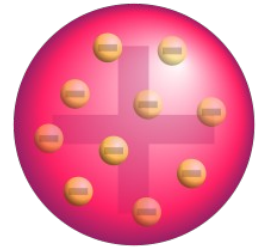


1. MODELOS ATOMICOS

1.1. Modelo de Thomson (1904)

Fue el primero en suponer la estructura del átomo

- Los electrones están incrustados en una esfera maciza y homogénea con carga positiva.
- La carga positiva tiene que ser del mismo valor que la carga total de los electrones ya que el átomo es neutro.



Modelo del pudin de pasas

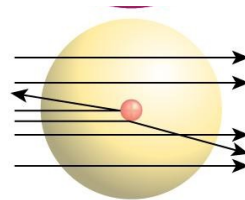
No se mencionan los protones y neutrones pues en ese momento aún no se habían identificado

1.2. Modelo de Rutherford (1911)

Experimento de la lámina de oro <https://youtu.be/qzXvNh-mwys>

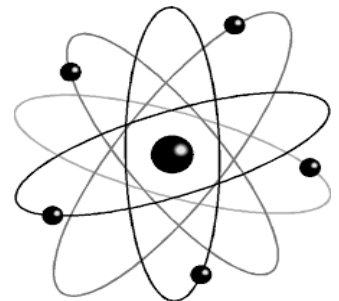
La explicación que dio Rutherford fue que la masa y la carga positiva del átomo estaban concentradas en un volumen muy pequeño, llamado **núcleo** en vez de distribuidas por todo el átomo, el resto está vacío

- La mayoría de las partículas atravesaban el átomo sin oposición
- Las que pasaban cerca del núcleo eran desviadas
- Las que impactaban con el núcleo (mucho más denso) rebotaban (1 de cada 10.000)



La mayor parte del espacio del átomo está vacío,

- En el **núcleo** se encuentran protones y neutrones por tanto aquí se encuentra la mayor parte de la masa del átomo y la carga positiva.
- En la **corteza** los **electrones** se mueven describiendo **órbitas** circulares en torno al núcleo de forma similar a como los planetas orbitan en torno al sol. Aquí se encuentra la carga negativa.



Modelo planetario

	Partículas	Carga	masa	tamaño
Núcleo	Protones	+1	1	1/10.000
	neutrones	0	1	
Corteza	electrones	-1	1/1837	1

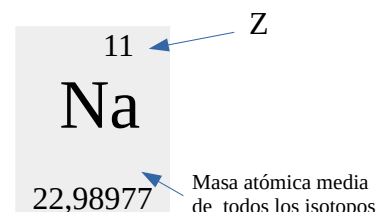
Los valores de la tabla están dados en unidades relativas.

Unos átomos se diferencian de otros en el número de partículas que contienen.

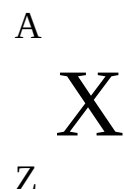
NUMERO ATOMICO, Z, = número de protones de un átomo

NUMERO de NEUTRONES = N

NUMERO MÁSICO, A = Z + N



- Los átomos de un **elemento químico** contienen todos el mismo numero de protones
- Un átomo neutro tiene tantos protones como electrones
- **ISOTOPOS**: átomos que tienen el mismo numero de protones y distinto numero de neutrones.



2. TEORIA CUANTICA DE PLANCK. (1900)

“Las partículas de un objeto que vibran con frecuencia, ν , emiten energía cuyo valor es un múltiplo entero de $h \cdot \nu$ ”

$$E = n \cdot h \cdot \nu$$

ν = frecuencia de la oscilación (Hz)

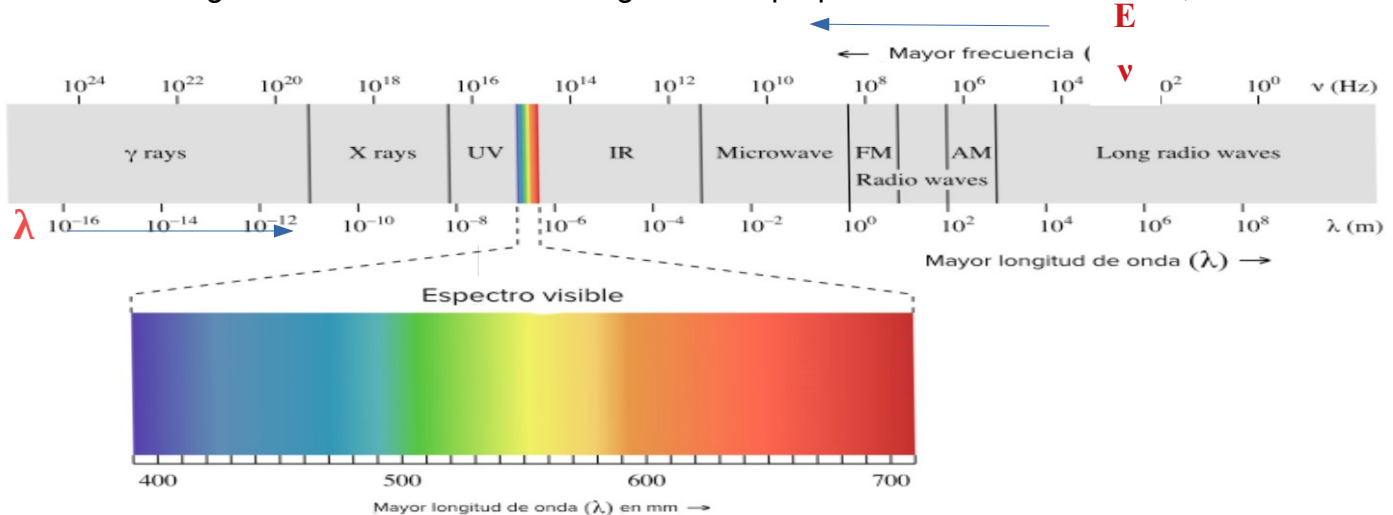
h = **constante de Planck** = $6,626 \cdot 10^{-34}$ J.s

n = n° cuantico = 1,2,3,4,.....

Al producto $h \cdot \nu$ se le denomina **cuanto**.

El cuanto de luz (o de cualquier otra radiación electromagnética) es el **fotón**.

- Todas las ondas electromagnéticas tienen en común la velocidad de propagación, $300.000 \text{ Km/s} = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ en el vacío, dicho valor se designa por **c**.
- Se diferencian unas de otras en su frecuencia y por tanto en su longitud de onda, que son inversamente proporcionales: **$c = \lambda \cdot \nu$**
- La energía de la radiación electromagnética es proporcional a su frecuencia, así:

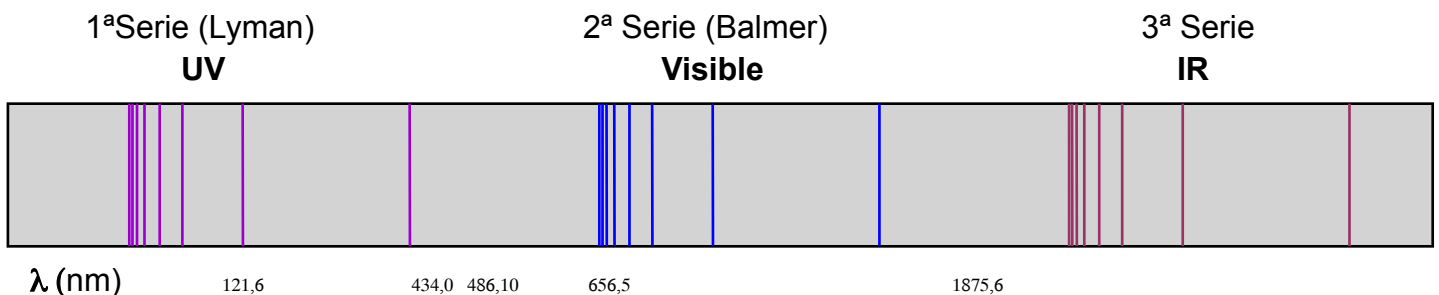


- Los R-X son mas energéticos que la luz U.V.
- Una luz de color azul es mas energética que una luz amarilla pues su frecuencia es mayor
- La intensidad (alumbra mas o menos) de la luz emitida por un foco luminoso (bombilla, fluorescente, vela, etc) depende del n° de cuantos (fotones) emitidos por unidad de tiempo
- El color depende de la frecuencia.

Espectros atómicos:

Son emitidos por los átomos a los que previamente se les ha suministrado energía, son específicos de cada elemento químico y son discontinuos.

Proporcionan una “imagen” del interior del átomo, concretamente de la ENERGÍA de mismo.



Espectro del hidrógeno

Del análisis de los espectros se deduce que los átomos emiten energía de forma discontinua, entonces el modelo de Rutherford no puede ser acertado puesto que según él la energía emitida debería ser continua, para explicar ese hecho Bohr propone un nuevo modelo atómico.

3. MODELO ATÓMICO DE BOHR (1913)

El modelo se enuncia, en principio, para el átomo **de hidrógeno**.

Este está constituido por un solo protón en el núcleo y un solo electrón en la corteza que se encuentra describiendo órbitas circulares en torno al núcleo.

POSTULADOS :

1. Solo son posibles las órbitas que cumplen la condición:

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

m = masa del electrón

v = velocidad del e- en la órbita

r = radio de la órbita

h = cte de Planck

n = n° cuántico: 1,2,3

n	Radio
1	a ₀
2	4a ₀
3	9a ₀
4	16a ₀

$r = n^2 a_0$ Siendo a_0 el radio de la 1° órbita cuyo valor es :0,0529 nm

2. Mientras el e- se encuentra en una de las órbitas posibles ni emite ni absorbe energía, está en estado estacionario.

La energía del electrón en una órbita viene dada por: $E = E_c + E_p$

Sustituyendo los valores del radio y operando Bohr obtiene una ecuación para la Energía:

$$E = \frac{-K}{n^2}$$

$$K = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

n	E
1	-k
2	-k/4
3	-k/9
4	-k/16

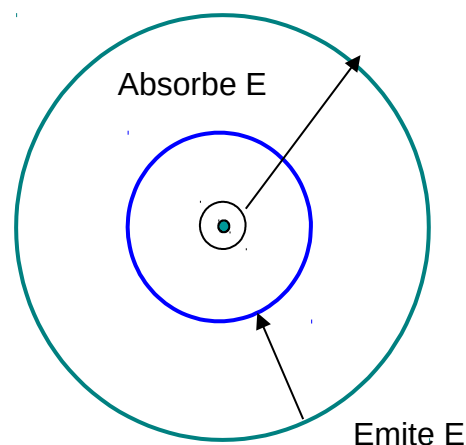
- La energía del electrón en el átomo es negativa
- Cuanto mayor es n, mayor es el radio de la órbita y mayor es la energía

3. Cuando un electrón cambia de órbita absorbe o emite la diferencia de energía entre esos niveles.

$$\text{Energía abs.} = \Delta E = E_f - E_i$$

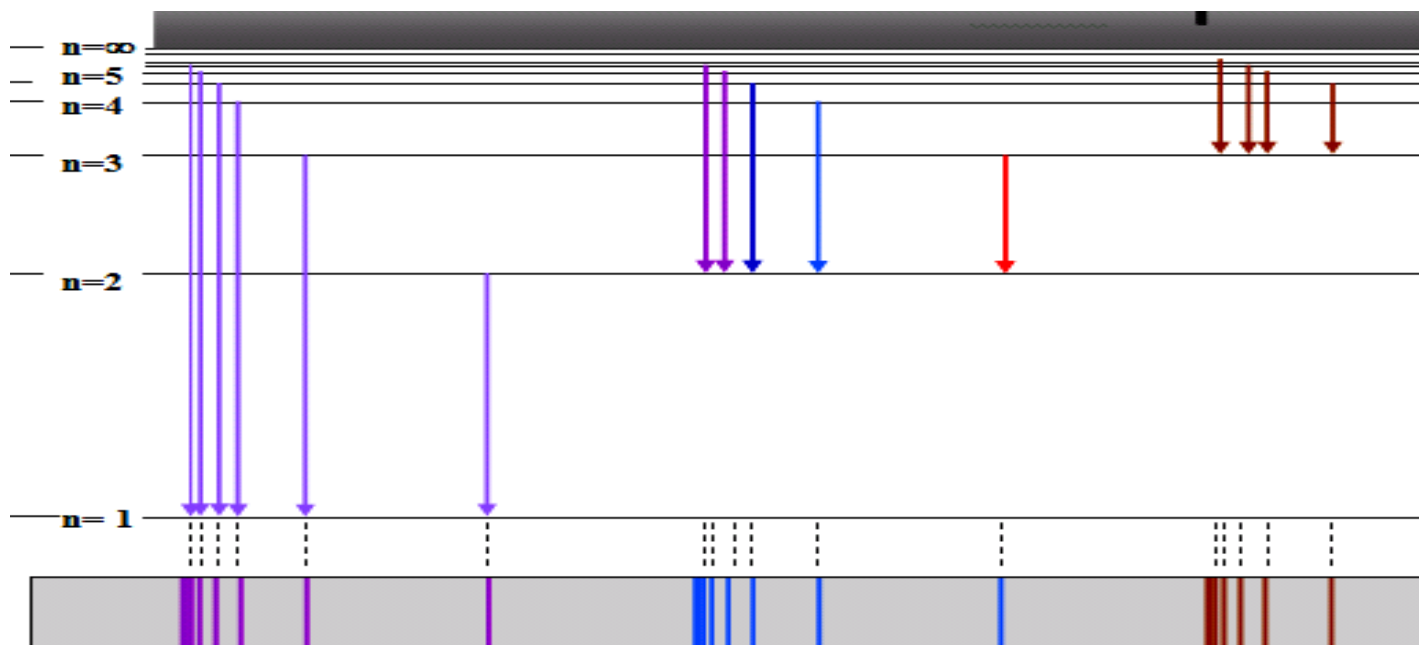
- Si comunicamos energía al átomo, el e- **absorbe la energía** necesaria para llegar a una órbita superior.
- Si el e- “cae” a una órbita más baja, **emite energía** en forma de radiación electromagnética de frecuencia ν

$$\Delta E = | E_f - E_i | = h \cdot \nu$$



Así se explica el espectro del hidrógeno:

- Cada raya del espectro del H corresponde a la caída de un electrón a una órbita inferior (de menor Energía).



- Bohr calcula las longitudes de onda de cada línea que se corresponden con las experimentales.

Limitaciones del modelo de Bohr

Teóricas: se trata de un modelo muy sencillo en el cual se hacen algunas simplificaciones para facilitar los cálculos:

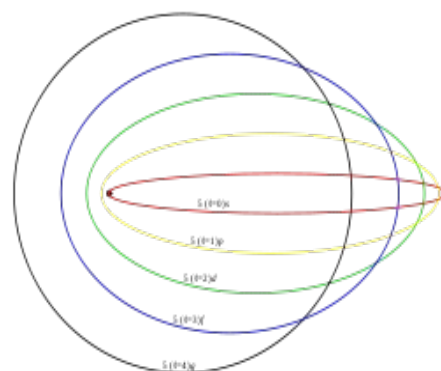
- Se supone que todas las órbitas son circulares
- Se considera infinita la masa del núcleo respecto a la del e- y es solo 1840 veces mayor
- Se supone el núcleo en reposo y en realidad ambas partículas giran en torno al centro de masa del sistema
- Mezcla de postulados clásicos y cuánticos según convenga.
- No justifica la condición del momento angular : $mvr = nh/2\pi$

Experimentales: el grado de coincidencia con los espectros experimentales no es tan bueno como en principio se pensaba. Al realizar el espectro con instrumentos de mayor poder de resolución se encontró que las líneas en realidad eran dobles, muy próximas entre sí lo cual suponía niveles de energía casi idénticos.

3.1. Modelo de Sommerfeld. (1916)

Para explicar la aparición de mas líneas en el espectro se propone una modificación del modelo de Bohr.

- ➔ Las órbitas pueden ser circulares o elípticas.
- ➔ La excentricidad de la órbita viene dada por un segundo n° cuántico, ℓ , (**n° cuántico secundario**) que puede tomar valores enteros desde 0 hasta $n-1$.
- ➔ En cada nivel hay n órbitas posibles, (una circular y las demás elípticas) y n subniveles de energía
 - En el primer nivel, $n=1$, solo hay una órbita circular
 - En el 2° nivel, $n=2$, hay dos órbitas. Una circular y otra elíptica
 - En el 3°, $n=3$, hay 3 órbitas. 1 circular y dos elípticas de distinta excentricidad, etc
- ➔ En presencia de un campo magnético aparecen mas rayas en el espectro, se justifica introduciendo un tercer numero cuántico, m , **n° cuántico magnético** que determina la orientación de las órbitas en el espacio.



Aun así el modelo solo explica el espectro del H, no el de los demás átomos.

4. DUALIDAD ONDA-PARTÍCULA. HIPÓTESIS DE DE BROGLIE

Naturaleza de la Luz

Teoría Ondulatoria

Onda  λ

Teoría corpuscular

Partícula  m

Fotón

Hipótesis de Planck

Un fotón de radiación electromagnética, de frecuencia ν y longitud de onda λ tiene una energía E expresada por la ecuación

$$E = h \nu$$

$$E = h \cdot c / \lambda$$

T. Relatividad

Toda partícula con energía también debe tener cantidad de movimiento, aun cuando no tenga masa en reposo.

$$E = p \cdot c = m \cdot c^2$$

$$h \cdot c / \lambda = m \cdot c^2$$

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

Dualidad onda-partícula para el fotón

La dirección del movimiento del fotón es la dirección en la que se mueve la onda electromagnética.

¿Cómo es que la luz puede ser al mismo tiempo una onda y una partícula?

El **principio de complementariedad**, enunciado por Niels Bohr en 1928, dice que las descripciones ondulatoria y corpuscular son complementarias. Esto es, se necesitan ambas para completar nuestro modelo de la naturaleza, pero nunca necesitaremos usarlas al mismo tiempo para describir una parte única de un suceso.

De Broglie pensó que si la naturaleza es simétrica, esa dualidad también debería ser válida para la materia. Los electrones y los protones, que imaginamos como *partículas*, en algunos casos se pueden comportar como *ondas*, y debería tener una longitud de onda y una frecuencia de forma análoga a la del fotón.

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

Longitud de onda asociada a una partícula cualquiera que se mueve con velocidad V

Toda la materia presenta características tanto ondulatorias como corpusculares comportándose de uno u otro modo dependiendo de cada experimento.

Esta hipótesis fue comprobada experimentalmente por Davidson y Germer en 1927, que observaron que una corriente de electrones se difractaba, fenómeno típicamente ondulatorio.

5. PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG.

Establece que, en general, no se puede determinar simultáneamente la posición y la cantidad de movimiento de una partícula con una precisión arbitrariamente grande, como indicaba la física clásica.

$$\Delta x \cdot \Delta mv = h/2\pi$$

Δx = incertidumbre en la posición

Δmv = incertidumbre en la cantidad de movimiento

El producto de ambas incertidumbres es constante por lo que si conseguimos que una de ellas sea muy pequeña la otra tendrá un valor muy alto, si ganamos en precisión al determinar la posición de la partícula perdemos información de la velocidad y viceversa. Las incertidumbres no se pueden evitar ni siquiera mediante una técnica experimental muy sofisticada, no es un problema técnico sino un principio básico de la naturaleza.

Como no es posible conocer exactamente el valor de todas las magnitudes físicas que describen el estado de movimiento de la partícula en un momento, **no es posible asignar una trayectoria a una partícula** sino una distribución estadística. Por lo tanto solo se puede decir que hay una determinada probabilidad de que la partícula se encuentre en una determinada región del espacio en un momento dado.

6. MODELO DE LA MECÁNICA ONDULATORIA. (1926)

W. Heisenberg y E. Schrödinger resolvieron de forma independiente el problema de la constitución del átomo creando una nueva teoría que ampliada después por Born, Jordan y Dirac se conoce hoy como Mecánica Cuántica.

La formulación de Schrödinger, más sencilla e intuitiva, se construye por analogía con el tratamiento clásico de los fenómenos ondulatorios: la función de ondas describe el comportamiento del sistema físico estudiado.

Estado del sistema. Viene dado por una función de las variables del sistema (propiedades medibles).

$\psi = \psi(x, y, z, t)$ llamada **función de onda** y que puede ser un n° complejo.

ψ^2 (el cuadrado de la función de onda) representa la **probabilidad** de hallar el sistema en una configuración particular en un tiempo dado, t, es decir ψ^2 es una función de probabilidad

Se plantea la Ecuación de *Schrödinger* para el electron:

$$H\psi = E\psi,$$

$$\delta^2\psi/\delta x^2 + \delta^2\psi/\delta y^2 + \delta^2\psi/\delta z^2 + 8\pi^2m/h^2 (E-V)\psi = 0$$

- H es el operador matemático correspondiente a la energía total del sistema.
- E es la energía total del sistema.

Se resuelve la ecuación y se obtienen una serie de funciones, $\Psi(n, l, m)$, que son soluciones de la misma que dependen de 3 parámetros **n, l, m**, llamados n° cuánticos. Para que dichas soluciones sean aceptables físicamente los números cuánticos están restringidos a los siguientes valores:

$n : 1, 2, 3, \dots$	N° cuántico principal
$l : 0, 1, 2, 3, \dots (n-1)$	N° cuántico secundario
$m : -l \dots 0 \dots +l$	N° cuántico magnetico

- Cada trío de valores **(n, l, m)** permitidos definen un ORBITAL: $\Psi_{n, l, m}$
- Para cada solución, $\Psi_{n, l, m}$, se calcula también el valor de su Energía:

$$E = \frac{-K}{n^2}$$

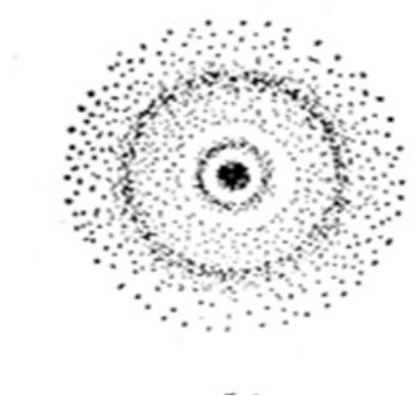
La Energía también está cuantizada y depende solo del n° cuántico principal n.

Visualización en el espacio de la distribución electrónica

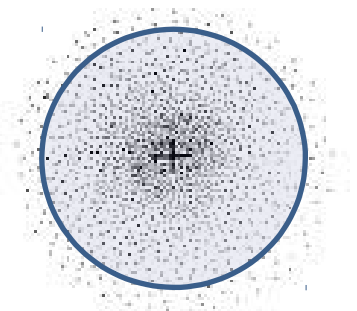
En el modelo de Bohr el electrón describe una trayectoria definida, órbita, en el modelo mecanocuántico la ecuación de Schrödinger define una distribución de probabilidad, ψ^2 , que rodea al núcleo, esta distribución es tridimensional y de forma compleja.

Para facilitar su visualización se recurre a varios tipos de representaciones en el plano, la mas sencilla es la **nube de puntos** en que cada punto correspondería a la posición del electrón en un instante, de manera que una zona donde los puntos están muy concentrados mayor será el valor de ψ^2 y por tanto mayor la probabilidad de encontrarlo allí.

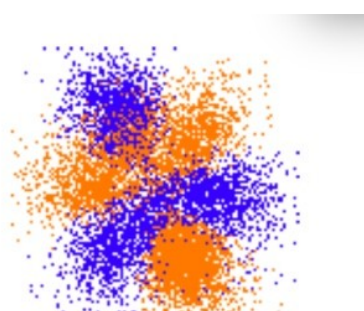
Además dado que el e- es una partícula cargada puede asociarse a cada punto una densidad de carga, por lo que se puede llamar también **nube de carga**



En la práctica para visualizar el orbital (que puede ser una función muy compleja) se traza una **superficie imaginaria** y se calcula la forma y tamaño que debe tener para que la probabilidad de encontrar al e- en ella sea muy alta (90%).



Para el caso de la 1ª función u orbital (1,0,0), al que le corresponde también la energía mas baja, esa superficie corresponde a una esfera



Para otros funciones (en la figura la (4,3,0)) la forma es diferente y depende del valor de *ℓ* y su orientación del valor de *m*.



Cada orbital, $\Psi(n,l,m)$, define un estado posible del electron en un atomo y esta caracterizado por un conjunto de 3 nº cuánticos.
Se visualiza como la zona del espacio, (comprendida dentro de la superficie límite), en la cual la probabilidad de encontrar al electrón,(o la densidad de carga negativa) es muy alta: 90%.

6.1. Valores y significado físico de los nº cuánticos

La forma de la superficie limite es una esfera para la primera de las soluciones de la ecuación: (1,0,0), pero para otras soluciones el radio de la esfera es diferente, y en la mayoría la forma de la superficie limite ni siquiera es esférica sino mas compleja.

El tamaño, forma y orientación y de la superficie limite esta determinada por los valores de los números cuánticos

	n	l	m
Valores	1,2,3,....	0,1,2,.. n-1	- l .. 0 ...+ l
Significado físico	Tamaño y energía del orbital	Forma del orbital	Orientación del orbital

n	l	m
1	0	0

n	l	m
2	0	0
	1	-1
		0
		1

3 valores de m

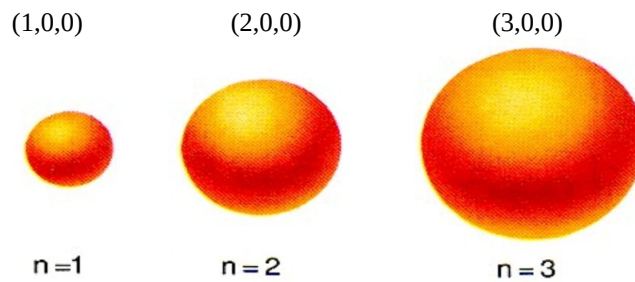
n	l	m
3	0	0
	1	-1
		0
		1
	2	-2
		-1
		0
		1
		2

1 valor de m

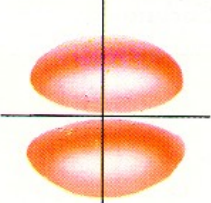
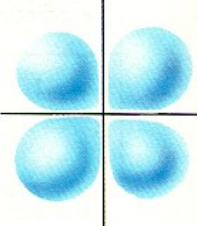
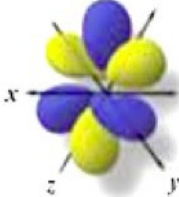
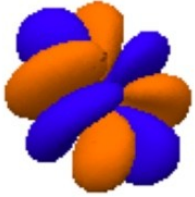
3 valores de m

5 valores de m

- **El tamaño** de la superficie límite, o la distancia al núcleo, viene dada por el nº n , y crece con este



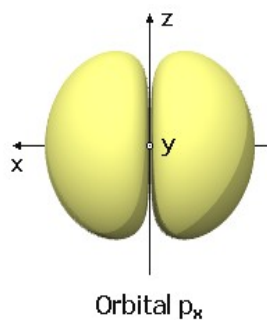
- **La forma** de la superficie límite viene dada por el nº ℓ .

$\ell =$	0	1	2	3	4
forma	esfera	2 lóbulos	4 lóbulos	Varios lóbulos	Varios lóbulos
tipo	s	p	d	f	g
	 $\ell = 0$, orbital s	 $\ell = 1$, orbital p	 $\ell = 2$, orbital d	 $\ell = 3$, orbital f	 $\ell = 4$, orbital g

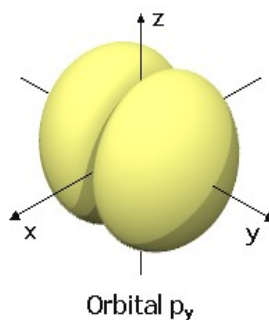
La orientación en el espacio está determinada por el valor del nº m , y hay tantas orientaciones como valores de m

- Para $\ell = 0$, (orbital s) $\rightarrow m=0 \rightarrow$ solo hay una orientación
- Para $\ell = 1$ (orbitales p) hay 3 valores de m : -1,0,1, es decir, 3 orientaciones posibles
 $\ell = 1$

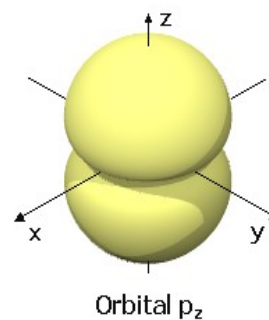
$m = -1$



$m = 1$



$m = 0$



- Para $\ell = 2$ (orbitales d) hay 5 valores de m, (-2,-1,0,1,2) → 5 orientaciones

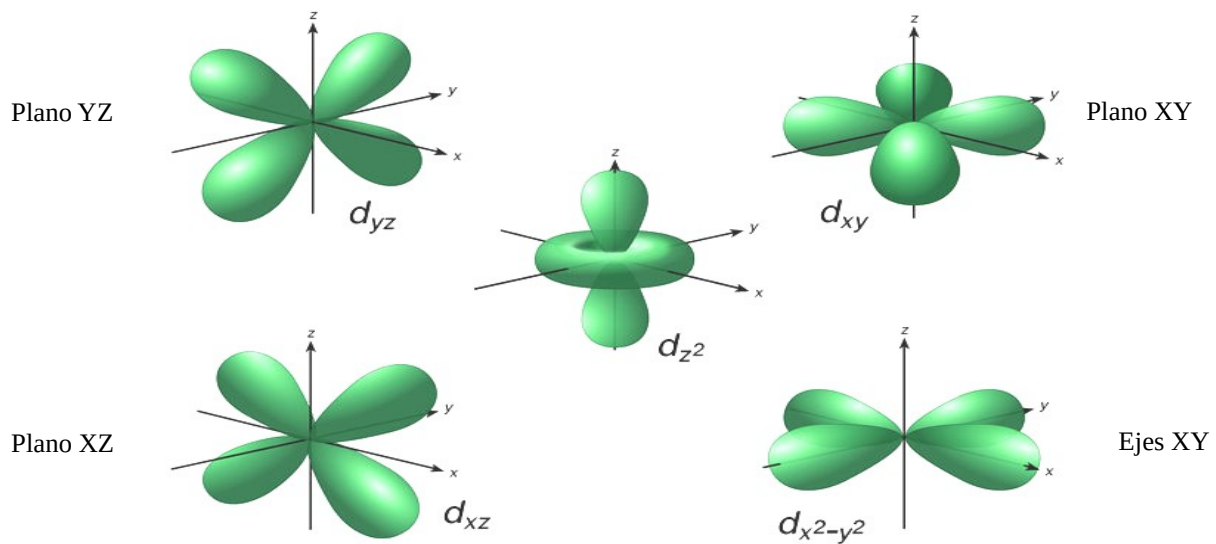
$m = -2$

$m = -1$

$m = 0$

$m = 1$

$m = 2$



- Para $\ell = 3$ (orbitales f) hay 7 valores de m, (-3,-2,-1,0,1,2,3) 7 orientaciones

$m = -3$

$m = -2$

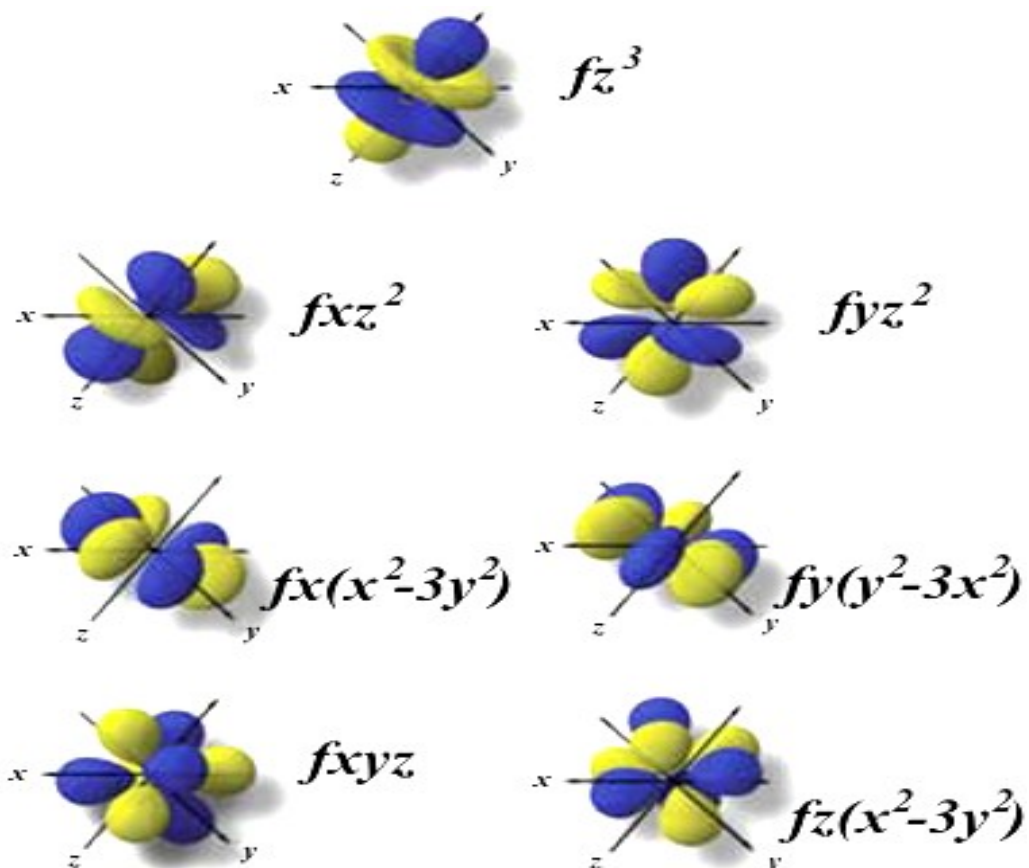
$m = -1$

$m = 0$

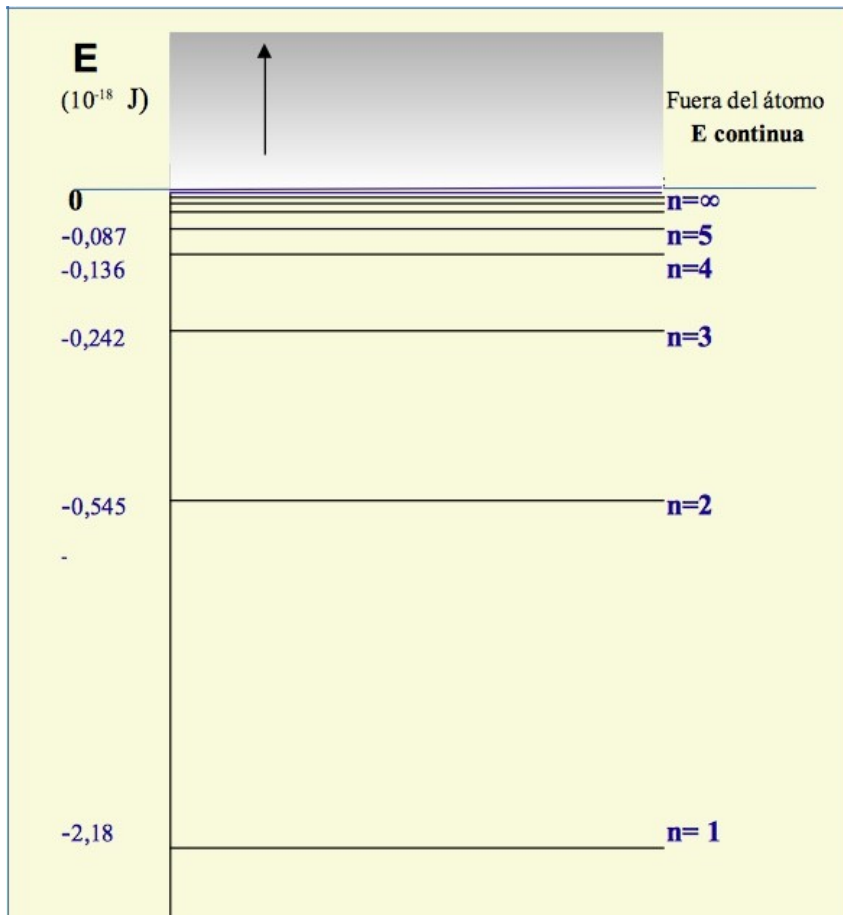
$m = 1$

$m = 2$

$m = 3$



6.2. Energía de los orbitales en el átomo de Hidrógeno.



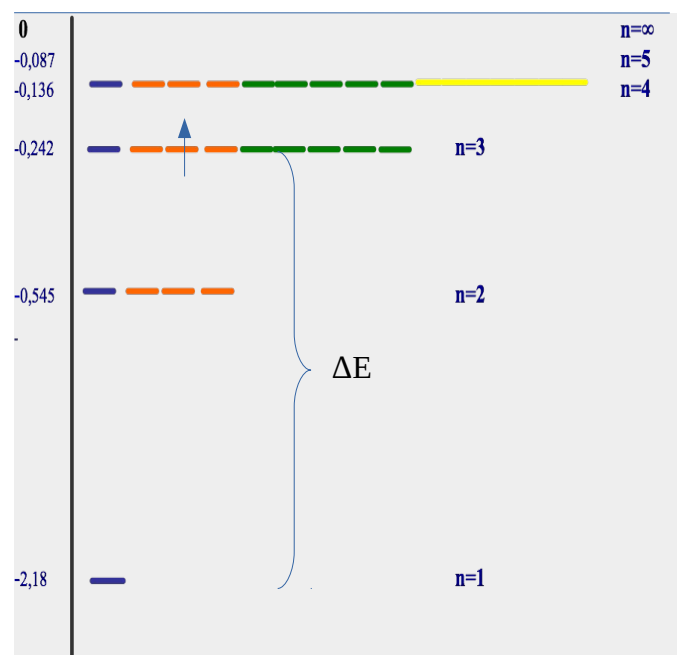
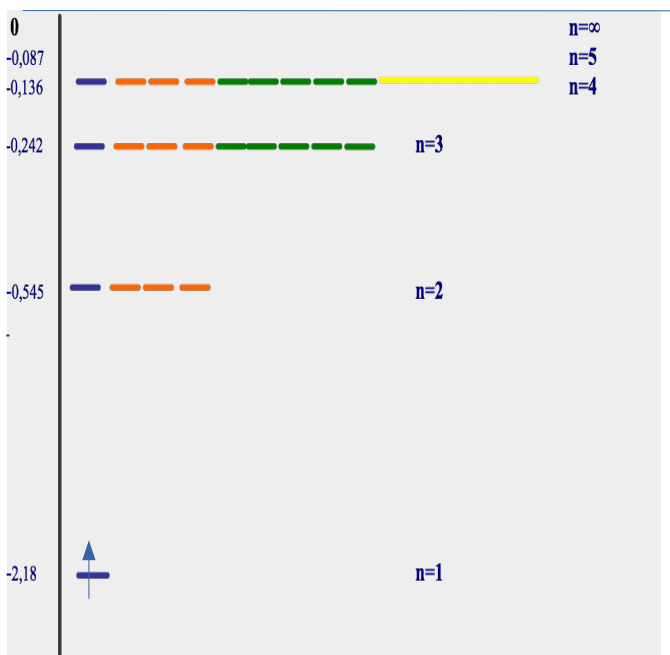
- $E = -K / n^2$
- Es discontinua y depende solo del n° cuántico n
 - Todos los orbitales de igual n tienen la misma energía (**degenerados**)
 - La energía dentro del átomo es negativa,
 - A mayor n la energía (se hace menos negativa, es decir), aumenta.
 - Al aumentar n los valores de la energía son mas próximos.
 - Para valores de n muy altos la energía es prácticamente la misma.
 - Para $n=\infty$, situación en la que el electrón ya estaría fuera del átomo la energía es 0.

Estado fundamental (Energía mínima)

El único electron se encuentra en el estado de mas baja E que corresponde al orbital (1,0,0). Solo hay un estado fundamental.

*Estado excitado ($E > E_{\text{minima}}$)

El electrón se encuentra en un estado de E mayor que la mínima. Son posibles muchos estados excitados.



Para pasar del estado fundamental a uno excitado hay que comunicar energía al átomo, de valor $\Delta E = E_f - E_i$

Estado ionizado (el átomo ha perdido el electrón, no es neutro), para arrancar el e^- hay que suministrar energía para llevarlo a un n tan alto que su $E=0$, es decir, $\Delta E = 0 - E_i$, lo que da una medida de la energía que tenía el e^- en el átomo.

Nivel cuantico (capa)	n	l	m	orbital (n,l,m)	orbital	Nº orbitales	Nº orbitales	E= -K/n²
1º	1	0	0	(1, 0, 0)	1s	1	1	-K
2º	2	0	0	(2, 0, 0)	2s	1	4	-K/4
		1	-1	(2, 1,-1)	2p _x	3		
			0	(2, 1, 0)	2p _y			
			1	(2, 1, 1)	2p _z			
3º	3	0	0	(3, 0, 0)	3s	1	9	-K/9
		1	-1	(3, 1,-1)	3p _x	3		
			0	(3, 1, 0)	3p _y			
			1	(3, 1, 1)	3p _z			
		2	-2	(3, 2,-2)	3d _{xy}	5		
			-1	(3, 2,-1)	3d _{xz}			
			0	(3, 2, 0)	3d _{z2}			
			1	(3, 2, 1)	3d _{yz}			
			2	(3, 2, 2)	3d _{x2-y2}			
4º	4	0	0	(4, 0, 0)	4s	1	16	-k/16
		1	-1	(4, 1,-1)	4p _x	3		
			0	(4, 1, 0)	4p _y			
			1	(4, 1, 1)	4p _z			
		2	-2	(4, 2,-2)	4d _{xy}	5		
			-1	(4, 2,-1)	4d _{xz}			
			0	(4, 2, 0)	4d _{z2}			
			1	(4, 2, 1)	4d _{yz}			
			2	(4, 2, 2)	4d _{x2-y2}			
		3	-3	(4, 3,-3)	4f	7		
			-2	(4, 3,-2)	4f			
			-1	(4, 3,-1)	4f			
			0	(4, 3, 0)	4f			
			1	(4, 3, 1)	4f			
			2	(4, 3, 2)	4f			
			3	(4, 3,3)	4f			
5º	5	0	0		5s	1		-k/25
		1	-1		5p	3		
			0		5p			
			1		5p			
		2	-2		5d	5		
			-1		5d			
					7			

[illegible]