

## NÚMEROS CUÁNTICOS - CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

En 1926, Erwin Schrödinger propuso una ecuación, ahora conocida como la ecuación de onda de Schrödinger, que involucra los comportamientos tanto ondulatorios como de partícula del electrón. El trabajo de Schrödinger inició una nueva forma de tratar las partículas subatómicas conocida como **mecánica cuántica** o **mecánica ondulatoria**.

La resolución de la ecuación de Schrödinger da lugar a una serie de funciones matemáticas llamadas funciones de onda que por lo regular se representan con el símbolo  $\psi$  (psi). Aunque la función de onda misma no tiene un significado físico directo, el cuadrado de la función de onda,  $\psi^2$ , proporciona información acerca de la ubicación de un electrón cuando está en un estado de energía permitido. El cuadrado de la función de onda,  $\psi^2$ , en un punto dado del espacio representa la probabilidad de que el electrón se encuentre en dicha región. Por esta razón denominamos a  $\psi^2$ , la **densidad de probabilidad**.

La solución completa de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno produce un conjunto de funciones de onda que se denominan **orbitales**, los cuales quedan definidos por un conjunto de tres números cuánticos: el número cuántico principal, el número cuántico azimutal y el número cuántico magnético.

En 1928, Paul Dirac, reformuló la mecánica cuántica del electrón para tener en cuenta los efectos de la relatividad. Esto dio lugar a la aparición de un cuarto número cuántico: el número cuántico de spin

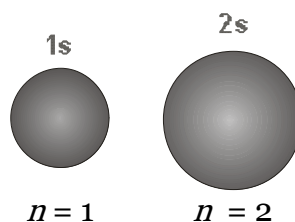
En la mecánica ondulatoria, la distribución electrónica de un átomo que contiene una cantidad de electrones se divide en niveles. Los niveles a su vez consisten en uno o más subniveles y estos a su vez están formados por uno o más orbitales, los cuales son ocupados por electrones. Cada electrón de un átomo se identifica por una combinación de cuatro números cuánticos.

Un **orbital atómico** es la región del espacio donde existe la máxima probabilidad de encontrar un electrón. Todo orbital atómico es ocupado por un máximo de dos electrones (**REEMPE**)

### NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL (n)

Describe el tamaño del orbital atómico. Además, está relacionado con el nivel energético que ocupa el electrón

$n$	1	2	3	4	5	6	7		$\infty$
CAPA	K	L	M	N	O	P	Q		



NIVEL	NÚMERO MÁXIMO DE ELECTRONES	NÚMERO DE ORBITALES
1 (K)	$2 = 2 \cdot (1)^2$	$1 = (1)^2$
2 (L)	$8 = 2 \cdot (2)^2$	$4 = (2)^2$
3 (M)	$18 = 2 \cdot (3)^2$	$9 = (3)^2$
4 (N)	$32 = 2 \cdot (4)^2$	$16 = (4)^2$

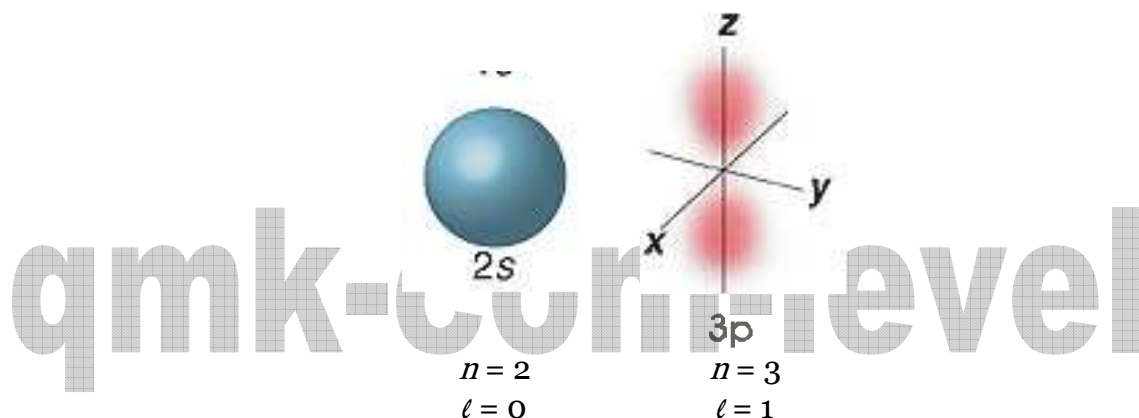
# máximo de orbitales por nivel =  $n^2$

# máximo de electrones por nivel =  $2n^2$

### NÚMERO CUÁNTICO SECUNDARIO ( $\ell$ )

Describe la forma del orbital atómico. También está relacionado con el subnivel de energía que ocupa el electrón

$\ell$	0	1	2	3	4	5	6		n-1
SUBNIVEL	s	p	d	f	g	h	i		



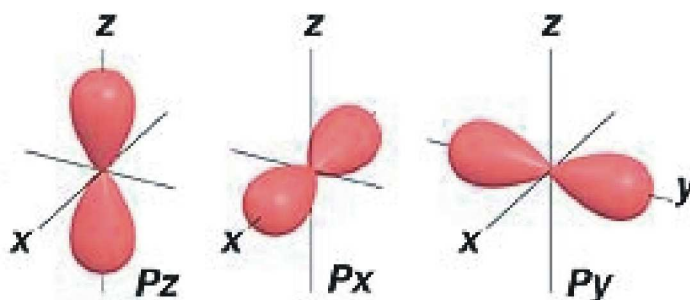
NIVEL (n)	$\ell$	SUBNIVEL	MÁXIMO NÚMERO DE ELECTRONES
1	0	1s	2
2	0	2s	2
	1	2p	6
3	0	3s	2
	1	3p	6
	2	3d	10
4	0	4s	2
	1	4p	6
	2	4d	10
	3	4f	14

Para un subnivel de energía (n) existen n subniveles de energía

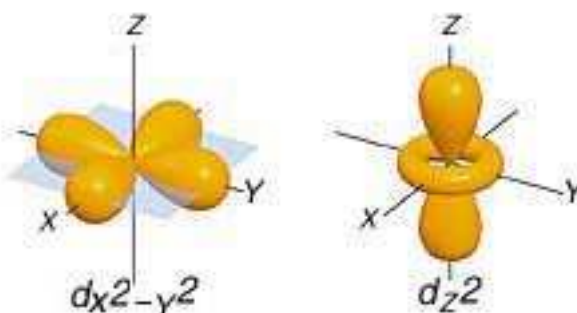
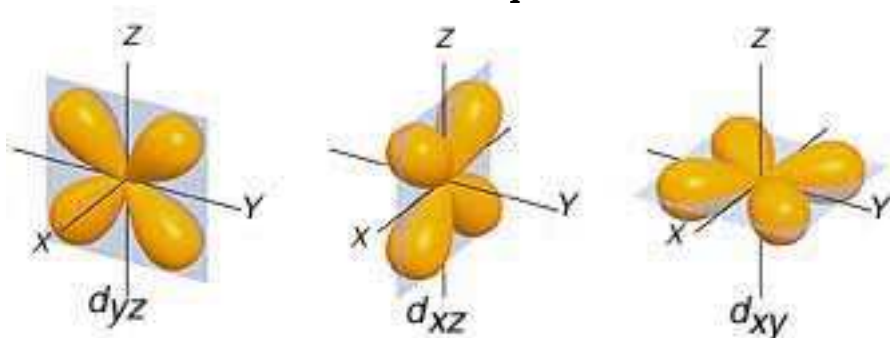
### NÚMERO CUÁNTICO MAGNÉTICO ( $m_\ell$ )

Describe la orientación espacial del orbital atómico. El número de valores que adopta el número cuántico magnético es igual al número de orbitales que posee un subnivel de energía

$m_\ell$ : desde (-l) .....0 .....hasta (+l)



Orbitales *p*



Orbitales *d*

Tomando como referencia al cuarto nivel de energía, se tiene:

n	ℓ	SUBNIVEL	mℓ	NÚMERO DE ORBITALES	NÚMERO MÁXIMO DE ELECTRONES
4	0	4s	$\uparrow\downarrow$ 0	1	2
	1	4p	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ -1 0 +1	3	6
	2	4d	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ -2 -1 0 +1 +2	5	10
	3	4f	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ -3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7	14

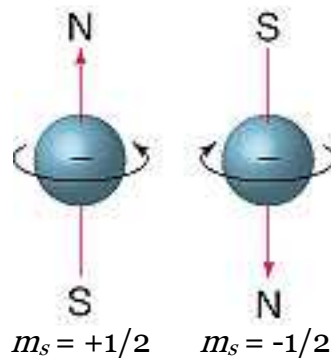
$$\# \text{ de orbitales en un subnivel} = 2\ell + 1$$

$$\# \text{ máximo de electrones en un subnivel} = 2(2\ell + 1)$$

**NÚMERO CUÁNTICO DE SPÍN (*m<sub>s</sub>*)**

Describe el sentido de giro del electrón sobre un eje imaginario, en sentido horario o antihorario.

$$m_s \begin{cases} +1/2 \\ -1/2 \end{cases}$$



## ENERGÍA RELATIVA DE LOS ORBITALES

$$E.R. = n + \ell$$

Para un valor dado de  $n$ , la energía relativa de los orbitales aumenta con el aumento del número cuántico secundario ( $\ell$ )

Según su energía:  $4s < 4p < 4d < 4f$

Para orbitales con el mismo valor de  $(n + \ell)$ , la energía del orbital aumenta con el incremento del número cuántico principal,  $n$

Según su energía:  $4f < 5d < 6p < 7s$

Todos los orbitales de un mismo subnivel poseen la misma energía. A estos orbitales se les denomina **orbitales degenerados**

$3p_x$ ,  $3p_y$  y  $3p_z$  son orbitales degenerados

## CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

La forma en como los electrones se distribuyen entre los diferentes orbitales de un átomo es su configuración electrónica. La configuración electrónica más estable, o basal, de un átomo es aquella en la que los electrones están en los estados de energía más bajos posibles

## PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI

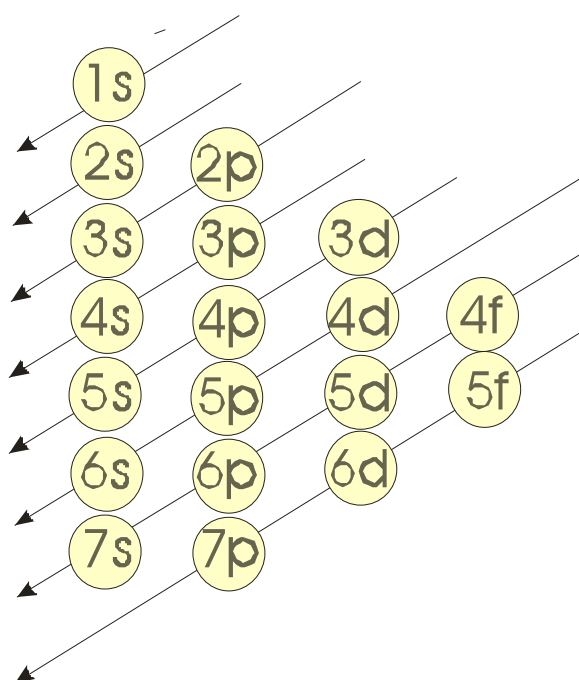
Establece que dos electrones en un mismo átomo no pueden tener el mismo estado cuántico, es decir no pueden tener el mismo conjunto de cuatro números cuánticos. Por consiguiente en un orbital atómico pueden existir como máximo dos electrones con espines opuestos.

## REGLA DE MÁXIMA MULTIPLICIDAD DE HUND

Establece que los electrones tienden a ocupar el máximo número de orbitales de un subnivel, es decir, los electrones deben ocupar todos los orbitales de un subnivel dado antes de empezar a aparearse. Estos electrones desapareados tienen espines paralelos

## REGLA DE AUFBAU

Este principio establece que los electrones se distribuyen en los orbitales de tal forma que den la energía total más baja para el átomo, es decir que los electrones se distribuyen en los orbitales atómicos siguiendo el orden creciente de sus energías

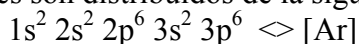


### CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA EN IONES

La configuración electrónica de un anión se realiza de la manera convencional distribuyendo el total de electrones de la especie negativa.

#### Configuración electrónica de un anión:

El  ${}_{16}\text{S}^{2-}$  posee 18 electrones los cuales son distribuidos de la siguiente manera:



El  ${}_{16}\text{S}^{2-}$  y el Ar poseen la misma distribución electrónica. A estas especies se les llama isoelectrónicas.

#### Configuración electrónica de un catión:

La distribución electrónica de un catión se realiza en dos pasos. Primero se distribuyen los electrones del átomo neutro y luego se retiran los electrones desde el nivel más externo. La distribución electrónica del hierro (II) ( ${}_{26}\text{Fe}^{2+}$ ), se realiza de la siguiente manera:

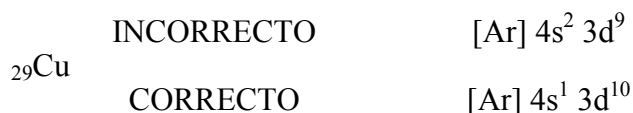
Para el átomo de hierro:  ${}_{26}\text{Fe} \quad \text{C.E. } [{}_{18}\text{Ar}] 4s^2 3d^6$  (Considere los 26 electrones del átomo neutro)

Para el catión :  ${}_{26}\text{Fe}^{2+} \quad \text{C.E. } [{}_{18}\text{Ar}] 4s^0 3d^6$  (Retire los electrones del nivel externo 4s)

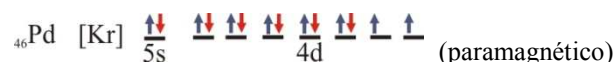
### ANOMALÍAS DE LA REGLA DE DISTRIBUCIÓN ELECTRÓNICA

No todos los átomos siguen la regla de AUFBAU en la distribución electrónica. Existen particularidades en la distribución electrónica de algunos elementos. La más común es la distribución de un átomo neutro cuyo último término es el subnivel  $d^4$  o  $d^9$ , en la cual se produce un salto electrónico para transformar dichos subniveles en  $d^5$  o  $d^{10}$ , respectivamente. Los elementos que se caracterizan por esta distribución son  ${}_{24}\text{Cr}$ ,  ${}_{42}\text{Mo}$  ( $d^4$ ) y  ${}_{29}\text{Cu}$ ,  ${}_{47}\text{Ag}$ ,  ${}_{79}\text{Au}$  ( $d^9$ ).

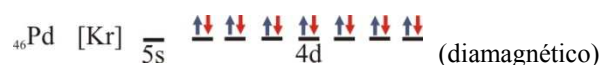
	INCORRECTO	$[\text{Ar}] 4s^2 3d^4$
${}_{24}\text{Cr}$	CORRECTO	$[\text{Ar}] 4s^1 3d^5$



Otro tipo de anomalía importante es la que se presenta en el átomo de paladio ( ${}_{46}\text{Pd}$ ), el cual exhibe diamagnetismo. Dicha propiedad no puede ser explicada si se considera la siguiente distribución electrónica, en la cual el átomo se muestra como paramagnético.



La distribución electrónica que permite explicar el diamagnetismo de esta especie es aquella en la que los electrones del orbital 5s han sido promovidos al subnivel 4d.



qmk-com-level