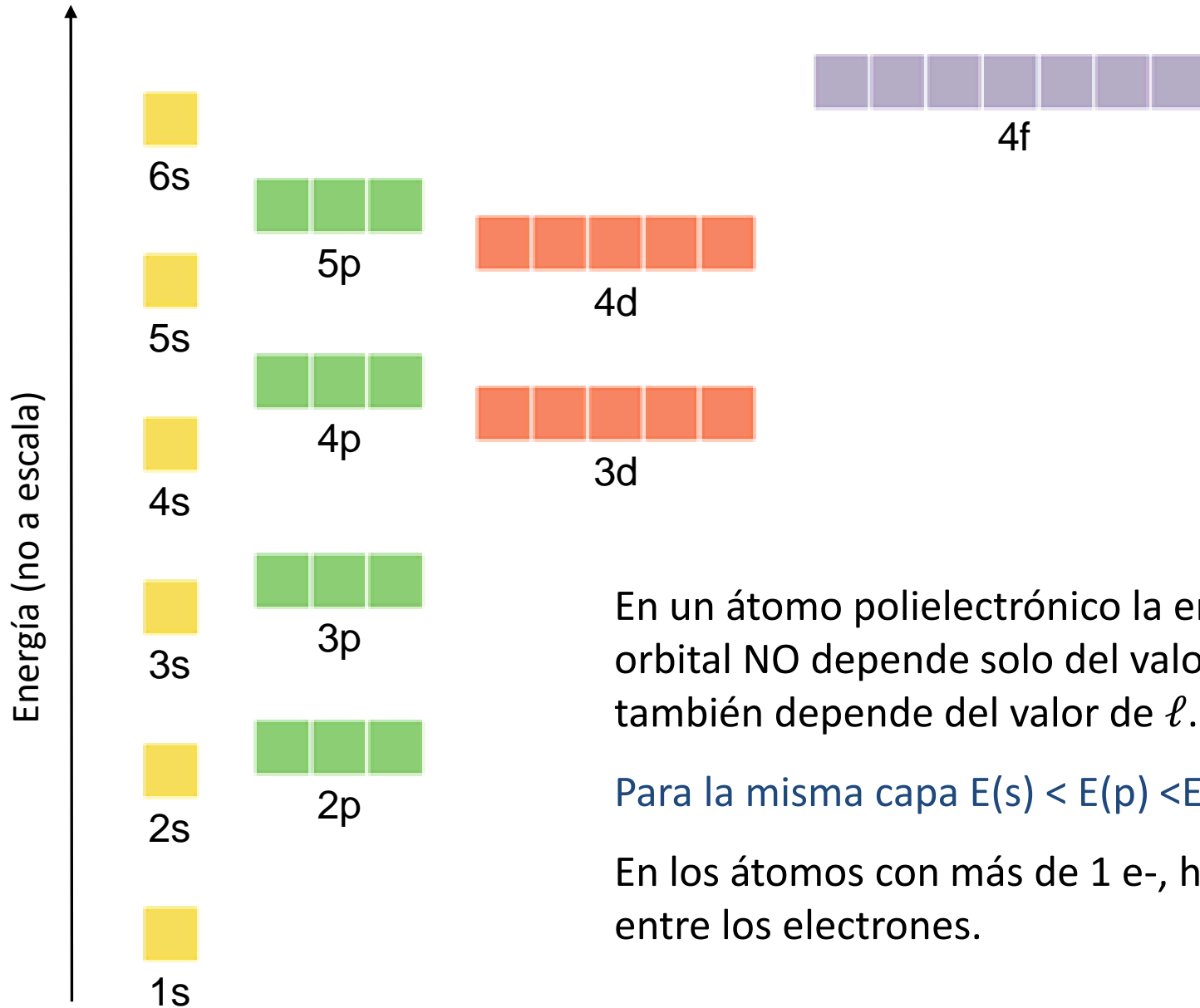
- Al conjunto de orbitales con igual  $n$ , se les llama **capa electrónica**.  
Ej. Todos los orbitales con  $n = 3$  pertenecen a la tercera capa.
- Cada capa está formada por **subcapas** (con igual valor de  $n$  y  $\ell$ ).  
Ej. Los orbitales de la tercera capa con  $\ell = 2$ , forman la subcapa 3d.
- El número de orbitales en una subcapa es igual al número de valores permitidos de  $m_l$  para un valor particular de  $\ell$ , por lo que el número de orbitales en una subcapa es  $2\ell + 1$ . Los nombres de los orbitales son los mismos que los de las subcapas en las que aparecen.

# ENERGÍA DE LOS ORBITALES

- En el átomo de hidrógeno (o hidrogenoides en general) los diferentes subniveles dentro de cada nivel están degenerados (tienen la misma energía) porque la energía solo depende del número cuántico principal  $n$ .



# ENERGÍA DE LOS ORBITALES



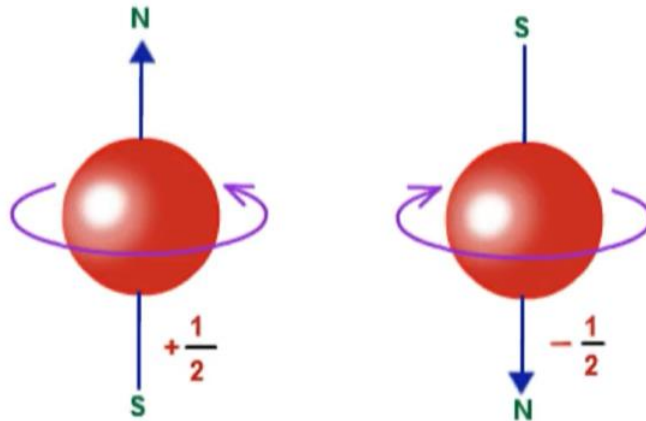
En un átomo polielectrónico la energía de un orbital NO depende solo del valor de  $n$ , también depende del valor de  $l$ .

Para la misma capa  $E(s) < E(p) < E(d) < E(f)$

En los átomos con más de 1 e-, hay repulsión entre los electrones.

# Número cuántico de espín "s"

- Está relacionado con la rotación sobre su eje del electrón, generando un campo magnético con dos posibles orientaciones según el giro.
- Los valores que toma son  $+\frac{1}{2}$  y  $-\frac{1}{2}$



# Configuraciones electrónicas de Átomos Multielectrónicos

## ¿Qué es una configuración?

- La distribución de los electrones de un átomo en sus orbitales.

## ¿Qué es una configuración fundamental?

- Aquella que tiene la menor energía.

## ¿Con qué criterio se colocan los electrones en un átomo para obtener su configuración fundamental?

1. Criterio de mínima energía (Aufbau)
2. Principio de exclusión de Pauli
3. Principio de máxima multiplicidad de Hund

## Principio de Aufbau (de mínima energía)

- Primero se ocupan los orbitales de menor energía.
- Los electrones entran en los orbitales en orden creciente de energía, dado por la suma de los números cuánticos principal y secundario,  $n + \ell$ . A igual número de la suma, predominará el del número cuántico principal más bajo.

Niveles	$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$
1	1s <sup>2</sup>			
2	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>		
3	3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>	3d <sup>10</sup>	
4	4s <sup>2</sup>	4p <sup>6</sup>	4d <sup>10</sup>	4f <sup>14</sup>
5	5s <sup>2</sup>	5p <sup>6</sup>	5d <sup>10</sup>	5f <sup>14</sup>
6	6s <sup>2</sup>	6p <sup>6</sup>	6d <sup>10</sup>	6f <sup>14</sup>
7	7s <sup>2</sup>	7p <sup>6</sup>	7d <sup>10</sup>	7f <sup>14</sup>

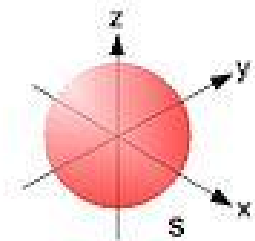
## Ejemplo. Configuración electrónica del Hidrógeno ( $Z = 1$ )



$Z = 1 \longrightarrow$  1 protón  
1 electrón

Principio de Aufbau  $\rightarrow$  orbital 1s  $\left\{ \begin{array}{l} n = 1 \\ \ell = 0 \\ m_{\ell} = 0 \end{array} \right.$

Dos posibles combinaciones de números cuánticos para definir el electrón del átomo de H:



Orbital 1s

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

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



Ejemplo. Configuración electrónica del Hidrógeno ( $Z = 1$ )

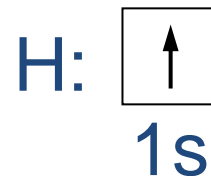
H:  $1s^1$

Nº de electrones  
en el orbital

Nº cuántico  
principal

Nº cuántico del momento  
angular (subcapa)

Diagrama Orbital:



# ¿Cuántos electrones caben en un orbital?

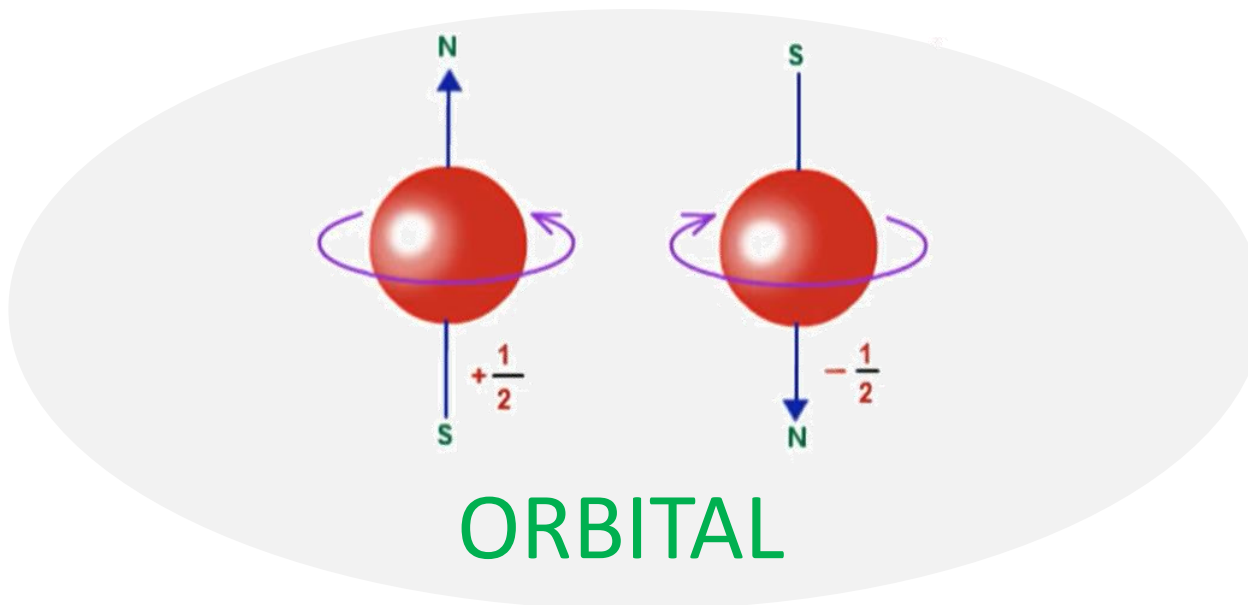
## Principio de exclusión de Pauli

En un sistema cuántico no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales. Al menos han de diferenciarse en uno de ellos. (1925).



Wolfgang Ernst Pauli

**Por lo tanto: en un orbital solo caben 2 electrones de espín opuesto**



# MUY IMPORTANTE


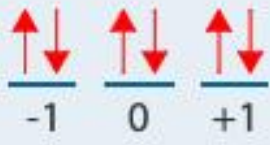

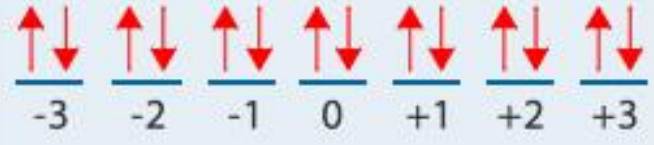
Un orbital está definido por 3 números cuánticos:

$$n, \ell, m_{\ell}$$

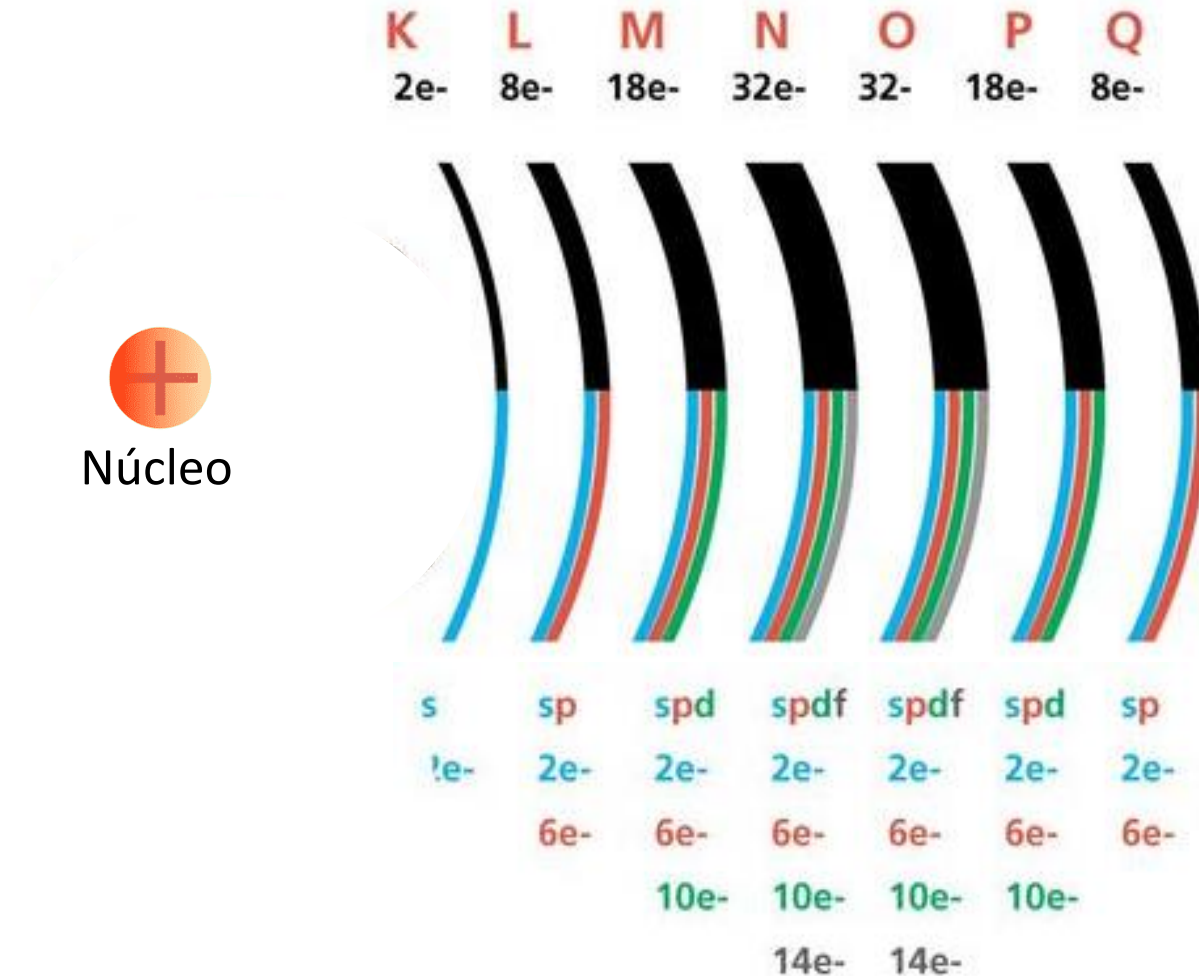
El estado de un electrón queda definido por 4 números cuánticos:

$$n, \ell, m_{\ell}, s$$

## ¿Cuántos electrones caben en una subcapa?

Subnivel ( $\ell$ )	Orbitales	Número de orbitales	Capacidad máxima de electrones
s ( $l = 0$ )		1	2
p ( $l = 1$ )		3	6
d ( $l = 2$ )		5	10
f ( $l = 3$ )		7	14

# ¿Cuántos electrones caben en una capa?



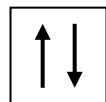
## Ejemplo. Configuración electrónica del Helio ( $Z = 2$ )



$Z = 2 \longrightarrow 2$  protones  $\longrightarrow 2$  electrones

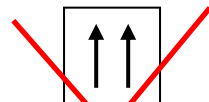
Principio de Aufbau:

- Primero se llenan los orbitales de menor energía
- Existen 3 formas de distribuir los dos electrones en el orbital  $1s$ :



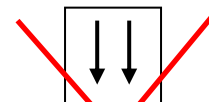
$1s^2$

(a)



~~$1s^2$~~

(b)



~~$1s^2$~~

(c)

Prohibidas por el  
P. de Exclusión  
de Pauli

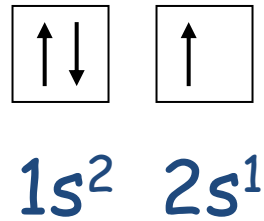
## Ejemplo. Configuración electrónica del Litio ( $Z = 3$ )



$Z = 3 \longrightarrow 3$  protones  $\longrightarrow 3$  electrones

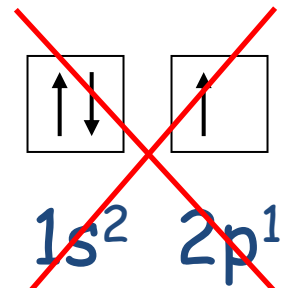
Principio de Aufbau:

- Primero se llenan los orbitales de menor energía



(a)

o



(b)

Prohibida  
por la energía  
(Aufbau)

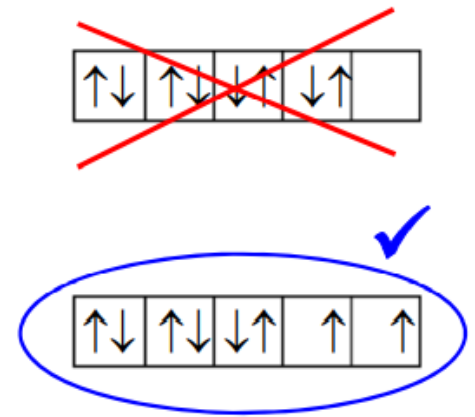
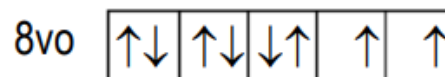
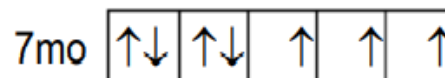
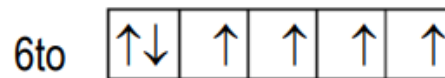
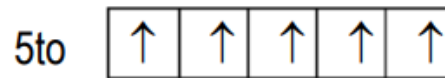
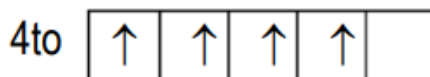
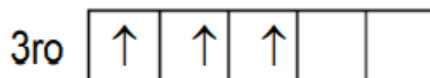
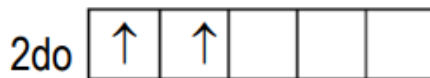
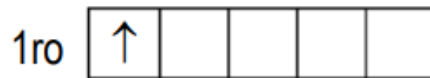
# ¿Cómo se colocan los electrones en los subniveles p, d, f, ...?

## Principio de máxima multiplicidad de Hund

Cuando varios electrones ocupan orbitales degenerados (igual contenido energético) lo harán lo más desapareado posible, con espines paralelos.

Los e- se ubican en el conjunto de orbitales degenerados de uno en uno, y cuando todos los orbitales tienen 1 e- entonces se empiezan a ubicar los demás e-.

Ejemplo:  
**3d<sup>8</sup>**



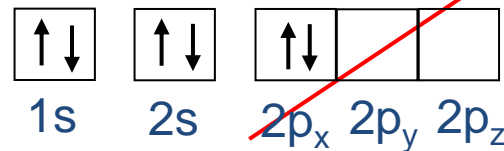
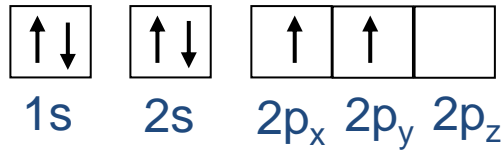


## Ejemplo. Configuración electrónica del Carbono ( $Z = 6$ )

6  
C  
Carbono  
12.0107

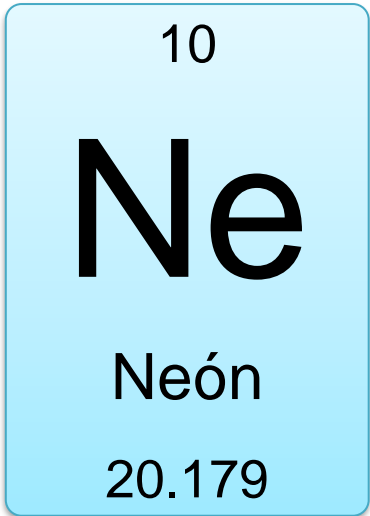
$Z = 6 \longrightarrow 6$  protones  $\longrightarrow 6$  electrones

Configuración electrónica del Carbono:  $1s^2 2s^2 2p^2$



Prohibida por  
Regla de Hund

Ejemplo. Configuración electrónica del Neón ( $Z = 10$ )

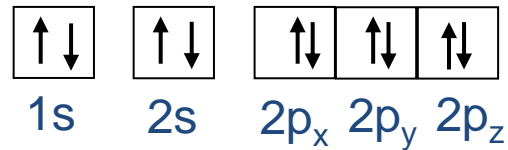


$Z = 10$

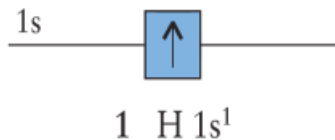
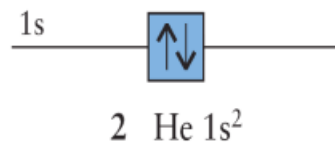
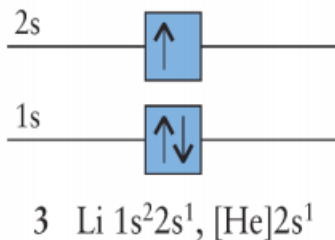
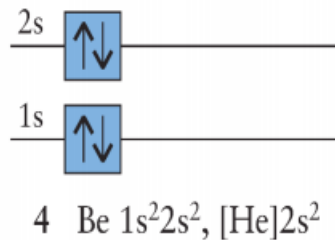
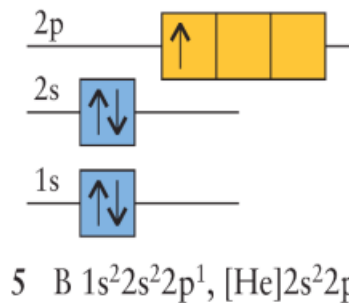
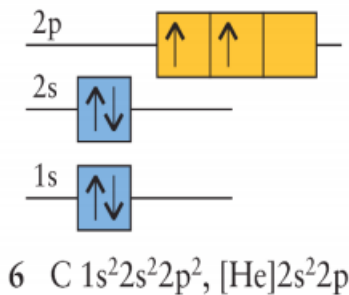
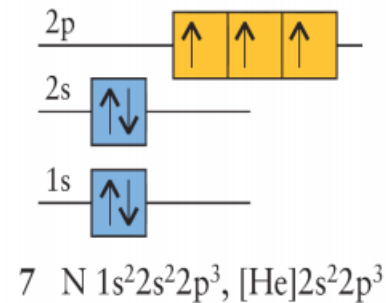
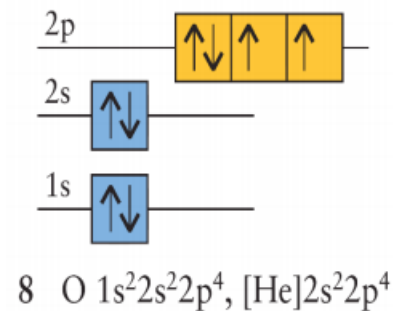
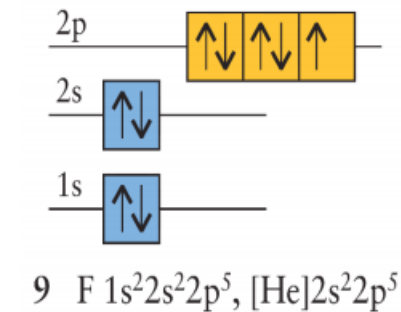
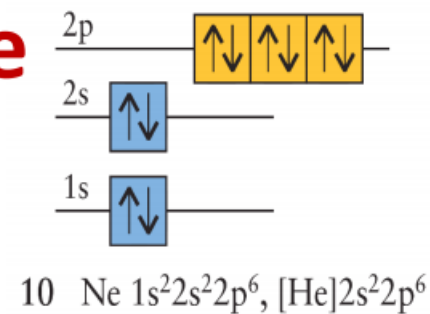
10 protones

10 electrones

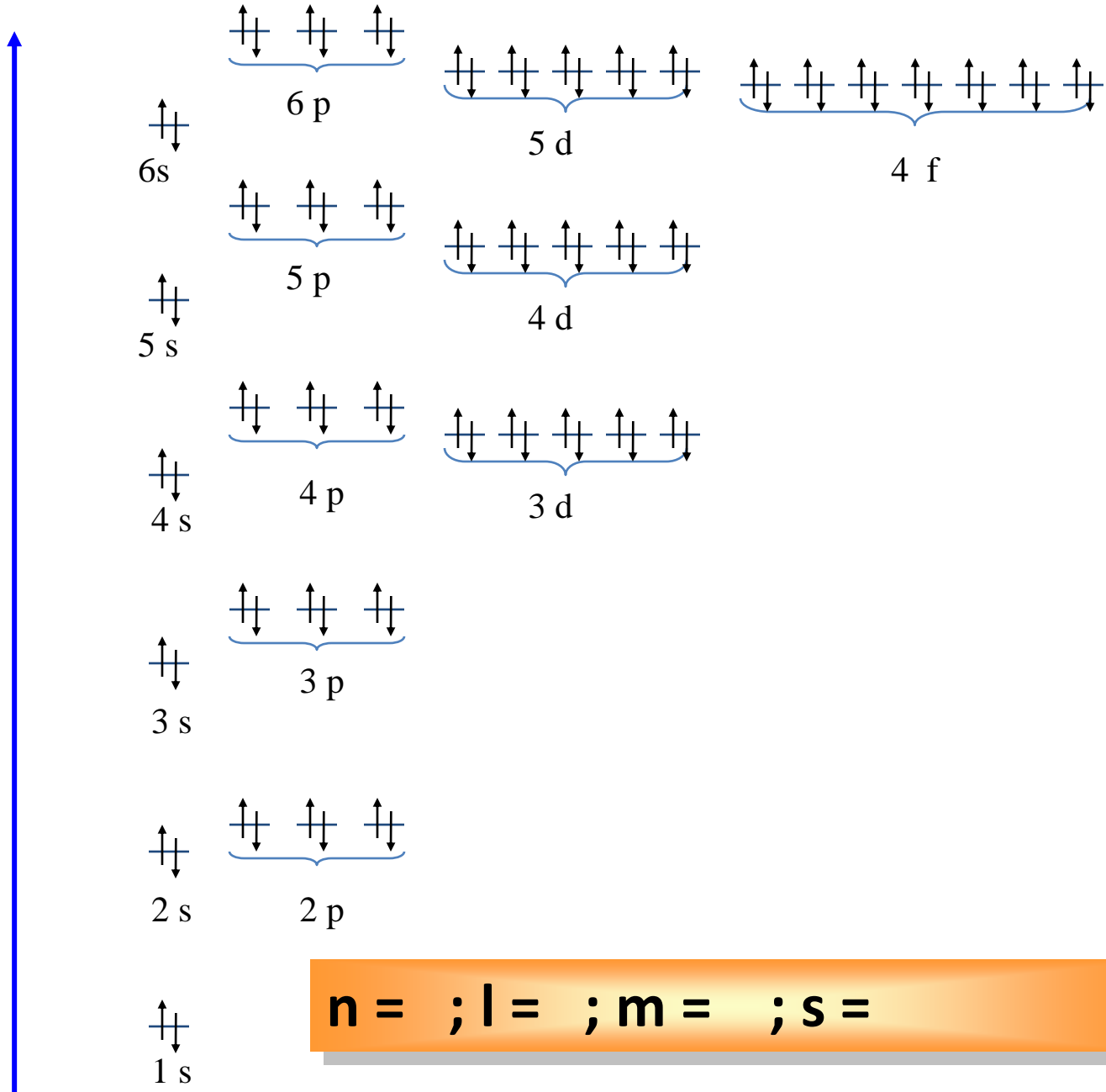
Diagrama de orbitales:



Configuración electrónica del Neón:  $1s^2 2s^2 2p^6$

**H****He****Li****Be****B****C****N****O****F****Ne**

Energía

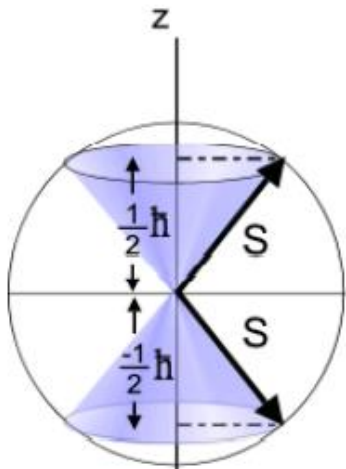
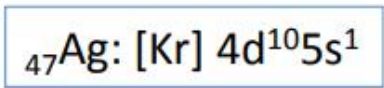
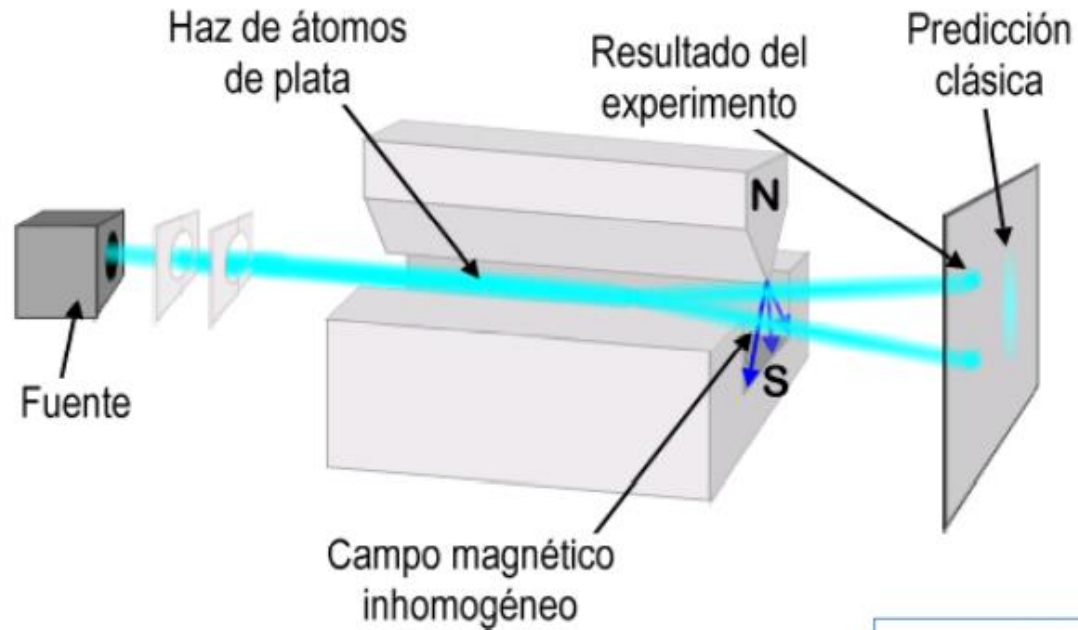


**$n =$  ;  $l =$  ;  $m =$  ;  $s =$**

# Propiedades magnéticas

¿Cómo reaccionan los átomos a un campo magnético?

Experimento de Stern-Gerlach (1922)



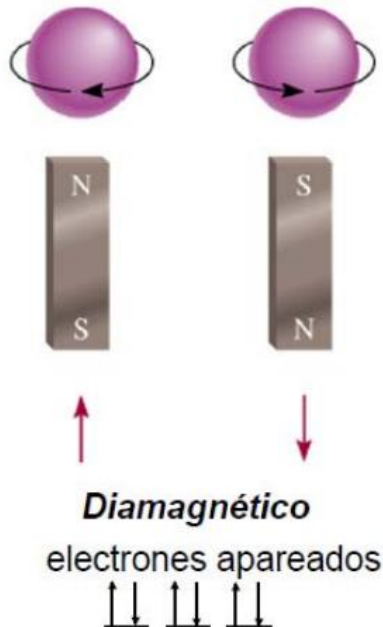
Los electrones tienen sólo dos posibles valores de momento angular de espín:  
 $+\hbar/2$  o  $-\hbar/2$ .

# Propiedades magnéticas

## Átomos o iones diamagnéticos:

Todos los electrones están apareados.

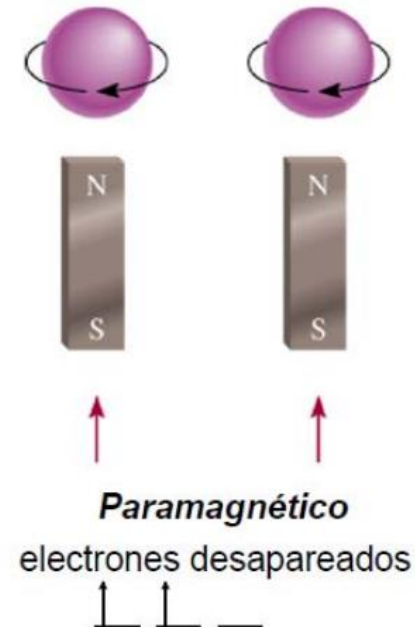
Una especie diamagnética es débilmente repelida por un campo magnético.



## Átomos o iones paramagnéticos:

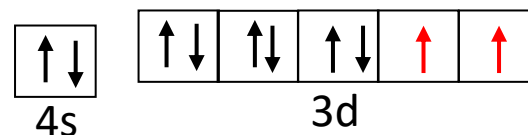
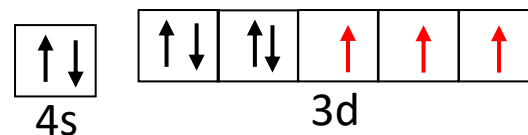
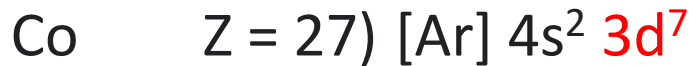
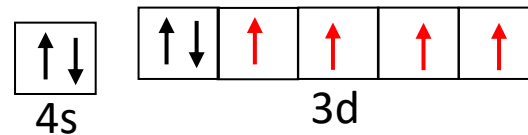
Tienen electrones desapareados.

Los electrones desapareados inducen un campo magnético que hace que el átomo o ion sea atraído por un campo magnético externo.



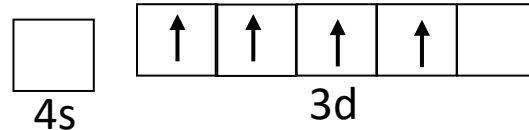
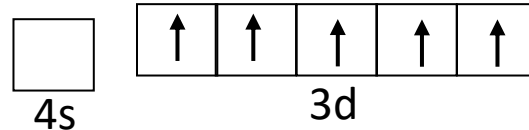
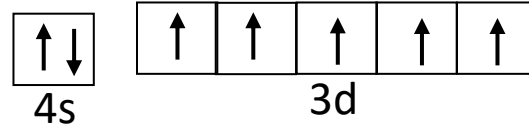
# Propiedades magnéticas

Algunos materiales como el níquel, el hierro, el cobalto y sus aleaciones, presentan propiedades magnéticas que son fácilmente detectables.



# Propiedades magnéticas

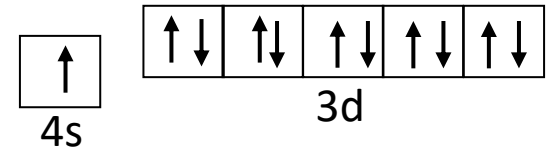
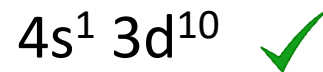
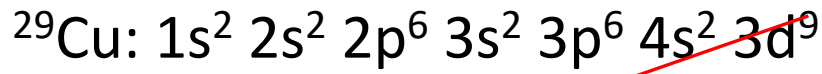
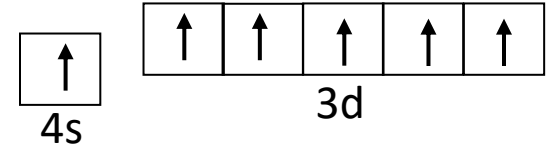
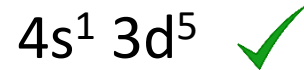
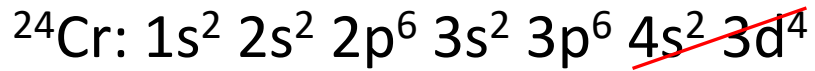
## Átomos o iones paramagnéticos:



- Los orbitales 4s tienen menor energía que los orbitales 3d.
- **Los orbitales d llenos y semillenos son muy estables.**



## Irregularidades:



## ¿Por qué?

- Orbitales con Energías parecidas:  $E_{4s} \sim E_{3d}$
- Orbitales d llenos y semilLENOS: **Muy Estables**