Orbitales Atómicos

En 1.927 pudo comprobarse experimentalmente la hipótesis de De Broglie al observarse un *comportamiento ondulatorio de los electrones en los fenómenos de difracción.*

Un electrón que se mueve alrededor de núcleo puede considerarse ligado a él y podemos describir su movimiento ondulatorio mediante la ecuación de ondas.

Con esta idea, Schrödinger realizó un estudio matemático del comportamiento del electrón en el átomo y obtuvo una expresión, conocida como *ecuación de Schrödinger*.

Podemos decir que un *orbital atómico es una zona del espacio donde existe una alta probabilidad (superior al 90%) de encontrar al electrón*. Esto supone considerar al electrón como una nube difusa de carga alrededor del núcleo con mayor densidad en las zonas donde la probabilidad de que se encuentre dicho electrón es mayor.

Para que la ecuación de Schrödinger tenga significado físico es necesario imponerle unas restricciones que son conocidas como *números cuánticos*, que se simbolizan de la misma forma que los obtenidos en el modelo atómico de Bohr:

n : número cuántico principal
l : número cuántico del momento angular orbital
m : número cuántico magnético
s : número cuántico del spin electrónico

Estos números cuánticos sólo pueden tomar ciertos valores permitidos:

para n : números enteros 1, 2, 3,…
para l : números enteros desde 0 hasta (n-1)
para m : todos los números enteros entre +l y -l incluido el 0
para s : sólo los números fraccionarios -1/2 y +1/2

Los valores del número cuántico n indican el tamaño del orbital, es decir su cercanía al núcleo.
Los valores del número cuántico l definen el tipo de orbital:

Si l = 0 el orbital es del tipo *s*
Si l = 1 los orbitales son del tipo *p*
Si l = 2 los orbitales son del tipo *d*
Si l = 3 los orbitales son del tipo *f*

Las letras *s, p, d, f* identificativas de los tipos de orbitales proceden de los nombres que recibieron los distintos grupos de líneas espectrales relacionadas con cada uno de los orbitales:

sharp : líneas nítidas pero de poca intensidad
principal : líneas intensas
difuse : líneas difusas
fundamental : líneas frecuentes en muchos espectros

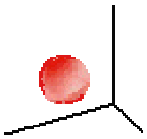
Son posibles otros tipos de orbitales como *g, h*, ...pero los elementos que conocemos, en sus estado fundamental, no presentan electrones que cumplan las condiciones cuánticas necesarias para que se den estos otros tipos de orbitales.

Los valores del número cuántico m hacen referencia a la orientación espacial del orbital.
El cuarto número cuántico, s, que define a un electrón en un átomo hace referencia al momento angular de giro del mismo.

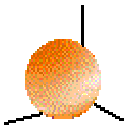
El conjunto de los cuatro números cuánticos definen a un electrón, no pudiendo existir en un mismo átomo dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales, por lo que una vez definido el tamaño, el tipo y la orientación de un orbital con los tres primeros números cuánticos, es decir los valores de n, l y m, sólo es posible encontrar un máximo de dos electrones en dicha situación que necesariamente tendrán valores diferentes de su número cuántico de spin.

Veamos los orbitales posibles según el valor de los números cuánticos:

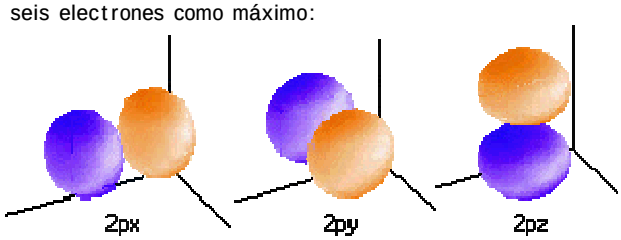
Si n = 1 entonces el número cuantico l sólo puede tomar el valor 0 es decir sólo es posible encontrar un orbital en el primer nivel energético en el que puede haber hasta dos electrones (uno con spin +1/2 y otro con spin -1/2). Este orbital, de apariencia esférica, recibe el nombre de 1s:



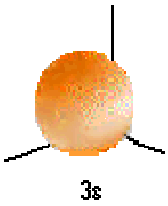
Si n = 2 , el número l puede tomar los valores 0 y 1, es decir son posibles los tipos de orbitales *s* y *p*. En el caso de que sea l = 0, tenemos el orbital llamado 2s en el que caben dos electrones (uno con spin +1/2 y otro con spin -1/2):



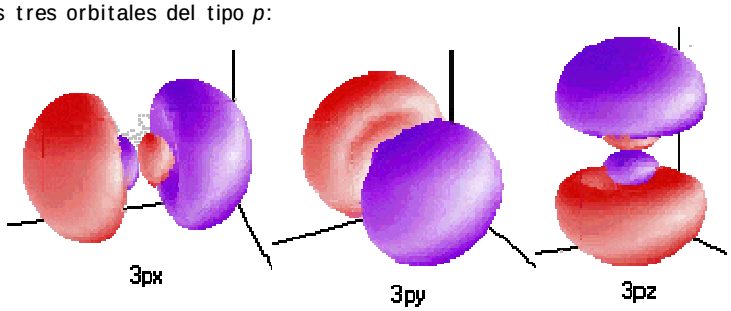
Si l = 1 tendremos orbitales del tipo *p* de los que habrá tres diferentes según indicarían los tres valores (+1, 0, -1) posibles del número cuántico m, pudiendo albergar un máximo de dos electrones cada uno, con valores de spin +1/2 y -1/2, es decir seis electrones como máximo:



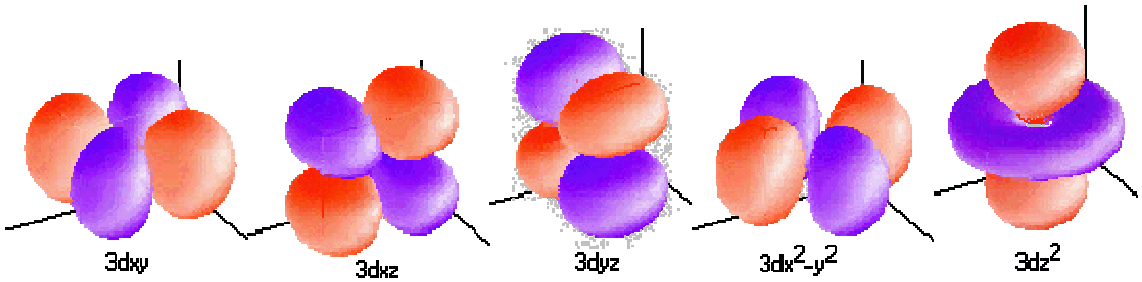
Si n = 3 son posibles tres valores del número cuántico l: 0,1 y 2. Si l = 0 tendremos de nuevo un orbital del tipo *s*:



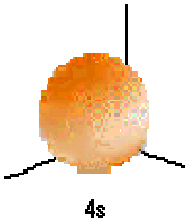
si l = 1 tendremos los tres orbitales del tipo *p*:



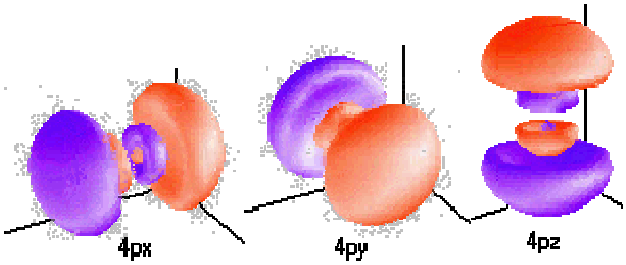
y si l = 2 los orbitales serán del tipo *d*, de los que habrá cinco diferentes según indican los cinco valores posibles (+2, +1, 0, -1, -2) para el número cuántico m y que podrán albergar un total de diez electrones:



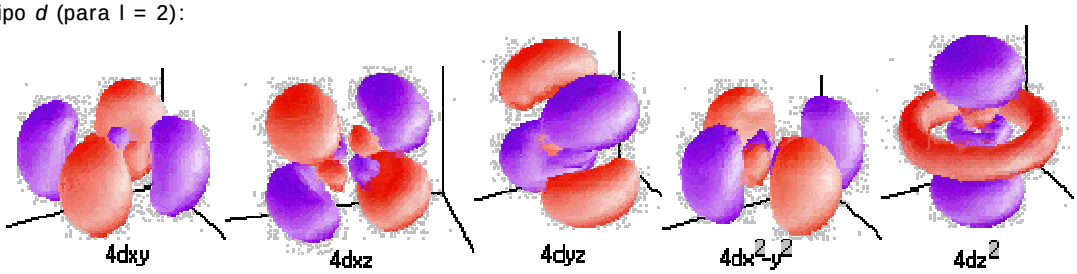
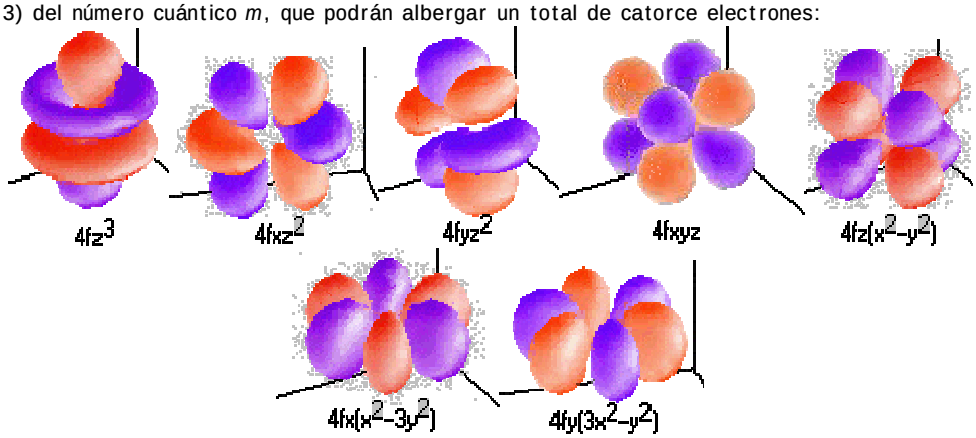
Si n = 4, son posibles cuatro tipos de orbitales diferentes. De tipo *s* (para l = 0):



De tipo *p* (para l = 1):



De tipo *d* (para l = 2):



De tipo *f* (para l = 3) de los que habrá siete diferentes según indican los siete valores posibles (+3, +2, +1, 0 -1, -2, -3) del número cuántico *m*, que podrán albergar un total de catorce electrones: