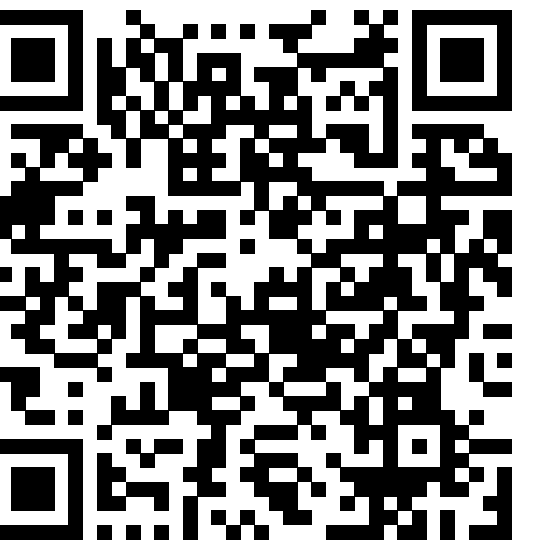




# ESTRUCTURA DE LA MATERIA

Química 2º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa

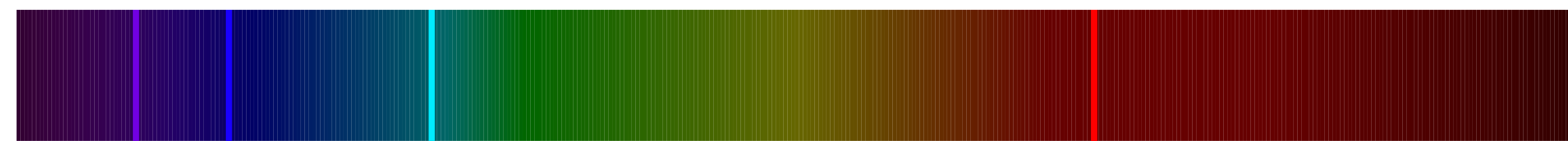


## Modelos atómicos

| Modelo     | Hechos experimentales que expusieron sus limitaciones                                                           |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Dalton     | Descubrimiento de la radiactividad natural (Becquerel, 1896)<br>Descubrimiento del electrón (Thomson, 1897)     |
| Thomson    | Descubrimiento del núcleo atómico (Rutherford, 1911)<br>Descubrimiento del protón (Rutherford, 1919)            |
| Rutherford | Integridad del núcleo → neutrón (Chadwick, 1932)<br>Inestabilidad de las órbitas electrónicas → Física Cuántica |

### Modelo atómico de Bohr

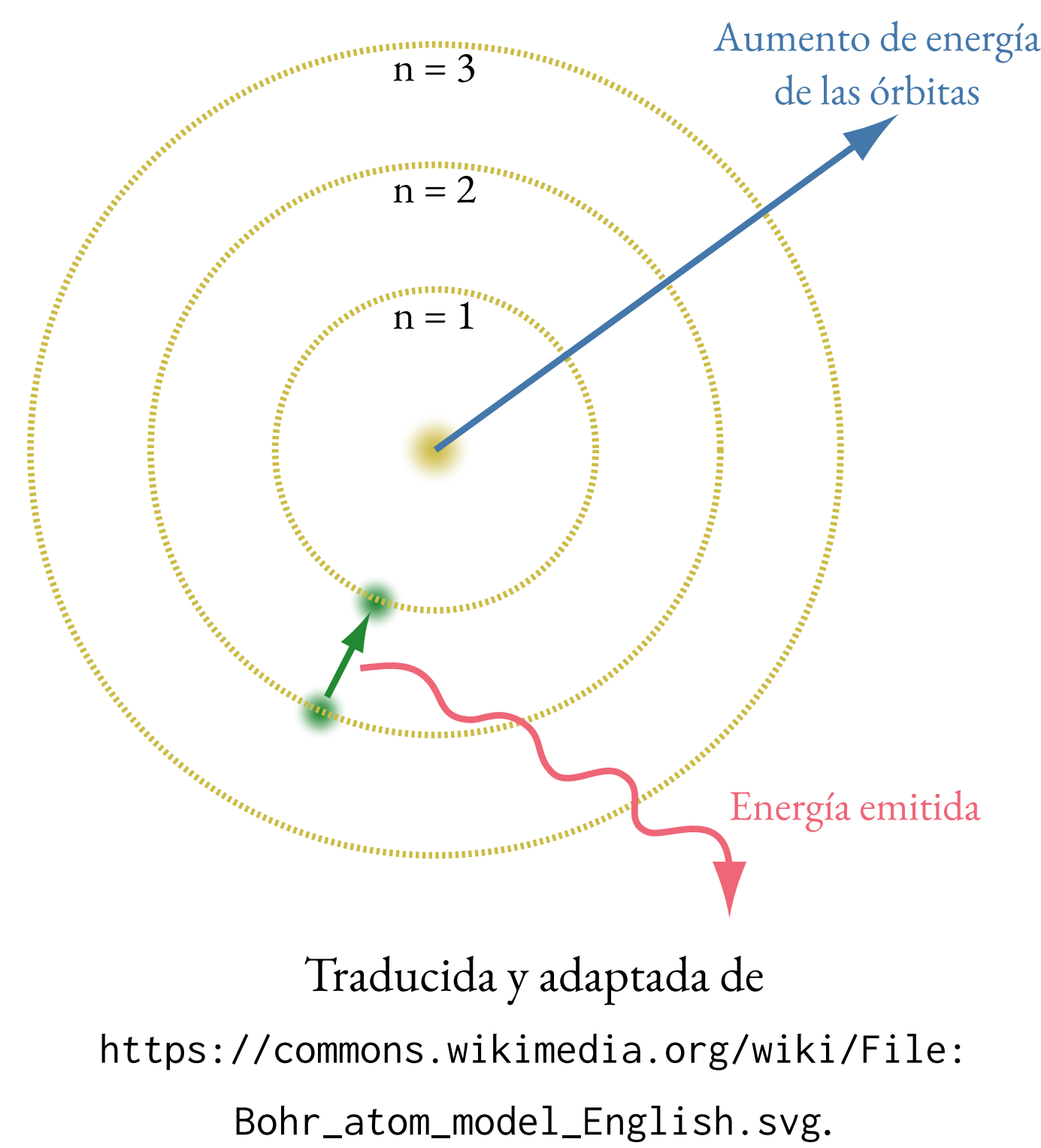
Propuesto en **1913** por Niels **Bohr** para **explicar** la **estabilidad** de la **materia** y los **característicos espectros** de emisión y absorción de los **gases**.



Espectro discreto de **emisión** del **hidrógeno** (H).

Este modelo se basa en **tres postulados fundamentales**:

- Los **electrones** describen **órbitas circulares** en torno al núcleo **sin irradiar energía**.
- Solo están **permitidas** aquellas **órbitas** en las que el electrón tiene un **momento angular múltiplo** entero de  $\hbar = h/(2\pi)$ .
- El **electrón** solo **emite** o **absorbe energía** en los **saltos** de una órbita permitida a otra, siendo la energía emitida/absorbida la diferencia de energía entre ambos niveles.



La **ecuación de Rydberg** nos da la **longitud de onda** de las **líneas espectrales** de muchos elementos químicos:

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

donde  $\lambda$  es la longitud de onda de la radiación emitida en el vacío,  $R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$  es la constante de Rydberg y  $n_1$  y  $n_2$  son los números cuánticos principales de las órbitas involucradas en el salto (con  $n_2 > n_1$ ).

Esta ecuación también nos permite calcular el **valor energético** correspondiente a una **transición electrónica** entre dos niveles dados,  $\Delta E$ :

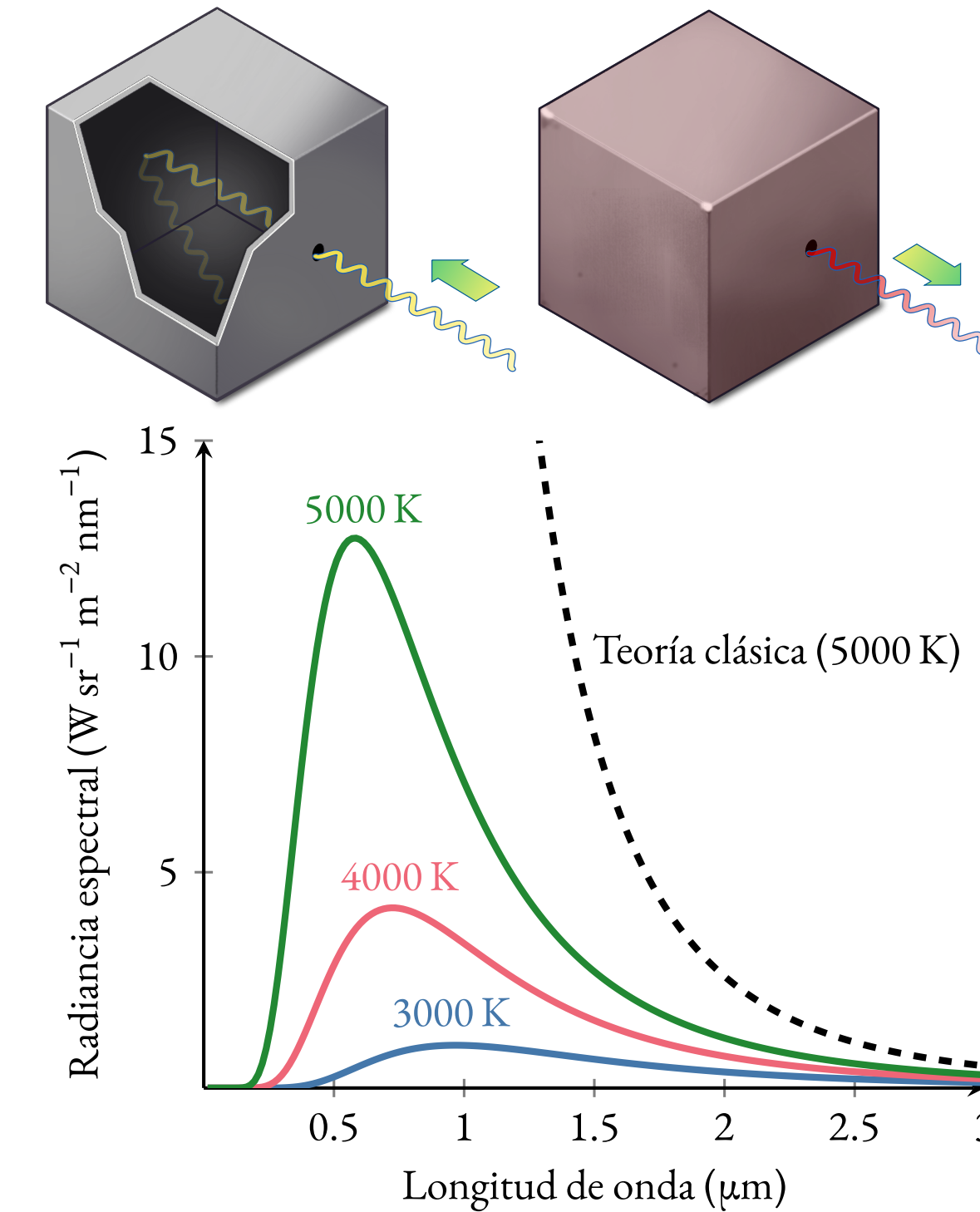
$$\Delta E = hcR \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

donde  $c = 299\,792\,458 \text{ m/s}$  es la velocidad de la luz en el vacío.

## Orígenes de la teoría cuántica

### Radiación de cuerpo negro

Es la **radiación electromagnética re-emitida** por un cuerpo ideal que absorbe toda la radiación que incide sobre él (**cuerpo negro**), estando en **equilibrio** termodinámico con su **entorno**. Tiene un espectro muy característico, inversamente relacionado con la intensidad, que depende únicamente de la temperatura del cuerpo. El **fallo** de la **teoría clásica** vigente a la hora de explicar la forma de este espectro se conoce como la **catástrofe ultravioleta**. **Max Planck** fue quien consiguió, en 1900, explicar el espectro del cuerpo negro, dando así **origen** a la **teoría cuántica**.



### Hipótesis de Planck

*La energía solo puede ser emitida/absorbida en paquetes discretos llamados cuantos o fotones, múltiplos de la frecuencia  $\nu$  de la radiación electromagnética asociada:*

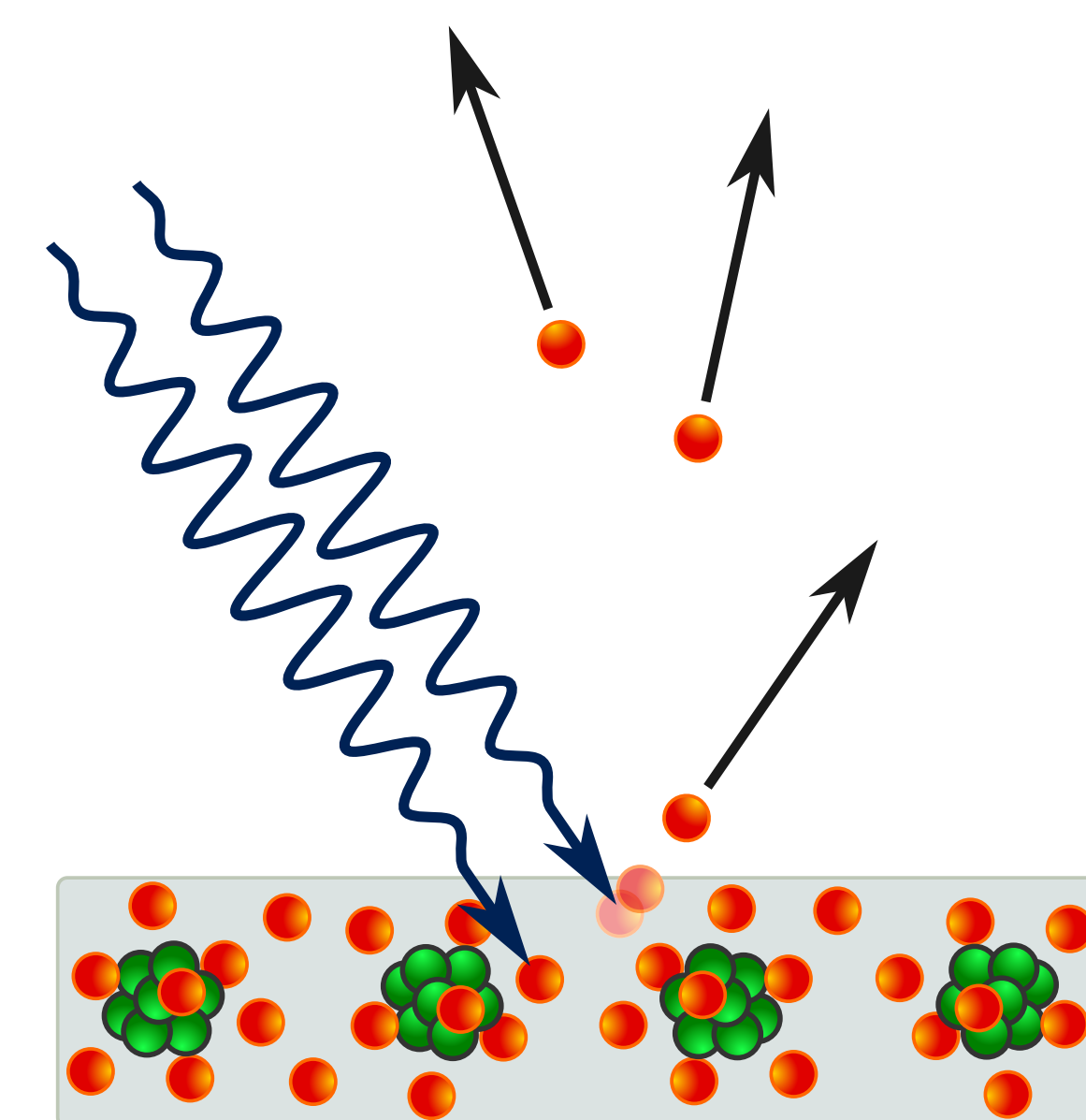
$$E = h\nu,$$

donde  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$  es la constante de Planck.

### Efecto fotoeléctrico

El **efecto fotoeléctrico** consiste en la **emisión** de (**foto**)**electrones** cuando radiación electromagnética, como por ejemplo luz ultravioleta, incide sobre un material, típicamente metálico. Esta emisión cumple las siguientes **características**:

- La **cantidad** de **fotoselectrones** emitidos es directamente **proporcional** a la **intensidad** de la **radiación** incidente.
- La **emisión** de **fotoselectrones** solo se produce cuando la radiación incidente tiene una **frecuencia mayor o igual** que una cierta frecuencia mínima, llamada **frecuencia umbral** o **de corte**,  $\nu_0$ , que es característica de cada material.
- La **energía cinética** de los **fotoselectrones** depende únicamente de la **frecuencia** de la **radiación** incidente.
- La **emisión** de **fotoselectrones** se realiza **instantáneamente**, sin existir ningún retraso entre la absorción de energía y la emisión de los fotoselectrones.



[https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Photoelectric\\_effect\\_in\\_a\\_solid\\_-\\_diagram.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Photoelectric_effect_in_a_solid_-_diagram.svg).

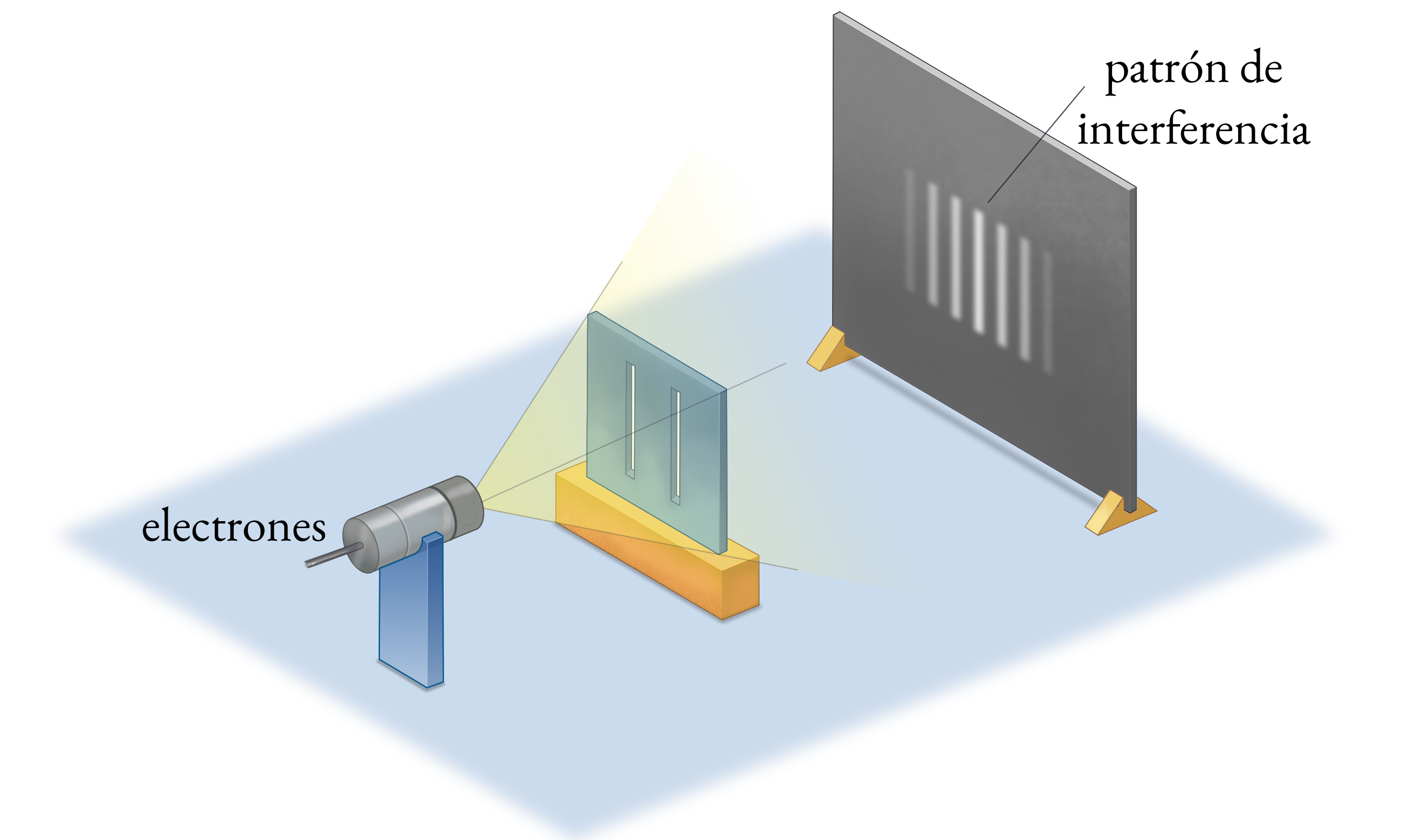
$$E = \phi + E_c$$
$$h\nu = h\nu_0 + E_c \Rightarrow E_c = h(\nu - \nu_0),$$

donde  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$  es la constante de Planck,  $\nu$  es la frecuencia de la radiación incidente,  $\nu_0$  es la frecuencia umbral (cuya energía asociada,  $\phi = h\nu_0$  se denomina **función de trabajo** o trabajo de extracción) y  $E_c = h(\nu - \nu_0)$  es la energía cinética máxima de los fotoselectrones, emitidos siempre que se cumpla  $\nu \geq \nu_0$ .

## Mecánica cuántica

### Dualidad onda-corpúsculo

Consiste en que el comportamiento de los **objetos cuánticos** no puede ser descrito considerando a estos como partículas u ondas, sino que tienen una **naturaleza dual**.



**Electrones** mostrando un **comportamiento** claramente **ondulatorio**, gracias al famoso **experimento de la doble rendija**. Traducida de [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical\\_and\\_Theoretical\\_Chemistry\\_Textbook\\_Maps/Map%3A\\_Physical\\_Chemistry\\_\(McQuarrie\\_and\\_Simon\)/01%3A\\_The\\_Dawn\\_of\\_the\\_Quantum\\_Theory/1.07%3A\\_de\\_Broglie\\_Waves\\_can\\_be\\_Experimentally\\_Observed](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Map%3A_Physical_Chemistry_(McQuarrie_and_Simon)/01%3A_The_Dawn_of_the_Quantum_Theory/1.07%3A_de_Broglie_Waves_can_be_Experimentally_Observed).

A partir de **experimentos** de **difracción** de **electrones**, **Louis de Broglie** fue el primero que propuso la siguiente **hipótesis**:

*Toda partícula de masa  $m$  moviéndose a una velocidad  $v$  tiene asociada una onda (de materia) cuya longitud de onda,  $\lambda$ , viene dada por*

$$\lambda = \frac{h}{mv},$$

siendo  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$  la constante de Planck.

### Principio de incertidumbre de Heisenberg

*Existen ciertos pares de magnitudes físicas (aquellas cuyo producto tiene dimensiones de  $\text{ML}^2\text{T}^{-1}$ ), que no pueden ser determinadas simultáneamente con total exactitud, pues el producto de sus incertidumbres ha de ser mayor o igual que  $\hbar/(4\pi) = \hbar/2$ .*

**Ejemplos** de tales magnitudes son:

$$\text{Posición } x \text{ y momento lineal } p: \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$
$$\text{Energía } E \text{ y tiempo } t: \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

donde  $\Delta$  denota la incertidumbre asociada y  $\hbar = h/(2\pi)$ .

El **principio de incertidumbre** de **Heisenberg** implica que, aunque se especifiquen todas las condiciones iniciales, no es posible predecir el valor de una cantidad con total certeza, dando así paso a una **interpretación probabilística** de la **mecánica cuántica**.





# ESTRUCTURA DE LA MATERIA

Química 2º Bach

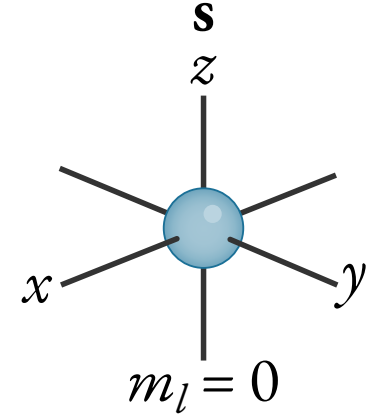
Rodrigo Alcaraz de la Osa



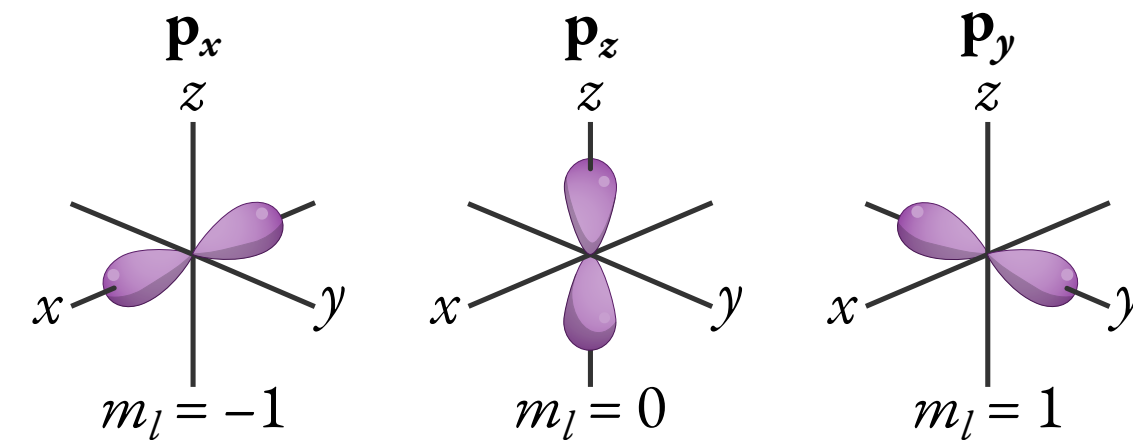
## Orbitales atómicos

Son **funciones matemáticas** que **describen** el **tamaño**, la **forma** y la **orientación** de las **regiones** del **espacio** donde es **más probable encontrar** al **electrón**.

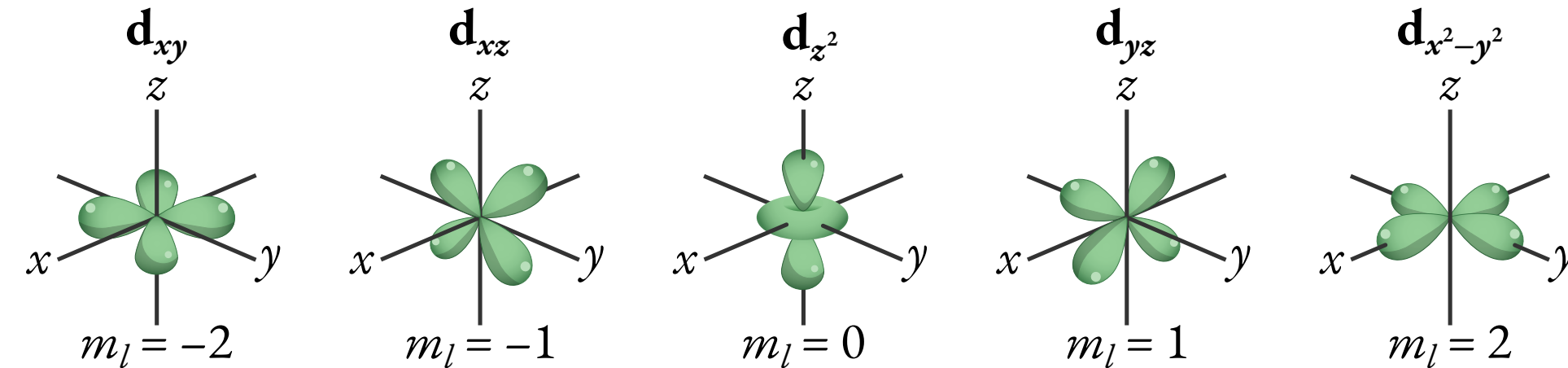
Orbital s:  $l = 0$



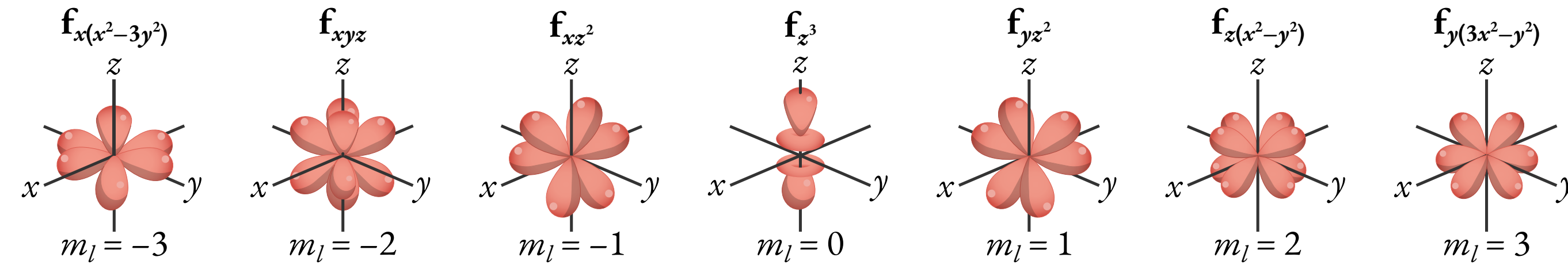
Orbitales p:  $l = 1$



Orbitales d:  $l = 2$



Orbitales f:  $l = 3$



Orbitales s ( $l = 0$ ), p ( $l = 1$ ), d ( $l = 2$ ) y f ( $l = 3$ ).

Adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/general-chemistry/quantum-theory/>.

## Números cuánticos y su interpretación

Los **números cuánticos** describen **valores** de **magnitudes físicas** que se **conservan** en la dinámica de un sistema cuántico, tales como la **energía** o el **momento angular**, las cuales están **cuantizadas** y por tanto toman **valores discretos**.

Para describir completamente el estado cuántico de un electrón en un átomo necesitamos **cuatro números cuánticos**, los cuales tienen un significado orbital concreto:

| Número cuántico | Símbolo | Significado orbital          | Rango de valores      | Ejemplos                                        |
|-----------------|---------|------------------------------|-----------------------|-------------------------------------------------|
| Principal       | $n$     | tamaño y energía del orbital | $1 \leq n$            | $n = 1, 2, 3, \dots$                            |
| Secundario      | $l$     | energía y forma del orbital  | $0 \leq l \leq n - 1$ | para $n = 3$<br>$l = 0, 1, 2$                   |
| Magnético       | $m_l$   | orientación del orbital      | $-l \leq m_l \leq l$  | para $l = 2$<br>$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$         |
| Espín           | $m_s$   | momento angular intrínseco   | $-s \leq m_s \leq s$  | para un electrón $s = 1/2$<br>$m_s = -1/2, 1/2$ |

## Estructura electrónica

### Principio de exclusión de Pauli

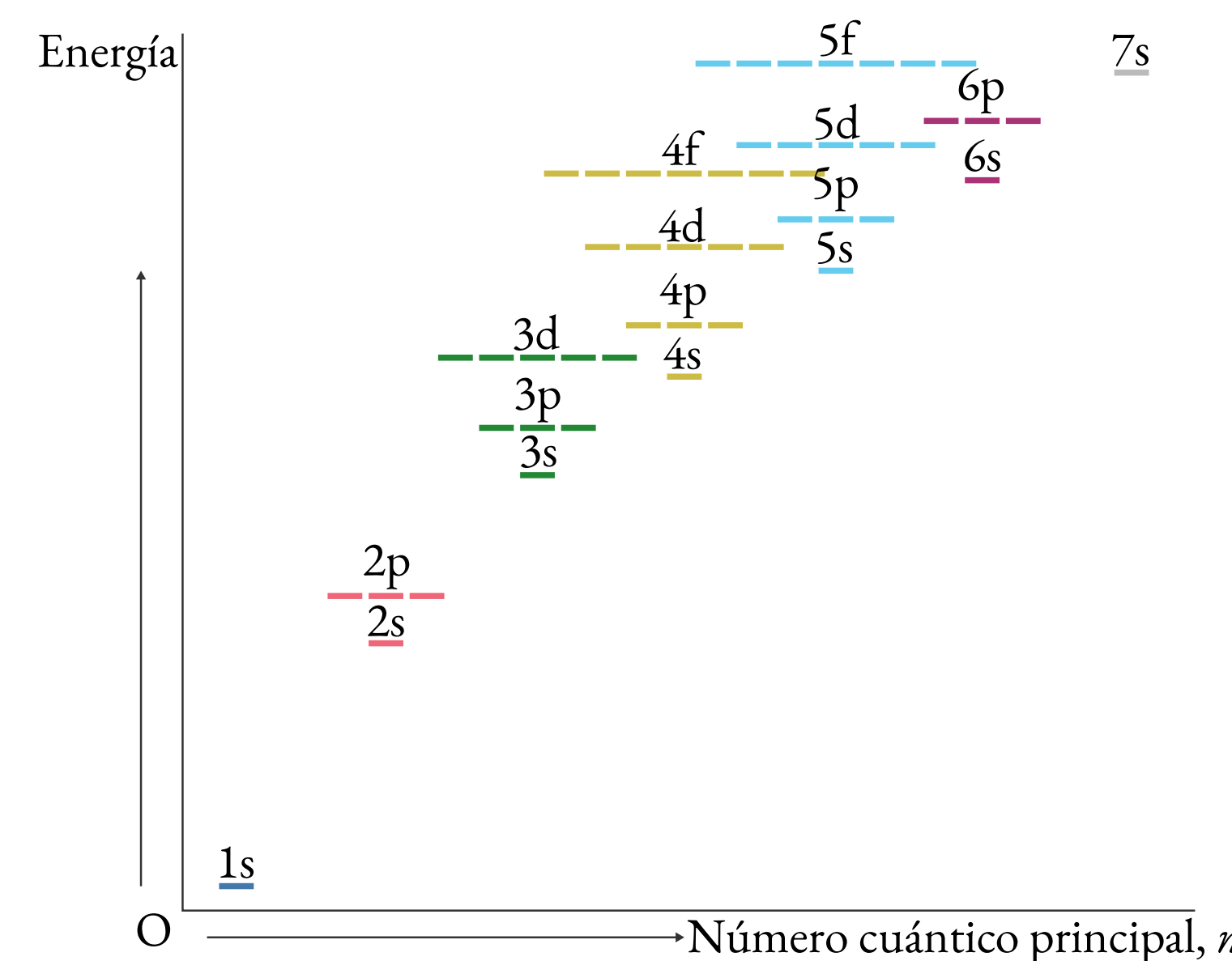
*Dos o más electrones no pueden tener todos sus números cuánticos idénticos (ocupar el mismo estado cuántico) dentro del mismo sistema cuántico (átomo).*

Gracias a este principio podemos determinar el **número máximo** de **electrones** que **caben** en cada tipo de **orbital**:

| Tipo de orbital        | s | p | d  | f  |
|------------------------|---|---|----|----|
| Número de orbitales    | 1 | 3 | 5  | 7  |
| Número máximo de $e^-$ | 2 | 6 | 10 | 14 |

### Orden energético creciente

La **configuración electrónica** es la **distribución** de **electrones** de un **átomo** en **orbitales atómicos** (s, p, d y f). El **diagrama de Möller** nos ayuda a saber en qué **orden** han de **llenarse** los distintos **orbitales**, siguiendo las **flechas** (orden energético creciente).



Traducida y adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/general-chemistry/quantum-theory/>.

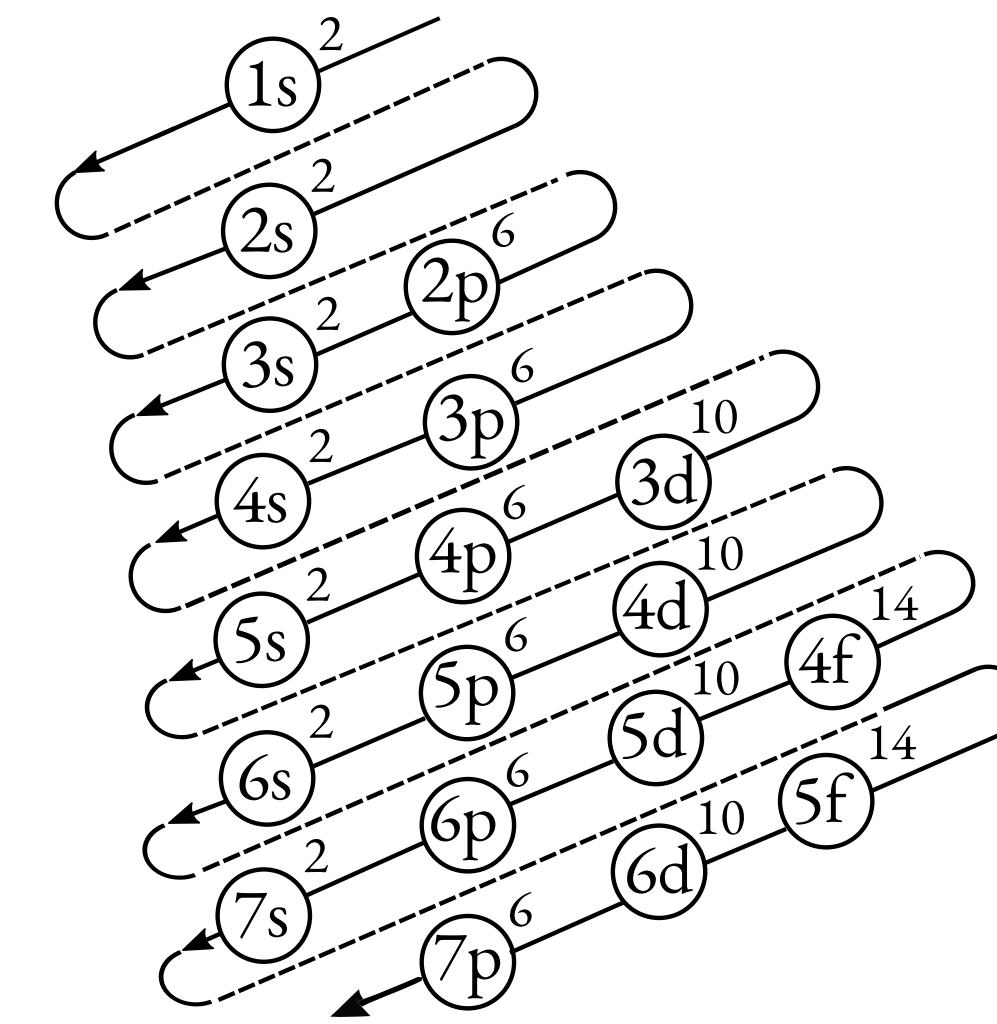
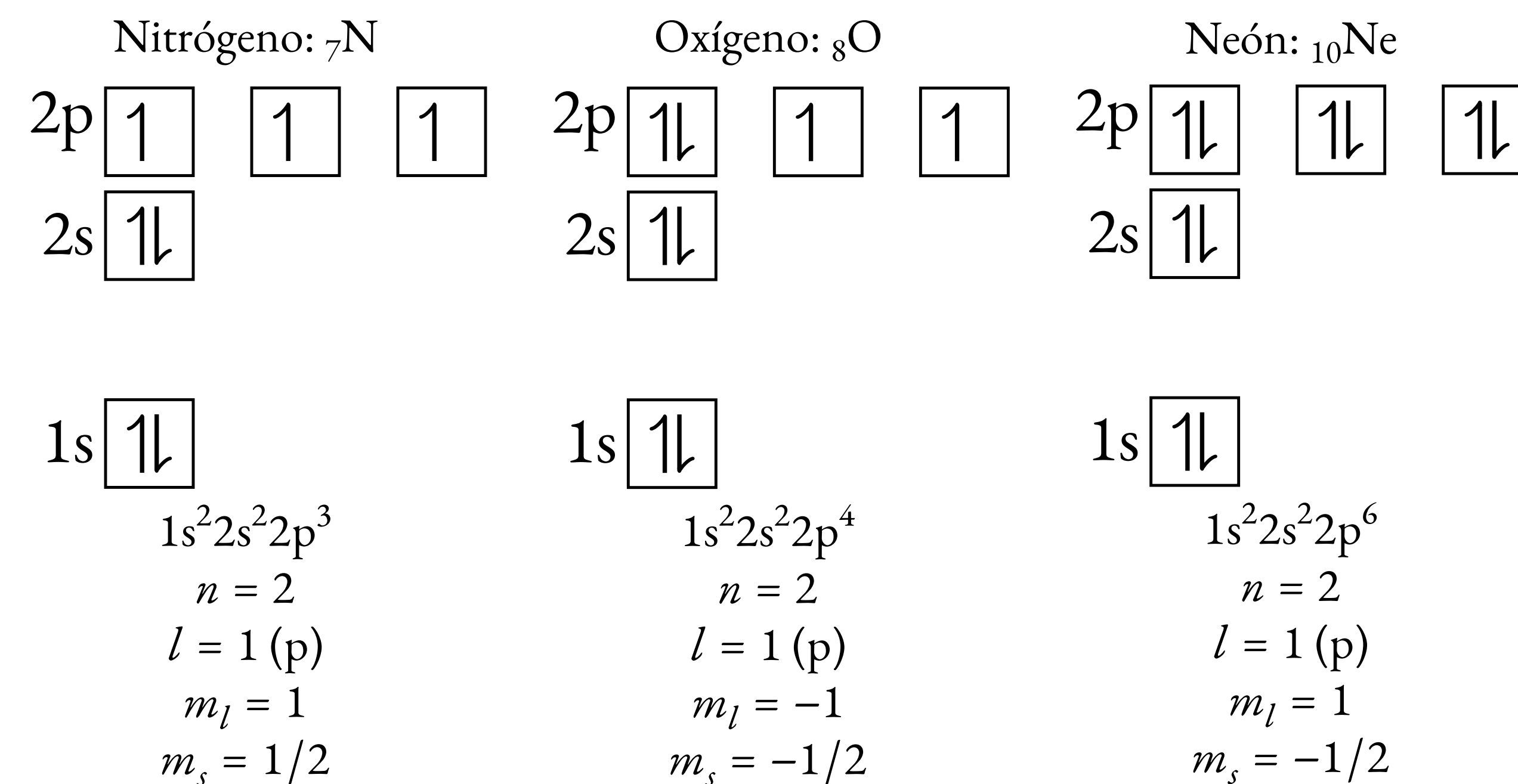


Diagrama de Möller. Adaptada de [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diagrama\\_de\\_Configuraci%C3%B3n\\_electr%C3%B3nica.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diagrama_de_Configuraci%C3%B3n_electr%C3%B3nica.svg).

### Regla de Hund de la máxima multiplicidad

*Al llenar orbitales de igual energía (por ejemplo los tres orbitales p) los electrones se distribuyen, siempre que sea posible, con sus espines paralelos, llenando los orbitales con la multiplicidad mayor.*

EJEMPLOS (se muestran también los números cuánticos del último electrón)



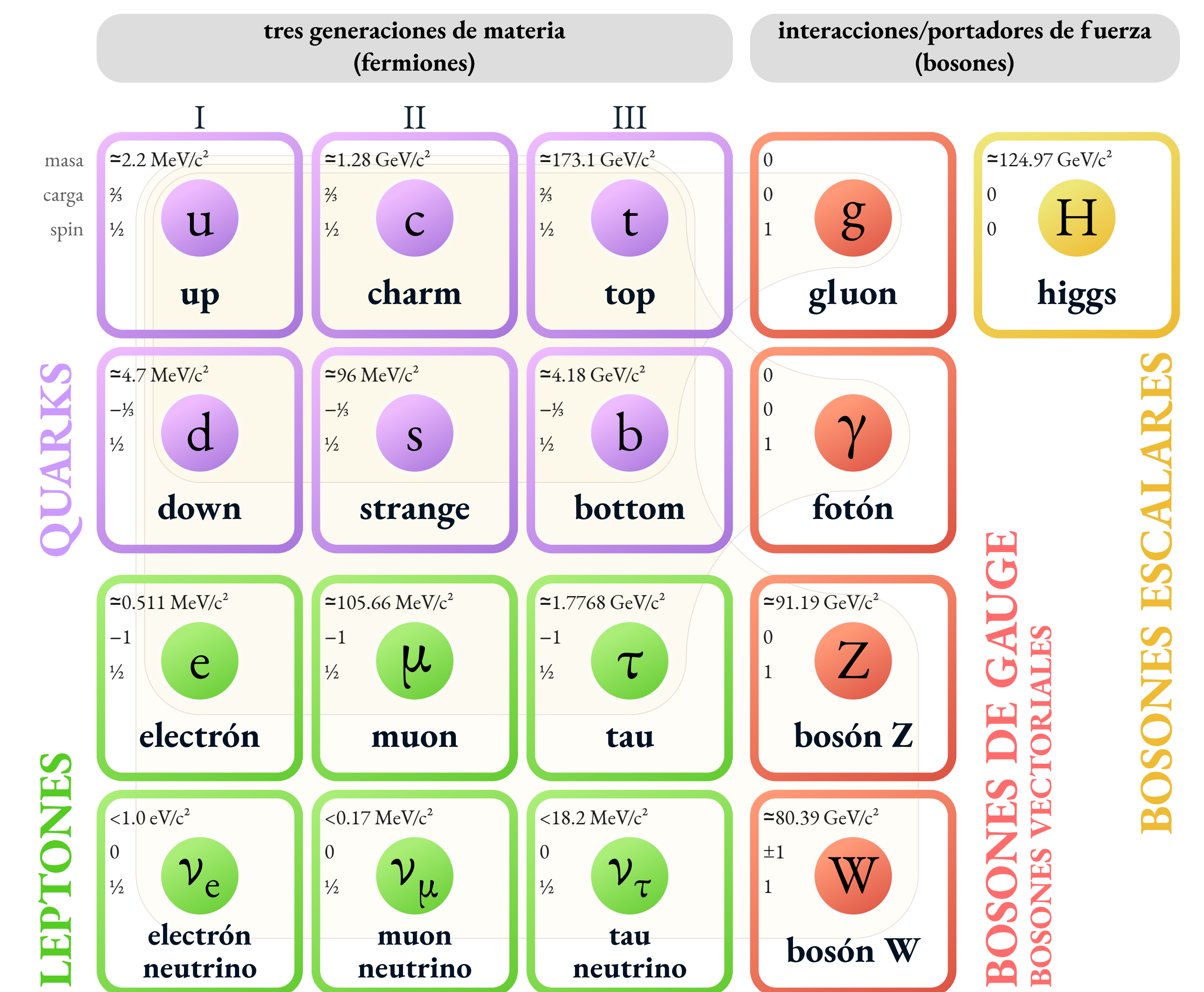
## Partículas subatómicas

Tras los descubrimientos de **Thomson**, **Rutherford** y **Chadwick** a principios del siglo XX, parecía claro que el átomo estaba formado por **protones** y **neutrones** en su núcleo y una corteza donde estaban los **electrones**.

| Partícula                                                                    | Masa/kg                 | Carga/C                  |
|------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|--------------------------|
| Protón                                                                       | $1.673 \times 10^{-27}$ | $1.602 \times 10^{-19}$  |
| Neutrón                                                                      | $1.675 \times 10^{-27}$ | 0                        |
| Electrón                                                                     | $9.109 \times 10^{-31}$ | $-1.602 \times 10^{-19}$ |
| $m_{\text{protón}} \approx m_{\text{neutrón}} \sim 2000 m_{\text{electrón}}$ |                         |                          |
| $q_{\text{protón}} = -q_{\text{electrón}}$                                   |                         |                          |

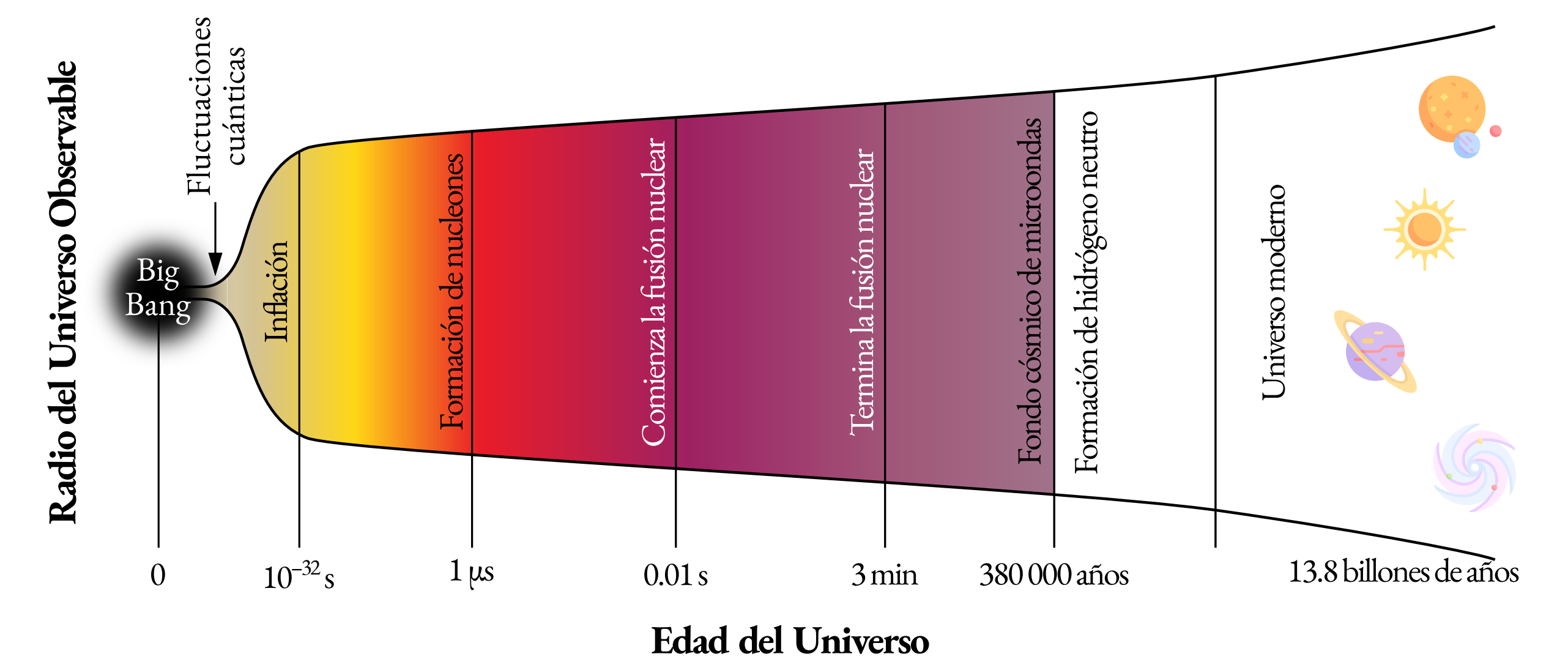
### Modelo estándar

Es la teoría que **describe tres de las cuatro interacciones fundamentales** de la naturaleza conocidas (electromagnética, nuclear fuerte y nuclear débil), además de **clasificar** todas las **partículas elementales** conocidas.



Traducida y adaptada de [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Standard\\_Model\\_of\\_Elementary\\_Particles.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Standard_Model_of_Elementary_Particles.svg).

## Evolución del Universo



Traducida y adaptada de [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:History\\_of\\_the\\_Universe.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:History_of_the_Universe.svg).  
Iconos diseñados por Freepik de <https://www.flaticon.es/>.