

ESTRUCTURA DE LA MATERIA

Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa



Modelos atómicos

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

Modelo atómico de Bohr

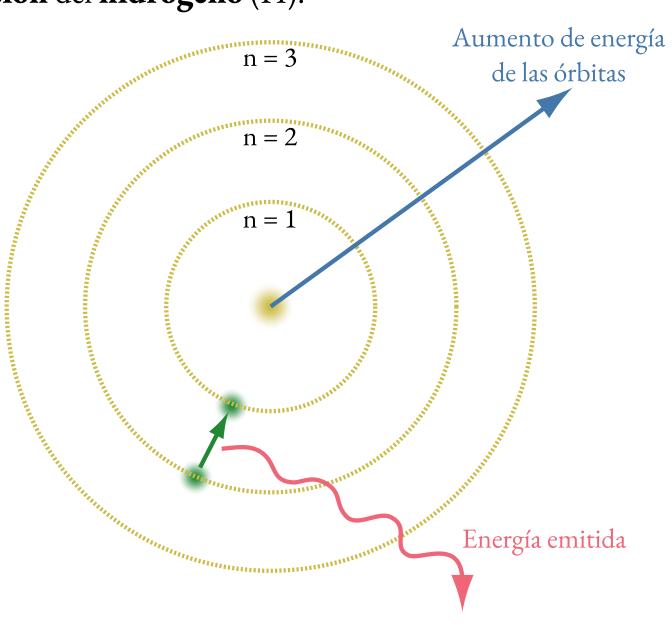
Propuesto en 1913 por Niels Bohr para explicar la estabilidad de la materia y los característicos espectros de emisión y absorción de los gases.



Espectro discreto de emisión del hidrógeno (H).

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

- 1. Los electrones describen órbitas circulares en torno al núcleo sin irradiar energía.
- 2. Solo están **permitidas** aquellas **órbitas** en las que el electrón tiene un **momento angular múltiplo** entero de $\hbar = h/(2\pi)$.
- 3. 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.



Traducida y adaptada de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:
Bohr_atom_model_English.svg.

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 λ es la longitud de onda de la radiación emitida en el vacío, $R = 1.097 \times 10^7 \,\mathrm{m}^{-1}$ 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, ΔE :

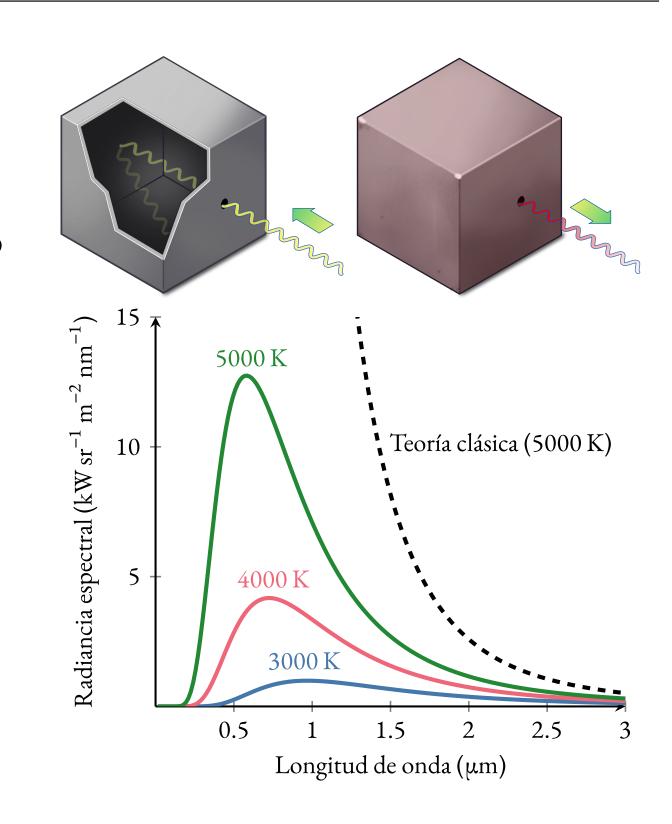
$$\Delta E = hcR \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right),\,$$

donde c = 299792458 m/s es la velocidad de la luz en el vacío.

Origenes de la teoria 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 v de la radiación electromagnética asociada:

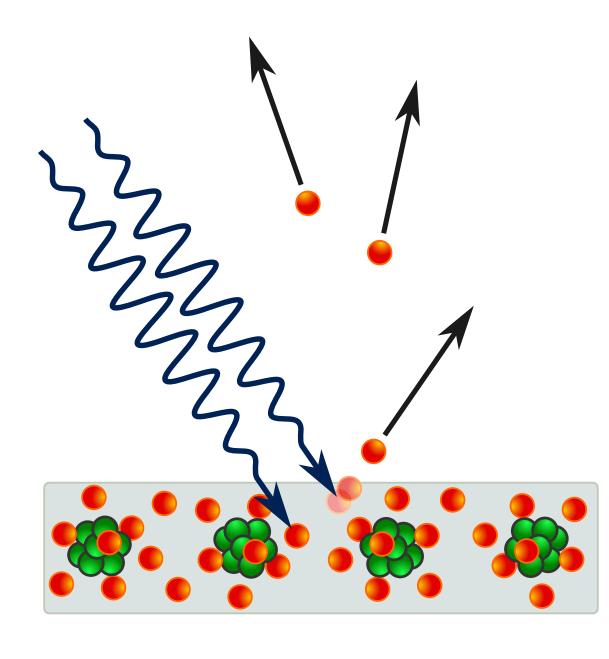
$$E = h\nu$$
,

donde $h = 6.626 \times 10^{-34} \, \text{J} \, \text{s}$ 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 fotoelectrones emitidos es directamente proporcional a la intensidad de la radiación incidente.
- La emisión de fotoelectrones solo se produce cuando la radiación incidente tiene una frecuencia mayor o igual que una cierta frecuencia mínima, llamada frecuencia umbral o de corte, ν₀, que es característica de cada material.
- La energía cinética de los fotoelectrones depende únicamente de la frecuencia de la radiación incidente.
- La emisión de fotoelectrones se realiza instantáneamente, sin existir ningún retraso entre la absorción de energía y la emisión de los fotoelectrones.



https://commons.wikimedia.org/wiki/File: Photoelectric_effect_in_a_solid_-_diagram.svg.

$$E = \phi + E_{c}$$

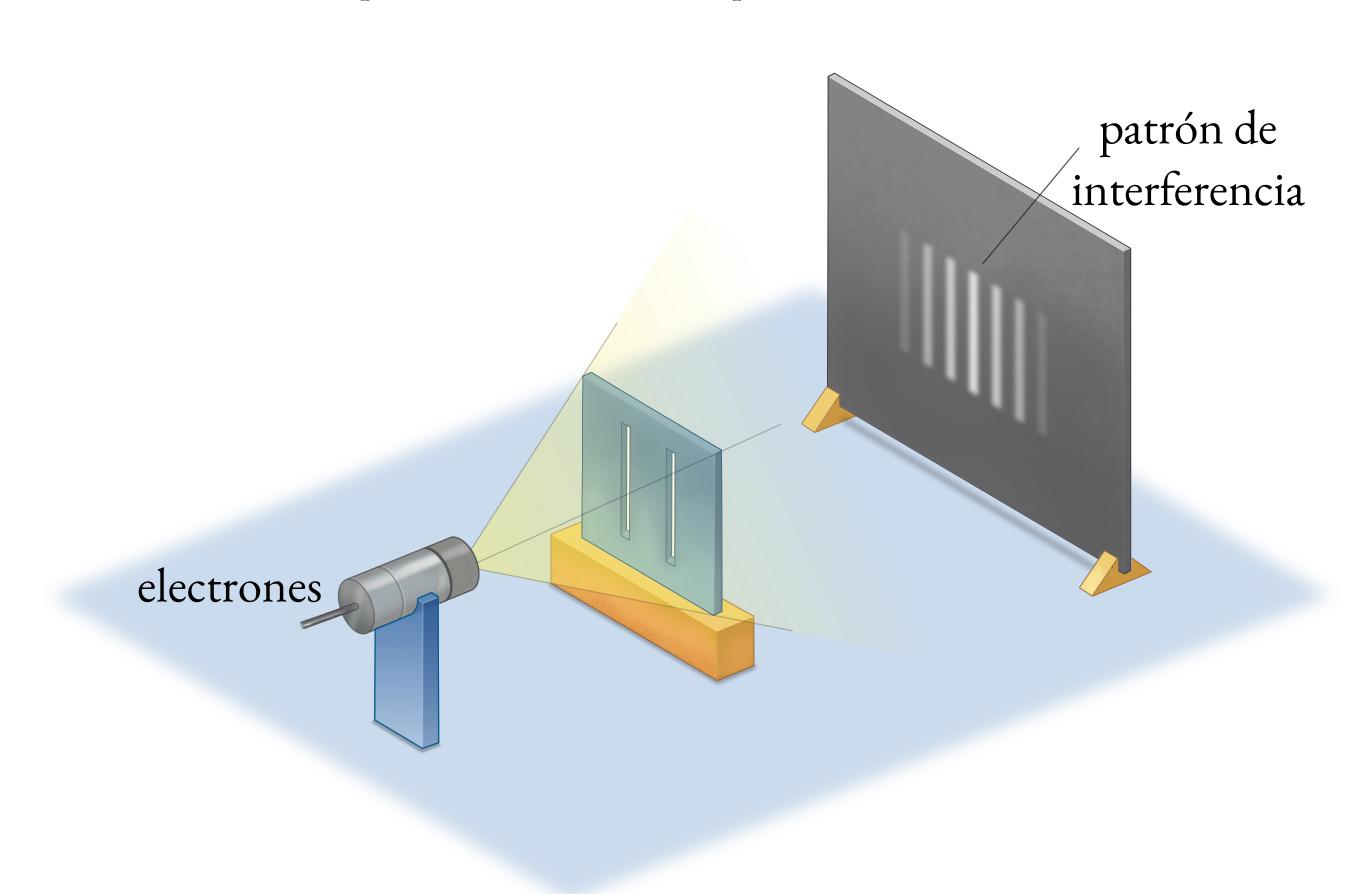
$$h\nu = h\nu_{0} + E_{c} \Longrightarrow E_{c} = h(\nu - \nu_{0}),$$

donde $h = 6.626 \times 10^{-34} \, \mathrm{J}\,\mathrm{s}$ es la constante de Planck, ν es la frecuencia de la radiación incidente, ν_0 es la frecuencia umbral (cuya energía asociada, $\phi = h\nu_0$ se denomina **función** de **trabajo** o trabajo de extracción) y $E_{\rm c} = h(\nu - \nu_0)$ es la energía cinética máxima de los fotoelectrones, 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.

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, λ, viene dada por

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

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

Principio de incertidumbre de Heisenberg

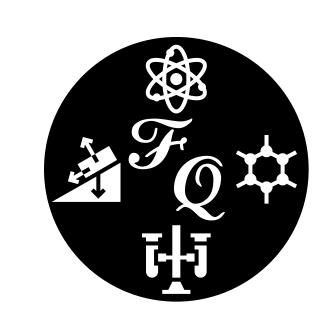
Existen ciertos pares de magnitudes físicas (aquellas cuyo producto tiene dimensiones de ML^2T^{-1}), que no pueden ser determinadas simultáneamente con total exactitud, pues el producto de sus incertidumbres ha de ser mayor o igual que $h/(4\pi) = \hbar/2$.

Ejemplos de tales magnitudes son:

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

donde Δ 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

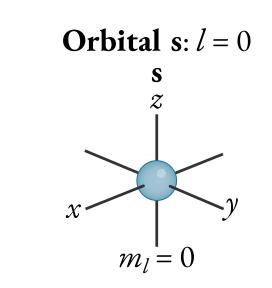
Química 2.º Bach

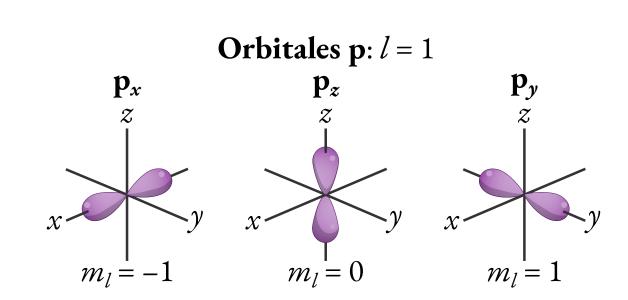
Rodrigo Alcaraz de la Osa

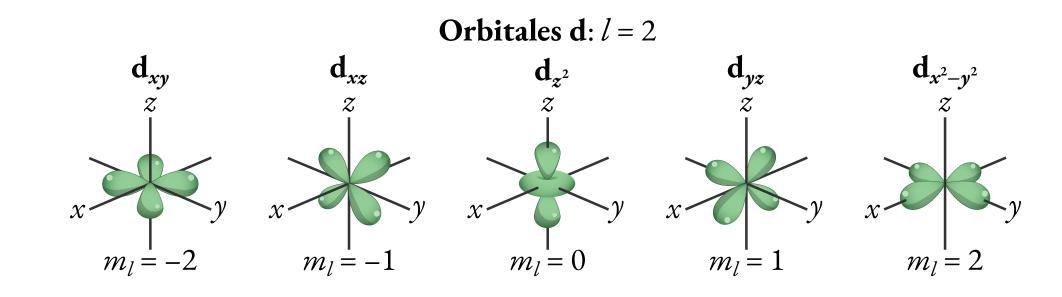


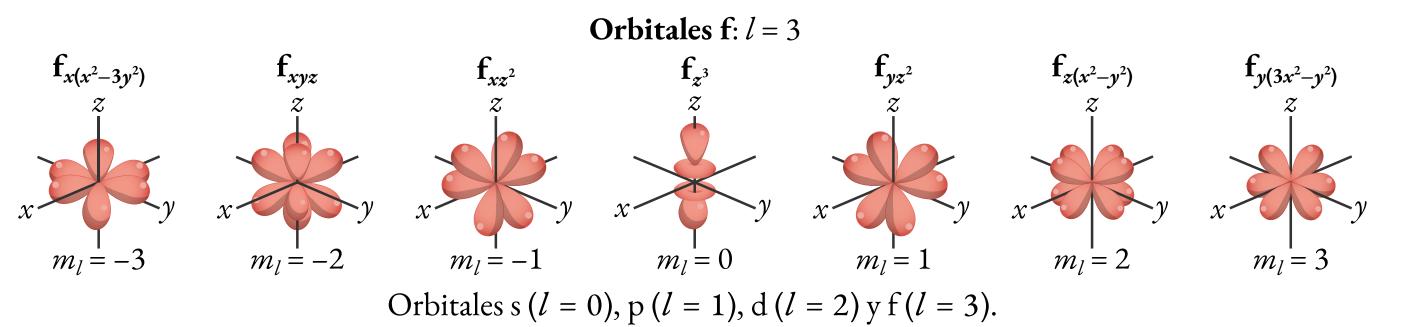
Orbitales atomicos

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









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	$0 \le l \le n-1$	para $n = 3$ $l = \{0, 1, 2\}$
Magnético	m_l	orientación del orbital	$-l \le m_l \le l$	para $l = 2$ $m_l = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$
Espín	$m_{\scriptscriptstyle \mathcal{S}}$	momento angular intrínseco	$-s \le m_s \le s$	para un electrón $s = 1/2$ $m_s = \{-1/2, 1/2\}$

Estructura electrónica

Principio de exclusión de Pauli

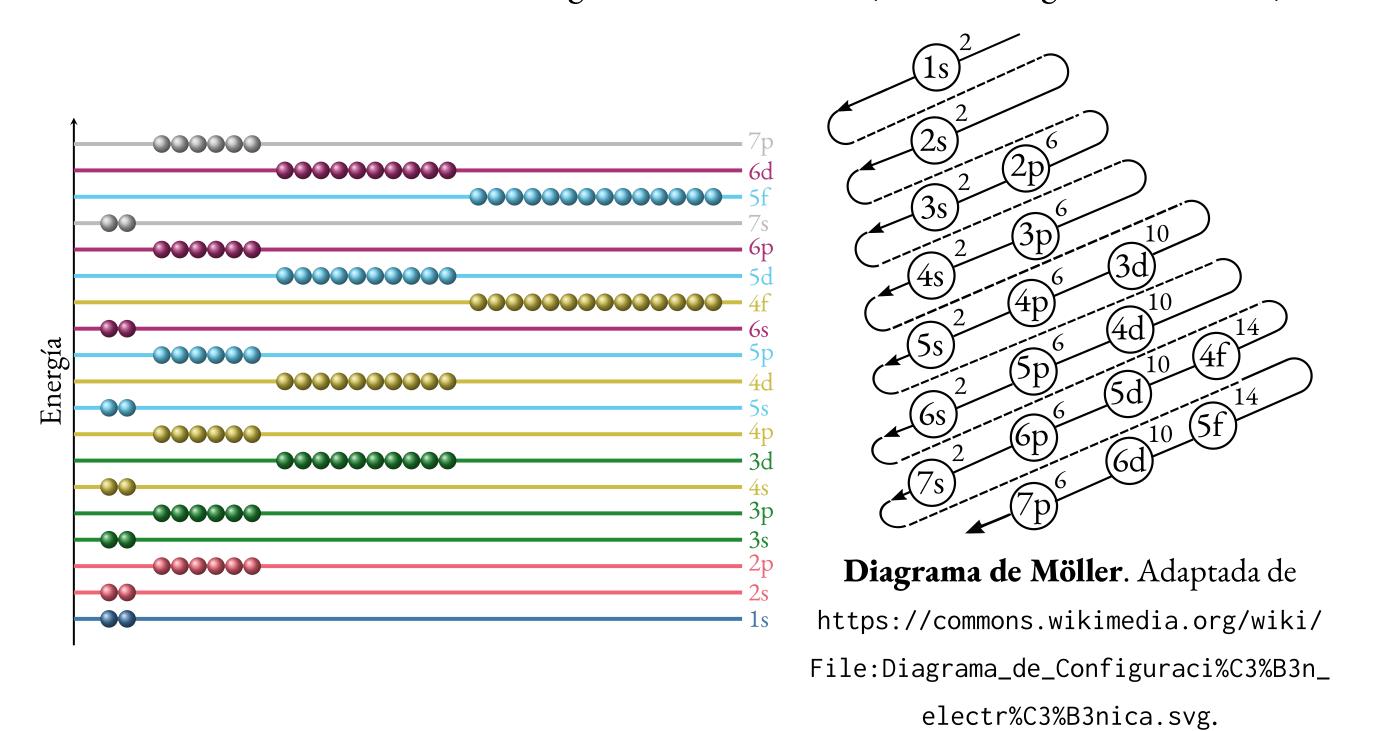
Dos o más electrones no pueden tener todos sus números cuánticos idénticos (ocupar el mismo estado cuántico) dentro del mismo sistema cuántico (átomo).

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 los 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).



Regla de Hund de la máxima multiplicidad

 $m_s = 1/2$

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)

EJEMPLOS (SC III destrair taimbien 103 humeros cuanticos der dicimo electron)						
Nitrógeno: 7N	Oxígeno: 8O	Neón: 10Ne				
2p 1 1 1	2p 1 1 1	2p 11 11 11				
2s 1	2s 1L	2s 1				
1s 1L	1s 1L	1s 1L				
$1s^2 2s^2 2p^3$	$1s^22s^22p^4$	$1s^22s^22p^6$				
n = 2	n = 2	n = 2				
l=1(p)	l=1 (p)	l=1(p)				
$m_I = 1$	$m_I = -1$	$m_I = 1$				

 $m_{s} = -1/2$

 $m_{s} = -1/2$

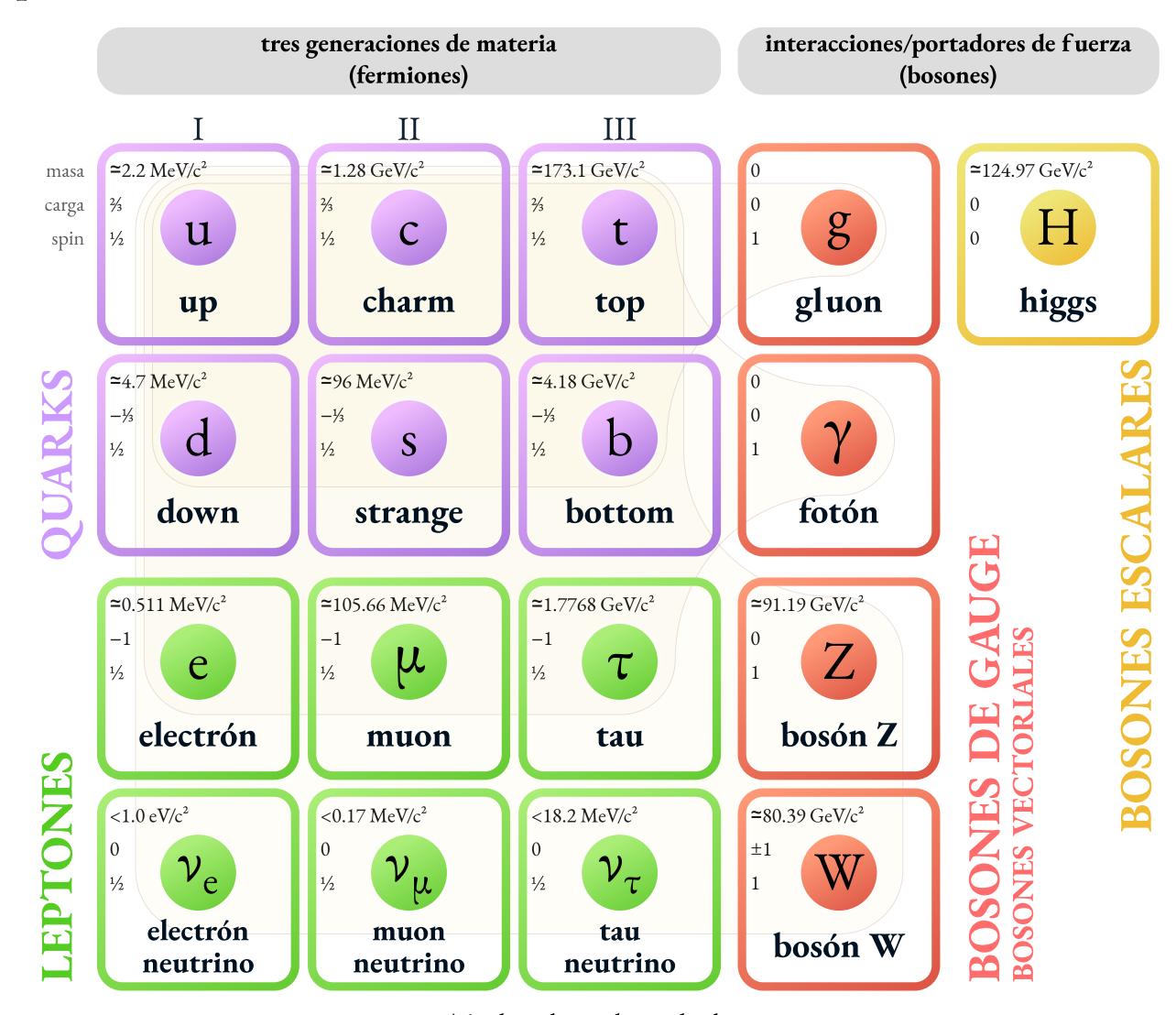
Particulas subatómicas

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	1.673×10^{-27}	1.602×10^{-19}
Neutrón	1.675×10^{-27}	0
Electrón	9.109×10^{-31}	-1.602×10^{-19}
$m_{ m prot\acute{o}n}$	$\simeq m_{\rm neutrón} \sim 2$	$000m_{ m electr\'{o}n}$
	$q_{\text{prot\'on}} = -q_{\text{elec}}$	ctrón

Modelo estándar

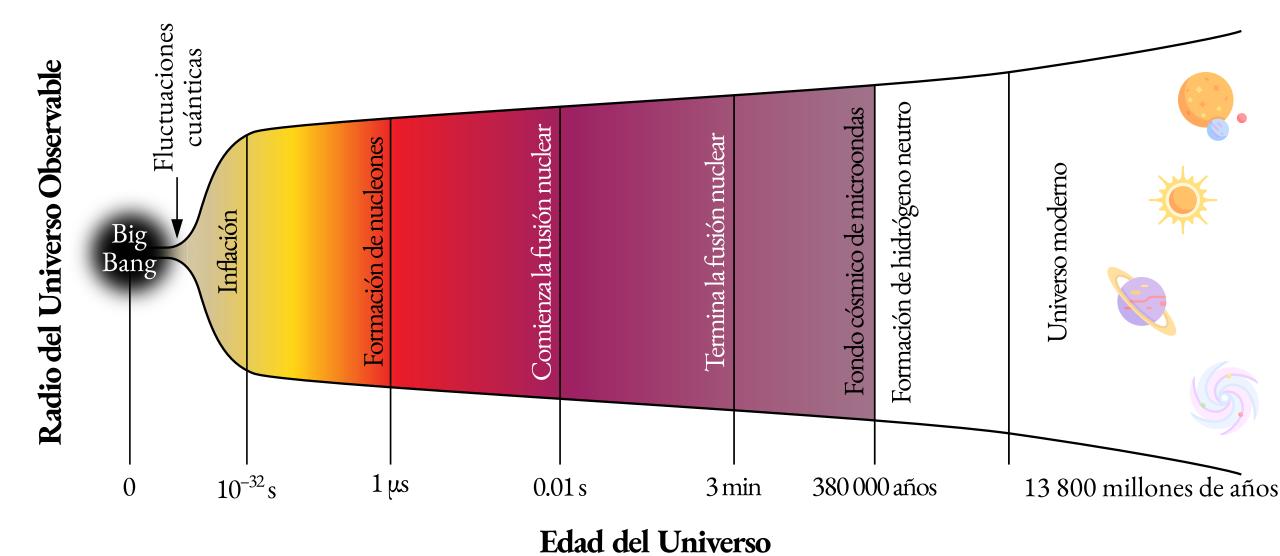
Es la teoría que describe tres de las cuatro interacciones fundamentales de la naturaleza conocidas (electromagnética, nuclear fuerte y nuclear débil), además de clasificar todas las partículas elementales conocidas.



Traducida y adaptada de

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Standard_Model_of_Elementary_Particles.svg.

Evolución del Universo



Traducida y adaptada de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:History_of_the_Universe.svg.

Iconos diseñados por Freepik de https://www.flaticon.es/.