MODELOS ATÓMICOS

El primero en hablar de la estructura de la materia fue Demócrito de Abdera, 460 a. C-370 a. C. Consideraba que la materia estaba compuesta por pequeñas partículas indivisibles e indestructibles. De ahí el nombre de átomo, deriva del griego “atoma” que significa indivisible.

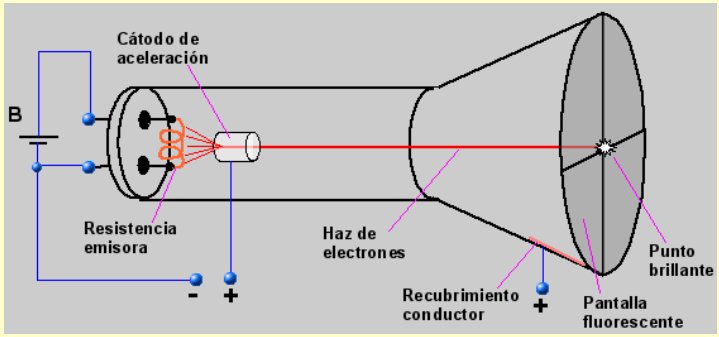
Ya ves que se empezó pronto con el estudio de la composición de la materia.

Aún más curioso es que hasta principios del siglo XIX no se avanzara en este aspecto

John Dalton, enunció su Teoría Atómica a principios del s. XIX. Se parecía mucho a lo dicho por Demócrito pero Dalton le dio un carácter cuantitativo novedoso. Para él los átomos se combinaban para dar moléculas y lo hacían en proporciones definidas.

MODELO ATÓMICO DE THOMSON.

Sus estudios sobre la naturaleza de los rayos catódicos (1895), hechos en un tubo de vacío, como el de la figura, le permitieron conocer la relación q/m (carga/masa) de las partículas que salían del cátodo. Su carga tenía que ser negativa y se les denominó electrones.
Más tarde, Millikan (1906), contribuyó a determinar la carga del electrón, con lo que la masa fue determinada con un simple cálculo.

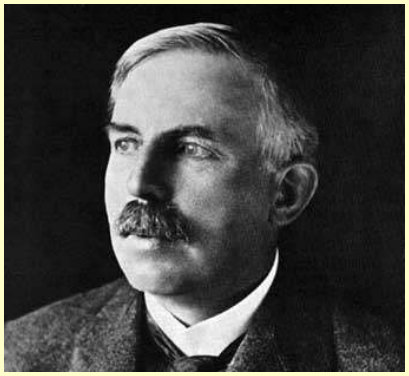


Un tubo de vacío o de rayos catódicos es un tubo de vidrio con dos placas, electrodos, conectadas a un generador. En el tubo se mete un gas a baja presión, haciendo vacío. En estas condiciones, cuando se somete a una gran diferencia de potencial, el gas comienza a conducir la electricidad y emite luz. Si se aumenta el vacío la luz desaparece y comienza una fluorescencia en la pared opuesta al cátodo. Al colocar un objeto entre el cátodo y el extremo del tubo aparece su sombra, (ver ilustración). Los científicos supusieron que la fluorescencia era producida por una radiación invisible procedente del cátodo, de ahí el nombre de RAYOS CATÓDICOS.

Con el descubrimiento del electrón, Joseph John Thomson acabó con la idea de la indivisibilidad del átomo. Enunció su Teoría Atómica que fue de gran aceptación. Comparó al átomo con un bizcocho de pasas en el que el bizcocho era el átomo, con carga positiva, y las pasas eran los electrones, con carga negativa. Habría tantos electrones como fueran necesarios para compensar la carga positiva del átomo.

Este modelo explicaba la producción de iones, por pérdida o ganancia de electrones, la electricidad estática y la corriente eléctrica, así como el efecto de fluorescencia del tubo de vacío.

MODELO ATÓMICO DE RUTHERFORD.



Ernest Rutherford

Diseñó un experimento para demostrar la validez de la Teoría Atómica de Thomson. El sistema que montó constaba de delgadas láminas de oro sobre las que hizo pasar partículas α provenientes de un elemento radiactivo como el Radio. Él esperaba que todas las partículas atravesaran las láminas sin problema alguno. Para verificarlo recubrió el sistema con una pantalla de ZnS, fluorescente.

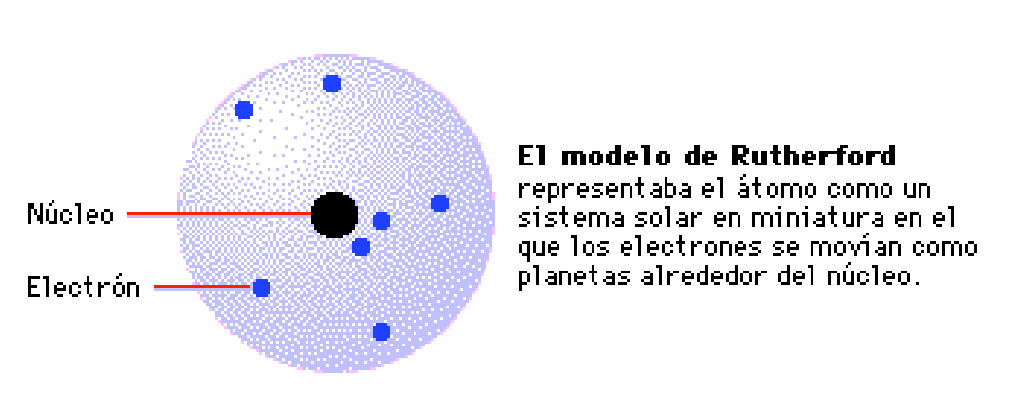
Su sorpresa fue enorme cuando descubrió que, aunque la mayoría de las partículas mostraban una trayectoria rectilínea, como era de esperar, algunas se desviaban e incluso ¡REBOTABAN!.

Era evidente que habría que establecer un nuevo modelo de átomo

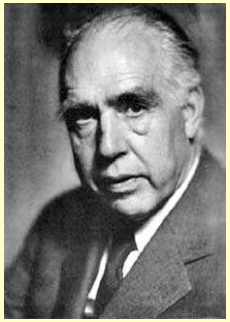
Las desviaciones de la trayectoria observadas, sólo se podían explicar suponiendo una gran concentración de carga positiva, y el hecho de que hubiera algunos "rebotes" se debería a la gran densidad material del punto de impacto. Estas deducciones fueron la base del nuevo modelo atómico, (1911).

El átomo estaba dividido en dos partes, el núcleo, con toda la carga positiva y masa del átomo y la corteza, en la que estaban los electrones.

Comienza la era nuclear y con este modelo se explican fenómenos de radiactividad recientemente descubiertos.



MODELO CUÁNTICO DE BOHR.



Niels Bohr

Al igual que en los casos anteriores, el motivo por el que se siguió investigando la estructura del átomo fue el avance de la tecnología. En ese tiempo se estaba investigando sobre los espectros atómicos, (la forma de absorber o emitir la energía que tienen los átomos). El modelo atómico de Rutherford no podía explicar las observaciones que se estaban haciendo.

Las experiencias que se estaban realizando mostraban espectros atómicos **característicos** para cada átomo. Además estos espectros no eran continuos, sino que mostraban una serie de líneas, correspondientes a distintas longitudes de onda, separadas por zonas oscuras (espectro de emisión) o claras (espectro de absorción).

Su Teoría Atómica fue publicada entre 1913 y 1915. Con ella consiguió explicar el espectro del átomo de hidrógeno. Lo que hizo fue aplicar la Teoría Cuántica de Planck al modelo atómico de Rutherford. Esto se traducía en limitar la posición de los electrones en la corteza del átomo. Ya no podían girar libremente sino que tendrían que cumplir una serie de requisitos energéticos. APARECE EL CONCEPTO DE ÓRBITA.

Este modelo se basa en tres postulados que establecen las condiciones energéticas que han de cumplir los electrones.

•PRIMER POSTULADO DE BOHR.

El electrón gira alrededor del núcleo en órbitas estacionarias, es decir, sin emitir energía.

Esto se consigue cuando la fuerza de reacción a la fuerza centrípeta es igual a la fuerza de atracción electrostática entre el electrón y el núcleo.

$$K\frac{e\cdot e}{r^2}=m\frac{v^2}{r}$$

•SEGUNDO POSTULADO DE BOHR.

Sólo son posibles aquellas órbitas en las que el electrón tiene un momento angular múltiplo entero de h/2π.

$$J=n\frac{h}{2\pi}$$

Este segundo postulado es semiempírico porque el valor h/2π es el único que permite la deducción de la serie de Balmer.

n = número cuántico principal = 1, 2, 3, ...

$$J=I\omega=mr^2\frac{v}{r}=mvr$$

Eliminando v entre las expresiones del primer y segundo postulado y despejando r se obtiene:

$$r=\frac{h^2}{4\pi^2me^2}\cdot n^2=a_0\cdot n^2$$

a_0 = cte. = 0,529 Å.

Para **n** = 1 tenemos la órbita de menor radio. El electrón en ella posee la menor energía potencial, por lo tanto es el estado de mínima energía o mayor estabilidad del átomo de hidrógeno. Dándole valores a **n** se van obteniendo los distintos radios de las órbitas permitidas para el átomo de hidrógeno.
Un electrón que sea excitado por algún agente, podrá promocionar a otra órbita de mayor energía o, si por el contrario, se relaja podrá descender a otra órbita de menor energía.

•TERCER POSTULADO DE BOHR.

La energía que libera un electrón que desciende a otro nivel de menor energía se emite en forma de fotón y su frecuencia viene dada por la expresión de Planck. $\boxed{E_a - E_b = h\nu}$

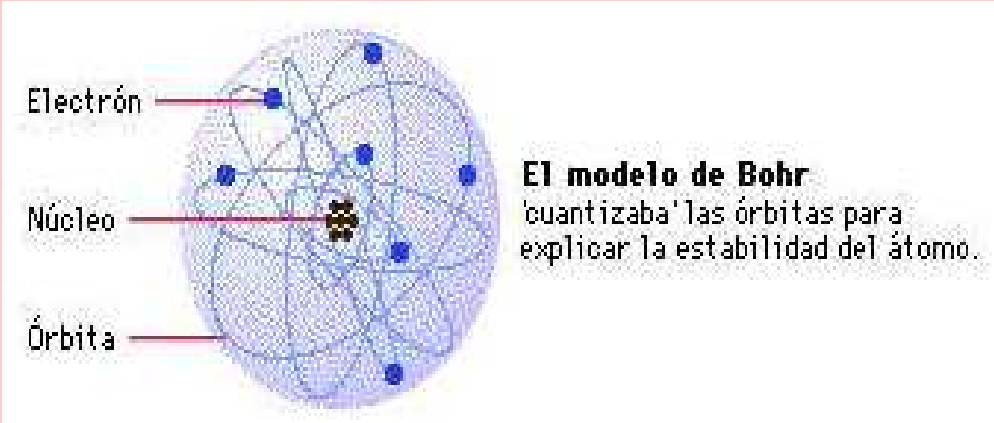
La energía cinética del electrón en cualquier órbita será: $E_C = \frac{mv^2}{2} = \frac{e^2}{2r}$

La energía potencial del electrón en cualquier órbita será: $E_P = e \cdot V = e\left(-\frac{e}{r}\right) = -\frac{e^2}{r}$

La energía total del electrón en cualquier órbita será: $E = E_C + E_P = \frac{e^2}{2r} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r}$

Si sustituimos r por el valor obtenido en el segundo postulado: $\boxed{E = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{K}{n^2}}$ K = cte.

Supongamos que un electrón cae desde una órbita superior a n = 2 hasta la órbita n = 2. Sus energías respectivas serán $E_n = -K/n^2$ y $E_2 = -K/2^2$. Si sustituimos en la expresión de Planck se tiene:



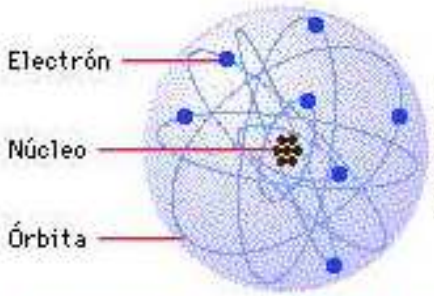
$$\boxed{\nu = \frac{K}{h}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)}$$

¡¡La expresión de Balmer!!

FALLOS DEL MODELO DE BOHR.

El modelo de Bohr explicó espectacularmente la serie de Balmer, pero poco después surgieron nuevas dificultades incluso para el espectro del átomo de hidrógeno. Había detalles que no se podían explicar. Sommerfeld (1916) perfeccionó el modelo de Bohr considerando que las órbitas también podían ser elípticas. Esta modificación sólo funcionó para sistemas de un solo electrón.

Como señalamos antes, el segundo postulado es un ajuste matemático para poder deducir la serie de Balmer de los espectros. El valor $h/2\pi$ es un valor empírico sin tener una base teórica. Esto es un poco desconcertante en el contexto de una Teoría Atómica. Además, esta Teoría es una mezcla de mecánica clásica y mecánica cuántica, algo que hoy en día no se acepta.



Observa la diferencia de tamaño entre el átomo y el núcleo.

Es un modelo bastante "lógico" porque se parece al modelo planetario. Los electrones giran alrededor del núcleo de igual manera que los planetas alrededor del Sol.

Aún con estos fallos, el modelo de Bohr es muy didáctico y supuso un gran avance para la ciencia por lo que no debemos menospreciar la labor de este gran científico.

MODELO ATÓMICO DE LA MECÁNICA ONDULATORIA.

Para poder entender este modelo se hace necesario explicar algunas Teorías y Principios que son la base.
Es una parte bastante árida pero necesaria para una buena comprensión.

Teoría cuántica, teoría física basada en el concepto de **cuanto**, como unidad energética para describir las propiedades dinámicas de las partículas subatómicas y las interacciones entre la materia y la radiación. Las bases de la teoría fueron sentadas por el físico alemán Max Planck, que en 1900 postuló que la materia sólo puede emitir o absorber energía en pequeñas unidades discretas llamadas cuantos. Otra contribución fundamental al desarrollo de la teoría fue el principio de incertidumbre, formulado por el físico alemán Werner Heisenberg en 1926, y que afirma que no es posible especificar con exactitud simultáneamente la posición y la velocidad de una partícula subatómica.

Introducción del cuanto de Planck. El primer avance que llevó a la solución de las dificultades que se encontraban los científicos que estudiaban los espectros atómicos fue la introducción del concepto de cuanto, como resultado de los estudios de la radiación del cuerpo negro realizados por los físicos en los últimos años del s. XIX (el término *cuerpo negro* se refiere a un cuerpo o superficie ideal que absorbe toda la energía radiante sin reflejar ninguna). Durante la década de 1890, los físicos llevaron a cabo estudios cuantitativos detallados de esos fenómenos y expresaron sus resultados en una serie de curvas o gráficas. La teoría clásica predecía un conjunto de curvas radicalmente diferentes de las observadas realmente. Lo que hizo Planck fue diseñar una fórmula matemática que describiera las curvas reales con exactitud; después dedujo una hipótesis física que pudiera explicar la fórmula. Su hipótesis fue que la energía sólo es radiada en cuantos cuya energía es $h\nu$, donde ν es la frecuencia de la radiación y h es una constante conocida como constante de Planck.

•EL EFECTO FOTOELÉCTRICO.

Cuando se irradia una placa metálica con una radiación electromagnética de una determinada frecuencia, ésta emite una corriente de electrones con una determinada energía que se hace mayor cuanto mayor es la intensidad de la radiación.

En 1905, para tratar de explicar el mecanismo del efecto fotoeléctrico, Albert Einstein sugirió que podría considerarse que la luz se comporta en determinados casos como una partícula, y que la energía de cada partícula luminosa, o fotón, sólo depende de la frecuencia de la luz. Para explicar el efecto fotoeléctrico, Einstein consideró la luz como un conjunto de "proyectiles" que chocan contra el metal. Cuando un electrón libre del metal es golpeado por un fotón, absorbe la energía del mismo. Si el fotón tiene la suficiente energía, el electrón es expulsado del metal. La teoría de Einstein explicaba muchas características del efecto fotoeléctrico, como por ejemplo el hecho de que la energía máxima de los electrones expulsados sea independiente de la intensidad de la luz. Según la teoría de Einstein, esta energía máxima sólo depende de la energía del fotón que lo expulsa, que a su vez sólo depende de la frecuencia de la luz. ($E = h\nu$).

La teoría de Einstein se verificó por experimentos posteriores. Su explicación del efecto fotoeléctrico, con la demostración de que la radiación electromagnética puede comportarse en algunos casos como un conjunto de partículas, contribuyó al desarrollo de la teoría cuántica.

Pero esta idea supuso un enigma para los físicos, la coexistencia de dos teorías de la luz: la teoría corpuscular, que explica la luz como una corriente de partículas, y la teoría ondulatoria, que considera la luz como ondas electromagnéticas, que era la vigente hasta ese momento.

•DUALIDAD ONDA-CORPÚSCULO.

El físico francés Louis Victor de Broglie sugirió en 1923 que, puesto que las ondas electromagnéticas muestran algunas características corpusculares, las partículas también deberían presentar en algunos casos propiedades ondulatorias. Esta predicción fue verificada experimentalmente pocos años después al lograr dispersar un haz de electrones por un cristal y obtener una figura de difracción característica de una onda.

$$E = h \cdot \nu$$

$$E = m \cdot c^2$$

Estas son las ecuaciones de Planck y Einstein para la Energía

$$h \cdot \nu = m \cdot c^2$$

Igualando se tiene esta otra.

Esta ecuación ya se conocía y relaciona la frecuencia y la longitud de onda de una radiación.

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

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{m \cdot c}}$$

Esta expresión nos da la longitud de onda asociada a un fotón (partícula de luz).

La expresión para una partícula de De Broglie es análoga:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{m \cdot v}}$$

Observa que la diferencia entre ambas expresiones es que para la primera la velocidad es la de la luz, mientras que en la segunda es otra velocidad que tiene que ser menor que la de la luz.

•LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER.

El concepto ondulatorio de las partículas llevó al físico austriaco Erwin Schrödinger a desarrollar una ***ecuación de onda*** para describir las propiedades ondulatorias de una partícula y, más concretamente, el comportamiento ondulatorio del electrón en el átomo de hidrógeno (1926).

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\boxed{\hat{H}\,\Psi_i = E_i \Psi_i}$$

Donde el operador hamiltoniano u operador energía es:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Para el caso de una sola dimensión.

Aunque esta ecuación diferencial era continua y proporcionaba soluciones para todos los puntos del espacio, las soluciones permitidas de la ecuación estaban restringidas por ciertas condiciones expresadas por ecuaciones matemáticas llamadas funciones propias. Así, la ecuación de onda de Schrödinger sólo tenía determinadas soluciones discretas; estas soluciones eran expresiones matemáticas en las que los números cuánticos aparecían como parámetros. La ecuación de Schrödinger se resolvió para el átomo de hidrógeno y dio resultados que encajaban sustancialmente con la teoría cuántica anterior. Además, tenía solución para el átomo de helio, que la teoría anterior no había logrado explicar adecuadamente, y también en este caso concordaba con los datos experimentales. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger también indicaban que no podía haber dos electrones que tuvieran sus cuatro números cuánticos iguales, esto es, que estuvieran en el mismo estado energético. Esta regla, que ya había sido establecida empíricamente por Wolfgang Pauli en 1925, se conoce como principio de exclusión.

La solución de una ecuación de onda elevada al cuadrado da como resultado una región del espacio en la que existe la máxima probabilidad de encontrar al electrón.

•EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG.

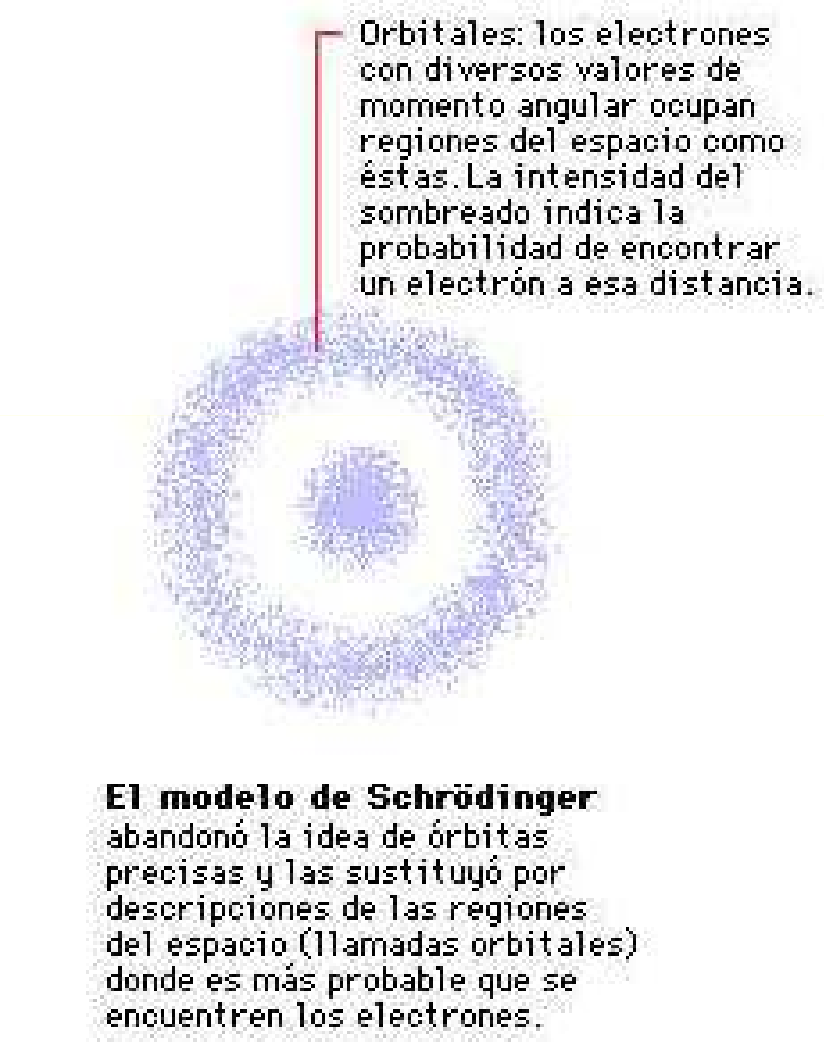
La imposibilidad de determinar exactamente la situación de un electrón en un instante determinado fue analizada por Heisenberg, que en 1927 formuló el principio de incertidumbre. Este principio afirma que es imposible especificar con exactitud simultáneamente la posición y momento lineal de una partícula. En otras palabras, los físicos no pueden medir la posición de una partícula sin causar una perturbación en la velocidad de dicha partícula. Se dice que el conocimiento de la posición y de la velocidad son complementarios, es decir, que no pueden ser precisos al mismo tiempo. Este principio también es fundamental en la visión de la mecánica cuántica que suele aceptarse en la actualidad: los caracteres ondulatorio y corpuscular de la radiación electromagnética pueden interpretarse como dos propiedades complementarias de la radiación.

La única manera de poder "ver" un electrón sería usando una luz de longitud de onda menor que la longitud de onda del electrón. Pero, al proyectar esa luz sobre el electrón, algún fotón chocaría con él, transmitiéndole su energía, por lo que variaría su velocidad. Es decir, al determinar su posición variamos su velocidad en una cantidad desconocida.

Al no poder determinar de forma precisa y al mismo tiempo su posición y su velocidad **es imposible conocer la trayectoria del electrón**.

No podemos hablar de órbitas sino de ORBITALES, zonas del espacio donde existe la máxima probabilidad de encontrar al electrón.

Una vez conocidos todos estos estudios y Principios debe ser más fácil la comprensión del modelo cuántico del átomo. Según este modelo los electrones se encuentran en orbitales que poseen una determinada energía. Estos orbitales rodean al núcleo y sólo pueden tener valores de energía permitidos por las funciones de ondas que los definen.



La grandeza de este modelo radica en encajar de forma racional todas las observaciones hechas y sin obviar el carácter dual (onda-partícula) del electrón.

A partir de este momento no podemos asegurar que las partículas sean ondas o partículas, unas veces se comportan como ondas y otras veces como partículas.

NÚMEROS CUÁNTICOS.

Ya hemos dicho que los números cuánticos eran los parámetros que daban las soluciones permitidas a las ecuaciones de Schrödinger para cada orbital. Ahora vamos a ver cuáles son estos números, que relación guardan entre sí y qué significado físico tienen.

NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL, (n).

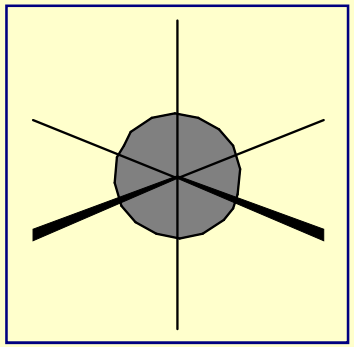
Sólo puede tomar valores de números naturales: 1, 2, 3, ...
Representa el nivel energético al que pertenece el orbital, dicho de otro modo, el tamaño o volumen del orbital.

NÚMERO CUÁNTICO AZIMUTAL, (l).

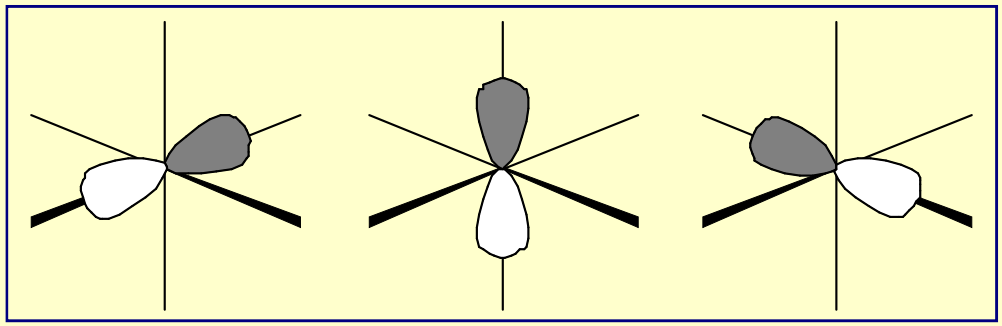
Toma valores que van desde 0 hasta n-1.
Se refiere a los subniveles de energía dentro del mismo nivel energético, niveles degenerados, y dan información de la geometría del orbital. Según sea su valor, la forma del orbital será distinta y por lo tanto lo será su geometría.

NÚMERO CUÁNTICO MAGNÉTICO, (m).

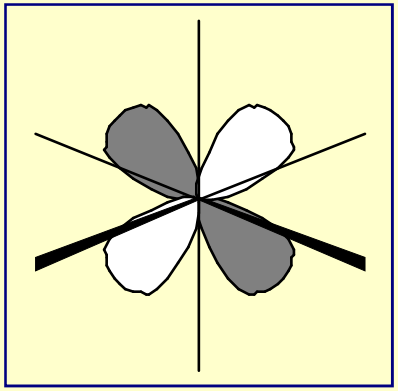
Toma valores que van desde -l hasta +l pasando por el cero.
Nace como consecuencia del desdoblamiento de los niveles energéticos cuando se someten a la acción de un campo magnético. Los orbitales se orientan de distintos modos. Nos dice de cuántas maneras distintas se pueden orientar en el espacio.



Para un orbital de tipo “s” (valor de **l** = 0) se obtiene un orbital esférico que sólo posee un orientación posible, por eso **m** sólo puede ser cero, (un solo valor).



Para un orbital de tipo “p” (valor de **l** = 1) se obtiene un orbital con dos lóbulos que posee tres orientaciones posibles, por eso **m** tiene tres valores, (-1, 0, 1).

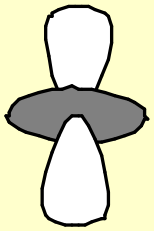


Para un orbital de tipo “d” (valor de **l** = 2) se obtiene un orbital de este tipo que posee cinco orientaciones posibles, por eso **m** tiene cinco valores, (-2, -1, 0, 1, 2).

NÚMERO CUÁNTICO DE ESPÍN, (s).

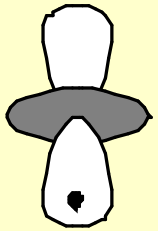
Sólo puede tomar los valores +1/2 y -1/2.
Representa el sentido en el que gira el electrón sobre sí mismo. Sólo son posibles dos formas por eso sólo puede tomar estos dos valores.

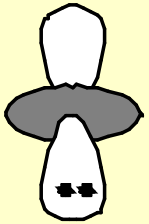
Es importante señalar que los tres primeros números cuánticos definen el orbital en el que se encuentra el electrón, mientras que los cuatro números cuánticos definen al electrón dentro de un determinado orbital.



Éste es un orbital tipo "d". Su pongamos que está en el tercer nivel energético. Los números cuánticos que lo definen serían: n = 3; l = 2; m = 2 (p. Ej.). La terna de números (3, 2, 2) define el orbital.

Ahora hay un electrón en ese orbital, tendremos que usar el número cuántico de espín para definirlo. (3, 2, 2, +1/2)





Ahora hay dos electrones en ese orbital, tendremos que usar el número cuántico de espín para definirlos. (3, 2, 2, +1/2) y (3, 2, 2, -1/2)

Dos electrones en un mismo orbital no pueden girar de la misma manera porque ese giro implica la presencia de un campo magnético y de hacerlo en el mismo sentido tenderían a repelerse por ser del mismo signo los dos campos magnéticos.