

ESTRUCTURA ATÓMICA

TEORÍA ATÓMICA DE DALTON

John Dalton propuso, en 1803, una teoría sobre la constitución de la materia basada en los puntos que a continuación se indican. Aunque hoy sabemos que algunos de ellos son en parte incorrectos, su idea general es muy acertada:

- 1) La materia está formada por unas unidades muy pequeñas llamadas átomos, indivisibles e inalterables. Hoy se conoce que los átomos son divisibles.
- 2) Los átomos de un elemento químico son todos iguales, tienen la misma masa y las mismas propiedades. Actualmente sabemos que todos los átomos del mismo elemento no son necesariamente iguales; pueden diferenciarse en la masa (isótopos), pero sí presentan las mismas propiedades químicas.
- 3) Los átomos de elementos distintos difieren en masa y propiedades. En la actualidad sabemos que hay más de cien clases de átomos diferentes. A cada clase de átomos (elemento químico) se le asigna un nombre y un símbolo químico. Por ejemplo, hidrógeno H, cloro Cl o uranio U.
- 4) Los compuestos químicos se forman por unión de átomos de los elementos correspondientes, en una relación química constante y sencilla. Así el agua se forma por la unión de hidrógeno y oxígeno en la proporción de dos átomos del primero por cada átomo del segundo.

Sustancias puras, elementos y compuestos

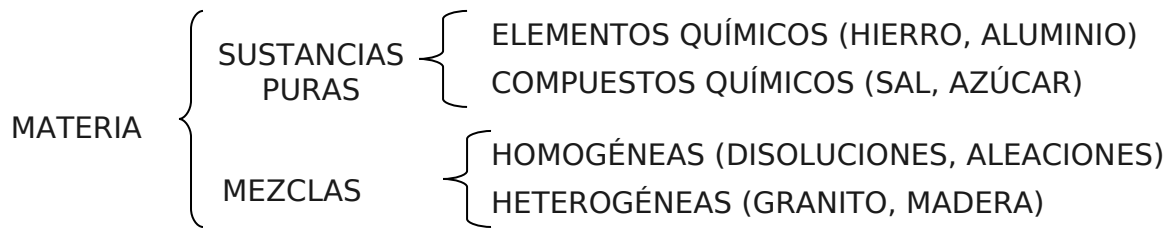
Un sistema se clasifica como homogéneo o heterogéneo según presente o no las mismas propiedades en todos sus puntos. Por ejemplo, el agua, el vino, la sal de mesa o el plomo son homogéneos porque en ellos no se pueden apreciar zonas que sean diferentes las unas de las otras. En cambio, el granito, la pólvora, la madera o un trozo de carne son heterogéneos porque se pueden apreciar zonas con una composición y propiedades diferentes las unas de las otras.

Tanto si los sistemas son homogéneos como si son heterogéneos, puede que estén formados por una o por más de una sustancia. Si es así, se podrán separar mediante procedimientos físicos como la evaporación, la filtración, la cristalización, etc. Por ejemplo, una disolución de agua con sal es homogénea pero si la calentamos se puede evaporar el agua quedando la sal como residuo.

Una sustancia pura es un sistema homogéneo que no se puede separar en diversos componentes por métodos físicos. Por ejemplo, el oro, la sal de cocina, el alcohol o el azufre.

Las sustancias puras con átomos de la misma clase son los elementos químicos y no se descomponen en sustancias más sencillas por procedimientos físicos ni químicos habituales. Son ejemplos el oro, la plata, el plomo o el oxígeno. Los elementos se representan mediante su símbolo químico.

Hay sustancias puras formadas por átomos de dos o más clases. Son los compuestos químicos, que se pueden separar en sustancias más sencillas. Por ejemplo el agua puede separarse en hidrógeno y oxígeno o la sal de cocina puede separarse en sodio y cloro.



LAS PARTÍCULAS ELEMENTALES

En el siglo XIX se creía que los átomos eran indestructibles y se trataba de las últimas partículas a las que se podía llegar en la división de la materia. Hacia 1900 se conocían unos cien átomos diferentes.

En 1897 los experimentos de Thomson llevaron al descubrimiento del electrón. En 1909, Rutherford descubrió el protón y en 1932 Chadwick descubrió el neutrón. Pronto quedó claro que los átomos están formados fundamentalmente por estos tres tipos de partículas: protones, neutrones y electrones. Protones y neutrones tienen una masa semejante (aproximadamente 1 unidad de masa atómica u.m.a.), mientras que un electrón tiene una masa unas dos mil veces menor que aquéllos. En cuanto a su carga eléctrica, los neutrones no tienen mientras que protones y electrones presentan cargas del mismo valor absoluto, los protones positiva y los electrones negativa.

	masa	carga eléctrica
electrón (e ⁻)	$9,11 \cdot 10^{-31}$ kg (0,00055 u.m.a.)	$-1,6 \cdot 10^{-19}$ C
protón (p ⁺)	$1,67 \cdot 10^{-27}$ kg (1 u.m.a.)	$+1,6 \cdot 10^{-19}$ C
neutrón (n)	$1,67 \cdot 10^{-27}$ kg (1 u.m.a.)	0

FENÓMENOS RADIATIVOS

La radiactividad fue descubierta casualmente por Becquerel, en 1896, al observar cómo una sal de uranio había impresionado una placa fotográfica tapada y preservada de la luz del sol. Más tarde, los esposos Curie descubrieron el mismo fenómeno, aunque más acentuado, en el polonio y en el radio y le dieron el nombre, hoy familiar, de radiactividad.

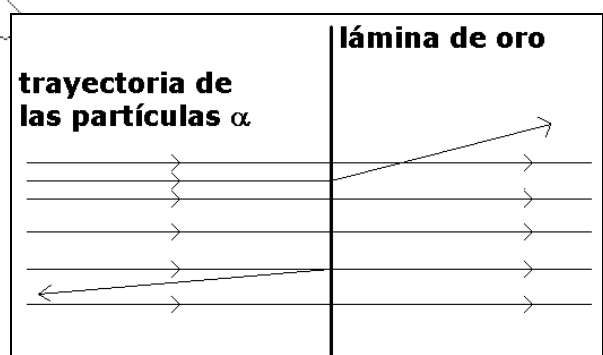
Las radiaciones que emiten los cuerpos radiactivos se clasifican esencialmente en tres grupos:

- partículas α , formadas por dos protones y dos neutrones; su masa aproximada es de 4 u.m.a. y su carga es positiva equivalente a dos veces la carga elemental;
- rayos β , constituidos por electrones; su velocidad se aproxima a 270000 km/s y pueden atravesar láminas de aluminio de 5 mm de espesor;
- rayos γ , que no están constituidos por partículas; son emisiones energéticas de naturaleza ondulatoria.

El descubrimiento de la radiactividad contribuyó a mostrar que el átomo era divisible, pues emitía partículas más pequeñas que éstos.

MODELO ATÓMICO DE RUTHERFORD

El modelo atómico de Ernest Rutherford es la base de los modelos atómicos posteriores y se basa en la observación del siguiente



experimento: cuando se bombardea con partículas α procedentes de un material radiactivo láminas muy finas de oro o plata (de unos 500 Å de espesor) la inmensa mayoría de las partículas α atraviesan la lámina sin sufrir desviación alguna, sólo algunas se desvían de su trayectoria y poquísimas (en torno al 0,005%) rebotan en la lámina.

Hacia 1911, Rutherford explicó este resultado experimental de la siguiente forma:

- a) el átomo tiene un núcleo central pequeño comparado con el tamaño total del átomo; el núcleo presenta carga positiva debida a protones y contiene prácticamente toda la masa del átomo;
- b) en órbitas circulares en torno al núcleo y a grandes distancias en comparación con el tamaño de éste giran electrones atraídos por el núcleo eléctricamente;
- c) la suma de las cargas negativas de los electrones es igual a la carga positiva del núcleo, porque el átomo es eléctricamente neutro; por tanto en un átomo neutro el número de protones del núcleo es igual al número de electrones de la corteza.

De esta forma, al estar el átomo en su mayor parte vacío, la mayoría de las partículas α del experimento anterior atraviesan la lámina sin desviarse; una pequeña fracción que pasa relativamente cerca del núcleo o algún electrón se desvía por la repulsión o atracción eléctrica y solamente aquellas que inciden directamente contra un núcleo (poco probable a consecuencia del pequeño tamaño de éste), rebotan.

Así calculó Rutherford el tamaño de un átomo (del orden de 10^{-10} m) y de su núcleo (sobre 10^{-14} m). Esto es, el núcleo tiene un diámetro diez mil veces más pequeño que el átomo entero; ello significa que la materia se halla prácticamente "vacía".

Este modelo tiene la virtud de ser sencillo, comprensible y fácilmente representable. Como se puede comparar con el sistema solar (con el sol como núcleo y los planetas como electrones) a menudo se le denomina modelo planetario.

No obstante, el modelo de Rutherford tiene deficiencias. Una de ellas es que el electrón al girar en torno al núcleo perdería energía continuamente, pues toda carga eléctrica en movimiento emite energía; así se precipitaría contra el núcleo. Ésta y otras deficiencias fueron subsanadas por modelos atómicos posteriores.

NÚMERO ATÓMICO Y MASA ATÓMICA

A consecuencia del descubrimiento del neutrón por Chadwick en 1932 y del cálculo de las masas de los átomos se concluyó que éstos están formados por protones, neutrones y electrones. Así en el núcleo se hallan los protones y neutrones y girando en torno al núcleo los electrones en número igual al de protones del núcleo. Al número de protones del núcleo, igual al de electrones de la corteza en un átomo neutro, se le denomina número atómico Z. El número atómico Z caracteriza a los átomos de un determinado elemento. A lo largo de distintos procesos químicos un átomo puede ganar o perder electrones convirtiéndose en una entidad cargada denominada ion. En los iones el número de protones no es igual al de electrones, pero el número atómico no varía, sigue siendo el número de protones.

Se puede considerar que prácticamente toda la masa del átomo se halla en el núcleo ya que la masa de los electrones, como anteriormente se indicó, es despre-

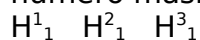
ciable frente a la de protones y neutrones. Además, como la masa de protón y neutrón es aproximadamente 1 u.m.a., la masa de un átomo puede considerarse (en u.m.a.) la suma del número de protones (Z) y neutrones (N). A esta suma se le denomina número másico A

$$A = Z + N$$

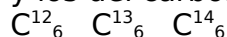
El número de neutrones de todos los átomos de un mismo elemento químico no es siempre el mismo. A cada una de los conjuntos de átomos de un mismo elemento que difieren en el número de neutrones se les denomina isótopos. La mayor parte de los elementos tienen varios isótopos. El hidrógeno, por ejemplo tiene tres distintos: todos contienen un protón, pero se diferencian en el número de neutrones (cero, uno o dos). El carbono también presenta tres isótopos con seis protones y seis, siete u ocho neutrones. Para diferenciar los isótopos entre sí se utiliza la simbología

$$X^A_Z$$

donde X es el símbolo del elemento correspondiente, Z su número atómico y A su número másico. De esta forma los isótopos del hidrógeno se representan



y los del carbono



MODELO ATÓMICO DE BÖHR

El modelo atómico de Böhr supone una modificación del modelo de Rutherford. Sigue suponiendo que los electrones giran en torno al núcleo en órbitas circulares, pero estas órbitas no pueden ser cualesquiera. Böhr supone que existen ciertas órbitas, denominadas órbitas permitidas o estacionarias en las cuales el electrón no emite energía; esto es, mientras los electrones se encuentren en estas órbitas el átomo será estable. De las condiciones físicas que impone Böhr a las órbitas estacionarias para el átomo de hidrógeno (el más sencillo, con un protón y un electrón) llega a la conclusión de que si las numeramos de dentro a fuera con los números 1, 2, 3, ... el radio r_n de la órbita n es

$$r_n = n^2 \cdot r_1$$

siendo r_1 el radio de la primera órbita permitida, esto es, la más cercana al núcleo. De esta forma los radios de la segunda, tercera o cuarta órbitas permitidas son cuatro, nueve o dieciséis veces mayores, respectivamente, que el de la primera.

Por otra parte, la energía total del electrón en su órbita es la suma de las energías cinética y potencial (eléctrica):

$$E = 1/2 m \cdot v^2 + K \cdot q_p \cdot q_e / r$$

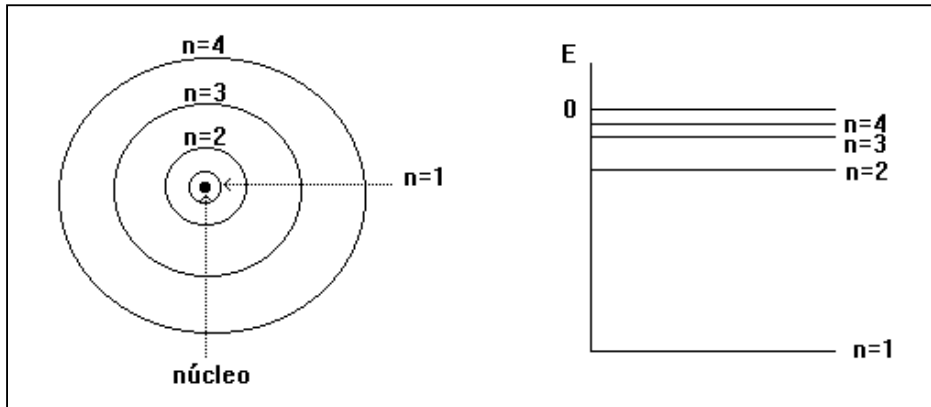
donde m es la masa del electrón, v su velocidad, K la constante de la ley de Coulomb ($9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2 / \text{C}^2$), q_p la carga del protón, q_e la carga del electrón y r el radio de la órbita. Ya que $q_p = -q_e = e$, resulta:

$$E = 1/2 m \cdot v^2 - K \cdot e^2 / r$$

Puede demostrarse que para que una órbita sea estable (sea la de la Luna alrededor de la Tierra o la del electrón alrededor del núcleo) la energía total ha de ser negativa. Si se hace cero o superior la partícula que gira queda desligada del centro (Tierra o núcleo). Por tanto, la energía total del electrón alrededor del núcleo es negativa en todas las órbitas permitidas. Su valor viene dado por

$$E_n = -R/n^2$$

R es una constante positiva. Así la primera órbita ($n=1$) tiene la energía más baja (más estable) y a medida que aumenta n , va aumentando el valor de la energía.



Esta teoría supuso un rotundo éxito para Bohr, puesto que justifica el espectro de emisión del hidrógeno (conjunto de luces emitidas por el átomo al calentarse) que no había podido explicarse hasta entonces. Sin embargo, cuando se aplica la teoría a átomos con más de un electrón los resultados ya no son válidos; por otra parte, se sabe que el comportamiento del electrón no es tan sencillo como el de una simple partícula (como Bohr supone); ello hizo buscar otros modelos atómicos.

EL MODELO ATÓMICO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

El átomo de hidrógeno no es tan simple como lo representaba el modelo atómico de Bohr. El electrón no queda confinado dentro de ciertas órbitas circulares, sino que existen ciertas zonas que rodean al núcleo donde existe una gran probabilidad de encontrar el electrón; estas zonas se denominan orbitales. En el átomo de Bohr las órbitas quedaban determinadas a partir de un número n ; sin embargo, los orbitales necesitan de tres números, llamados números cuánticos para identificar sus propiedades (energía, tamaño, forma y orientación espacial). Estos números cuánticos son los siguientes:

Símbolo	Nombre	Valores posibles	Magnitudes relacionadas
n	nº cuántico principal	1, 2, 3, ...	energía, tamaño
l	nº cuántico azimutal	0 ... $n-1$	energía, forma
m	nº cuántico magnético	-1 ... 0 ... 1	orientación espacial

Así cada orbital viene caracterizado por los tres números cuánticos n, l, m . Para $n=1$, l puede tomar valores desde 0 hasta $1-1=0$, esto es, sólo puede valer cero, y m puede valer desde -0 hasta 0, esto es, cero.

De esta forma para $n=1$ sólo existe un orbital caracterizado por los números cuánticos (1,0,0). Para $n=2$, l puede tomar los valores 0 y 1, pudiendo encontrar los orbitales (2,0,0), (2,1,-1), (2,1,0) y (2,1,1), cuatro en total. En la siguiente tabla se encuentran todos los posibles orbitales hasta $n=4$

n	l	m	(n, l, m)
1	0	0	1,0,0
2	0	0	2,0,0
	1	-1	2,1,-1
		0	2,1,0

n	l	m	(n, l, m)
4	0	0	4,0,0
	1	-1	4,1,-1
		0	4,1,0
		1	4,1,1
	2	-2	4,2,-2

		1	2,1,1
3	0	0	3,0,0
	1	-1	3,1,-1
		0	3,1,0
		1	3,1,1
	2	-2	3,2,-2
		-1	3,2,-1
		0	3,2,0
		1	3,2,1
		2	3,2,2

		-1	4,2,-1
		0	4,2,0
		1	4,2,1
		2	4,2,2
	3	-3	4,3,-3
		-2	4,3,-2
		-1	4,3,-1
		0	4,3,0
		1	4,3,1
		2	4,3,2
		3	4,3,3

El tamaño del orbital depende del número cuántico principal n ; cuanto mayor es n , mayor es el tamaño.

La energía del orbital depende fundamentalmente de n : a mayor n , mayor energía; también depende algo del número cuántico azimutal l de manera que para igual n la energía es mayor cuanto mayor es el valor de l ; esto es, un orbital con $n=2$, $l=1$ tiene mayor energía que otro con $n=2$, $l=0$.

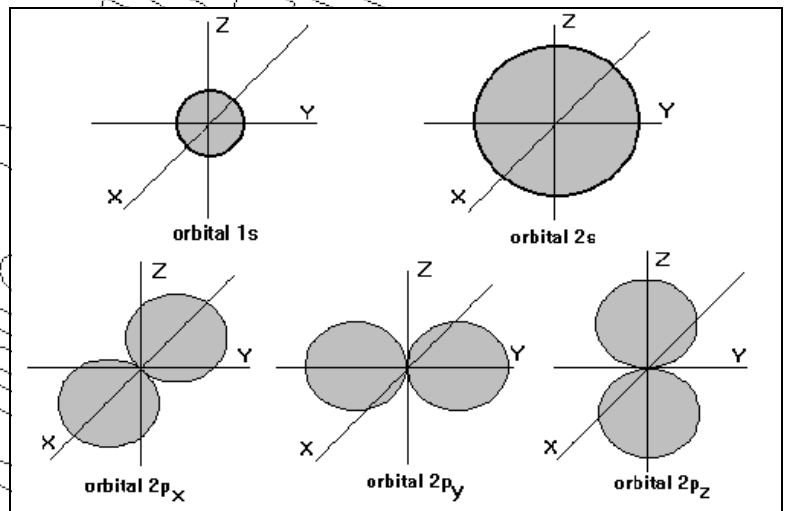
La forma del orbital depende de l . Los orbitales con $l=0$ son esféricos con el núcleo en el centro. Los orbitales con $l=1$ tienen forma de doble lóbulo con el núcleo en el punto de unión de ambos lóbulos. Los orbitales con $n=2$ o mayor tienen formas más complejas. Ya que el nombrar los orbitales con sus números cuánticos a veces resulta engorroso, se utiliza otra notación más sencilla.

Así, a cada valor de l se le asigna una letra, del modo siguiente:

l	0	1	2	3
Símbolo	s	p	d	f

De esta forma, el orbital con $n=1$, $l=0$ se denomina 1s; el $n=2$, $l=0$ es 2s; los tres orbitales con $n=2$, $l=1$ son 2p; los cinco orbitales con $n=3$, $l=2$ se llaman 3d; los siete con $n=4$, $l=3$ son 4f. Así en cada nivel el orbital s es único, los p van en grupos de tres, los d en grupos de cinco y los f en grupos de siete.

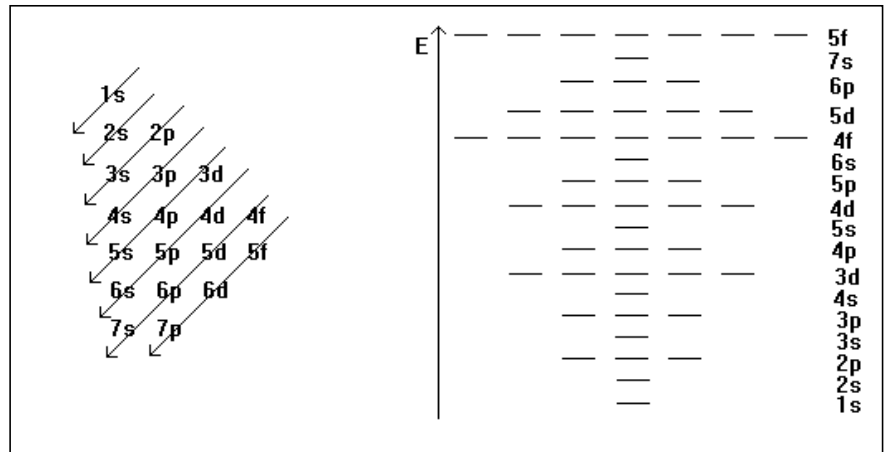
La orientación espacial depende del número cuántico magnético m . Los orbitales s no tienen orientación, pues son esféricos. Para los orbitales p, m puede tomar los valores -1, 0 ó 1 y se orientan perpendiculares entre sí, de manera que se les hace coincidir con cada uno de los ejes de coordenadas denominándose p_x , p_y o p_z .



Para caracterizar un electrón situado en un orbital atómico necesitamos, además de los tres números cuánticos (n , l , m) que caracterizan el orbital un cuarto número cuántico propio del electrón, el número cuántico de spin s que tiene que ver con el giro del electrón en torno a su propio eje. Este número cuántico s puede tomar únicamente dos valores: $+1/2$ y $-1/2$. En definitiva, un electrón en el interior de un átomo viene caracterizado por cuatro números cuánticos: n , l , m , s .

ORDENACIÓN ENERGÉTICA DE LOS ORBITALES

En los átomos polielec-trónicos la ordenación (de menor a mayor) de la energía de los orbitales puede conocerse a partir de la siguiente tabla



CONFIGURACIÓN ELÉCTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS

Para establecer la disposición de los electrones en los átomos, denominada configuración electrónica, seguiremos los siguientes principios:

- 1) Mínima energía: Los electrones ocupan los orbitales disponibles de más baja energía
- 2) Principio de exclusión de Pauli: En un mismo átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales. Ello implica que en un orbital atómico caben como máximo dos electrones, que han de tener distinto spin. Por ejemplo, en un orbital 2s podemos encontrar como máximo dos electrones con números cuánticos (2,0,0,+1/2) o (2,0,0,-1/2). Un tercer electrón en este orbital habría de repetir los cuatro números cuánticos, hecho prohibido por el principio de exclusión de Pauli.

Usando estos dos principios podemos escribir las configuraciones electrónicas de los átomos más sencillos.

ELEMENTO	Z		CONF.ELECTRÓNICA
H	1	↑ 1s	1s ¹
He	2	↑↓ 1s	1s ²
Li	3	↑↓ ↑ 1s 2s	1s ² 2s ¹
Be	4	↑↓ ↑↓ 1s 2s	1s ² 2s ²
B	5	↑↓ ↑↓ ↑ 1s 2s 2p	1s ² 2s ² 2p ¹
C	6	↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ? 1s 2s 2p	1s ² 2s ² 2p ²
		↑↓ ↑↓ ↑↓ ? 1s 2s 2p	

Al emplear estos dos principios para realizar la distribución electrónica de los elementos más sencillos el primer problema surge con el carbono, ya que los dos electrones situados en orbitales 2p podrían hallarse de las dos formas indicadas previamente: ocupando orbitales distintos o apareados en el mismo orbital. Para elegir la configuración adecuada se ha de utilizar el principio siguiente.

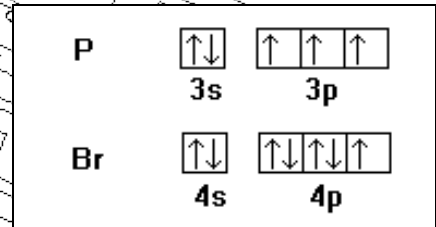
- 3) Principio de Hund de la máxima multiplicidad: Si un electrón puede optar por ocupar dos orbitales de la misma energía, uno vacío y otro semilleno, ocupará el vacío y su spin habrá de ser el mismo que el de electrón que ocupa el orbital semilleno.

Según esto, la configuración correcta para el carbono es la indicada en primer lugar, con los dos electrones 2p en orbitales diferentes. Las configuraciones para los siguientes elementos son:

ELEMENTO	Z		CONF.ELECTRÓNICA
C	6	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow & \uparrow & \\ \hline 1s & 2s & 2p & & \\ \hline \end{array}$	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline 1s & 2s & 2p & & \\ \hline \end{array}$	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	8	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline 1s & 2s & 2p & & \\ \hline \end{array}$	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	9	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow \\ \hline 1s & 2s & 2p & & \\ \hline \end{array}$	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	10	$\begin{array}{ c c c } \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow \\ \hline 1s & 2s & 2p & & \\ \hline \end{array}$	$1s^2 2s^2 2p^6$

Habitualmente, la configuración electrónica de un elemento se da indicando el número de electrones en cada grupo de orbitales, esto es, para el cloro, $Z=17$ sería: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ y para el hierro ($Z=26$) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$.

Sin embargo, cuando se quiere visualizar la distribución de los electrones de la última capa (la de número cuántico principal mayor) se usa el diagrama de distribución electrónica orbital a orbital. De esta forma para fósforo ($Z=15$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$) y bromo ($Z=35$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$) se representa:



IONES

Los átomos neutros tienen el mismo número de protones en el núcleo que electrones en la corteza. Pero en ocasiones pueden ganar o perder electrones convirtiéndose en iones, especies con carga. Si un átomo pierde electrones se convierte en un ion positivo (catión). Si los gana en un ion negativo (anión). Por ejemplo:

Na	11p ⁺ 11e ⁻	-e ⁻	▪	Na ⁺	11p ⁺ 10e ⁻	$1s^2 2s^2 2p^6$
Ca	20p ⁺ 20e ⁻	-2e ⁻	▪	Ca ²⁺	20p ⁺ 18e ⁻	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Cl	17p ⁺ 17e ⁻	+e ⁻	▪	Cl ⁻	17p ⁺ 18e ⁻	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
O	8p ⁺ 8e ⁻	+2e ⁻	▪	O ²⁻	8p ⁺ 10e ⁻	$1s^2 2s^2 2p^6$

Puedes observar que el número atómico de un átomo es igual que el de su correspondiente ion, pero cambia el número de electrones y la configuración electrónica.