

ESTRUCTURA ATÓMICA

TEORÍAS ATÓMICAS

Los griegos El concepto de átomo nació con los griegos Leucipo y su discípulo Demócrito (siglo V a IV a.C.) quienes decían que cada cosa puede dividirse hasta un cierto límite, que llamaron átomo (sin división).

Dalton en 1803, desarrolló la primera teoría atómica que explicaba satisfactoriamente las leyes químicas enunciadas hasta ese momento.

Esta teoría puede resumirse en:

a) Todos los elementos están constituidos por átomos, consistentes en partículas materiales separadas e indestructibles.

b) Todos los átomos de un mismo elemento son iguales en masa y en las demás propiedades.

c) Los átomos de elementos distintos son diferentes en masa y en las demás propiedades.

d) Los compuestos se forman por la unión de átomos de los correspondientes elementos en una relación numérica sencilla.

Thomson en 1898, postuló que el átomo está constituido por una esfera de carga eléctrica positiva en la cual están incrustadas partículas de carga eléctrica negativa (electrones) que neutralizan dicha carga.

Esto explicaba el hecho de que cuando se hacía pasar corriente eléctrica con un elevado voltaje en un tubo de descarga, a baja presión, se observaba luminiscencia en el gas contenido. Esto lo provocaban haces eléctricos que iban del cátodo al ánodo, llamados rayos catódicos, de carga eléctrica negativa. A las partículas elementales constituyentes de esos rayos se les llamó electrones (e^-). Posteriormente, Goldstein en 1886, demostró la existencia de rayos positivos, los cuales son diferentes para distintos gases introducidos en los tubos de descarga. A los constituyentes elementales de dichos rayos, cuando se utilizaba hidrógeno, se les llamó protones (p^+).

Rutherford

Para comprobar la veracidad del modelo atómico de Thomson, Lord Rutherford, en 1911, realizó experimentos que consistieron en “bombardear” delgadas láminas metálicas con partículas alfa (α^{+2}). A pesar de que éstas poseen carga eléctrica positiva, por su gran energía no tendrían mayor inconveniente en atravesar la lámina, porque se suponía que la carga eléctrica positiva estaría uniformemente repartida. La mayoría de las partículas atravesaron la lámina en línea recta, pero hubo algunas que se desviaron bastante de su trayectoria e incluso un pequeño porcentaje “rebotó” en la lámina. Esto sólo podía explicarse suponiendo que toda la carga positiva del átomo estuviera concentrada en un núcleo atómico y los electrones estuvieran girando alrededor de él a distancias relativamente grandes.

Bohr

Pero el modelo atómico de Rutherford no era consistente, porque el electrón para vencer la atracción electrostática de núcleo, debería girar a gran velocidad, pero como tiene carga eléctrica emitiría energía radiante, lo cual traería como consecuencia un acercamiento cada vez mayor del electrón al núcleo hasta chocar con él.

Para superar esta dificultad, Niels Bohr propuso en 1913 la siguiente teoría atómica:

a) Cualquiera sea la órbita descrita por el electrón, éste no emite energía radiante.

b) Solamente algunas órbitas son permitidas.

c) Cuando un electrón pasa a una órbita más cercana al núcleo, emite energía radiante y para pasar a una órbita más lejana, debe absorber energía radiante.

Sommerfeld, en 1916 propuso que el electrón no solamente describe órbitas circulares, sino que también elípticas.

Modelo cuántico

La teoría atómica de Bohr-Sommerfeld explica la no-destrucción del átomo y otros fenómenos, pero nuevos hechos trajeron como consecuencia una visión más completa y compleja del átomo, se llega al concepto cuántico del átomo.

Para concluir, se dice que el átomo está constituido por un núcleo de carga eléctrica positiva, conformado por protones (eléctricamente positivos) y neutrones (eléctricamente neutros). Y alrededor de ese núcleo existe una densidad de masa y carga negativa, compuesta por electrones. Podemos decir que cada electrón se mueve en una determinada zona que se denomina orbital y que estudiaremos algo más cuando en el apartado “*Configuración electrónica*”

ESTRUCTURA NUCLEAR

El átomo está constituido por electrones, protones y neutrones. Los electrones están situados en la corteza y los protones y neutrones en el núcleo. Las masas del protón y del neutrón son prácticamente iguales y la del electrón unas 1800 veces mas pequeña, por lo que en principio la consideramos despreciable. Las cargas eléctricas del electrón y del protón son iguales y de signo contrario y el neutrón no tiene carga, por tanto al ser el átomo eléctricamente neutro

significa que tiene el mismo número de e^- y de p^+ . Al número de p^+ (o de e^-) se le denomina "número atómico" (Z) y es característico de cada elemento químico.

Si al número de neutrones lo llamamos N, tenemos que $Z + N$ es el número de partículas del núcleo y a su vez el número de partículas que influyen en la masa del átomo ya que hemos considerado despreciable la masa del electrón. Se denomina entonces como número másico (A) a:

$$A = Z + N.$$

Partícula	Símbolo	Situación	Carga eléctrica	Masa (kg)
Protón	p^+	Núcleo	+1	$1,6725 \cdot 10^{-27}$
Neutrón	e^-	Núcleo	0	$1,6748 \cdot 10^{-27}$
Electrón	0n	Corteza	-1	$0,00091 \cdot 10^{-27}$

Existen para cada elemento químico un determinado número de átomos que tienen igual valor de Z pero distinto de A, es decir, tienen igual número de p^+ (o e^-) pero distinto número de 0n , y dado que las propiedades químicas se deben al número de electrones (esto se verá al estudiar la tabla periódica) resulta que estos átomos son iguales químicamente y solo se diferencian en algunas propiedades físicas. A estos átomos se le denominan "isótopos". Así por ej. el cloro tiene dos isótopos:



El número mayor al lado del símbolo es el número másico y el menor es el número atómico. En negrilla y % es la proporción en la que cada isótopo se encuentra en la naturaleza.

La proporción de cada isótopo que entra en cualquier cantidad del elemento es siempre igual, independientemente de donde procede y como se obtiene, sin embargo cada isótopo puede ser aislado por procesos físicos y obtener así, p. ej. ${}^{35}\text{Cl}$ puro, ${}^{238}\text{U}$ puro.

CONFIGURACION ELECTRÓNICA

El electrón es una partícula elemental, extranuclear, cuya masa en reposo es $9,1 \times 10^{-28}$ g. Posee carga eléctrica negativa de magnitud $-1,6 \times 10^{-19}$ C, igual a la del protón, pero de signo contrario. Por esto el átomo eléctricamente neutro posee el mismo número de protones y electrones.

La Mecánica Cuántica Relativista no describe al electrón como una partícula que gira alrededor del núcleo describiendo una cierta órbita, sino más bien, como una densidad de carga y masa distribuida en una cierta región espacial llamada orbital.

Cada electrón de un átomo tiene asociado 4 números cuánticos que describen su nivel energético y posición. Los orbitales son una consecuencia de la resolución matemática de las ecuaciones físicas que se plantean para el comportamiento de los electrones. El resultado que se obtiene es que los orbitales vienen definidos o determinados por tres números cuánticos:

- Número cuántico principal (n): Indica la energía del orbital, así como las dimensiones del mismo. Puede tomar únicamente valores enteros: $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$

- Número cuántico secundario (l "letra ele") o del momento angular: Determina la región o forma del orbital donde se mueve el electrón, influyendo también en parte en la energía del orbital (subniveles de energía). Puede tomarlos valores enteros comprendidos entre 0 y $n-1$ y a cada valor se le asigna una letra:

$$\text{Si } l=0 \Rightarrow s \quad l=1 \Rightarrow p \quad l=2 \Rightarrow d \quad l=3 \Rightarrow f$$

- Número cuántico magnético (m): Determina la orientación del orbital. Puede tomar los valores enteros comprendidos entre $-l$ y $+l$.

Existe un cuarto número cuántico que no influye en la naturaleza del orbital, sino solo en el electrón. Este número se denomina s y se llama spin, y determina el sentido de giro del electrón sobre si mismo. Puede tomar los valores $+1/2$ y $-1/2$.

Muchas propiedades físicas y todas las químicas de un elemento dependen de su corteza, es decir de su estructura electrónica, por lo cual es de enorme interés conocer ésta.

Veamos en primer lugar cuantos orbitales pueden haber y cuantos electrones pueden ir en cada uno de ellos, para lo cual aplicaremos los números cuánticos y el principio de exclusión de Pauli que dice: "en un átomo no pueden haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales"

n	l	m	nombre orbital	s	n° e ⁻ en el orbital	n° e ⁻ en el nivel
1	0 (s)	0	1s	+1/2, -1/2	2	2
2	0 (s)	0	2s	"	2	8
	1 (p)	-1, 0, 1	2p	"	6	
3	0 (s)	0	3s	"	2	18
	1 (p)	-1, 0, 1	3p	"	6	
	2 (d)	-2, -1, 0, 1, 2	3d	"	10	
4	0 (s)	0	4s	"	2	32
	1 (p)	-1, 0, 1	4p	"	6	
	2 (d)	-2, -1, 0, 1, 2	4d	"	10	
	3 (f)	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f	"	14	

continua

Los electrones de un elemento se irán colocando en orbitales de menor a mayor energía (alejándose del núcleo). El orden de energía viene determinado principalmente por el número n, pero también influye el l, por lo que puede ocurrir que un determinado orbital de un nivel n inferior sea de más energía que uno de un n superior. Para saber el orden de energía y por tanto de relleno de los orbitales se puede aplicar la siguiente regla nemotécnica.

CONFIGURACIONES ELECTRONICAS

Z = 1	Hidrógeno	H:	1s ¹
Z = 2	Helio	He:	1s ²
Z = 3	Litio	Li:	1s ² 2s ¹
Z = 4	Berilio	Be:	1s ² 2s ²
Z = 5	Boro	B:	1s ² 2s ² 2p ¹
Z = 6	Carbono	C:	1s ² 2s ² 2p ²
Z = 7	Nitrógeno	N:	1s ² 2s ² 2p ³
Z = 8	Oxígeno	O:	1s ² 2s ² 2p ⁴
Z = 9	Flúor	F:	1s ² 2s ² 2p ⁵
Z = 10	Neón	Ne:	1s ² 2s ² 2p ⁶
Z = 11	Sodio	Na:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹
Z = 12	Magnesio	Mg:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²
Z = 13	Aluminio	Al:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ¹
Z = 14	Silicio	Si:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²
Z = 15	Fósforo	P:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³
Z = 16	Azufre	S:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴
Z = 17	Cloro	Cl:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵
Z = 18	Argón	Ar:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶
Z = 19	Potasio	K:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹
Z = 20	Calcio	Ca:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ²
Z = 21	Escandio	Sc:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹ 4s ²
Z = 22	Titanio	Ti:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ² 4s ²
Z = 23	Vanadio	V:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ³ 4s ²
.....sigue.....			
Z = 36	Kriptón	Kr:	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶
.....sigue.....			

SISTEMA PERIÓDICO

En 1869 Mendeleiev y Lothar Meyer (de forma simultánea e independiente) aprovecharon los conocimientos y trabajos existentes sobre clasificación de los elementos según sus propiedades, encontrando que si éstos se ordenaban según aumentaba el peso atómico, cada cierto número de elementos se repetían las propiedades químicas y físicas o bien variaban de forma regular y sistemática. Esto les llevó a realizar una clasificación de los elementos en orden creciente de su masa atómica y de tal forma que en columna se correspondieran los elementos de propiedades semejantes. Mendeleiev observó que en su clasificación debía dejar algunos "huecos" vacíos ya que no se conocían elementos que correspondieran a las propiedades de esa posición, posteriormente predijo con gran exactitud la existencia y propiedades de esos elementos que luego fueron descubiertos (algunos de ellos viviendo aún Medeleiev).

En realidad la clasificación actual sigue un orden creciente de Z , es decir del número atómico, que equivale al número de protones del elemento, lo cual está relacionado con el peso o masa atómica ya que ésta aumenta al aumentar Z (salvo raras excepciones debido al porcentaje de los distintos isótopos del elemento).

De los ejemplos realizados de configuración electrónica se puede observar que los elementos que se encuentran en una misma columna o grupo periódico tienen la misma configuración electrónica en su último nivel, de ello se deduce que las propiedades químicas dependen de la configuración electrónica del elemento.

PROPIEDADES PERIÓDICAS

Son las propiedades que se van repitiendo en los elementos de cada grupo del sistema periódico, o que van variando de una forma regular y sistemática.

Antes de comentar algunas de estas propiedades, vamos a ver como determinar la posición de un elemento en la tabla periódica a partir de su configuración electrónica y viceversa.

s^1											s^2							
	s^2											p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6	
		s^2																
		d^1	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}							
a						c								Y				
	X															b		
			Z															
		s^2																
		f^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^8	f^9	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}			

Elemento X \Rightarrow configuración final $5s^2$

Elemento Y \Rightarrow " " $4s^2 4p^3$

Elemento Z \Rightarrow " " $5d^3 6s^2$

Elemento de configuración final $4s^1 \Rightarrow$ situado en período 4º grupo 1º (a)

" " " " " $5s^2 5p^5 \Rightarrow$ situado en período 5º grupo 5º después de transición (b)

" " " " " $3d^5 4s^2 \Rightarrow$ situado en período 4º grupo 5º de transición (c)

Los gases nobles (elementos químicamente inactivos) tienen una configuración final $s^2 p^6$ (salvo el Helio que es $1s^2$), por lo cual hay que suponer que esta configuración da estabilidad y por ello todos los elementos tienden a adquirir dicha configuración ganando electrones para completar la configuración final $s^2 p^6$ o perdiéndolos para quedar con el nivel anterior, ya completo ($s^2 p^6$), como último, o bien compartiendo electrones con otro elemento de forma que ambos

elementos tengan el último nivel completo. Esto es lo que ocurre en la formación de los compuestos como veremos en el tema siguiente, "El enlace químico".

-Electronegatividad: Es la tendencia que tiene un elemento a ganar o llevarse electrones para conseguir la configuración de gas noble. "La electronegatividad aumenta de izquierda a derecha y de abajo a arriba"

-Carácter metálico: Un elemento tiene carácter metálico cuando tiene tendencia a ceder electrones. El carácter metálico aumenta por tanto de forma contraria a la electronegatividad: aumenta de derecha a izquierda y de arriba a abajo.

ENLACE QUÍMICO

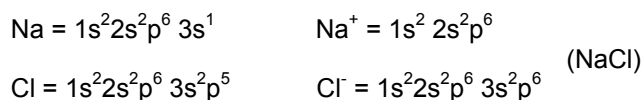
Hemos observado que las propiedades químicas están ligadas con la configuración electrónica (en su último nivel particularmente) y que todos los elementos tienden a conseguir la configuración estable de gas noble s^2p^6 . Para lo cual los elementos ceden o ganan electrones (trasfiriéndose de unos a otros), o bien compartiendo electrones, de forma que el resultado final es que todos adquieren el octeto de electrones s^2p^6 .

Para que ésta transferencia o compartición de electrones tenga lugar es necesario que los átomos se aproximen y se influyan mutuamente sus capas electrónicas, dando lugar así a los enlaces, y en definitiva, a la reacción química, que no es otra cosa que la formación de enlaces o la reordenación de los existentes en las sustancias reaccionantes.

La capacidad que tiene un átomo para combinarse con otros se denomina valencia y se mide por el número de electrones que es capaz de captar (electrovalencia o valencia iónica) o compartir (covalencia) con el fin de obtener una configuración electrónica estable.

ENLACE IÓNICO

Si un átomo de Na se acerca a un átomo de Cl ocurrirá que:



Los átomos que han perdido o ganado electrones se llaman iones, denominándose cationes a los que adquieren carga positiva (ej. Na^+) y aniones a los negativos (ej. Cl^-).

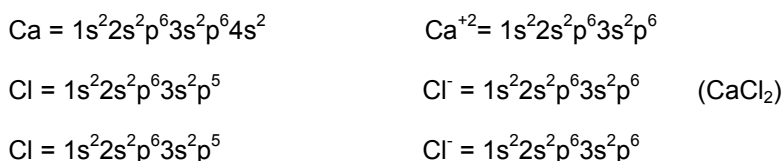
Al formarse los iones de signo contrario aparecerá entre ellos una fuerza de atracción eléctrica que dará origen a la formación del enlace y por tanto del nuevo elemento.

Se define entonces el enlace iónico como: "La unión por fuerzas electrostáticas existentes entre iones de signo contrario, los cuales se han formado por la cesión de electrones de un átomo metálico (electropositivo) a otro no metálico (electronegativo)."

El enlace iónico se produce por tanto entre los elementos más electro- negativos y los más electropositivos.

Debido a que la atracción eléctrica es en todas las direcciones, cada ión tiende a rodearse de iones de signo contrario, dando lugar entonces no a un enlace único entre un Cl^- y un Na^+ , sino a una "red cristalina" formada por iones Cl^- y Na^+ ordenados; ahora bien, como la proporción de iones Cl^- y Na^+ es 1 a 1 tomamos como fórmula NaCl , y para el caso del cloro con el calcio será

CaCl_2 pues la proporción es de 1 a 2 ya que se necesitan dos átomos de cloro para que cada uno capte uno de los dos electrones que debe ceder el calcio, es decir habrán dos iones Cl^- por cada ión Ca^{+2} .

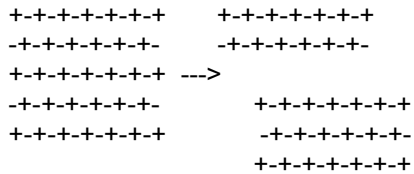


La forma de la red cristalina depende del volumen de los iones que la forman y de la carga de éstos (es decir de la proporción en que entran unos y otros). Para el caso del NaCl resulta una red "cúbica".

-Características principales.

Debido a que las fuerzas eléctricas que mantienen unidos entre sí a los iones son relativamente fuertes, tendremos que comunicar mucho calor (energía) para que los iones adquieran la energía necesaria para vencer las fuerzas de atracción y salir de la red cristalina, lo cual equivale a fundir el cristal. Por tanto tendrán temperaturas de fusión altas.

Igualmente son cuerpos duros, debido a que para rayarlos hay que vencer la fuerza que une una enorme cantidad de iones, pero sin embargo son frágiles pues por un golpe se puede hacer desplazar una capa de iones sobre otra enfrentándose así iones de igual signo que al repelerse romperán la red cristalina en esa zona.

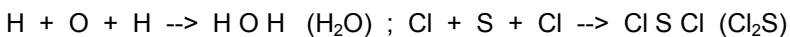
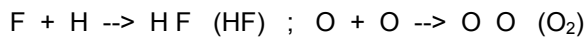


En estado sólido no conducen la corriente eléctrica ya que no hay iones (cargas) libres, sino que éstos están fijos (unidos en la red), sin embargo, fundidos o disueltos si conducen la electricidad ya que entonces si hay iones libres.

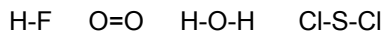
Son solubles en agua, debido a que los polos de ésta (se verá al estudiar el enlace covalente polar) atraen a los iones de la red cristalina separándolos de ella.

ENLACE COVALENTE

Es el enlace que se forma cuando los átomos se unen compartiendo pares de electrones, consiguiendo la estructura así la estructura de gas noble.



Cada par de electrones compartido se suele representar por un guión "-", así las moléculas anteriores se pueden representar por:



Se denomina "covalencia" de un átomo al número de pares de electrones que ese átomo comparte con otros. Cada par de electrones compartido se denomina doblete electrónico.

El enlace covalente se puede interpretar como una superposición parcial (solapamiento) de los orbitales atómicos, dando lugar a la formación de un nuevo orbital denominado "orbital molecular" que contiene a los electrones del último nivel de uno y otro elemento.

- Características principales.

Las fuerzas de unión entre los átomos de un enlace covalente son mas fuertes que las que unen a los iones del enlace iónico, por tanto el enlace covalente da lugar a compuestos mas estables, sin embargo, las fuerzas que atraen a las moléculas de las sustancias covalentes son mucho mas débiles que las fuerzas electrostáticas de la red iónica, por ello las moléculas covalentes pueden existir como unidades individuales (gases) o ligeramente unidas (líquidos o sólidos de baja temperatura de fusión).

Al no existir cargas eléctricas no son conductores de la electricidad.

- Enlace covalente polar.

Cuando el enlace covalente se forma entre elementos de distinta electronegatividad, la distribución de los electrones que forman el enlace no es simétrica, tendiendo a estar mas cerca del átomo más electronegativo, lo que origina un "dipolo", es decir, una zona con cierta carga positiva y otra con cierta carga negativa. El grado de polaridad depende de la distinta electronegatividad de los átomos que forman el enlace.

Se puede considerar al enlace iónico como el caso extremo del enlace covalente polar.

Las moléculas covalentes polares tienen una mayor atracción entre sí, debido a la existencia de los dipolos, por lo tanto sus temperaturas de fusión y ebullición son mas altas generalmente que las de las sustancias no polares.