



Tema 1: El átomo mecano-cuántico

1. Conceptos básicos

Elemento químico: es una sustancia que no puede ser descompuesta en otras más simples mediante reacciones químicas. Es equivalente al concepto de **átomo**.

Número atómico (Z): es igual al número de protones que contiene el núcleo. Cada elemento químico posee un número de protones distinto.

Número másico (A): es igual al número de protones (Z) más el de neutrones (N).

$$A = Z + N \quad (1)$$

Isótopos: dos átomos de un mismo elemento (igual Z) son isótopos si sus núcleos tienen una cantidad distinta de neutrones (N). Por tanto, dos isótopos difieren en el número másico (A).

Los elementos químicos tal y como aparecen en la tabla periódica son neutros (mismo número de protones que de electrones). Sin embargo, en la naturaleza los elementos pueden aparecer cargados si el número de protones no es igual al número de electrones. Este tipo de elementos cargados se denominan **iones**. Distinguimos dos clases:

- Si el átomo está cargado positivamente (tiene menos electrones que protones): **catión**.
- Si el átomo está cargado negativamente (tiene más electrones que protones): **anión**.

Masa atómica: es la masa de un único átomo de cierto elemento. Corresponde a un solo isótopo del elemento. Se expresa en unidades de masa atómica unificada (u).

Unidad de masa atómica unificada (u): es la doceava parte (1/12) de un átomo neutro y no enlazado de carbono-12 en su estado fundamental eléctrico y nuclear (^{12}C). Su valor es de

$$1 \text{ u} = 1,66053886 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad (2)$$

Peso atómico estándar o masa atómica relativa: es la razón del promedio de las masas de los átomos de un elemento (de una muestra dada) con respecto a la unidad de masa atómica unificada (u).

- Depende de la abundancia isotópica del elemento.
- Difiere según la muestra tomada.





2. El átomo de Bohr

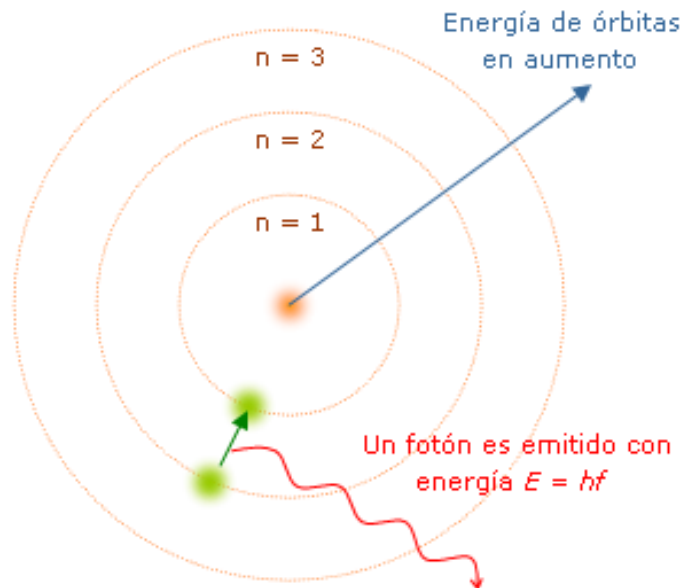


Figura 1: Diagrama del modelo atómico de Bohr [1].

- Utiliza elementos clásicos (los electrones siguen trayectorias circulares) y cuánticos (los niveles de energía están cuantizados: esto es, solamente pueden tomar valores discretos de energía).
- Predice correctamente el espectro del átomo de hidrógeno.

2.1. Fundamentos de la mecánica cuántica

- Hipótesis de De Broglie: dualidad onda-corpúsculo.
- Principio de indeterminación de Heisenberg.
- Ecuación de Schrödinger:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi. \quad (3)$$





2.2. Números cuánticos

Los **números cuánticos** son un conjunto de números (n, l, m, s) que aparecen al resolver matemáticamente la ecuación de Schrödinger. Estos números etiquetan las distintas soluciones ψ que satisfacen la ecuación, y describen el estado del electrón.

El conjunto de números (n, l, m, s) no puede tomar valores arbitrarios. Cada función de onda ψ que es solución de la ecuación de Schrödinger viene caracterizada por un conjunto concreto de números cuánticos que siguen unas reglas determinadas.

2.3. Número cuántico principal (n)

Describe el estado energético del electrón. Toma como valores cualquiera de los números naturales $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, 4, \dots\}$. El valor de n determina el nivel de energía o «capa». Cuanto mayor es n , mayor es la energía del electrón en el orbital (estrictamente esto es válido para el átomo de hidrógeno y otros átomos hidrogenoideos, ya que en átomos más complejos el número cuántico l también determina la energía del electrón).

2.4. Número cuántico secundario (l)

Es el número cuántico orbital o número cuántico del momento angular. Es el responsable de la forma del orbital, es decir, determina cómo se distribuyen los electrones en el espacio. Para cada nivel energético dado por n , l toma valores enteros entre 0 y $n - 1$. Los subniveles energéticos que vienen determinados por l pueden denotarse por letras $s, p, d, f, g \dots$

2.5. Número cuántico magnético (m)

Si el número cuántico secundario determina la *forma* del orbital, el número cuántico magnético determina su *orientación*. Esto quiere decir que podemos tener orbitales con la misma forma, pero distinta orientación. Al igual que el valor de l dependía de n , el valor de m depende de l , de forma que m toma valores enteros entre $-l$ hasta l pasando por el cero.

2.6. Número cuántico de espín (s)

El número cuántico de espín añade dos subniveles más de energía. Aunque físicamente la idea de espín es compleja, frecuentemente se representa como si el electrón girara sobre su propio eje en dos sentidos distintos. Este número toma, por tanto, dos valores $+1/2$ y $-1/2$, representando los dos posibles sentidos de giro. Téngase en cuenta que esta representación del espín en la que el electrón es una bolita que gira sobre su propio





eje no es estrictamente cierta y representa una visión pedagógica y adaptada de este efecto cuántico.

Principio de exclusión de Pauli: no puede haber dos electrones en el mismo estado cuántico dentro de un mismo sistema cuántico (para nosotros, el átomo). Esto quiere decir que dos electrones no pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos (n , l , m , s). Cada función de onda queda perfectamente definida en función de sus cuatro números cuánticos.

Estado fundamental: es el estado de menor energía. Viene representado por un conjunto de números cuánticos.

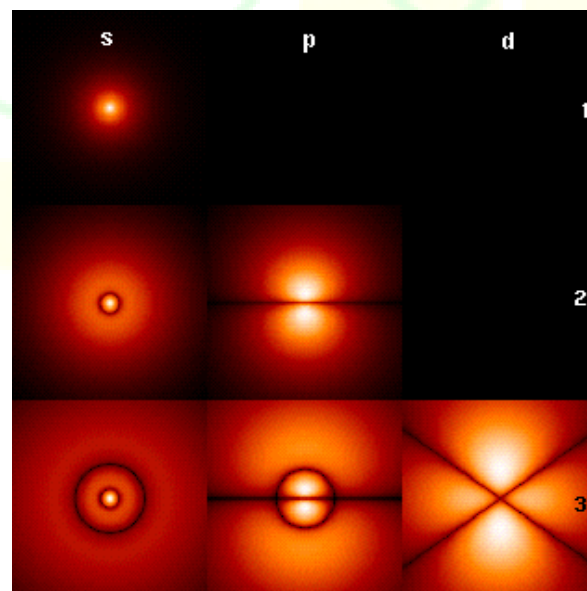


Figura 2: Densidad de probabilidad de posición de un electrón para los primeros niveles de energía [2].





2.7. Orbitales atómicos

Orbital atómico: Zona del espacio en que la probabilidad de encontrar al electrón es máxima. Este concepto no se debe confundir con el de órbita, que implica una trayectoria definida en el espacio alrededor de un objeto. Matemáticamente, un orbital atómico es una función de onda ψ caracterizada por los números cuánticos (n, l, m, s).

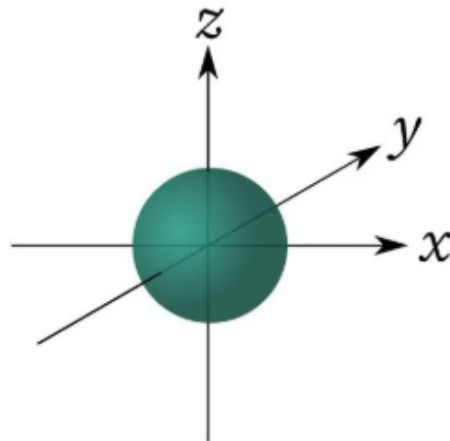


Figura 3: Representación de la probabilidad de distribución en los orbitales de tipo s [3].

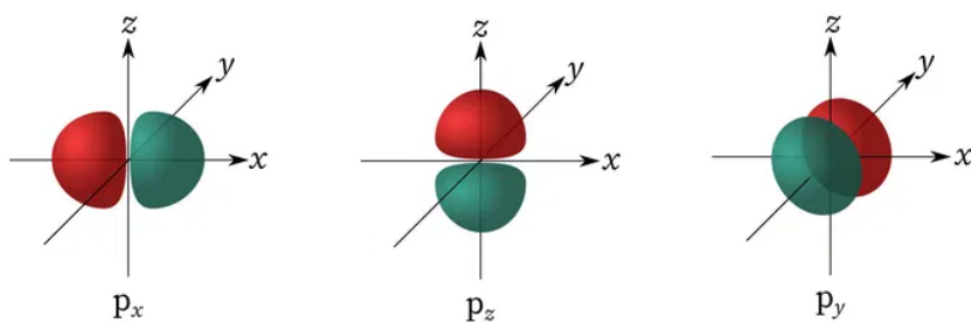


Figura 4: Representación de la probabilidad de distribución en los orbitales de tipo p [3].



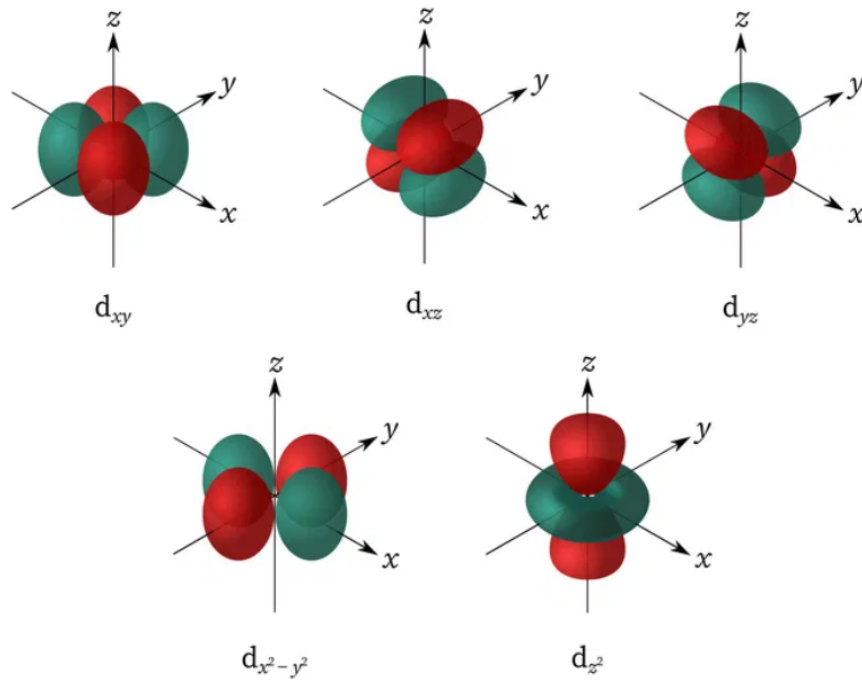


Figura 5: Representación de la probabilidad de distribución en los orbitales d [3].

	$s (l=0)$	$p (l=1)$			$d (l=2)$				
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$
n=1	•								
n=2	•								
n=3									
n=4									
n=5									
n=6				
n=7	

Figura 6: Tabla resumen de las distribuciones de probabilidad de los orbitales s, p y d.





2.8. Configuración electrónica de un elemento

La configuración electrónica indica la manera en la cual los electrones se estructuran en un átomo de acuerdo con el modelo de capas. Se determina siguiendo el **principio de construcción** de Bohr y Pauli: se llenan primero los orbitales de menor energía. La regla que determina el orden de llenado de los orbitales es la **regla de Madelung**: se llenan antes los orbitales con número $n + l$ más bajo.

El **diagrama de Moeller**:

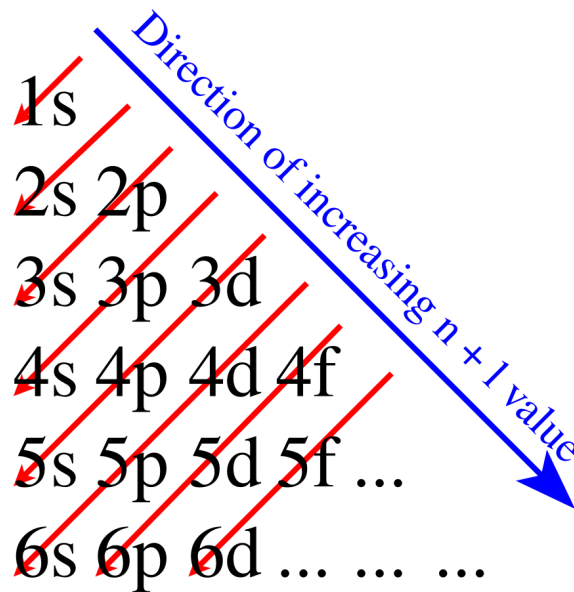


Figura 7: Diagrama de Moeller [4].

Principio de máxima multiplicidad de Hund: los electrones situados en el mismo subnivel de energía tienden a estar desapareados. Esto es debido a que el apareamiento electrónico requiere de energía extra.





3. Propiedades periódicas de los elementos

Existen varias propiedades de los elementos químicos que presentan una variación característica a lo largo de un mismo periodo de la tabla periódica. Además, estas variaciones se repiten para todos los periodos sucesivos de la tabla. Son las llamadas *propiedades periódicas* de los elementos y dependen de

- la configuración electrónica y
- la carga nuclear efectiva.

¿Qué es la carga nuclear efectiva?

3.1. Tabla Periódica de los elementos químicos

El sistema periódico de los elementos consta de siete filas o periodos y dieciocho columnas o grupos.

Entre los grupos, distinguimos a los *grupos representativos o principales* (IA, IIA, ..., VIIIA), los *metales de transición* (IIIB, ..., VIIIIB, IB y IIB) y los *metales de transición interna*, conformados por los *lantánidos* y los *actínidos*. Existen grupos que presentan una nomenclatura particular debido a las propiedades semejantes de sus elementos:

- *metales alcalinos* (IA),
- *metales alcalinotérreos* (IIA),
- *Calcógenos* (VIA),
- *Halógenos* (VIIA),
- *Gases nobles* (VIIIA).

La división diagonal escalonada desde el boro hasta el astato permite distinguir entre *metales* y *no metales*. Estos dos tipos de sustancias se diferencian por sus propiedades químicas: conducción del calor y la electricidad, ductilidad y maleabilidad... Aquellos elementos que se encuentran en el límite de la división entre metales y no metales son los *metaloideos o semimetales* que presentan propiedades intermedias entre ambos grupos.

3.2. Configuración electrónica y Tabla Periódica

Dado que los elementos se ordenan en la Tabla Periódica según su número atómico, esto permite estudiar cómo varía la configuración electrónica a medida que nos desplazamos por la Tabla Periódica.

Nótese que los elementos del grupo de los Gases nobles presentan una configuración electrónica de capas llenas. Aquellos electrones perteneciente a una capa (nivel) exterior de un elemento no completa se les denomina *electrones de valencia*.





3.3. Radio atómico

Se define como la mitad de la distancia entre los núcleos de dos átomos metálicos adyacentes o de una molécula diatómica. Es una medida del tamaño de los átomos, aunque, dado que la distribución electrónica radial no tiene un límite definido, el tamaño de los átomos no se puede precisar bien. Considerando dos átomos esféricos que se «tocan», el radio atómico es la mitad de la distancia entre los dos núcleos de los átomos.

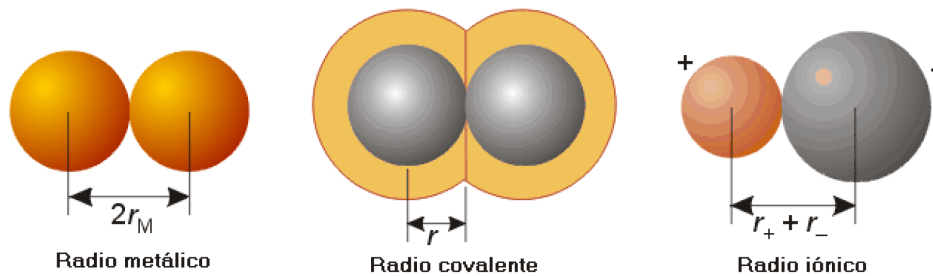
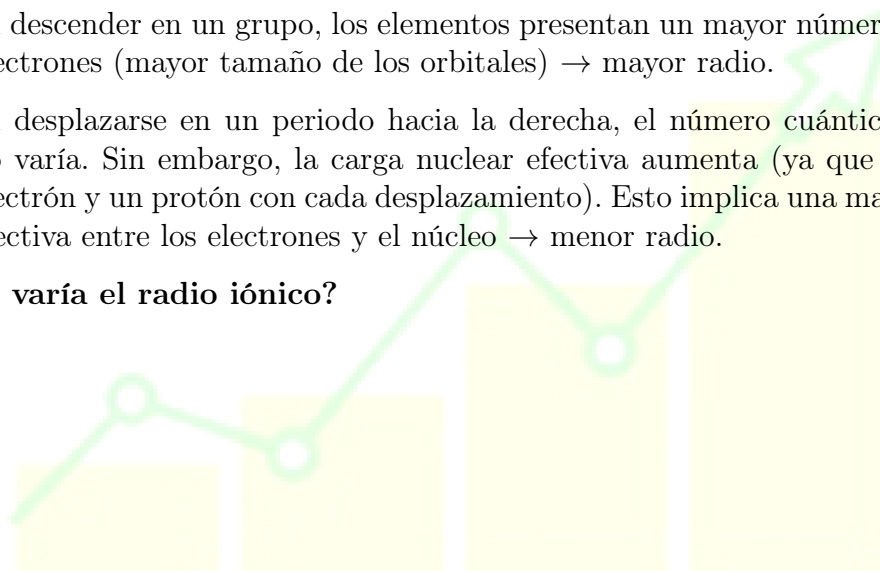


Figura 8: Definición del radio atómico para distintos tipos de enlace.

- Al descender en un grupo, los elementos presentan un mayor número de capas de electrones (mayor tamaño de los orbitales) → mayor radio.
- Al desplazarse en un periodo hacia la derecha, el número cuántico principal n no varía. Sin embargo, la carga nuclear efectiva aumenta (ya que añadimos un electrón y un protón con cada desplazamiento). Esto implica una mayor atracción efectiva entre los electrones y el núcleo → menor radio.

¿Cómo varía el radio iónico?



3.4. Energía de ionización

Es la energía mínima (en kJ/mol) necesaria para remover un electrón de un átomo en estado gaseoso, en su estado fundamental. Es, por tanto, una medida de la fuerza con la que el átomo retiene a sus electrones.

Es lógico pensar que cuanto mayor sea la atracción entre los electrones y el núcleo, mayor será la energía necesaria para arrancar un electrón:

- Al descender en un grupo, el radio atómico aumenta, por lo que los electrones están más lejos del núcleo y la atracción es menor (conviene recordar que la fuerza





de atracción es inversamente proporcional al cuadrado del radio $1/r^2$) → menor energía de ionización.

- Al desplazarse en un periodo hacia la derecha, el número cuántico principal n no varía. Sin embargo, la carga nuclear efectiva aumenta, como vimos con el radio atómico. Esto implica una mayor atracción efectiva entre los electrones y el núcleo → mayor energía de ionización.

3.5. Afinidad electrónica

Es el valor negativa del cambio de energía que se desarrolla cuando un átomo, en estado gaseoso, acepta un electrón para formar un anión. En otras palabras: es la energía desprendida en el proceso de adición de un electrón a un átomo neutro en estado gaseoso para formar un anión.

En el proceso en el cual un átomo atrae y gana un electrón para formar un ion negativo, se libera energía. Esta energía liberada es mayor cuanto mayor es la atracción (afinidad) entre el átomo y el electrón: básicamente, cuanto más estable se vuelva el átomo al captar el electrón, más energía será liberada.

- Al desplazarse en un periodo hacia la derecha, los elementos se acercan a la configuración de gas noble → mayor afinidad electrónica. Esto no aplica al caso de la configuración de gas noble, ya que la configuración electrónica es estable.
- Los elementos alcalinotérreos (ns^2) presentan un orbital s lleno, por lo que presentarán afinidades electrónicas positivas (no tienden a captar electrones), ya que el nuevo electrón tendría que ocupar una subcapa (np) superior.
- Desplazarnos arriba y abajo en un grupo no varía sustancialmente la afinidad electrónica del elemento, pero se puede encontrar una relación con el radio atómico. Al descender en un grupo, el radio aumenta, y la distancia del electrón añadido al núcleo aumenta: esto disminuye la atracción, por lo que la energía liberada en el proceso es cada vez menor → menor afinidad electrónica al descender en un grupo.





3.6. Electronegatividad

Es la capacidad de un átomo para atraer hacia sí los electrones de un enlace químico. Los elementos con electronegatividad alta tienen mayor tendencia para atraer electrones que los elementos con electronegatividad baja.

En general, aumenta de izquierda a derecha y disminuye de arriba abajo en la Tabla Periódica conforme aumenta el radio atómico y los electrones de valencia se alejan del núcleo. Los elementos no metálicos son claramente más electronegativos que los metálicos y los átomos más pequeños son más electronegativos que los más grandes.

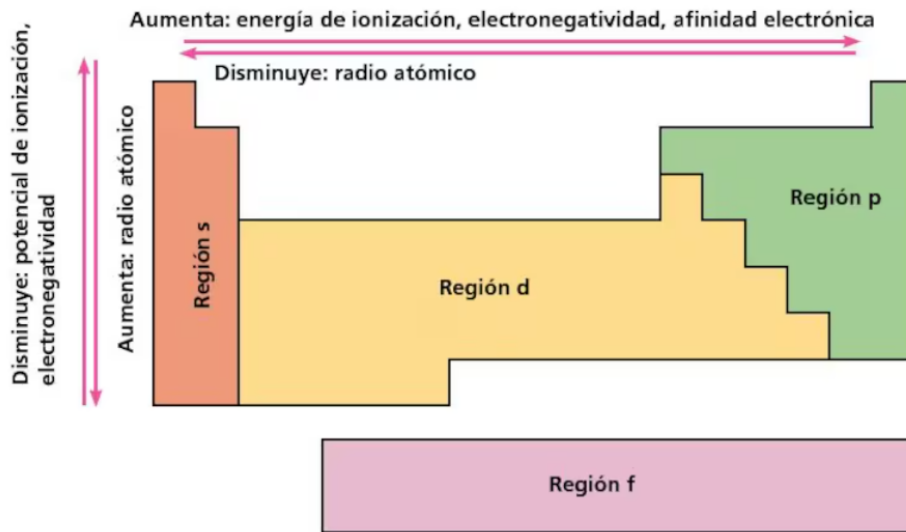
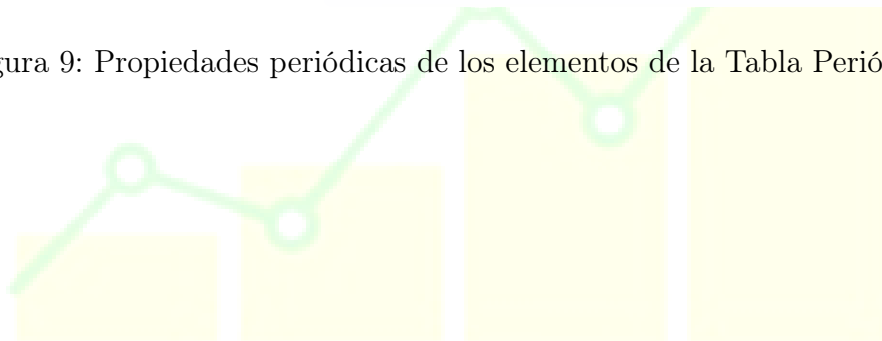


Figura 9: Propiedades periódicas de los elementos de la Tabla Periódica [5].





Referencias

- [1] Wikimedia Commons. File: Modelo de Bohr.png — Wikimedia Commons, the free media repository, 2025. [Online; accedido el 29 de agosto de 2025].
- [2] Wikimedia Commons. File: HAtomOrbitals.png — Wikimedia Commons, the free media repository, 2025. [Online; accedido el 29 de agosto de 2025].
- [3] Stephen Rhoton. Orbitales atómicos, 2024. [Online en <https://www.significados.com/orbital-atomico/> ; accedido el 29 de agosto de 2025].
- [4] Wikimedia Commons. File:aufbau principle-en.svg — wikimedia commons, the free media repository, 2025. [Online; accessed 29-August-2025].
- [5] Graciela Ortega Miranda. Propiedades periódicas de los elementos, 2014. [Online; accedido el 9 de septiembre de 2025].
- [6] María José Caselles Pomares, María Rosa Gómez Antón, Mariano Molero Meneses, and Jesús Sardá Hoyo. *Química aplicada a la ingeniería*. UNED, 2010.
- [7] Raymond Chang and Jason Overby. *Química*. McGraw Hill, 2020.

