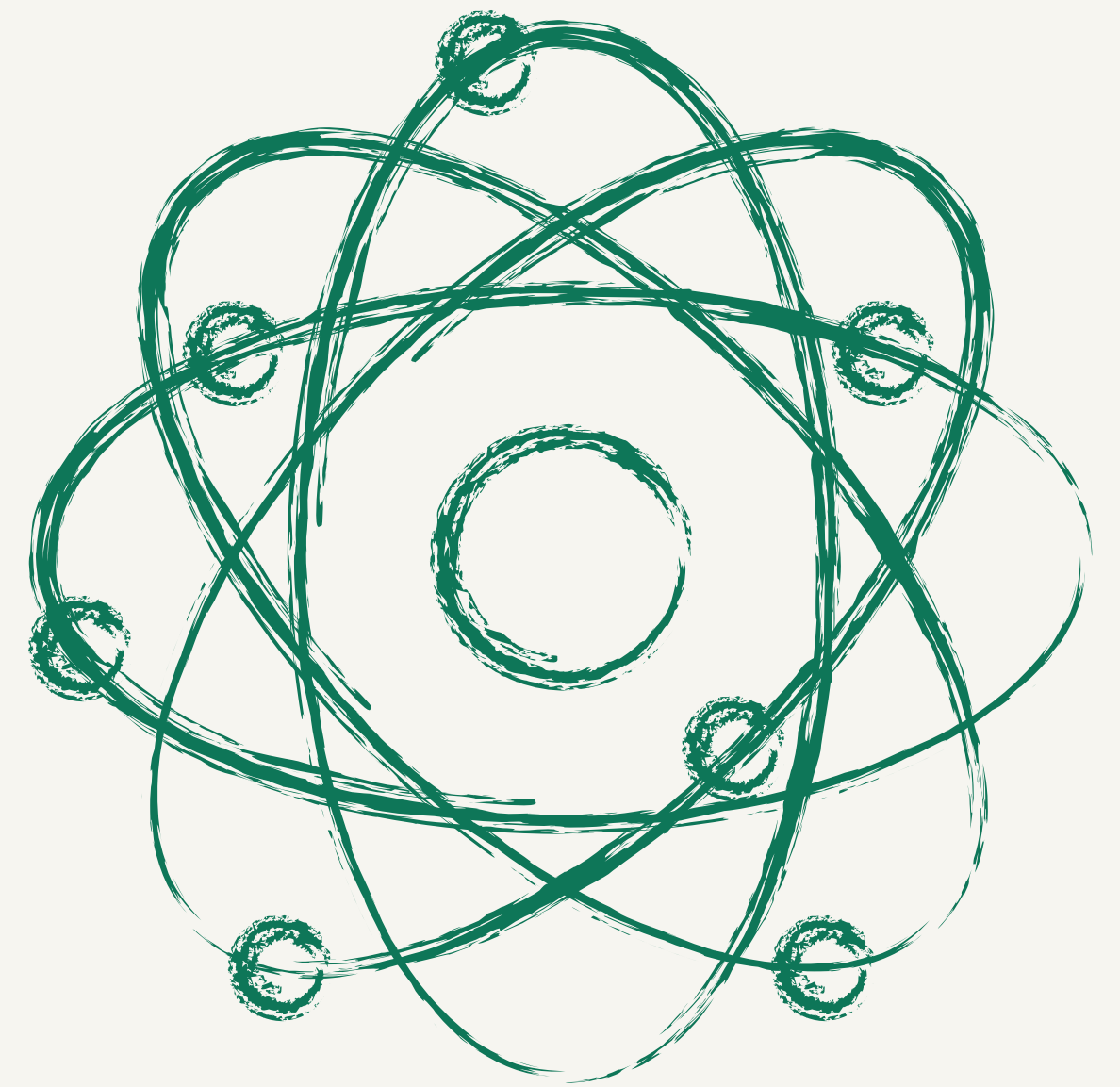


Vd 1.- Estructura

ATÓMICA



ÍNDICE

A) Historia de los modelos atómicos :
Dalton, Thomson, Rutherford

B) Bases físicas para nuevos modelos:

Teoría fotónica de Planck, Radiación electromagnética! Efecto fotoeléctrico, espectros atómicos

C) Modelo atómico de Bohr:

Estudio órbitas de Bohr (radio, energía, interpretación)

Limitaciones modelo Bohr : Modelo Sommerfeld, Efectos Zeeman y de espín, Números cuántico.

D) Modelos mecanocúntcos: Principio dualidad onda corpúsculo, ondas asociadas a electrones, principio incertidumbre, Ecuación onda Schrödinger, orbitales atómicos. Significado números cuánticos.

Importancia de los modelos atómicos

1 Clave para entender la estructura y comportamiento de la materia.

2 Posibilidad de explorar los principios fundamentales de la naturaleza.

3 Son fundamentales en campos como química, física y biología.

4 Desarrollo de tecnologías que mejoran nuestra calidad de vida.



¿De qué está hecha la materia?

Varía a lo largo de la historia.

Leucipio de Mileto y Demócrito fueron los primeros atomistas, contradicen las ideas de Platón y Aristóteles, que suponían la materia como un continuo. Esta teoría prevalece un tiempo.

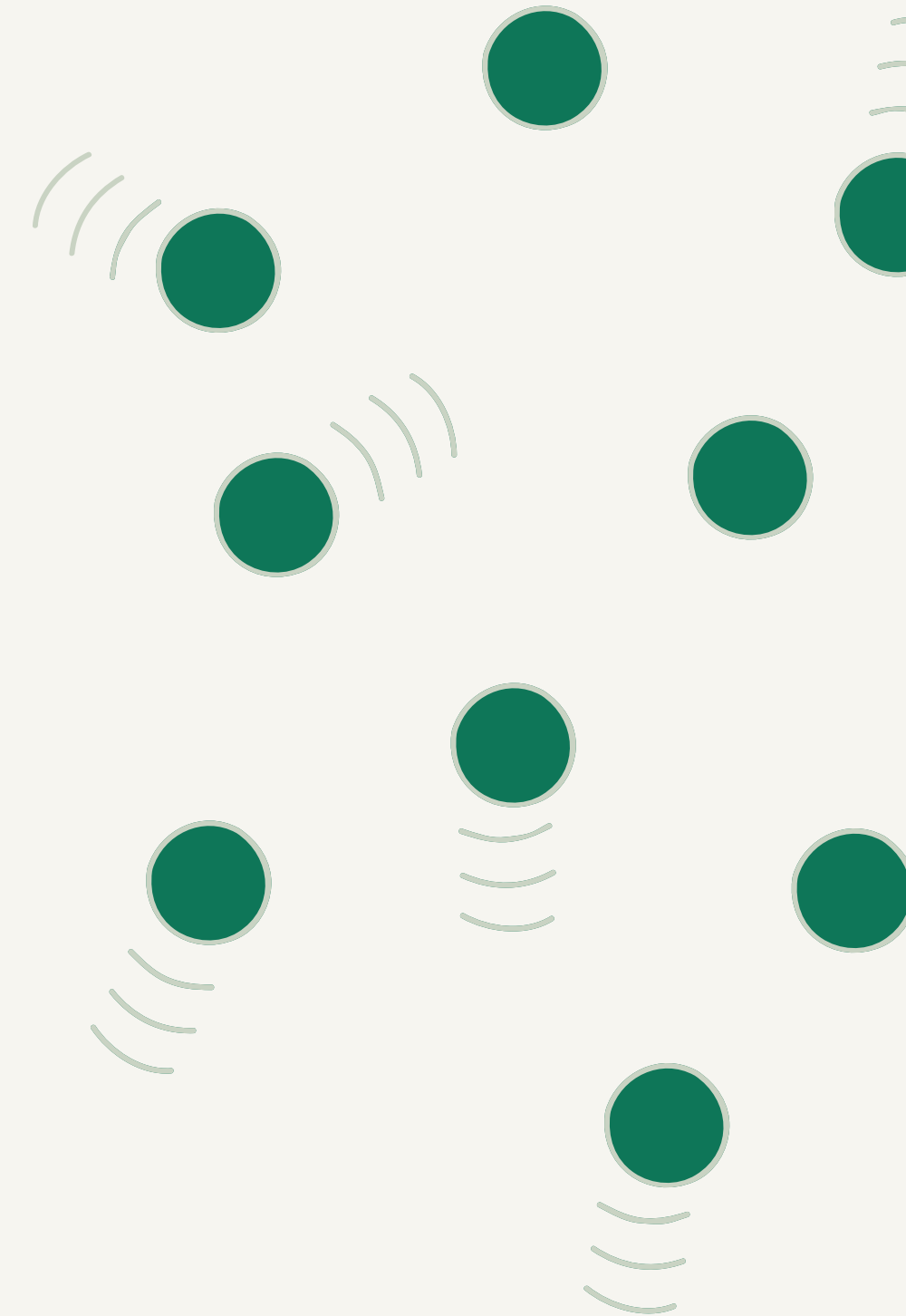


1803

Primera teoría atómica: Modelo atómico de Dalton

- 1 Los elementos están compuestos por átomos indivisibles que no se modifican en los cambios químicos.
- 2 Los átomos de un mismo elemento son iguales en masa, tamaño y propiedades físicas y químicas.
- 3 Los compuestos se forman por la unión de átomos de diferentes elementos según una relación numérica constante y sencilla.

En las reacciones químicas , la masa permanece siempre constante.

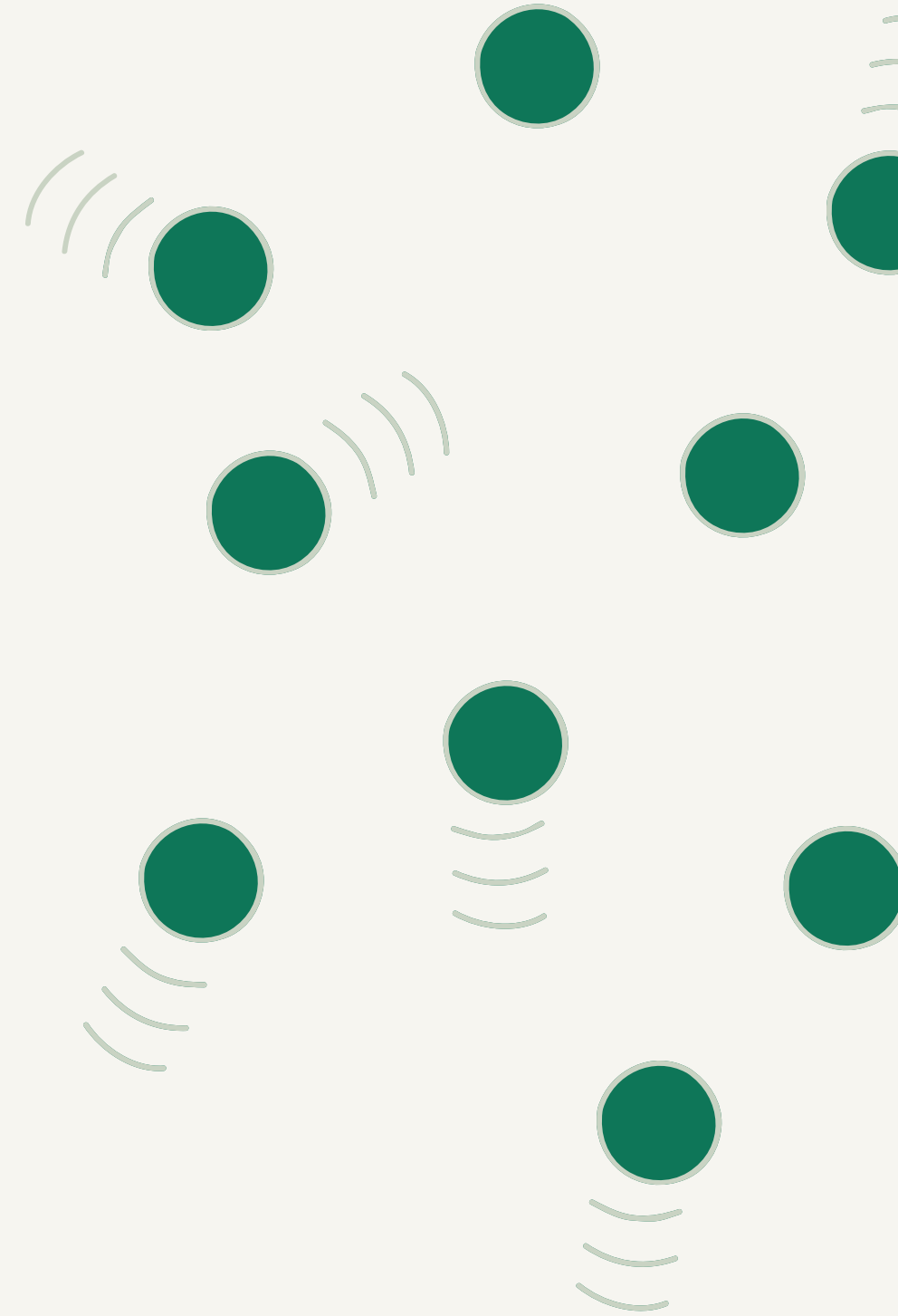


1803

Primera teoría atómica: Modelo atómico de Dalton

Dalton idea unos símbolos químicos para la representación de cada uno de los elementos.

Berzelius propuso emplear la inicial de su nombre, una o dos letras (p. 14)



Descubrimiento del electrón. Modelo atómico de Thomson

1897

El empleo de los rayos catódicos en un tubo de descargas modificado, da lugar al descubrimiento del electrón.

De forma similar posteriormente se detecta el protón.

Realizó distintos experimentos para analizar el comportamiento de los rayos catódicos en presencia de los campos eléctricos y magnéticos. Modificaba la intensidad y la polaridad del campo.

Vídeo Experimento Thomson

Así pudo medir la relación carga/ masa del electrón.

Experimento Rober Millikan

Permite determinar el valor de la carga del electrón.

Emplea una cámara de gotas de aceite.

Experimento Millikan

Conocidas la carga y la relación carga/masa fue posible determinar la masa del electrón y del protón.

Partículas subatómicas básicas		
	Carga (C)	Masa (Kg)
Electrón	$-1,6 \cdot 10^{-19}$	$9,109 \cdot 10^{-31}$
Protón	$+1,6 \cdot 10^{-19}$	$1,673 \cdot 10^{-27}$

La masa del protón es muy superior a la del electrón y constituye aproximadamente una unidad de masa atómica (u)

Modelo atómica de Thomson

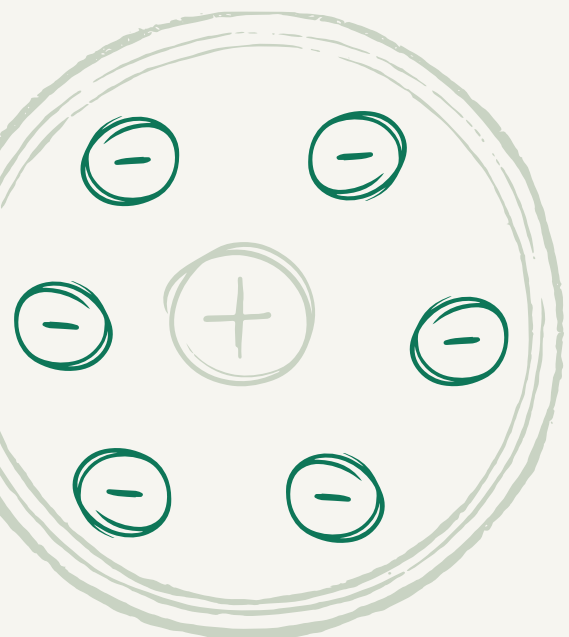
Se basa en el hecho de que la materia se presenta , normalmente, en estado eléctricamente neutro y es aparentemente densa y sin oquedades.

MODELO DE PUDIN DE PASAS

Se propone un átomos formado por un **conglomerado** de protones y electrones en igual número.

Casi todo el volumen está **formado por los protones y los electrones estarían inmersos en ellos.**

Los **protones actúan como aglomerante y evitan las repulsiones electroestáticas.**



RESUMEN:

Todos los átomos contienen pequeñas partículas subatómicas con carga negativa, llamadas electrones **1**

En este modelo, los electrones se distribuyen uniformemente en una esfera de carga positiva. **2**

Los átomos son eléctricamente neutros y la carga negativa de los electrones **equilibra la carga** positiva de la esfera. **3**

1911

Modelo atómica de Rutherford o modelo planetario

Tras los descubrimientos de los procesos radiactivos de Becquerel y el matrimonio Curie surgen nuevas investigaciones.

Rutherford propone investigar la estructura de los átomos bombardeando una finísima lámina de oro con partículas alfa.

EXPERIMENTO

Las conclusiones sacadas fueron que el átomo estaría formado por un núcleo , en el que se encontraría toda la masa (protones +) y los electrones girarían entorno a este como hacen los planetas alrededor del Sol.



1911

Modelo atómica de Rutherford o modelo planetario

- 1 Sugirió que los átomos tienen un núcleo central denso y pequeño en comparación con el tamaño total del átomo.
- 2 Los electrones orbitan alrededor del núcleo a distancias relativamente grandes.
- 3 El experimento de la lámina de oro permitió determinar la existencia del núcleo atómico y la distribución de carga en el átomo.



1911

Modelo atómica de Rutherford o modelo planetario

En este modelo la fuerza de atracción electrostática actuaba como fuerza centrípeta.

No existían órbita predefinidas, cualquier distancia de los electrones al núcleo era válida siempre y cuando se cumpliese que ...

$$F_e = F_c \text{ (deducción)}$$



1911

Modelo atómica de Rutherford o modelo planetario

Inconvenientes:

- 1.- El movimiento de los electrones debía obedecer las leyes de la física clásica, por lo tanto al girar debería emitir radiación electromagnética y como consecuencia perder energía, hasta precipitarse contra el núcleo, y esto no pasaba.
- 2.- No era capaz de justificar los espectros atómicos.



Bases físicas para un nuevo modelo



Nuevos descubrimientos físicos como la **teoría fotónica de Planck**, el **efecto fotoeléctrico** y el **estudio de los espectros atómicos** hicieron necesario el desarrollo de un nuevo modelo.

Se basa en el modelo nucleado de Rutherford , pero intentando explicar estos nuevos fenómenos.

Teoría fotónica de Planck

1900

Fue el resultado de los estudios sobre **la radiación del cuerpo negro**.

El cuerpo negro es un emisor ideal de radiación (absorbe toda la radiación que le llega y la radiación que emite solo depende de la temperatura del propio cuerpo).

Por ejemplo, el color del hierro depende de la temperatura a la que se encuentra.

El cuerpo negro ideal no existe , pero podemos simularlo mediante un objeto hueco, en el que se pinta de negro su interior y se le hace una pequeña abertura por la que va a penetrar poca radiación del exterior.



Teoría fotónica de Planck

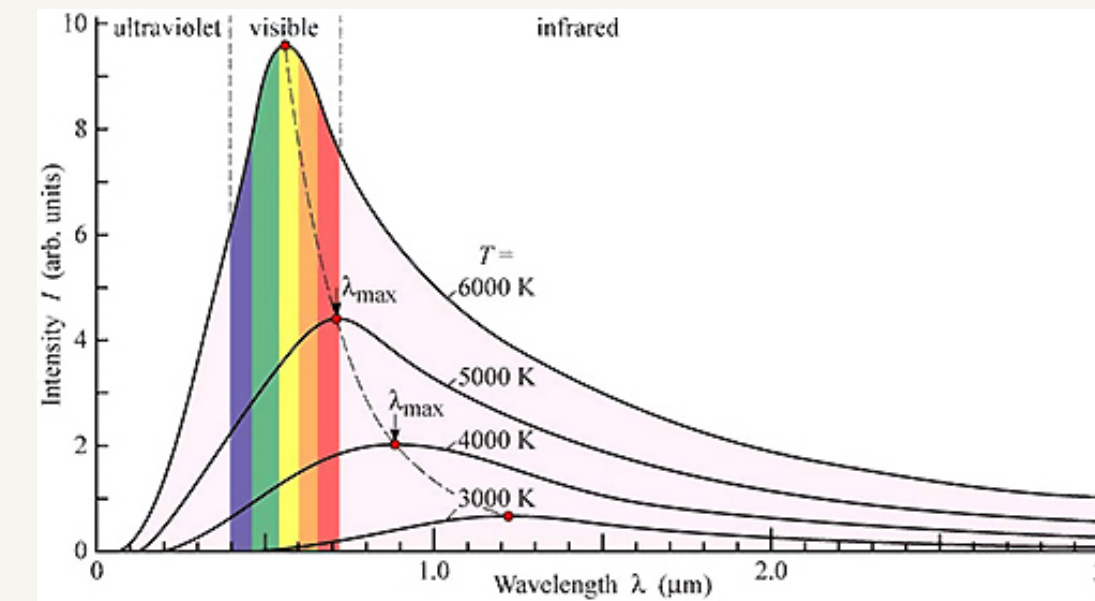
1900

La experiencia se basaba en calentar el cuerpo a distintas temperaturas y estudiar las frecuencias de radiación emitidas en cada caso.

Resultados: a medida que aumentaba la Temperatura del cuerpo emisor, el pico de intensidad emitida se producía a una frecuencia cada vez más alta.

Planck intentó desarrollar una fórmula que explicase la gráfica obtenida.

La teoría clásica decía que “al aumentar la temperatura debía cambiar la intensidad de la radiación, pero NO la frecuencia”



Teoría fotónica de Planck

1900

Conclusión de Planck:

“La **radiación electromagnética NO ES UN CONTÍNUO**”.

Propone que esa **radiación es emitida en forma de pequeños paquetes de energía, cuantos de radiación o FOTONES**, cuya energía dependía de la frecuencia de la radiación según la fórmula

$$E = hf$$

donde h = constante de Planck= $6,63 \cdot 10^{-34}$ J s

f = frecuencia de la radiación electromagnética= frecuencia de un fotón concreto

Teoría fotónica de Planck

1900

Hipótesis de Planck:

- Un fotón es un cuanto de radiación electromagnética, o cuanto de energía. Se trata de una partícula de energía en estado puro, QUE NO TIENE MASA.
- La energía de un foton depende de su frecuencia (f) , así cuanto mayor sea esta frecuencia , mayor será la energía que transporta.

Recordar que a mayor frecuencia, menor longitud de onda

- La energía de una radiación es la energía de cada uno de sus fotones, mientras que su intensidad viene determinada por el número de fotones.

Datos a recordar

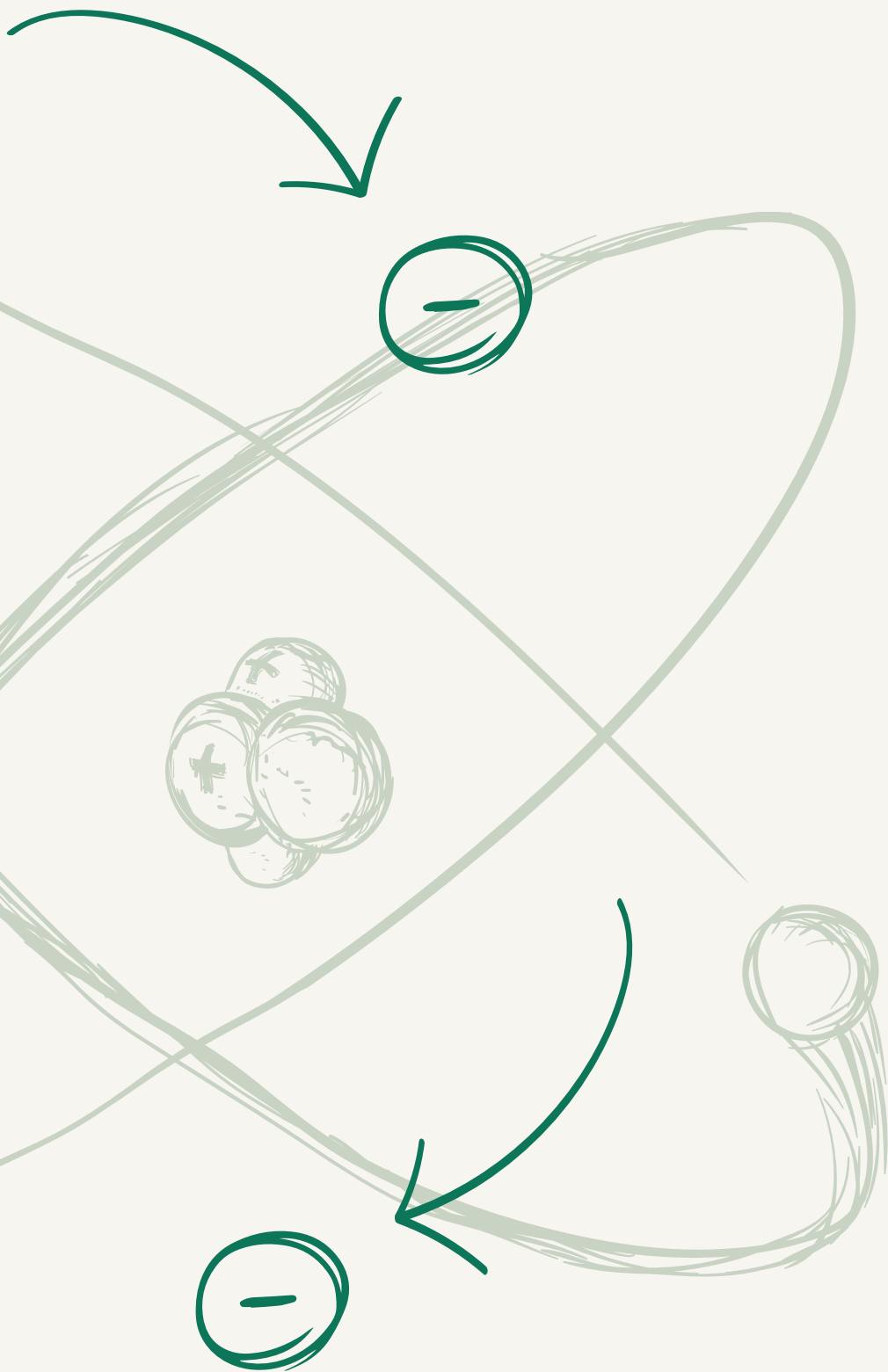
La frecuencia (f) se mide en Hz ($1/s$, s^{-1} , ciclos/s)

La longitud de onda (λ) se mide en unidades de longitud (m, nm o $\text{\AA}$)

$$\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

Electrones saltarines

1913



Los electrones circulan en órbitas alrededor del núcleo.

1

Cada órbita tiene una energía definida y los electrones pueden saltar entre ellas.

2

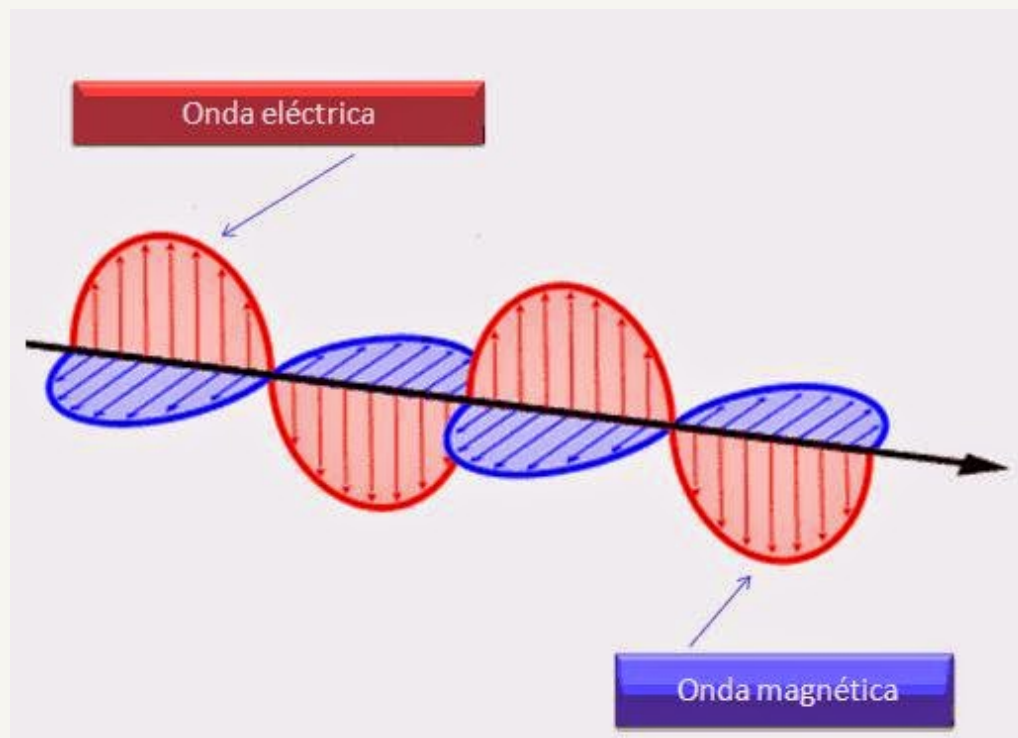
El modelo explicó la emisión y absorción de energía en los átomos.

3

La radiación electromagnética

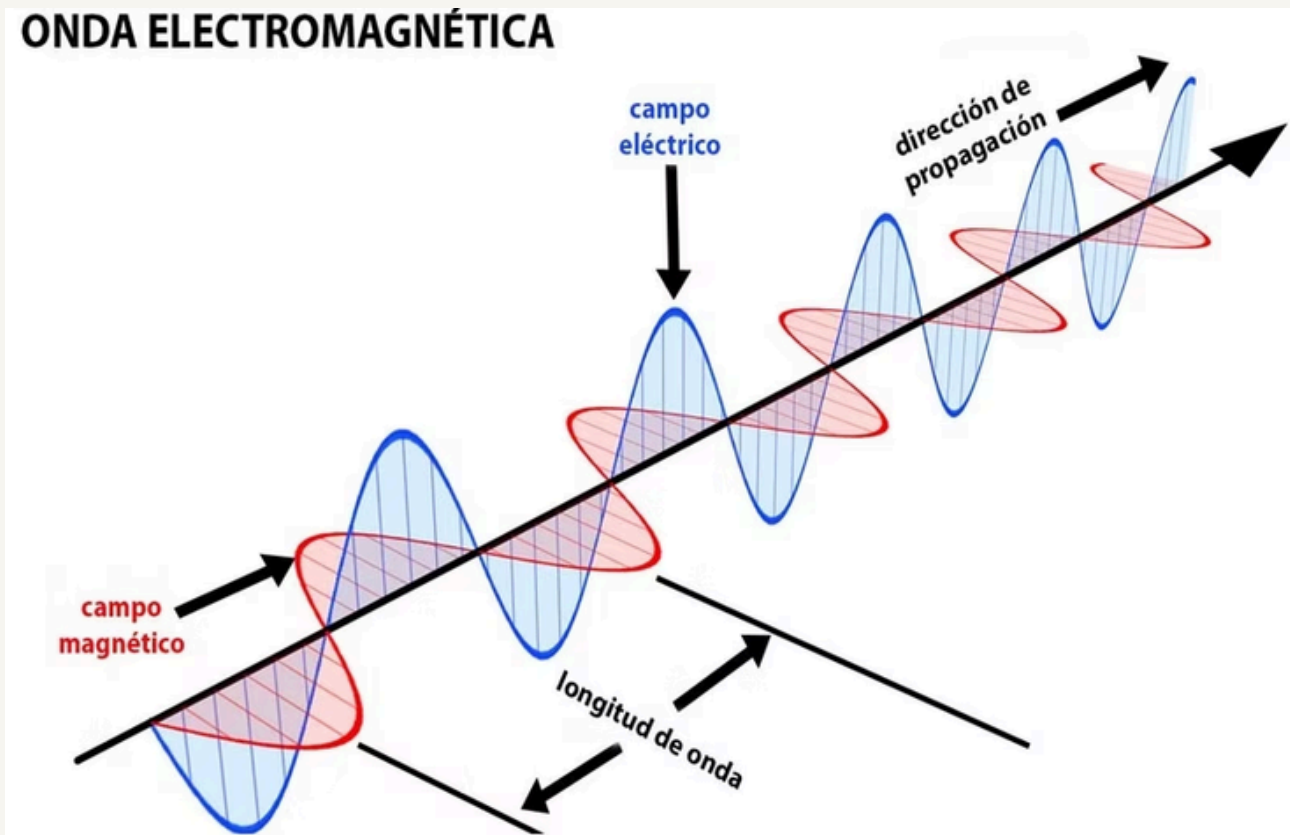
La radiación electromagnética es energía que viaja en forma de ondas eléctricas y magnéticas, es decir, está compuesta por un campo eléctrico y un campo magnético oscilantes. Estos se propagan vibrando en direcciones perpendiculares entre sí.

LA LUZ ES UNA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA



Esta se propaga mediante una onda que se desplaza a velocidad constante, y esta depende del medio por el que se propaga (vacío, aire, agua...)

La radiación electromagnética



La velocidad constante a la que se propaga la onda se denomina Velocidad de la luz, c o v , que en el vacío es 300 000 km/s o $3 \cdot 10^8$ m/s

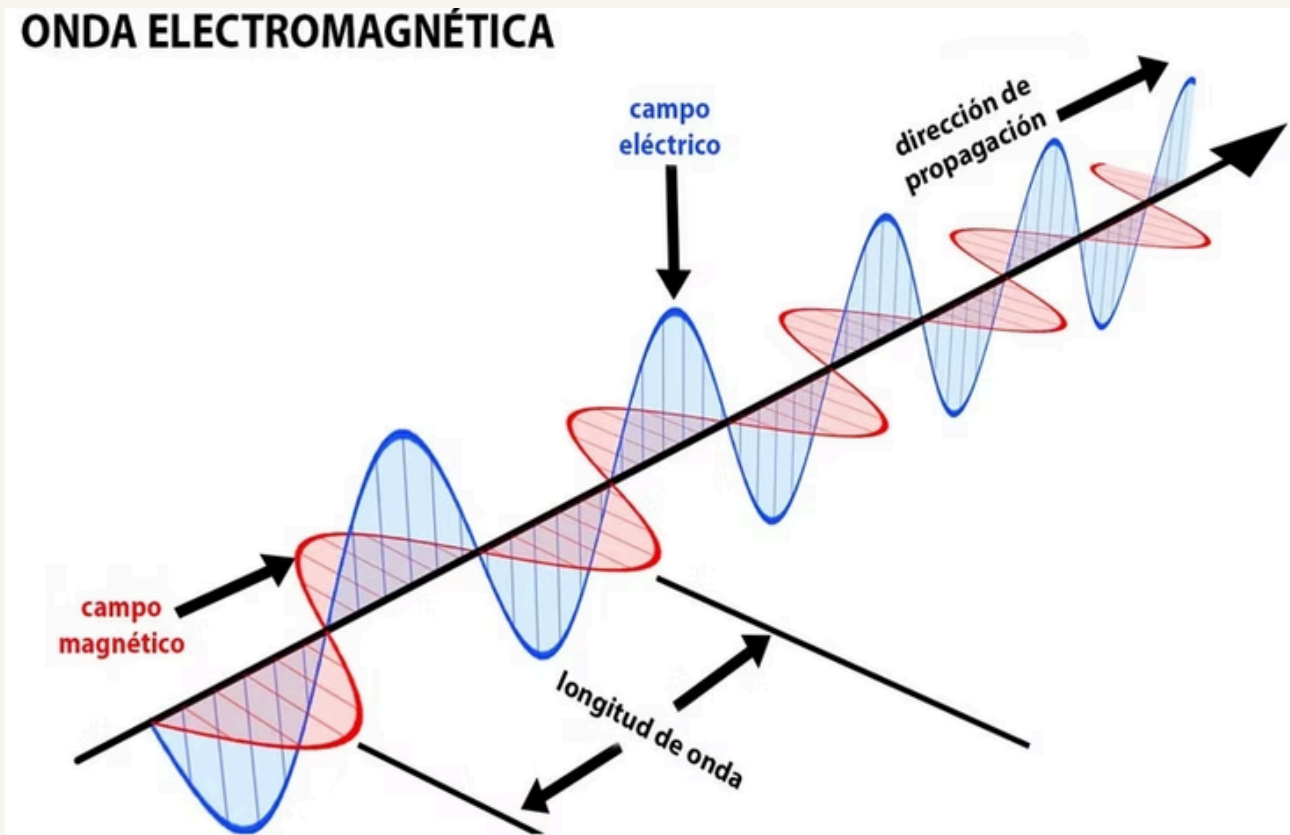
Elementos de una onda:

- Longitud de onda (λ), distancia que separa un punto del siguiente en el mismo estado de vibración.
- Período (T), tiempo que tarda la perturbación en avanzar una longitud de onda.
- Frecuencia (f), número de longitudes de onda que avanza la perturbación en un segundo. ES LA INVERSA DEL PERÍODO.

$$v = \frac{\lambda}{T}$$

$$v = \lambda \cdot f$$

La radiación electromagnética



La velocidad constante a la que se propaga la onda se denomina Velocidad de la luz, c o v , que en el vacío es 300 000 km/s o $3 \cdot 10^8$ m/s

Elementos de una onda:

- Longitud de onda (λ), distancia que separa un punto del siguiente en el mismo estado de vibración.
- Período (T), tiempo que tarda la perturbación en avanzar una longitud de onda.
- Frecuencia (f), número de longitudes de onda que avanza la perturbación en un segundo. ES LA INVERSA DEL PERÍODO.

$$v = \frac{\lambda}{T}$$

$$v = \lambda \cdot f$$

Como v es constante, a mayor frecuencia menor será la longitud de onda y viceversa.

El efecto fotoeléctrico

Fenómeno descrito por Hertz en 1887, estudiado por Lenard y explicado en 1905 por Albert Einstein.

Se fundamenta en la teoría fotónica de Planck.

Usos y aplicaciones :

- en células fotoeléctricas que abren o cierran circuitos eléctricos para abrir o cerrar puertas...
- Paneles fotovoltaicos para generar corriente eléctrica cuando la luz del sol incide sobre un semiconductor.

UN HAZ DE LUZ DE UNA ENERGÍA DETERMINADA PROVOCA UN MOVIMIENTO DE ELECTRONES

El efecto fotoeléctrico

PAU

Efecto fotoeléctrico simulación (Phet colorado)

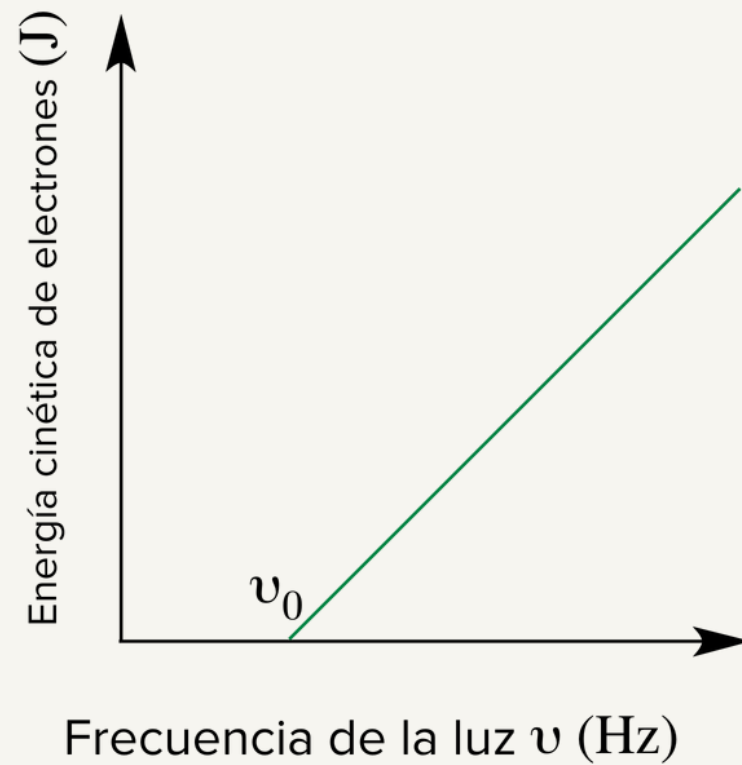
- Iluminamos la placa con radiaciones de distintas frecuencias.
- Cuando la radiación llega al átomo y tiene suficiente energía arranca un electrón y este sale del átomo.
- En ocasiones además del electrón, se expulsa un fotón de menor energía (solo sucede cuando el electrón NO está en la última capa del átomo). En este caso el electrón más externo pasa a ocupar el hueco que deja el fotón y se libera una radiación de energía equivalente a la diferencia energética entre los dos niveles de esa transición electrónica.

El efecto fotoeléctrico

Algunas cuestiones no podía ser explicadas sin tener en cuenta la teoría fotónica de Planck:

- No hay emisión de fotoelectrones si la frecuencia de radiación incidente es menor que el valor de la FRECUENCIA UMBRAL. Esta depende del tipo de metal.
- Cuando la frecuencia de la radiación era superior al valor umbral, se produce una corriente cuya intensidad es proporcional a la intensidad de la radiación incidente. El número de fotoelectrones emitidos es proporcional al número de fotones de la radiación incidente. ES UN PROCESO INSTANTÁNEO.
- Los fotoelectrones arrancados tiene una energía cinética máxima que depende solo de la frecuencia de la radiación incidente, no de su intensidad. DEPENDE DE LA ENERGÍA DE LOS FOTONES INCIDENTES, NO DE LA CANTIDAD DE FOTONES QUE INCIDEN SOBRE EL METAL.

El efecto fotoeléctrico



Si la frecuencia de la radiación incidente está por debajo de la frecuencia umbral , NO SE PRODUCE EFECTO FOTOELÉCTRICO.

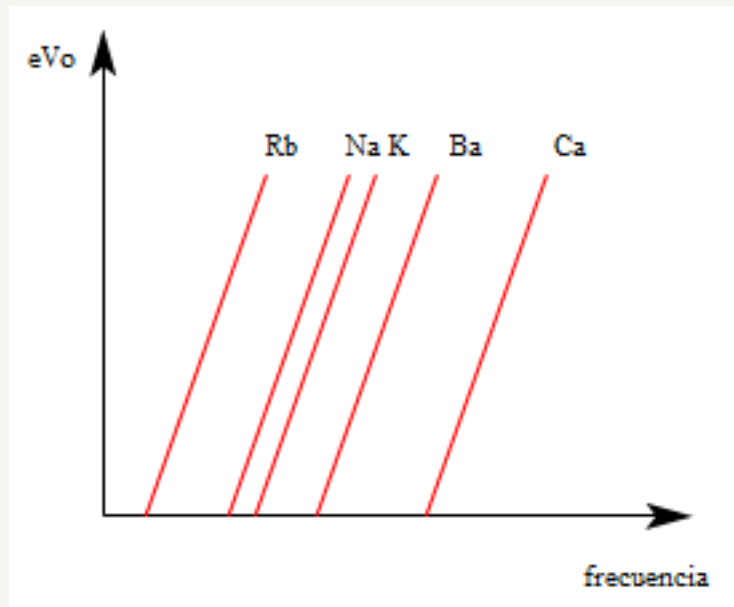
En este caso el valor de E_c sería cero, lo que implica que NO SE ARRANCAN ELECTRONES DEL METAL.

Por encima de la frecuencia umbral , la E_c de los electrones arrancados es proporcional a la frecuencia de la radiación incidente.

Si aumenta la intensidad aumenta el número de electrones emitidos , NO su energía.

Explicación Einstein del efecto fotoeléctrico

PAU



- Se parte de la idea de que los electrones en los átomos del metal están en diferentes niveles de energía.
- La radiación incidente consigue extraer electrones cuando los fotones incidentes logran vencer la energía que los mantenía unidos al núcleo, el fotón supera el mínimo, y dota al electrón de E_c .

Cuanto más externos están los electrones más E_c alcanzan, mientras que los que están cerca del núcleo (pozo de energía), adquieren menos E_c .

Esa energía cinética se puede medir mediante el potencial de frenado, que frena los electrones hasta dejarlos sin movimiento

Explicación Einstein del efecto fotoeléctrico

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2}mv^2$$

Ecuación de Planck – Einstein del efecto fotoeléctrico

Energía
incidente

=

Trabajo de
extracción

+

Energía
cinética

$$h \cdot \nu = h \cdot \nu_0 + Ec$$

$$h \cdot \frac{c}{\lambda} = h \cdot \frac{c}{\lambda_0} + \frac{1}{2} m \cdot v^2$$

El trabajo de extracción es la energía mínima necesaria para que se produzca la extracción de electrones del metal.

La frecuencia umbral es la frecuencia mínima que ha de tener un fotón incidente para producir la extracción de electrones del metal. Está asociada con una longitud de onda umbral.

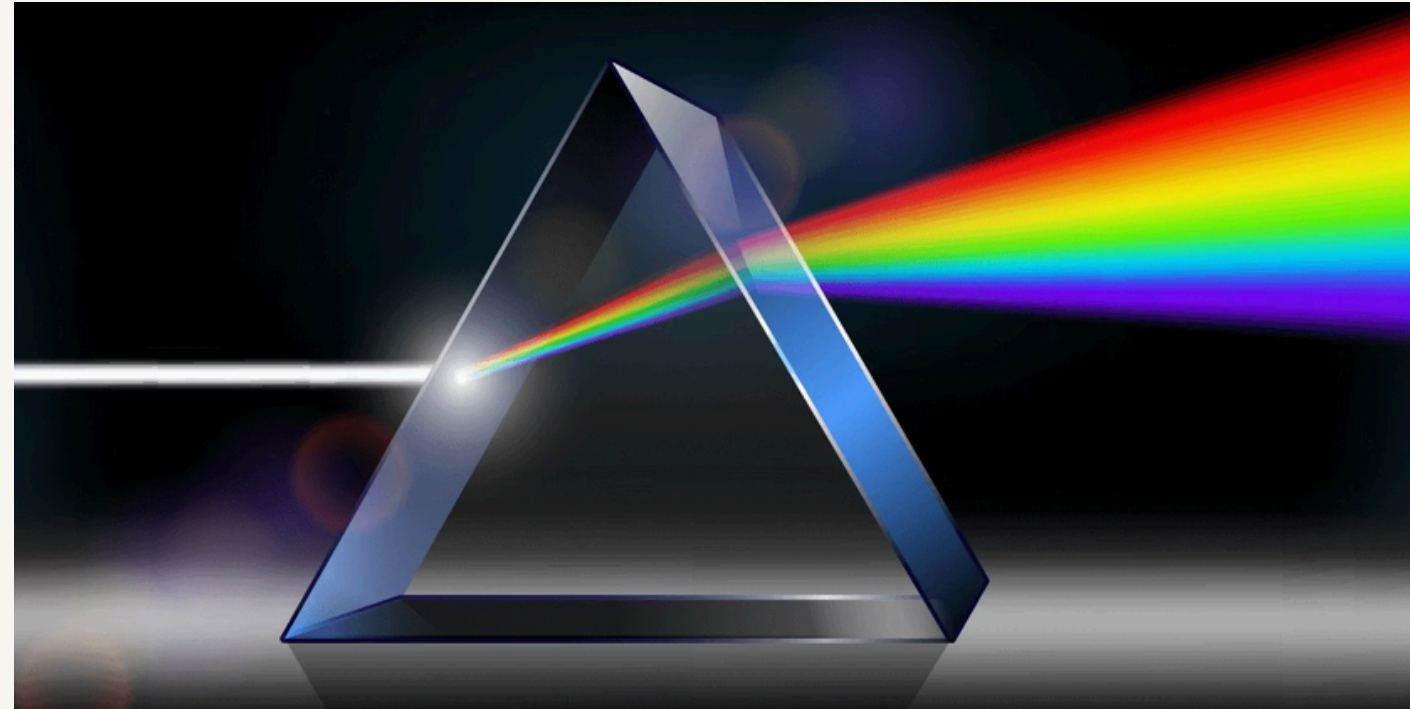
El trabajo de extracción DEPENDE DEL TIPO DE METAL.

Explicación Einstein del efecto fotoeléctrico

PAU

Ejercicios p. 21 : Resuelto, 1, 2 y 3

Los espectros atómicos



El arco iris(radiaciones sencillas) es el espectro visible de la luz del sol (radiación compleja) que se obtiene cuando un de sus rayos atraviesan pequeñas gotas de agua o un prisma de vidrio.

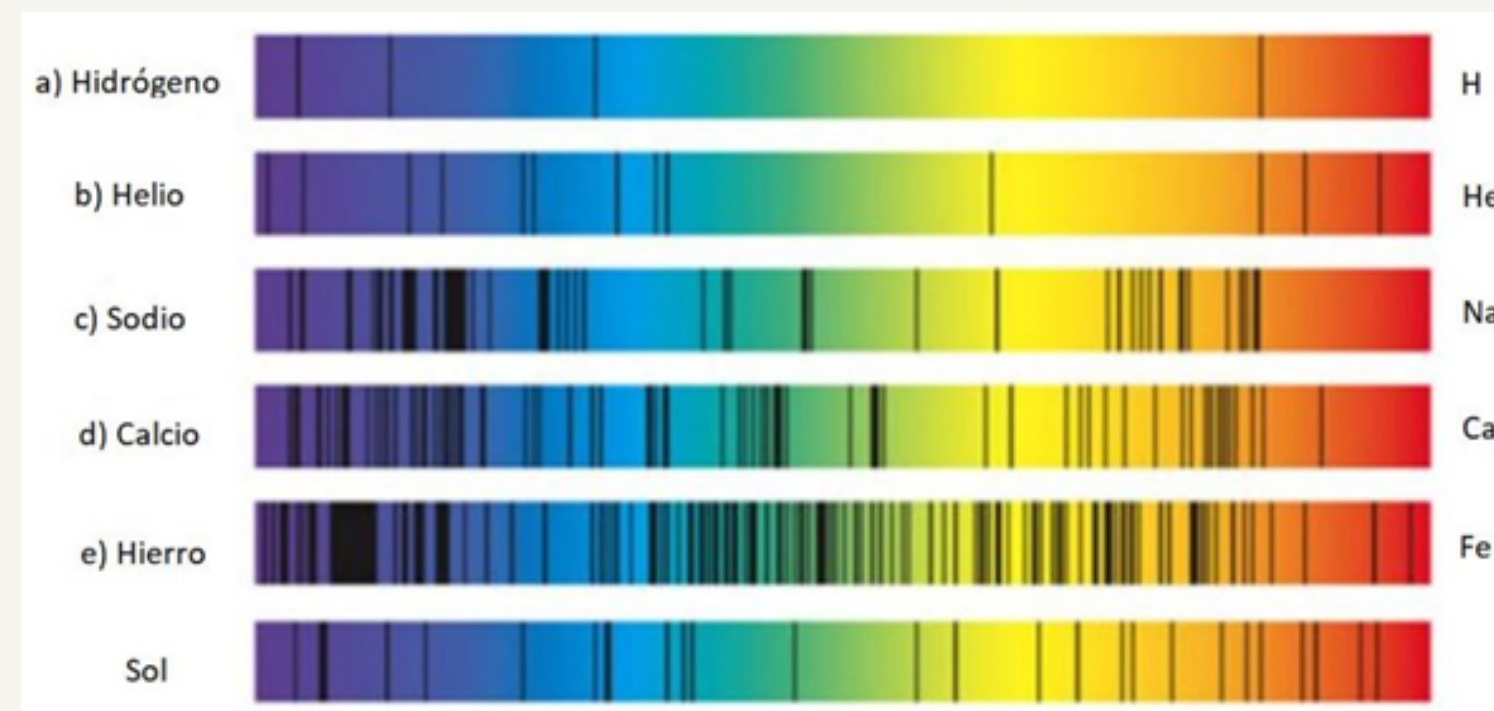
El haz de luz sufre refracción y se dispersa, provocando la separación de las diferentes tonalidades, del rojo al violeta

Los espectros atómicos

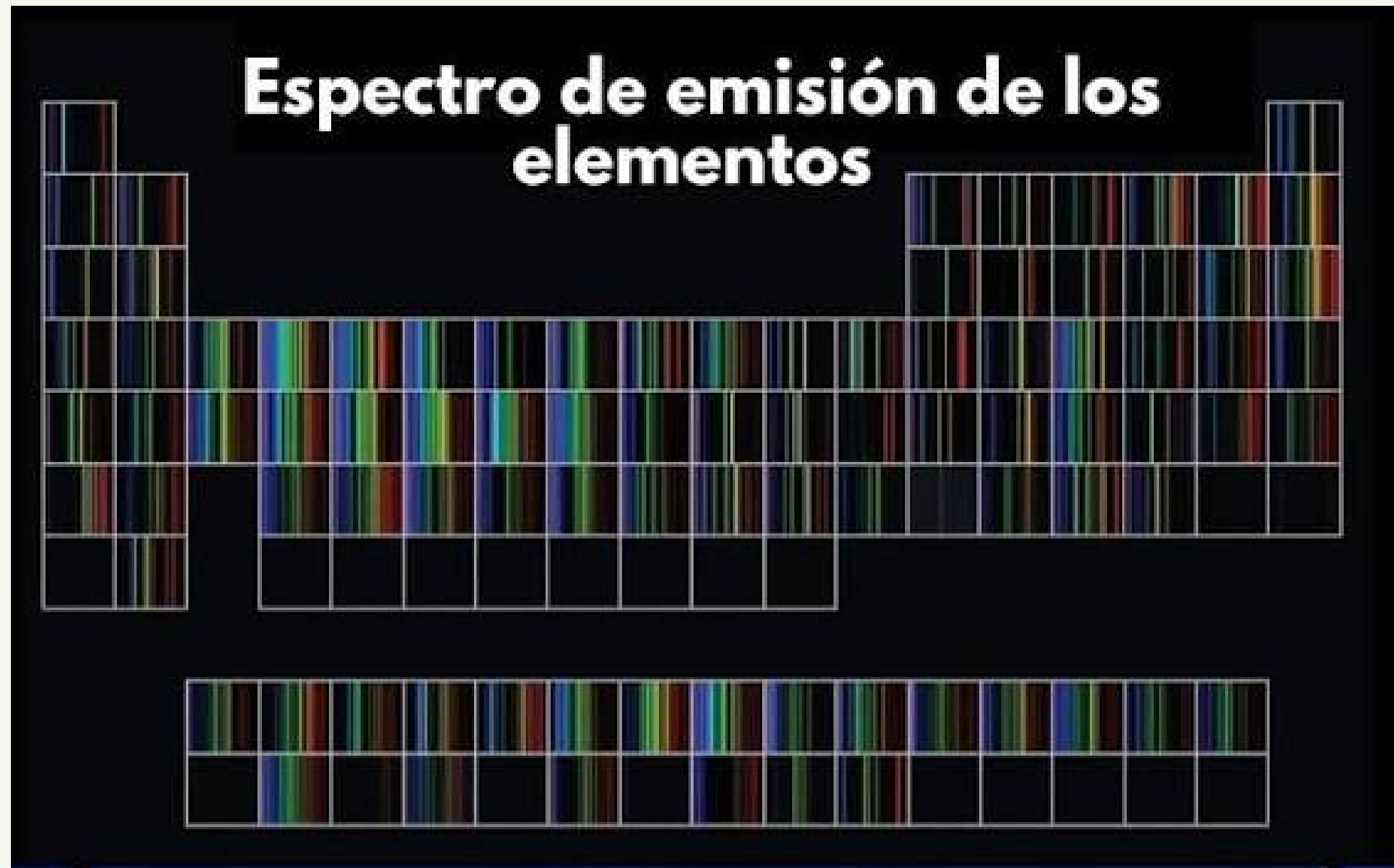
El espectro atómico de un elemento se consigue analizando la radiación que procede de una muestra de una sustancia que contenga dicho elemento.

Para ello se hace pasar la radiación por un prisma, se difracta y las radiaciones sencillas se recogen sobre una pantalla o placa fotográfica.

Por métodos espectroscópicos se puede identificar los elementos químicos que componen la muestra, pues las rayas que aparecen son propias de cada elemento.

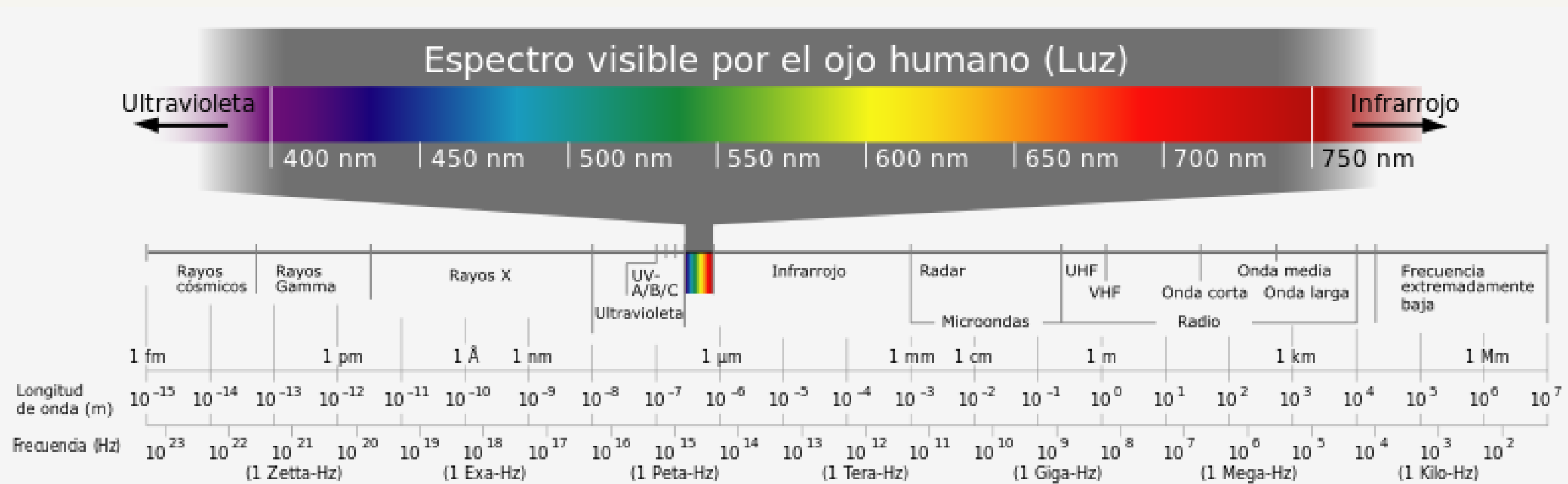


Los espectros atómicos



Espectro electromagnético

Abarca todas las frecuencias posibles de la radiación electromagnética y se divide en diversas zonas.



La zona visible es muy limitada.

LA FRECUENCIA Y LA LONGITUD DE ONDA SON INVERSAS, A MAYOR FRECUENCIA MENOR LONGITUD Y VICEVERSA

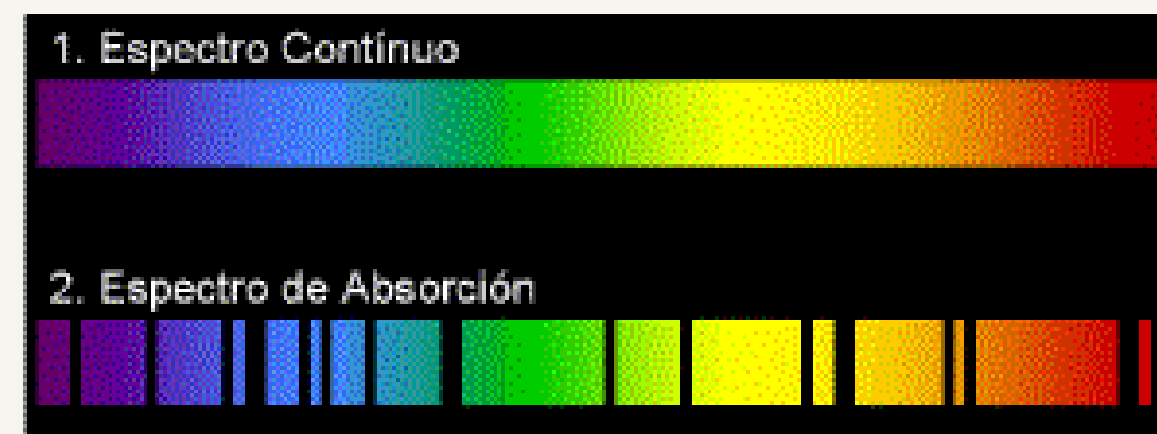
Espectros de absorción y emisión

Se diferencian en la forma de obtener la radiación cuyo espectro se va a analizar.

En el espectro de absorción se analiza la radiación absorbida por una muestra.

SE ilumina la muestra con una radiación compleja (luz blanca) y se analiza la radiación que resulta tras atravesarla. SOLO PARA MUESTRAS EN ESTADO LÍQUIDO O GAS. PARA MUESTRAS SÓLIDAS, se analiza el espectro que surge tras reflejarse en la muestras.

Los átomos habrán absorbido alguna radiación , y se verán líneas negras en las zonas donde se absorbió la radiación



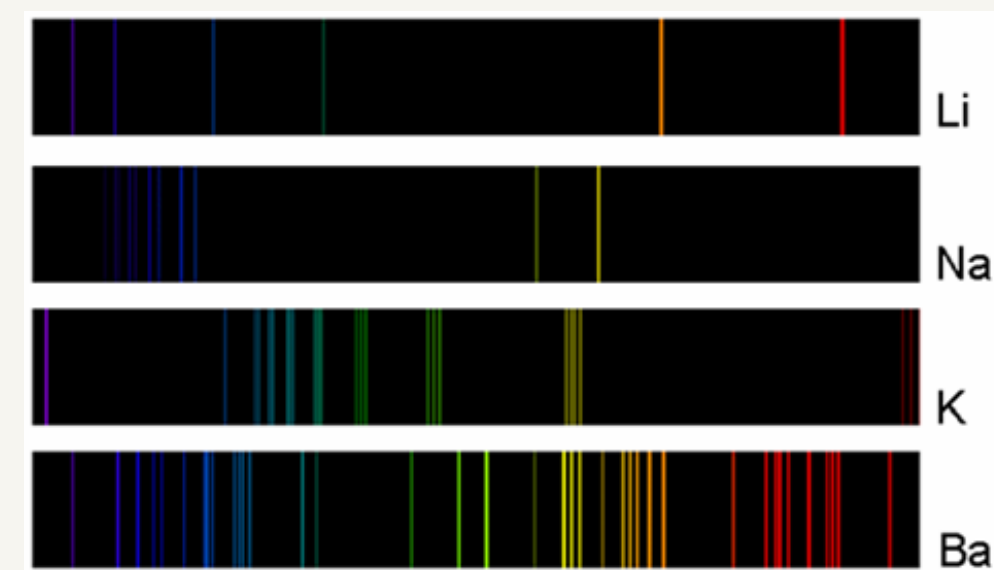
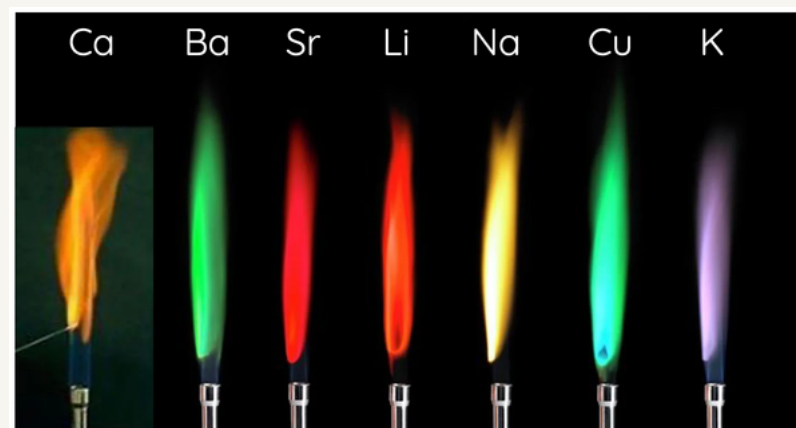
Espectros de absorción y emisión

En el espectro de emisión se analiza la radiación emitida por una muestra sobre la cual NO incide ninguna radiación externa.

En estos casos deberemos excitar sus átomos sometiendo la muestra al calor de una llama o a una descarga eléctrica.

En este caso veremos líneas de color sobre un fondo negro, que corresponden con las radiaciones que emiten los átomos excitados cuando sus electrones pasan a un estado menor de energía.

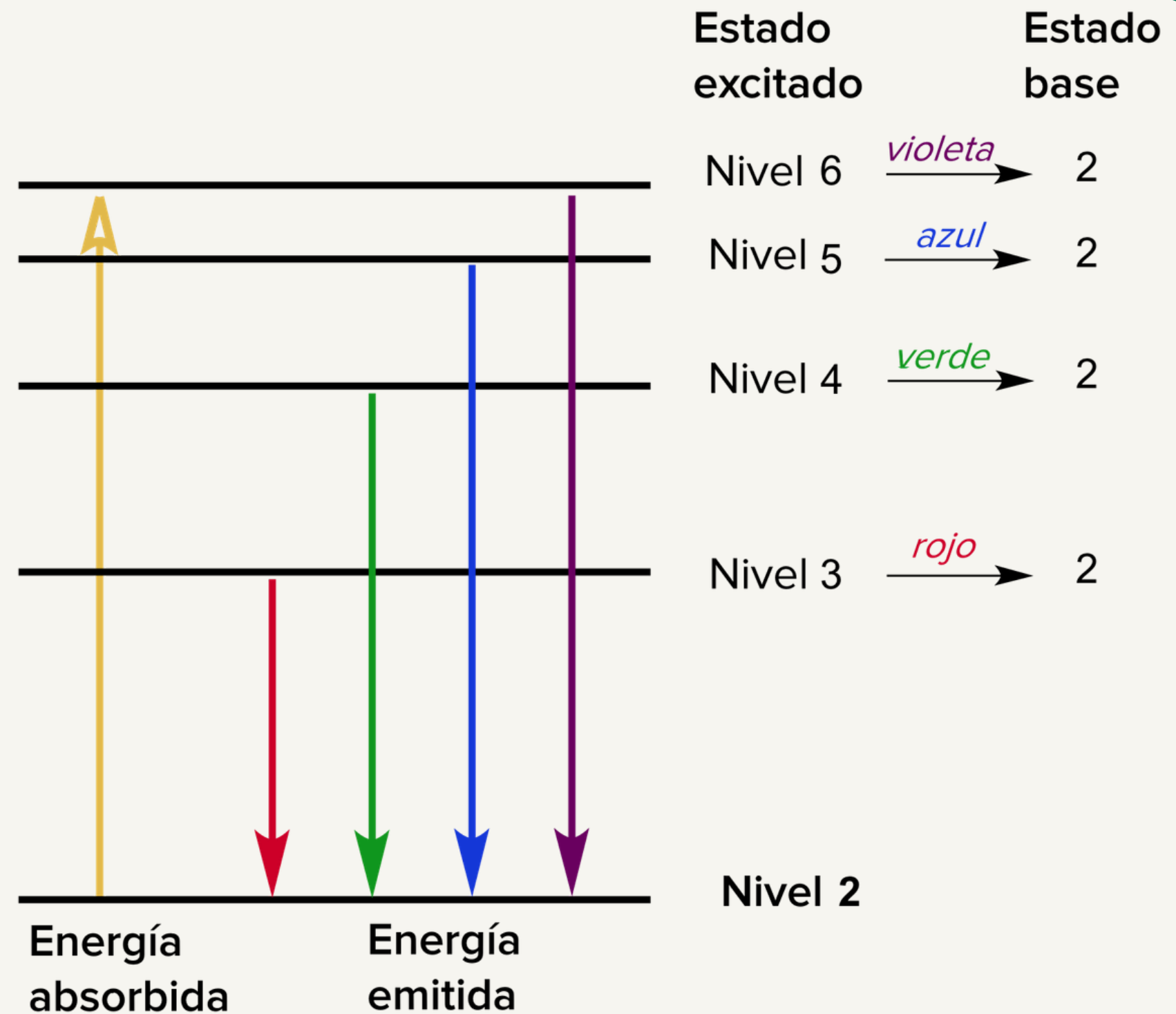
En sustancias fluorescentes este proceso se produce de forma espontánea.



Espectros de absorción y emisión

La energía que emiten los átomos es la que liberan sus electrones excitados cuando vuelven a su estado fundamental de menor energía.

Así el espectro de absorción de un átomo es el complementario del de emisión.

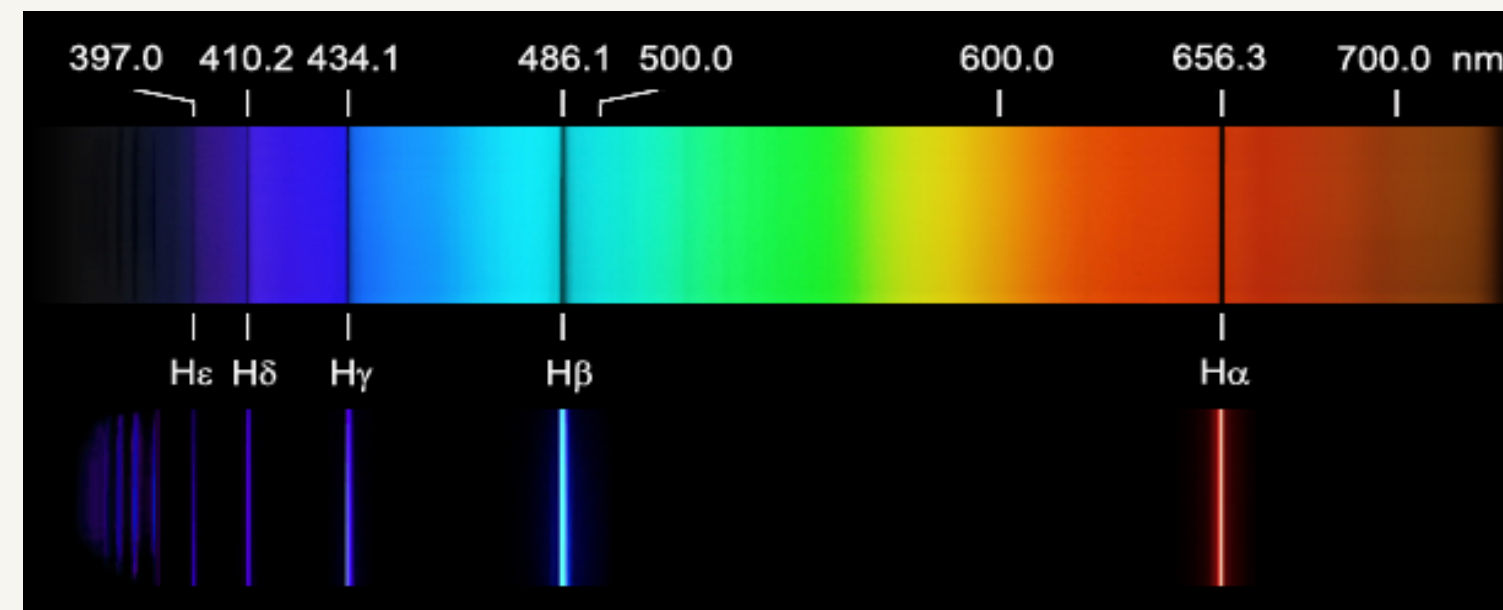


Seríes espectrales

En el siglo XIX, se observa una serie de regularidades en los espectros atómicos, pues en las longitudes de onda o sus frecuencias obedecía a una ecuación.

Una serie espectral es un grupo de rayas de un espectro atómico completo.

El primero en encontrar una fue Balmer y fue el átomo de hidrógeno



Serías espectrales

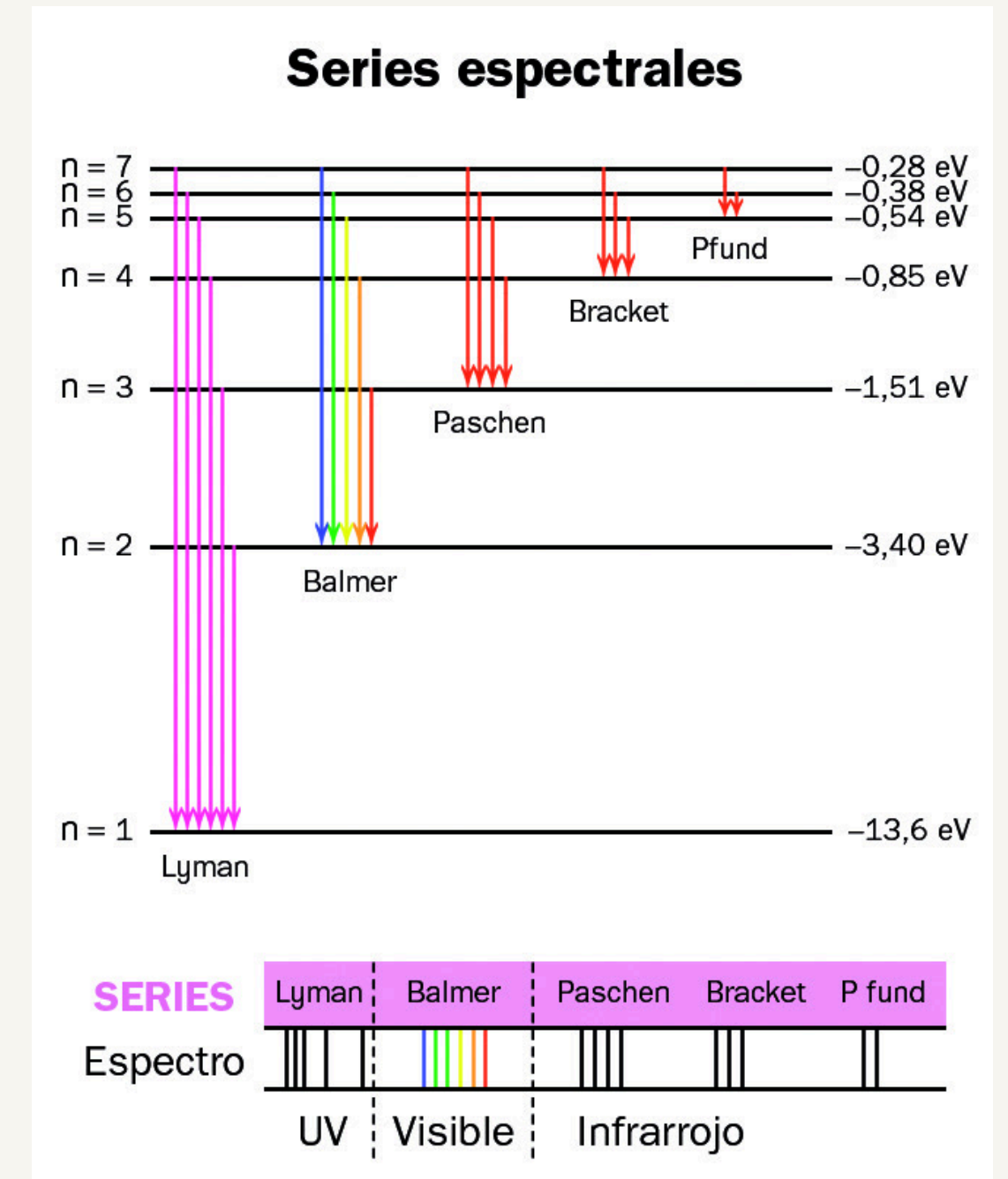
Ecuación espectral general , o Fórmula de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

n toma los valores naturales 3, 4, 5, y R es la CONSTANTE DE RYDBERG, de valor $10\,967\,757,6 \text{ m}^{-1}$ para el átomo de Hidrógeno

Ecuaciones series espectrales

<i>Serie de Lyman:</i>	$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$(n = 2, 3, 4, \dots)$
<i>Serie de Paschen:</i>	$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$(n = 4, 5, 6, \dots)$
<i>Serie de Brackett:</i>	$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$(n = 5, 6, 7, \dots)$
<i>Serie de Pfund:</i>	$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$(n = 6, 7, 8, \dots)$



Modelo atómico de Bohr

Surge tras la necesidad de poder justificar los espectros atómicos e introducir la idea de la cuantización (tras los estudios de Planck y el desarrollo del efecto fotoeléctrico).

Es un modelo cuántico pero con elementos de la física clásica.

Postulados :

- 1.- Los átomos tienen un núcleo donde se encuentra los protones y alrededor del cual giran los electrones en determinadas órbitas circulares y estables. Estos electrones NO EMITEN ENERGÍA EN SU MOVIMIENTO.
- 2.- Las órbitas permitidas para el electrón, que cumplen el criterio de estabilidad, son las que hacen que su momento angular (cantidad de rotación) sea un número entero de veces la cantidad $h/2\pi$

$$L = mvr = n\hbar \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

- 3.- Los electrones pueden pasar de una órbita a otra absorbiendo o emitiendo energía en forma de radiación electromagnética (luz o fotones)

p. 25 libro

Modelo atómico de Bohr

2º postulado

$$L = mvr = n\hbar$$

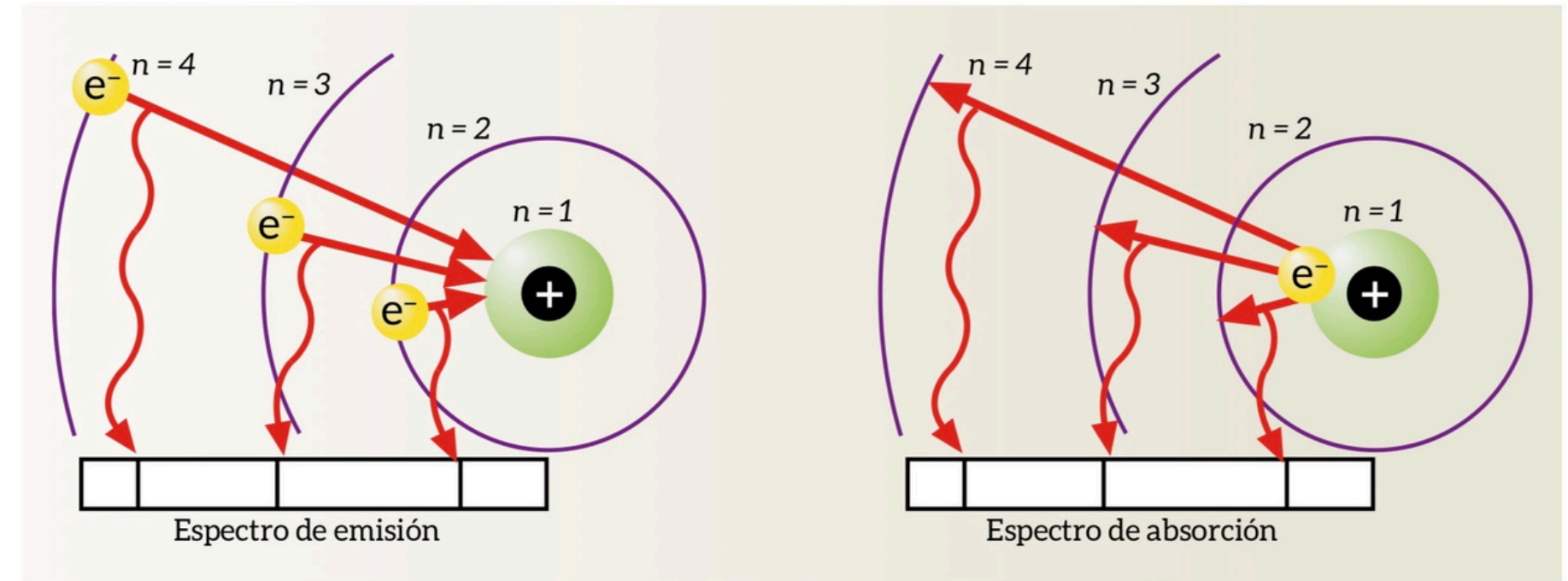
$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

m: masa del electrón
v: velocidad del electrón
r: radio de la órbita
h: constante de Planck

n: NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL (puede tomar valores 1,2,3... en función de si está en la 1º órbita, 2º,...)

3º postulado

$$|\Delta E| = h \cdot f = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$



Modelo atómico de Bohr

Según este modelo las órbitas que describen los electrones al girar entorno al núcleo están CUANTIZADAS, es decir, solo están permitidas determinadas distancias radiales. Como consecuencia, en cada órbita, la energía del electrón depende de un número cuántico, n .

Niveles	n	Número máximo de electrones
K	1	2
L	2	8
M	3	18
N	4	32
O	5	50
P	6	72

Modelo atómico de Bohr

Deducciones órbitas estables

Radio de las órbitas

Radio átomo de hidrógeno

Deducción energía de las órbitas.

Según Bohr, el radio de las órbitas es directamente proporcional al cuadrado del número cuántico principal.

La energía de estabilización, de valor negativo, es inversamente proporcional al cuadrado del número cuántico principal

Interpretación espectros según modelo de Bohr

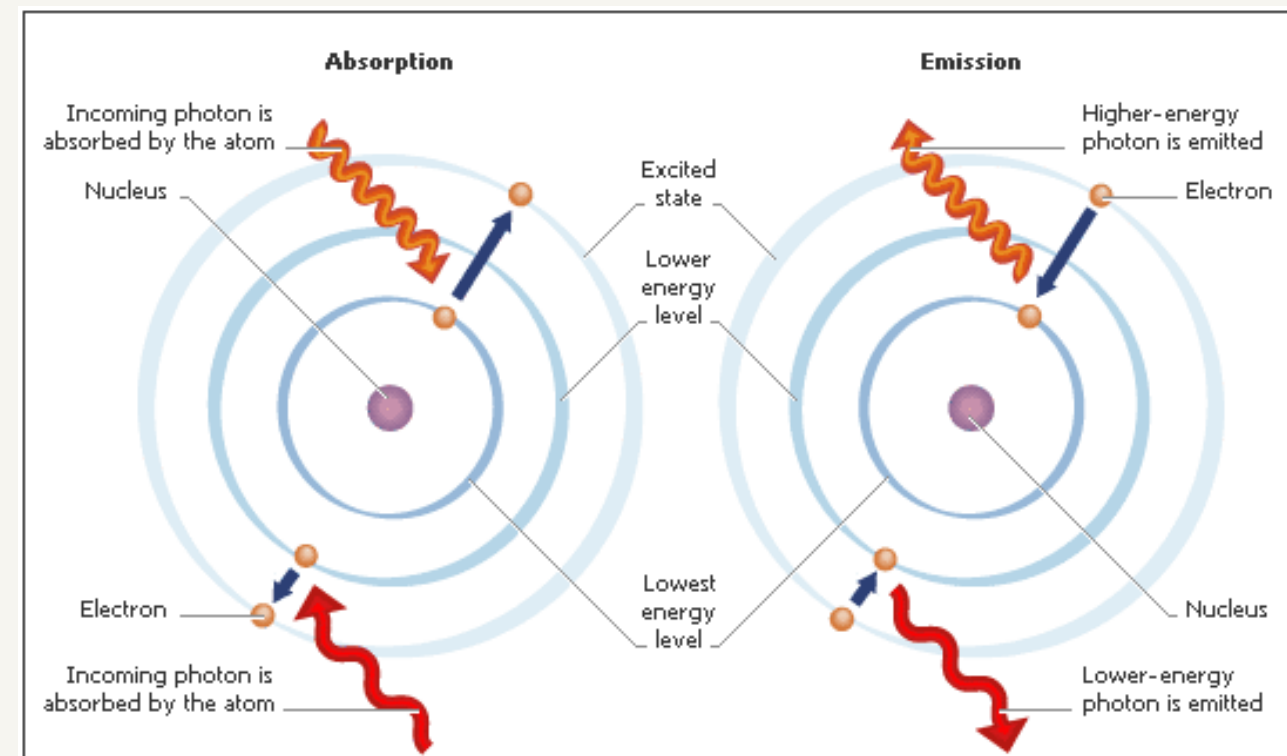
p 28

Ecuación espectral general , o Fórmula de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Despejando matemáticamente la ecuación anterior se analiza que el factor constante es igual a la constante de Rydberg, que además está en claser consonancia con el valor experimental.

Si se analiza un poco más en profundidas se obseva queel valor de la energía de un transito de absorción coincide con ese mismo tránsito pero de emisión, explicando el hecho de que sean espectros complementarios



Limitaciones modelo atómico de Bohr

A pesar de que permitía interpretar las series de rayas espectrales del átomo de hidrógeno, que explicaba los espectros de absorción y emisión, pronto surgieron nuevas limitaciones pues:

- No funcionaba para explicar átomos multielectrónicos.
- Aparecieron nuevas rayas en los espectros que no podían ser explicadas.
- No podía justificar la estabilidad de las órbitas y el hecho de que los electrones no emitiesen energía al girar entorno al núcleo.

Los principios de dualidad onda-corpúsculo y el principio de incertidumbre terminaban con la idea de órbita como lugar concreto en el que debería encontrarse los electrones.

Este modelo será un modelo medio camino entre la mecánica clásica y las nuevas ideas mecanocuánticas.

Modelo atómico de Sommerfeld

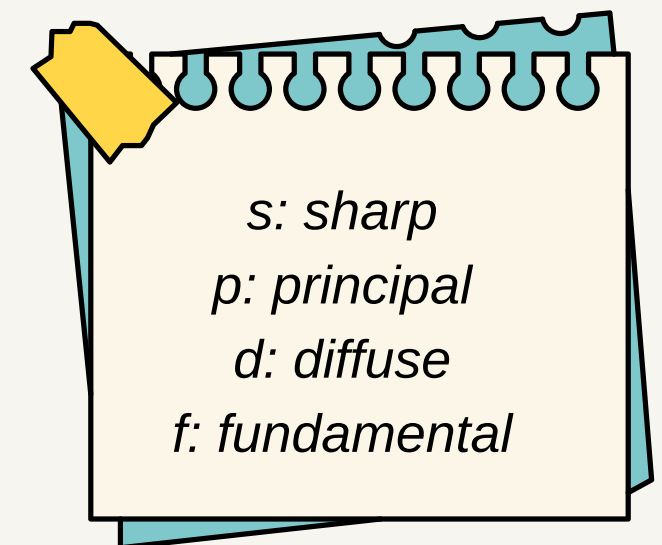
Al mejorar las técnicas espectroscópicas aparecen más rayas en los espectros, incluso se observa que algunas de ellas eran múltiples.

Sommerfeld propone que eso era debido a que cada órbita de Bohr constaba en realidad de varias órbitas, o tipos de órbitas, que se diferenciaban en la forma en la que los electrones orbitaban alrededor del núcleo.

Supone que existían órbitas circulares pero también elípticas, donde el núcleo se situaría en uno de sus focos.

Matemáticamente, se representan mediante un nuevo número cuántico, l, número cuántico secundario o azimutal.

Número cuántico principal	Cantidad de subniveles por nivel	
	Representación con letra	Representación numérica
1	s	0
2	s y p	0 y 1
3	s, p y d	0, 1 y 2
4	s, p, d y f	0, 1, 2 y 3



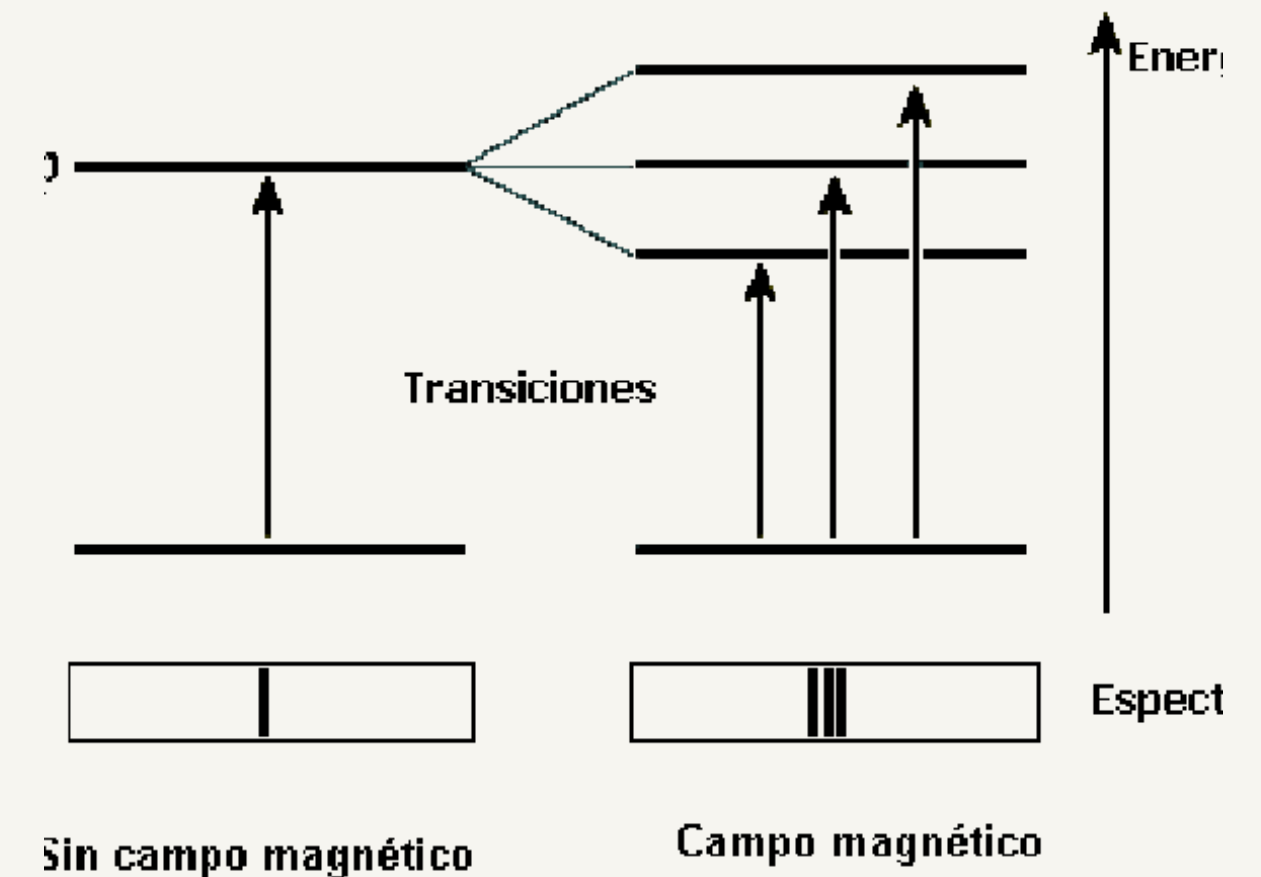
Efectos Zeeman y de espín

Zeeman observó que el espectro atómico de una muestra inmersa en un campo magnético contenía nuevas rayas, que surgían por el desdoblamiento de las originales.

Lorentz lo explicó posteriormente indicando que era debido a que en cada capa o nivel energético existían diferentes subcapas que se diferenciaban en la orientación espacial.

Los electrones interferían con el campo magnético externo de manera diversa y eso modificaba sus estados de energía.

Para explicarlo se introduce un nuevo número cuántico, m , número cuántico magnético, que podía adoptar valores de $+l$ a $-l$, pasando por el cero.



Efectos Zeeman y de espín

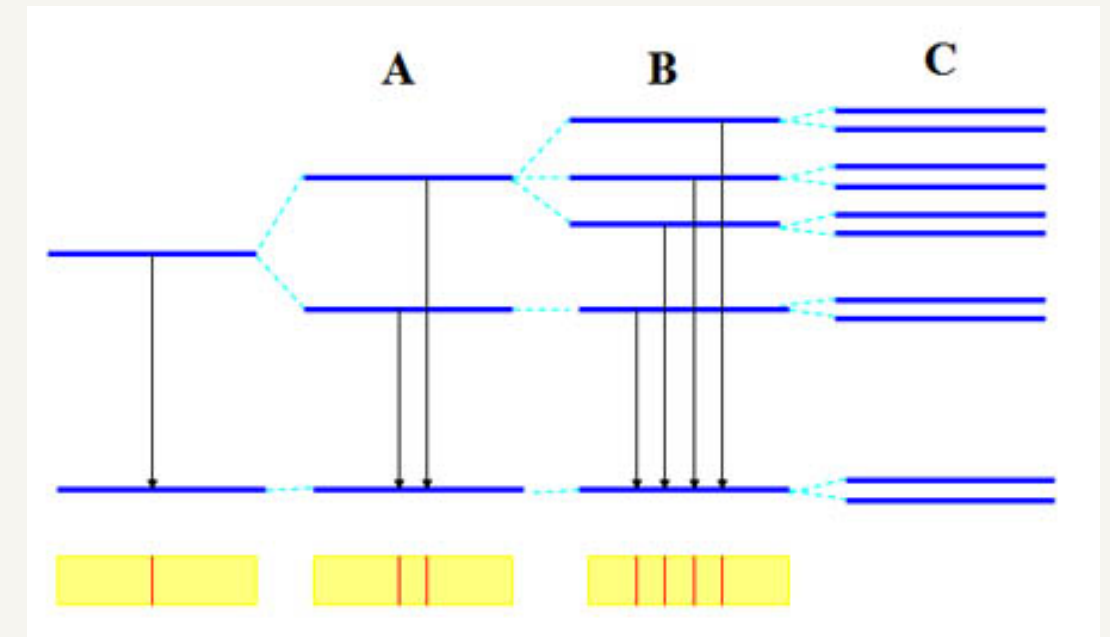
Posteriormente, Stern y Gerlach , observan nuevos desdoblamientos al realizar los espectros dentro de campos magnéticos.

Aparecían dobletes, rayas muy próximas y de frecuencia similar, que correspondían a tránsitos electrónicos de energía muy similar.

Sugirieron que los electrones , además de girar en torno al núcleo tenían también un movimiento de rotación propio, denominado EFEECTO ESPÍN. Este movimiento de una carga generaba un campo magnético que interfiere con el externo y modifican la energía liberada por el electrón.

Esto hacía que los electrones rotasen en sentido horario o antihorario, y que era lo que provocaba los dobletes.

Para explicarlo se introduce un nuevo número cuántica, s , o número cuántico de espín, y que puede tomar los valores de $+1/2$ y $-1/2$.



Números Cuánticos

REPRESENTACIÓN	NOMBRE	VALORES	RELACIONA	INDICA
n	Número cuántico principal.	Números enteros positivo (1, 2, 3...)	Volumen del orbital.	Nivel de energía.
ℓ	Número cuántico secundario o azimutal	Desde cero hasta n-1 s = 0 p = 1 d = 2 f = 3	Forma del orbital.	Sub-nivel (orbitales s,p,d,f).
m	Número cuántico magnético.	Desde -ℓ pasando por cero hasta +ℓ (-ℓ, 0, +ℓ) s 0 p -1,0,+1 d -2,-1,0,+1,+2, f -3,-2,-1,0,+1,+2,+3	Orientación espacial del orbital.	Número de orbitales.
s	Número cuántico espín.	-1/2 para ↑ +1/2 para ↓	Posibilidad de aceptar o un electrón.	Giro del electrón.

EL CONJUNTO DE
NÚMEROS CUÁNTICOS
DE UN ELECTRÓN
DEFINE SU ESTADO EN
UN ÁTOMO

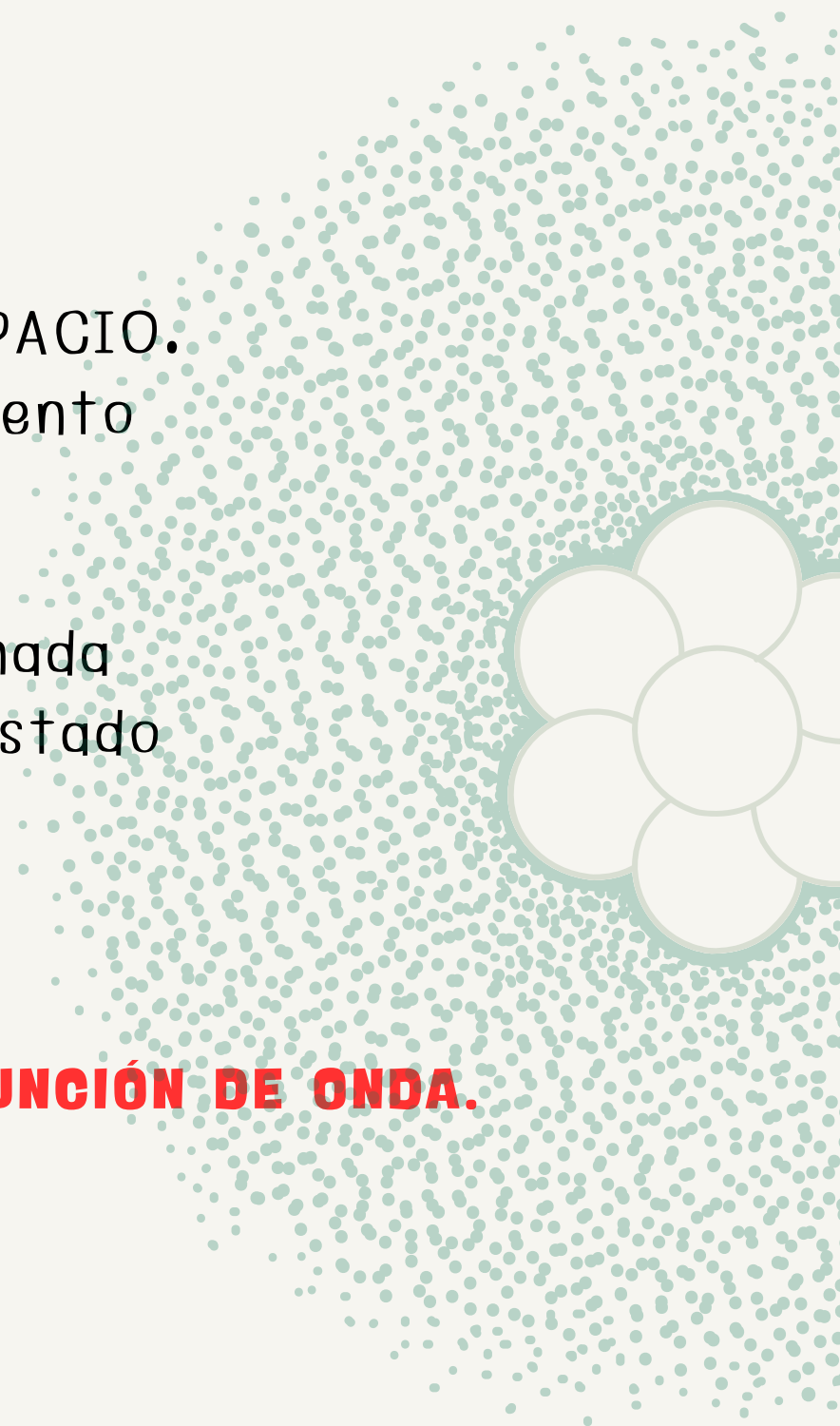
Modelos mecánoc cuánticos

La visión actual ha cambiado en relación a los modelos anteriores.

- Se considera un átomo nucleado con protones y neutrones alrededor del cual se encuentran los electrones, pero NO EN POSICIONES CONCRETAS, SINO EN DIFERENTES ESTADOS ENERGÉTICOS.
- Tienen una determinada PROBABILIDAD DE ENCONTRARSE EN CIERTAS REGIONES DEL ESPACIO.
- No se puede definir con exactitud la posición que ocupa un electrón dado en un momento determinado.

Se cambia la idea de órbita por la de orbital (región del espacio donde hay una determinada probabilidad de hallar un electrón). No es un lugar concreto , sino que representa un estado energético en vez de una órbita bien definida.

SE BASA EN LA DUALIDAD ONDA- CORPÚSCULO, EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE Y LA FUNCIÓN DE ONDA.



Principio dualidad onda-corpúsculo

A lo largo de la historia, la luz ha sido considerada como una partícula y como una onda de forma alternativa, dependiendo de la teoría que mejor explicara los fenómenos a estudiar.

Onda	Corpúsculo
Huygens y Fresnel Estudian la difracción y las interferencias estableciendo el caracter ondulatorio de la luz	Planck y Einstein Demuestran que la luz tiene caracter corpuscular, se puede comportar como una unidad indivisible

Existe una dualidad en el comportamiento de la luz, puede ser tanto óndula como corpúsculo.

Louis de Broglie trató de hacer extensivo el doble carácter a toda la materia. Cualquier partícula en movimiento llevaría asociada una onda.

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

Ondas asociadas a electrones

Thomson provocó un fenómeno de difracción al hacer pasar un chorro de electrones a través de una delgada lámina de oro.

Luego se observó ese mismo fenómeno al hacer incidir un haz de electrones sobre un cristal de níquel.

En ambos casos los electrones se comportaban como ONDAS en la periferia de los átomos.

La idea básica de un modelo mecánico-ondulatorio supone que los electrones giran alrededor de un núcleo en las órbitas estables deben hacerlo de forma que sus trayectorias sean cantidades enteras de su longitud de onda, para que no se produzcan interferencias destructivas y que el sistema no fuese estable.

Ondas asociadas a electrones



Condiciones de estabilidad de las ondas:

- 1.- Un electrón en el átomo no orbita como un planeta, sino que se comporta como una onda de materia. Para ser estable y no colapsar, la onda debe cerrar su trayectoria formando una onda estacionaria exacta.
- 2.- En una órbita o nivel de energía estable, la circunferencia del orbital debe contener un número entero de longitudes de onda del electrón ($n\lambda = 2\pi r$). Si no coincide, la onda se destruye a sí misma por interferencia destructiva.
- 3.- Los orbitales atómicos son las zonas de probabilidad donde es más probable encontrar al electrón, derivados de resolver la ecuación de onda de Schrödinger. El estado más estable del hidrógeno, por ejemplo, corresponde al orbital 1s.

Principio incertidumbre de Heisenberg

PAU

Afirma que hay una limitación fundamental para determinar con precisión la posición y la cantidad de movimiento de una partícula.

El motivo es que para determinar la posición de un electrón es necesario hacer incidir sobre él una radiación electromagnética, que será absorbida por el electrón y ella alterará su energía cinética y provocará una incertidumbre sobre su velocidad.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Δx es la incertidumbre en la posición

Δp es la incertidumbre en la cantidad de movimiento

El mero hecho de medir provoca una incertidumbre en la magnitud de medida.

YA NO SE PUEDE INTERPRETAR LOS ELECTRONES COMO PARTÍCULAS CON POSICIÓN PRECISA, LO QUE DA LUGAR A LOS ORBITALES

Principio incertidumbre de Heisenberg

P. 33 EJ RESUELTO ;
EJ 9 Y 10

Ecuación de onda de Schrödinger

p. 34

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$\hat{H}$ = OPERADOR HAMILTONIANO

Ψ = FUNCIÓN DE ONDA

E = ENERGÍA

Propone una ecuación de onda para explicar el comportamiento ondulatorio de los electrones.

La función de onda describe el estado del electrón en función de las coordenadas x, y, z y del tiempo.

La resolución de la ecuación de onda, permite determinar la función de onda si conocemos la energía potencial y la energía total del sistema.

Ψ^2
Es la función densidad de probabilidad.

$\Psi^2 = 0$ NODOS

Su producto con el volumen de una determinada región del espacio da como resultado la probabilidad de entrar un electrón en dicha región

Ecuación de onda de Schrödinger

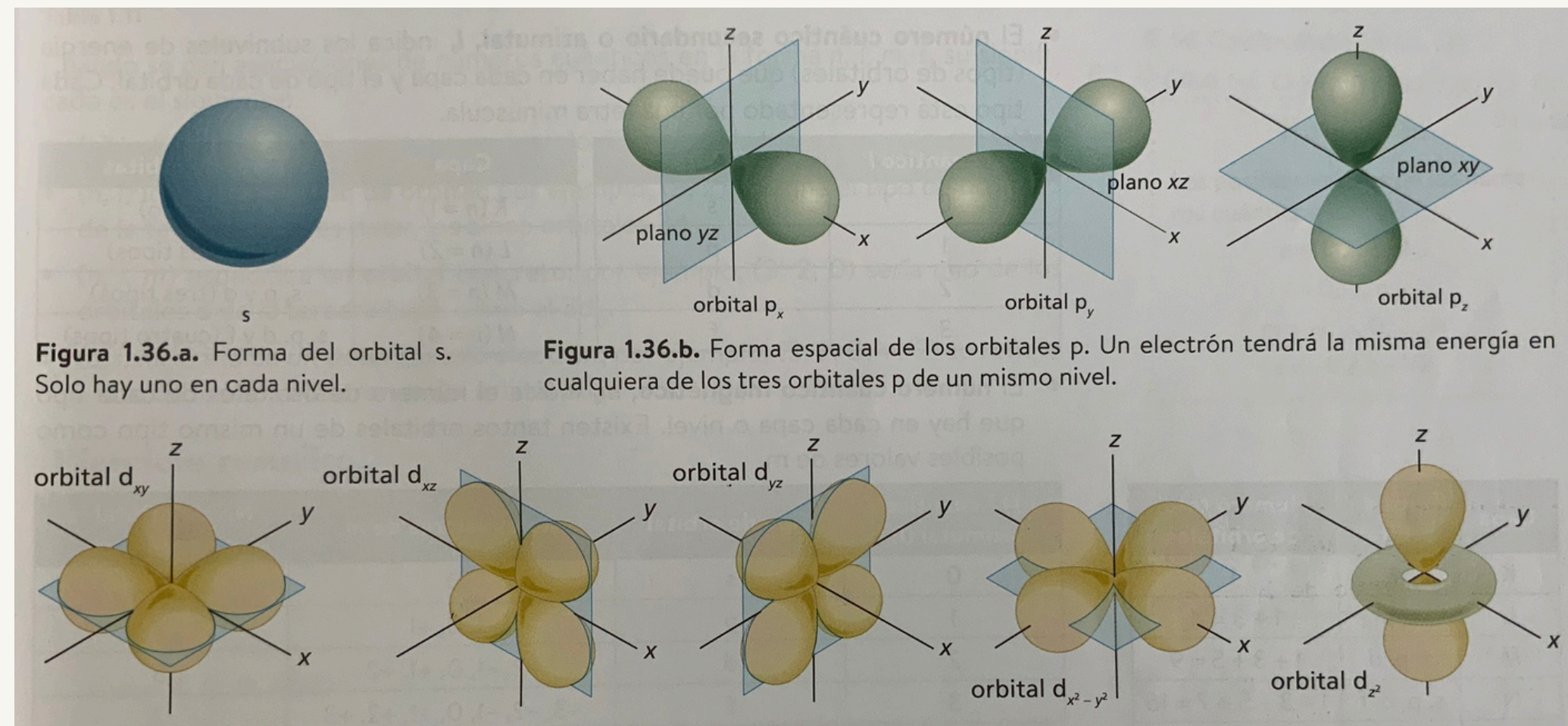
La resolución de esta ecuación implica métodos de cálculo con potentes ordenadores, que dan como resultado los cuatro números cuánticos que permiten explicar los desdoblamientos en las rayas espectrales

Importante recordar que para Bohr hablamos de órbitas y en los modelos mecano-cuánticos se habla de orbitales, pero no es posible concretar donde se encuentra un electrón, solo se puede indicar la probabilidad de que esté presente en una determinada región.

Forma de los orbitales atómicos

Un orbital es la región del espacio en la que hay probabilidad elevada (mayor del 90%) de encontrar un electrón.

La representación gráfica de la función de densidad de probabilidad frente a la distancia al núcleo nos dará la forma tridimensional del orbital.



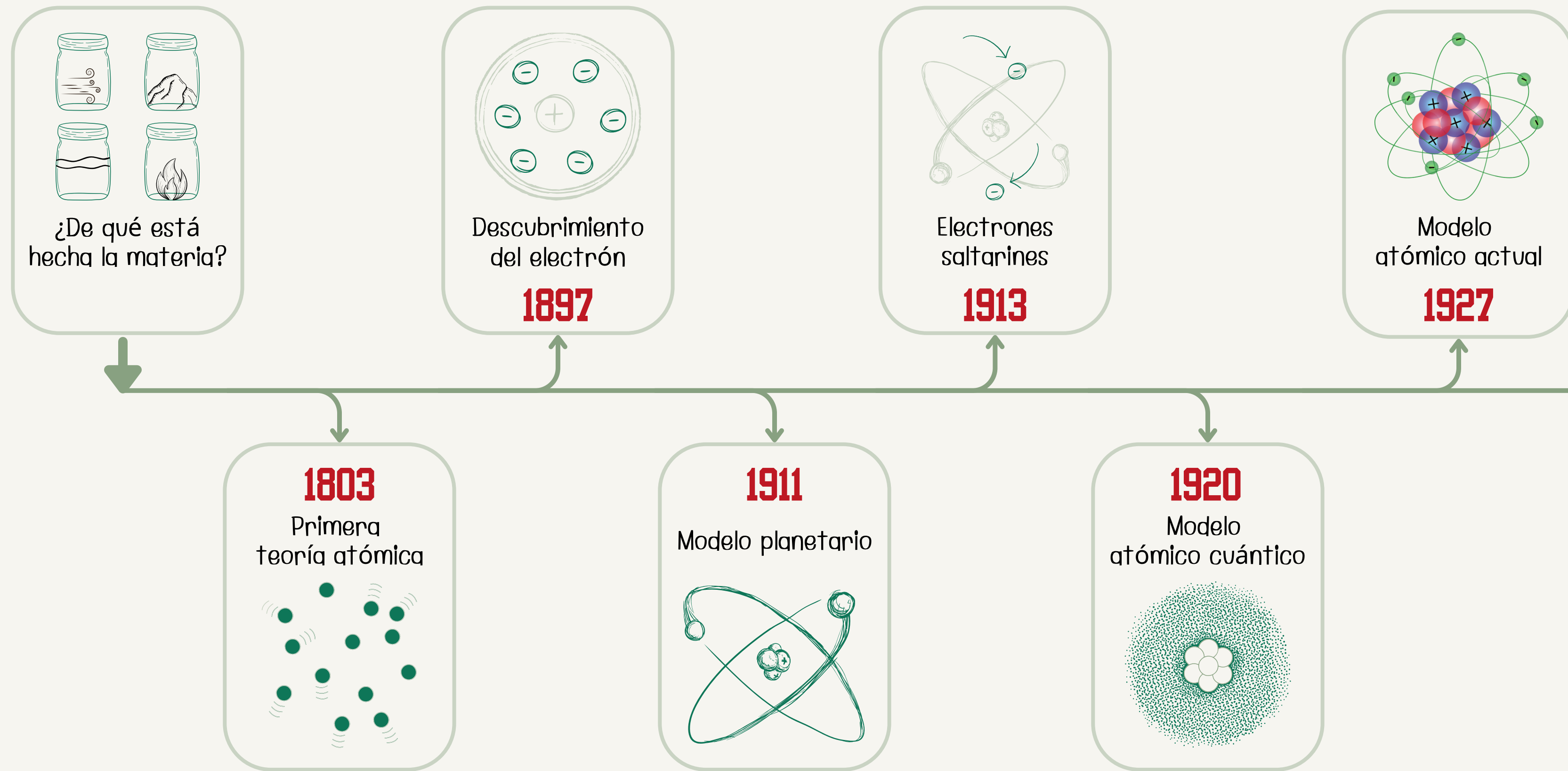
Significado de los números cuánticos

números cuánticos			
Número cuántico	Determina para el		Valores permitidos
	electrón	orbital	
Principal (n)	El nivel principal de energía	El tamaño o volumen	$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots \infty$ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ K L M N O P Q (Capas)
Secundario o azimutal (l)	El subnivel de energía	La forma geométrica	$l = 0, 1, 2, 3, \dots (n-1)$ ↓ ↓ ↓ ↓ máximo valor s p d f
Magnético (m_l)	El orbital o REEMPE	Su orientación espacial	$m_l = l, \dots, 0, \dots, +l$ o $m_l = -l, \dots, 0, \dots, -l$
Spin Magnético (m_s)	El sentido de rotación	no tiene significado	Antihorario Horario $\frac{1}{m_s = +1/2}$ $\frac{1}{m_s = -1/2}$

Timo

En el átomo actual, el nivel de energía queda definido con n, un subnivel se define con los valores de n y l, un orbital con n, l y m_l y un electrón queda definido con n, l, m_l y m_s .

Línea del tiempo





¿Preguntas?

