

## ESTRUCTURA DEL ÁTOMO

### MODELO MECANOCUÁNTICO DEL ÁTOMO. ORBITALES ATÓMICOS

#### ESTUDIA / APRENDE

- El postulado de la **dualidad onda-partícula** de De Broglie.
- El **Principio de Incertidumbre** de Heisenberg.
- Qué es la **función de ondas** de Schrödinger.
- El concepto de **orbital** y su importancia.
- Las ideas de Bohr que desaparecen con la aparición del concepto de orbital.
- Los conceptos de **nivel y subnivel de energía** y las formas de representarlos.
- Las formas y posiciones espaciales de los orbitales “s” y “p”.
- Las diferencias que hay entre orbitales de electrones que poseen diferente energía.
- Qué es el **spin de un electrón** y qué diferencia hay entre dos electrones que se encuentran en el mismo orbital.
- Los conceptos de **spines opuestos** y **spines paralelos**.

Aunque la observación que había hecho Bohr acerca de los diferentes valores de energía permitidos para los electrones dentro de un átomo era totalmente acertada y por lo tanto se mantiene, experimentos posteriores con los espectros de emisión y de absorción permitieron determinar que estos valores energéticos posibles eran mucho más complejos que los que dedujo Bohr. Se dedujo de estos experimentos basados en la nueva teoría de la mecánica cuántica que los electrones no se movían por órbitas circulares y elípticas, sino por unas zonas con un tamaño y unas formas determinadas a las que se llamó **orbitales**.

**Se llegó a descubrir que el tamaño o volumen de los orbitales y la forma de éstos dependía de la energía del electrón que por ellos se mueve.**

Pero para llegar a todo esto los pasos que se siguieron transcurrieron así:

Experimentos posteriores al establecimiento del modelo atómico de Bohr detectaron que el electrón no sólo se comportaba como una partícula material cualquiera sino que además tenía también el comportamiento de una onda. Esto dio origen al **POSTULADO DE LA DUALIDAD ONDA CORPÚSCULO** de De Broglie:

**“Toda partícula material en movimiento tiene un comportamiento ondulatorio, de forma que las propiedades ondulatorias y corpusculares de la materia se relacionan mediante la fórmula  $\lambda = h/mv$ , donde  $\lambda$  es la longitud de onda,  $h$  es la constante de Planck,  $m$  la masa de la partícula y  $v$  la velocidad.”**

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

Además este postulado llevó a Heisenberg a formular su **PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE** según el cuál:

**“No es posible, en principio, conocer, simultáneamente y con toda precisión, la velocidad y posición de un electrón, y, por tanto, determinar la trayectoria exacta del electrón”.**

Según este postulado si  $\Delta x$  y  $\Delta p$  son respectivamente las mayores precisiones con que se pueden determinar en un instante dado la posición y el momento lineal (o cantidad de movimiento) de la partícula, entonces:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h,$$

siendo  $h$  la constante de Planck.

Esta fórmula nos está indicando, por tanto, la incertidumbre que tenemos al querer determinar en un instante dado la velocidad y la posición de cualquier partícula que nosotros consideremos.

Para la realización de problemas aplicando el principio de incertidumbre de Heisenberg, tenemos que recordar que la cantidad de movimiento  $p$ , es igual al producto de la masa por la velocidad:

$$p = m \cdot v \Rightarrow \Delta p = m \cdot \Delta v$$

En el siguiente “**ejercicio resuelto**” puedes observar cómo a cualquier tipo de cuerpo o partícula se le puede aplicar el principio de incertidumbre de Heisenberg. En los casos de grandes masas la incertidumbre calculada es tan insignificante que se puede despreciar, con lo que para dichas masas es válido seguirlas estudiando mediante el modelo de la Física clásica. Sin embargo para partículas submicroscópicas esa incertidumbre en la medida de su posición tiene un valor muy elevado, por lo que estudiarlas aplicando los patrones de la Física Clásica conllevaría errores altísimos y, por tanto, en su estudio hay que aplicar la teoría cuántica.

## EJERCICIO RESUELTO

Halla la incertidumbre en la medida de la velocidad de:

a) Una bola de masa de 10 kg en movimiento, si la incertidumbre de la medida de su posición es de 0,1mm.

b) Un electrón de masa  $9,11 \cdot 10^{-31}$  kg, si la incertidumbre de la medida de su posición es del orden de su diámetro ( $10^{-15}$  m).

Dato: Constante de Planck reducida  $h = 1,05 \cdot 10^{-31}$  J·s.

$$\begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p &\geq h \\ \text{En ambos casos:} \quad \Delta v &\geq \frac{h}{m \cdot \Delta x} \end{aligned}$$

Luego:

$$\text{a) } \Delta v \geq \frac{1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{10 \text{ kg} \cdot 0,1 \cdot 10^{-3} \text{ m}} = 1,05 \cdot 10^{-31} \text{ m/s}$$

La incertidumbre es de  $1,05 \cdot 10^{-31}$  m/s lo que significa que es indetectable y en su tratamiento es válido el modelo de la Física clásica.

$$\text{b) } \Delta v \geq \frac{1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 10^{-15} \text{ m}} = 1,15 \cdot 10^{11} \text{ m/s}$$

La incertidumbre es de  $1,15 \cdot 10^{11}$  m/s que es un valor muy elevado por lo que no se pueden aplicar los patrones de la Física clásica y hay que aplicar la teoría cuántica moderna.

---

Hemos de conformarnos, por tanto, con conocer una zona determinada para cada electrón en la que la probabilidad de encontrarlo sea máxima. **Por consiguiente LA IDEA DE LAS ÓRBITAS DE BOHR NO PUEDE SER VÁLIDA** puesto que en una órbita conocemos en todo momento la posición del electrón y la trayectoria del mismo. Es decir, como consecuencia de las relaciones de incertidumbre, se deduce la imposibilidad de conocer con exactitud las órbitas recorridas por los electrones del átomo. No obstante, existe la posibilidad de determinar, mediante procedimientos matemáticos, las regiones en que existe probabilidad de encontrar un electrón. A estas zonas de alta probabilidad las conocemos con el nombre de *orbitales*.

Se hacía necesario un nuevo modelo atómico que explicara estos últimos experimentos. Este nuevo modelo atómico, que es con el que se trabaja actualmente, se le conoce como **MODELO ATÓMICO MECANO-CUÁNTICO**. En él aparece un nuevo concepto, el de **ORBITAL**.

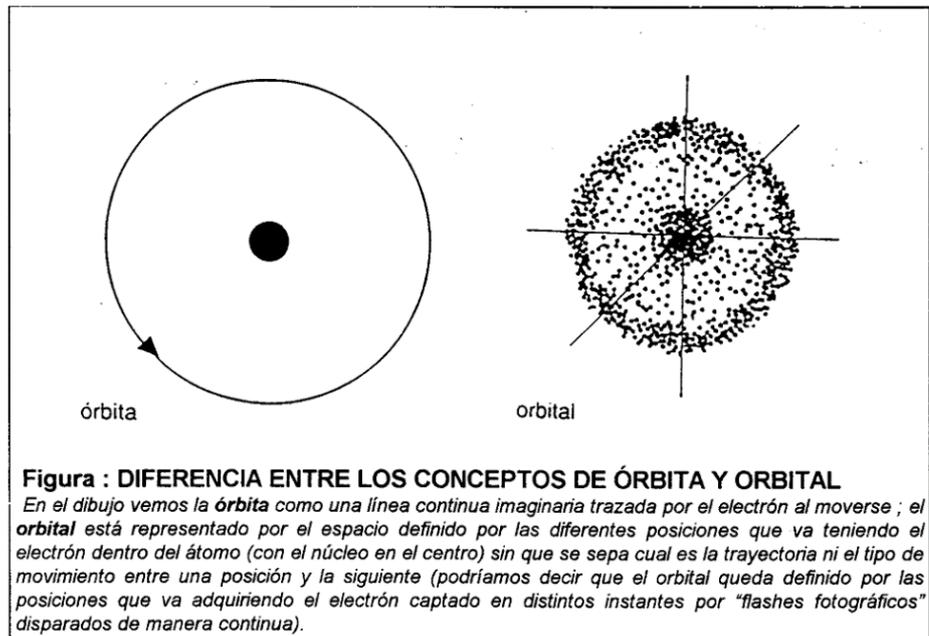
Los orbitales se definen como las regiones del espacio, caracterizadas por una determinada energía, donde la probabilidad matemática de encontrar un electrón con una determinada energía es superior al 99 %.

Este modelo de “probabilidad matemática” se debe a Schrödinger, pues estos orbitales son la representación gráfica de las soluciones de **LA ECUACIÓN DE ONDA DE SCHRÖDINGER** (los electrones además de partícula se comportan como ondas).

Schrödinger dedujo su ecuación de onda al reflexionar sobre el principio dualidad onda partícula de De Broglie. Se planteó que si hay una onda «asociada» a cada partícula material, parece que debiera haber una ecuación de ondas que rijan su evolución. Y efectivamente encontró dicha ecuación ( $\psi$ ). Pero es una ecuación no real, sino compleja. El cuadrado de la función de onda,  $\Psi^2$ , representa la probabilidad de encontrar al electrón en una región determinada, es decir, el “orbital”: región del espacio en la que hay una máxima probabilidad de encontrar al electrón.

**ORBITAL: ZONA O ESPACIO DONDE LA PROBABILIDAD DE ENCONTRAR A UN DETERMINADO ELECTRÓN DENTRO DE UN ÁTOMO ES SUPERIOR AL 99%, Y CUYO TAMAÑO Y FORMA DEPENDE DE LA ENERGÍA QUE POSEA DICHO ELECTRÓN.**

*En la figura, cuando vemos la representación del orbital (a la derecha) cada punto representa al mismo electrón en diferentes instantes; es el propio electrón, por tanto, quien, debido a la energía que posee, delimita una determinada zona: su orbital.*



Con ello aparece un nuevo modelo atómico. Se mantiene la idea de RUTHERFORD y BOHR de la existencia de un núcleo central con los protones y los neutrones, pero se modifica la idea de cómo es la disposición de los electrones en la corteza. Desaparece, por tanto, el concepto de ÓRBITA dado por Bohr y aparece el concepto de ORBITAL, pero, y esto es importantísimo, se mantienen las ideas de que los electrones sólo pueden moverse dentro de cada átomo con unos valores de energía permitidos y sólo con esos valores y que los electrones tendrán siempre el valor de energía más bajo que le permita el átomo dentro del cual se mueven. Por eso la mayor aportación de este modelo radica en el estudio del movimiento de los electrones dentro de un átomo atendiendo a la energía que posee cada electrón.

**Todos los orbitales que existen dentro de un átomo tienen su centro en el núcleo de dicho átomo. Esto indica, como veremos en algunos ejemplos más adelante, que existen muchas zonas de intersección de unos orbitales con otros, y que incluso unos orbitales están dentro de otros. Por tanto habrá electrones con diferente energía que tengan algunos lugares comunes de movimiento dentro del átomo, pero de ellos, los que tienen mayor energía podrán llegar hasta lugares más lejanos al núcleo (todo lo que le permita su zona u orbital) que los que posean menos energía.**

En cada orbital no puede haber más de 2 electrones, los cuales poseerán pues la misma energía.

A los valores de energía permitidos para los electrones dentro de un átomo se les llama también **SUBNIVELES DE ENERGÍA.**

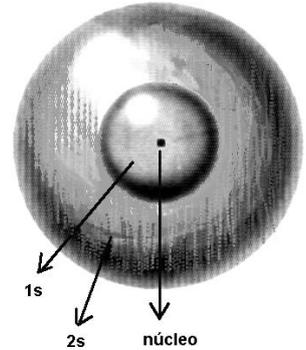
A estos subniveles se les nombra por un **NÚMERO** y una **LETRA**.

El **NÚMERO** indica el volumen o tamaño del orbital por el que se mueve el electrón (al nº también se le llama NIVEL). Es siempre un valor entero del 1 en adelante. Cuanto mayor sea el número mayor es el tamaño del orbital. Este valor coincide con el número cuántico establecido por Bohr y se le llama **número cuántico principal (n)**.

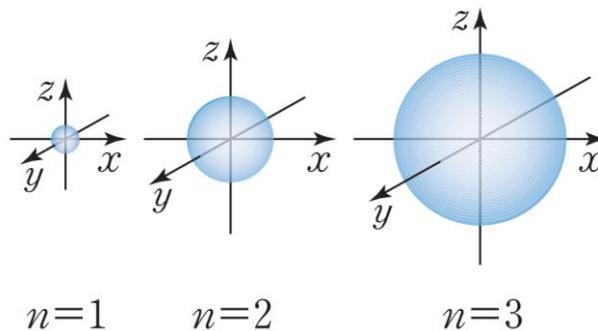
La **LETRA** indica la forma que tiene el orbital por donde se mueve el electrón que tiene esa energía. Las letras pueden ser cuatro: s, p, d, f.

- Cuando la letra que va a continuación del número es una "s" significa que los electrones se mueven por un orbital de forma esférica cuyo centro está en el núcleo.

*Así, si decimos que un electrón tiene el subnivel de energía 1s y que otro tiene el 2s significa que los dos se mueven por orbitales esféricos, pero que la esfera del 2s es mayor que la del 1s (figura de la derecha). Como ambas esferas tienen el mismo centro (son concéntricas) la del 1s está dentro de la del 2s, lo que significa que todos los puntos por los que se mueve el electrón del 1s pueden ser ocupados por los del 2s, pero éste puede moverse también por lugares más alejados (observar la figura). Lo mismo ocurriría para el 3s, 4s...*



*En la imagen que tienes a continuación puedes observar por separado los orbitales 1s, 2s y 3s. A medida que aumenta la energía aumenta el volumen del orbital. Cada uno de ellos lleva asociado un número cuántico n)*

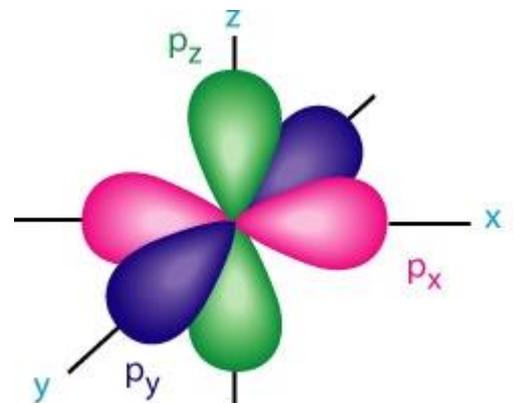


- Cuando la letra que va a continuación del número es una "p" significa que los electrones se mueven dentro de un orbital de forma de reloj de arena. El centro del reloj de arena es el núcleo. Para cada nivel o número (a partir del 2) hay tres orbitales "p" exactamente iguales en tamaño (mismo número) y forma (misma letra) pero situados de manera diferente, formando ángulos rectos entre ellos siguiendo la dirección marcada por los tres ejes cartesianos.

**Observa detenidamente la figura:**

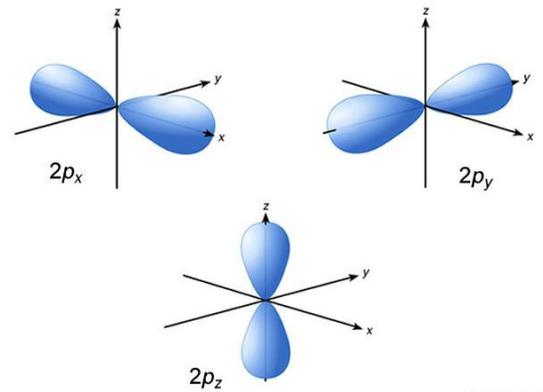
*En ella puedes observar tres "relojes de arena" dispuestos según los ejes cartesianos X, Y y Z. Los tres son iguales, luego los electrones que por ellos se muevan tienen la misma energía. Como en cada orbital puede haber dos electrones y aquí observamos la existencia de tres orbitales, puede haber hasta 6 electrones con la energía 2p, otros tantos con la 3p (el tamaño será mayor pero la forma es exactamente la misma), igual con la 4p y así sucesivamente.*

*En el centro de la figura se encuentra el núcleo del átomo.*



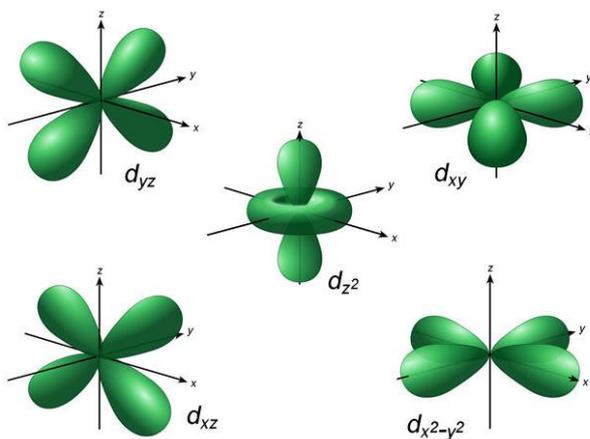
Luego pueden existir orbitales con la misma energía. Se diferencian entre ellos únicamente en la orientación en el espacio

*Si dibujamos una figura con los tres orbitales separados para poderlos ver con más claridad nos quedarían:*

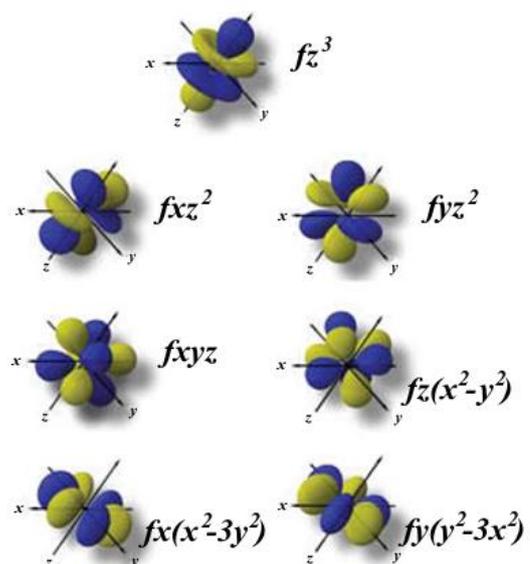


- Cuando la letra que va a continuación del número es una "d" o una "f" las formas de los orbitales de los electrones con esos valores son complejas. En cada subnivel d existen 5 orbitales con lo que puede haber 10 electrones por subnivel. Este subnivel comienza a partir del nivel o tamaño 3. En cada subnivel f existen 7 orbitales con lo que puede haber 14 electrones por subnivel. Este subnivel comienza a partir del nivel o tamaño 4.

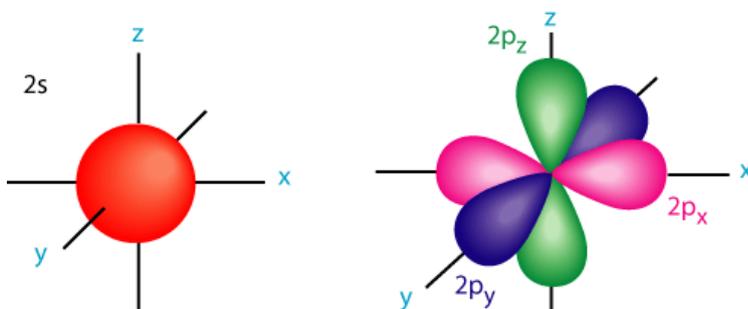
### ORBITALES d



### ORBITALES f



Recuerda: Las diferencias entre orbitales de electrones con diferente energía son su VOLUMEN y su FORMA.



Forma de los orbitales s y p.

Fíjate en los orbitales 2s y 2p dibujados por separado en la figura. El volumen del orbital 2s y el de cualquiera de los 2p es similar, sin embargo las formas son diferentes (el s tiene forma esférica y los p forma de reloj de arena). Tienen más energía los electrones que se mueven en cualquiera de los orbitales 2p que los que se mueven en el orbital 2s.

Teniendo en cuenta lo que hemos estudiado cabría hacerse la siguiente pregunta: ¿Cuántos electrones que se muevan con la misma energía puede haber en un átomo?

Tendríamos que contestar así: depende de la letra con que se le llame al subnivel de energía correspondiente:

- en los subniveles llamados “s” (sea cual sea el tamaño o nivel) sólo puede haber **2 electrones** (en un orbital);
- en los “p” puede haber **6 electrones** (distribuidos en **tres orbitales**: ¡2 electrones máximo en cada orbital!);
- en los “d” puede haber hasta **10 electrones** que se muevan con esa energía (distribuidos en **cinco orbitales**);
- y en los “f” puede haber un máximo de **14 electrones** (distribuidos en **siete orbitales**).

### Los electrones tendrán los valores de energía más bajos que les sea posible

En resumen los tipos de orbitales según su forma pueden ser:

**Orbitales “s”**: siempre hay uno en cada nivel.

**Orbitales “p”**: siempre hay tres en cada nivel a partir del segundo nivel.

**Orbitales “d”**: siempre hay cinco en cada nivel a partir del tercer nivel.

**Orbitales “f”**: siete en cada nivel a partir del cuarto.

Al igual que a cada nivel energético le hemos asociado un número cuántico “n”, **a cada subnivel o letra se le asignó un segundo número cuántico “ℓ”**: al subnivel “s” se le asigna  $\ell=0$ ; al “p”,  $\ell=1$ ; al “d”,  $\ell=2$  y al “f”,  $\ell=3$ .

Cuando dos electrones se encuentran en el mismo orbital decimos que están **apareados**. Pero aunque ambos tienen la misma energía, hay una diferencia entre los dos: se supone que cada electrón, además de estar moviéndose de forma continua según establece su ecuación de onda, tiene también **un movimiento de rotación sobre sí mismo**, lo que llamamos **spin**. Pues bien, cuando dos electrones se encuentran en el mismo orbital, lo que los diferencia es precisamente ese giro o rotación sobre sí mismo. Lo harán en sentido contrario uno del otro. Decimos que tienen **“spines opuestos”**. Por otra parte, cuando dos electrones que se encuentran en diferentes orbitales tienen el mismo sentido de giro decimos que son electrones con **“spines paralelos”**.



### ACTIVIDAD RESUELTA:

Indica cuál o cuáles de las afirmaciones siguientes son aceptables:

Un orbital atómico es:

- a) Una zona del espacio en la que se encuentran dos electrones.
- b) Una zona del espacio en la que se encuentra un electrón.
- c) Una función matemática que es solución de la ecuación de Schrödinger para cualquier átomo.
- d) Una función matemática que es solución de la ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides.
- e) El cuadrado de una función de onda de un electrón que expresa una probabilidad de presencia.

a) No aceptable. Falta decir que la probabilidad de encontrar un electrón debe ser muy elevada y que si hay dos, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli deben tener los espines opuestos.

b) No aceptable. Falta decir que la probabilidad de encontrar un electrón debe ser muy elevada.

c-d) No aceptable. La ecuación de Schrödinger describe el movimiento de los electrones considerados como ondas y no como partículas.

e) Aceptable. El cuadrado de la función de onda,  $\Psi^2$ , representa la probabilidad de encontrar al electrón en una región determinada, es decir, el “orbital”: región del espacio en la que hay una máxima probabilidad de encontrar al electrón.

## CONTESTA Y REPASA

- ¿Cuál es la diferencia entre órbita y orbital?
- ¿A qué llamamos en un átomo subnivel de Energía? Nombra por orden energético los subniveles energéticos que existan. ¿Para qué utilizamos el concepto de nivel de energía?
- ¿Pueden existir orbitales con la misma energía? ¿En qué se diferencian? Pon algún ejemplo.
- ¿El modelo de Bohr y el principio de incertidumbre son incompatibles?