

TEORÍAS ATÓMICAS

Primeros Modelos

Los filósofos griegos se ocuparon del estudio de la naturaleza de la materia basándose en su propia percepción de la realidad.

Demócrito (IV a.C.) afirmó: "No hay mas que átomos (sin partes, indivisibles) y espacio vacío". Es la primera idea del concepto de átomo.

La discusión sobre la existencia de los átomos se mantuvo más de dos mil años, hasta que en el siglo XIX, el científico inglés John Dalton establece una primera teoría atómica.

Teoría de Dalton

Dalton (1808) propuso cinco hipótesis que podemos catalogar como una primera teoría atómica:

1. La materia está constituida por átomos que son inalterables y no se pueden dividir en nada más sencillo.
2. Las sustancias simples o elementos están formados por "átomos simples" idénticos, con la misma masa y propiedades
3. Los compuestos están formados por "átomos compuestos" también idénticos entre sí.
4. Los átomos de distintas sustancias tienen distinta masa y distintas propiedades.
5. Los átomos no se destruyen en las reacciones químicas, sino que se recombinan en la proporción numérica más sencilla posible.



Dalton no veía problemas en la idea de "átomos compuestos" y fue Avogadro quien introduciría poco después en 1811 el concepto de molécula.

La teoría atómica de Dalton sirvió para impulsar la química a lo largo del siglo XIX, pero algunas de sus hipótesis se pusieron pronto en entredicho, gracias sobre todo al descubrimiento de la electricidad.

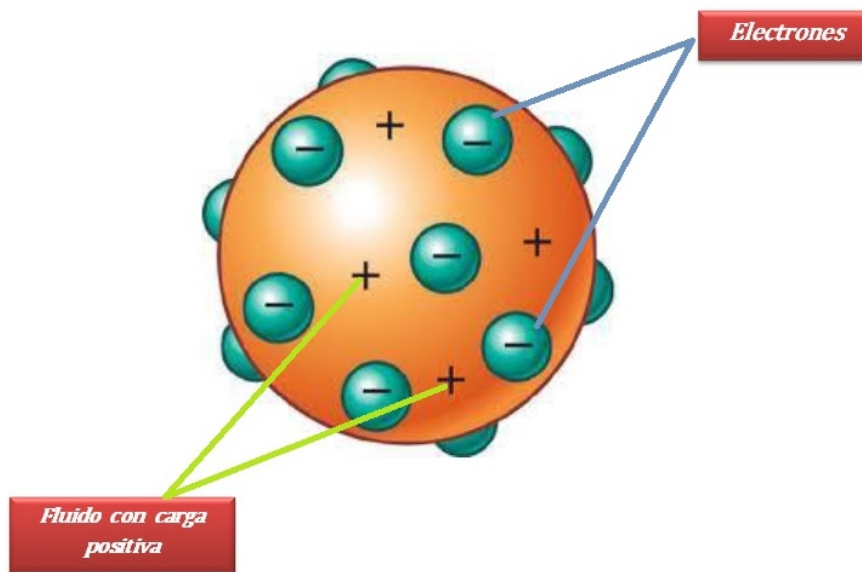
Determinadas experiencias parecían indicar que los átomos no eran tan indivisibles al fin y al cabo:

- Los experimentos de Faraday sobre electrólisis (un experimento químico y eléctrico, donde al pasar la corriente eléctrica, el agua se descompone en sus dos componentes, hidrógeno y oxígeno)
- Las experiencias con tubos de descarga (que consistían en someter a fuertes voltajes a un gas encerrado en un tubo en el que se hacía el vacío). Aparecían unas radiaciones que Goldstein llamó rayos catódicos.

Ambas experiencias ponían de manifiesto que el átomo era divisible y además poseía naturaleza eléctrica.

Teoría de Thomson

Thomson demostró en 1897 que estos rayos estaban constituidos por partículas de carga negativa a las que llamó electrones. Las partículas de gas a las que se habían robado estos electrones adquirían carga positiva. Thomson dedujo que los componentes de los rayos catódicos no eran átomos con carga, sino partículas nuevas resultantes de la fragmentación del átomo.



Con estos datos Thomson propuso un torno al año 1900 un modelo atómico que se llamó "puding de pasas"

Supuso que el átomo era como una tarta, cargada toda ella positivamente, en la cual se incrustaban como pequeños gránulos o pasas, que eran las cargas negativas o electrones, en un número suficiente para que el conjunto resultara neutro.

Este modelo respondía a dos hechos básicos, la neutralidad eléctrica de la materia y la existencia del electrón.

- La materia es eléctricamente neutra: el átomo debía contener una carga positiva que contrarrestase a los electrones.
- La materia desprende electrones, pero nunca cargas positivas
- El modelo de Thomson explicaba la formación de iones, tanto positivos como negativos.

Dos nuevos hechos se sumaron a los anteriores:

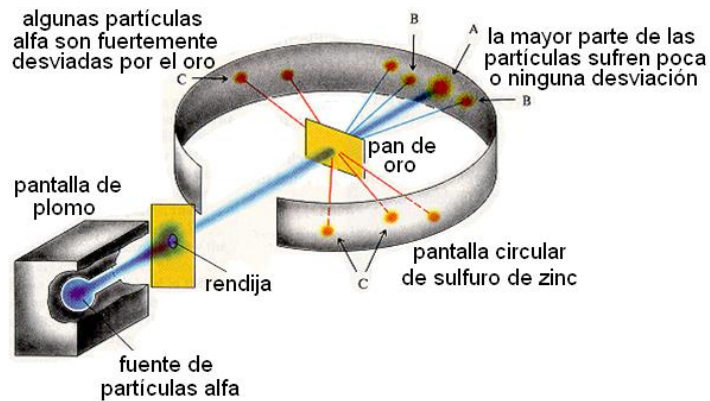
- El **efecto fotoeléctrico**, descubierto en 1888 por Hertz y estudiado posteriormente por Einstein. Consistía en la emisión de electrones por parte de una superficie metálica al incidir luz sobre ella. Ello hacía pensar que los átomos de un metal (y todos los átomos) contenían electrones. Pero seguían sin aparecer las emisiones de partículas positivas.
- La **radiactividad**, descubierta por Becquerel en 1896, un año antes de que Thomson anunciara los resultados de su modelo. Becquerel comprobó que la radiación emitida por sustancias radiactivas, como el uranio, estaba compuesta por tres radiaciones diferentes, rayos alfa, beta y gamma. Rutherford, discípulo de Thomson, decidió estudiar la nueva radiación y descubrió en ella emisiones positivas a las que llamó rayos alfa, que posteriormente demostró que se trataba de iones de helio, emisiones negativas o rayos beta que fueron identificadas como electrones, y emisiones neutras denominadas radiación gamma.

Modelo Nuclear de Rutherford

Fue el mismo Rutherford quien en 1911, dio un paso decisivo en el estudio de la estructura del átomo al descubrir que el átomo poseía un núcleo central. La totalidad de la carga positiva se hallaba concentrada en el núcleo y los electrones giraban alrededor, para no caer sobre él por atracción eléctrica.

Rutherford llegó a esta conclusión mientras investigaba la difusión de partículas alfa por la materia.

Para ello realizó, junto con sus colaboradores, una serie de experiencias en las que se hacía incidir un haz de partículas alfa de alta energía procedentes de una sustancia radiactiva como el radio, sobre láminas metálicas delgadas de oro, plomo, cobre, etc.

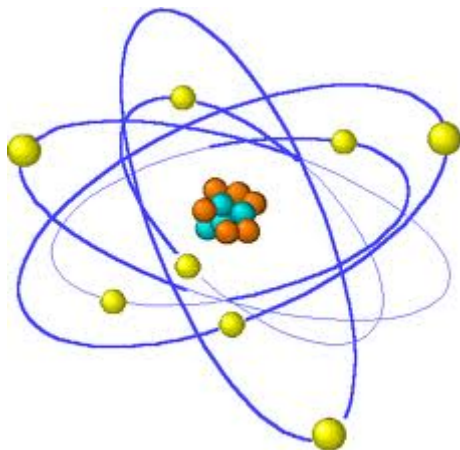


Lo que cabía esperar según el modelo de Thomson era que el haz atravesase la lámina abriéndose algo más (dispersión) y al chocar con la pantalla de sulfuro de cinc, originase una mancha fluorescente en línea con el haz. Sorprendentemente lo que se observó fue que, además de la mancha central, había centelleos laterales que indicaban que algunas partículas sufrían desviaciones considerables e incluso podían rebotar en la lámina y salir hacia atrás.

Las grandes desviaciones de algunas partículas alfa solo se podían explicar por choque contra una partícula de gran masa y elevada carga positiva. Esto hizo suponer a Rutherford que toda la carga positiva del átomo estaba concentrada en un pequeño gránulo donde residía además, la casi totalidad de su masa. Era el núcleo. El átomo estaba lejos de ser la esfera de masa y carga uniformes que Thomson había propuesto. El átomo estaba prácticamente hueco.

Posteriormente se observó que el número de cargas positivas elementales en el núcleo (protones) coincidía con el número de orden del elemento en la tabla periódica, pero el peso variaba y era mucho mayor. Rutherford sugirió que en los núcleos de los átomos tenían que existir otras partículas de masa casi igual a la del protón, pero sin carga eléctrica, por lo que las llamó neutrones. El neutrón no fue descubierto experimentalmente hasta 1932 por Chadwick.

El modelo atómico nuclear se puede resumir así:



1. El átomo está constituido por un núcleo central que concentra toda la carga positiva y casi toda la masa del átomo.
2. En la corteza están los electrones con carga negativa y con una masa despreciable frente a la del núcleo. Los electrones giran en órbitas circulares concéntricas en torno al núcleo.
3. El tamaño del núcleo es muy pequeño en comparación con el tamaño de todo el átomo, y entre núcleo y corteza hay espacio vacío.

El modelo de Rutherford permitió:

1. Explicar las propiedades eléctricas de la materia;
2. Identificar el núcleo como parte constituyente de los átomos;
3. Caracterizar a los elementos químicos;
4. Predecir la existencia del neutrón.

Limitaciones:

1. Su inestabilidad;
2. La incapacidad para explicar los espectros atómicos.

Espectros Atómicos

Al hacer incidir un haz de luz blanca sobre un prisma de vidrio, obtenemos un espectro continuo de colores en cuyos extremos se disponen el azul, en uno y el rojo, el más desviado, en otro. La luz blanca está, pues, compuesta por infinidad de radiaciones simples, cada una de frecuencia determinada.

El aparato utilizado para el estudio de las radiaciones es el espectroscopio. En esencia consiste en un prisma que descompone las radiaciones complejas, en sus componentes simples.

Cuando un elemento, en estado gaseoso, se calienta o se excita por una descarga eléctrica, emite una radiación que constituye su espectro atómico de emisión. Los espectros atómicos no son continuos, están constituidos por rayas luminosas de frecuencias definidas, separadas por zonas oscuras. El espectro es como la huella dactilar del elemento, de tal modo que puede utilizarse para identificarlo.

Modelo cuántico de Bohr

En 1913 el físico danés Niels Bohr, se apuntó un gran triunfo al explicar el espectro del hidrógeno. La clave del éxito consistió en aplicar al modelo de Rutherford la teoría cuántica dada por Planck en 1900.

Planck estudiando la luz emitida por la materia al calentarse, llegó a la conclusión de que la energía no es divisible indefinidamente, sino que existen últimas porciones de energía a las que llamó cuantos. La radiación emitida o absorbida por un cuerpo solo puede ser un número entero de cuantos. Cinco años más tarde Einstein, para explicar el efecto fotoeléctrico, generalizó la hipótesis de Planck y sugirió que la luz está formada por cuantos de luz o fotones.

Bohr desarrollo su modelo basándose en tres postulados:

- Los electrones giran en órbitas circulares en torno al núcleo por causa de la atracción eléctrica protón-electrón, y lo hacen sin emitir energía radiante.
- El electrón no puede situarse a cualquier distancia del núcleo sino que debe ocupar niveles energéticos u orbitas predeterminadas. Estos niveles se designan como $n = 1, 2, 3, \dots$ y no existen otros niveles entre las órbitas.
- Mientras el electrón se mueve en su órbita no pierde energía. Si pasa de una órbita externa a otra más interna desprende energía, la misma que absorbe para la transición contraria, de la interna a la externa.

Limitaciones del modelo de Bohr:

La evolución de la espectroscopia hizo ver que en realidad algunas rayas del espectro eran dobles, lo que entraba en contradicción con el modelo de Bohr.

No era posible explicar los espectros de los átomos poli-electrónicos a partir de los postulados de Bohr.

Modelo mecano-cuántico

El actual modelo cuántico está basado en las ideas de De Broglie, de Heisenberg y de otros físicos como Schrodinger. Es un modelo atómico matemáticamente muy complejo, pero que describe mejor todos los aspectos del comportamiento atómico, predice las propiedades de los átomos y explica la información suministrada por los espectros.

Se acepta el carácter dual de la luz (onda - corpúsculo) y se extiende este comportamiento al electrón (Teorías de De Broglie).

El electrón se comporta como una partícula pero también exhibe un comportamiento ondulatorio, como consecuencia de esto llegamos al principio de incertidumbre de Heisenberg, que indica que es imposible determinar simultáneamente la posición y la velocidad exactas de un electrón. Para ver al electrón habría que emplear luz de longitud de onda menor que las dimensiones del electrón. Entonces al proyectar la luz sobre el electrón, algún fotón componente de éste chocaría contra él y alteraría apreciablemente su velocidad. Es decir, al determinar la posición del electrón cambiamos su velocidad en una cantidad desconocida. Como la determinación simultánea y exacta de la posición y velocidad es indispensable para describir una trayectoria, el principio de incertidumbre demuestra que es imposible conocer la trayectoria de un electrón. De este modo, no podemos hablar de posición del electrón, sino de probabilidad de encontrarlo en una determinada zona del espacio que rodea al núcleo.

Uno de los conceptos esenciales del nuevo modelo atómico es el de orbital. Dicho concepto es distinto al concepto de órbita del modelo de Bohr que implica una localización del electrón. Ambos conceptos -órbita y orbital- deben ser diferenciados.

Para explicar el comportamiento de los electrones atómicos Schrodinger planteó una serie de ecuaciones matemáticas, teniendo en cuenta el carácter dual del electrón. Las soluciones de dichas ecuaciones son unas funciones matemáticas bastante complejas, denominadas orbitales y que permiten obtener la siguiente información sobre el electrón atómico:

- La energía asociada al electrón dentro del átomo.
- La probabilidad matemática de encontrar el electrón en una determinada zona del espacio, más o menos cercana o alejada del núcleo.

Por lo tanto, el orbital es una función matemática que se obtiene al resolver la ecuación establecida para explicar el comportamiento electrónico, y que nos informa de la energía asociada al electrón en el átomo, y nos permite estimar la zona del espacio donde es más probable localizar un electrón con determinada energía.

Los orbitales vienen caracterizados por un conjunto de parámetros denominados números cuánticos. Los orbitales no existen de forma independiente, solo tienen sentido hablar de ellos para describir a los electrones, que se encuentran en cierto estado cuántico caracterizado por tres números cuánticos que definen cada orbital, más un cuarto número cuántico que identifica al electrón.

Cuando visualizamos la región de máxima probabilidad para localizar al electrón alrededor del núcleo, asociamos el valor de n con el tamaño, y el valor de l con la forma espacial de dicha región. A mayor valor de n le corresponde un volumen de probabilidad de localización mayor; a $l = 0$ le corresponde una forma espacial esférica, y a $l = 1$ le asociamos una forma espacial de localización lobular.

Números cuánticos:

- *Principal (n):* Define el nivel principal de energía y la distancia media de los electrones al núcleo. Toma valores enteros desde el 1 hasta el infinito.
- *Secundario o angular (l):* Define el subnivel energético y la forma de la superficie límite de la región del espacio donde es más probable localizar el electrón.. Toma valores determinados por n , y puede variar desde 0 hasta $(n-1)$
- *Magnético (m_l):* Define la orientación espacial de las superficies que encierran la misma probabilidad de localizar al electrón. Toma valores determinados por l , y pueden ser números enteros comprendidos desde $-l$ hasta $+l$
- *De Spin (m_s):* Representa una nueva propiedad asociada a la naturaleza de los electrones, al giro. Solo puede tomar dos valores $+1/2$ y $-1/2$

Distribución electrónica del átomo: Los electrones se encuentran distribuidos en el interior del átomo en niveles energéticos, dichos niveles vienen indicados por los distintos orbitales atómicos.

Las configuraciones electrónicas de los elementos químicos se expresan mediante una combinación de números y letras que nos indican las características de los orbitales que describen a los electrones.

La importancia de establecer la configuración electrónica de los átomos es debida a que nos permite explicar las propiedades químicas de cualquier elemento químico.

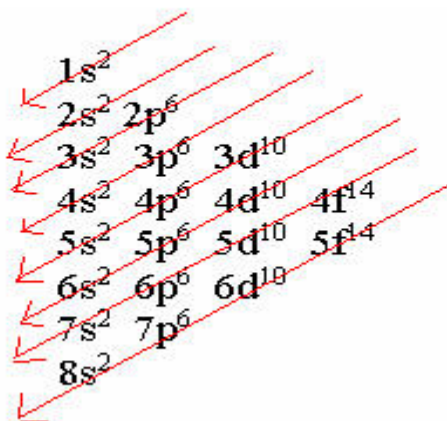
El establecimiento de la configuración electrónica de los átomos se fundamenta en un conjunto de principios:

Principio de mínima energía:

Los electrones vienen caracterizados por el conjunto de orbitales que representen un estado de menor energía para el átomo, en el estado fundamental. Por eso debemos ordenar los distintos orbitales posibles en base a su estado energético creciente.

Un esquema posible es el diagrama de llenado de Moeller.

Diagrama de llenado:



Principio de exclusión de Pauli:

En un átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales. Dicho principio limita la capacidad de los orbitales a dos electrones con número de spin opuesto.

Regla de máxima multiplicidad de Hund:

Cuando una serie de orbitales de igual energía se esta llenando con electrones, estos permanecen desapareados mientras sea posible y mantienen sus espines paralelos. Es decir, los electrones tienden a ocupar el máximo de orbitales, antes de llenarlos.