



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

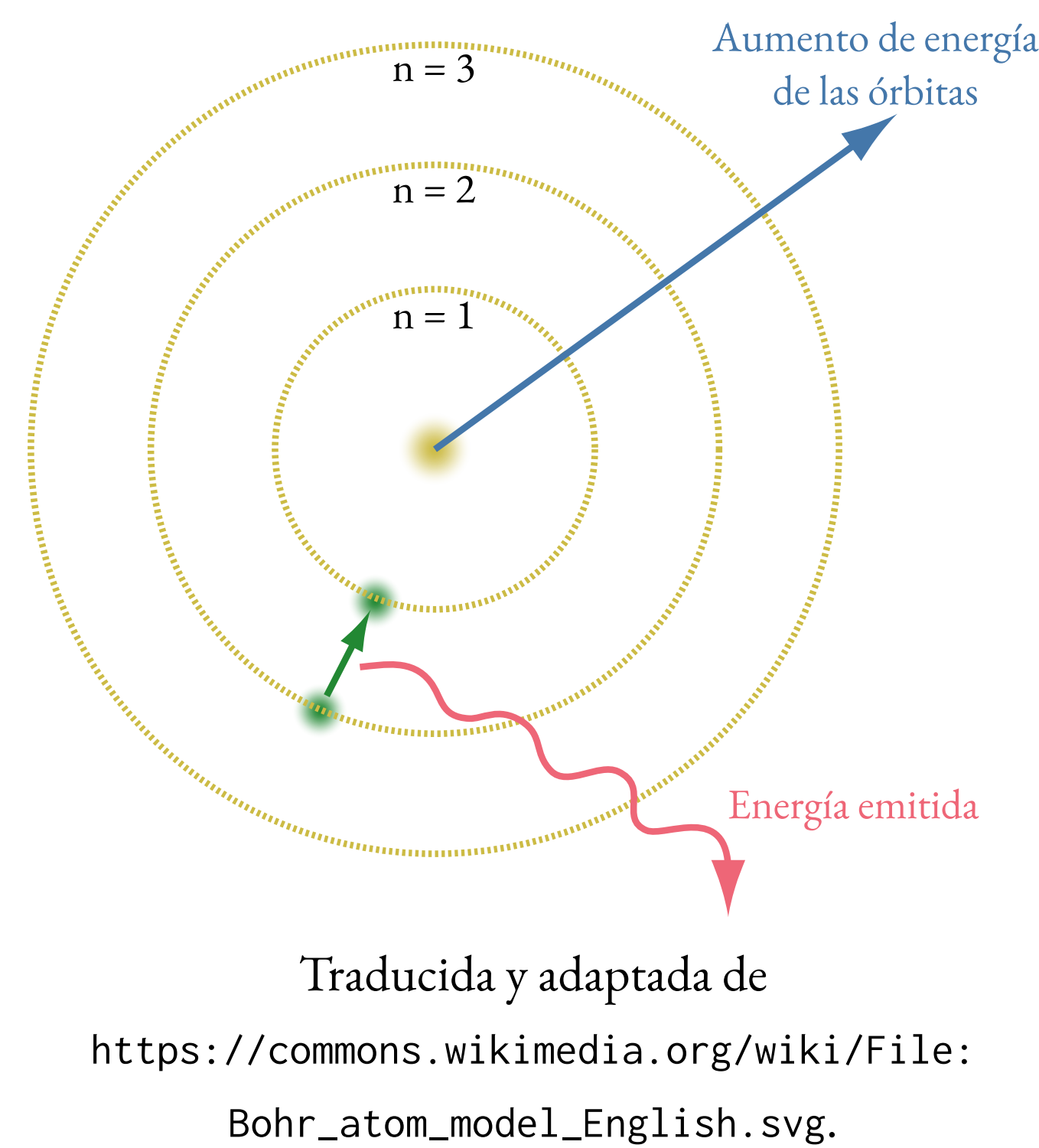
Propuesto en **1913** por Niels **Bohr** para **explicar** la **estabilidad** de la **materia** y los **característicos espectros** de emisión y absorción de los **gases**.



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

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

- 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 λ 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, ΔE :

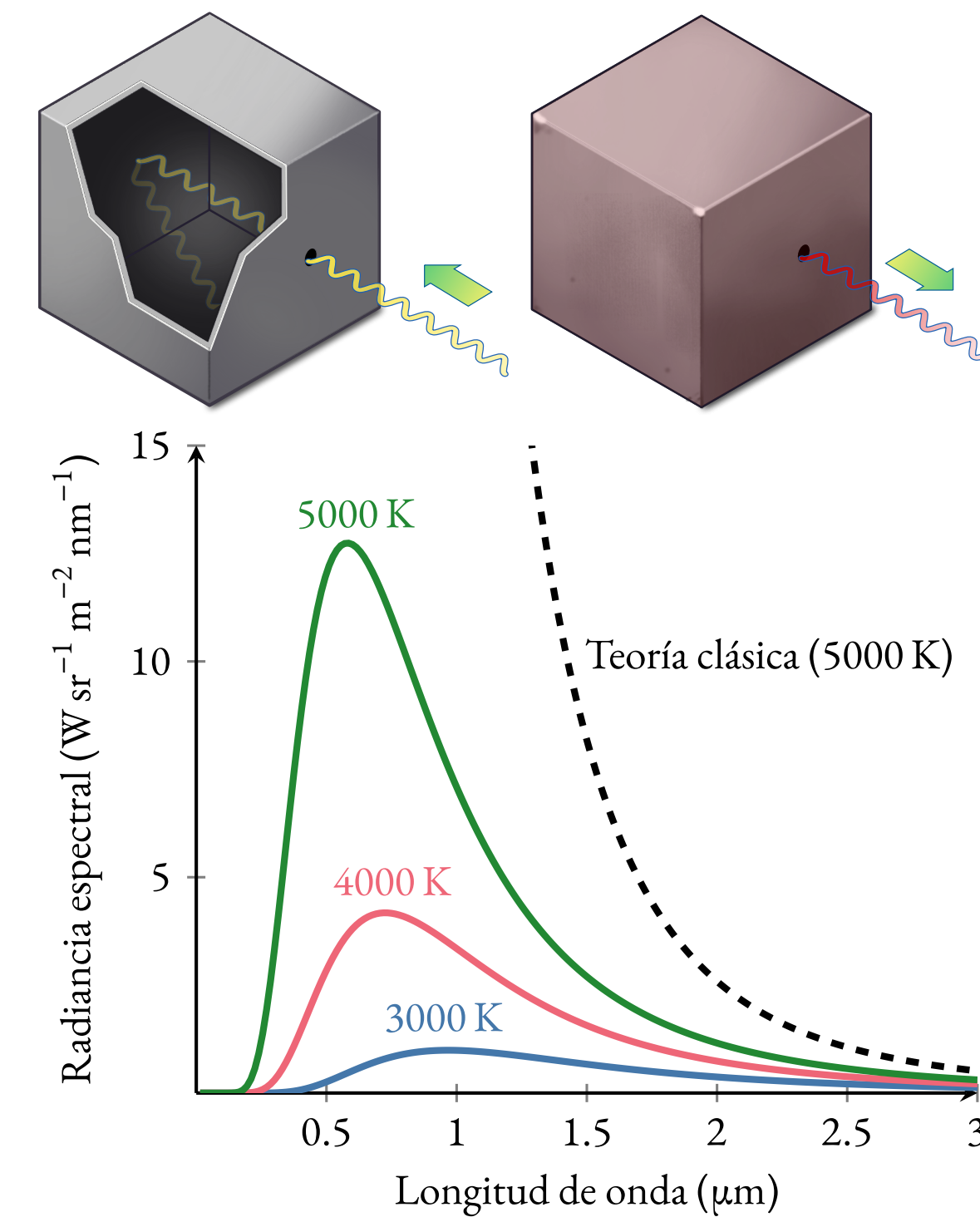
$$\Delta E = hcR \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

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 ν de la radiación electromagnética asociada:

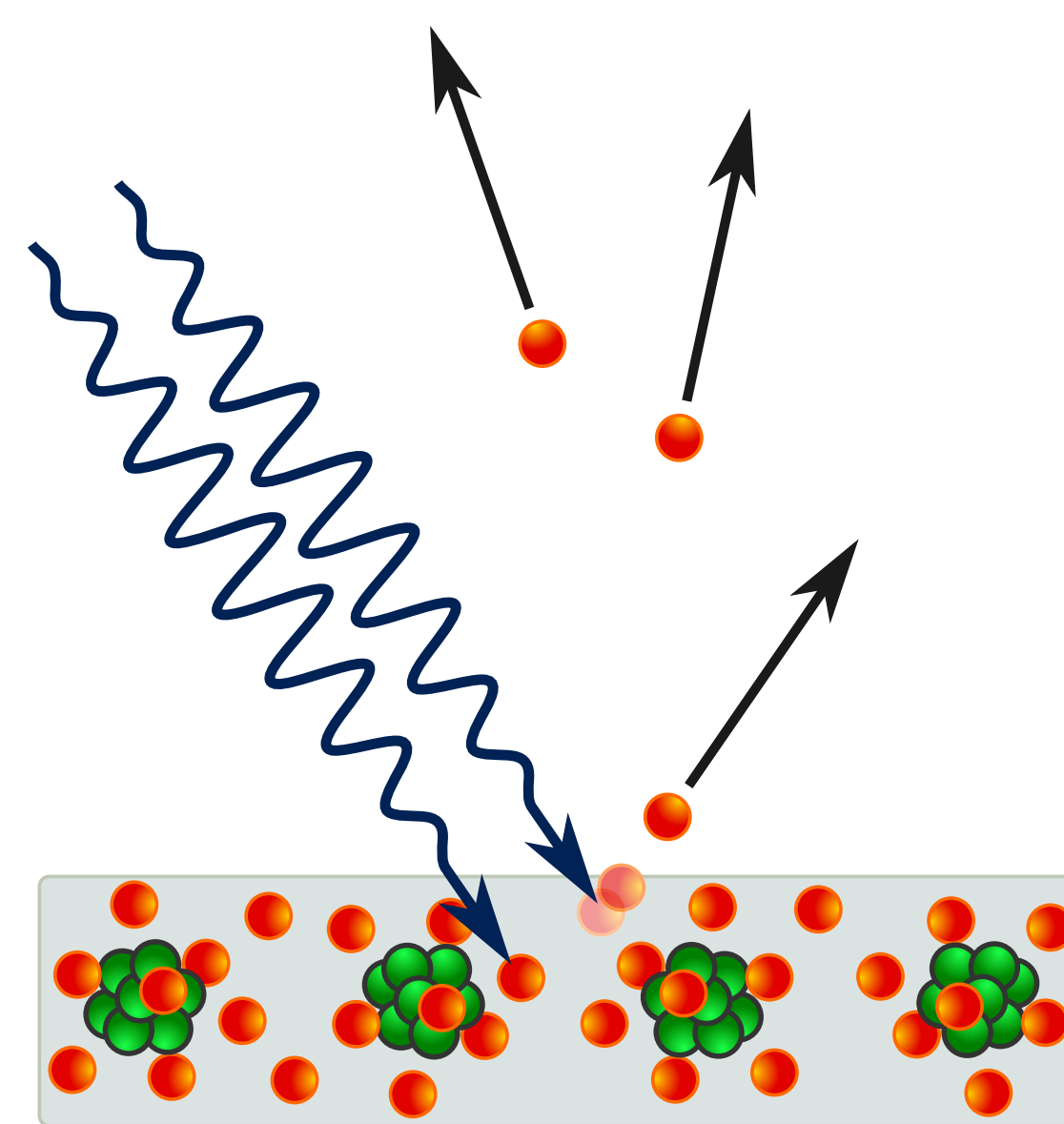
$$E = h\nu,$$

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**, ν_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

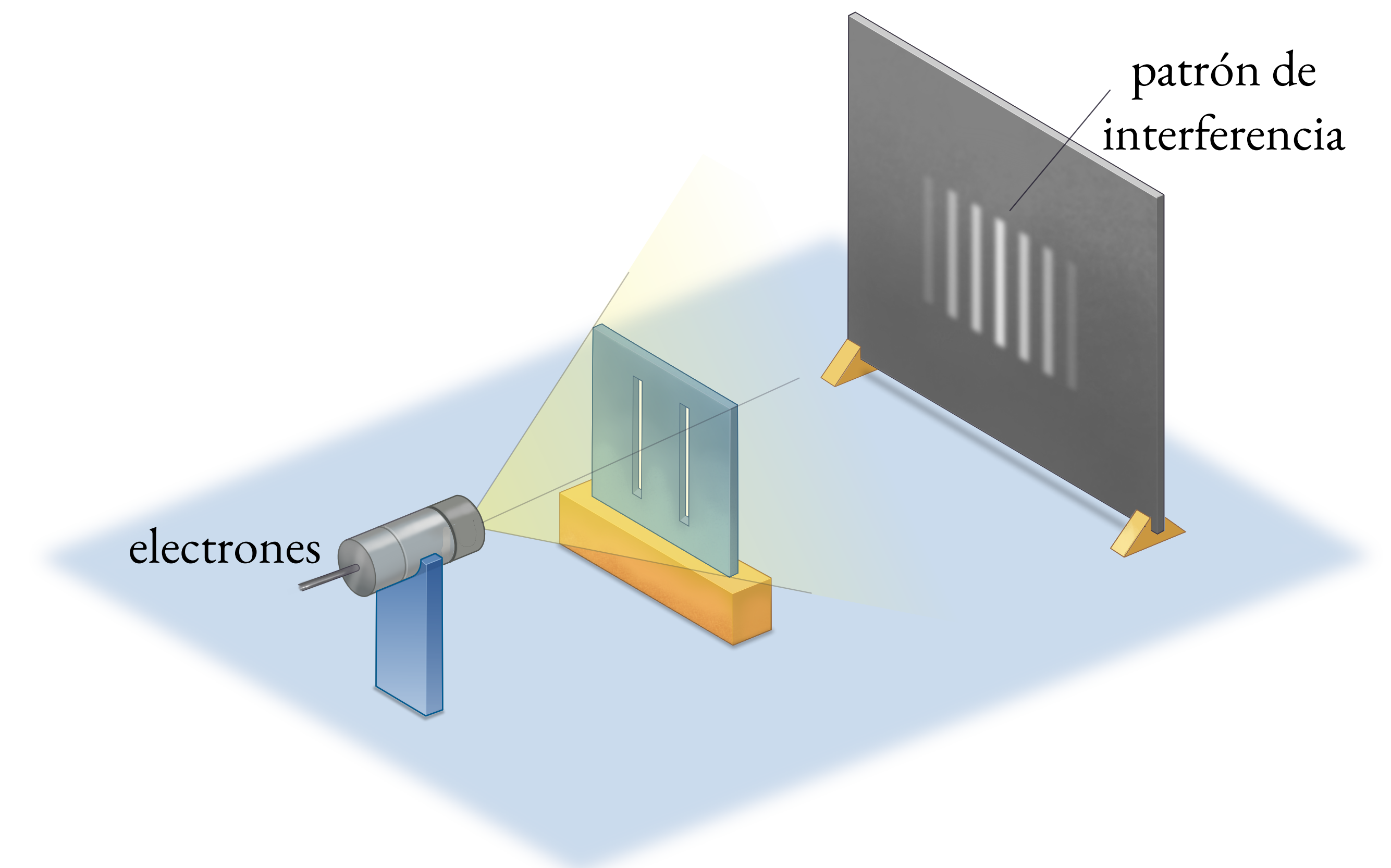
$$E = \phi + E_c$$
$$h\nu = h\nu_0 + E_c \Rightarrow E_c = h(\nu - \nu_0),$$

donde $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ es la constante de Planck, 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 $E_c = h(\nu - \nu_0)$ 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, λ , 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 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 $\hbar/(4\pi) = \hbar/2$.

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 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

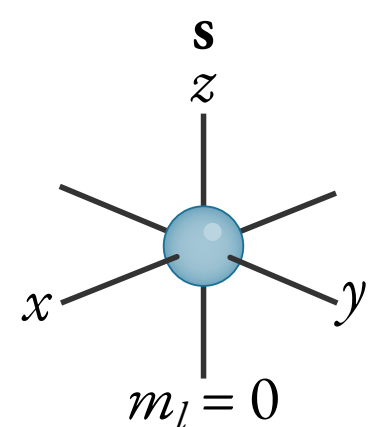
Rodrigo Alcaraz de la Osa



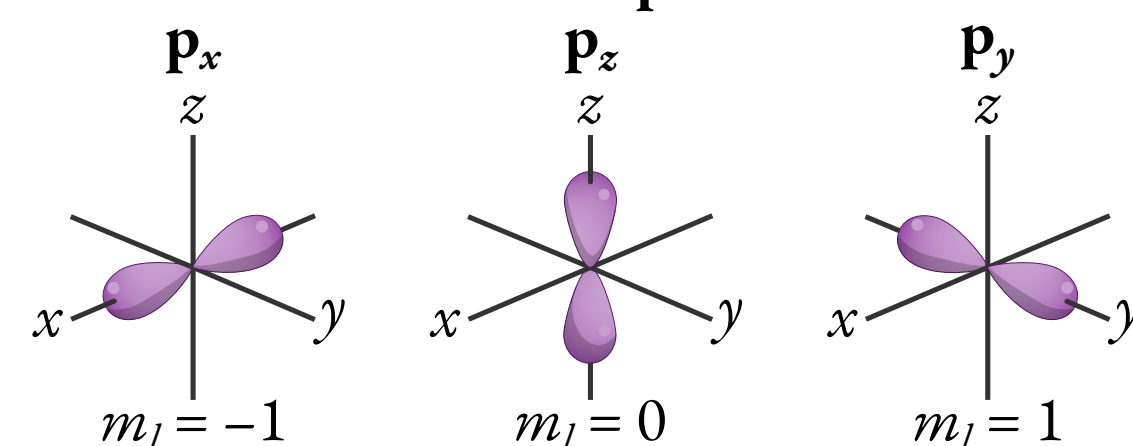
Orbitales atómicos

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

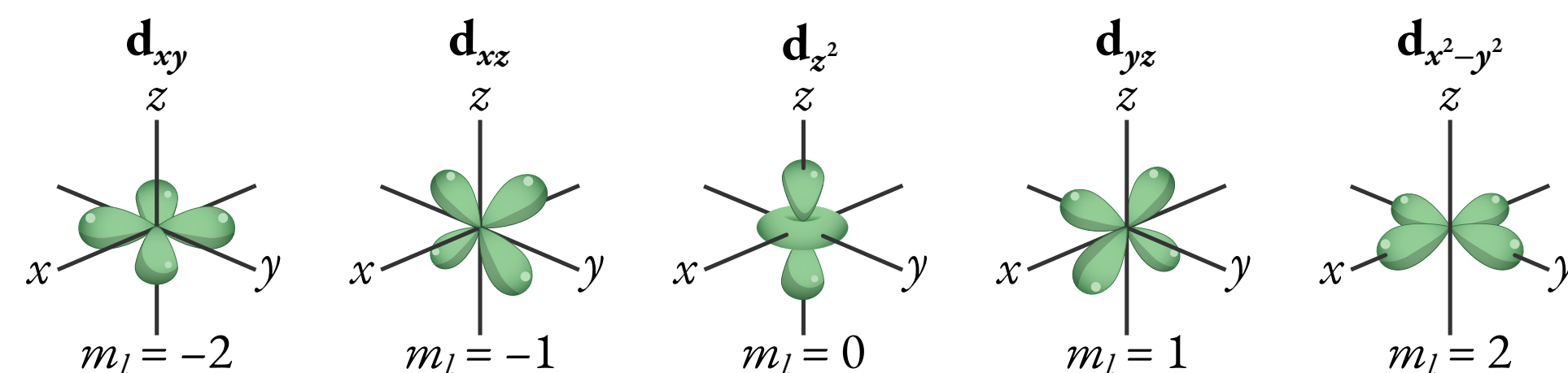
Orbital s: $l = 0$



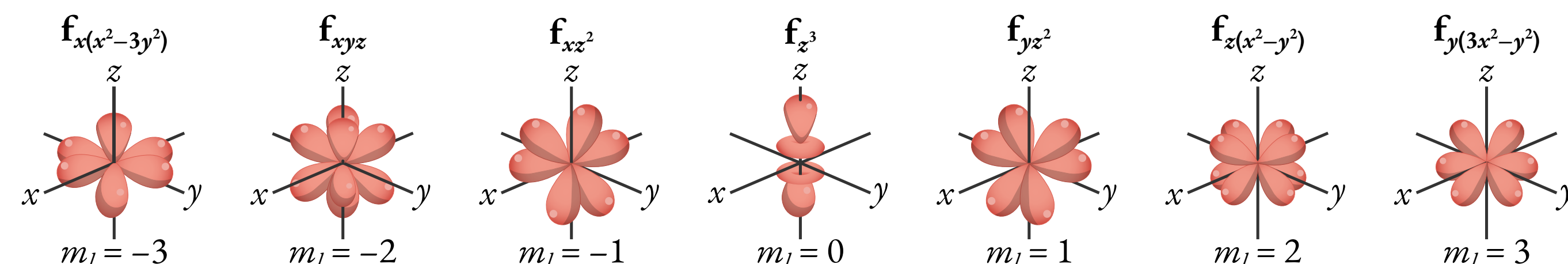
Orbitales p: $l = 1$



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

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).

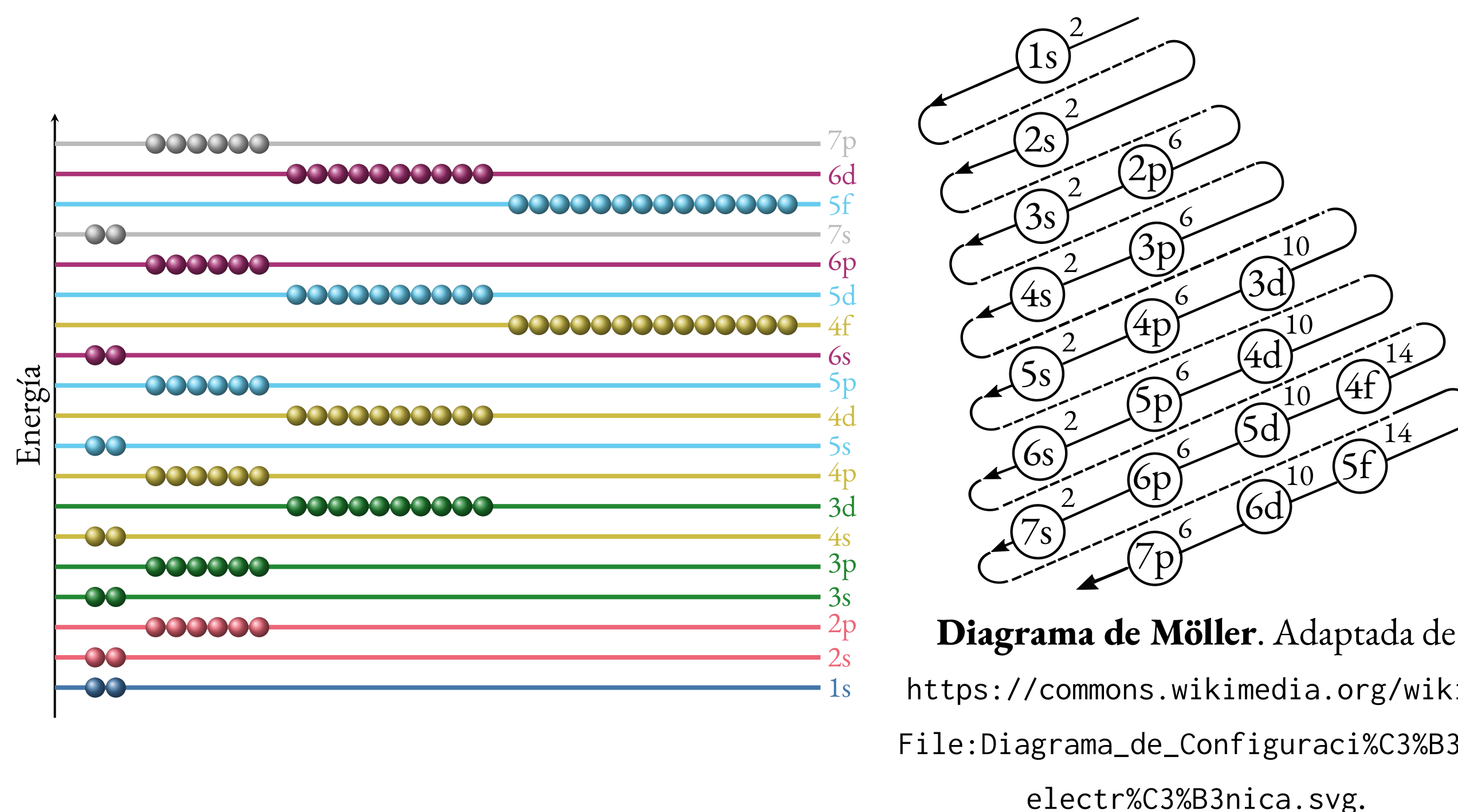


Diagrama de Möller. Adaptada de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diagrama_de_Configuraci%C3%B3n_electr%C3%B3nica.svg.

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**)

| Nitrógeno: ${}_7\text{N}$ | Oxígeno: ${}_8\text{O}$ | Neón: ${}_{10}\text{Ne}$ |
|--|--|---|
| 2p $\boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow}$ | 2p $\boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow}$ | 2p $\boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow}$ |
| 2s $\boxed{\uparrow\downarrow}$ | 2s $\boxed{\uparrow\downarrow}$ | 2s $\boxed{\uparrow\downarrow}$ |
| 1s $\boxed{\uparrow\downarrow}$ | 1s $\boxed{\uparrow\downarrow}$ | 1s $\boxed{\uparrow\downarrow}$ |
| $1s^2 2s^2 2p^3$ $n = 2$ $l = 1$ (p) $m_l = 1$ $m_s = 1/2$ | $1s^2 2s^2 2p^4$ $n = 2$ $l = 1$ (p) $m_l = -1$ $m_s = -1/2$ | $1s^2 2s^2 2p^6$ $n = 2$ $l = 1$ (p) $m_l = 1$ $m_s = -1/2$ |

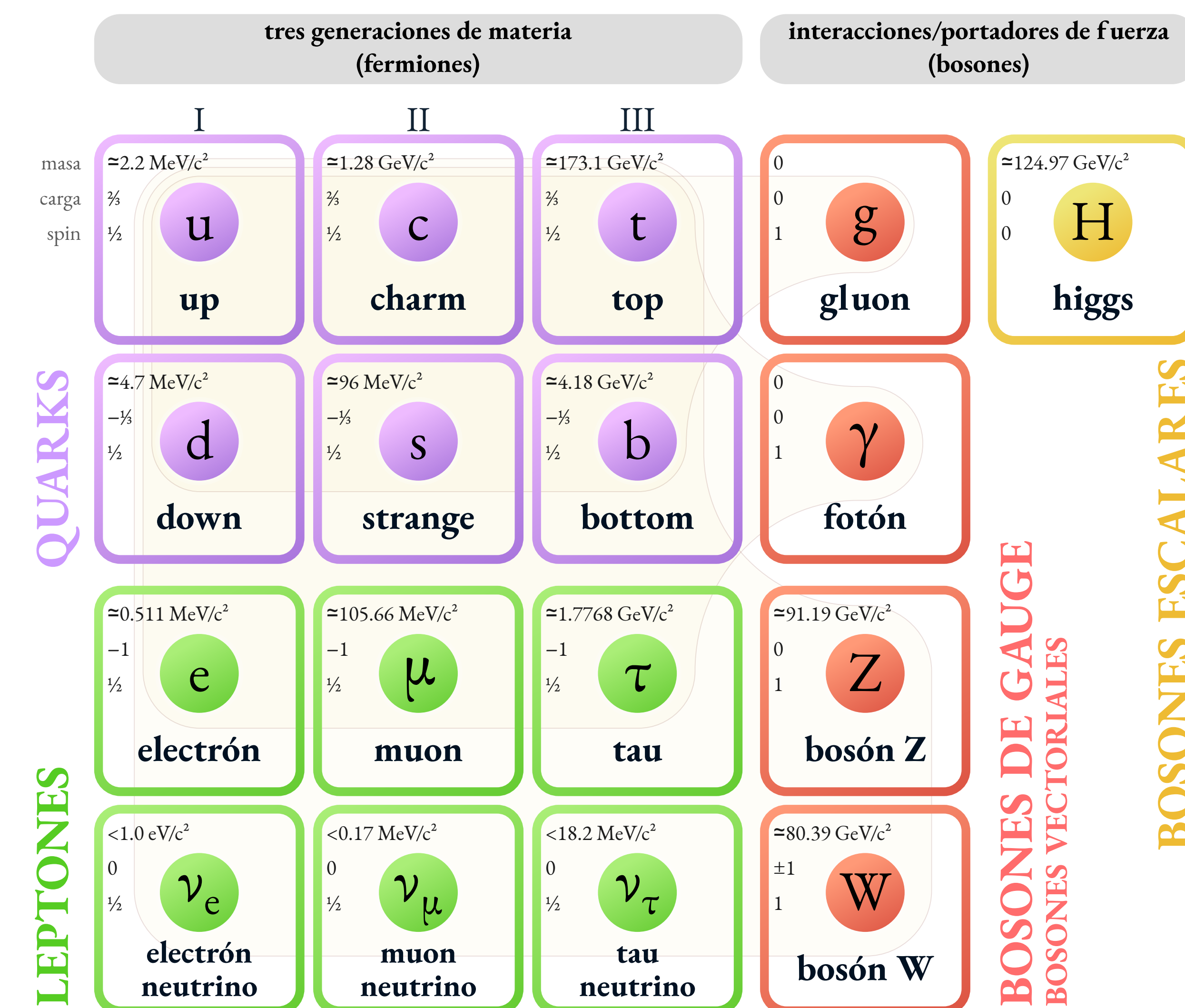
Partículas subatómicas

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 | 1.673×10^{-27} | 1.602×10^{-19} |
| Neutrón | 1.675×10^{-27} | 0 |
| Electrón | 9.109×10^{-31} | -1.602×10^{-19} |
| $m_{\text{protón}} \approx m_{\text{neutrón}} \sim 2000 m_{\text{electrón}}$ | | |
| $q_{\text{protón}} = -q_{\text{electrón}}$ | | |

Modelo estándar

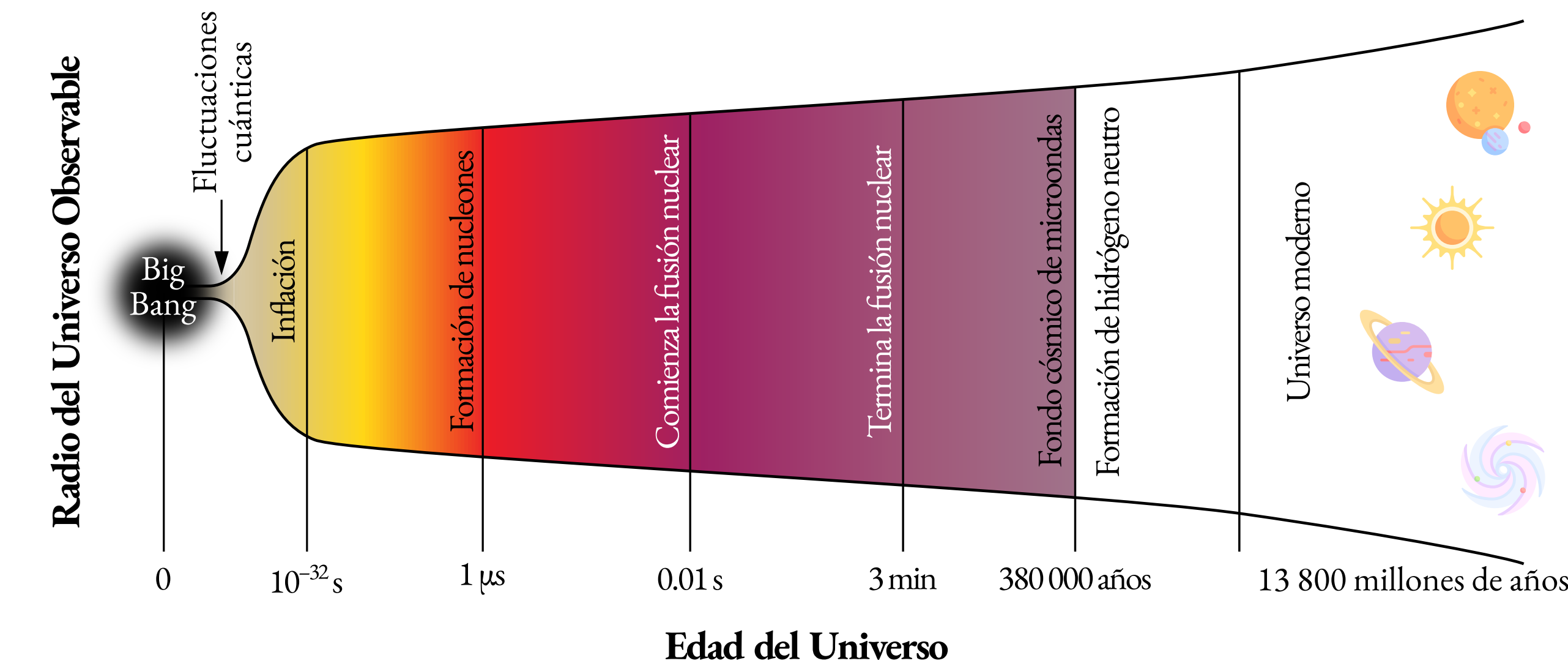
Es la teoría que **describe tres de las cuatro interacciones fundamentales** de la naturaleza conocidas (electromagnética, nuclear fuerte y nuclear débil), además de **clasificar** todas las **partículas elementales** conocidas.



Traducida y adaptada de

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

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/>.