

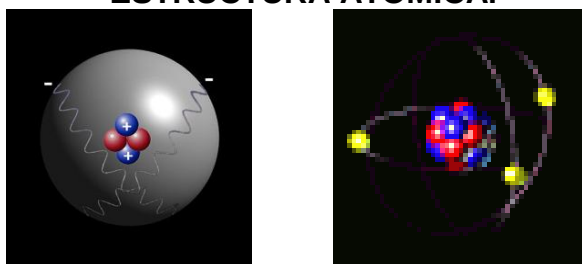
UNIDAD 2.- ESTRUCTURA ATÓMICA

Competencia particular: Emite juicios de valor sobre los beneficios y repercusiones del uso del átomo en los diferentes campos de la ciencia integrando los fundamentos de la mecánica cuántica.

RAP 1: Predice la estructura del átomo empleando modelos atómicos para caracterizar los diferentes elementos químicos.

RAP 2: Explica la construcción de la tabla periódica tomando como base la determinación de los cuatro números cuánticos.

ESTRUCTURA ATÓMICA.



Concepto del Átomo: (En química y física, átomo (del latín *atomus*, y éste del griego *ἄτομος*, indivisible) es la unidad más pequeña de un elemento químico que mantiene su identidad o sus propiedades y que no es posible dividir mediante procesos químicos. El concepto de átomo como bloque básico e indivisible que compone la materia del universo ya fue postulado por la escuela atomista en la Antigua Grecia. Sin embargo, su existencia no quedó demostrada hasta el siglo XIX. Con el desarrollo de la física nuclear en el siglo XX se comprobó que el átomo puede subdividirse en partículas más pequeñas.

Estructura Atómica. La teoría aceptada hoy es que el átomo se compone de un **núcleo** de carga positiva formado por protones y neutrones, alrededor del cual se encuentra una **nube de electrones** de carga negativa.

El Núcleo Atómico. El núcleo del átomo se encuentra formado por:

- **Protones:** Partícula de carga eléctrica positiva igual a una carga elemental, y una masa de 1.67262×10^{-27} Kg; una masa 1837 veces mayor que la del electrón.
- **Neutrones:** Partículas carentes de carga eléctrica y una masa un poco mayor que la del protón (1.67493×10^{-27} Kg.)

La cantidad de protones contenidos en el núcleo del átomo se conoce como **número atómico**, el cual se representa por la letra **Z**, es el que distingue a un elemento químico de otro. Según lo descrito anteriormente, el número atómico del hidrógeno es 1 (${}_1\text{H}$), y el del helio, 2 (${}_2\text{He}$).

La cantidad total de partículas contenidas en el núcleo del átomo (protones + neutrones) se conoce como **número de masa o masa atómica**, representado por la letra **A**. Para los ejemplos dados anteriormente, la masa atómica del hidrógeno es 1 (${}^1\text{H}$), y el del helio, 4 (${}^4\text{He}$).

Existen también **átomos que tienen el mismo número atómico, pero diferente número de masa**, los cuales se conocen como **isótopos**. Por ejemplo, existen tres isótopos naturales del hidrógeno, el **protio** (${}^1\text{H}_1$), el **deuterio** (${}^2\text{H}_1$) y el **tritio** (${}^3\text{H}_1$). Todos poseen las mismas propiedades químicas del hidrógeno y pueden ser diferenciados únicamente por ciertas propiedades físicas.

Lo más maravilloso e increíble del átomo es el hecho de que algo tan sólido y aparentemente estático como una roca esté íntegramente formado por partículas en continuo movimiento.

Nube electrónica. Alrededor del núcleo se encuentran los **electrones** que son partículas elementales de carga negativa y con una masa de 9.10×10^{-31} Kg. La cantidad de electrones **de un átomo en su estado basal** es igual a la cantidad de protones **que contiene en el núcleo**, es decir, al número atómico; **por lo que un átomo en estas condiciones tiene una carga eléctrica neta igual a 0, lo que muchas veces se describe por el término de que un átomo puro es eléctricamente neutro.**

EJEMPLOS: En el siguiente cuadro, se encuentran algunos elementos, mostrando tanto su No. Atómico, como Masa Atómica o Número de masa; indicando también la cantidad de partículas que cada uno contiene:

Símbolo	Nombre	Masa atómica	No. atómico	No. de e ⁻	No. de p ⁺	No. de n ⁰
Ba	Bario	137	56	56	56	81
Ca	Calcio	40	20	20	20	20
S	Azufre	32	16	16	16	16
N	Nitrógeno	14	7	7	7	7
Br	Bromo	80	35	35	35	45
I	Yodo	127	53	53	53	74

Como se puede observar, el valor del Número atómico corresponde directamente a la cantidad de electrones y protones que tiene el átomo en cuestión; para determinar la cantidad de neutrones que cada átomo presenta, se realiza lo siguiente: **No. de neutrones = Masa atómica – Número atómico**

Un átomo puede perder o adquirir algunos de sus electrones sin modificar su identidad química, transformándose en un **ion**, una partícula con carga neta diferente de cero; si se trata de un ion positivo se denomina **catión**, en tanto que si es un ion negativo se denomina **anión**.

El concepto de que los electrones se encuentran en órbitas satelitales alrededor del núcleo se ha abandonado en favor de la concepción de una nube de electrones deslocalizados o difusos en el espacio, el cual representa mejor el comportamiento de los electrones descrito por la mecánica cuántica únicamente como funciones de densidad de probabilidad de encontrar un electrón en una región finita de espacio alrededor del núcleo.

HISTORIA DE LA TEORÍA ATÓMICA

El concepto de átomo existe desde la Antigua Grecia propuesto por los filósofos griegos Demócrito, Leucipo y Epicuro, sin embargo, no se generó el concepto por medio de la experimentación sino como una necesidad filosófica que explicara la realidad, ya que, como proponían estos pensadores, la materia no podía dividirse indefinidamente, por lo que debía existir una unidad o bloque indivisible e indestructible que al combinarse de diferentes formas creara todos los cuerpos macroscópicos que nos rodean.

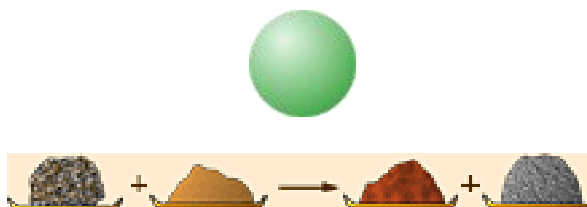
El siguiente avance significativo se realizó hasta 1773, cuando el químico francés Antoine-Laurent de Lavoisier postuló su enunciado: *"La materia no se crea ni se destruye, simplemente se transforma."*; demostrado más tarde por los experimentos del químico inglés **John Dalton** quien en **1804**, luego de medir la masa de los reactivos y productos de una reacción, concluyó que las sustancias están compuestas de **átomos esféricos idénticos para cada elemento, pero diferentes de un elemento a otro.**

Luego en **1811 Amadeo Avogadro**, físico italiano, postuló que a una temperatura, presión y volumen dados, un gas contiene siempre el mismo número de partículas, sean átomos o moléculas, independientemente de la naturaleza del gas, haciendo al mismo tiempo la hipótesis de que los gases son moléculas poliatómicas, con lo que se comenzó a distinguir entre átomos y moléculas. El químico ruso **Dimitri Ivánovich Mendeléyev** creó en **1869** una **clasificación de los elementos químicos en orden creciente de su masa atómica, remarcando que existía una periodicidad en las propiedades químicas.** Este trabajo fue el precursor de la tabla periódica de los elementos como la conocemos actualmente. La visión moderna de su estructura interna tuvo que esperar hasta el **experimento de Rutherford en 1911 y el modelo atómico de Bohr.** Posteriores descubrimientos científicos, como la **teoría cuántica** y avances tecnológicos, como el microscopio electrónico, han permitido conocer con mayor detalle las propiedades físicas y químicas de los átomos.

EVOLUCIÓN DEL MODELO ATÓMICO.

La concepción del átomo que se ha tenido a lo largo de la historia ha variado de acuerdo a los descubrimientos realizados en el campo de la física y la química. A continuación se hará una exposición de los modelos atómicos propuestos por los científicos de diferentes épocas. Algunos de ellos son completamente obsoletos para explicar los fenómenos observados actualmente, pero se incluyen a manera de reseña histórica.

MODELO DE DALTON.



Fue el primer modelo atómico con bases científicas, fue formulado en 1808 por John Dalton. Este primer modelo atómico postulaba:

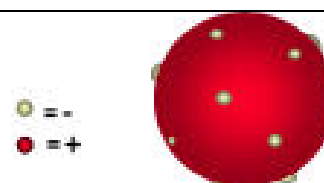
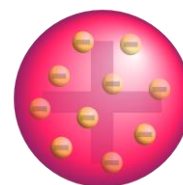
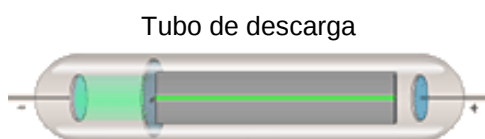
- La materia está formada por partículas muy pequeñas llamadas átomos, que son indivisibles y no se pueden destruir.
- Los átomos de un mismo elemento son iguales entre sí, tienen su propio peso y cualidades propias. Los átomos de los diferentes elementos tienen pesos diferentes.
- Los átomos permanecen sin división, aún cuando se combinen en las reacciones químicas.
- Los átomos, al combinarse para formar compuestos guardan relaciones simples.
- Los átomos de elementos diferentes se pueden combinar en proporciones distintas y formar más de un compuesto.
- Los compuestos químicos se forman al unirse átomos de dos o más elementos distintos.

Sin embargo desapareció ante el modelo de Thomson ya que no explica los rayos catódicos, la radioactividad ni la presencia de los electrones (e^-) o protones (p^+)



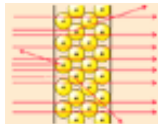
MODELO DE THOMSON

Este modelo fue representado en 1897. Para explicar la formación de iones, positivos y negativos, y la presencia de los electrones dentro de la estructura atómica, Thomson ideó un átomo parecido a un pastel de frutas (de la analogía del inglés *plum-pudding model*). Una nube positiva que contenía las **pequeñas partículas negativas (los electrones)** suspendidos en ella. El número de cargas negativas era el adecuado para neutralizar la carga positiva. En el caso de que el átomo perdiera un electrón, la estructura quedaría positiva; y si ganaba, la carga final sería negativa. De esta forma, explicaba la formación de iones; pero dejó sin explicación la existencia de las otras radiaciones.



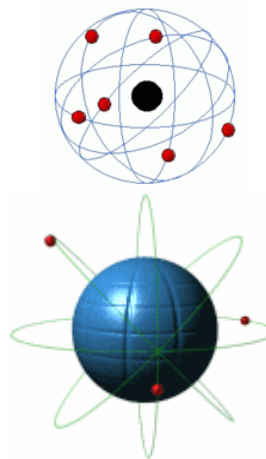
MODELO DE RUTHERFORD

Este modelo fue desarrollado por el físico Ernest Rutherford a partir de los resultados obtenidos en lo que hoy se conoce como el experimento de Rutherford en 1911. Representa un avance sobre el modelo de Thomson, ya que mantiene que el átomo se compone de una parte positiva y una negativa, sin embargo, a diferencia del anterior, postula que la parte positiva se concentra en un núcleo, el cual también contiene virtualmente toda la masa del átomo, mientras que los electrones se ubican en una corteza orbitando al núcleo en órbitas circulares o elípticas con un espacio vacío entre ellos. A pesar de ser un modelo obsoleto, es la percepción más común del átomo. Rutherford predijo la existencia del neutrón en el año 1920, por esa razón en el modelo anterior (Thomson), no se habla de éste.



Por desgracia, el modelo atómico de Rutherford presentaba varias incongruencias:

- Contradecía las leyes del electromagnetismo de James Clerk Maxwell, las cuales estaban muy comprobadas mediante datos experimentales. Según las leyes de Maxwell, una carga eléctrica en movimiento (en este caso el electrón) debería emitir energía constantemente en forma de radiación y llegaría un momento en que el electrón caería sobre el núcleo y la materia se destruiría. Todo ocurriría muy brevemente.
- No explicaba los espectros atómicos.

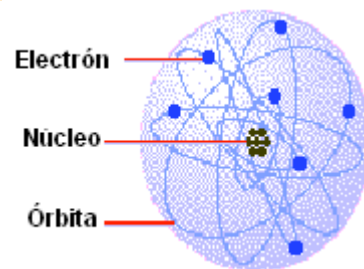
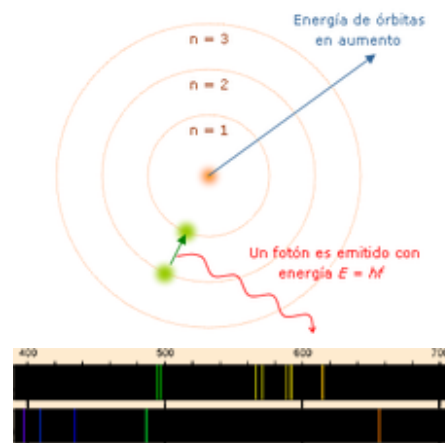


MODELO DE BOHR (1913)

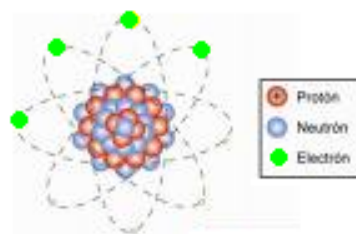
“El átomo es un pequeño sistema solar con un núcleo en el centro y electrones moviéndose alrededor del núcleo en órbitas bien definidas.”

Las órbitas están cuantizadas (los e^- pueden estar solo en ciertas órbitas). Este modelo es estrictamente un modelo del átomo de hidrógeno tomando como punto de partida el modelo de Rutherford, Niels Bohr trata de incorporar los fenómenos de absorción y emisión de los gases, así como la nueva teoría de la cuantización de la energía desarrollada por Max Planck y el fenómeno del efecto fotoeléctrico observado por Albert Einstein.

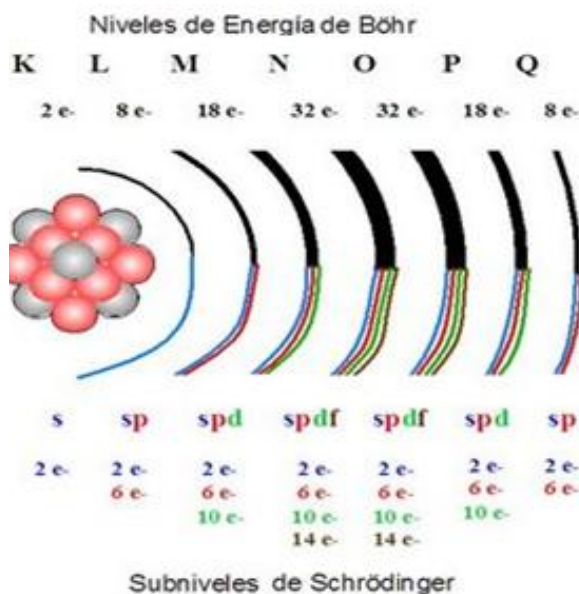
- Cada órbita tiene una energía asociada. La más externa es la de mayor energía.
- Los electrones no radian energía (luz) mientras permanezcan en órbitas estables.
- Los electrones pueden saltar de una a otra órbita. Si lo hace desde una de menor energía a una de mayor energía absorbe un cuanto de energía (una cantidad) igual a la diferencia de energía asociada a cada órbita. Si pasa de una de mayor a una de menor, pierde energía en forma de radiación (luz).
- El mayor éxito de Bohr fue dar la explicación al espectro de emisión del hidrógeno. Pero solo la luz de este elemento. Proporciona una base para el carácter cuántico de la luz, el fotón es emitido cuando un electrón cae de una órbita a otra, siendo un pulso de energía radiada. Bohr no puede explicar la existencia de órbitas estables.



MODELO DE SCHRÖDINGER: MODELO ACTUAL



Después de que Louis-Victor de Broglie propuso la naturaleza ondulatoria de la materia en 1924, la cual fue generalizada por Erwin Schrödinger en 1926, se actualizó nuevamente el modelo del átomo. En el modelo de Schrödinger se abandona la concepción de los electrones como esferas diminutas con carga que giran en torno al núcleo. En vez de esto, Schrödinger describe a los electrones por medio de una función de onda, estableciendo que los niveles de energía de Bohr están formados por regiones discretas a las que denomino orbitales. Los cuales representan la **región de mayor probabilidad de presencia de los electrones** en una región delimitada del espacio (**REEMPE**). Esta zona de probabilidad se conoce como **orbital**.



Sommerfeld modificó (1915) la sencilla teoría de Bohr para explicar el hecho de que los campos aplicados externamente perturban en forma natural las órbitas de los electrones, que de otro modo permanecerían circulares. Tales perturbaciones harían elípticas las órbitas y modificarían las propiedades del momento angular del electrón. **Louis de Broglie** introduce en 1924 la sugerencia de que una partícula lleva asociada una onda.

Una consecuencia del carácter ondulatorio de la materia (es decir, de gozar ésta de propiedades ondulatorias) es la **imposibilidad de especificar, simultáneamente y con exactitud, la posición y el momento lineal de una partícula**, lo que se conoce como **Principio de Incertidumbre de Heisenberg**.

NÚMEROS CUÁNTICOS:

Wolfgang Pauli fue uno de los científicos más importantes del grupo que crearon la teoría cuántica, juega un papel crucial en el desarrollo de esta teoría. Cada una de las capas del modelo atómico de Bohr correspondía a un conjunto de números cuánticos, es decir, de la región en la que se pueden encontrar los electrones dentro de un átomo y formuló lo que hoy se conoce como el:

Principio de Exclusión de Pauli, según el cual **“dos electrones no pueden tener nunca el mismo conjunto de números cuánticos”**, proporcionando así una razón para justificar la forma de llenarse las capas de átomos cada vez más pesados.

Los números cuánticos son valores numéricos que nos indican las características de los electrones de los átomos, esto está basado desde luego en la teoría atómica de Neils Bohr que es el modelo atómico más aceptado y utilizado en los últimos tiempos.

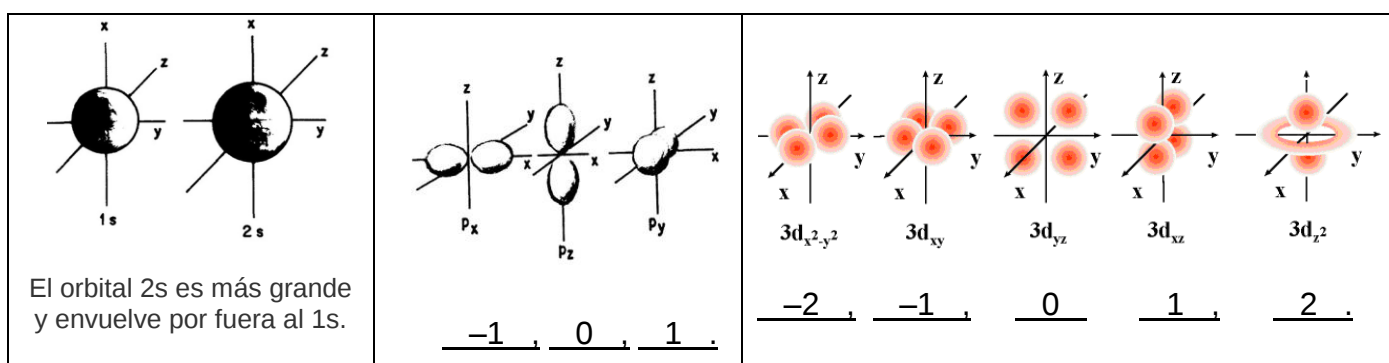
Los números cuánticos más importantes son cuatro:

- **n = Número Cuántico Principal.**
- **l = Número Cuántico Secundario.**
- **m = Número Cuántico Magnético.**
- **s (m_s) = Número Cuántico de Spin.**

Son los que determinan la región espacio-energía de mayor probabilidad para encontrar a un electrón (**REEMPE** u orbital). Se llaman números cuánticos porque se basan en la teoría cuántica, pueden presentar los siguientes **Valores**.

n =	Número Cuántico Principal: Proporciona el Nivel de energía donde se localiza un electrón; así como la distancia promedio relativa del electrón al Núcleo. n posee valores de 1, 2, 3,... (los elementos conocidos hasta estas fechas, solo tienen como máximo valor de niveles de energía el 7).	
l =	Número Cuántico Azimutal: Proporciona el subnivel, que determina la forma en que gira un electrón alrededor del núcleo. Cada orbital de un subnivel dado es equivalente en energía, en ausencia de un campo magnético. " l " posee valores desde 0 hasta (n-1) . Ejemplo: n = 1 l = 0 (subnivel llamado "s") n = 2 l = 0, 1 (subniveles "s" y "p") n = 3 l = 0, 1, 2 (subniveles "s", "p", "d") n = 4 l = 0, 1, 2, 3 (subniveles "s", "p", "d", "f")	Como puedes observar, si: l = subnivel 0 = s 1 = p 2 = d 3 = f
m =	Número Cuántico Magnético: Define la cantidad y orientación de los Orbitales dentro de un subnivel. m posee valores desde (- l pasando por 0 hasta + l). Cada valor de "m" indica la presencia de un orbital; por lo que se observa que para el subnivel s = 1 orbital; en el subnivel "p" = 3 orbitales; en "d" = 5 orbitales y en el subnivel "f" = 7 orbitales, representados por medio de una línea.	subnivel = l = "m" s = 0 = 0 p = 1 = -1 0 1 d = 2 = -2 -1 0 1 2 f = 3 = -3 -2 -1 0 1 2 3
m_s =	Número Cuántico de Spin: Define el giro del Electrón en un orbital. Cada orbital tiene un máximo de 2 electrones . Posee valores de $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$.	Para simbolizar la presencia de los electrones en cada orbital, se emplean flechas de la siguiente forma: $\uparrow$ $+\frac{1}{2}$ $\downarrow$ $-\frac{1}{2}$

Orbitales: Cada tipo de subnivel, cuenta con diferentes orbitales, tabulados como lo indicamos anteriormente; en las siguientes figuras podemos apreciar la forma de los orbitales s, p y d, respectivamente; así como los valores que corresponden al número cuántico "m" para cada caso.



Configuración Electrónica

Para saber dónde se localizan los electrones en el modelo atómico cuántico, se utiliza la Configuración Electrónica.

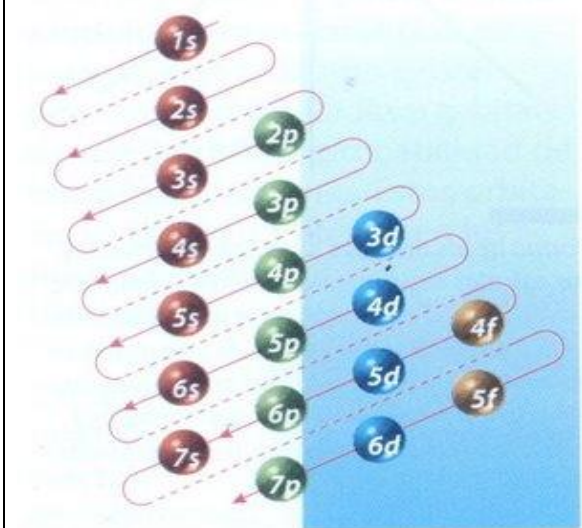
Configurar significa "ordenar" o "acomodar" y electrónico deriva de "electrón"; así configuración electrónica es la manera ordenada de repartir los electrones en los niveles y subniveles de energía.

Para acomodar correctamente los electrones en el Modelo Atómico de la Mecánica Cuántica Ondulatoria, existen dos principios denominados fundamentales:

"Principio de Edificación Progresiva o Regla de Auf - Bau". Cada nuevo electrón añadido a un átomo entrará en el orbital disponible de mínima energía.

Regla de las diagonales: Consiste en distribuir los electrones de un átomo a partir de su número atómico, considerando el nivel y los posibles subniveles que existan en cada uno; lo que nos indica la forma en la que los electrones se "localizan" en un átomo. La REGLA DE LAS DIAGONALES ofrece un medio sencillo para realizar dicho cálculo. Recordemos que el número máximo de electrones en los subniveles es:

	s	p	d	f	
1	s				s: 2 electrones
2	s	p			p: 6 electrones
3	s	p	d		d: 10 electrones
4	s	p	d	f	f: 14 electrones
5	s	p	d	f	
6	s	p	d		
7	s	p			



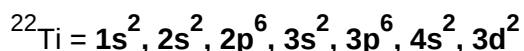
La configuración electrónica es el modo en el cual los electrones están ordenados en un átomo. Están sujetos al principio de exclusión de Pauli, que dice que **no puede haber dos electrones en un mismo átomo con los cuatro valores de los números cuánticos iguales**. La configuración electrónica se basa en los cuánticos o Quantum, los cuales son unidades de energía atómica.

El **Número atómico** nos indica la **cantidad de electrones y de protones** que tiene un elemento, por lo tanto, es el dato que se utiliza para la realización de la configuración electrónica.

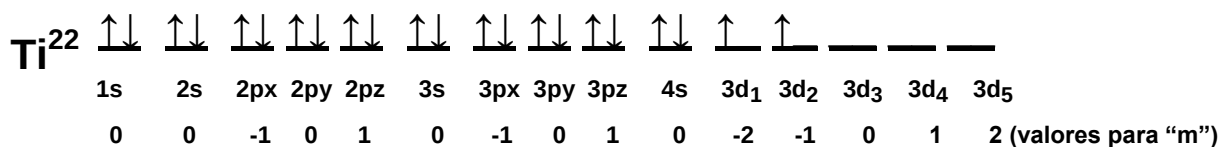
1 s² Se escribe un número **como coeficiente**, mismo que indica el **nivel**; una letra "**s, p, d, f**", para señalar el subnivel; y un superíndice, que muestra la cantidad de electrones en ese subnivel.

Ejemplo: Escribe la configuración electrónica del elemento con número atómico 22 (Titanio).

- Escribe el símbolo químico del elemento. Ti
- Coloca como superíndice izquierdo o derecho el número atómico de ese elemento (el número atómico indica las cargas positivas del núcleo, protones, que son numéricamente igual al total de cargas negativas, electrones). ²²Ti
- Utilizando la "Regla de Diagonales" distribuye los electrones; comienza en la posición 1s que será llenado con los electrones que caben en ese orbital (recuerda que el orbital "s" con 2 electrones; "p" con 6 e⁻; "d" con 10 y "f" con 14). Y así sucesivamente hasta llegar al total de los 22 electrones siguiendo la secuencia del esquema.
- Escribe la cantidad de electrones que caben en cada orbital siguiendo las flechas del cuadro y observa que la configuración electrónica para este elemento queda expresada:



Para conocer **los valores de los números cuánticos** de los electrones en cada átomo, se parte de la configuración electrónica y se simboliza cada orbital con una línea y los electrones por medio de flechas, recordando que en cada orbital solo pueden existir como máximo 2 electrones con spin contrario (flechas opuestas). Para tal fin, se debe seguir la **Regla de Hund**, conocida como **principio de máxima multiplicidad**. "Para el llenado de orbitales en un átomo, en un subnivel se debe ocupar cada orbital con un electrón con un mismo spin, una vez ocupados todos los orbitales se formarán parejas de electrones con spin opuesto".



El último electrón que se anota, se denomina **electrón diferencial** y, como su nombre lo indica, es el que caracteriza a los átomos de los diferentes elementos. Los valores de los números cuánticos de ese electrón permitirán definir de que tipo de elemento se trata y su localización posterior en la tabla periódica.

Para el elemento del ejemplo, los valores de los números cuánticos del electrón diferencial son:

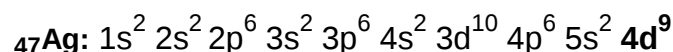
$n = 3$, debido a que el electrón se localiza en el nivel 3, por el coeficiente de la configuración;

$l = 2$, si el subnivel es "d", es el valor que se le asigna al mismo.

$m = -1$, como lo muestra el diagrama por la tabulación de los orbitales y la localización del e^-

$m_s = \frac{1}{2}$, siendo un electrón solitario simbolizado con una flecha hacia arriba su valor es positivo.

Configuración electrónica de la plata. De acuerdo a la regla de Auf-Bau, el orden de energía de los orbitales es el indicado en la tabla de la izquierda: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, etc.



Valor de los números
 cuánticos del electrón
 diferencial.

$n = 5$

$l = 2$

$m = 1$

$m_s = -\frac{1}{2}$