

TEMA 2: ESTRUCTURA ATÓMICA.

- 2.1 Clasificación periódica de los elementos químicos.
- 2.2 Modelos atómicos.
- 2.3 Espectros atómicos.
- 2.3 Teoría cuántica. Orbitales atómicos.
- 2.4 Propiedades periódicas de los elementos químicos.

2.1 CLASIFICACIÓN PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS

Actualmente se conocen 116 elementos químicos (tipos de átomos), de los cuales 90 se dan en la naturaleza. El resto han sido creados en laboratorio a partir de otros átomos.

Sin embargo, hasta 1700 sólo se conocían 12 de estos elementos. Fue con la introducción de medidas precisas en las reacciones cuando se pudieron aislar nuevos elementos, como el Hidrógeno (1766), Nitrógeno (1772), Oxígeno (1774), etc. Durante el siglo XIX, gracias a las leyes ponderales y a la teoría atómica de Dalton, hacia 1829 el número de elementos conocidos crece hasta 55.

Ante tal abundancia de elementos diferentes, una cuestión que se plantea es la de hacer una clasificación de dichos elementos, buscando propiedades que tengan en común. Se estudian tanto propiedades físicas (densidad, P.F., P.E.) como químicas (capacidad de reaccionar con otros elementos, oxígeno principalmente).

Ya **Lavoisier** había clasificado los 33 elementos que se conocían en su época en dos grupos: metales y no metales, atendiendo a su capacidad para conducir la corriente eléctrica y al tipo de óxido que forman.

En 1829, el alemán **Johann Döbereiner** observa que existen algunos grupos de tres elementos con propiedades parecidas: (Ca, Sr, Ba) (Cl, Br, I) (S, Se, Te). Los llamó *tríadas*.

En 1862, el francés **Alexandre de Chancourtois** descubre que, al colocar los elementos por orden de masas atómicas alrededor de un cilindro, formando una *espiral (espiral telúrica)*, los elementos que estaban en la misma vertical tenían propiedades parecidas. Sólo se cumplía con los primeros elementos.

1864, **John Newlands** (inglés) continúa con el ordenamiento por orden de masa atómica, y observa que las propiedades se repiten periódicamente cada 8 elementos. A estos grupos de 8 elementos les llamó *octavas*, por su parecido con la clasificación de las notas musicales. De nuevo, sólo se cumplía para los primeros elementos.

1869-1870: El ruso **Dimitri Ivanovich Mendeleiev** y el alemán **Lothar Meyer** llegan por separado a una clasificación parecida. A partir del orden por masas atómicas, colocan en una misma columna los elementos con propiedades parecidas, estableciendo una tabla.

Mendeleiev introdujo unas mejoras importantes en la clasificación, dando prioridad a las propiedades. Por tanto:

- Cambió el orden de algunos elementos para que se situaran en la columna que les correspondía según sus propiedades (Co-Ni) (Te- I).
- Dejó huecos en la tabla, y predijo que esos huecos correspondían a elementos aún no descubiertos, de los cuales calculó qué propiedades debían tener, a partir de las propiedades de los elementos adyacentes. Tuvo la satisfacción de que, cuando aún vivía, en 1875 se descubrió el Galio, en 1879 el Escandio y en 1886 el Germanio, y sus propiedades coincidían plenamente con las predichas por Mendeleiev.

Posteriormente, con el descubrimiento de nuevo elementos, se agregan nuevas columnas a la tabla de Mendeleiev (gases nobles, tierras raras), y con el descubrimiento por Moseley, en 1914, del número atómico, se llega a la tabla periódica actual. El último elemento conocido se descubrió en 2001.

TABLA PERIÓDICA ACTUAL:

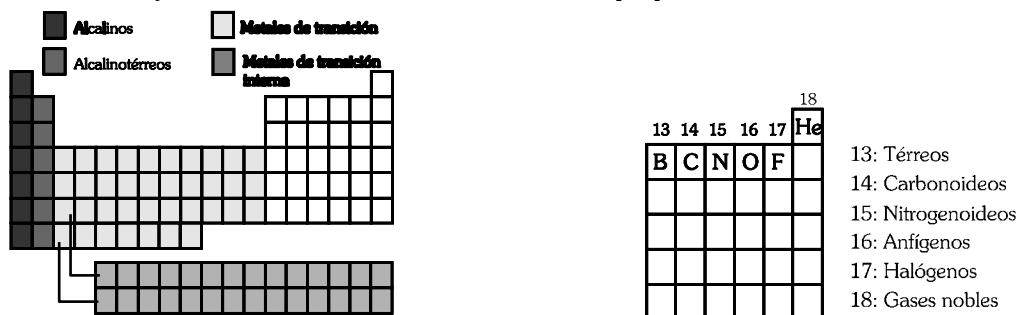
La clasificación periódica actual de los elementos químicos es una ampliación de la de Mendeleiev y Meyer. Sigue estos criterios de clasificación:

Los elementos están clasificados por orden de número atómico creciente. El número atómico coincide con el nº de protones del átomo.

- En la misma columna están situados los elementos con propiedades (físicas y químicas) parecidas.
- La masa atómica también crece al ir avanzando en la tabla periódica, salvo algunas excepciones (Ar-K, Co-Ni, Te-I).

Las filas (horizontales) de la tabla se denominan **periodos**: están numerados del 1 al 7.

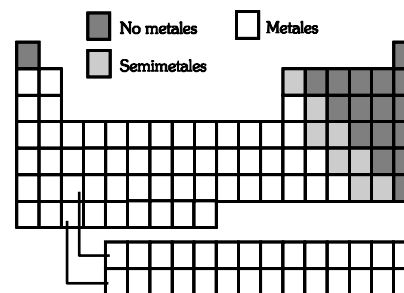
Las columnas, que contienen elementos con propiedades parecidas, se denominan **grupos o familias**: están numeradas del 1 al 18. La mayoría de ellas tienen además un nombre propio.



Las dos filas de elementos que aparecen aisladas del resto de la tabla, están así sólo por hacer una tabla más compacta. Si nos fijamos en el orden de número atómico, vemos que la primera de las filas (Lantánidos) corresponde al periodo 6 y van a continuación del Lantano. La fila de los actínidos corresponde al periodo 7 a continuación del Actinio. Los 28 elementos que componen las “tierras raras”, como se les conoce, al tener propiedades parecidas a La y Ac se consideran todos del grupo III.



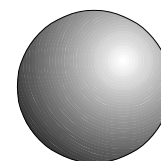
Se observa también que se mantiene la clasificación inicial que hizo Lavoisier en elementos metálicos y no metálicos. Cuanto más a la izquierda y debajo de la tabla, más acentuado es el carácter metálico; mientras que cuanto más a la derecha y arriba de la tabla, mayor es el carácter no metálico. Existen elementos con propiedades intermedias entre metales y no metales, se denominan semimetales.



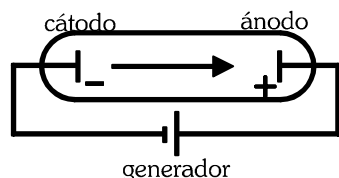
2.2 MODELOS ATÓMICOS.

Una vez estudiado cómo están clasificados los diferentes tipos de átomos que se conocen, pasamos a investigar la estructura interna de los mismos.

Recordamos que, según la teoría atómica de **Dalton**, de 1808, los átomos eran partículas indivisibles, sin estructura interna. La única característica que diferenciaba los átomos de uno u otro elemento era la masa atómica. Ese es, por tanto, el primer modelo atómico que se propuso: un átomo esférico, macizo e indivisible.



Durante casi todo el siglo XIX se mantuvo ese modelo, ya que no hubo descubrimientos que lo contradijeran.

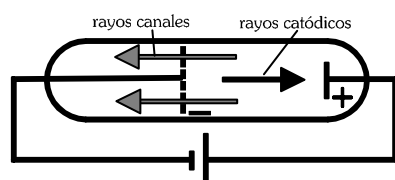


En 1875, el británico **Crookes**, experimentando con gases a baja presión, descubre que es posible hacer pasar corriente eléctrica a través de estos gases. El dispositivo experimental se conoce como *tubo de vacío*: un tubo herméticamente cerrado que contiene en su interior un gas a muy baja presión, y conectado a una fuente de tensión de alto voltaje. Crookes observa que del cátodo (polo -) salen rayos (llamados **rayos catódicos**) que llegan al ánodo (polo +). Aunque desconoce la naturaleza de estos rayos, descubre que:

naturaleza de estos rayos, descubre que:

- Tienen carga negativa.
- Tienen masa

- Se propagan en línea recta.

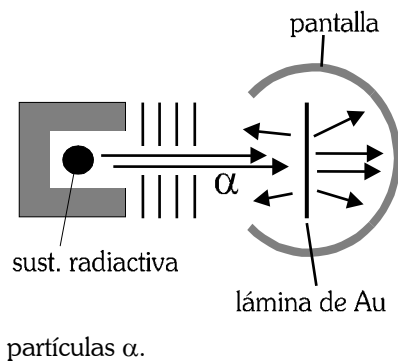
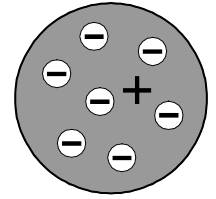


En 1886, **Goldstein**, usando como cátodo una lámina metálica perforada, descubre que, por detrás del cátodo, también se observan rayos que van en sentido contrario a los rayos catódicos: los llamó rayos canales, y descubrió que tenían carga positiva y una masa mucho mayor que la de los rayos catódicos.

Thomson, en 1897, y a la vista de que los rayos catódicos se producen en todos los experimentos, sea cual sea el gas que pongamos en el interior del tubo, propone que los rayos están formados por partículas de masa muy pequeña, y que se encuentran en todos los elementos. Por lo tanto, deben formar parte de todos los átomos. A esas partículas, responsables de la corriente eléctrica, las llamó **electrones** (e^-).

También descubrió que los rayos canales son átomos ionizados, es decir, átomos del gas que han perdido algún electrón al chocar con los rayos catódicos, y se han quedado con carga positiva.

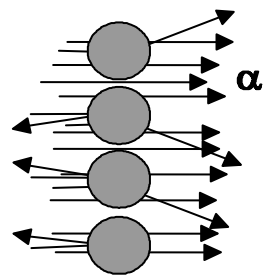
En 1904 propone un modelo de átomo en el que incluye al electrón. Según Thomson, el átomo estaría formado por una esfera de carga positiva, en cuyo interior estarían incrustados los electrones, de forma que la carga total fuera neutra. (*Este modelo fue bautizado por los contemporáneos de Thomson como el del "pastel de pasas"*)



El siguiente descubrimiento importante lo hizo el neozelandés **Rutherford** entre 1910 y 1911. Gracias al descubrimiento de la radiactividad en 1898 por Becquerel y a los estudios posteriores de Marie Curie y otros, se disponía de partículas, conocidas como partículas α , soltadas por las sustancias radiactivas, y que viajaban a gran velocidad y podían lanzarse como proyectiles para investigar la estructura interna de los átomos.

El experimento que usó Rutherford consistía en "bombardear" una delgada lámina de Au con estas partículas α . Alrededor de la lámina, pantallas de ZnS, una sustancia que emite destellos de luz cuando chocan con ella las

partículas α .



En este experimento, se observa que:

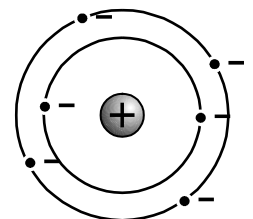
- A pesar de la elevada densidad del oro, y de la poca distancia que hay entre átomos, la inmensa mayoría de las partículas α atraviesan la lámina sin apenas desviarse.
- Muy pocas partículas α se desvían apreciablemente.
- Hay partículas que rebotan hacia atrás, pero lo hacen con una intensidad mucho mayor de la esperada.

Estudiando estos datos, llega a estas conclusiones:

- El átomo es en su mayor parte espacio vacío. Esto explica que las partículas α lo atraviesen sin desviarse.
- Casi toda la masa del átomo está concentrada en una zona central de diámetro aprox. 10.000 veces menor que el del átomo. A esta zona se le llamó núcleo.

Así, en 1911, Rutherford propone su modelo atómico (*conocido como modelo planetario, por su semejanza con el sistema solar*). Consta de un núcleo central (de carga positiva, que concentra casi toda la masa del átomo), y una corteza exterior formada por electrones que dan vueltas alrededor del núcleo,

atraídos por la carga positiva de éste.

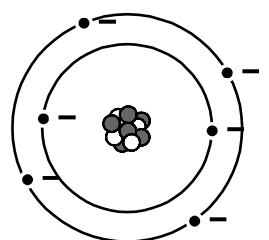


En 1919 descubre el **protón** (p^+), con lo que el núcleo, en lugar de ser una esfera maciza, pasa a estar formado por un n° de protones igual al de electrones de la corteza.

Pese a suponer un gran avance, el modelo planetario de Rutherford era incompleto, por varias razones:

1. Es un modelo inestable. Un electrón describiendo órbitas por la atracción electrostática debería ir perdiendo energía en forma de radiación (luz), con lo que se acercaría cada vez más al núcleo, hasta chocar con él. Esto fue resuelto por Böhr (apdo. 2.4.3)

2. No es capaz de explicar aún cómo es que existen los isótopos, átomos del mismo elemento (igual número de protones y electrones) pero con distinta masa. Hubo que suponer que existía una tercera partícula sin carga eléctrica, el **neutrón** (n), que añadía la masa que faltaba. En 1932, **Chadwick** descubrió esta partícula.



De este modo, el modelo planetario del átomo queda como en la figura:

Número atómico y número másico: Isótopos.

El modelo de Rutherford, ampliado luego con el descubrimiento de las partículas que componen el núcleo, propone básicamente que el átomo está formado por tres partículas fundamentales:

Núcleo:	Protones (p^+)	Carga $+e$	Masa ~ 1 u
	Neutrones (n)	Carga neutra	Masa ~ 1 u
Corteza:	Electrones (e^-)	Carga $-e$	Masa $\sim 1/1800$ u

$$1 \text{ u} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

El número de partículas que haya de cada tipo nos dirá de qué elemento se trata y qué características tiene:

Número atómico (Z): Número de protones del núcleo. Caracteriza al elemento químico. Descubierta por el inglés Moseley en 1913.

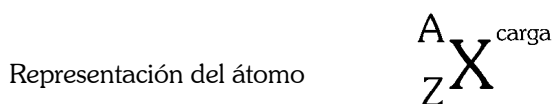
Número de neutrones (N)

Número másico (A): $A = Z + N$ número total de partículas que hay en el núcleo. Nos indica la masa aproximada del átomo, en una.

Número de electrones: En un átomo neutro, el nº de e^- es igual a Z.

Si el nº de e^- es mayor que Z (más e^- que p^+) \rightarrow ión negativo \rightarrow Anión

Si el nº de e^- es menor que Z (menos e^- que p^+) \rightarrow ión positivo \rightarrow Cation



Isótopos: Dos átomos se dice que son isótopos cuando tienen igual número de protones ($= Z$, es decir, pertenecen al mismo elemento) pero su número de neutrones es diferente (lo que hace que A sea distinto y, por tanto, su masa también)

Ejemplo: son isótopos estos pares de átomos $^{12}_6\text{C}$ $^{14}_6\text{C}$; $^{235}_{92}\text{U}$ $^{238}_{92}\text{U}$; ^1_1H ^2_1H

Cálculo de la masa atómica de un elemento: En la naturaleza, un elemento químico está formado por una mezcla de átomos de sus distintos isótopos, en una proporción determinada, según su abundancia. La masa atómica del elemento se calculará, por tanto, como la media de las masas atómicas de los isótopos, teniendo en cuenta su abundancia en %.

$$Mat = \frac{Mat_1 \cdot \%_1 + Mat_2 \cdot \%_2 + \dots}{100}$$

2.3 ESPECTROS ATÓMICOS

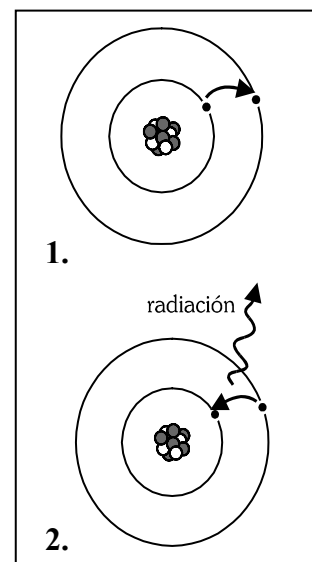
El modelo atómico propuesto por Rutherford, situaba a los electrones en la corteza atómica, describiendo órbitas en torno al núcleo, de tamaño muy pequeño, pero que concentra la casi totalidad de la masa del átomo.

En este apartado, vamos a estudiar cómo están distribuidos los electrones en la corteza. Este estudio es importante, ya que es precisamente la forma en que están distribuidos los electrones, lo que determina las propiedades químicas de cada elemento, y lo que justifica su lugar en la tabla periódica.

2.3.1 Energía del electrón en la órbita:

Según Rutherford, los electrones giran alrededor del núcleo siguiendo una órbita de radio determinado. El radio, la distancia a la que se encuentre, puede ser cualquiera, en principio. De hecho, los diferentes electrones que posee un átomo orbitarán a distintas distancias.

Estos electrones (carga $-$) se mantienen en órbita, sin escapar del átomo, debido a la atracción eléctrica que sufren por parte del núcleo (carga $+$). Esta atracción hace que el electrón almacene energía por el hecho de encontrarse en su órbita. Un electrón que se encuentre en una órbita más cercana al núcleo almacena menos energía que otro electrón de una órbita más lejana.



Los electrones pueden pasar de una órbita a otra, ganando o perdiendo energía en el cambio.

- Si suministramos energía a un electrón (por calentamiento, por ej.), pasará a una órbita más alejada, en la que le corresponde tener más energía. (1.)
- Un electrón puede también saltar a una órbita más cercana, desprendiendo energía en forma de radiación (luz)(2)

Cuando calentamos un cuerpo, suministramos energía a los átomos de ese cuerpo y, por tanto, a sus electrones, que vibrarán, saltando a órbitas superiores, y volviendo luego de nuevo a órbitas inferiores. En este proceso, repetido una y otra vez, se desprende constantemente radiación (por ej, el filamento de una bombilla, un hierro al rojo...)

2.3.2 Radiación. Ondas electromagnéticas.

La luz, las ondas de radio, los rayos UVA, X, etc, constituyen la denominada radiación electromagnética. Son ondas producidas por la vibración de cargas eléctricas. Se propagan a gran velocidad por medios transparentes. En el vacío, esta velocidad es una constante universal, $c = 3 \cdot 10^8$ m/s.

Características generales de las ondas:

Periodo (T): Tiempo que tarda en repetirse la vibración. Se mide en segundos (s).

Frecuencia (ν): Es la magnitud inversa del periodo. $\nu = \frac{1}{T}$

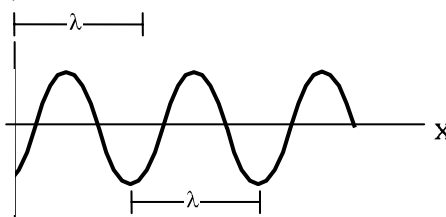
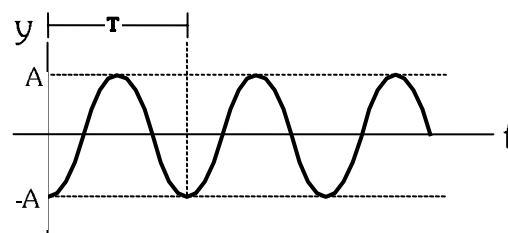
Indica el número de vibraciones por segundo. La frecuencia de la radiación depende de la frecuencia de vibración de los electrones que la han producido. Se mide en oscilaciones/segundo = s^{-1} = hertzios (Hz).

Longitud de onda (λ): Distancia a la que se repite la vibración. La onda recorre esa distancia durante un tiempo igual al periodo. Se mide en m.

Estas características están relacionadas a través de la velocidad de propagación de la radiación (c).

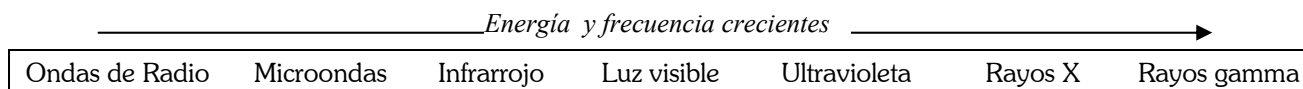
$$\lambda = c \cdot T$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$



2.3.3 Espectros atómicos:

Existen distintos tipos de radiación (de luz). La luz visible es sólo una parte. Estas radiaciones tienen la misma naturaleza (electromagnética), pero difieren en la energía que transportan. La clasificación de estas radiaciones, ordenadas de menor a mayor energía, se denomina *espectro*.



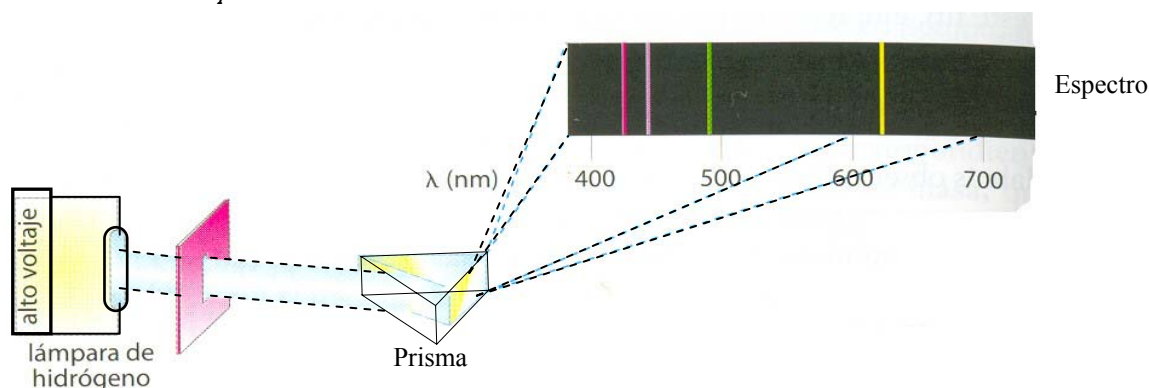
Las divisiones entre unos tipos de radiación y otros es totalmente artificial. No existe un límite claro entre un tipo de luz y el siguiente. Además, el nombre dado a cada radiación responde únicamente a razones históricas, o de utilidad tecnológica.

Por ejemplo, la región visible del espectro se encuentra entre el violeta ($\lambda = 3,9 \cdot 10^{-7}$ m, $\nu = 7,69 \cdot 10^{14}$ Hz) y el rojo ($\lambda = 7,8 \cdot 10^{-7}$ m, $\nu = 3,85 \cdot 10^{14}$ Hz)

Podemos observar el espectro descomponiendo la luz con un prisma. Al pasar por el prisma, las radiaciones se desvían más o menos, dependiendo de su energía. Así, al proyectarse en una pantalla, quedan ordenadas por ese orden de energía (es lo que pasa con las gotas de lluvia, que descomponen la luz del sol, formando el arco iris). El *espectroscopio* es un aparato diseñado para observar y analizar los espectros.

Cuando calentamos una sustancia simple (todos los átomos del mismo elemento), podemos observar la distribución de la radiación que desprende. Esto es lo que se conoce como *espectro de emisión atómico*.

También podemos hacer pasar luz blanca por un recipiente que contenga al elemento en estado gaseoso. Los electrones del elemento absorberán ciertos tipos de radiación, las cuales no aparecerán en la pantalla, quedando zonas oscuras. Esto se llama *espectro de absorción atómico*.



Los espectros venían siendo estudiados desde que fueron tratados por Newton en 1704 en su obra *Óptica*.

En 1859, Bunsen y Kirchoff estudian los espectros de emisión de diferentes sustancias al ser calentadas.

Descubren:

- Los espectros observados son **discontinuos**. Los átomos del elemento sólo desprenden unos tipos de luz determinados, y no otros.
- Cada elemento químico tiene su propio espectro característico (esto permitirá identificar los componentes de una sustancia a partir de la luz que emite).

Estas características no habían podido ser explicadas con los modelos atómicos de Dalton o Thomson. El modelo de Rutherford explicaba por qué emiten radiación los átomos. Pero 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, y no otros.

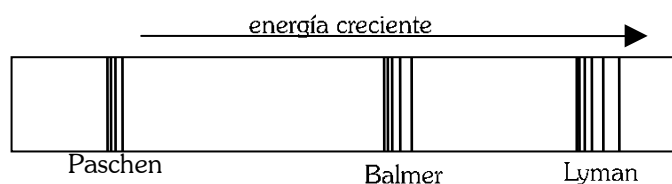
Espectro del hidrógeno

En 1885, J. Balmer, estudiando el espectro de emisión del hidrógeno, descubre una expresión que relaciona las energías de una serie de líneas del espectro (llamada serie de Balmer). $E = R_E \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, donde R_E es una constante cuyo valor es $2,172 \cdot 10^{-18}$ J. n toma un valor para cada línea ($n = 3, 4, 5, 6, 7$)

(Nota: en realidad Balmer estudió otra magnitud, la frecuencia, que es directamente proporcional a la energía. Aquí usamos la energía por simplicidad)

Posteriormente, al perfeccionarse la técnica, otros científicos descubren nuevas series de líneas espectrales en el hidrógeno. La energía de todas estas líneas puede calcularse con la expresión general $E = R_E \cdot \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$, donde n_1 es diferente para cada serie, y $n_2 > n_1$. Así, las series son:

Serie de Lyman:	$n_2 = 1 ; n_1 = 2, 3, 4, 5 \dots$
Serie de Balmer:	$n_2 = 2 ; n_1 = 3, 4, 5, 6 \dots$
Serie de Paschen:	$n_2 = 3 ; n_1 = 4, 5, 6 \dots$
Serie de Brackett:	$n_2 = 4 ; n_1 = 5, 6, 7 \dots$
Serie de Pfund:	$n_2 = 5 ; n_1 = 6, 7, 8 \dots$
Serie de Hunfreys:	$n_2 = 6 ; n_1 = 7, 8 \dots$



¿Cómo se explican estas líneas? Recordemos que la energía (la luz) es emitida al saltar los electrones desde una órbita más alejada del núcleo hasta otra más cercana.

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.

2.4 TEORÍA CUÁNTICA. ORBITALES ATÓMICOS.

2.4.1 Hipótesis de Planck. Carácter corpuscular de la luz.

En 1900, el alemán Max Planck descubrió que, cuando un cuerpo emite radiación, o la absorbe, lo hace de forma discontinua, concentrada en pequeños "paquetes" de radiación, o cuantos.

La energía de un cuanto de radiación depende de su frecuencia, según la siguiente fórmula:

$$E = h \cdot \nu \quad \text{h es la constante de Planck: } h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

En 1905 Albert Einstein propone que la luz consiste en la transmisión de partículas llamadas fotones, cuya energía viene dada por la fórmula de Planck.

2.4.2 Dualidad onda-partícula (De Broglie, 1924):

En 1924 Louis de Broglie propone que toda partícula (un electrón, por ejemplo) tiene una onda de materia asociada, es decir, toda partícula puede comportarse como una onda en determinados experimentos. La naturaleza, por lo tanto, tiene carácter dual a nivel microscópico. Fue comprobado experimentalmente en 1927.

2.4.2 Modelo de Bohr (1913):

En 1913, el danés Niels Bohr explica las características de los espectros, suponiendo los siguientes postulados:

- Ya que la radiación desprendida se debe a la diferencia de energía entre las órbitas, los electrones sólo podrán tener ciertos valores de energía permitidos (se dice que la energía está *cuantizada*).

- Como consecuencia, los electrones no podrán estar a cualquier distancia del núcleo. Sólo están permitidas las órbitas correspondientes a las energías permitidas. Estas órbitas son llamadas *capas*, e identificadas por un *número cuántico*, n . ($n = 1, 2, 3, 4, \dots$)

- Mientras el electrón se mantiene en la órbita, su energía es constante.

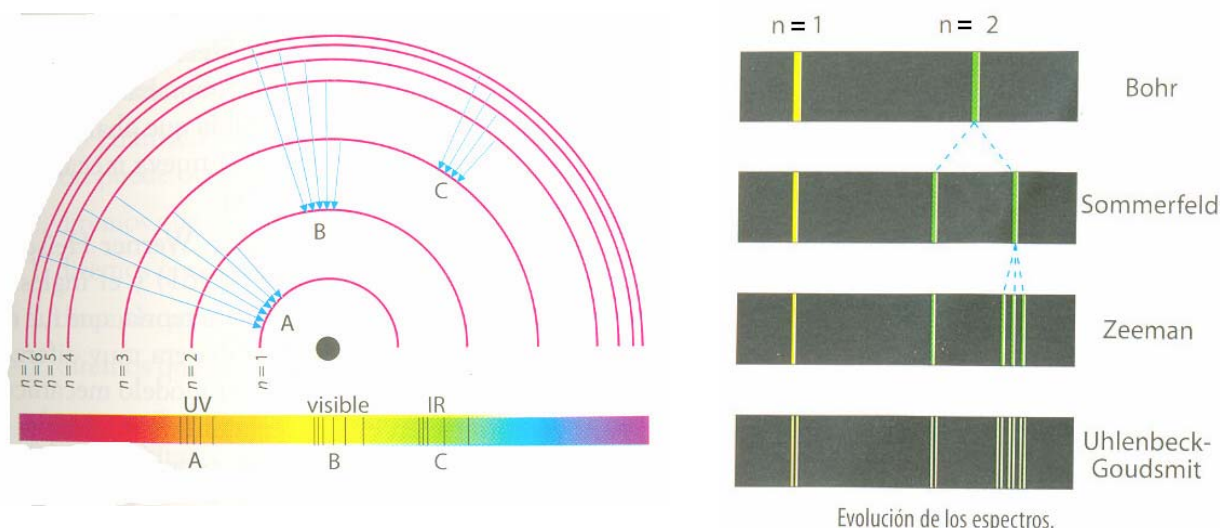
- Como sólo están permitidas ciertas órbitas, los electrones sólo pueden dar unos saltos determinados, a los que corresponde una cantidad de energía fija. Esto hace que sólo se desprendan los tipos de luz que aparecen en el espectro. La energía absorbida o desprendida en el salto viene dada por.

$$\Delta E = -R_E \cdot \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \begin{array}{l} \Delta E > 0 \rightarrow \text{energía absorbida} \\ \Delta E < 0 \rightarrow \text{energía desprendida} \end{array}$$

Con esto se explican las series de líneas del espectro del hidrógeno. La serie de Lyman corresponde a saltos de electrones hasta la capa $n=1$ desde capas superiores, la serie de Balmer, saltos hasta la capa $n=2$, y así sucesivamente.

(Nota importante: En la emisión de radiación, la diferencia de energía (ΔE) es negativa, ya que la energía del nivel final es menor que la del nivel inicial. Esa diferencia de energía es la que se desprende en la radiación. Por tanto, la energía que transporta la radiación es de signo positivo, como aparece en la fórmula de Balmer de la página anterior).

Posteriormente, otros científicos, como Sommerfeld, Zeeman, Uhlenbeck y Goudsmidt ... van descubriendo una estructura interna en las capas, estableciendo así subcapas y otras divisiones.



2.4.4 Principio de indeterminación de Heisenberg:

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. Se llega así al concepto de *orbital*.

2.4.4 Orbitales atómicos. Configuración electrónica:

Un orbital atómico es un estado de energía permitido en un átomo. A este estado de energía le corresponde una zona donde es probable encontrar a un electrón que posea esa energía.

No podremos dibujar la órbita que describe un electrón, sino una nube de puntos donde es probable encontrarlo (llamada nube electrónica). Normalmente en las figuras aparece dibujada la zona donde existe al menos un 90% de probabilidad. (VER EL ANEXO AL FINAL DEL TEMA)

DISTRIBUCIÓN DE LOS ELECTRONES EN EL ÁTOMO. NÚMEROS CUÁNTICOS

Todos los descubrimientos ya vistos y otros posteriores llevan al modelo actual de distribución de los electrones. Están organizados en capas, subcapas y orbitales (algo así como si en un hotel distribuyéramos a los clientes en pisos, pasillos y habitaciones). Cada nivel viene identificado por un número cuántico. Son los siguientes:

Capa	n	n = 1, 2, 3, 4 ...	En la naturaleza, los átomos sólo tienen e ⁻ hasta la capa 7 como mucho. Este número va a determinar la energía de los electrones.
Subcapa	l	l = 0 ... n-1	El número de subcapas depende de la capa en la que estemos. Así, la capa 1 sólo tendrá una subcapa posible (l = 0). La capa n=2 tendrá dos subcapas (l = 0, l = 1), y la tercera capa tres subcapas, la cuarta cuatro... Por tradición, se identifica a cada subcapa con una letra. Así: l = 0 s l = 1 p l = 2 d l = 3 f El número l nos indica la forma del orbital, como puede verse en las figuras de la última página.
Orbital	m	m = -l ... 0 ... +l	Observamos que en una subcapa s sólo puede haber un orbital (m = 0) En una subcapa p tenemos tres orbitales (m = -1, m = 0, m = +1) En una subcapa d , cinco orbitales (m = -2, -1, 0, 1, 2) En una subcapa f , siete orbitales (m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3)
Spin	s	s = 1/2, -1/2	Esta es una división interna de los orbitales. El spin marca el movimiento de rotación del electrón (como le pasa a la Tierra). Como puede girar en dos sentidos (en el de las agujas del reloj o en el contrario), el número cuántico de spin puede tomar dos valores. Como podemos ver, en un orbital podremos tener dos electrones como máximo.

Representación simbólica de los orbitales:

Para referirnos a un determinado orbital, habrá que indicar en qué capa y subcapa está. Para ello se indica el número de la capa seguido de la letra correspondiente en la subcapa. El número de electrones que contiene la subcapa (puede estar llena o no) se coloca a continuación como superíndice.

Ejemplos: 1 s¹ 3 p⁴ 3 d⁷ 5 f³

Para indicar qué orbitales son los que contienen electrones en una determinada subcapa representaremos cada orbital con un círculo, pintando una flecha en su interior por cada electrón que ocupe ese orbital. Como ya hemos visto, sólo puede haber dos e⁻ como máximo en el orbital, y deben tener distinto número de spin. En un orbital en que haya dos electrones, se pintarán las flechas una hacia arriba y otra hacia abajo.

Ejemplos: 1s¹ (↑) 1s² (↑↓) 4p² (↑)(↑)(○) 5p⁴ (↑↓)(↑)(↑)

Orden de llenado de los electrones:

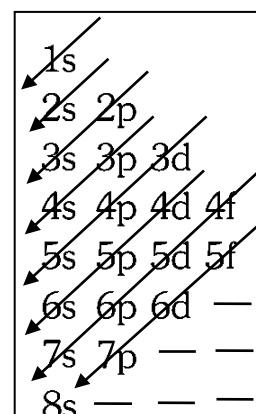
Los electrones (como cualquier otro sistema en la naturaleza) tienden a la máxima estabilidad, y esto se consigue cuando tienen la menor energía posible. Es decir, que intentarán ocupar en primer lugar los orbitales con menor energía. El orden de llenado viene dado por algunas reglas y principios que exponemos a continuación:

Regla de Hund:

- Los electrones se distribuyen en el átomo de menor a mayor energía. Primero se ocupan los orbitales más cercanos al núcleo.
- Dentro de una misma subcapa, los electrones comienzan a colocarse uno en cada orbital (electrones desapareados). Cuando ya no quedan más orbitales libres, rellenan los que tenían un electrón (se habla entonces de electrones apareados)

Principio de exclusión de Pauli: *En un átomo, no podemos tener dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales.* Esto explica el hecho de que en el mismo orbital sólo podemos tener dos electrones, ya que sólo hay dos valores de m_s.

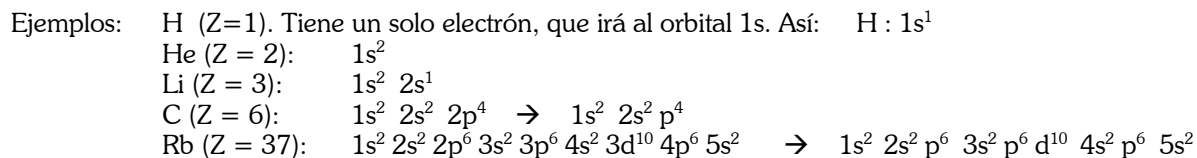
Regla de Möller: Resume el orden de energía de los orbitales y nos indica cuáles serán ocupados antes.



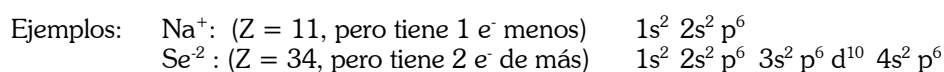
CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA DE UN ELEMENTO:

Establecer la configuración electrónica de un elemento consiste en indicar la distribución de los electrones que tiene un átomo de dicho elemento.

Se van indicando por orden los distintos orbitales ocupados por electrones y el nº de electrones que tienen, siguiendo la regla de Möller. Terminamos de llenar cuando hemos llegado al número total de electrones que corresponden a ese elemento.



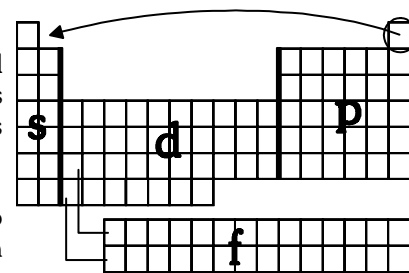
Nota: cuando tenemos un ión, hay que calcular previamente el número de electrones que tiene el átomo, a partir del número atómico y la carga eléctrica.



Importancia de la última capa:

La configuración electrónica del último nivel (capa) ocupado es fundamental a la hora de ver las propiedades químicas de los elementos, ya que son esos electrones más externos, los que van a interactuar con los electrones externos de otros átomos, dando lugar a las reacciones químicas.

Si miramos en la tabla periódica, todos los elementos del mismo grupo tienen iguales propiedades químicas. Esto se debe a que poseen la misma configuración electrónica en su capa más externa.



Último orbital en ser llenado

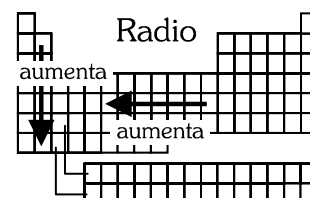
Todos los átomos tienden a ser lo más estables que puedan. Esta estabilidad la consiguen si tienen llena de electrones su capa más externa. Entonces, los átomos tendrán tendencia a ganar o perder electrones para conseguir esa estabilidad. Esta es la base de lo que será el Tema 3: el Enlace Químico.

2.5 PROPIEDADES PERIÓDICAS:

Ya hemos visto que la clasificación de los elementos químicos en la tabla periódica está hecha basándose en las propiedades químicas de dichos elementos. En este apartado estudiaremos algunas de esas propiedades, que están relacionadas con la configuración electrónica de los átomos de cada elemento.

Radio atómico: El radio (el tamaño) de un átomo viene marcado por el tamaño de la corteza electrónica. Depende básicamente de dos factores, por orden de importancia:

- El número de capas (n) que posea el átomo. A mayor nº de capas, mayor será el radio del átomo. El nº de capas nos lo indica el periodo en el que se encuentra el elemento (ej: el Cl, del periodo 4, tiene 4 capas electrónicas). Así, vemos que, dentro de un mismo grupo, conforme bajamos en la tabla, tenemos un mayor nº de capas, y un mayor radio.



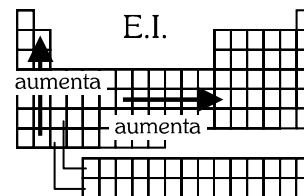
- La atracción que sufran los electrones por parte del núcleo. Si los electrones externos están muy atraídos por el núcleo, se acercarán más a este, con lo que el átomo tendrá menor tamaño que otro con menor atracción. Para los átomos con muchos electrones, además, influye el apantallamiento, o repulsión entre electrones, que hace que se alejen unos de otros, haciendo más grande el átomo y aumentando el radio.

El estudio conjunto de estos factores se vuelve complicado, pero en general, sin profundizar, podemos considerar que:

- Al descender en el grupo, el radio aumenta (hay cada vez mayor nº de capas)
- Al avanzar en el mismo periodo, el radio atómico disminuye (esto no se cumple para los gases nobles)

Energía de ionización (E.I.): Es la energía que hay que suministrar a un átomo del elemento en estado gaseoso para arrancar su electrón más externo (de su última capa).

Es lógico que haya que darle energía para extraer el electrón, ya que hay que vencer la atracción eléctrica del núcleo. Cuanto más cerca esté la capa exterior (menor n), mayor será la atracción del núcleo y más energía habrá que suministrarle. Lo contrario ocurre si el electrón está más lejos. Es decir, al descender dentro del mismo grupo, la E.I. disminuye.

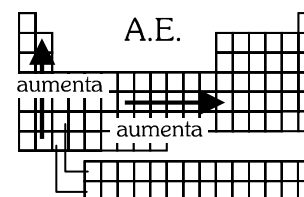


Al avanzar dentro del mismo periodo, como en general los electrones externos van siendo cada vez más atraídos por el núcleo, hará falta más energía para extraerlos. Así, en general, al avanzar en el periodo, la E.I. aumenta.

Esta que hemos visto es lo que se conoce como primera energía de ionización. Existe la 2ª E.I. (al quitar un 2º electrón), la 3ª E.I., etc...

Afinidad electrónica (A.E.): Energía que desprende un átomo del elemento en estado gaseoso al captar un electrón en su última capa.

Si comparamos con la E.I., el concepto es justo el contrario. Si para quitar un electrón hay que suministrar energía, al añadir un electrón, se desprenderá energía. Esto, sin embargo, tiene excepciones, ya que para los elementos que tienen la última capa llena (gases nobles) o alguna subcapa llena o a medio llenar, puede darse el caso de que sea necesario darle energía al átomo para que acepte el electrón.

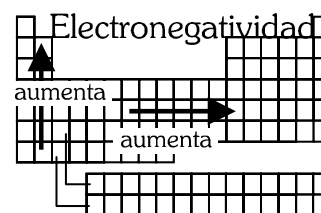


Sin entrar en un estudio en profundidad, en general podemos decir que la A.E. varía de la misma forma que la E.I.

Electronegatividad: Esta propiedad está muy relacionada con el tema siguiente, el del enlace químico.

Cuando los átomos se unen para formar moléculas o redes iónicas, intercambian o comparten electrones de sus capas externas. La electronegatividad es la tendencia que tienen los átomos a atraer hacia su núcleo estos electrones compartidos.

El valor de esta propiedad sólo puede establecerse comparando los elementos entre sí, de dos en dos. Existe una escala relativa, llamada escala de Pauling, en la que se toma como elemento de referencia el más electronegativo, el flúor, al que se le da el valor 4,0. Por comparación, se obtiene la electronegatividad del resto de los elementos.



Los gases nobles, debido a que tienen la última capa llena, no suelen formar enlaces, y tienen electronegatividad 0.

La electronegatividad, en general, varía de la misma forma que E.I. y A.E. Disminuye al descender dentro de un grupo y aumenta al avanzar en el mismo periodo.

Metales y No Metales: Vistas las propiedades anteriores, y observando la tabla, podemos ver en qué se diferencian los elementos que consideramos *metales* de los *no metales*.

METALES	NO METALES
Tendencia a perder electrones.	Tendencia a ganar electrones.
Bajas E.I. , A.E. , electronegatividad	Altas E.I. , A.E. , electronegatividad

Los semimetales tienen propiedades intermedias, y dependen del elemento con el que se combinen.

Valencia: Es la tendencia a ganar, perder o compartir electrones que tiene un átomo para conseguir la mayor estabilidad posible (configuración de gas noble). También se denomina estado de oxidación.

Cuando la tendencia es a arrancar electrones a otro elemento, o a perderlos, se habla de valencia iónica.

Cuando la tendencia es a compartirlos, se habla de valencia covalente.

Esta propiedad depende de la configuración electrónica de la última capa. De hecho, los elementos del mismo grupo tienen propiedades químicas parecidas porque poseen idéntica configuración electrónica en su última capa.

Ej: F ($Z = 9$): $1s^2 2s^2 p^5$ Le falta $1 e^-$ para tener su última capa llena. Tiene tendencia a ganar un e^- .
Valencia -1

Ca ($Z = 20$): $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^2$. Le es más "fácil" perder los dos e^- de su última capa, y así se queda con la configuración del gas noble anterior, el Ar. Valencia +2

CUESTIONES Y PROBLEMAS

1. Completar la siguiente tabla:

	Z	A	N	Nº p+	Nº e-	Tipo ión
${}^{15}_{8}\text{O}^{2-}$						
Ca^{+2}			21			
	16		16			neutro
		30	16		15	
Fe^{+3}		56				

2. El cobre aparece en la naturaleza constituido por dos isótopos de masas atómicas 62,930 uma y 64,928 uma respectivamente. El primero se encuentra en la naturaleza en una proporción del 69,1 %. Calcular la masa atómica del cobre.

3. Los siguientes datos se refieren a la abundancia de los isótopos de un cierto elemento en la naturaleza. Calcular la masa atómica de dicho elemento. ¿De qué elemento se trata?

	Isótopo 1	Isótopo 2	Isótopo 3	Isótopo 4
masa (uma)	49,946	51,94	52,94	53,939
abundancia(%)	4,31	83,76	9,55	2,38

4. La plata presenta en la naturaleza dos isótopos, cuyas masas atómicas son 106,905 uma y 108,905 uma. Sabiendo que la masa atómica de la plata es de 107,868 uma, calcular la abundancia en la naturaleza de cada isótopo, en %.

5. Escribir las configuraciones electrónicas de los siguientes átomos:

- a) O ; Li ; Ni ; I ; Au ; Fr ; U ; Rn ; Eu
 b) Mg^{+2} ; F^- ; Ne ; Cs^+ ; Xe ; Sb^{3-}

6. Según las siguientes configuraciones electrónicas, situar cada elemento en la tabla periódica e identificarlo.

- a) $1s^2 2s^2 p^6 3s^1$ b) $1s^2 2s^2 p^4$ c) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^5$ d) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6$

7. Razonar las siguientes cuestiones:

- a) Si un electrón de un átomo de hidrógeno salta de la primera a la cuarta capa. ¿Gana o pierde energía?
 b) ¿Qué diferencia existe entre órbita y orbital?
 c) Diferencias entre el modelo atómico de Rutherford y de Thomson.
 d) ¿Cuántos orbitales hay en la tercera capa de cualquier átomo? ¿Cuántos electrones caben en dicha capa?
 e) En las siguientes parejas de elementos, ¿cuál de ellos tiene mayor radio atómico?
 1) Li - K 2) Se - O 3) Na - S 4) I - Rb
 f) Con las mismas parejas de antes. ¿Qué elemento de la pareja tendrá mayor energía de ionización? ¿Y mayor afinidad electrónica? ¿Y mayor electronegatividad?
 g) ¿Por qué el conjunto de los metales de transición está formado por diez grupos?
 h) Si la configuración electrónica de la última capa de un elemento neutro es $5s^2 p^2$. ¿De qué elemento se trata?
 i) La corteza electrónica es muy densa ¿verdadero o falso?
 j) El átomo no puede ser neutro porque contiene cargas eléctricas. ¿verdadero o falso?
 k) En cada orbital de un átomo sólo caben dos electrones. ¿verdadero o falso?
 l) ¿Por qué, después del descubrimiento del protón, era necesaria la existencia de otra partícula sin carga? ¿De qué partícula se trataba?

8. ¿Cuál de las siguientes líneas espectrales se encuentran en la región visible del espectro? ¿Qué frecuencia y energía va asociada a cada una de ellas?

- a) 350 nm b) 500 nm c) 200 nm d) 1000 nm e) 770 nm
 (recuerda: $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$)

9. Tenemos el valor de longitud de onda de tres líneas espectrales que corresponden al Li (670 nm), Ne(616 nm) y Hg (454 nm):

- a) Calcula la frecuencia asociada a cada una de ellas.
 b) Calcula la energía asociada a cada una de ellas.

10. El color amarillo de la luz de vapor de sodio proviene de la raya D del espectro visible de dicho elemento. La longitud de onda correspondiente a dicha raya es 589 nm. Calcula la energía asociada a la radiación.

11. La serie de Lyman de líneas del espectro de emisión del hidrógeno se encuentra en el ultravioleta. Estas líneas corresponden a transiciones electrónicas desde estados de energía superiores hasta $n=1$. Una línea de la serie de Lyman tiene longitud de onda de 95 nm. ¿Cuál es el nivel cuántico del estado de energía superior, n ?

- 12.** Determina la longitud de onda de las dos primeras líneas de la serie de Balmer.
- 13.** Calcular la longitud de onda, frecuencia y energía de la radiación emitida por un átomo de hidrógeno cuando $n_2 = 2$ y $n_1 = 5$.
- 14.** a) Calcula la longitud de onda y la frecuencia de la 3ª raya de la serie espectral de Lyman.
b) Interpreta según el modelo de Böhr el origen de esta raya
c) Si la energía del electrón en la órbita de llegada es de $-13,6$ eV. ¿Cuánto vale la energía del electrón en la órbita de salida? (dato: $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$)
- 15.** Razonar si serían posibles cada uno de los conjuntos de números cuánticos para cada electrón y denominar el correspondiente subnivel de energía:
a) $n=1; l=0; m=0; s= +1/2$ b) $n=1; l=3; m=3; s= -1/2$ c) $n=2; l=1; m=-1; s= +1/2$
d) $n=5; l=2; m=2; s= -1/2$
- 16.** Flúor, cloro, bromo y yodo son elementos denominados halógenos, de números atómicos 9, 17, 35 y 53 respectivamente. Escribe sus configuraciones electrónicas. ¿En qué se diferencian? ¿En qué se parecen?

Soluciones numéricas a los problemas:

2. $\text{Mat}(\text{Cu}) = 63,547 \text{ u.}$

3. $\text{Mat} = 51,997 \text{ u.}$

4. Isótopo 1: 51,85 % , Isótopo 2: 48,15 %

8. Están comprendidas dentro del espectro visible las radiaciones b) y c). Las frecuencias y energías son:

a) $\nu = 8,57 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 5,66 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

b) $\nu = 6 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 3,96 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

c) $\nu = 1,5 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 9,9 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

d) $\nu = 3 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 1,98 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

e) $\nu = 3,9 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 2,57 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

9. Li) $\nu = 4,48 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 2,96 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Ne) $\nu = 4,87 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 3,21 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Hg) $\nu = 6,61 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } E = 4,36 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

10. $E = 3,36 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

11. $n = 5.$

12. Línea 1: (salto de $n = 3$ a $n = 2$) $E = 6,56 \cdot 10^{-7} \text{ m.}$ Línea 2: (salto de $n = 4$ a $n = 2$) $E = 7,29 \cdot 10^{-7} \text{ m.}$

13. $E = 4,56 \cdot 10^{-19} \text{ J, } \nu = 6,91 \cdot 10^{14} \text{ Hz, } \lambda = 4,34 \cdot 10^{-7} \text{ m}$

14. a) $\nu = 3,09 \cdot 10^{15} \text{ Hz; } \lambda = 9,72 \cdot 10^{-8} \text{ m}$

c) $E_i = -1,366 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

ANEXO: ORBITALES ATÓMICOS

Orbital atómico: Estado permitido para el electrón en el átomo.

Los orbitales surgen como soluciones de la ecuación de onda de Schrödinger para el electrón en el átomo.

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \right) + V(r) \cdot \Psi = E \cdot \Psi$$

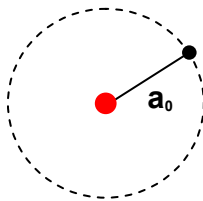
- A cada orbital atómico corresponde: - Un valor determinado de energía.
- Una zona de probabilidad de encontrar al electrón.

Cada orbital viene caracterizado por el valor de tres números cuánticos:

- n:** n = 1, 2, 3... 7
- l:** l = 0 ... n-1 (l = 0 → s, l = 1 → p, l = 2 → d, l = 3 → f)
- m:** m = -l ... +l

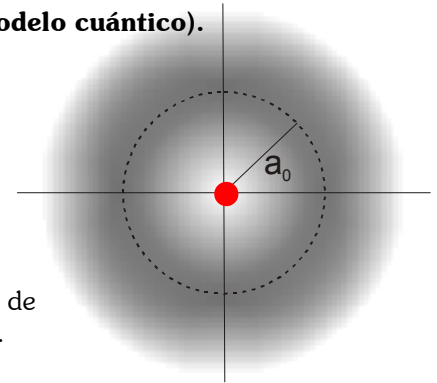
Dentro de cada orbital tenemos dos posibilidades de spin (giro) para el electrón → nº cuántico **s**. s = +½, -½
 Por lo tanto, cada electrón en el átomo viene dado por un conjunto de cuatro números cuánticos. (n, l, m, s)

Diferencia entre órbita (según el modelo de Bóhr) y orbital (según el modelo cuántico).



Órbita (Bóhr):

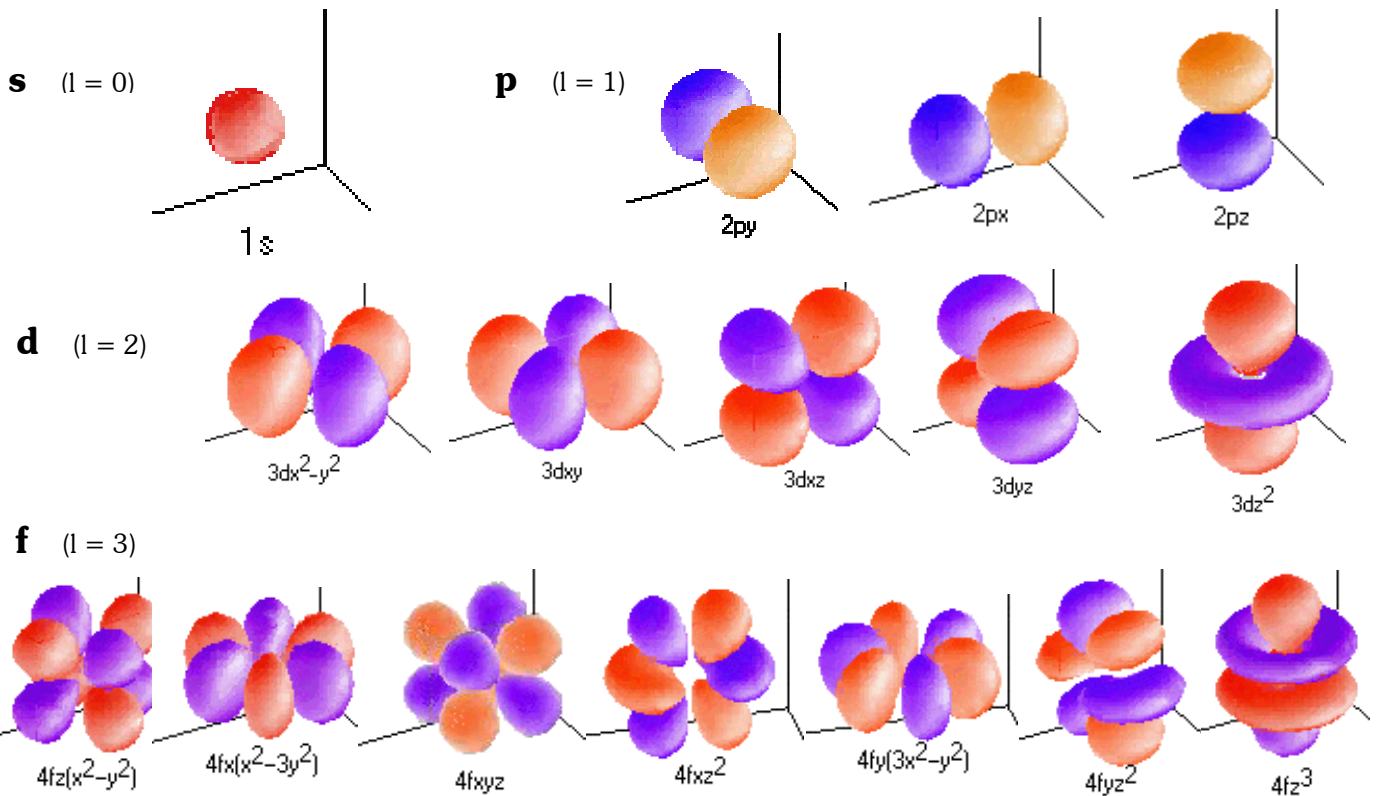
- Trayectoria y velocidad bien definidas.



Orbital (modelo cuántico):

- Energía bien definida.
- Sólo conocemos la probabilidad de encontrar al electrón en un punto.
- No hay una trayectoria definida.

Zonas de distribución de probabilidad de los orbitales, según los valores de n, l, m:



- El valor de **n** indica el tamaño de la zona de probabilidad. (por ejemplo, la zona de probabilidad del 2s será mayor que para el 1s)
- El valor de **l** indica su forma.
- El valor de **m** indica su orientación en el espacio.