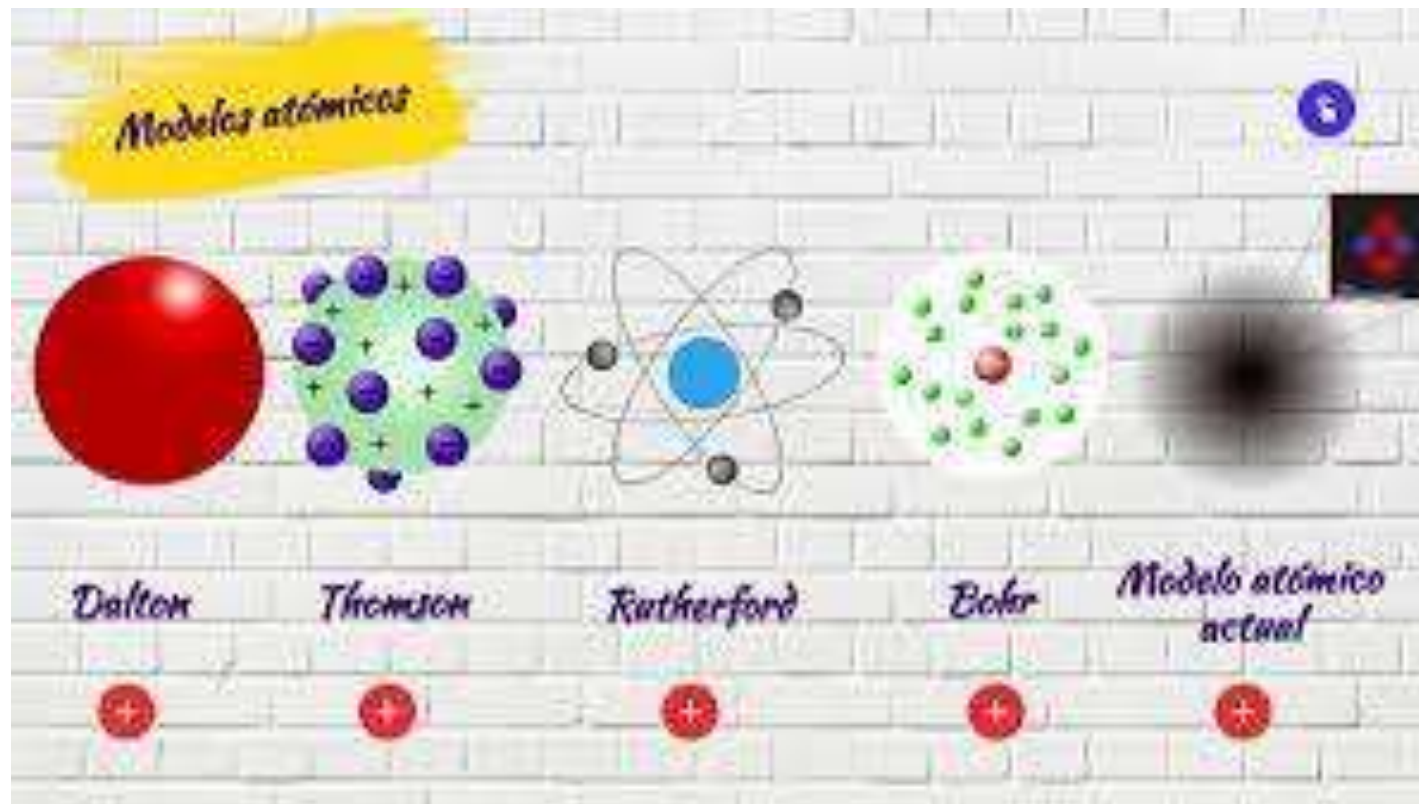


UNIDAD 1: ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA



Magnitudes atómicas (I)

NÚMERO ATÓMICO

- Representado por la letra Z.
- Hace referencia al número de protones en el núcleo atómico.
- Es característico de cada elemento.
- Para un átomo eléctricamente neutro, coincide también con el número de electrones.

NÚMERO MÁSCICO

- Representado por la letra A.
- Hace referencia al número de nucleones (protones + neutrones).
- Por tanto: $A = Z + N$ (neutrones)

Un átomo de un elemento dado (X) se representa como:



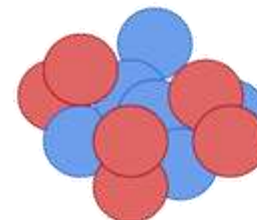
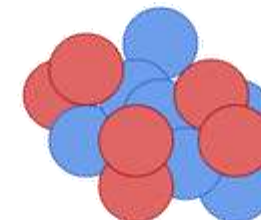
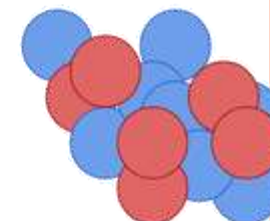
UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA



Magnitudes atómicas (II)

ISÓTOPOS

Átomos que comparten el mismo número atómico pero tienen diferente número másico.

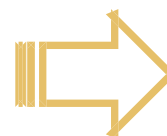
 $^{12}_6\text{C}$  $^{13}_6\text{C}$  $^{14}_6\text{C}$ 

IONES

- Los átomos pueden ganar o perder electrones para convertirse en iones.
- La carga eléctrica adquirida (q) se calcula como la diferencia entre el número de protones y el de electrones.



Ion positivo (catión) → el átomo pierde electrones → defecto de carga negativa.

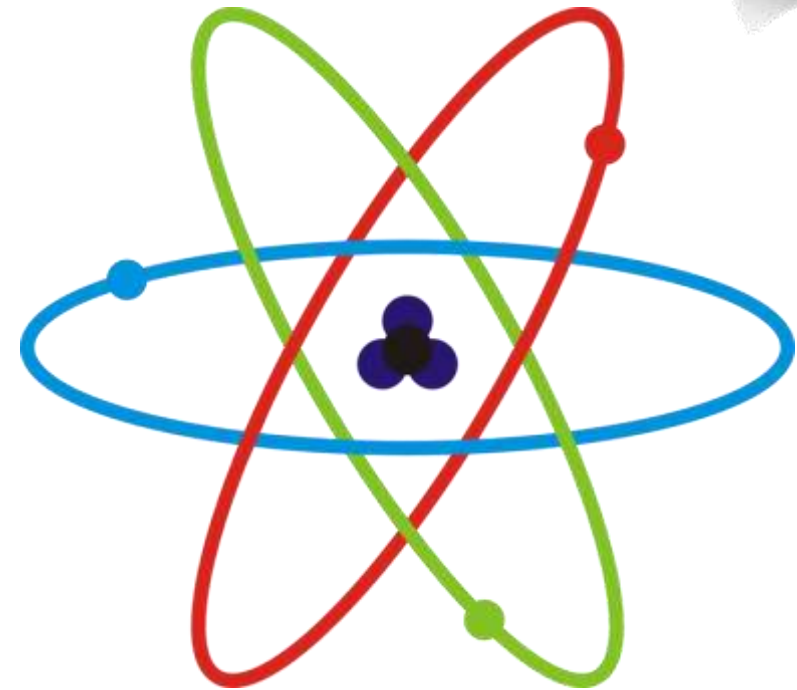


Ion negativo (anión) → el átomo gana electrones → exceso de carga negativa.

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

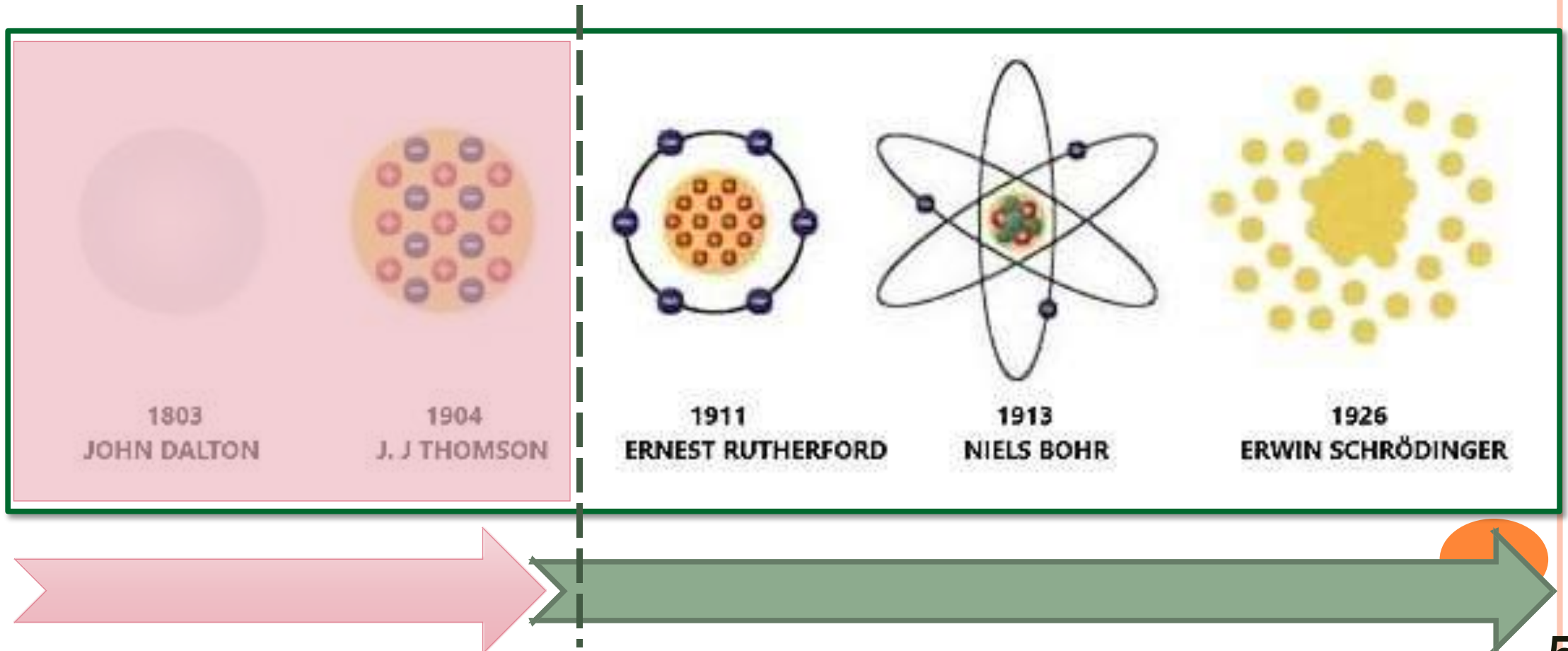
¿Qué es un MODELO ATÓMICO?

Un MODELO ATÓMICO hace referencia a una representación que trata de describir las partes de las que se compone el átomo y cómo estas se encuentran distribuidas en el mismo formando un todo conjunto.



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

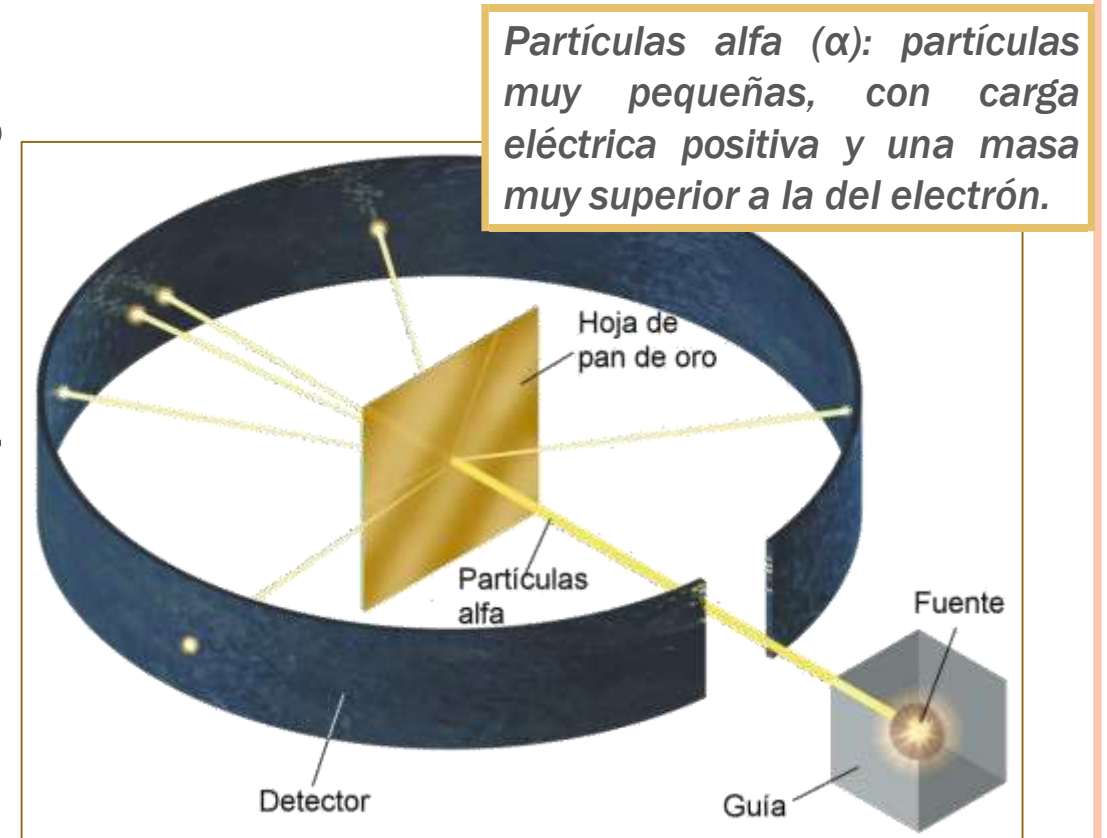
A lo largo de la historia, se han ido desarrollando diferentes modelos atómicos; centremos la atención en aquellos más relevantes...



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Experimento de Rutherford (1911)

- ✓ Ernest Rutherford realizó un experimento clave con el fin de comprobar la validez del modelo atómico definido por Thomson.
- ✓ El experimento consistía en hacer incidir un haz de partículas alfa (α) sobre una delgada lámina de oro, rodeada por una pantalla fluorescente.
- ✓ Al analizar los resultados era posible observar si dichas partículas experimentaban algún tipo de desviación al atravesar la lámina.



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Experimento de Rutherford (1911)

- ✓ Rutherford observó que:
 - La mayor parte de las partículas α atravesaron la lámina de oro sin desviarse de su trayectoria.
 - Algunas partículas α se desviaron ligeramente.
 - Otras pocas partículas α (1 de cada 20000 aproximadamente) sufrieron una importante desviación en su trayectoria después de atravesar la lámina de oro.
 - Una proporción similar de partículas α (1 de cada 20000 aproximadamente) rebotaron en la lámina, sin atravesarla, e incidieron en la pantalla fluorescente.

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Experimento de Rutherford (1911)

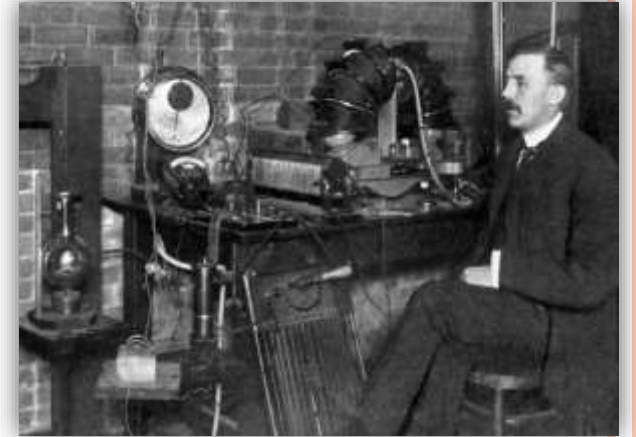
- ✓ Rutherford concluyó que:
 - Para que las partículas α se desvíen han de encontrar en su trayectoria una zona en la que se concentre carga eléctrica positiva, con una masa comparable o incluso superior a la suya, responsable de la repulsión entre cargas positivas.
 - Esa zona, en la que se concentra la masa y carga positiva, debe ser muy pequeña en comparación con el conjunto del átomo, pues la mayoría de partículas α no se desvían.



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Modelo atómico de Rutherford (1911)

- ✓ En base a las conclusiones anteriores, Rutherford enuncia su propio modelo atómico:
 - El átomo dispone de un núcleo central en el que se concentran la totalidad de la carga positiva y prácticamente toda su masa.
 - La carga positiva del núcleo es compensada con la carga negativa de los electrones.
 - Los electrones están en la corteza, formando una nube en torno al núcleo.
 - El tamaño del núcleo es muy pequeño en comparación con el del átomo, existiendo un gran espacio vacío entre este y la corteza.

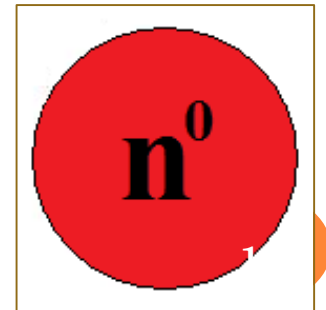
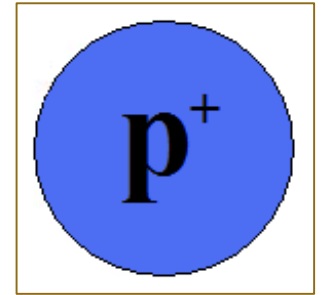


Ernest Rutherford
(1871 – 1937)

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Modelo atómico de Rutherford (1911)

- ✓ Rutherford descubre, por tanto, la presencia de los protones en el átomo: partículas con la misma carga que el electrón pero con signo positivo y una masa unas 1840 veces superior a la de este.
- ✓ Más adelante, Rutherford supuso que en el núcleo debe existir otro tipo de partículas adicionales, pues la suma de la masa de protones y electrones no coincide con la masa total del átomo.
- ✓ Posteriormente, J. Chadwick descubre la presencia de partículas sin carga y con masa similar a la del protón: los neutrones.



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Limitaciones del modelo atómico de Rutherford (1911)

Rutherford supone que los electrones giran alrededor del núcleo.



Según la teoría electromagnética, eso implicaría una continua emisión de energía por parte de los electrones; la energía terminaría por agotarse y los electrones se precipitarían sobre el núcleo atómico.

Rutherford defiende un modelo energéticamente continuo (la energía puede tomar cualquier valor).

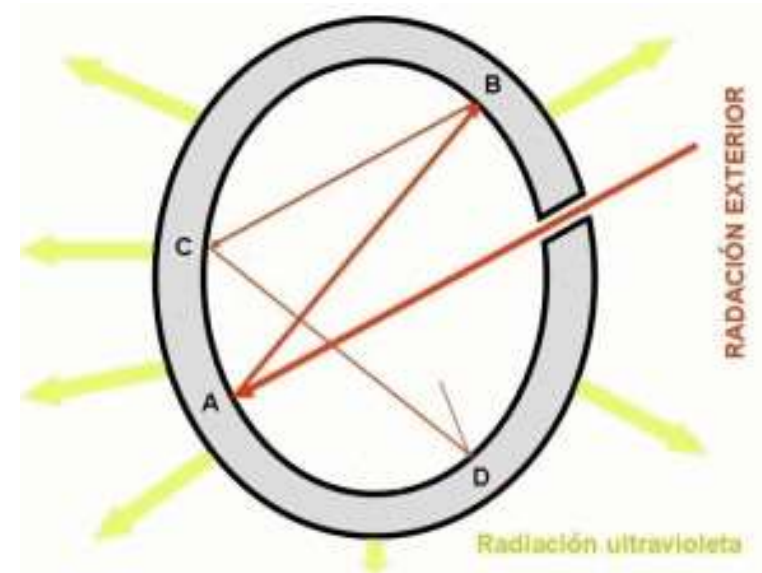


Su modelo no es capaz de explicar las bandas discontinuas de los espectros atómicos.

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Teoría cuántica – Hipótesis de Planck (I)

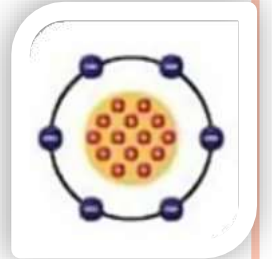
Cuerpo negro: objeto ideal que absorbe toda la energía electromagnética que incide sobre él



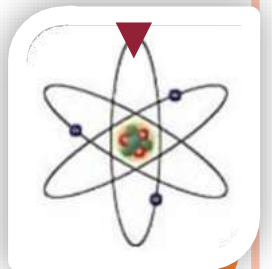
Todos los objetos emiten radiación electromagnética (REM) debido a su temperatura

<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:HornoCuerpoNegroGif.gif>

E. Rutherford



M. Planck



N. Bohr

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

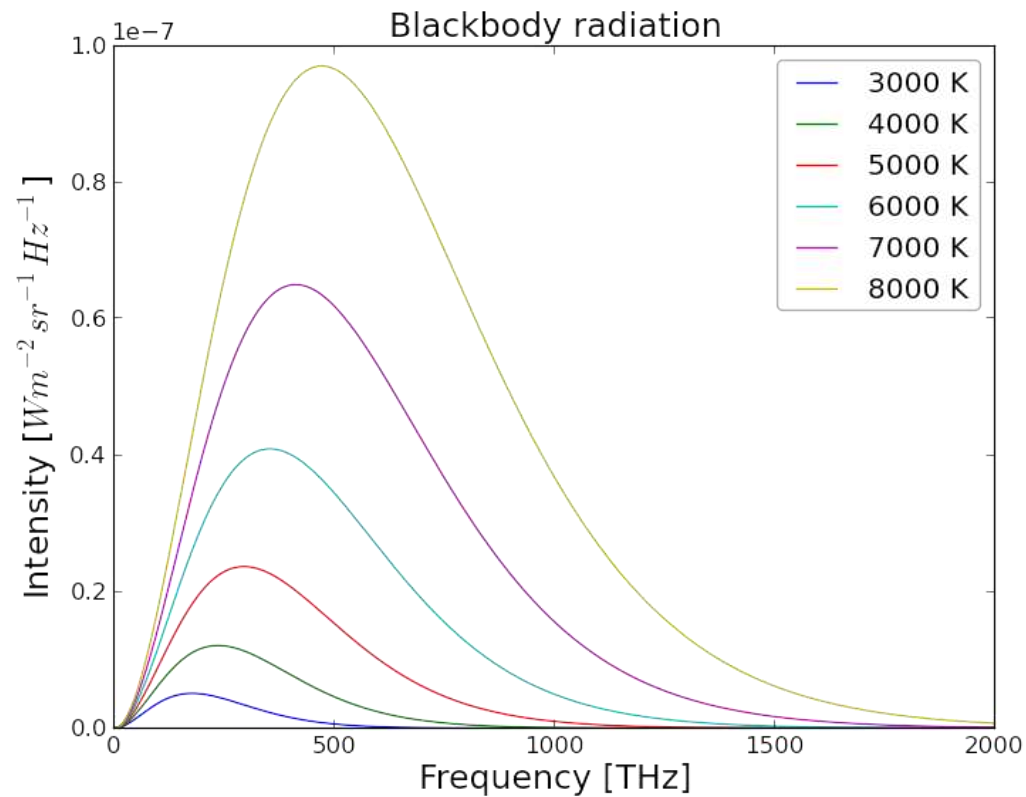
Teoría cuántica – Hipótesis de Planck (II)

Espectros de emisión del cuerpo negro: radiación emitida en función de la frecuencia o la longitud de onda

Ley de Stefan-Boltzmann:

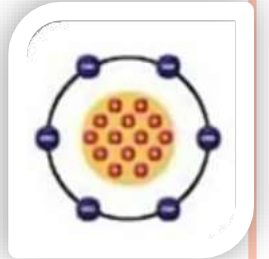
$$\frac{dE}{dt} = \sigma ST^4$$

donde $\sigma = 5,6703 \cdot 10^{-8} W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$
es la constante de Stefan-Boltzmann

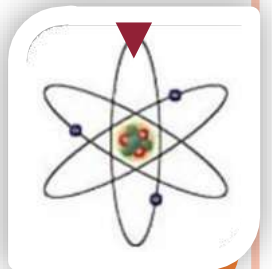


https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Blackbody_spectrum.png

E. Rutherford



M. Planck



N. Bohr

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Teoría cuántica – Hipótesis de Planck (III)

- ✓ M. Planck propone que la energía emitida por estos cuerpos estaba relacionada con la energía de sus átomos, al comportarse como osciladores.
- ✓ En consecuencia, la energía emitida era proporcional a la frecuencia de oscilación de cada uno de sus átomos.
- ✓ Matemáticamente, la hipótesis de Planck se expresa como:

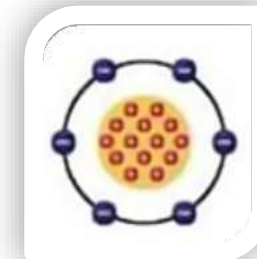
$$E = h \cdot f$$

$$h = \text{constante de Planck} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

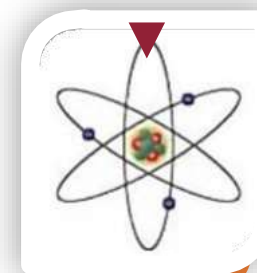
$$f = \text{frecuencia de oscilación del átomo}$$

La energía está cuantizada: se transmite de forma discontinua, como paquetes de energía llamados “cuantos”, proporcionales al valor de la constante (h).

E. Rutherford



M. Planck



N. Bohr

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Teoría cuántica – Efecto fotoeléctrico (I)

- ✓ Albert Einstein (1905) aplicó la hipótesis de Planck al fenómeno de efecto fotoeléctrico.

Efecto fotoeléctrico = propiedad que presentan algunos metales de emitir electrones al ser sometidos a la irradiación de la luz.

- ✓ Pero la emisión de electrones se produce solo cuando la luz alcanza una frecuencia mayor a una frecuencia mínima (frecuencia umbral, f_0), particular para cada metal.
- ✓ Einstein propone entonces que:

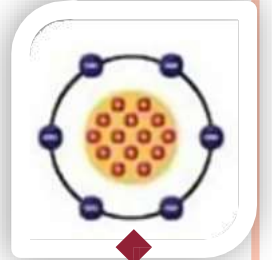
$$E = h \cdot f$$

$h = \text{constante de Planck} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

$f = \text{frecuencia de la luz incidente}$

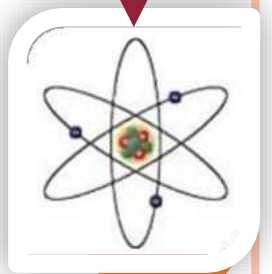
La luz se compone de una serie de partículas elementales, llamadas fotones, cuya energía viene dada por la ecuación de Planck.

E. Rutherford



M. Planck

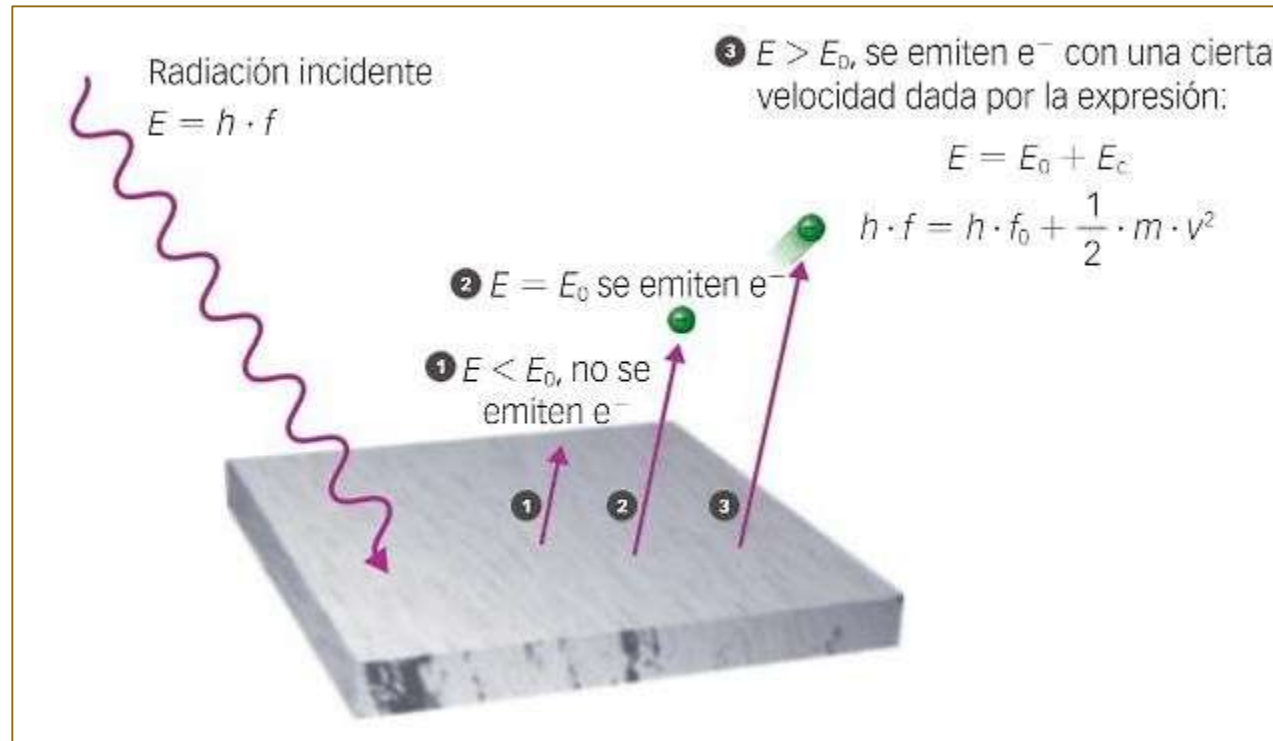
A. Einstein



N. Bohr

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Teoría cuántica – Efecto fotoeléctrico (II)



*Mayor intensidad luz
(radiación incidente)*



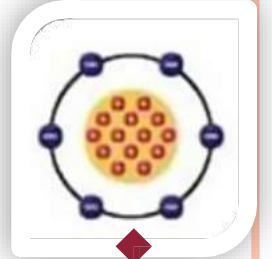
*Mayor número de
fotones*



*Mayor número de
electrones emitidos*

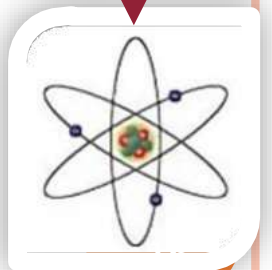
Los electrones serán arrancados cuando se les proporcione la energía mínima suficiente (E_0), conocida como trabajo de extracción, relacionada con la frecuencia umbral (f_0).

E. Rutherford



M. Planck

A. Einstein

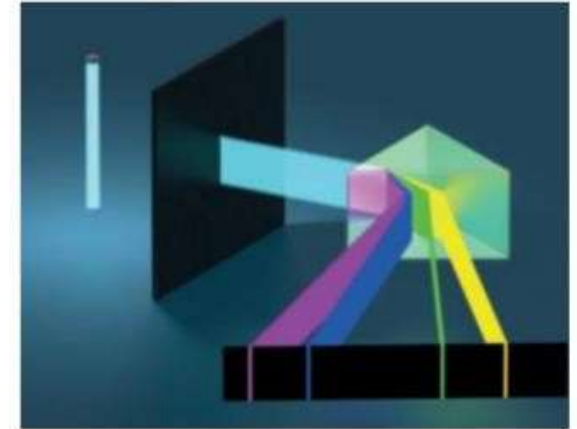


N. Bohr

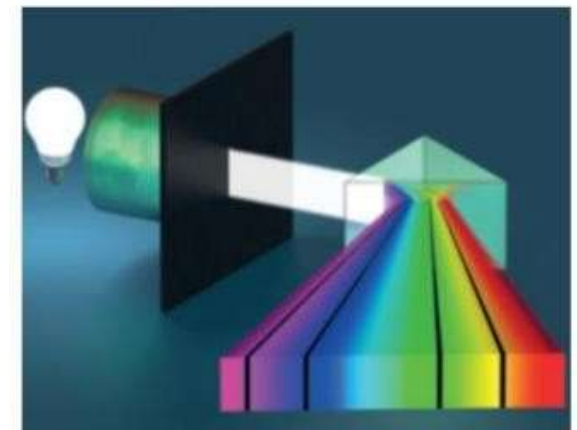
UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Teoría cuántica – Espectros atómicos (I)

- ✓ La luz solar presenta un espectro con todos los colores, conocido como espectro continuo.
- ✓ Los átomos son capaces de emitir y/o absorber radiación al ser estimulados por calentamiento y/o radiación, respectivamente, pero solo en determinadas frecuencias
→ se generan líneas en el espectro del átomo → espectros discontinuos.
- ✓ El primer espectro atómico estudiado fue el del átomo de hidrógeno, por ser el elemento más sencillo conocido.



Espectro de emisión



Espectro de absorción

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Teoría cuántica – Espectros atómicos (II)

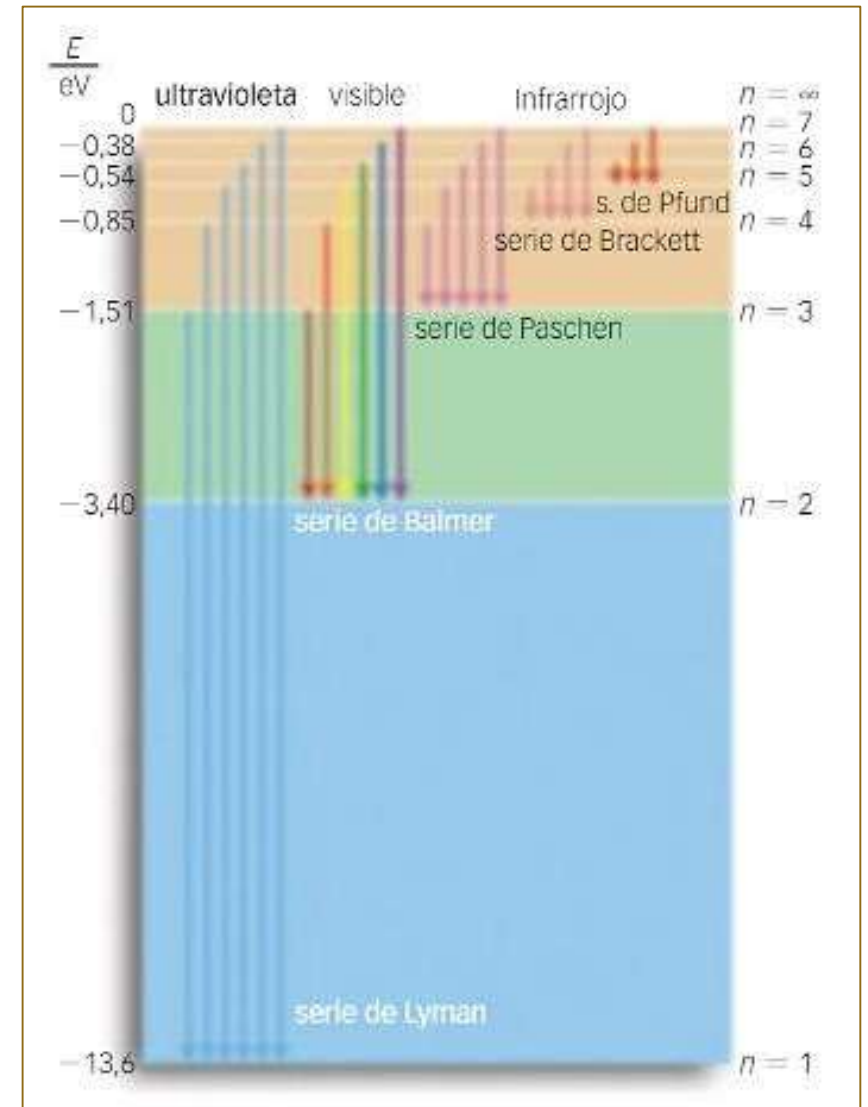
- ✓ Rydberg (1900) definió una ecuación empírica generalizada para determinar las longitudes de onda de las líneas espectrales.

$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Donde:

$$n_1 < n_2$$

R = constante de Rydberg = $1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Niels Bohr
(1885 – 1962)



Modelo atómico de Bohr (I)

- ✓ Niels Bohr (1913) propone un nuevo modelo atómico.
- ✓ Este modelo se basa en tres postulados:
 - 1) Los electrones giran en órbitas circulares en torno al núcleo (debido a la atracción eléctrica protón – electrón) sin emitir energía.
 - 2) El electrón no puede situarse a cualquier distancia del núcleo; este debe ocupar unos niveles energéticos (órbitas) predeterminados, siendo su momento angular (L) un múltiplo entero de $h/2\pi$. Esto es:

$$L = m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

Siendo n el número cuántico principal: $n = 1, 2, 3 \dots$

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Modelo atómico de Bohr (II)

Se cumple así que el radio (r) de la órbita del electrón está cuantizado:

$$r = n^2 \cdot a$$

3) Si el electrón se mueve de una órbita externa a una más interna desprende energía; en caso contrario, absorbe energía.

La energía se emite o absorbe en forma de un fotón, cuya frecuencia viene dada por la ecuación de Planck. Los fotones generados a consecuencia de los saltos energéticos de los electrones son los responsables de los espectros.

En consecuencia, se cumple que la energía (E) del electrón está cuantizada:

$$E = -\frac{1}{n^2} \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi^2 \cdot k^2 \cdot m_e \cdot e^4}{h^2} \right) = -\frac{A}{n^2}$$

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Modelo atómico de Bohr – Sommerfeld (I)

- ✓ Sommerfeld (1916) perfecciona el modelo de Bohr al considerar la posibilidad de que las órbitas pudiesen ser también elípticas.

Esta modificación supuso la definición de un **segundo número cuántico**, el **número cuántico secundario (l)**, encargado de indicar la forma de la órbita:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots (n - 1)$$

- ✓ Como consecuencia del efecto Zeeman, se define un **tercer número cuántico**, el **número cuántico magnético (m_l)**, responsable de indicar la orientación de la órbita:

$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Modelo atómico de Bohr – Sommerfeld (II)

EJEMPLO:

$$n = 3 \begin{cases} l = 0; m_l = 0 \\ l = 1; m_l = -1, 0, +1 \\ l = 2; m_l = -2, -1, 0, +1, +2 \end{cases}$$

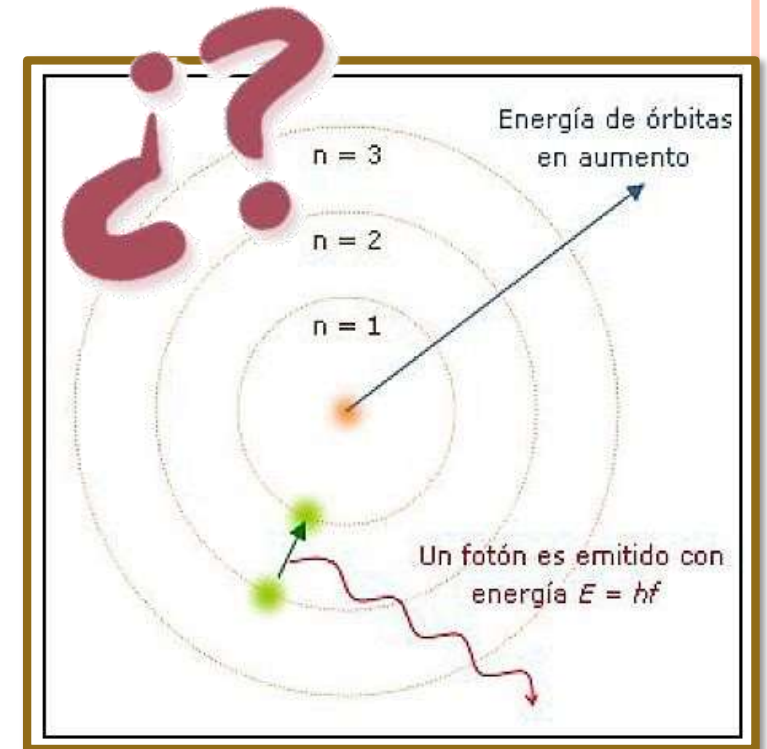
- ✓ Finalmente, asumiendo dos posibles sentidos de giro del electrón en el átomo, se define el cuarto número cuántico, conocido como número cuántico de spin (m_s):

$$m_s \begin{cases} +1/2 \\ -1/2 \end{cases}$$

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Transición hacia el modelo mecano – cuántico

- ✓ El modelo atómico de Bohr no es capaz de explicar completamente las características de átomos con varios electrones en su corteza.
- ✓ A partir de la década de 1920 surge una revolución (de la mano de físicos como Schrödinger, Heisenberg...) que da paso al inicio de la mecánica cuántica.
- ✓ En el modelo mecano – cuántico se empieza a hablar de probabilidades y “*nubes electrónicas*” (*orbitales*) y se amplía el número de niveles y subniveles energéticos.



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Hipótesis dualidad onda – corpúsculo (Louis De Broglie)

- ✓ Einstein demostró, al explicar el efecto fotoeléctrico, que la luz podía comportarse como un conjunto de partículas (fotones).

¿Podrían entonces los electrones (partículas) comportarse como ondas?

- ✓ Louis de Broglie (1923) valoró esta posibilidad y dedujo la expresión para determinar la longitud de onda asociada al movimiento ondulatorio del electrón:

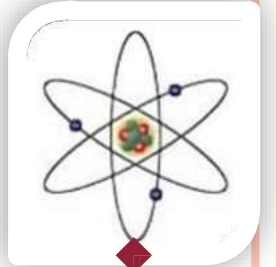
$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

Donde:

m = masa del electrón.

v = velocidad del electrón.

Modelo
cuántico



Modelo
mecano-cuántico

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Principio de incertidumbre o indeterminación (Heisenberg)

- ✓ Heisenberg (1927) establece el siguiente principio:

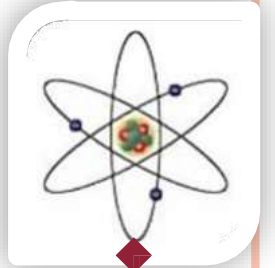
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

No se pueden determinar simultáneamente el momento lineal (p) y la posición (x) de una partícula en movimiento.

- ✓ En consecuencia, se concluye que el modelo de Bohr – Sommerfeld es inviable: es imposible conocer la posición del electrón en el átomo.
- ✓ Surge entonces un nuevo concepto: el orbital atómico.

Un orbital es una región del espacio, alrededor del núcleo atómico, donde es máxima la probabilidad de encontrar al electrón con una determinada energía.

Modelo
cuántico

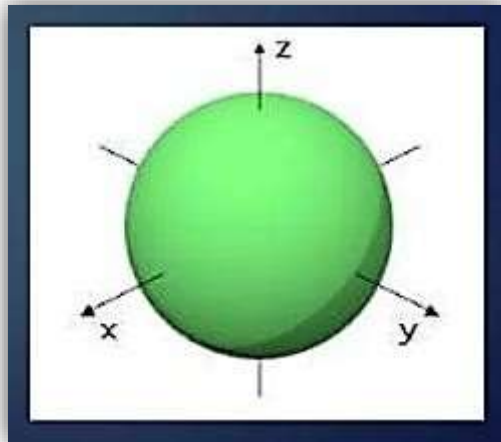


Modelo
mecano-cuántico

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

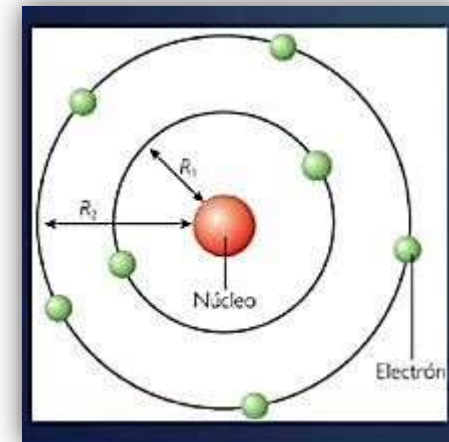
Orbital *versus* Órbita

ORBITAL



- Modelo mecano-cuántico
- Con volumen
- Tridimensional

ÓRBITA



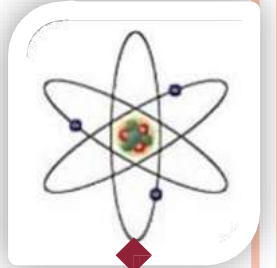
- Modelo cuántico
- Plana
- Superficial

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Mecánica cuántica/ondulatoria

- ✓ La mecánica cuántica u ondulatoria se basa en la ecuación de ondas propuesta por Schrödinger para describir el comportamiento del electrón.
- ✓ La solución de esta ecuación es función de tres números enteros (tres números cuánticos).
- ✓ Esta solución no proporciona la posición ni tampoco la velocidad exacta del electrón, de conformidad con el principio de indeterminación de Heisenberg.
- ✓ Cada grupo de tres valores permitidos (n , l , m_l) definen un orbital.

Modelo
cuántico



Modelo
mecano-cuántico

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

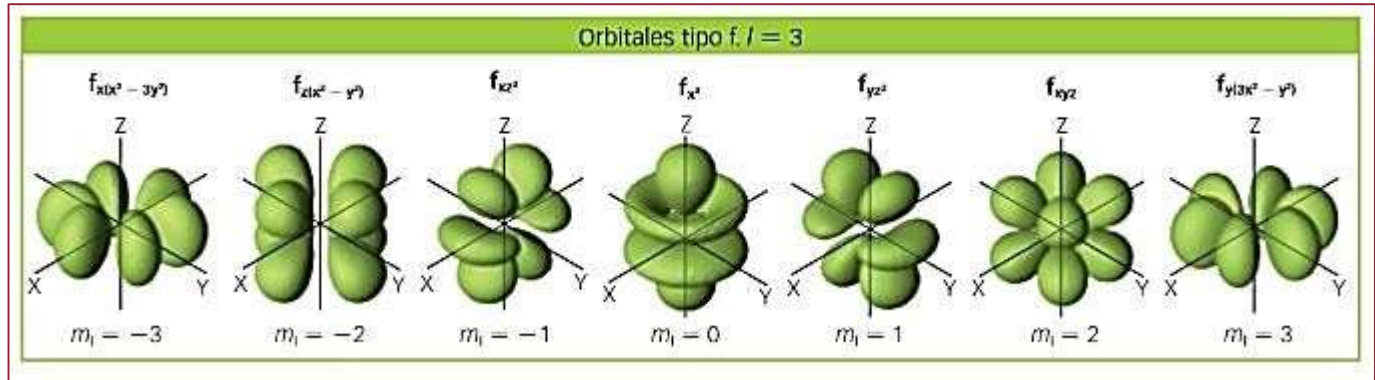
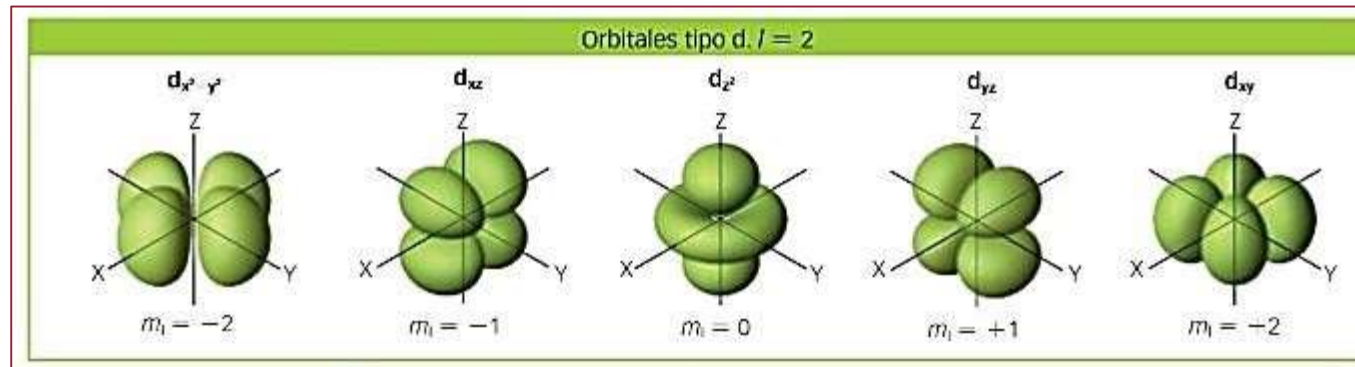
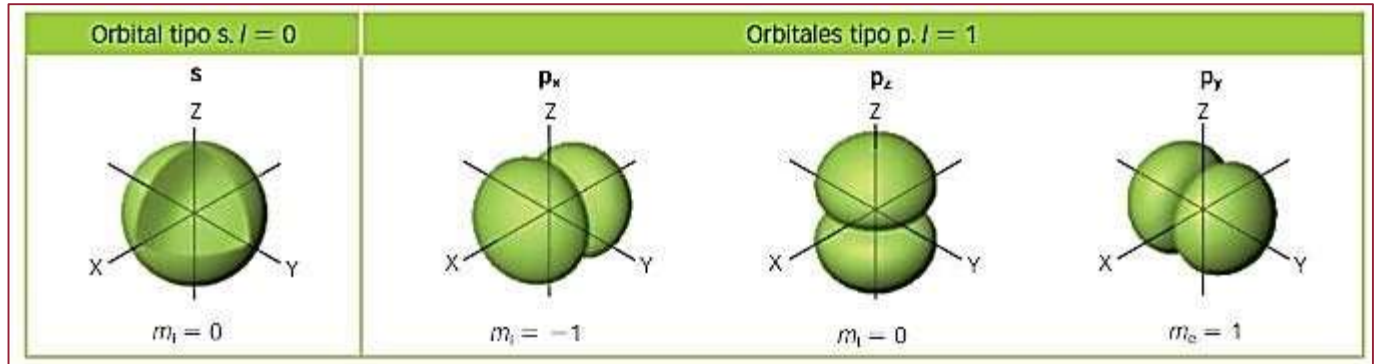
Números cuánticos (I)

- ✓ Cada electrón queda definido por cuatro números cuánticos:
 - Tres primeros números (n, l, m_l) = soluciones ecuación de Schrödinger = definición orbital.
 - Cuarto número (m_s) = explicación espectros = caracterización electrón.

Nº cuántico	Valores	Función
Principal (n)	1, 2, 3, 4, ...	Energía del nivel principal Tamaño del orbital
Secundario (l)	0 a ($n - 1$)	Energía del subnivel Forma del orbital
Magnético (m_l)	- l a $+ l$	Orientación espacial del subnivel en el campo magnético del átomo
Espín (m_s)	$+1/2, - 1/2$	Sentido de giro del electrón alrededor del núcleo

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Números cuánticos (II)



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Orbitales y números cuánticos

n	l	Tipo de orbital	m	m_s	Número de orbitales	Número máximo de electrones ($2n^2$)
1	0	1s	0	$-1/2$ o $+1/2$	1	2
2	0	2s	0	$-1/2$ o $+1/2$	1	2
	1	2p	$-1, 0, 1$	$-1/2$ o $+1/2$	3	6
3	0	3s	0	$-1/2$ o $+1/2$	1	2
	1	3p	$-1, 0, 1$	$-1/2$ o $+1/2$	3	6
	2	3d	$-2, -1, 0, 1, 2$	$-1/2$ o $+1/2$	5	10
4	0	4s	0	$-1/2$ o $+1/2$	1	2
	1	4p	$-1, 0, 1$	$-1/2$ o $+1/2$	3	6
	2	4d	$-2, -1, 0, 1, 2$	$-1/2$ o $+1/2$	5	10
	3	4f	$-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	$-1/2$ o $+1/2$	7	14

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Configuración electrónica de un átomo (I)

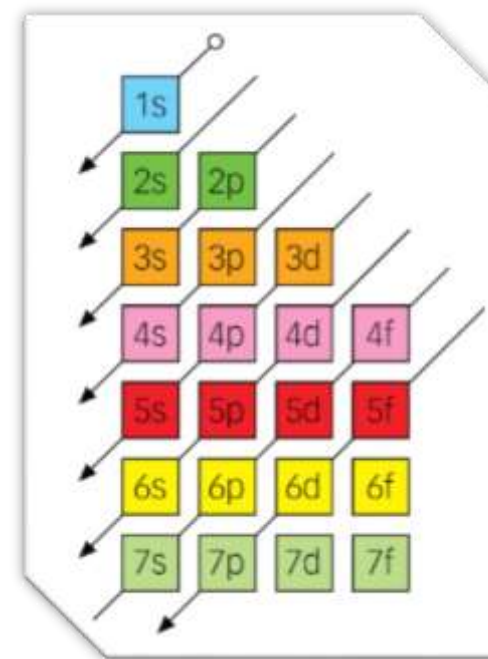
- ✓ La configuración electrónica de un átomo hace referencia a la distribución de los electrones entre los diferentes orbitales del mismo.
- ✓ Los electrones van a ocupar los orbitales con el fin de minimizar la energía; la configuración de mínima energía recibe el nombre de configuración electrónica fundamental.
- ✓ La configuración electrónica de un átomo se basa en una serie de principios y reglas:
 - 1) Principio de mínima energía o proceso Aufbau.
 - 2) Principio de exclusión de Pauli.
 - 3) Regla de máxima multiplicidad de Hund.



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Configuración electrónica de un átomo (II) – Energía de los orbitales

- ✓ La energía de los orbitales depende principalmente del valor de n y también de l :
 - Dentro de un mismo nivel n , los orbitales (s, p, d, f) tendrán energía diferente: $s < p < d < f$
 - Dentro de un mismo subnivel l , los orbitales tendrán la misma energía; se habla de orbitales degenerados (p_x, p_y, p_z).
- ✓ El diagrama de Möeller es una regla nemotécnica que permite recordar el orden relativo de energías en un átomo polielectrónico:



UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Configuración electrónica de un átomo (III)

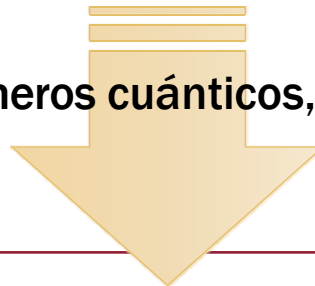
1) Principio de mínima energía (proceso Aufbau):

Los electrones ocupan los subniveles de un átomo por orden creciente de energía.

2) Principio de exclusión de Pauli:

Dos electrones en un mismo átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales.

Un orbital está definido por tres números cuánticos, pero un electrón está definido por cuatro.



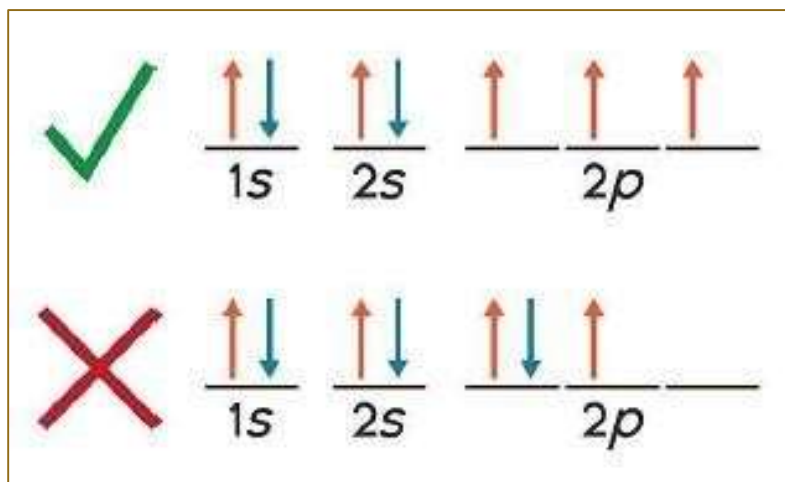
Solo podrá haber, como máximo, dos electrones con espín opuesto en cada orbital.

UD1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA

Configuración electrónica de un átomo (IV)

3) Regla de máxima multiplicidad de Hund:

Los electrones que ocupan orbitales degenerados (misma energía), lo hacen ocupando el mayor número de ellos, ubicándose de la forma más desapareada posible.



Los orbitales 2p, por ejemplo, presentan la misma energía, al compartir los mismos números cuántos n y l .



Para llenarlos, primeramente cada orbital p dispondrá de un electrón, para luego completarse con el segundo electrón.