

Estructura Atómica

Tema 1

1. Estructura Atómica

1.1 Modelos atómicos: de Dalton a Rutherford

- 1.1.1 Modelo atómico de Dalton
- 1.1.2 Modelo atómico de Thomson
- 1.1.3 Modelo atómico de Rutherford

1.2 Modelo atómico de Bohr

- 1.2.1 Espectro electromagnético
- 1.2.2 Espectros atómicos de emisión y absorción
- 1.2.3 Modelo atómico de Bohr

1.3 Introducción a la teoría cuántica

- 1.3.1 Planck y la cuantización de la energía
- 1.3.2 Dualidad onda corpúsculo
 - 1.3.2.1 El Efecto fotoeléctrico
 - 1.3.2.2 Hipótesis de De Broglie
- 1.3.3 Principio de incertidumbre de Heisenberg
- 1.3.4 La ecuación de Schrödinger y los números cuánticos
 - 1.3.4.1 Interpretación geométrica
- 1.3.5 Configuración electrónica

1.1. Modelos atómicos: de Dalton a Rutherford

A finales del siglo XVIII; Boyle, Lavoisier y Proust defendían la teoría atomista, enunciada por Leucipo y Demócrito (450 a.C.) que proponía la existencia de un cuerpo indivisible o “átomo” constituyente de la materia. Posteriormente se postularon diversos modelos tratando de explicar la estructura de este átomo.

1.1.1. Modelo atómico de Dalton (1808)

En 1808, John Dalton propone la hipótesis atómica, en la que explica **el átomo** como una **esfera maciza e indivisible**. Los postulados de su teoría son:

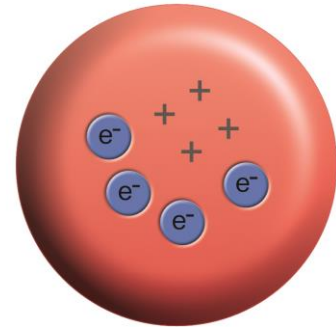
- Los átomos no presentan carga.
- Cada elemento se forma por un tipo concreto de átomos.
- Los átomos de un elemento son de igual masa, distinta a la de otros elementos.
- Las moléculas se forman por unión de átomos, permaneciendo intactos en ella.

1.1.2. Modelo atómico de Thomson (1904)

En 1875 Crookes hizo pasar corriente eléctrica por un gas, descubriendo los rayos catódicos. Estos viajan en línea recta desde el cátodo (polo $-$) hasta el ánodo (polo $+$) y se demostró que tenían energía, masa y carga negativa.

En 1886 Goldstein descubrió la existencia de los rayos canales, que viajan en sentido contrario a los catódicos, tienen mucha mayor masa y carga positiva.

En 1897 Thomson propone que los rayos catódicos están formados por partículas de masa muy pequeña, los denominó electrones (e^-). Los rayos canales los explicó como átomos ionizados, es decir, átomos que al colisionar con los rayos catódicos habían perdido electrones y entonces poseían carga positiva.



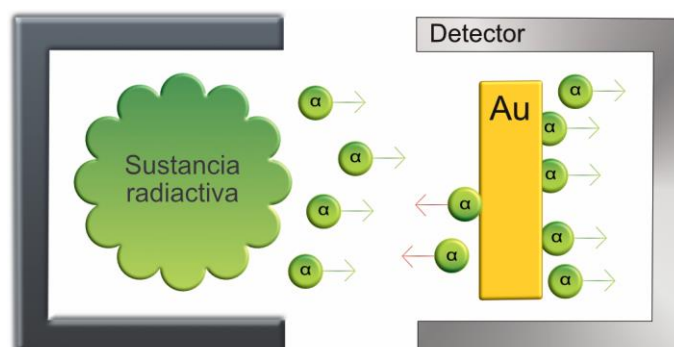
Este modelo es el primero en hablar de un **átomo divisible**.

Los postulados son:

- El **átomo** tiene **forma esférica** y en su interior se **incrustan los electrones**.
- La **esfera atómica** tiene la cantidad de **carga positiva** necesaria para contrarrestar la **carga negativa de los electrones** que en ella se incrustan.

1.1.3. Modelo atómico de Rutherford (1911)

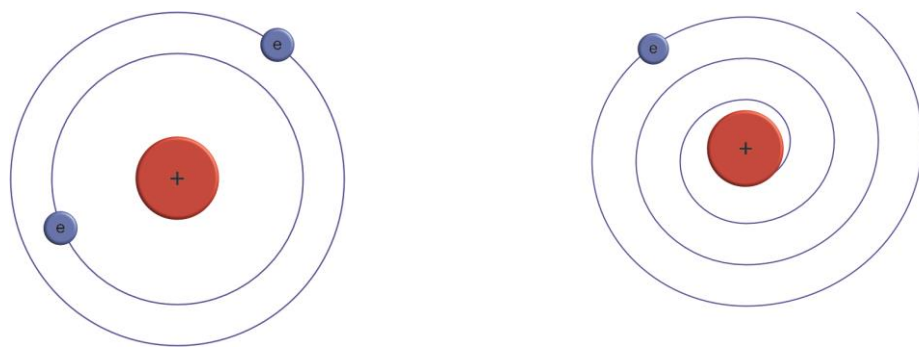
El descubrimiento de la radiactividad por Becquerel y los posteriores avances de Marie Curie, posibilitaron el uso de partículas alfa en el estudio de la materia. Rutherford usó estas partículas para bombardear una lámina de Au, observando que la mayoría de las partículas alfa atravesaban la lámina sin apenas desviarse, por lo que **el átomo debía ser un su mayor parte espacio vacío**. Muy pocas partículas se desviaron apreciablemente y las que rebotaron hacia atrás lo hicieron con gran intensidad, por lo que casi toda **la masa del átomo debía estar concentrada** en una pequeña **zona central con carga positiva: el núcleo**. **La materia es discontinua**



El **modelo de Rutherford** o “**modelo planetario**” por su semejanza con el sistema solar, tenía los siguientes postulados:

- El **átomo** es prácticamente **vacío** y está **formado por un núcleo y la corteza**.
- En **el núcleo** , donde se concentran la masa atómica se encuentran **los protones cargados positivamente**.
- En **la corteza**, los **electrones orbitan alrededor del núcleo**.
- El **núcleo es 10^5 veces menor que la corteza**.

Este modelo tuvo carencias desde su implantación, puesto que Maxwell ya había demostrado, en 1865, que **toda carga eléctrica en movimiento que sufre aceleración pierde energía**, por lo que los electrones no podían orbitar indefinidamente alrededor del núcleo, sino que se irían aproximando formando una espiral.

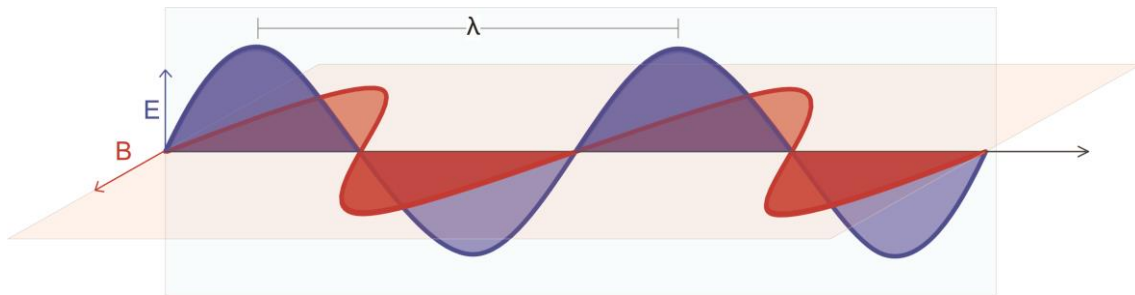


1.2. Modelo atómico de Bohr. Espectro electromagnético.

La necesidad de mejorar el modelo de Rutherford hace que Bohr postule un nuevo modelo atómico. Para comprender bien este modelo, es necesario conocer el significado de los espectros atómicos en los que Bohr se basó.

1.2.1. Espectro electromagnético

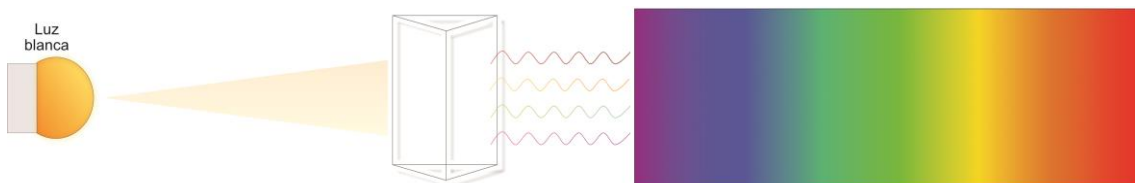
Las ondas electromagnéticas, producidas por cargas eléctricas en movimiento, son perturbaciones en el espacio que transmiten energía mediante oscilaciones (vibraciones). Están formadas por un componente campo eléctrico (E) perpendicular al componente campo magnético (B).



Las **ondas electromagnéticas** se clasifican en función de su **longitud de onda (λ)** o **frecuencia (ν)**, inversamente proporcionales entre sí, en lo que se conoce como **el espectro electromagnético**.

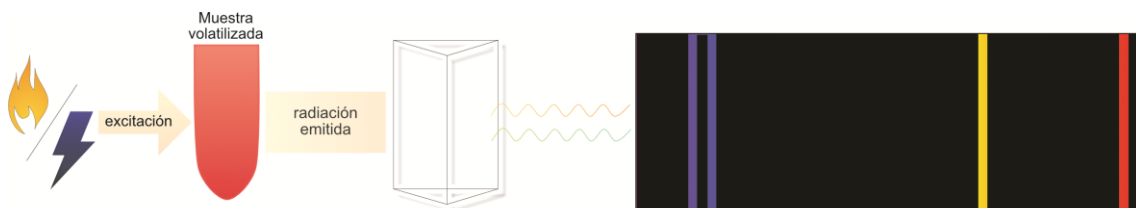
La luz que los humanos somos capaces de ver es solo una región de todo el espectro electromagnético. En la región del visible, percibimos cada longitud de onda como un color distinto.

La luz blanca es la superposición de un conjunto de ondas de todos los colores, por lo que al hacer pasar esta luz por un prisma se produce la difracción del haz, descomponiéndose en las ondas que lo forman generando un **espectro continuo** (arcoíris).

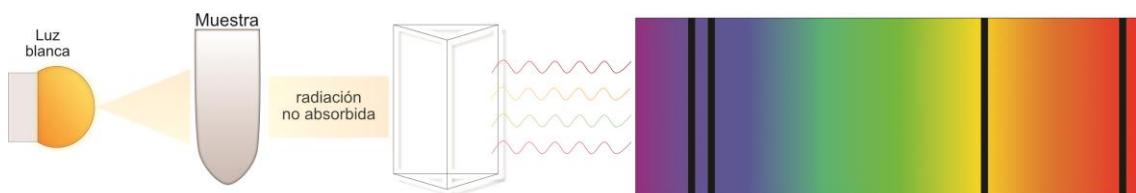


1.2.2. Espectros atómicos

Los espectros atómicos son el resultado de la interacción de la radiación electromagnética con los electrones. Si se excitan los electrones de una sustancia en estado gaseoso, al volver estos a su estado fundamental, desprenden energía en forma de luz. Mediante la difracción de la luz emitida, puede determinarse la distribución de la radiación desprendida, apareciendo en forma de bandas discontinuas, conocidas como el **espectro atómico de emisión**. Esto indica que la energía que emiten los electrones tiene valores restringidos. **Espectro discontinuo.**



Por otro lado, se puede hacer pasar luz blanca a través de la sustancia, los electrones del elemento absorberán ciertas ondas, que aparecen en el detector en forma de bandas oscuras, mientras dejan pasar el resto de la radiación que no absorbe la muestra **espectro discontinuo**. Esto se conoce como **espectro atómico de absorción**.



Ambos espectros atómicos son complementarios y **únicos para cada elemento**, actuando como su huella dactilar.

1.2.3. Modelo de Bohr para el átomo de hidrógeno 1913

-El electrón gira en orbitas circulares, que son niveles energéticos que están permitidos.

-La energía del electrón es $E = -\frac{R_H}{n^2} J$

(n) = número cuántico principal

$$R_H \text{ (cte de Bohr)} = 2,18 * 10^{-18} J$$

-Cuando el electrón pasa de un nivel de mayor energía a otro de menor energía emite radiación en forma de luz (fotones). La energía del fotón, equivalente a la energía del tránsito entre ambos niveles se puede calcular:

$$E_{\text{foton}} = E_2 - E_1 = h\nu = hc/\lambda$$

$$\Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

Aunque el modelo de Bohr supuso un éxito en la explicación del espectro atómico del hidrógeno, presentaba estos inconvenientes:

-**No explica** satisfactoriamente **los espectros de átomos polielectrónicos**.

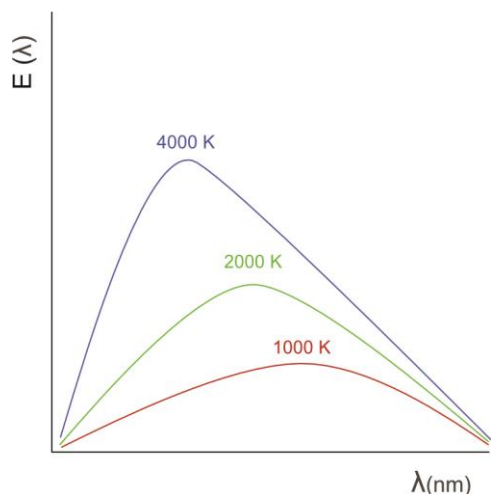
-**No explica** la causa de que el **número cuántico principal tome valores discretos**.

-Posteriormente se descubre que **algunas líneas espectrales son en realidad varias** que aparecen muy próximas, debido a que poseen energías muy parecidas. El desdoblamiento de estas bandas **no es explicado por el modelo de Bohr**.

Tratando de solventar los problemas del modelo de Bohr se propusieron la existencia del **número cuántico secundario (l)** que explica la geometría del orbital, un **número cuántico magnético (m)** para explicar la orientación de las órbitas y un **número cuántico de spin (s)** relacionado con la rotación del electrón sobre sí mismo.

1.3 Introducción a la Teoría Cuántica

1.3.1 Planck y la cuantización de la energía



Los cuerpos emiten radiación a cualquier temperatura; por ejemplo, el cuerpo humano emite radiación infrarroja por estar a 37°C y el filamento de una bombilla emite luz amarilla cuando se calienta. Para estudiar mejor este comportamiento se ideó un modelo llamado **cuerpo negro**, en el que **se estudiaba la radiación emitida en función de la temperatura** a la que se calentaba.

Se debe observar en la gráfica lo que ocurre al aumentar la temperatura:

-**Aumenta la energía total U** (área bajo la curva) según la ley de Stefan:

$$U = \sigma T^4$$

-**El máximo de la curva se desplaza hacia menor λ .**

La **física clásica** consideraba que la **radiación** emitida poseía un **carácter ondulatorio**, por lo tanto, la energía de la radiación formaba un **continuo**, es decir, **podía tener cualquier valor**. Según esta teoría los cuerpos, a temperatura ambiente, debían emitir radiación en la zona del visible y el ultravioleta; lo **cual es obvio que no ocurre**. Este problema de la física clásica se conoció como **catástrofe ultravioleta**.

Para solventar este inconveniente, Max Planck propuso su teoría cuántica:

-**La energía se emite de forma discreta**, no continua, como **paquetes o cuantos de energía** (como ocurriría si la radiación se emitiese en forma de partículas).

-**La energía** correspondiente a **un cuanto es proporcional a la frecuencia** de la radiación, pudiéndose expresar como:

$$E = h\nu \quad h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J Cte Planck}$$

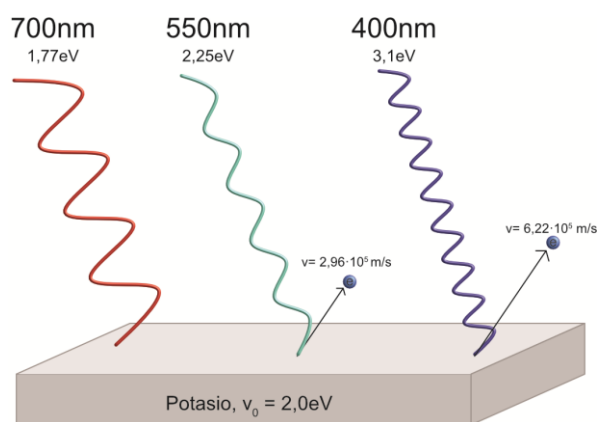
Por lo tanto se descubrió que la física clásica era incapaz de explicar que ocurría con el cuerpo negro porque **la energía no formaba un continuo, si no que tomaba valores discretos, estaba cuantizada.**

1.3.2 Dualidad Onda-Corpúsculo

Como consecuencia de las hipótesis de Planck, se tuvieron que revisar los conceptos clásicos de onda y corpúsculo. Esto dio lugar a experimentos que sugerían que, en determinadas circunstancias, las **partículas se comportan como ondas y las ondas como partículas**

1.3.2.1 Efecto fotoeléctrico

Haciendo incidir radiación electromagnética (luz) sobre una lámina de metal, se detectó una emisión de electrones del metal. Einstein propuso que este comportamiento de la luz se debía a un carácter corpuscular de la misma y supuso la existencia de cuerpos, que denominó **fotones**. Estos fotones colisionaban con los electrones y al colisionar, los fotones transmitían su energía cinética a los electrones que salían despedidos del metal. Como ocurriría con un choque entre dos bolas de billar.



Se demostró que:

-Este fenómeno ocurría solo cuando la onda superaba un valor mínimo de frecuencia, llamado **frecuencia umbral** ν_0 , por debajo de la cual la radiación no lograba “arrancar” ningún electrón del metal. **Este valor es característico de cada metal.**

-Cuanto **mayor era la frecuencia** de la radiación incidente, mayor energía poseían los fotones y, a su vez, **mayor energía cinética y velocidad**, poseían los electrones arrancados.

-El número de electrones arrancados (intensidad de corriente) dependía de la intensidad de la radiación (cantidad de radiación).

Basándose en la cuantización de Planck, Einstein propuso que la energía de un fotón se correspondería con la energía de un cuanto de radiación, quedando expresado en la ecuación de Einstein-Planck:

$$E_{\text{fotón}} = h\nu$$

Se puede relacionar la energía de la luz incidente con la del electrón arrancado:

$$E_{\text{luz}} = \phi + E_c = h\nu_0 + \frac{1}{2}mv^2 = h\nu$$

1.3.2.2 Hipótesis de De Broglie

De forma similar al comportamiento onda-corpúsculo de la luz, De Broglie extendió dicha dualidad a la materia, demostrando que las partículas llevan asociada una longitud de onda que depende de su momento lineal p y que puede ser calculada:

$$\lambda_{\text{partícula}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

La energía asociada también se puede calcular, teniendo en cuenta las ecuaciones de Einstein, Planck y la anterior descrita por De Broglie:

$$E_{\text{partícula}} = mc^2 = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

1.3.3 Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Habiéndose demostrado el carácter dual onda-corpúsculo de la materia, Heisenberg descubrió que resulta imposible medir simultáneamente algunas magnitudes de un sistema, en concreto **la posición y la cantidad de movimiento de una partícula**, como el electrón en un átomo. Por lo tanto, para referirse a estas magnitudes se habla en términos de probabilidad, como por ejemplo; la **probabilidad de encontrar una partícula en una determinada posición**. Así Heisenberg enunció el principio de incertidumbre:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/2\pi$$

De la ecuación se deduce que cuando **se aumenta la precisión de una de las medidas, disminuye la precisión de la otra**.

1.3.4 Ecuación de Schrödinger

A partir del principio de incertidumbre, se dedujo la necesidad de buscar una nueva física, que pudiese explicar lo que la física clásica no podía. La física cuántica. Para ello, Schrödinger introdujo el estudio del electrón como onda, suponiendo que debía tener una función de onda Ψ que describiese su comportamiento. **La función Ψ debía ser solución de una ecuación de onda**, que para el caso de un electrón sometido a un potencial eléctrico por parte del núcleo, toma la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi$$

Un orbital atómico es una solución de la ecuación aplicada al átomo, es decir, es un estado de energía permitido en un átomo.

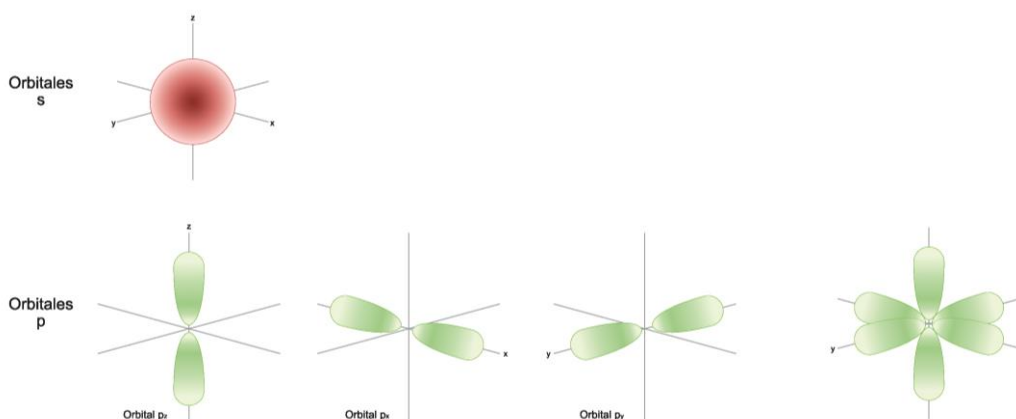
La función de onda correspondiente a un determinado orbital viene determinada por cuatro números, llamados **números cuánticos**, que aparecen

al resolver la ecuación de onda. Coinciden con los números introducidos por Bohr y Sommerfeld para explicar los espectros, y son los siguientes:

Número cuántico	Valores posibles	Ejemplo de valores	Interpretación
<i>n</i> número cuántico principal	$n = 1,2,3,4,5 \dots$	$n = 1,2,3,4 \dots$	Capa o nivel energético principal
<i>l</i> número cuántico secundario o azimutal	$l = 0 \dots (n - 1)$	Si $n = 4$ $l = 0,1,2,3$ (s, p, d, f)	Forma geométrica del orbital
<i>m</i> número cuántico magnético	$m = -l \dots l$	Si $l = 3$ $m = -3, -2, \dots 3$	Dirección del momento angular orbital del electrón
<i>s</i> número cuántico de spin	$s = -1/2, 1/2$	$s = -1/2$ o $1/2$	Dirección del momento rotacional del electrón

1.3.4.1 Interpretación geométrica de la función de onda

Considerando al electrón como onda, se propaga según su función de onda Ψ . Sin embargo, considerando al electrón como partícula, la función Ψ no tiene sentido físico, pero su cuadrado nos indica la densidad de probabilidad; es decir, la probabilidad de encontrar al electrón en un punto concreto del espacio. Representando los puntos donde resulta más probable encontrar al electrón, se obtiene un dibujo, o región espacial, que determina la “forma” del orbital.



1.3.5 Configuración electrónica

La configuración electrónica de un elemento, es la distribución (orden de llenado de los orbitales) que toman los electrones en un átomo de dicho elemento.

La distribución de los electrones en un átomo se rige por unos principios básicos:

a) Principio de mínima energía o Aufbau

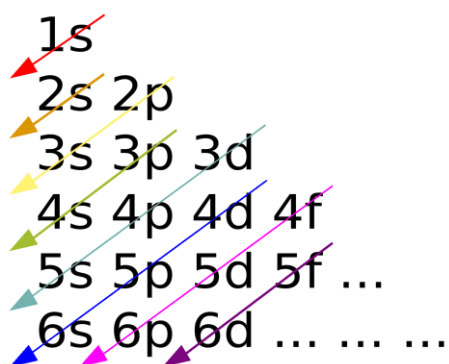
El orden de llenado de los electrones en un átomo se hace en **orden creciente de energía** (de menor a mayor energía). Este orden viene determinado, fundamentalmente, por la suma de los números cuánticos $(n+l)$

b) Principio de la máxima multiplicidad o regla de Hund

Debido a la repulsión de los electrones entre sí, se sitúan **lo más desapareados posible**. Esto quiere decir que en una misma subcapa los electrones llenan primero cada orbital vacío disponible. Después, los electrones ocupan aquellos en los que ya hay un electrón (colocados con spines opuestos).

c) Principio de exclusión de Pauli

En un átomo **no pueden existir dos o más electrones con los cuatro números cuánticos iguales**. Por lo tanto, en un orbital solo pueden existir dos electrones, que difieren en los dos posibles valores del número cuántico s o de spin.



El diagrama de Meller es una sencilla interpretación del orden de llenado de los electrones en los orbitales.

