

La Física de la Química

A comienzos del siglo XX, se desarrolló la Mecánica Cuántica. Lo esencial de esta teoría es la introducción de elementos discretos en la descripción de la naturaleza. Es así como los electrones en los átomos no pueden tener cualquier energía, sino que están en estados estacionarios discretos donde su energía está determinada por números enteros.

El Atomo de Rutherford

El modelo atómico aceptado actualmente consisten en un núcleo pesado con carga eléctrica positiva, compuesto por neutrones y protones, rodeado de una nube de electrones con carga eléctrica negativa y masa muy pequeña comparada con la del núcleo. El átomo es eléctricamente neutro.

De este modelo atómico se puede derivar toda la Química, como veremos a continuación.

Para ilustrar esto en el caso más sencillo, estudiaremos el átomo de Hidrógeno, que consta de un protón y un electrón. La teoría del átomo de Hidrógeno fue inventada por N. Bohr en 1913.

La idea básica de Bohr es que el electrón en el átomo de Hidrógeno puede ocupar sólo algunas órbitas alrededor del protón. Las órbitas permitidas se llaman órbitas estacionarias, porque estando en ellas el electrón no pierde energía por radiación de luz.

Para determinar las órbitas estacionarias, Bohr postuló que el momentum angular, definido por $l = mvr$, donde m es la masa del electrón, v es su velocidad tangencial y r es el radio de la órbita estacionaria, sólo puede valer un múltiplo entero de una constante fundamental:

$$l = n \frac{h}{2\pi}, n = 1, 2, \dots$$

$h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg} / \text{ s}$ se llama la constante de Planck.

Utilizando las leyes de la Mecánica, Bohr encontró que la energía del electrón en el átomo de Hidrógeno está dada por:

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}, R_y = 13.6 \text{ eV} \quad (1)$$

NOTA: $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$. Es la energía que adquiere un electrón al ser acelerado por una diferencia de potencial de 1 V (olt).

La energía negativa significa que el electrón está atrapado por el protón (como los planetas). Para liberarlo, debemos agregar al electrón una energía de 13.6 eV (energía de ligazón del H).

La teoría de Bohr se completa con la regla de Einstein. Cada onda electromagnética (fotón) de frecuencia ν lleva un cuanto (paquete) de energía dada por

$$E = h\nu$$

Dado que la energía se conserva en todos los procesos, se obtienen las siguientes predicciones:

1) Si un electrón que está originalmente en una órbita estacionaria de número n , a una órbita estacionaria de número m , con $n < m$, se absorbe un fotón de frecuencia:

$$\nu_{nm}^a = \frac{E_m - E_n}{h} \quad (2)$$

Si la frecuencia ν del fotón no coincide con ninguna de estas frecuencias características, no será absorbido por el átomo.

2) Si un electrón que está originalmente en una órbita estacionaria de número n , a una órbita estacionaria de número m , con $n > m$, se emite un fotón de frecuencia:

$$\nu_{nm}^e = \frac{E_n - E_m}{h} \quad (3)$$

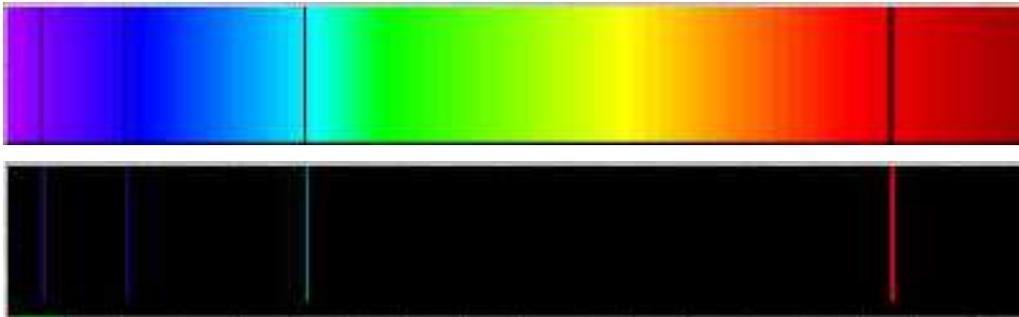
Con estas predicciones, Bohr pudo explicar los espectros de los átomos. El espectro de un átomo es su huella digital. Permite identificar su presencia en estrellas lejanas y en el medio interestelar.

En el caso 1) se trata de un espectro de absorción y en 2) de emisión.

El espectro de absorción permite detectar la presencia de un elemento químico al hacer pasar luz blanca por un medio conteniendo el elemento a ser estudiado. El espectro mostrará líneas oscuras en la posición correspondiente a las frecuencias dadas por (2)

El espectro de emisión permite detectar la presencia de un elemento, cuando el material se calienta y emite luz. En el espectro aparecerán líneas brillantes en las posiciones dadas por (3)

ESPECTRO DE ABSORCION Y DE EMISION DEL ATOMO DE HIDROGENO



LA TABLA PERIODICA DE LOS ELEMENTOS

Las propiedades químicas de un elemento están determinadas por su lugar en la Tabla Periódica:

Tabla Periódica de los Elementos

La teoría atómica de Bohr permite entender la Tabla Periódica.

Un átomo de la Tabla se identifica por su número atómico Z . Z es el número de protones que hay en el núcleo. Como el átomo es eléctricamente neutro, hay Z electrones orbitando alrededor del núcleo. Las propiedades químicas de los elementos están totalmente determinadas por la nube de electrones que rodea al núcleo.

Recordemos que el electrón tiene espín $\frac{1}{2}$ (es un fermión). Por lo tanto, obedece el Principio de Exclusión de Pauli. Esto es, dos electrones no pueden ocupar el mismo estado cuántico.

Para construir la Tabla Periódica, imaginamos que los niveles de energía del átomo son similares a los niveles de energía del átomo de Hidrógeno de la ecuación (1), llamados en este contexto orbitales. Luego procedemos a llenar los orbitales con los Z electrones, cuidando de obtener el estado de menor energía.

Usando la Mecánica Cuántica, se puede mostrar que cada orbital n puede recibir $2n^2$ electrones, catalogados por el momentum angular orbital $l < n$, la componente z del momentum angular orbital $-l \leq m \leq l$ y la componente z del espín $s_z = \pm \frac{1}{2}$.

Para cada valor de l hay $g = 2l + 1$ orbitales. g es la multiplicidad. Por razones históricas, se usa la siguiente notación para l .

Valor de l	0	1	2	3
Letra asociada	s	p	d	f

Convención: $s_z = \frac{1}{2} = \uparrow$, $s_z = -\frac{1}{2} = \downarrow$

La notación para los orbitales se explica en la siguiente tabla

n	l	Orbital	g
1	0	1s	1
2	0	2s	1
	1	2p	3
3	0	3s	1
	1	3p	3
	2	3d	5

Como ejemplo llenamos los orbitales correspondientes a la primera y segunda fila de la Tabla Periódica.

	1s	2s	2p
H: $1s$	\uparrow		
He: $1s^2$	$\uparrow\downarrow$		
Li: $1s^2 2s^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	
Be: $1s^2 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	
B: $1s^2 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow
C: $1s^2 2s^2 2p^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow$
N: $1s^2 2s^2 2p^3$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
O: $1s^2 2s^2 2p^4$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$
F: $1s^2 2s^2 2p^5$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow$
Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

A partir del Carbono C , se usa la *regla de Hund* que especifica que la configuración atómica de menor energía es aquella con el mayor número de electrones no apareados. Se llama apareamiento el que las flechas que representan el spin sean opuestas.

Electrones de valencia

Es conveniente introducir el concepto de *electrones de valencia*, con el cual nos referimos a los electrones de la capa externa incompleta. Como ejemplo, el He no los tiene, mientras el Li sólo tiene un electrón de valencia: el que ocupa el orbital 2s. El N en cambio tiene cinco electrones de valencia: dos en orbitales 2s y tres en orbitales 2p. Los electrones de valencia son los más importantes para las propiedades químicas, puesto que participan en los enlaces entre los átomos. Estos últimos determinan las propiedades físicas de los materiales, como dureza, fragilidad, transparencia, conductividad térmica y eléctrica, magnetismo, etc. Los electrones que completan las capas interiores no participan directamente en la química y reciben, en conjunto con el núcleo, la denominación de *cuzco* o *carozo*.

Notemos que los elementos de la misma columna de la Tabla Periódica ilustrada más arriba, tienen la misma configuración de los electrones de valencia; ésta es la razón física detrás de la clasificación empírica de Mendeleiev, basada en las propiedades químicas de los elementos.