

MODELOS ATÓMICOS

Desde la aparición de la teoría atómica de Dalton hasta nuestros días, han sido muchos los experimentos realizados sobre la materia y muchos los datos así obtenidos. Estos datos experimentales han llevado a pensar o idear un cierto modelo de la estructura de la materia, de la unidad material elemental llamada átomo.

A mediados del siglo XIX se tenía ya la evidencia de que el átomo no era indivisible como propuso Dalton, sino que estaba formado por partículas.

Vamos a recordar algunos de estos aspectos experimentales sobre la materia, insistiendo más en las consecuencias que de ellos se derivan que en la minuciosidad de los experimentos en sí.

DATOS EXPERIMENTALES SOBRE LA ESTRUCTURA DE LA MATERIA

A) Descargas eléctricas en gases enrarecidos

Los gases son ordinariamente aislantes desde el punto de vista eléctrico. Pero cuando se les somete a alto voltaje y a una presión inferior a 0,01 atm, los gases conducen la corriente eléctrica, emitiendo también luz.

Lo más curioso de los experimentos hechos con diferentes gases es que todos presentaban un comportamiento común a presiones de 10^{-4} mm de Hg; en todos ellos aparecía una radiación fluorescente que se dirigía en línea recta del cátodo al ánodo y que se les llamó rayos catódicos. Experimentos posteriores de JJ Thomson determinaron algunas características de los rayos catódicos:

-Tenían carga negativa.

--Poseían masa, por lo tanto eran partículas.

-Se pudo obtener la relación q/m para ellos.

Una vez que se conoció la relación q/m , se intensificaron las investigaciones para obtener el valor de su carga absoluta. Fue Millikan, con repetidos experimentos con su célebre cámara de la gota de aceite, el que la determinó, encontrando que su carga es de $1,6 \cdot 10^{-19}$ C. Conocida su carga, se determinó su masa: $9,1 \cdot 10^{-31}$ Kg.

Se había identificado un nuevo tipo de partícula constituyente de los átomos: los **electrones**. Con esto quedó desterrada la idea de Dalton de la indivisibilidad del átomo. Junto con los rayos catódicos, apareció una nueva radiación en un tubo de descarga de gases. Tal radiación se identificó bastantes años más tarde y presentaba las siguientes características:

-Está formada por partículas que tienen más masa que los rayos catódicos

-Están cargada positivamente.

--Tal radiación recibió el nombre de rayos canales. Cuando el gas encerrado era el hidrógeno, se obtenían las partículas positivas de menos masa., a las que se llamó **protones**. Su carga era igual a la de los electrones en valor absoluto y eran más pesados con una masa de $1,67 \cdot 10^{-27}$ Kg.

Por tanto, en conclusión: podemos decir que la experiencia de la descarga eléctrica en tubos de gases enrarecidos nos proporciona los siguientes datos sobre la estructura de la materia:

-El átomo contiene partículas subatómicas

-Algunas de ellas poseen carga negativa: son los electrones.

-El resto del átomo posee carácter positivo.

-Dado el carácter eléctricamente neutro de cualquier átomo, habrá que pensar que el nº de protones debe ser igual al de electrones.

Modelo de Thomson (1897)

Imagina el átomo como una esfera maciza con carga positiva. Los electrones, diminutas partículas con carga eléctrica negativa, están incrustadas en una nube de carga positiva de forma similar a las pasas en un pastel (modelo de "pastel de pasas")

Modelo de átomo planetario (Rutherford, 1911)

Rutherford realiza en **1911** un experimento crucial con el que trataba de comprobar la validez del modelo atómico de Thomson.

Partículas alfa (núcleos de helio con carga positiva) procedentes de un material radiactivo, se aceleran y se hacen incidir sobre una lámina de oro muy delgada, visualizándose la dirección en la que emergen tras atravesar los átomos de la lámina. Encontró que la mayoría de las partículas atraviesan el metal sin desviarse, unas pocas se desvían ligeramente de su trayectoria original y una pequeñísima proporción retroceden.

El análisis de los resultados obtenidos lleva a Rutherford a proponer la existencia de un **núcleo (muy pequeño** en relación con el volumen total del átomo) en el que se concentra la práctica totalidad de la masa del átomo, y cuya carga positiva compensará la negativa de los **electrones corticales que giran alrededor del núcleo** de forma análoga a como los planetas orbitan alrededor del Sol .

El **neutrón** fue propuesto también por Rutherford en 1920, siendo identificado por J. Chadwick en 1932.

El diámetro de un átomo típico es del orden de 10^{-10} m , mientras que **el núcleo atómico es 10000 veces más pequeño** (10^{-14} m).

La crisis del modelo de Rutherford

El modelo de átomo planetario propuesto por Rutherford mostró pronto algunos inconvenientes teóricos que lo hacían inviable:

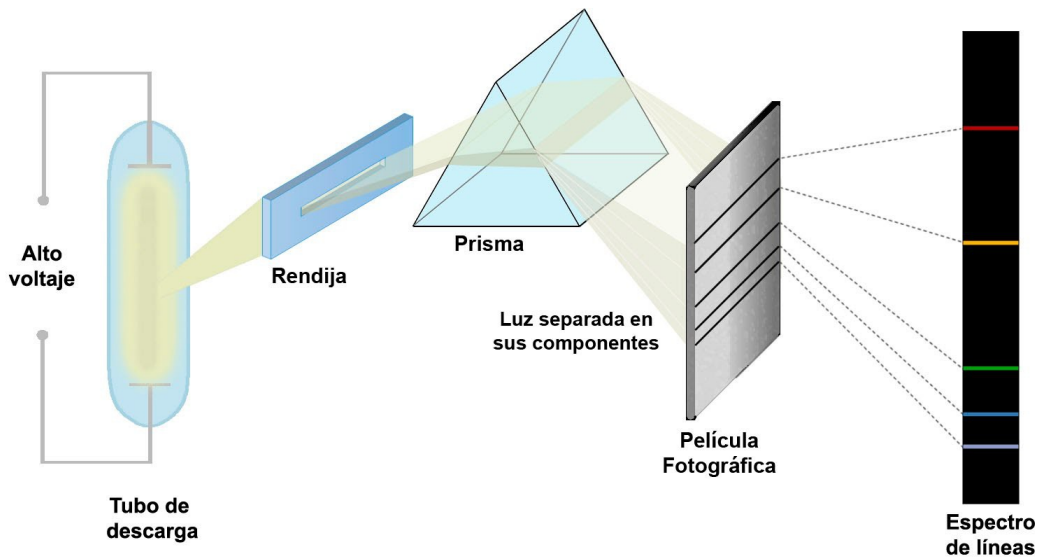
- Contradecía la teoría electromagnética de Maxwell.

Según esta teoría una carga eléctrica acelerada debería de emitir energía de modo continuo.

Un electrón al girar en círculos tiene aceleración normal y debería emitir, por tanto, energía. *Dicha emisión provocaría una pérdida de energía que haría que el electrón describiera órbitas de radio decreciente hasta caer sobre el núcleo. El modelo atómico de Rutherford era, por tanto, inviable desde el punto de vista de la física clásica.*

- No daba una explicación satisfactoria a los espectros atómicos.

Otra técnica fundamental para la investigación de la estructura atómica es, sin duda, la espectroscopía. En 1859, Bunsen y Kirchoff estudiaron lo que ocurre cuando calientan diferentes muestras de material atómico comunicándoles suficiente energía (normalmente se les somete a elevados voltajes) , observando que emiten luz, esto es radiación. Si hacemos pasar esa luz emitida a través de un prisma, se descompondrá la luz en las diferentes frecuencias que las constituyen dándonos el espectro .



Descubren:

- Los espectros observados son discontinuos (espectros de líneas o de rayas).
- . Los átomos del elemento sólo desprenden unos tipos de luz determinados, y no otros.
- Cada elemento químico tiene su propio espectro característico (es su huella digital).

Lo verdaderamente importante es comprobar que :

Cada elemento sólo puede emitir o absorber unas radiaciones concretas, que son específicas de cada átomo.

Estas características no habían podido ser explicadas con los modelos atómicos de Dalton o Thomsom. El modelo de Rutherford era incapaz de explicar por qué emiten sólo unas radiaciones, y no otras. **Parece ser que los electrones sólo tienen permitido dar ciertos saltos entre órbitas.**

Al existir esta discontinuidad en las líneas, parece que los electrones no pueden dar cualquier salto dentro del átomo, no pueden desprender cualquier cantidad de energía. Todo parece indicar que los electrones no pueden estar en cualquier órbita, sino a unas distancias determinadas.

El inicio de la Física Cuántica. Modelo atómico de Bohr

Con el fin de resolver los problemas acumulados sobre el modelo de átomo planetario, y para explicar el espectro del átomo de hidrógeno, Niels Bohr, físico danés, propone en 1913 un nuevo modelo atómico sustentado en tres postulados:

1. Los electrones giran en órbitas circulares entorno al núcleo y cualquiera que sea la órbita descrita por un electrón, éste no emite energía. Las órbitas son consideradas como estados estacionarios de energía. A cada una de ellas le corresponde una energía, tanto mayor, cuanto más alejada se encuentre del núcleo.

2. No todas las órbitas son posibles. Únicamente pueden existir aquellas órbitas para las cuales el momento angular del electrón sea un múltiplo entero de la constante de Plank reducida:

$$m \cdot v \cdot r = n \cdot h / 2\pi \quad n = 1,2,3,4,5$$

El número, **n**, que determina las órbitas posibles, se denomina **número cuántico principal**

y sólo puede tomar valores enteros y positivos

Las órbitas que se correspondan con valores no enteros del número cuántico principal, *no existen*.

3. La energía liberada al caer un electrón desde una órbita superior, de energía E_2 , a otra inferior, de energía E_1 , se emite en forma un cuanto de luz (fotón). La frecuencia (ν) viene dada por la expresión:

$$E = h \cdot \nu$$

h (constante de Planck) = $6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s

ν : frecuencia de la radiación emitida

Los cálculos basados en los postulados de Bohr daban excelentes resultados a la hora de interpretar el espectro del átomo de hidrógeno,.

Pese al éxito inicial, pronto la teoría de Bohr topó con ciertas dificultades, incluso para el mismo espectro del átomo de H que tan bien explicaba al principio. Cuando se dispuso de mejores medios técnicos, lo que parecía una línea en el espectro era varias. Por tanto había más niveles de energía que los propuestos por Bohr.

Además cuando el espectro se hacía en presencia de un campo magnético, las líneas del espectro se desdoblaron. Todo esto el modelo de Bohr no lo podía explicar. Y hay que tener en cuenta que contradecía algunas de las leyes más asentadas de la Física:

- **El primer postulado iba en contra de la teoría electromagnética de Maxwell**, ya que según esta teoría cualquier carga eléctrica acelerada debería de emitir energía en forma de radiación electromagnética.
- **El segundo postulado era aún más sorprendente**. En la física clásica era inaceptable suponer que el electrón no pudiera orbitar a determinadas distancias del núcleo, o que no pudiera tener determinados valores de energía.
- **El tercer postulado afirmaba que la luz se emitía en forma de pequeños paquetes o cuantos**, lo cual a pesar de que ya había sido propuesto por Planck en 1900, no dejaba de sorprender en una época en la que la idea de que la luz era una onda estaba firmemente arraigada.

El átomo de Bohr era, simplemente, un síntoma de que la física clásica, que tanto éxito había tenido en la explicación del mundo macroscópico, no servía para describir el mundo de lo muy pequeño, el dominio de los átomos.

Posteriormente, en la década de 1920, una nueva generación de físicos (Schrödinger, Heisenberg, Dirac...) elaborarán una nueva física, la Física Cuántica, destinada a la descripción de los átomos, que supuso una ruptura con la física existente hasta entonces

NUEVA VISIÓN DE LA ESTRUCTURA DEL ÁTOMO : MECÁNICA CUÁNTICA.

Para resolver estas cuestiones, **Heisenberg** y **Schrödinger** propusieron en 1923, unos puntos de partida diferentes a los de la mecánica clásica: el principio de dualidad onda-partícula de De Broglie y el principio de incertidumbre de Heisenberg.

-En el primero, se suponía que las partículas podían comportarse como ondas:

Formulado por De Broglie en 1924.

“Cada partícula lleva asociada una onda”

La longitud de onda asociada se puede calcular como: $\lambda = h/p$

h = cte de Planck = $6,63 \cdot 10^{-34}$ J·s;

p = cantidad de movimiento = $m \cdot v$ (Kg·m·s⁻¹)

Las propiedades ondulatorias de las partículas solo son observables para partículas muy pequeñas y a gran velocidad .

-En el segundo formulado por Heisenberg en 1927:

“Es imposible conocer simultáneamente la posición y la cantidad de movimiento de una partícula”

Expresa la imposibilidad de conocer con precisión la posición y la velocidad de una partícula. Esto sólo es relevante para partículas de poca masa (como el electrón).

Se postula la imposibilidad de conocer con exactitud y simultáneamente la posición y velocidad del electrón. Esto descarta la idea de radio de la órbita de Bohr, no podemos conocer exactamente la posición del electrón, sino que podremos determinar sólo la probabilidad de que esté en una determinada zona. Heisenberg demuestra, en 1927, que es imposible conocer simultáneamente y con exactitud ciertas magnitudes de las partículas. En concreto, es imposible conocer al mismo tiempo y con exactitud la posición (la órbita) y la velocidad de los electrones (la naturaleza no lo permite, al intentar medir una de las magnitudes, modificamos la otra y ya no podemos medirla). Siempre habrá un cierto error, una indeterminación.

Como consecuencias de esto, ya no podemos hablar de órbitas bien definidas para los electrones. Ahora, a un electrón que tenga cierta energía no le corresponde una cierta órbita, sino una zona donde es probable que se encuentre. **Podemos conocer y encontrar únicamente la probabilidad de encontrar a la partícula en una determinada zona del espacio.** Se pasa de una mecánica determinista (el electrón está aquí,) a una de probabilidad: el electrón es probable que esté aquí.

En 1927 **Schrödinger**, dió a conocer un nuevo modelo basándose en estos principios:

Schrödinger, desarrollando la teoría de De Broglie, **considera al electrón como una onda e intenta obtener la correspondiente ecuación.**

En 1925 propone la llamada **ecuación de onda para un electrón** que describe su comportamiento en el átomo de hidrógeno.

La **resolución** de la ecuación de onda, que se resuelve aplicando cálculo diferencial que no está a nuestro alcance, permite obtener un conjunto de **soluciones** llamadas funciones de onda , a los que corresponden unos determinados valores de energía. A estas funciones matemáticas se les llamó **orbitales atómicos** que se definen como la zona del espacio donde la posibilidad de encontrar al electrón es máxima (del 99%). Los orbitales atómicos, describen el comportamiento del electrón y permite calcular su energía.

La variación del modelo de Schrödinger con respecto al de Bohr es sustancial:

-No se habla del electrón como una partícula, sino como una nube eléctrica.

-No se habla de órbitas fijas, sino de orbitales o zonas de probabilidad de encontrar al electrón.

Al resolver la ecuación de onda, ve que los orbitales llevan asociados unos **números** , llamados **números cuánticos que sólo pueden tomar ciertos valores: n, l y m** .**La energía de los electrones está cuantizada, esto es, sólo puede tomar ciertos valores: la cuantización de la energía surge de la propia teoría, no se impone como ocurría en el modelo de Bohr.**

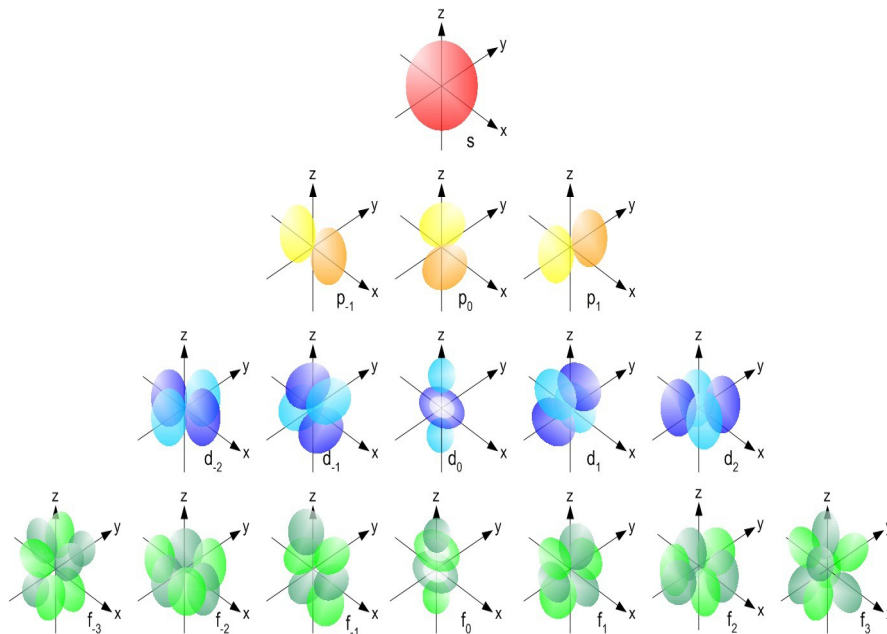
Número cuántico	Valores posibles	
$n=n^{\circ}$ cuántico principal	1,2,3,4,5.....(enteros positivos)	
$l=n^{\circ}$ cuántico secundario	Desde 0 hasta $n-1$	$l=0$ orbital s
		$l=1$ orbital p
		$l=2$ orbital d
		$l=3$ orbital f
$m= n^{\circ}$ cuántico magnético	Desde $-l.....0.....+l$	

La combinación de los tres números cuánticos nos proporciona un orbital (n,l,m)

Significado de los números cuánticos

Número cuántico n : es el n° de capa o nivel en la que está situado el electrón. Determina la **energía** del orbital , su **tamaño**(a mayor valor de n mayor tamaño) y su cercanía al núcleo.

Número cuántico l: representa el tipo de orbital (s, p,d,f) y su valor determina la **forma** del orbital .



Los más interesantes para nuestro nivel son los orbitales **s** : **son esféricos** y los orbitales **p** , **lobulares** y **dirigidos a lo largo de los 3 ejes** coordenados.

Número cuántico magnético m : determina la **orientación del orbital en el espacio** .

Veamos cómo se obtienen los números cuánticos de cada orbital.

Veamos cómo se combinan estos números cuánticos para obtener los diferentes orbitales:

n	l	m	Orbital	nombre		
1	0	0	(1,0,0)	Un orbital 1s		
2	0	0	(2,0,0)	Un orbital 2s		
		1	-1		(2,1,-1)	Tres orbitales 2p
			0		(2,1,0)	
			1		(2,1,1)	
3	0	0	(3,0,0)	Un orbital 3s		
		1	-1,0,1		(3,1,-1)	Tres orbitales 3p
					(3,1,0)	
					(3,1,1)	
3	2	-2,-1,0,1,2	(3,2,-2)	Cinco orbitales 3d		
			(3,2,-1)			
			(3,2,0)			
			(3,2,1)			
			(3,2,2)			
			(3,2,2)			

Más tarde se introdujo un nuevo número cuántico, **el número cuántico de spin, s**, que tiene en cuenta el **giro del electrón** sobre si mismo. Tal giro sólo puede ocurrir en dos direcciones y estas están determinadas por los **dos únicos valores posibles** que puede tomar este número cuántico

s : número cuántico de spin : $1/2$, $-1/2$

Conociendo los 4 números cuánticos queda completamente especificado el estado del electrón.

En estos orbitales es donde vamos a colocar los electrones de los átomos, obteniéndose las **configuraciones electrónicas**.

Para ello se siguen los siguientes principios:

Principio de exclusión de Pauli:

“En un mismo átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales”

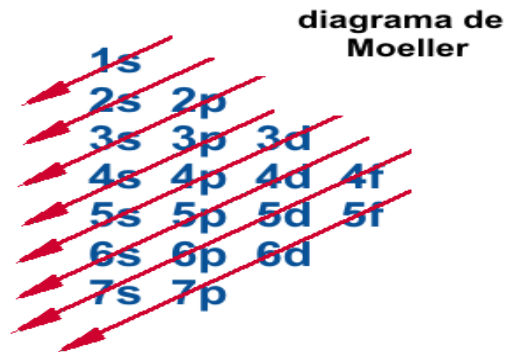
Por ello en un orbital especificado por 3 números cuánticos n, l y m, sólo son posibles dos combinaciones de los cuatro números cuánticos. Por tanto **en cada orbital sólo puede haber 2 electrones** :

(n,l,m)	(n,l,m,1/2)
	(n,l,m,-1/2)
Orbital	Electrones totales
Tipo “s”	Hay 1 orbital s : 2 electrones
Tipo “p”	Hay 3 orbitales p : caben 6 electrones
Tipo “d”	Hay 5 orbitales d : caben 10 electrones
Tipo “f”	Hay 7 orbitales f: caben 14 electrones

Principio de mínima energía (aufbau)

Los electrones se colocan siguiendo el criterio de mínima energía:es decir se rellenan primero los niveles con menor energía.

No se rellenan niveles superiores hasta que no estén completos los niveles inferiores.
 Para seguir el **orden de llenado** de mínima energía se usa el **diagrama de Moeller**



Principio de máxima multiplicidad (regla de Hund)

Cuando un nivel electrónico tenga varios orbitales con la misma energía, los electrones se van colocando **desapareados** en ese nivel electrónico. Siempre se colocarán de la forma más desapareada posible.

No se coloca un segundo electrón en uno de dichos orbitales hasta que todos los orbitales de dicho nivel están semicupados

${}^7\text{N}$ $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ Tiene 3 electrones desapareados

${}^8\text{O}$ $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$ Tiene 2 electrones desapareados

${}^9\text{F}$ $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$ Tiene 1 electrón desapareado

${}^{10}\text{Ne}$ $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$ No tiene electrones desapareados

Las configuraciones electrónicas así obtenidas son las que se corresponden al estado fundamental del átomo; esto es, al estado de mínima energía.

Cualquier otra configuración donde uno o más electrones estén en niveles superiores de energía se corresponden con estados excitados del átomo:

${}^8\text{O}$ $1s^2 2s^2 2p^4$ (fundamental)

${}^8\text{O}^*$ $1s^2 2s^2 2p^3 3s^1$ (excitado)