

incertidumbre tan grande que es imposible establecer la posición del electrón de un átomo en un momento determinado.

1-7 NIELS BOHR Y SU TEORÍA ATÓMICA.

Niels Bohr describió el átomo como constituido por un núcleo central pequeño y cargado positivamente con los electrones moviéndose alrededor del núcleo en orbitas circulares, definidas, de acuerdo con este modelo, el átomo de hidrógeno consistiría en un núcleo con una carga $1+$ (el hidrógeno tiene número atómico 1). Alrededor del cual un electrón recorre una trayectoria circular. La trayectoria que describe el electrón es circular (o elíptica) y siempre está a una distancia fija del núcleo. Debido a su movimiento, y posición, el electrón posee energía. La distancia ente el electrón y el núcleo depende de la energía del electrón, sin embargo Bohr, supuso en su teoría que el electrón solo podía encontrarse a distancias específicas del núcleo, en orbitas específicas; en otras palabras supuso que la energía del electrón estaba *cuantizada* en el sentido que solo podía tomar ciertas posiciones o valores permitidos. La idea de la energía cuantizada es nueva para nosotros. Para concebir más claramente esta idea, supongamos que un alumno sube por una escalera, y solo puede tomar posiciones "cuantizadas" conforme sube (Ver figura 1-4) de tal manera que no puede permanecer en cualquier posición entre los peldaños de la escalera. Suponiendo que todos los peldaños tengan igual distancia entre sí, conforme sube la escalera su energía (energía potencial con respecto al piso) tiene cierto valor (primer peldaño) y aumenta en algún múltiplo entero de ese valor (2do peldaño, 3er peldaño, etc.)

En el átomo de hidrógeno según el *Modelo de Bohr* tendrá un electrón localizado en una orbita que depende de la energía del electrón. Las posiciones cuantizadas posibles del electrón se llaman *Estados de Energía* o *Niveles de Energía* del electrón (ver figura 1-5) en los átomos normales de hidrógeno, los electrones toman el nivel más bajo de energía cuantizada permisible. Los átomos en los cuales los electrones se encuentran en los estados de energía más bajos posi-

Fig. 1-4 La persona que está en la escalera sólo adquirirá energías potenciales específicas, dependiendo del peldaño en que se encuentre. Debido a que sólo puede ocupar ciertos niveles de energía, su energía está "cuantizada"



Modelo de Bohr del átomo de hidrógeno. Un electrón está en órbita circular alrededor del núcleo positivo.

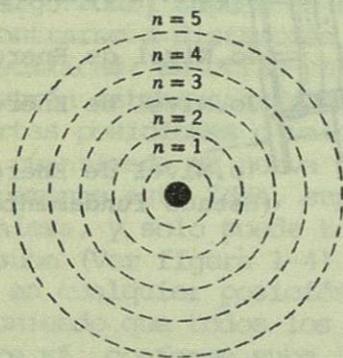
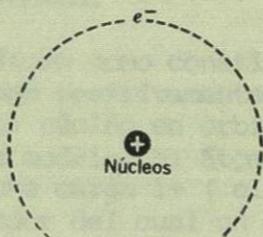


Fig. 1.5

Los niveles de energía en el átomo de Bohr están indicados como valores posibles de n . En la figura se muestran cinco niveles de energía. Un electrón puede efectuar un salto cuántico de un nivel de menor energía hacia cualquier otro superior. Un electrón excitado puede caer de un nivel más alto hacia otro más bajo. Los saltos cuánticos posibles relacionados con los cinco primeros niveles de energía están indicados mediante flechas.

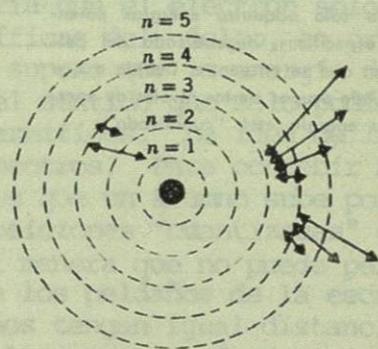


Fig. 1.6

bles reciben el nombre de *átomos en el estado fundamental*, - utilizando el modelo del átomo de Bohr, podríamos describir que sucede cuando el electrón de un átomo de hidrógeno en el estado fundamental recibe energía de una fuente externa. Si el electrón llegara a obtener determinada cantidad de energía, puede saltar del nivel mas bajo de energía hacia otro nivel de energía superior. A este paso se le denomina *salto cuántico* (ver figura 1-6). Cuando un electrón salta a un nivel de energía superior se dice que se excita, y a un átomo con tales electrones se le llama *átomo excitado*. Cuando un átomo recibe demasiada energía, los electrones se excitan mucho e incluso puede llegar a que un electrón o varios se desprendan del átomo dejando así al átomo con carga positiva - (iones) de donde deducimos que los iones positivos se pueden formar por la pérdida de electrones de un átomo determinado. Una característica de los átomos excitados es que son inestables o sea, puede el electrón regresar a su estado original, o hacia los niveles de energía más bajos y por último a su estado fundamental. A medida que el electrón cae hacia los estados de energía más bajos, desprende el exceso de energía que poseía. Esto es parecido a lo que sucede cuando el alumno baja la escalera hasta el piso (estado fundamental). Liberando así la energía potencial que almacenó en forma de energía cinética (energía de movimiento). Esta energía que es liberada por los electrones al caer hacia los estados de energía mas bajos en los átomos, por lo general se manifiesta en forma de energía radiante o de luz.

Hasta ahora se ha visto el átomo de hidrógeno bajo el concepto del modelo de Bohr. Es verdad que el modelo del átomo de Bohr nos da una imagen del átomo de hidrógeno. ¿Será igual esto para con aquellos átomos que poseen más de un electrón? Imaginémonos un átomo con más de un electrón como un núcleo con los electrones distribuidos en varias orbitas (ver figura 1-6). Pero nos encontramos con un problema, el de que todos los electrones no pueden ocupar una misma orbita. Tan solo cierto número de electrones pueden ocupar una orbita dada, por lo que los electrones tomarán valores diferentes de energía, dependiendo de la orbita que ocupen. La teoría de Bohr sobre el átomo no proporcionó satisfactoriamente un buen modelo para los átomos que tuvieran más de un electrón. Es por eso que surgió la necesidad de desarrollar otra

teoría sobre la estructura del átomo.

1-8 ECUACIÓN DE ONDA DE SCHRODINGER.

Después de las ideas de Bohr y de De Broglie, Erwin Schrodinger, buscó y encontró un modelo en el que ambas se pudieran aunar. Schrodinger dedujo una ecuación matemática en donde el electrón era tratado en función del comportamiento ondulatorio, se obtuvieron soluciones de la "ecuación de onda" solo para determinados valores del término energía del electrón, usados en la ecuación. La ecuación de onda de Schrodinger admitió sólo ciertos niveles de energía, de acuerdo con el concepto de estados estacionarios de energía.

Cuando la ecuación de onda se resolvió para el átomo de hidrógeno con un electrón, los estados de energía calculados concordaron extraordinariamente bien con los niveles de energía espectral observados. El entusiasmo de los científicos fue enorme al enterarse de que podían ser calculados los niveles de energía de los átomos a partir de las ecuaciones de ondas.

El uso de la ecuación de onda como modelo atómico no sólo conduce a valores para los estados estacionarios de energía electrónica, sino que también proporciona datos con respecto a la posición en el espacio de electrones en esos estados. Sin embargo, este modelo mecánico cuántico no describe con exactitud la posición del electrón, como lo hace el modelo de Bohr. Pero en cambio, nos da una descripción que está de acuerdo con el principio de incertidumbre. No es posible decir exactamente donde está el electrón de un átomo en un tiempo dado; pero la ecuación de onda puede determinar la probabilidad de encontrar un electrón en cierto punto para un tiempo dado.

Suponga que tiene a su perro favorito en el jardín de su casa, habrá lugares que le gusten más al perro: en las tardes calurosas, será la perrera o la sombra de un árbol. Si se le preguntara a la 1:00 P.M. del 15 de julio, donde está su perro, seguramente respondería "en el jardín", pero

si se le pidiera que fuera más específico con respecto al lugar, contestaría que probablemente bajo el árbol o en su perrera. Quizá lo ha observado bastante (ha efectuado suficientes experimentos) para decir que las probabilidades de encontrarlo bajo del árbol son de 4 en 10 (probabilidad de 40%); en su perrera, de 5 en 10 (probabilidad de 50%); y, en cualquier otro lugar, solo en 1 en 10 (probabilidad de 10%).

En forma análoga, las soluciones de la ecuación de onda predicen las probabilidades de que el electrón este a determinadas distancias del núcleo en un momento dado, en la figura 1-7 se muestra una gráfica de la probable distribución radial del electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno. El máximo de curva ocurre a la misma distancia del núcleo que Bohr había predicho para el radio del estado basal. Sin embargo, la teoría de Bohr coloca al electrón en su estado fundamental siempre a esa distancia. El modelo del átomo según la teoría mecánica cuántica, conduce a esto sólo como la distancia más probable. El modelo matemático indica que tanto la distancia más corta como la más grande, también tiene alguna probabilidad.

1-9 COMPORTAMIENTO DEL ELECTRÓN Y NÚMEROS CUÁNTICOS.

Para solucionar la ecuación de Schrodinger se necesitan un conjunto de cuatro números simbolizados por las letras n , l , m , y s . Se llaman números cuánticos y tienen valores que dependen unos de otros. De hecho, estos números cuánticos designan los diferentes niveles de energía de los electrones, sus formas orbitales, sus características magnéticas y la dirección de su giro; estas notaciones cuánticas son como sigue:

1. El número cuántico principal (n) es un entero positivo, 1, 2, 3, 4... que representa el nivel energético principal del electrón. Estas notaciones son sinónimas de las denominaciones de las capas electrónicas K, L, M, N... y se usan indiferentemente. De ordinario estos números indican el radio relativo de la máxima densidad de carga de la nube electrónica de un nivel energético dado.

2. El número cuántico azimutal (l) determina la forma de la nube electrónica. Los valores numéricos que puede tener l están relacionados con n según: l puede tener valores enteros desde 0 hasta $n-1$, inclusive cuando $l=1$, puede tener sólo el valor de 0, esto es hay solamente una forma permitida para la forma electrónica. Cuando $n=2$, l tiene dos valores, 0 y 1; cuando $n=3$, l tiene tres valores 0, 1 y 2, etc.

Cada valor de l tiene asociada una forma particular de nube electrónica. Para $l=0$, cualquiera que sea el nivel energético principal, la nube electrónica es esférica. Para $l=1$ la nube electrónica tiene forma de mancuerna, con una esfera distorsionada de cada lado del núcleo y para $l=2$ la forma se aproxima a cuatro peras con sus rabillos hacia el núcleo. La notación común para los valores del número cuántico azimutal $l=0, 1, 2, 3$ y 4 es s, p, d, f y g respectivamente.

Dos realciones adicionales respecto al número cuántico l asumen especial importancia. Le puede calcular el momento angular de un electrón a partir de valor de utilizado en la ecuación de Schrodinger, con el valor más bajo, $l=0$.

Un aumento en l conduce a un aumento en momento angular. Esto significa que aunque un electrón s recorre en su movimiento alrededor del núcleo un volumen esférico en el espacio se esta moviendo más cerca de la línea recta que un electrón p a su vez un electrón p tiene menos curvatura en su trayectoria que un electrón d etc.

Si esto es cierto, un electrón s debe emplear más tiempo cerca del núcleo que un electrón p en átomos con muchos electrones que seran discutidos mas tarde. Se deben tomar en cuenta las repulsiones entre los electrones así como las atracciones entre el núcleo y los electrones de este modo, encontraremos que para dos electrones en el mismo nivel energético principal, la diferencia en l conducen a diferencia de energías a causa de las trayectorias que siguen los electrones. Por esta razón, los diferentes valores de l especifican subniveles de energía dentro de cada nivel energético principal con un aumento progresivo de energía para los subniveles s, p, d, f, etc.

3. El tercer número cuántico, llamado número cuántico magnético (m) también tiene valores enteros, en este caso limitados por el valor de l . Cuando $l=0$, m tiene como único valor permitido 0; cuando $l=1$ m tiene tres valores permitidos $-1, 0 +1$. En general m puede tener valores enteros desde $-l$ hasta $+l$. Los valores de m especifican las orientaciones en el espacio, permitidas para una nube electrónica. Claramente el número de orientaciones permitidas esta relacionadas directamente por la forma de la nube indicada por l . Cuando $l=0$ (subnivel s) hay una sola orientación ya que es una distribución esférica. Cuando $l=1$ (subnivel p) hay tres orientaciones permitidas, estas orientaciones son tales que los ejes principales de las nubes electrónicas estan a 90° entre sí para $l=2$ (subnivel d) hay cinco orientaciones permitidas que corresponden a los cinco valores permitidos para $m, m=2, -1, 0 +1, +2$.

4. El cuarto número cuántico llamado el número cuántico de espín (s), no resulta de la ecuación de Schrodinger, sino que se origina a partir de otras consideraciones. Tiene solo dos valores permitidos para cada valor de $m + 1/2$ y $- 1/2$.

Esta notación indica que un electrón en un orbital dado tiene dos orientaciones permitidas del espín, opuestas entre sí.

Una segunda regla que viene a reforzar las estructuras atómicas es el *principio de exclusión de Pauli*, que establece que no es posible la existencia de dos electrones en el mismo átomo que tengan sus cuatro números cuánticos iguales. Si un electrón tiene los valores cuánticos $n=2, \ell=1, m=0, s=+1/2$, en un segundo electrón puede tener $n=2, \ell=1, m=0, s=-1/2$, puesto que se pueden emplear las dos posibilidades de los valores de s no cabrá un tercer electrón que tenga $n=2, \ell=1, m=0$; ya que una combinación de n, ℓ y m forma un orbital, cada orbital tiene a lo menos dos electrones ($s=+1/2, s=-1/2$).

Tabla 1.1 Resumen de tipos y números de orbitales según quedan determinados por los números cuánticos n, ℓ y m .

$n \ell$	m	Tipo de Orbital (de n y ℓ)	Número de Orbitales (según los diversos valores de m)
1 0	0	1s	1
2 0	0	2s	1
2 1	-1, 0, +1	2p	3
3 0	0	3s	1
3 1	-1, 0, +1	3p	3
3 2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5
4 0	0	4s	1
4 1	-1, 0, +1	4p	3
4 2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5
4 3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7

NIVELES ENERGÉTICOS Y CONFIGURACIÓN
ELECTRÓNICA.

No siempre es tan práctico como interesante seguir el desarrollo histórico de la química. Por el hecho de que se han llevado a cabo muchos estudios simultáneamente, resulta con frecuencia encontrar a la química como a otras ciencias, muy complicada y confusa.

Sin embargo, si recordamos el átomo de Dalton que supuestamente era simple e indestructible y lo vemos ahora, después de muchos años de investigación, concluimos en que no tiene nada de simple, sino todo lo contrario, es muy complejo; tiene muchas partes elementales. En efecto, se han descubierto o postulado unas 30 partículas subatómicas, de las cuales las tres más importantes son el protón, el neutrón y el electrón.

En el comportamiento químico de los elementos depende según ganen, pierdan y compartan electrones en la formación de un enlace químico. Por lo tanto, las propiedades químicas de los elementos depende de las estructuras electrónicas que tengan propiedades químicas semejantes.

En esta unidad estudiarás el electrón y sus orbitales donde al final de ella deberás ser capaz de:

OBJETIVOS.

- 1.- Describir la estructura atómica que Bohr formuló.
- 2.- Explicar qué son los espectros de emisión, cuántos tipos de ellos existen, y con qué fin se utilizan.