

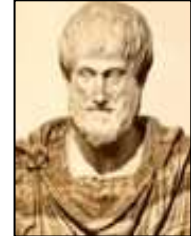
1. Modelos atómicos

En la antigua Grecia dos concepciones compitieron por dar una interpretación racional a cómo estaba formada la materia.



Demócrito
(460-370 a.c.)

Demócrito consideraba que la materia estaba formada por pequeñas partículas indivisibles, llamadas átomos. Entre los átomos habría vacío.



Aristóteles
(384-322 a.C)

Aristóteles era partidario de la teoría de los cuatro elementos, según la cual toda la materia estaría formada por la combinación de cuatro elementos: aire, agua, tierra y fuego.

La teoría de los cuatro elementos fue la aceptada durante muchos siglos. Siguiendo la teoría aristotélica **los alquimistas** (que están considerados como los primeros químicos) intentaban obtener la Piedra Filosofal que les permitiría transmutar los metales en oro, curar cualquier enfermedad y evitar, incluso, la vejez y la muerte.

Su incesante trabajo en el laboratorio dio como fruto la invención o perfeccionamiento de muchos procedimientos aún hoy usados en los laboratorios (entre ellos la destilación), la síntesis de numerosos compuestos (como el ácido clorhídrico, sulfúrico o nítrico), el descubrimiento de técnicas metalúrgicas, la producción de tintes, pinturas o cosméticos... etc.



John Dalton (1766-1844)

En 1808 John Dalton (1766-1844) recupera la teoría atómica de Demócrito y considera que los átomos (partículas indivisibles) eran los constituyentes últimos de la materia que se combinaban para formar los compuestos.

J.J Thomson. En 1897 los experimentos realizados sobre la conducción de la electricidad por los gases dieron como resultado el descubrimiento de una nueva partícula con carga negativa: el electrón.

Los rayos catódicos, estaban formados por electrones que saltan de los átomos del gas que llena el tubo cuando es sometido a descargas eléctricas.

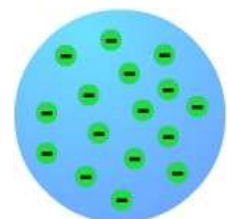
Los átomos, por tanto, no eran indivisibles.

J.J Thomson propone entonces el primer modelo de átomo:

Los electrones (pequeñas partículas con carga negativa) se encontraban incrustados en una nube de carga positiva. La carga positiva de la nube compensaba exactamente la negativa de los electrones siendo el átomo eléctricamente neutro.



J. J. Thomson (1856-1940)

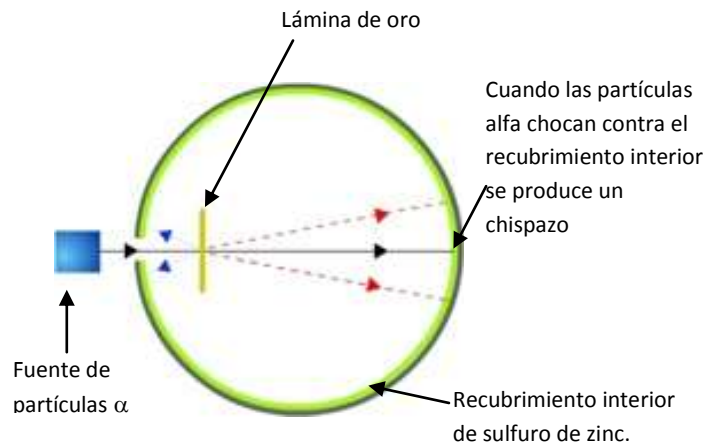


Ernest Rutherford realiza en 1911 un experimento crucial con el que se trataba de comprobar la validez del modelo atómico de Thomson.

Un esquema del montaje experimental usado se muestra más abajo:

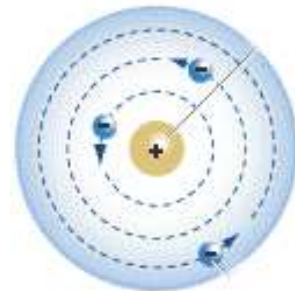
Las partículas alfa (α)($2P^+ + 2n^0$), procedentes de un material radiactivo, se aceleran y se hacen incidir sobre una lámina de oro muy delgada. Tras atravesar la lámina las partículas α chocan contra una pantalla recubierta interiormente de sulfuro de zinc, produciéndose un chispazo. De esta forma era posible observar si las partículas sufrían alguna desviación al atravesar la lámina.

- La mayor parte de las partículas atravesaban la lámina de oro sin sufrir ninguna desviación.
- Muy pocas (una de cada 10.000 aproximadamente) se desviaba un ángulo mayor de 10° (trazo a rayas)
- En rarísimas ocasiones las partículas α rebotaban (líneas de puntos)



La interpretación dada por Rutherford fue la siguiente:

- Si el modelo atómico propuesto por Thomson fuera cierto no deberían observarse desviaciones ni rebotes de las partículas incidentes. Éstas atravesarían limpiamente los átomos sin desviarse.
- Para que las partículas se desvíen deben encontrar en su trayectoria una zona (núcleo) en la que se concentre carga de signo positivo y cuya masa sea comparable o mayor a la de las partículas α .
- La zona en la que se concentra la masa y la carga positiva debería de ser muy pequeña comparada con la totalidad del átomo.
- Los electrones orbitan en círculos alrededor del núcleo.



Modelo atómico de Rutherford

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

- Un electrón al girar en círculos alrededor del núcleo debería emitir, por tanto, ondas electromagnéticas. Dicha emisión provocaría una pérdida de energía que haría que el electrón describiera órbitas de radio decreciente hasta caer sobre el núcleo.
- *No daba una explicación satisfactoria a los espectros atómicos.* Si encerramos en un tubo hidrógeno o helio y sometemos el gas a voltajes elevados, el gas emite luz. Si hacemos pasar esa luz a través de un prisma, los colores que la constituyen se separan dándonos el espectro de la luz analizada.



Espectro continuo. Se observan todos los colores que el ojo puede percibir.



Espectros de emisión de H (arriba) y del He (abajo). No son continuos. Constan de rayas de diversos colores separadas por amplias zonas negras en las que no se observa luz.

Pronto se concluyó que la emisión de luz podría deberse a que los electrones absorbían energía de la corriente eléctrica y saltaban a órbitas superiores para, a continuación, volver a caer a las órbitas más próximas al núcleo emitiendo el exceso de energía en forma de energía luminosa.

El inicio de la Física Cuántica. Modelo atómico de Bohr (1913)

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 propone en 1913 un nuevo modelo atómico sustentado en tres postulados:



Niels Bohr (1885-1962)

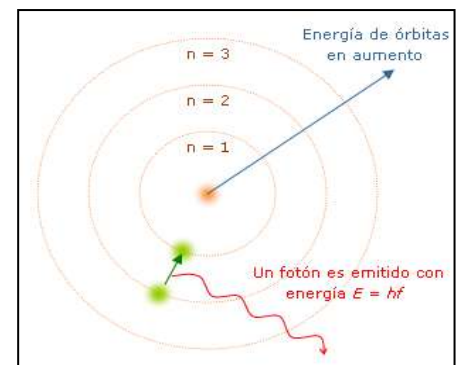
- Cualquiera que sea la órbita descrita por un electrón, éste no emite energía.** Las órbitas son consideradas como estados estacionarios de energía. A cada una de ellas le corresponde una energía, tanto mayor, cuanto más alejada se encuentre del núcleo.
- No todas las órbitas son posibles.** Sólo pueden existir aquellas órbitas que tengan ciertos valores de energía, dados por el **número cuántico principal, n**. Solamente son posibles las órbitas para las cuales el número cuántico principal (n) toma valores enteros: $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Las órbitas que se correspondan con valores no enteros del número cuántico principal, no existen.
- 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 de luz. La frecuencia (f) de la luz viene dada por la expresión:**

$$E_2 - E_1 = h f$$

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

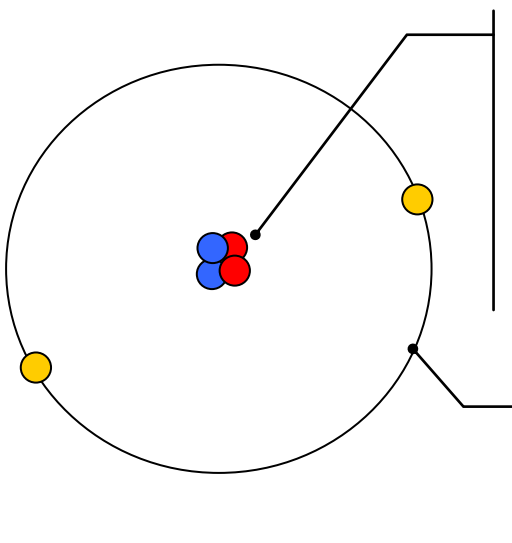
El átomo de Bohr era, simplemente, un síntoma de que la física clásica, que tanto éxito había tenido en la explicación del mundo macroscópico, no servía para describir el mundo de lo muy pequeño, el dominio de los átomos.

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.



Modelo atómico de Bohr (1913)

2. Átomo, conceptos fundamentales



Núcleo

- Dimensiones muy reducidas (10^{-14} m) comparadas con el tamaño del átomo (10^{-10} m).
- En el núcleo radica la masa del átomo.
- Partículas: **protones y neutrones** (nucleones). El número total de nucleones viene dado por el **número másico, A**.
- Los nucleones están unidos muy fuertemente por la llamada “fuerza nuclear fuerte”.
- **El número de protones del núcleo es lo que distingue a un elemento de otro.**
- **El número atómico, Z**, nos da el número de protones del átomo y el número de la casilla que éste ocupa en el S.P.

Corteza

- Los electrones orbitan en torno al núcleo.
- Los electrones (carga -) son atraídos por el núcleo (carga +).
- **El número de electrones coincide con el de protones, por eso los átomos, en conjunto, no tienen carga eléctrica.**

- Los átomos de elementos distintos se diferencian en que tiene distinto número de protones en el núcleo (distinto Z).
- Los átomos de un mismo elemento no son exactamente iguales, aunque todos poseen el mismo número de protones en el núcleo (igual Z), pueden tener distinto número de neutrones (distinto A).
- El número de neutrones de un átomo se calcula así: **$n = A - Z$**
- Los átomos de un mismo elemento (igual Z) que difieren en el número de neutrones (distinto A), se denominan **isótopos**.
- Todos los isótopos tienen las mismas propiedades químicas, solamente se diferencian en que unos son un poco más pesados que otros. Muchos isótopos pueden desintegrarse espontáneamente emitiendo energía. Son los llamados **isótopos radioactivos**

CARACTERÍSTICAS DE LAS PARTÍCULAS ATÓMICAS

Protón: $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg = 1,007 u ; $q_p = +1,60 \cdot 10^{-19}$ C

Neutrón: $m_n = 1,68 \cdot 10^{-27}$ kg = 1,009 u ; $q_n = 0$

Electrón: $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg = 0,0005 u ; $q_e = -1,60 \cdot 10^{-19}$ C

Observa que $m_p \approx 1800 m_e$

$$m_p \approx m_n$$

$q_p = q_e$ (aunque con signo contrario)

NOMENCLATURA DE LOS ÁTOMOS (ISÓTOPOS)

nº másico

nº atómico (se puede obviar)



Símbolo del átomo

Ejemplos:

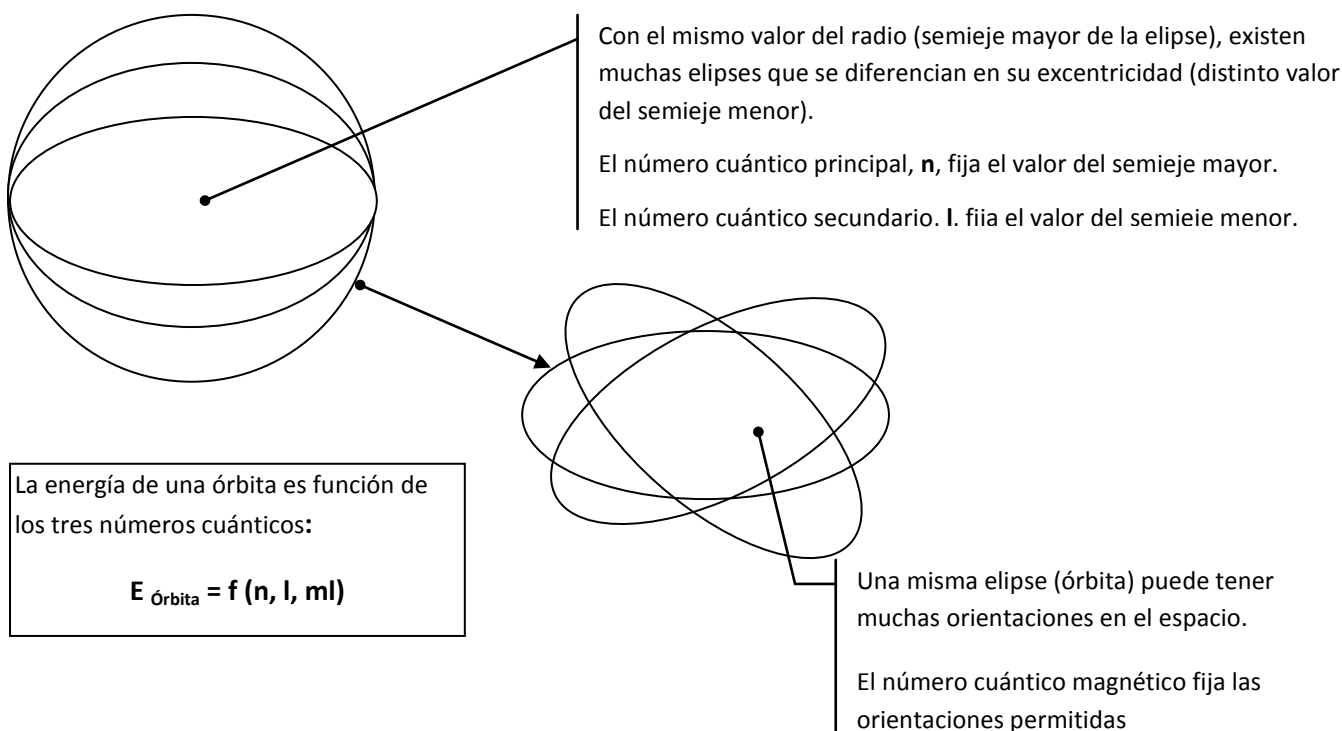
${}^4\text{He}$: Helio- 4

${}^{14}\text{C}$: Carbono- 14

${}^{235}\text{U}$: Uranio- 235

3. Átomo, estructura de la corteza

- Los electrones del átomo se distribuyen en órbitas o capas alrededor del núcleo, aunque no todas las órbitas (y en consecuencia los valores de energía asociados) pueden existir (postulados de Bohr).
- La última capa, o capa más externa, recibe el nombre de “**capa de valencia**” y los electrones situados en ella “**electrones de valencia**”.
- Sommerfeld (en 1916) perfeccionó el átomo de Bohr considerando que al estar sometido el electrón a una fuerza inversamente proporcional al cuadrado de la distancia (ley de Coulomb) debería de describir una elipse y no una circunferencia.
- Según la teoría cuántica un electrón no puede poseer valores arbitrarios de energía cuando orbita alrededor del núcleo, hay valores permitidos y valores prohibidos. **La energía está “cuantizada”**.
- El valor de la energía para un electrón situado en determinada órbita es, en consecuencia, función de tres números cuánticos:
n : Número cuántico principal. Cuantiza (fija) el radio mayor de la órbita (elipse).
l : Número cuántico secundario. Cuantiza (fija) el radio menor de la órbita (elipse).
ml: Número cuántico magnético. Cuantiza (fija) la orientación de la órbita en el espacio.



Si ahora consideramos al electrón como una partícula situada en determinada órbita, a la energía de la órbita hemos de sumar una energía propia del electrón (podemos imaginar que el electrón gira sobre su propio eje). Esta energía está también cuantizada (es decir, no puede tomar cualquier valor) y es función de un cuarto número cuántico, **s**, llamado “spin”.

En resumen, la energía de un electrón situado en una órbita es función de cuatro números cuánticos: tres que fijan el valor de la energía de la órbita considerada; n , l y m , y el número cuántico de spin, s , que cuantiza la energía propia del electrón:

ESTRUCTURA ATÓMICA

FÍSICA Y QUÍMICA 1º DE BACHILLERATO

Como no todos los valores de energía son posibles, los números cuánticos deberán tener sólo ciertos valores:

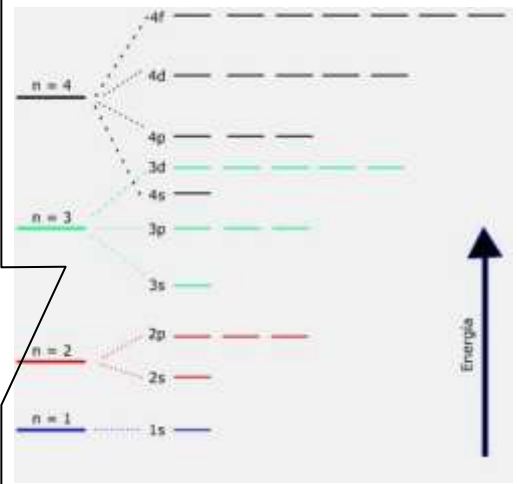
- El número cuántico principal puede tomar valores enteros: $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$
- El número cuántico secundario puede tomar valores desde 0 hasta $n - 1$: $l = 0 \dots n - 1$
- El número cuántico magnético puede tomar valores desde $-l$ a $+l$, incluyendo el valor cero: $-l \dots 0 \dots +l$
- El número cuántico de espín sólo puede tomar dos valores $-1/2$ y $+1/2$

A la hora de ir llenando con electrones los distintos estados de energía disponibles hay que tener en cuenta el llamado **Principio de Exclusión de Pauli**: "No pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales".

$$\begin{aligned}
 n = 1 &\rightarrow l = 0 \rightarrow m_l = 0 \\
 n = 2 &\rightarrow l = \begin{cases} l = 0 \rightarrow m_l = 0 \\ l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1 \end{cases} \\
 n = 3 &\rightarrow \begin{cases} l = 0 \rightarrow m_l = 0 \\ l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1 \\ l = 2 \rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \end{cases} \\
 n = 4 &\rightarrow \begin{cases} l = 0 \rightarrow m_l = 0 \\ l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1 \\ l = 2 \rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \\ l = 3 \rightarrow m_l = -3, -2, -1, \dots \end{cases} \\
 n = 5 &\rightarrow \begin{cases} l = 0 \rightarrow m_l = 0 \\ l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1 \\ l = 2 \rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \\ l = 3 \rightarrow m_l = -3, \dots -1 \dots \\ l = 4 \rightarrow m_l = -4, \dots -1 \dots \end{cases} \\
 n = 6 &\rightarrow \begin{cases} l = 0 \rightarrow m_l = 0 \\ l = 1 \rightarrow m_l = -1, 0, 1 \\ l = 2 \rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \\ l = 3 \rightarrow m_l = -3, \dots -1 \dots \\ l = 4 \rightarrow m_l = -4, \dots -1 \dots \\ l = 5 \rightarrow m_l = -5, \dots -1 \dots \end{cases}
 \end{aligned}$$

Obtención de los orbitales a partir de las combinaciones de números cuánticos. Cada trío (n, l, m) determina un orbital. Ej:
 $(1, 0, 0)$ = orbital 1s
 $(2, 0, 0)$ 2s
 $(3, 1, -1)$ 3p_x
 $(4, 0, 0)$ 4s
 $(4, 1, 1)$ 4p_z
 $(4, 2, -2)$ 4d
 $(4, 3, -3)$ 4f

Orden energético de llenado de orbitales. Se cumple la regla "n+l": a mayor suma de n^{os} cuánticos n+l más energía tiene el orbital, en caso de "empate" tiene más energía el de mayor n.
 Ej:
 3d: 3+2=5
 4s: 4+0=4
 4p: 4+1=5



Ejemplo de llenado de orbitales

FORMA DE INDICAR LA DISTRIBUCIÓN ELECTRÓNICA	ELEMENTO QUÍMICO	
	${}^2\text{He}$ 2 electrones	${}^3\text{Li}$ 3 electrones
Configuración electrónica	1s ²	1s ² 2s ¹
Diagrama orbital	$\uparrow\downarrow$ 1s	$\uparrow\downarrow$ 1s \uparrow 2s
Números cuánticos	$(1, 0, 0, +\frac{1}{2})$ $(1, 0, 0, -\frac{1}{2})$	$(1, 0, 0, +\frac{1}{2})$ $(2, 0, 0, +\frac{1}{2})$ $(1, 0, 0, -\frac{1}{2})$

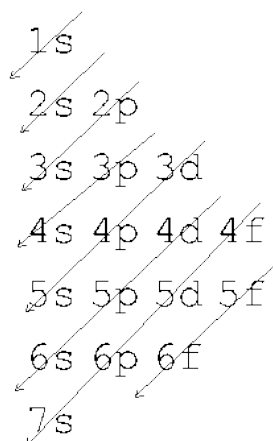
	s (l=0)	p (l=1)	d (l=2)	f (l=3)
n=1	$m=0$			
n=2	$m=0$	$m=-1$ $m=0$ $m=1$		
n=3	$m=0$	$m=-1$ $m=0$ $m=1$	$m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$	
n=4	$m=0$	$m=-1$ $m=0$ $m=1$	$m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$	$m=-3$ $m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$ $m=3$
n=5	$m=0$	$m=-1$ $m=0$ $m=1$	$m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$	
n=6	$m=0$	$m=-1$ $m=0$ $m=1$		
n=7	$m=0$			

Formas espaciales de los orbitales

Por razones históricas a los estados de energía correspondientes a los distintos valores del número cuántico secundario, l , se les denomina con las letras **s, p, d y f** y según lo visto se concluye que **en un estado "s" puede haber como máximo dos electrones, seis en uno "p", diez en un "d" y catorce en un "f"**:

Una vez que conocemos los distintos niveles de energía en los que pueden situarse los electrones el siguiente paso será calcular su energía y ordenarlos según un orden creciente.

Para recordar el orden de energía (de menor a mayor) se recurre al llamado **diagrama de Möeller**:



Orden de energía creciente: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p...

Se puede observar que a partir de la tercera capa estados con un valor de n superior (por ejemplo el 4s) tienen menos energía que otros con un valor de n inferior (por ejemplo el 3d)

Con todos estos datos la configuración electrónica de un átomo (esto es, la distribución de sus electrones entre los estados de energía posibles) se obtiene siguiendo las siguientes normas:

Para obtener la configuración electrónica de un átomo:

1. **Considerar el número de electrones que se deben distribuir.** Recordar que el número de electrones en un átomo neutro viene dado por el número atómico Z .
2. **Los electrones se van distribuyendo entre los estados de energía posibles llenando primero los de menor energía.** Cuando un nivel se complete, pasar al siguiente (recordar el principio de exclusión y para establecer el orden de llenado usar el diagrama de Möeller).

Ejemplos

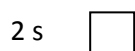
Ejemplos		
S	Z = 16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Ar	Z = 18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Ti	Z = 22	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$
Ga	Z = 31	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^1$
Br	Z = 35	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$
Pd	Z = 46	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^8$

Si queremos afinar un poco más en la configuración electrónica deberemos usar el **Principio de Máxima Multiplicidad o Regla de Hund que establece que a la hora de ocupar estados de energía degenerados (por ejemplo los tres estados "p") los electrones tienden a situarse en ellos de forma tal que su espín sea el mismo.**

Apliquemos esto para el átomo de nitrógeno ($Z=7$). Representaremos los estados posibles por cuadrados y el valor del espín por una flecha que apunta hacia arriba cuando el espín valga $+1/2$ y hacia abajo cuando valga $-1/2$

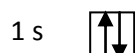


Los dos primeros electrones se sitúan en el estado de energía más bajo. Como han de respetar el principio de exclusión se colocan con "espines contrarios".



Los valores de los números cuánticos serán (n, l, m_l, s) :

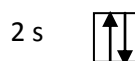
$$(1, 0, 0, +1/2)$$



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

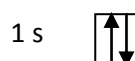


Proceso idéntico, los dos siguientes electrones se sitúan en el siguiente estado de energía. Para respetar el Principio de Exclusión se colocan con "espines contrarios".



Los valores de los números cuánticos serán (n, l, m_l, s) :

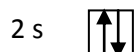
$$(2, 0, 0, +1/2)$$



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

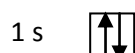


El quinto electrón puede situarse en cualquiera de los tres niveles de energía 2p, ya que todos ellos tienen la misma energía. Supongamos que se sitúa en el primero $(2, 1, 0, +1/2)$. El próximo electrón tiene ahora dos posibilidades: situarse en el mismo estado que el electrón precedente, para lo cual debería de "invertir" su espín para no tener los cuatro números cuánticos iguales, o situarse en otro nivel 2p (de igual energía) con el mismo espín. Esta última es la opción energéticamente más favorable (regla de Hund).

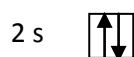


Los valores de los números cuánticos para los electrones quinto y sexto serán entonces (n, l, m_l, s) :

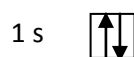
$$(2, 1, 0, +1/2)$$



El séptimo electrón repetirá lo dicho para el sexto. Esto es, se coloca en el tercer nivel 2p (de igual energía) con el mismo espín que los precedentes.



Los valores de los números cuánticos para los tres últimos electrones serán entonces (n, l, m_l, s) :



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

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

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

Es bien sabido que la configuración ns^2p^6 para la última capa (configuración de gas noble) es especialmente estable.

3. Átomo, Masas atómicas

Los átomos son extraordinariamente pequeños y su masa, en consecuencia, pequeñísima, tanto que si usamos como unidad para medirla las unidades de masa a las que estamos acostumbrados (kg), obtendríamos valores muy pequeños, difícilmente manejables. Por ejemplo, el átomo de hidrógeno tiene una masa de $1,66 \cdot 10^{-27}$ kg y el de carbono $2,00 \cdot 10^{-26}$ kg.

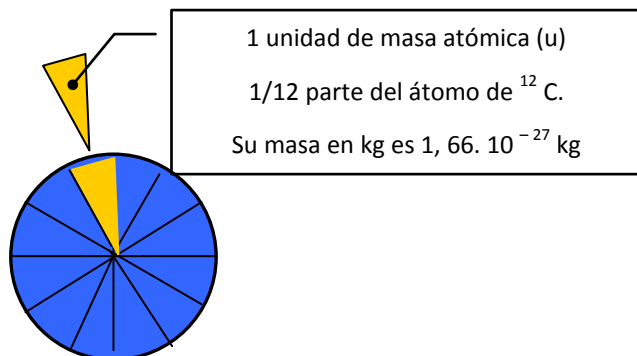
Por esta razón para medir la masa de los átomos se adopta una nueva unidad: **la unidad de masa atómica (u.m.a)**. La u.m.a se define de la siguiente manera:

Consideremos un átomo del isótopo más abundante de C, el ^{12}C , dividámoslo en doce partes iguales y tomemos una de ellas. La masa de esta parte sería la unidad de masa atómica (u. m .a).

"La unidad de masa atómica es la masa de la doceava parte del átomo de ^{12}C "

Considerando esta nueva unidad el ^{12}C tiene una masa de 12 u.

A la hora de calcular la masa de un elemento hay que tener en cuenta que no todos los átomos son iguales, ya que pueden existir varios isótopos. La masa se obtiene como masa ponderada de todos sus isótopos. Por eso las masas que se pueden leer en las tablas no son enteras.



La masa atómica de los elementos que aparece en las tablas es la masa atómica ponderada de sus isótopos.

Ejemplo.

El cloro se encuentra en la naturaleza como 75,53% de ^{35}Cl (34,97 u) y 24,47 % de ^{37}Cl (36,97 u).

La masa atómica del cloro será, por tanto: $(0,7553 \times 34,97) + (0,2447 \times 36,97) = 35,46$ u

Teniendo en cuenta lo anterior podríamos preguntarnos:

¿Cuántos átomos de ^{12}C sería necesario reunir para tener una masa "manejable" en el laboratorio, por ejemplo, 12 g (valor de la masa atómica expresada en gramos)?

$$0,012 \text{ kg de } ^{12}\text{C} \cdot \frac{1 \text{ u}}{1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ átomo de } ^{12}\text{C}}{12 \text{ u}} = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ átomos de } ^{12}\text{C}$$

A esta cantidad de materia se le denomina **MOL de una sustancia**

Otros ejemplos

Elemento	masa en u. m.a	masa en kg	Átomos que hay en una cantidad igual a su masa atómica expresada en gramos
H	1,00	$1,66 \cdot 10^{-27}$	1,00 g de H contiene $6.02 \cdot 10^{23}$ átomos (1 mol de H)
N	14,00	$2,32 \cdot 10^{-26}$	14,00 g de N contienen $6.02 \cdot 10^{23}$ átomos (1 mol de N)
O	16,00	$2,66 \cdot 10^{-26}$	16,00 g de O contienen $6.02 \cdot 10^{23}$ átomos (1 mol de O)
Cl	35,45	$5,89 \cdot 10^{-26}$	35,45 g de Cl contienen $6.02 \cdot 10^{23}$ átomos (1 mol de Cl)
Fe	55,85	$9,26 \cdot 10^{-26}$	55,85 g de Fe contienen $6.02 \cdot 10^{23}$ átomos (1 mol de Fe)