

MODELO ATÓMICO DE LA MATERIA

1. Constituyentes básicos del átomo

En 1808, el químico inglés J. Dalton (1766-1844) formuló su célebre teoría atómica. En ella rompía con las ideas tradicionales y postulaba que la materia está formada por átomos. A partir de ese momento comenzó una etapa de la química y la física repleta de asombrosas evidencias experimentales sin fundamento teórico.

El concepto de átomo como partícula material indivisible se mantuvo con éxito durante casi un siglo, dado que la técnica del momento no permitía otras posibilidades. No obstante, la electricidad y la electroquímica, en cuyo estudio profundizaron Ampère y Faraday, sugerían una relación íntima entre la materia y las cargas eléctricas.

La radiactividad natural, descubierta de manera casual en 1896 por el físico francés Henri A. Becquerel (1852-1908), llevó al conocimiento de tres clases de partículas: los rayos alfa, con carga positiva, los rayos beta, partículas con carga negativa, y un tercer tipo sin carga y de naturaleza inmaterial, los rayos gamma. Todo ello sugería que los átomos no debían de ser la partícula indivisible que se creía.

El descubrimiento de las partículas subatómicas comenzó realmente cuando se impuso el tubo de descarga como herramienta de investigación en la naturaleza de la materia.

Así, el final del siglo XIX marcó el comienzo de un período de tres décadas definido por enormes cambios que modelaron la química de nuestros días.

1.1. El electrón

El estudio de la conductividad de gases a baja presión en un tubo de descarga reveló una luminiscencia en la pared del tubo opuesta al cátodo. La causa de esta luminiscencia era un chorro de partículas con carga negativa que parecía provenir del cátodo. A estas partículas se les dio el nombre de rayos catódicos (Fig. 1).

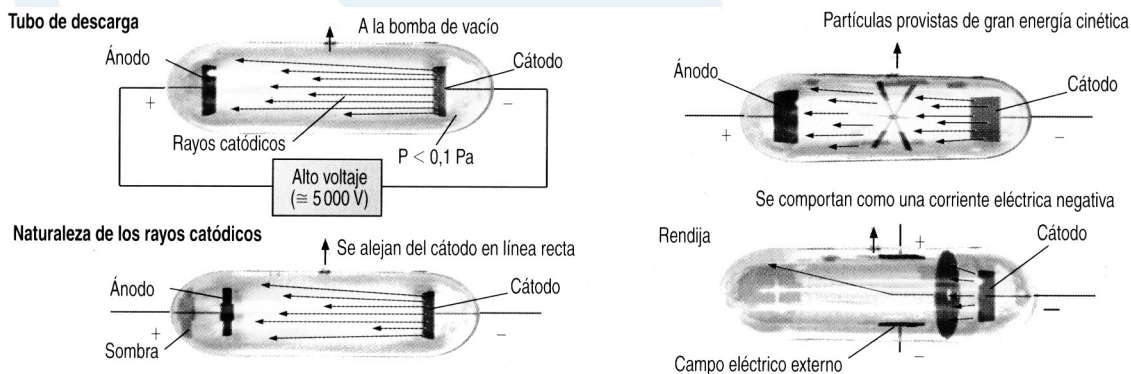


Figura 1: Esquema del tubo de descarga y comportamiento de los rayos catódicos

Se comprobó que los rayos catódicos obtenidos con diferentes gases son iguales entre sí y, en todos los casos, las partículas tenían una **relación carga/masa** idéntica. El valor de esta relación fue determinado por el físico inglés J.J. Thomson (1856-1940)

$$Q/m = -1,76 \times 10^8 \text{ Cg}^{-1}$$

En 1911 el físico estadounidense R. A. Millikan (1868-1953) determinó la carga de los rayos catódicos mediante su famoso experimento de la gota de aceite (Fig. 2).

Experimento de Millikan de la gota de aceite

El aceite se atomiza en pequeñas gotas, algunas de las cuales pasan a través de un hueco practicado en la tapa. Al ser irradiadas con rayos X, adquieren carga negativa.

Si se varía el voltaje entre las placas, la caída de la gota puede detenerse, momento en el que las fuerzas eléctrica, gravitatoria y de rozamiento (viscosidad) están en equilibrio.

De este modo, si se conocen la masa de la gota y el voltaje entre las placas, puede deducirse la carga de la gota.

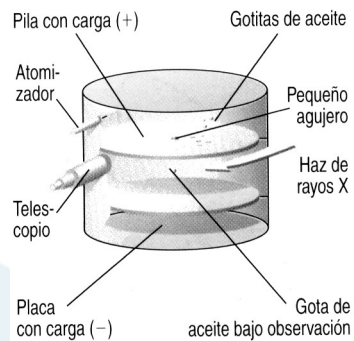


Figura 2: Experimento de Millikan

La carga medida en las gotas de aceite resultó ser siempre múltiplo de un valor determinado, $1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$, al que Millikan denominó **e**. A consecuencia de todo ello, pudo deducirse que la electricidad, como la materia, es otra magnitud que ya no debe considerarse continua, sino formada por partículas elementales llamadas electrones. La carga y la masa del electrón son las siguientes:

$$m_{\text{electrón}} = 9,109534 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$Q_{\text{electrón}} = -1,602189 \times 10^{-19} \text{ C}$$

Modelo atómico de Thomson

Cuando Thomson comprobó experimentalmente la constancia de la relación Q/m del electrón, propuso en 1898 que el átomo no debe considerarse como la partícula indivisible propuesta por J. Dalton en 1808, sino que debe de estar formado por cargas negativas, electrones. Los electrones están incrustados en una masa con carga positiva y de naturaleza aún no conocida (Fig. 3), aunque probablemente estaría compuesta por partículas elementales con carga positiva.

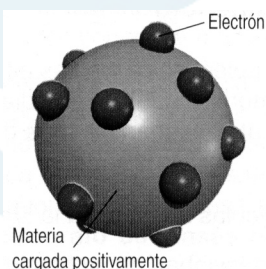


Figura 3: Modelo atómico de Thomson

La carga negativa total de los electrones es la misma que la positiva de la masa en la que se encuentran incrustados, de manera que el átomo es eléctricamente neutro.

Este modelo atómico desvelaba la naturaleza de los rayos catódicos (electrones que salen despedidos de los átomos del gas cuando éstos chocan contra el cátodo) y da una explicación a que sean idénticos independientemente del gas analizado.

1.2. El protón

En 1886, el físico alemán E. Goldstein (1850-1931) estudió con más de detalle el fenómeno que se produce en el tubo de descarga. Empleando un cátodo perforado observó una radiación de partículas con carga positiva que parecía provenir de los canales abiertos en el cátodo.

La nueva radiación recibió el nombre de **rayos canales** (Fig. 4).

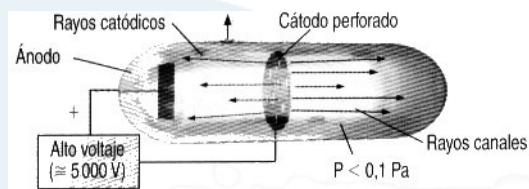


Figura 4: Tubo de descarga y rayos canales.

$$m_{\text{protón}} = 1,672649 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$Q_{\text{protón}} = 1,602189 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

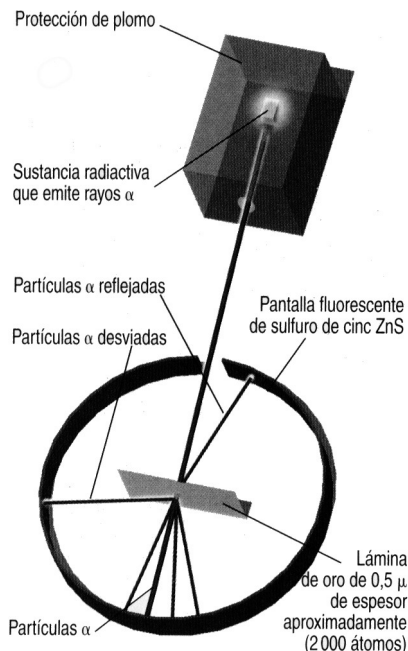
Las características de esta radiación son las siguientes:

- Está formada por partículas con carga positiva. Los rayos catódicos chocan con el gas enrarecido encerrado en el tubo y lo despojan de algún electrón. El resto positivo que queda se mueve atraído por el cátodo hasta chocar con él, o bien lo atraviesa si se le practica algún orificio o canal. Esto explica que sean diferentes de un gas a otro.
- La relación entre la carga y la masa es diferente según el gas empleado en el tubo. La razón Q/m de los rayos canales, originados cuando el gas era hidrógeno, resultó ser la mayor de las observadas. Al tratarse del átomo más ligero, si suponemos igualdad de carga, la carga positiva de la partícula debía ser la menor de las aisladas hasta el momento.

Como se comprobó más adelante, la carga de esas partículas era igual a la del electrón pero de signo contrario, por lo que, junto a las demás relaciones Q/m observadas, sugería la existencia de otra partícula subatómica con carga positiva: el **protón**.

En 1919 el físico neozelandés E. Rutherford (1871-1937) y el inglés J. Chadwick (1891-1974) observaron por primera vez el protón al bombardear ciertos átomos con partículas α . La masa del protón es unas 1 840 veces la masa del electrón.

Modelo atómico de Rutherford



En 1911 E. Rutherford empleó las partículas alfa para determinar la estructura interna de la materia (fig. 5). Al estudiar el comportamiento de estas partículas cuando atravesaban láminas delgadas de metal, pudo observar lo siguiente:

- La mayoría de las partículas atravesaba la lámina sin desviarse.
- Algunas partículas se desviaban de su trayectoria inicial.
- Otras partículas eran rechazadas por la lámina.

El modelo atómico propuesto por J. J. Thomson sugería que los átomos estaban formados por una distribución regular de carga y masa, y que éstos a su vez estaban unidos unos a otros formando la sustancia, en este caso el metal. En definitiva, la lámina metálica debía poseer una estructura interna homogénea y, por lo tanto, el comportamiento de las partículas alfa al atravesarla debía exhibir un comportamiento uniforme y no resultados tan dispares como los que se observaban.

Figura 5: Experimento de Rutherford.

Los sorprendentes resultados obtenidos por Rutherford llevaron a establecer un nuevo modelo atómico innovador, denominado modelo nuclear del átomo (Fig. 6). Según este modelo, el átomo está formado por un núcleo y una corteza.

- En el núcleo se alojan la carga positiva y casi la totalidad de la masa.
- La corteza está formada por los electrones, que giran alrededor del núcleo como si se tratara de un sistema solar en miniatura.

Este nuevo modelo explica los resultados observados:

La materia está prácticamente vacía, ya que el núcleo es aproximadamente 100.000 veces más pequeño que el átomo.

La mayor parte de las partículas pasa a través de la corteza y no sufre desviación en su trayectoria.

Las partículas que pasan cerca del núcleo son repelidas fuertemente y se desvían.

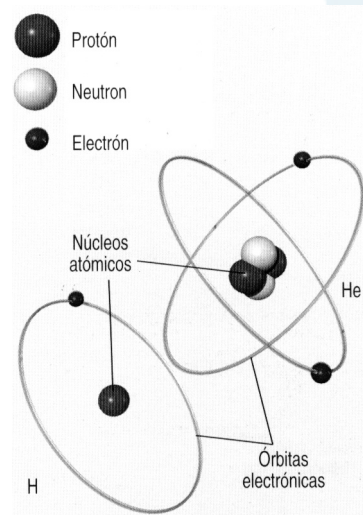
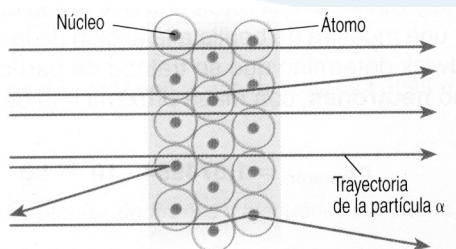


Figura 6: Modelo atómico de Rutherford.



Pocas partículas chocan contra el núcleo, pero las que lo hacen rebotan experimentando un choque elástico y retroceden, debido a la enorme diferencia de masa entre las partículas alfa y el núcleo de los átomos de los metales empleados.

Isótopos

La pequeñez de la masa del electrón hace suponer que la masa de las partículas que componen los rayos canales sea, aproximadamente, la misma que la del átomo del que se obtiene. Por lo tanto, si se conoce la masa de estas partículas, se conoce la masa del átomo.

La determinación de la masa de las partículas se consigue haciendo actuar sobre ellas un campo magnético perpendicular a su trayectoria. De este modo, la fuerza que se ejerce sobre ellas actúa como una fuerza centrípeta y la trayectoria que describen es una circunferencia cuyo radio es directamente proporcional a la masa de la partícula. Éste es el fundamento del espectrógrafo de masas que permite determinar la masa de un solo átomo (Fig. 7).

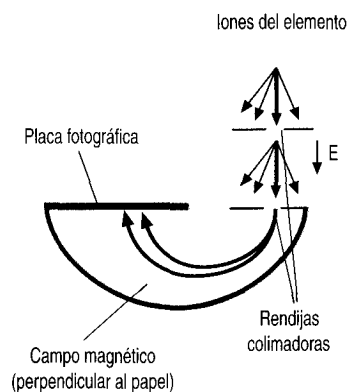


Figura 7: Esquema de un espectrógrafo de masas.

J.J. Thomson observó que, al medirla masa de los átomos de neón empleando el espectrógrafo de masas, no obtuvo la masa de 20,2 u, que era la oficialmente admitida, sino que aparecieron dos partículas de masas 20 u y 22 u. El oxígeno reveló tres partículas, de masas 16 u, 17 u y 18 u, y el cloro dos, de 35 u y 37 u de masa.

Estos resultados sugerían que los átomos que forman un elemento no son iguales en todo, sino que puede haber átomos con las mismas propiedades químicas pero diferente masa. A estos átomos se les denominó isótopos.

1.3. El neutrón

En 1914 el investigador británico H. Moseley (1887-1915) estudió los rayos X producidos por los elementos al someterlos a la acción de electrones de alta energía. Los resultados obtenidos le permitieron deducir el número de protones presentes en el núcleo de los átomos de cada elemento, al que denominó *número atómico*.

Esta nueva característica de los átomos, el número atómico, tuvo dos importantes consecuencias:

- Si se ordenan los elementos en orden creciente de número atómico, se eliminan las anomalías que aparecen en la Tabla Periódica basada en el orden creciente de masas atómicas.
- La masa isotópica determinada con el espectrógrafo de masas no concuerda con la masa de los protones que constituyen el número atómico. La masa del átomo debe explicarse de alguna otra forma.

En 1930 Bothe y Becker observaron una nueva radiación muy penetrante al someter una muestra de berilio a la acción de las partículas alfa. En 1932 J. Chadwick determinó que se trataba de partículas neutras, a las que denominó neutrones, con masa próxima a la del protón.

$$m_{\text{neutrón}} = 1,674954 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

Estas nuevas partículas deben ocupar el núcleo del átomo, junto con los protones, y contribuyen a la masa de éste. La diferencia en e/número de neutrones del núcleo determina la diferencia entre la masa de los isótopos de un elemento.

1.4. Magnitudes atómicas

Así pues, cada átomo queda definido por dos características: su número atómico y su número másico.

- El **número atómico** indica el número de protones del núcleo y determina el elemento de que se trata. Se representa por la letra Z.
- El **número másico** indica el número de nucleones, es decir neutrones y protones, que componen el núcleo y determina el isótopo del elemento. Se representa por la letra A.

La notación isotópica incluye el número másico, A, el número atómico, Z, y el símbolo del elemento, X, como se expone a continuación:



La mayoría de los elementos se presenta en la naturaleza como mezcla de varios isótopos, en una proporción, referida a número de átomos, que recibe el nombre de abundancia isotópica y que suele expresarse como porcentaje.

No debe confundirse por lo tanto, la masa atómica de un elemento con la masa isotópica de cada átomo. La masa atómica del elemento representa el promedio entre las masas isotópicas que lo componen en la naturaleza.

Ejemplo 1

El magnesio presenta en la naturaleza tres isótopos distintos. La abundancia relativa y las masas isotópicas de cada uno aparecen en la tabla siguiente:

Isótopo	Abundancia (%)	Masa isotópica
${}_{12}^{24}\text{Mg}$	78,70	23,98504
${}_{12}^{25}\text{Mg}$	10,13	24,98584
${}_{12}^{26}\text{Mg}$	11,17	25,98259

Determina la masa atómica del magnesio.

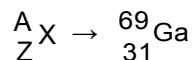
La abundancia isotópica representa el número de átomos de cada clase que hay en 100 átomos de magnesio en la naturaleza. Por lo tanto, la masa pro medio de 100 átomos de Mg se calculará como la media ponderada de las masas isotópicas de las tres formas:

$$A_r(\text{Mg}) = (78,70 \times 23,98504) + (10,13 \times 24,98584) + (11,17 \times 25,98259) = 24,3095 \text{ u}$$

La masa atómica promedio del Mg en la naturaleza es **24,3095 u**.

Ejemplo 2

Deduce el número de protones, neutrones y electrones del átomo de galio: ${}^{69}_{31}\text{Ga}$



$A = 69 = n^\circ \text{ de protones} + n^\circ \text{ de neutrones}$

$Z = 31 = n^\circ \text{ de protones} = n^\circ \text{ de electrones}$

$n^\circ \text{ de neutrones} = A - Z = 69 - 31 = 38$

El átomo de galio analizado tiene **31** protones, **31** electrones y **38** neutrones.

2. Orígenes de la teoría cuántica

Aunque el modelo atómico de Rutherford explicaba con éxito las evidencias experimentales observadas hasta el momento, era en sí mismo inconsistente.

Ya era conocido en aquella época que cuando una carga eléctrica se mueve con movimiento acelerado, pierde energía en forma de radiación electromagnética. Por lo tanto, como el electrón en movimiento circular alrededor del núcleo está sometido a una aceleración centrípeta, debe perder energía en forma de radiación electromagnética.

La pérdida de energía conduciría a que la trayectoria del electrón fuera cada vez más cercana al núcleo hasta que el electrón terminara precipitándose sobre él y aniquilándose. Por el contrario, sabemos que el átomo es un sistema de partículas estable. Por lo tanto, es necesario establecer otro modelo atómico que, además de ofrecer explicación a los fenómenos observados, no vulnere las leyes de la física.

2.1. Espectros atómicos de emisión

Los cuerpos calientes emiten energía en forma de radiación, y lo hacen en forma continua, es decir, la radiación está formada por todas las frecuencias, desde muy pequeñas hasta muy grandes.

Por el contrario, el espectro de emisión de los elementos gaseosos a baja presión no es continuo, sino que la radiación está formada por algunas frecuencias que se pueden separar por métodos ópticos.

Si la radiación descompuesta en las distintas radiaciones que la componen se registra en una placa fotográfica, se observan unas bandas de color sobre fondo negro, por lo que estos espectros se conocen con el nombre de **espectros de rayas**.

Espectro de emisión del hidrógeno

El espectro de emisión del hidrógeno es el más sencillo de todos y, por ello, el más estudiado. Se compone de varias series de bandas, que aparecen en la zona ultravioleta, en la visible y en el infrarrojo.

La primera serie que se observó fue, por razones obvias, la de frecuencias correspondientes a la porción visible del espectro. La descubrió y estudió el físico suizo J. J. Balmer (1825-1898), por lo que se conoce con el nombre de serie de Balmer. En 1885 obtuvo una fórmula empírica que reproducía numéricamente las longitudes de onda de las radiaciones observadas.

Al estudiar la radiación no visible se detectaron otras series de rayas que se conocen, también, con el nombre de sus descubridores:

- Lyman, formada por radiación ultravioleta.
- Paschen, Brackett y Pfund, formadas por radiación infrarroja.

El físico sueco J. Rydberg (1858-1919) halló la expresión empírica que relaciona las longitudes de onda de las radiaciones observadas en las diferentes series espectrales del hidrógeno. Esta es muy similar a la obtenida por Balmer para la serie visible del espectro. La ecuación de Rydberg es la siguiente:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Donde R: constante de Rydberg, cuyo valor es $1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$
 n_1 y n_2 variables que toman valores naturales, de manera que $n_1 < n_2$

Esta ecuación sólo reproduce los valores encontrados experimentalmente, pero no ofrece ninguna explicación del fenómeno.

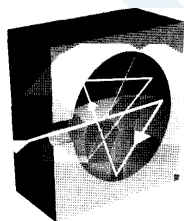
En 1913 Niels Bohr estableció un nuevo modelo atómico basado en novísimas y revolucionarias teorías: *la teoría cuántica de Planck y la teoría corpuscular de la luz de Einstein*.

3. Teoría cuántica de Planck

Los cuerpos sólidos calientes emiten radiación que depende de la temperatura a la que se encuentren. Por ejemplo, un hierro muy caliente emite un resplandor rojo y una lámpara de incandescencia, luz blanca.

A finales del siglo XIX se llevaron a cabo numerosos intentos de relacionar la longitud de onda de la radiación y la temperatura del cuerpo, pero no se alcanzó un éxito completo.

El físico alemán M. Planck (1858-1947) estudió en 1900 la radiación emitida por el *cuerpo negro*.

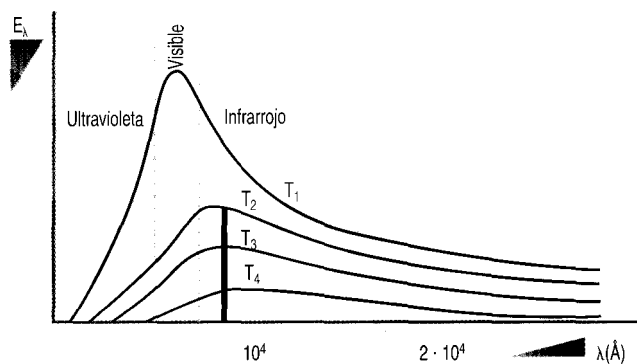


El cuerpo negro

Un cuerpo negro es una superficie ideal que no refleja la radiación que incide sobre ella.

Con fines experimentales, es bastante aproximado considerar como cuerpo negro la abertura en una cavidad, ya que la radiación que incide en la abertura queda atrapada en la cavidad y no se refleja.

Planck dedujo que la energía emitida por el cuerpo mediante la radiación de una determinada frecuencia era múltiplo de una cantidad de energía elemental que llamó cuanto, y era independiente de la temperatura.



Distribución de la energía emitida por el cuerpo negro a diferentes temperaturas: $T_1 > T_2 > T_3 > T_4$

Así, cuando emite radiación de frecuencia ν , la energía de la radiación será múltiplo entero del cuanto, es decir, la energía emitida será $h\nu$, $2h\nu$, $3h\nu$...

$$E = h \nu \quad \text{donde}$$

E = energía de la radiación
 h = constante de Planck ($6,63 \times 10^{-34}$ Js)
 ν = frecuencia de la radiación

La energía, al igual que la materia y la electricidad, ya no es la magnitud continua considerada, sino que está formada por múltiplos enteros de cantidades elementales: el cuanto de energía.

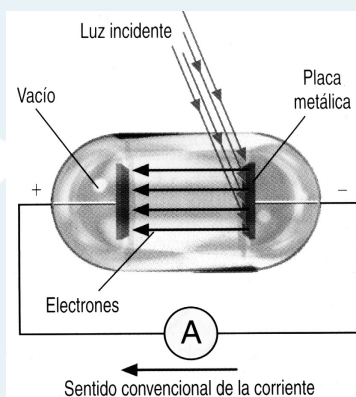


Figura 8. Efecto fotoeléctrico.

4. Teoría corpuscular de la luz de Einstein

En 1887 el alemán H. Hertz (1 857-1 894) descubrió el efecto fotoeléctrico, que consiste en que determinados metales son capaces de emitir electrones cuando se exponen a la luz (Fig. 8).

Las características del fenómeno son las siguientes:

- El metal emite electrones siempre y cuando la radiación alcance una frecuencia mínima, denominada por ello frecuencia umbral.
- Al aumentar la intensidad de la luz sin variar la frecuencia, se incrementa el número de electrones que emite el metal, pero no varía la energía con la que son emitidos.
- Si la frecuencia no alcanza el valor umbral, no se emiten electrones, sea cual sea la intensidad de la radiación.

La explicación de este fenómeno fue desarrollada en 1905 por el alemán A. Einstein (1879-1955), claramente influido por la hipótesis cuántica de la energía que M. Planck había presentado algunos años antes (Fig. 9).

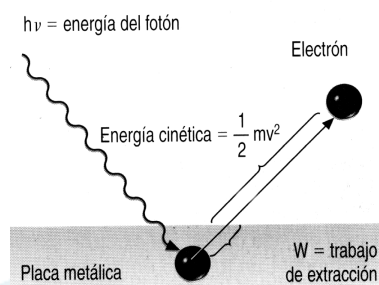


Figura 9: Explicación del efecto fotoeléctrico según la teoría cuántica

La teoría de Einstein afirma lo siguiente:

*La luz está constituida por partículas denominadas **fotones**, cuya energía es $E = h\nu$, donde ν es la frecuencia de la luz empleada.*

De este modo encuentra explicación a las características que definen el efecto fotoeléctrico:

- Los **electrones** son arrancados del metal cuando se les comunica la energía necesaria para liberarse de la atracción del núcleo.

Si la energía que se le comunica al electrón es menor, no se produce el efecto fotoeléctrico. Si es mayor, el electrón sale despedido con una cierta energía cinética.

La mínima energía necesaria para que se produzca el efecto fotoeléctrico se llama energía umbral.

- La **energía umbral** corresponde a un fotón con una determinada frecuencia, frecuencia umbral, que se representa por ν_0

Si la energía de los fotones, $E = h\nu$, que colisionan con el electrón es mayor que la energía umbral, $E = h\nu_0$ se produce el efecto fotoeléctrico, y el electrón sale despedido con la energía cinética, E_c correspondiente a la expresión:

$$h\nu = h\nu_0 + E_c$$

- La **intensidad** de la luz debe entenderse como una medida de la cantidad de fotones por unidad de tiempo.

Por lo tanto, si aumenta, se incrementará el número de electrones que emita el metal, *pero sólo si la frecuencia de la radiación alcanza el valor umbral*; en caso contrario, la energía de los fotones es insuficiente para provocar el efecto fotoeléctrico, independientemente de la intensidad de la radiación.

5. Modelo atómico de Bohr

La nueva concepción de la energía y de la luz suscitó al físico danés N. Bohr (1885-1962) una explicación al fenómeno que constituye el espectro de emisión de los gases y, en concreto, el del hidrógeno, y dio lugar en 1913 a un nuevo modelo atómico que puede considerarse el verdadero precursor del modelo atómico actual.

Los **principios** en que Bohr basa su modelo atómico son:

- El electrón se mueve alrededor del núcleo describiendo órbitas circulares. El espacio que rodea al núcleo está cuantizado, es decir, hay zonas permitidas, llamadas **niveles**, y otras que no lo son.

Mientras un electrón no cambie de órbita, no se modifica su energía.

Las órbitas permitidas son aquellas en las que el momento angular del electrón (mvr) es un múltiplo entero de $h/2\pi$ donde h es la constante de Planck.

$$mvr = n(h/2\pi)$$

n recibe el nombre **de número cuántico principal** y define los niveles alrededor del núcleo, numerados a partir del núcleo. Sus valores son: $n = 1, 2, 3, \dots$. Esto significa que la energía de las órbitas y sus radios están cuantizados.

- Siempre que un átomo absorbe o emite energía, lo hace mediante cuantos completos de valor $h\nu$, y es como consecuencia de que el electrón experimenta un tránsito entre niveles, que se puede resumir con la expresión:

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

E = energía del nivel final

donde.

E = energía del nivel inicial

Si $E_2 > E_1$ el átomo absorbe energía.

Si $E_2 < E_1$ el átomo emite energía.

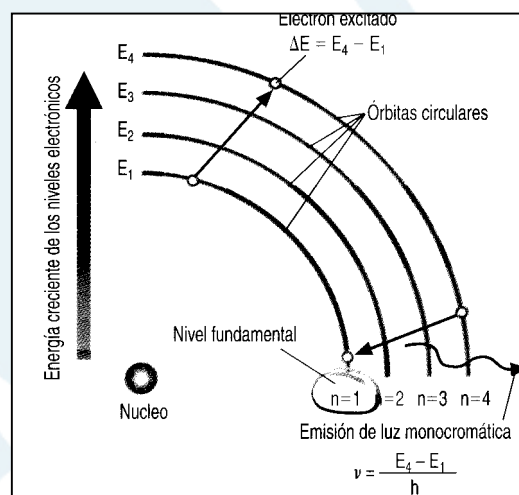


Figura 10: Radios de Bohr de las cuatro primeras órbitas

El modelo propuesto por Bohr daba explicación a los espectros de emisión de los elementos y respaldaba teóricamente la expresión empírica obtenida por Rydberg.

El éxito de este modelo fue efímero, ya que no explicaba algunas propiedades periódicas de los elementos y su hipótesis fundamental -consistente en que el electrón en el átomo presenta estados energéticos cuantizados- carecía de respaldo teórico. Además, con el empleo de espectroscopios más precisos, se observaron dos fenómenos a los que no se podía dar explicación:

- Algunas líneas del espectro son en realidad dos, tres o más, tan próximas que, cuando se observan con instrumentos poco precisos, parecen una sola.
- En 1896 el físico holandés P. Zeeman (1865-1943) observó que cada una de las líneas espectrales se desdoblaba en dos cuando la muestra se sometía a un campo magnético muy intenso, hecho que se conoce como efecto Zeeman.

5.1. Modificaciones al modelo atómico de Bohr

La modificación más importante de cuantas se hicieron al modelo atómico de Bohr se debe al físico alemán A. Sommerfeld (1868-1951). Este investigador sugirió, en 1915, que el electrón podía describir órbitas circulares y elípticas alrededor del núcleo en un mismo nivel energético. De este modo se explicaba la existencia de líneas muy juntas observadas con espectrógrafos más precisos.

Sommerfeld propuso que la energía del electrón depende de dos números cuánticos: el *número cuántico principal*, n , y otro definido por la excentricidad de la órbita. Este nuevo número cuántico recibió el nombre de **número cuántico orbital** o **secundario**, y se designó por ℓ . Sus valores dependen del número cuántico principal del nivel que ocupa el electrón, de manera que puede tomar todos los valores enteros comprendidos entre 0 y $n - 1$.

Por otro lado, el efecto Zeeman obligó a involucrar un tercer número cuántico, al que llamaron **número cuántico magnético**, m_ℓ definido por las orientaciones de la órbita del electrón en el espacio.

Y, finalmente, Goudsmitt y Uhlenbeck propusieron la rotación del electrón sobre sí mismo, que definiría un cuarto número cuántico, el **número cuántico de espín**, m_s .

6. Modelo mecano-cuántico

El modelo atómico evolucionó, desde su nacimiento hasta el momento histórico que hemos estudiado, a partir de modificaciones empíricas en caminadas a reproducir matemáticamente los resultados experimentales. En realidad, no existía hasta ese momento un fundamento teórico que los explicara y, por lo tanto, se carecía de un verdadero modelo atómico.

La respuesta a estos enigmas vino de la mano de la mecánica cuántica, y para su desarrollo fue decisivo el principio de dualidad onda-corpúsculo y el principio de incertidumbre.

6.1. Dualidad onda-corpúsculo

A partir de la hipótesis que en 1905 propuso A. Einstein acerca de que la luz, además de comportamiento ondulatorio, también presenta comportamiento corpuscular, el físico francés Louis de Broglie (1892-1977) propuso en 1924 que, de igual modo que la luz, los electrones podrían presentar propiedades ondulatorias, además del comportamiento corpuscular reconocido tradicionalmente.

Cualquier partícula de masa m y velocidad v debe considerarse asociada a una onda cuya longitud de onda λ viene dada por la expresión:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Así, la longitud de la órbita del electrón alrededor del núcleo debe ser un número entero de veces la longitud de la onda asociada para que se trate de una onda estacionaria. Por tanto, las únicas órbitas permitidas son las que dan lugar a una onda estacionaria.

$$2\pi r = n\lambda$$

De manera que, según el valor de n : 1, 2, 3, 4...y el valor de λ , el radio de la órbita debe tomar valores determinados que corresponden a los radios de las órbitas permitidas.

La hipótesis de de Broglie quedó demostrada experimentalmente cuando se comprobó que los electrones presentan reflexión y difracción:

- En 1927 los físicos estadounidenses C. Davisson (1881-1958) y L. Germer (1896-1972) observaron que un haz de electrones dirigido hacia una superficie de un cristal de níquel no presentaba la reflexión difusa que cabía esperar de un chorro de partículas que rebota contra una superficie irregular, sino que la reflexión era similar a la de una radiación de rayos X.
- A su vez, en 1928 el físico inglés G. P. Thomson (1892-1975) observó que los electrones que atravesaban un retículo cristalino experimentaban el fenómeno de difracción. Si se considerara al electrón como partícula, pasarían a través del cristal solamente los que encontraran un espacio lo suficientemente grande.

6.2. Principio de incertidumbre. Orbital atómico

Esta nueva concepción del electrón, como *partícula y onda*, suscitó la polémica acerca de lo que siempre había sido indiscutible: *la posición del electrón*.

En efecto, de la misma manera que carece de sentido hablar de posición de una onda, por tratarse de una perturbación que se extiende en el espacio, es igualmente incorrecto referirse a la posición del electrón, ya que está asociado a una onda.

Consecuentemente, el físico alemán W. Heisenberg (1901-1975) formuló en 1927 su célebre principio de incertidumbre:

Es conceptualmente imposible conocer simultáneamente y con exactitud el momento lineal, $p = mv$, y la posición, x , de una partícula en movimiento.

Se comprende este principio al admitir que, si queremos ver el electrón para determinar su posición, hay que iluminarlo con alguna forma de luz. Como los fotones son de energía similar a la de los electrones, la interacción entre ambos perturba considerablemente el propio movimiento del electrón.

El electrón en el átomo ya no puede definirse como una partícula que describe una trayectoria precisa alrededor del núcleo, sino que debemos admitir una inexactitud inherente en la determinación de su posición y, por lo tanto, incorporar el concepto de **orbital** en sustitución del de órbita.

***Orbital atómico** es la región del espacio alrededor del núcleo en la que existe gran probabilidad de encontrar un electrón con una energía determinada.*

6.3. Ecuación de onda de Schrödinger

El carácter ondulatorio del electrón en el átomo queda definido por la llamada **función de onda**, representada por Ψ . Esta se obtiene, con gran dificultad de cálculo, como solución de la **ecuación de onda** propuesta en 1926 por el físico austriaco E. Schrödinger (1887-1961).

La ecuación de onda incorpora las condiciones que debe cumplir cada electrón para que el átomo sea un sistema estable. En ella intervienen la *energía*, la *masa* y la *función de onda* del electrón.

Cada solución de la ecuación de onda informa del *estado energético del electrón* y de la función de onda asociada a ese estado energético.

La función de onda, Ψ , carece de significado físico directo, mientras que su cuadrado, Ψ^2 , sí tiene: representa la probabilidad de encontrar al electrón en una región del espacio alrededor del núcleo, con un estado energético determinado. En definitiva, Ψ^2 suministra la información necesaria para conocer el orbital que ocupa un electrón en el átomo.

La importancia de la ecuación de onda como medio de describir al electrón en el átomo es que se basa en los fundamentos teóricos de la mecánica cuántica para reproducir y explicar con éxito los resultados experimentales, mientras que los anteriores intentos tan sólo consistían en ecuaciones matemáticas que reproducían los resultados experimentales, pero sin aportar explicación teórica alguna.

6.4. Principios fundamentales del modelo mecano-cuántico

El modelo mecano-cuántico del átomo es, en la actualidad, la mejor forma de concebir el átomo. Se basa en tres principios:

- El átomo y la molécula solamente pueden existir en determinados estados energéticos. La variación del estado energético se produce con emisión o absorción de energía.
- El cambio de energía de un átomo o molécula, ΔE , se lleva a cabo por emisión o absorción de un fotón de energía igual al cambio energético experimentado
- Los estados energéticos permitidos para el átomo y la molécula se distinguen entre sí mediante cuatro valores determinados llamados números cuánticos.

6.5. Solución de la ecuación de onda. Apantallamiento

La solución de la ecuación de onda solamente puede obtenerse en el caso más sencillo, el átomo de hidrógeno, y en aquellos cationes dotados de un solo electrón (He^+ , Li^{2+}).

En el caso de átomos polielectrónicos, la ecuación de onda puede resolverse si se recurre a ciertas aproximaciones.

La más importante es considerar el átomo como si estuviera constituido únicamente por un electrón y un núcleo ficticio dotado de una carga nuclear llamada carga nuclear efectiva, Z^* .

Carga nuclear efectiva, Z^* , de un átomo respecto a un electrón es la carga que debería poseer el núcleo si el átomo estuviera constituido solamente por el propio núcleo y el electrón considerado.

El cálculo de esta carga nuclear efectiva considera que la atracción del electrón por el núcleo está debilitada por la repulsión que ejercen sobre él los demás electrones del átomo. Esta repulsión se conoce con el nombre de apantallamiento, y se representa generalmente por a .

$$Z^* = Z - a$$

Cuanto mayor sea el número de electrones existentes entre el electrón estudiado y el núcleo del átomo, mayor será el apantallamiento y, por lo tanto, la carga nuclear efectiva será menor.

6.6. Orbital y números cuánticos

Las soluciones de la ecuación de onda dependen de cuatro parámetros: n , ℓ , m_ℓ y m_s , que se conocen como números cuánticos.

Por lo tanto, cada electrón del átomo queda representado por los cuatro números cuánticos. Cada uno de ellos tiene un significado físico diferente y representa aspectos distintos del movimiento del electrón en el átomo, que queda reflejado por el nombre que se asigna a cada uno:

n:	número cuántico principal
ℓ:	número cuántico orbital o de momento angular
m_ℓ:	número cuántico magnético
m_s	número cuántico de espín

Número cuántico principal, n

El número cuántico principal, n , sólo puede tomar valores naturales, $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Cada valor designa un nivel.

Está relacionado con el tamaño del orbital. A mayor valor de n , mayor es la distancia promedio del electrón respecto al núcleo.

El primer nivel es el de menor energía y los siguientes, cada vez más alejados del núcleo, tienen energías mayores.

Número cuántico orbital o del momento angular, ℓ

Toma valores enteros entre **0** y **$n - 1$** . Cada valor designa un subnivel, y a cada uno de ellos se le asigna una letra:

$$\ell=0 \rightarrow \mathbf{s} \quad \ell=1 \rightarrow \mathbf{p} \quad \ell=2 \rightarrow \mathbf{d} \quad \ell=3 \rightarrow \mathbf{f}$$

Está relacionado con la forma del orbital que ocupa el electrón, con el módulo del momento angular y con la energía del orbital.

Número cuántico magnético, m_ℓ

Sus valores dependen del valor de ℓ , de manera que puede tomar todos los valores enteros comprendidos entre $-\ell$ y $+\ell$, incluido el cero. Está relacionado con la orientación del orbital en el espacio.

ℓ	0	1	2	3
m_ℓ	0	-1, 0, +1	-2, -1, 0, +1, +2	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3
Subnivel	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
Orbitales	<i>ns</i>	<i>np</i>	<i>nd</i>	<i>nf</i>

Número cuántico de espín, m_s

Sólo puede tomar los valores $-\frac{1}{2}$ y $+\frac{1}{2}$. Está relacionado con el giro del electrón respecto a su eje (Fig. 11), lo que genera un campo magnético con dos posibles orientaciones según el sentido del giro.

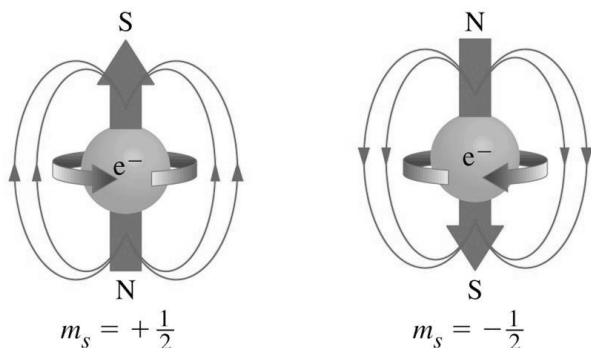


Figura 11. Espín del electrón: movimiento de rotación del electrón sobre sí misma

Este fenómeno, exclusivo del electrón, constituye la única explicación al efecto Zeeman y fue demostrado experimentalmente en 1924 por O. Stern (1888-1969) y W. Gerlach (1889-1979).

Una vez descritos los cuatro números cuánticos, es fácil comprender que cada orbital atómico está representado por los tres números cuánticos n , ℓ y m_ℓ que suelen designarse por un número, el nivel, y una letra, el subnivel, mientras que la descripción de cada electrón en el átomo requiere, además, del cuarto número cuántico, m_s

La tabla siguiente muestra la distribución de los electrones por niveles y subniveles.

Distribución de Orbitales y electrones por niveles											
Nivel de energía (n)	1		2			3			4		
Número total de orbitales (n^2)	1		4			9			16		
Tipo de orbitales	<i>s</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	
Número de orbitales de cada tipo	1	1	3	1	3	5	1	3	5	7	
Denominación de los subniveles	1 <i>s</i>	2 <i>s</i>	2 <i>p</i>	3 <i>s</i>	3 <i>p</i>	3 <i>d</i>	4 <i>s</i>	4 <i>p</i>	4 <i>d</i>	4 <i>f</i>	
Número máximo de electrones en los subniveles	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	
Número máximo de electrones por nivel ($2n^2$)	2		8			18			32		

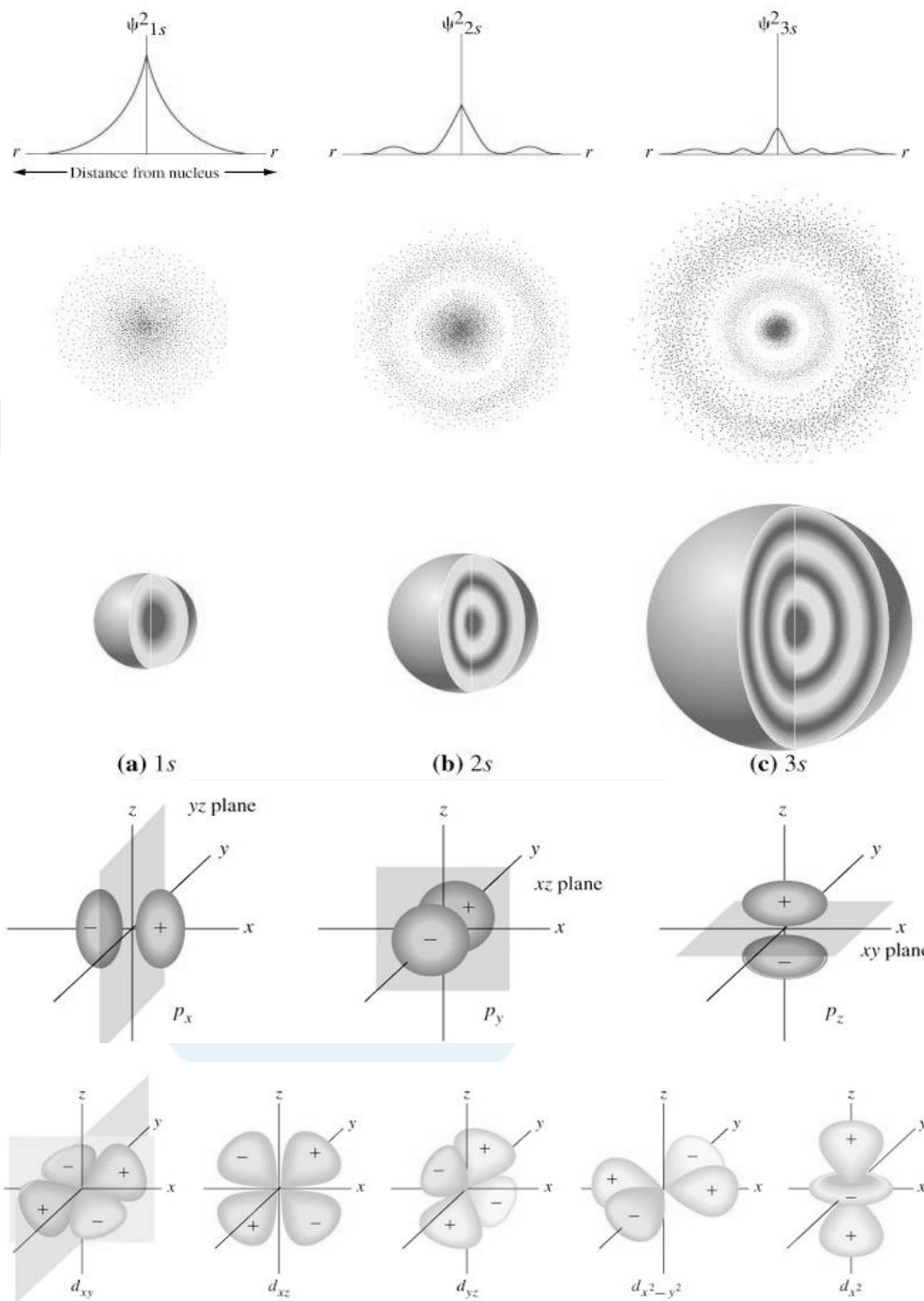
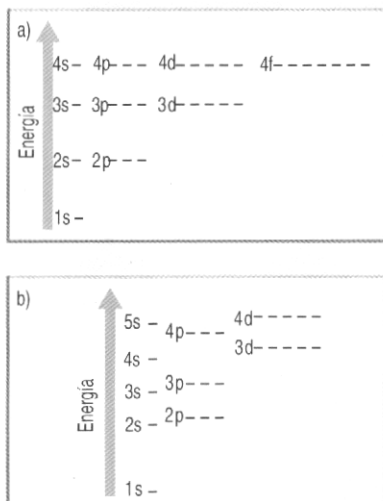


Figura 12: Forma y orientación de los orbitales s, p y d.

6.7. Energía relativa de los orbitales



La energía relativa entre los electrones que ocupan los distintos orbitales varía según se trate de átomos con un solo electrón, caso del hidrógeno, o de átomos polielectrónicos.

Átomo de hidrógeno

En átomos con un solo electrón, la atracción entre el electrón y el núcleo depende solamente de la distancia que los separa, por lo que la energía del electrón está en función únicamente de su distancia al núcleo, tamaño del orbital, y no de la región que ocupa, forma del orbital

Por lo tanto, todos los orbitales con el mismo valor de su número cuántico principal, n , confieren al electrón la misma energía y reciben por ello el nombre de orbitales degenerados (Fig. 12 a).

Figura 12: Energía relativa de los orbitales en un átomo de hidrógeno (a) y en un átomo polielectrónico (b).

Átomos polielectrónicos

Por el contrario, en los átomos polielectrónicos, cada electrón está sujeto a la atracción nuclear y a la repulsión de los demás electrones o apantallamiento.

Ésta es la razón por la que los orbitales de un mismo nivel dejan de ser degenerados, y los electrones adquieren diferente energía según la forma del subnivel que ocupan.

La explicación aparece cuando se estudia la distancia instantánea entre el núcleo y el electrón en cada orbital, y no la distancia promedio, como se ha hecho hasta el momento.

Así, la forma del subnivel, definida por el número cuántico orbital l , establece el acercamiento instantáneo máximo del electrón al núcleo, que es diferente entre ellos y se conoce como penetrabilidad del orbital. Para el mismo número cuántico principal, n , el orden de penetrabilidad de los orbitales es:

$$s > p > d > f$$

La consecuencia de la mayor penetrabilidad es el descenso en la energía relativa del electrón, ya que en ese instante experimenta mayor atracción por parte del núcleo, y hay menor número de electrones entre ambos que lo apantallen.

Por tanto, el **orden de energía** entre los electrones que ocupan orbitales con el mismo número cuántico principal, n , resulta:

$$s < p < d < f$$

En definitiva, la energía del electrón en un átomo polielectrónico depende tanto del tamaño del orbital que ocupa, número cuántico principal (n), como de su forma, número cuántico orbital (l); mientras que siguen siendo degenerados los orbitales que solamente difieren en su orientación, número cuántico magnético, m_l (figura 12 b).

El orden relativo de energías en un átomo polielectrónico resulta ser:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < \dots$$

Una forma sencilla de recordarlo es el diagrama de Moeller (figura 13), aunque el orden puede ser diferente en algunos casos.

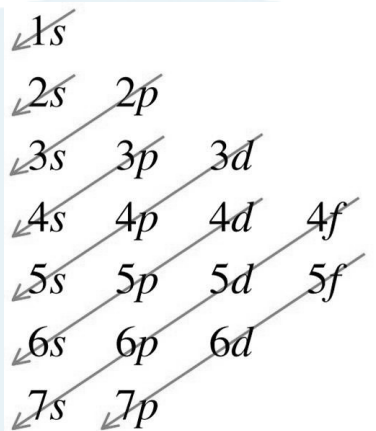


Figura 13. Diagrama de Moeller.

6.8. Configuración electrónica de un átomo

La distribución de los electrones de un átomo en orbitales recibe el nombre de **configuración electrónica**. Cuando ésta es la de menor energía, se trata de la configuración electrónica fundamental.

La configuración electrónica fundamental se obtiene, en la práctica, a partir de tres reglas o principios: *regla de la construcción*, *principio de exclusión de Pauli* y *regla de la máxima multiplicidad de Hund*.

Regla de la construcción.

Esta regla también es conocida como principio de mínima energía o Aufbau y dice:

La configuración electrónica fundamental se obtiene colocando los electrones uno a uno en los orbitales disponibles del átomo en orden creciente de energía.

Principio de exclusión de Pauli.

En 1925, Pauli estableció el célebre principio de exclusión, que dice:

Dos electrones de un mismo átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales.

Como cada orbital está definido por los números cuánticos n , ℓ y m_ℓ sólo quedan dos posibilidades $m_s = -1/2$ y $m_s = +1/2$ que físicamente que da reflejado en que cada orbital (definido por n , ℓ y m_ℓ) puede contener un máximo de dos electrones, y éstos deben tener *espines* opuestos (electrones apareados).

Abreviadamente suele escribirse el número de electrones en cada subnivel mediante un superíndice. Por ejemplo: $2p^3$ representa que en el conjunto de orbitales $2p$ hay 3 electrones, pero no informa de su distribución entre ellos.

Regla de la máxima multiplicidad de Hund

Cuando varios electrones ocupan orbitales degenerados, de la misma energía, lo harán en orbitales diferentes y con espines paralelos (electrones desapareados), mientras sea posible.

Como los electrones se repelen entre sí, la configuración de mínima energía es aquella que mantiene los electrones lo más alejados posible entre ellos, y por esto se distribuyen separados antes de ocupar dos electrones el mismo orbital.

Por ejemplo, si deben colocarse tres electrones en orbitales $2p$, lo harán desapareados:



Si se trata de cuatro electrones en orbitales $2p$, dos de ellos deben aparearse, mientras que los otros dos permanecen desapareados:



Paramagnetismo y diamagnetismo

La regla de la máxima multiplicidad de Hund se corresponde perfecta mente con las propiedades magnéticas que exhibe la materia: *paramagnetismo* y *diamagnetismo*.

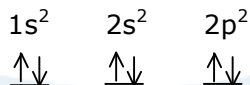
- Hay sustancias, las paramagnéticas, que son atraídas por un imán.
- Otras sustancias, las diamagnéticas, no son atraídas por un imán o bien son repelidas ligeramente.

La causa de este comportamiento debe buscarse en el espín de los electrones:

- Si los electrones se encuentran desapareados, presentan el mismo espín y, por tanto, un campo magnético neto que, al interactuar con el campo magnético del imán, provoca la fuerza de atracción o para- magnetismo.

- Si los electrones se encuentran apareados, presentan espines opuestos, y por tanto no existe un campo magnético neto. Se da entonces el fenómeno del diamagnetismo.

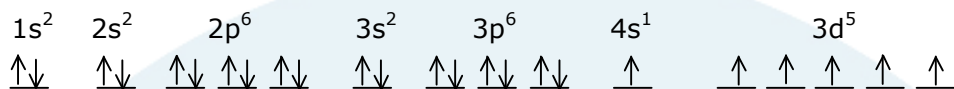
El carbono ($Z = 6$) es una sustancia paramagnética, como predice su configuración electrónica, con electrones desapareados:



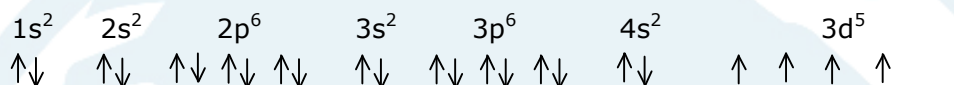
Estabilidad de subnivel lleno y semiocupado

El modelo mecano-cuántico predice que los subniveles llenos y semiocupados confieren al conjunto del átomo una estabilidad adicional, lo que supone alguna excepción en la configuración electrónica de los elementos.

Efectivamente, algunos elementos de transición y de transición interna presentan configuraciones electrónicas distintas a las esperadas a partir de las reglas y los principios expuestos hasta ahora. La configuración electrónica del cromo ($Z = 24$) es:



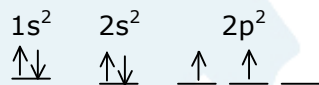
La configuración que cabría esperar al aplicar las reglas vistas anteriormente sería:



Esto es debido a que la estructura electrónica con seis electrones en subniveles semiocupados o llenos es más estable que si sólo tiene dos electrones.

Para conseguir los seis electrones en subniveles semiocupados, uno de los electrones debe ocupar el subnivel $3d$ en lugar del $4s$, siendo el $3d$ de mayor energía que el $4s$. La explicación reside en que esa diferencia de energía es pequeña y está compensada de sobra por la mayor estabilidad que alcanza el átomo.

En el caso del carbono ($Z = 6$), la configuración electrónica es:



De manera análoga al caso del cromo, podría esperarse la siguiente configuración:



Sin embargo, esta configuración no se da, porque la diferencia de energía entre los subniveles $2s$ y $2p$ es demasiado grande, y no está compensada por la estabilidad que aporta la existencia de cuatro electrones en subniveles semiocupados o llenos en lugar de dos.

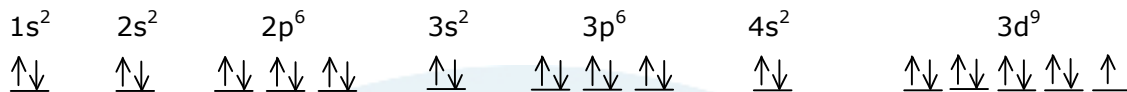
Para predecir estas desviaciones de la regla de la construcción son de utilidad las siguientes *reglas prácticas*:

- La diferencia de energía entre los subniveles np y $(n + 1)s$, por ejemplo, entre $2p$ y $3s$ o entre $3p$ y $4s$, suele ser considerable.
- La diferencia de energía entre los subniveles $(n - 1)d$ y ns , por ejemplo, $3d$ y $4s$, es pequeña.
- Si se trata de los subniveles $(n - 2)f$ y ns , por ejemplo, $4f$ y $6s$, la diferencia de energía entre ellos es aún menor que en el caso anterior.

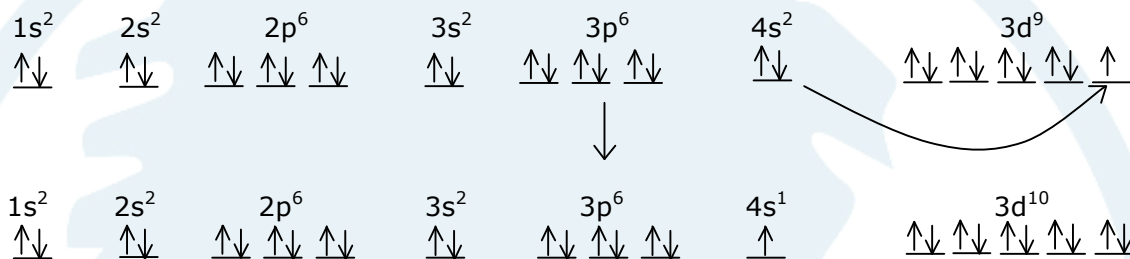
Ejemplo

Deduce la configuración electrónica del cobre ($Z = 29$).

Siguiendo las reglas estudiadas debemos esperar:



Pero, si en el orbital $4s$ hubiera solamente 1 electrón, el orbital $3d$ tendría 10 electrones, que corresponde al subnivel lleno. Con ello alcanzaría la estabilidad adicional que supone la existencia de 11 electrones en subnivel lleno o semiocupado frente a 2 electrones solamente. Como el subnivel $4s$ y el $3d$ no están separados por una diferencia de energía muy grande, la estabilidad adicional que supone compensará el tránsito electrónico, y la estructura electrónica del cobre es:



PREGUNTAS

1. El boro presenta dos isótopos en la naturaleza: $^{10}_5\text{B}$ y $^{11}_5\text{B}$ cuyas abundancias y masas isotópicas se recogen en la tabla siguiente:

Isótopo	Abundancia	Masa isotópica (u)
$^{10}_5\text{B}$	19,6%	10,01294
$^{11}_5\text{B}$	80,4%	11,00931

Calcule la masa atómica del boro.

2. Calcule la masa atómica del cobre a partir de los datos de la tabla siguiente:

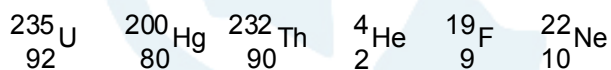
Isótopo	Abundancia	Masa isotópica (u)
$^{63}_{29}\text{Cu}$	69,09%	62,9300
$^{65}_{29}\text{Cu}$	30,91%	64,9278

3. El galio presenta una masa atómica de 69,7200 u. En la naturaleza se encuentra en forma de dos isótopos:



cuyas masas isotópicas son, respectivamente, 68,9257 u y 70,9249 u. Determine la abundancia de cada isótopo en la naturaleza.

4. Deduzca el número de neutrones, protones y electrones de los átomos siguientes:



5. Deduzca los posibles números cuánticos para un electrón que ocupe un orbital 3s, un 6f, un 1s, un 4d y un 5p.
6. Razone si es posible que un electrón esté descrito por los siguientes números cuánticos. En caso afirmativo, identifique el orbital que ocupa:

- a) 1, 1, 0, +1/2
 b) 2, 1, 0, 1
 c) 1, 2, 1, -1/2
 d) 1, 0, 0, 0

7. Razone en qué se diferencian y en qué se parecen las siguientes parejas de electrones, sabiendo que pertenecen al mismo átomo:
- a) $1, 1, 0, +\frac{1}{2}$ y $1, 1, 0, -\frac{1}{2}$
 - b) $2, 1, 0, +\frac{1}{2}$ y $2, 1, 1, +\frac{1}{2}$
 - c) $3, 1, 1, -\frac{1}{2}$ y $2, 1, 1, -\frac{1}{2}$
 - d) $3, 2, 1, +\frac{1}{2}$ y $3, 1, 0, -\frac{1}{2}$
8. Deduzca la configuración electrónica del arsénico ($Z = 33$), el potasio ($Z = 19$), el neón ($Z = 10$) y el hafnio ($Z = 72$).
9. Deduzca si los elementos Ni ($Z = 28$), Zn ($Z = 30$), Ti ($Z = 22$) y Mn ($Z = 25$) son paramagnéticos o diamagnéticos.