

ESTRUCTURA DE LA MATERIA

Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa

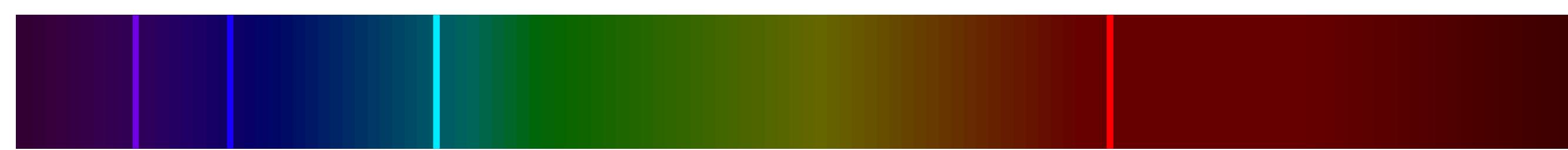


Modelos atómicos

| 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

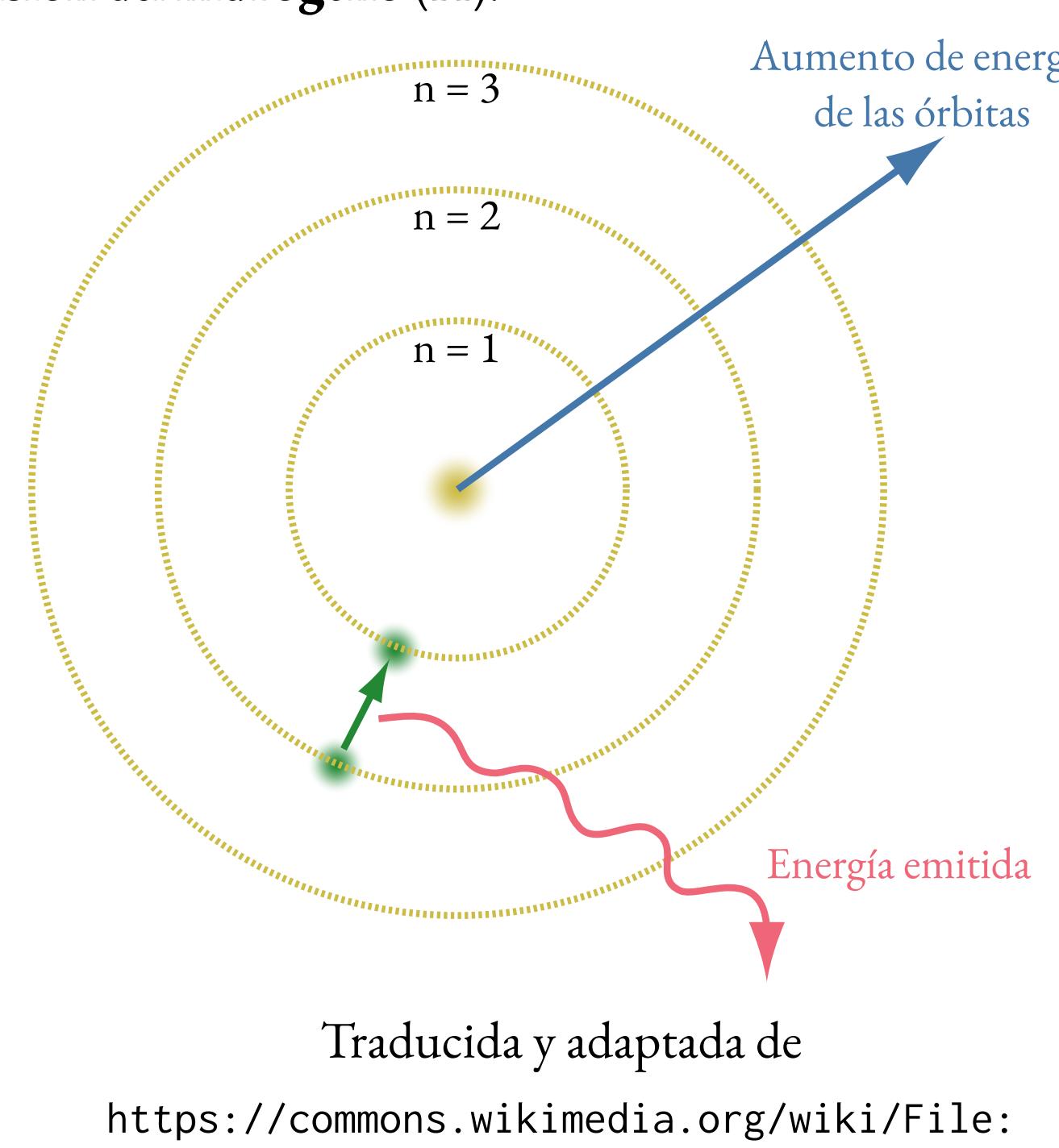
Propuesto en 1913 por Niels Bohr para explicar la estabilidad de la materia y los características espectros de emisión y absorción de los gases.



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. Para el caso del **hidrógeno**:

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

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

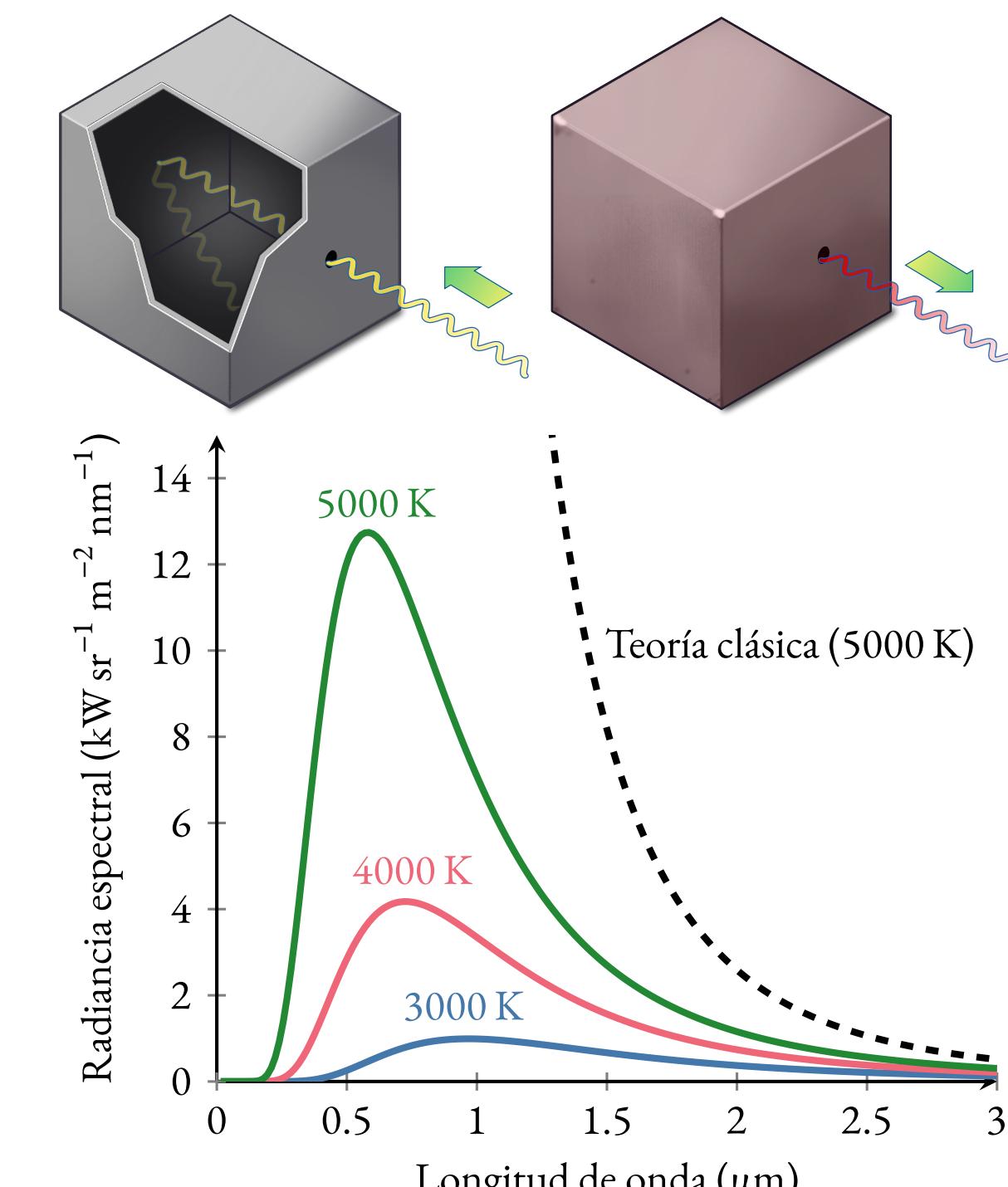
$$\Delta E = hcR_H \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

donde $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ es la constante de Planck y $c = 299\,792\,458 \text{ m/s}$ 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** está **cuantizada** y solo puede ser emitida/absorbida en paquetes discretos llamados **cuantos** o **fotones**, múltiplos de la **frecuencia ν** de la radiación electromagnética asociada:

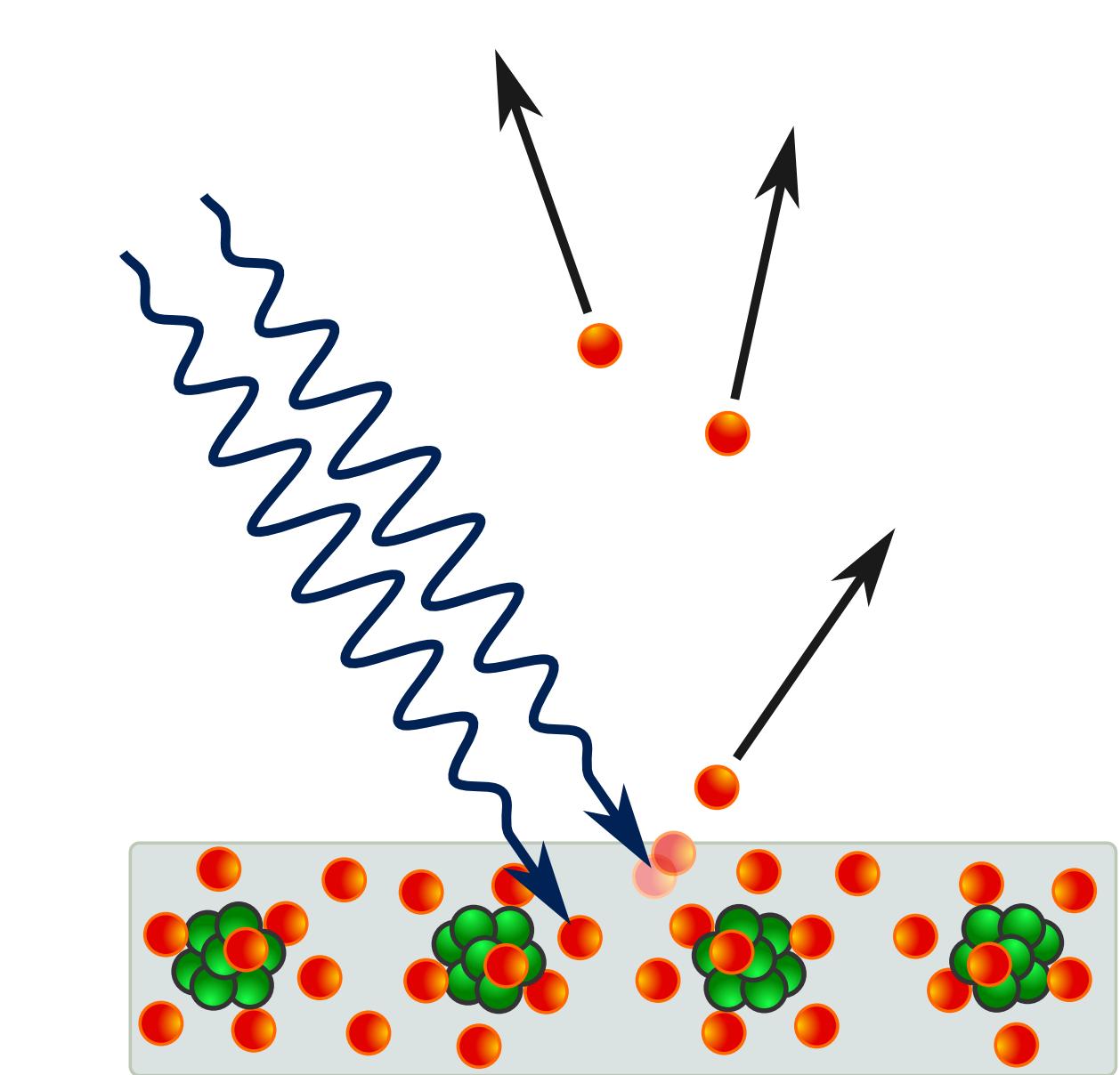
$$E = h\nu = hc/\lambda,$$

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 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**, ν_0 , 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

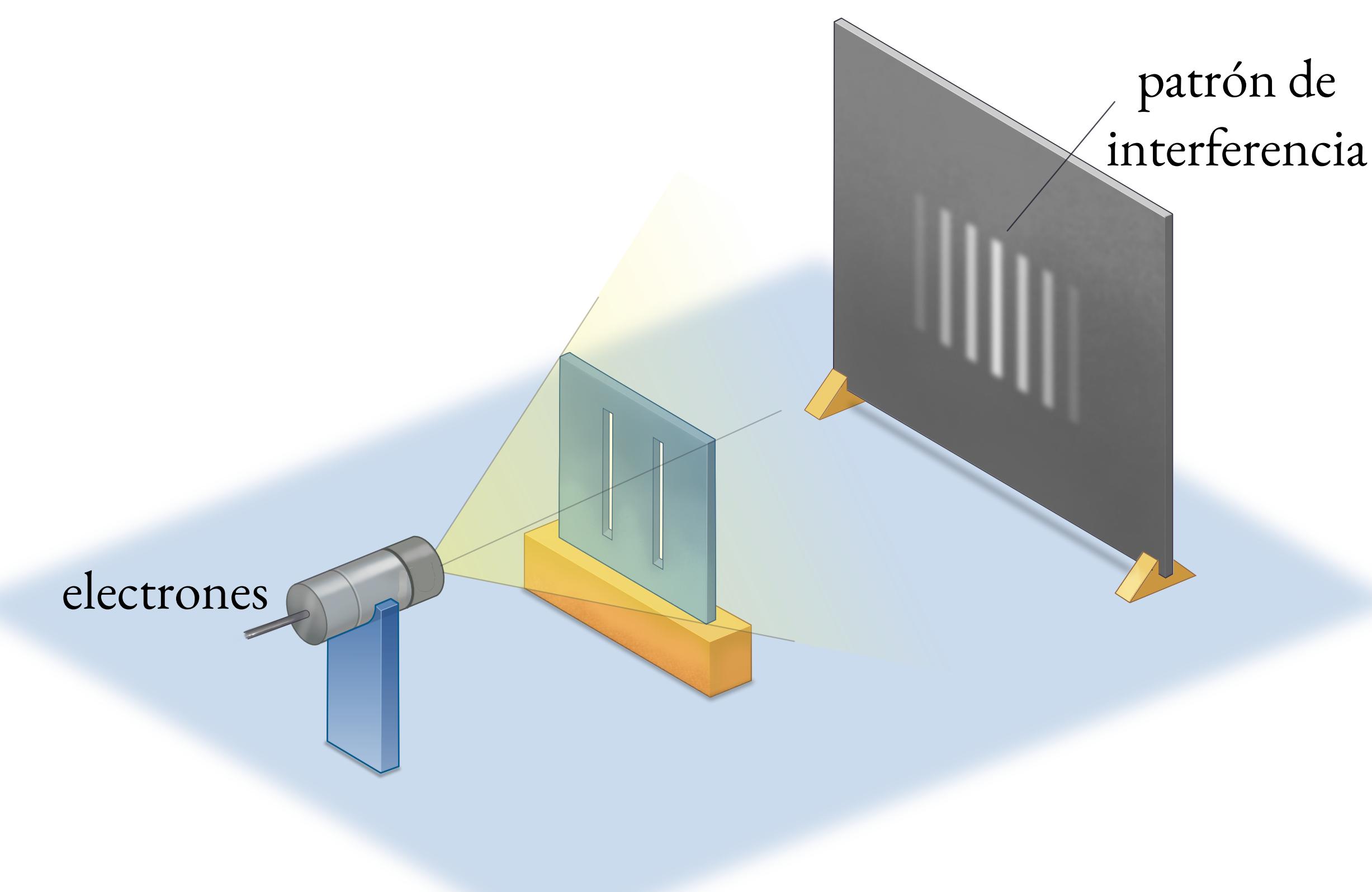
$$E = \phi + E_c \\ h\nu = h\nu_0 + E_c \Rightarrow E_c = h(\nu - \nu_0),$$

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 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](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 $h/(4\pi) = \hbar/2$.

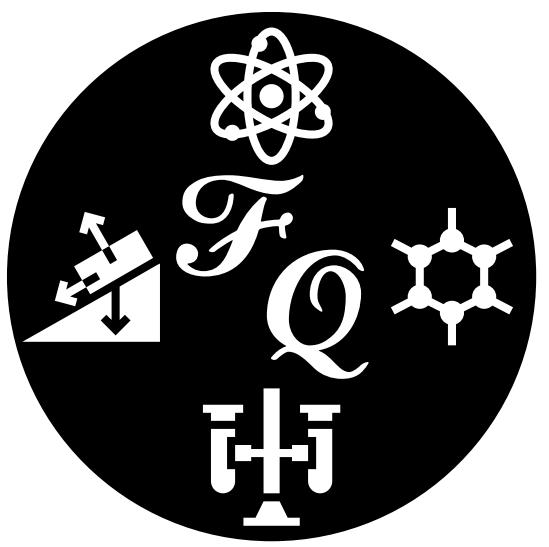
Ejemplos de tales magnitudes son:

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

$$\text{Energía } E \text{ y tiempo } t: \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

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

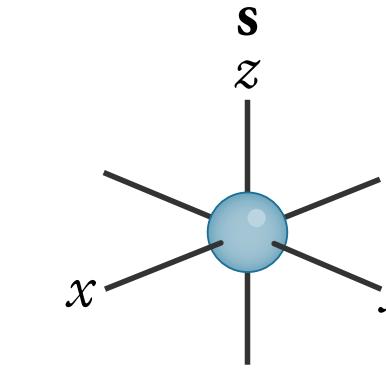
Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa



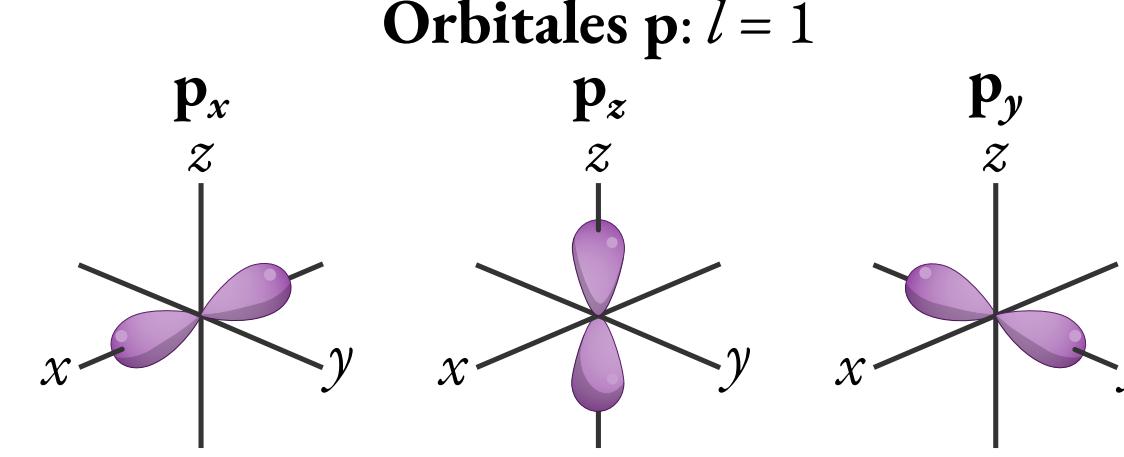
Orbitales atómicos

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

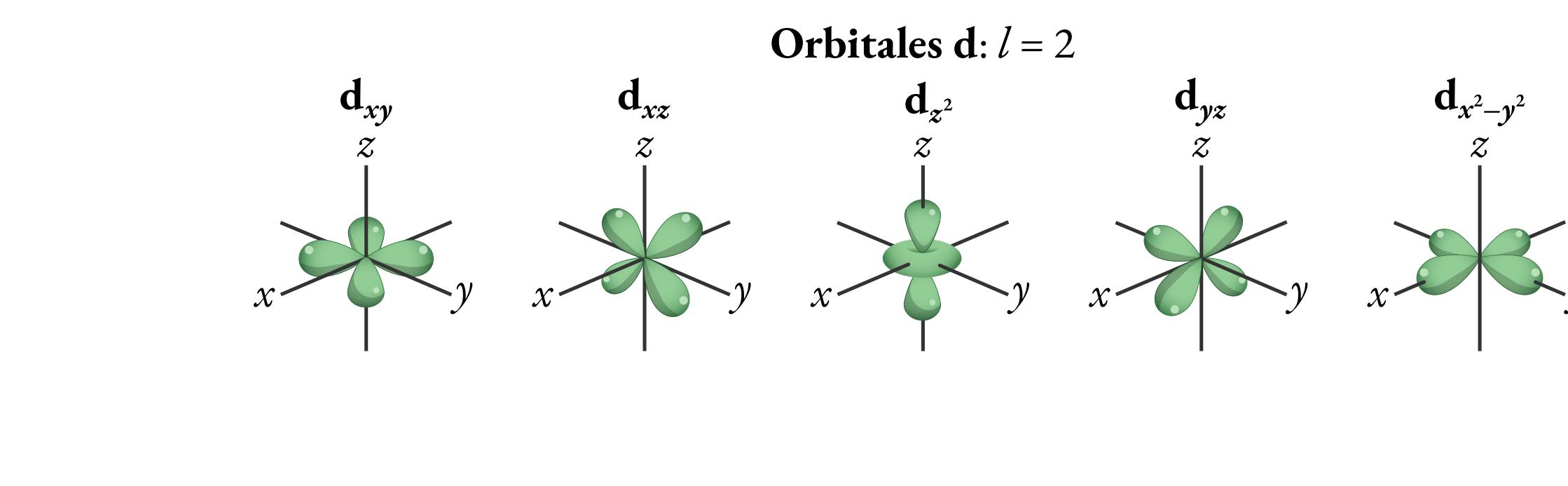
Orbital s: $l = 0$



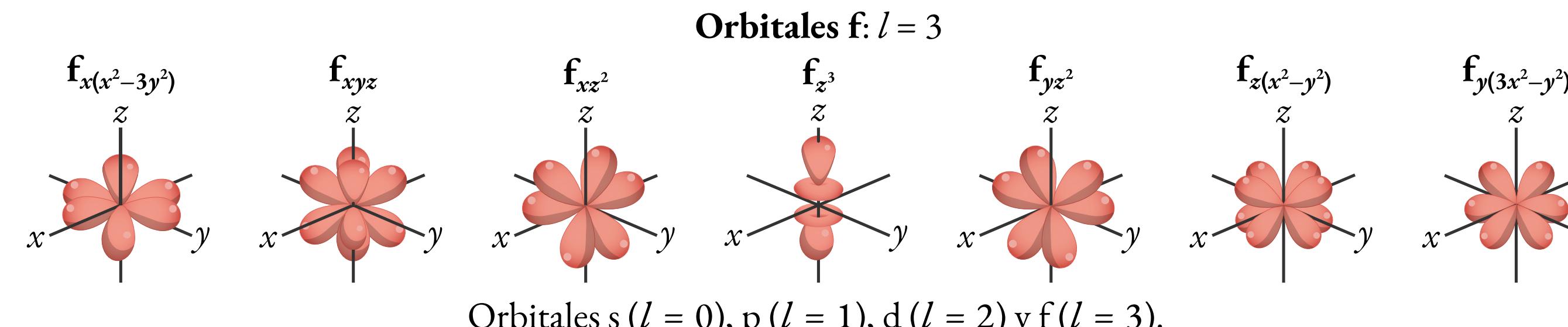
Orbitales p: $l = 1$



Orbitales d: $l = 2$



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

Estructura electrónica

Principio de exclusión de Pauli

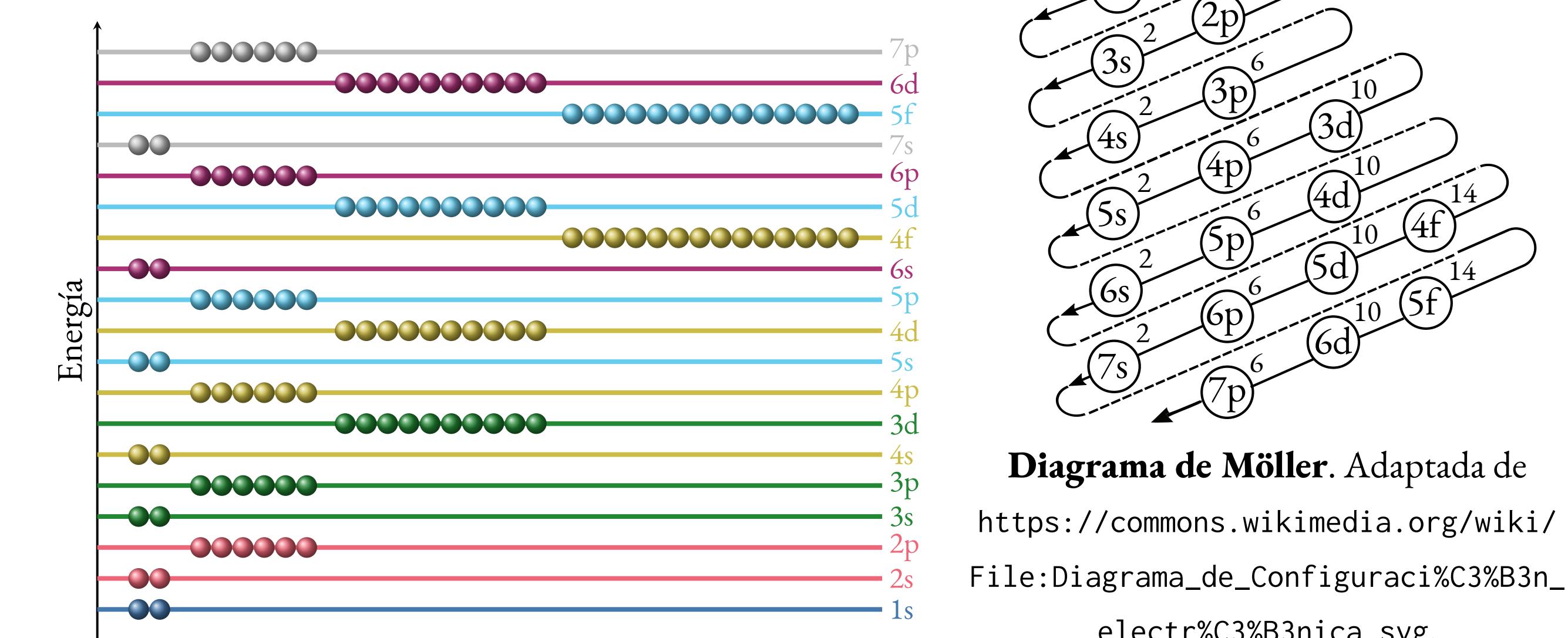
Dos o más electrones no pueden tener todos sus números cuánticos idénticos (ocupar el mismo estado cuántico) dentro del mismo sistema cuántico (átomo).

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).



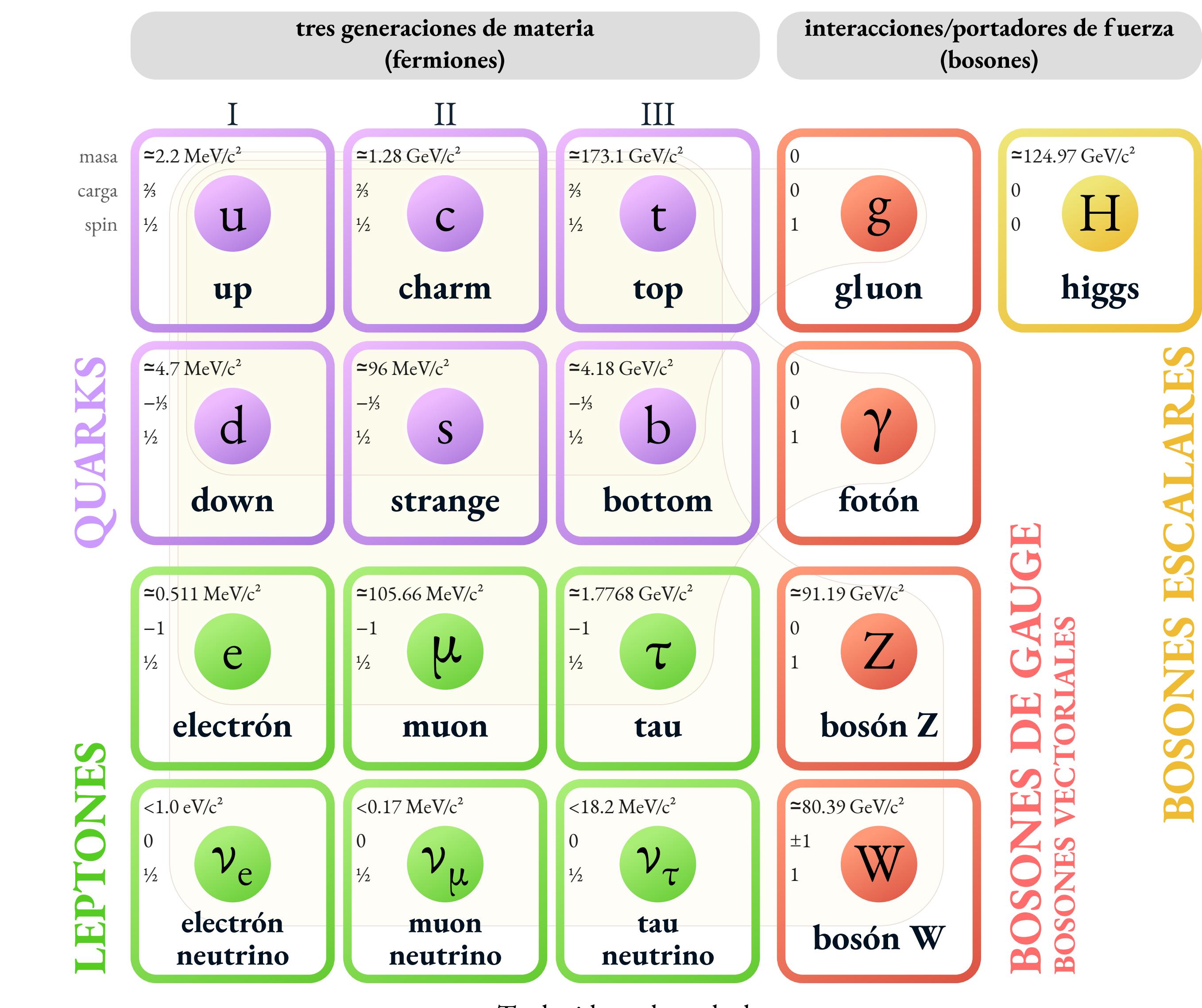
Partículas subatómicas

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

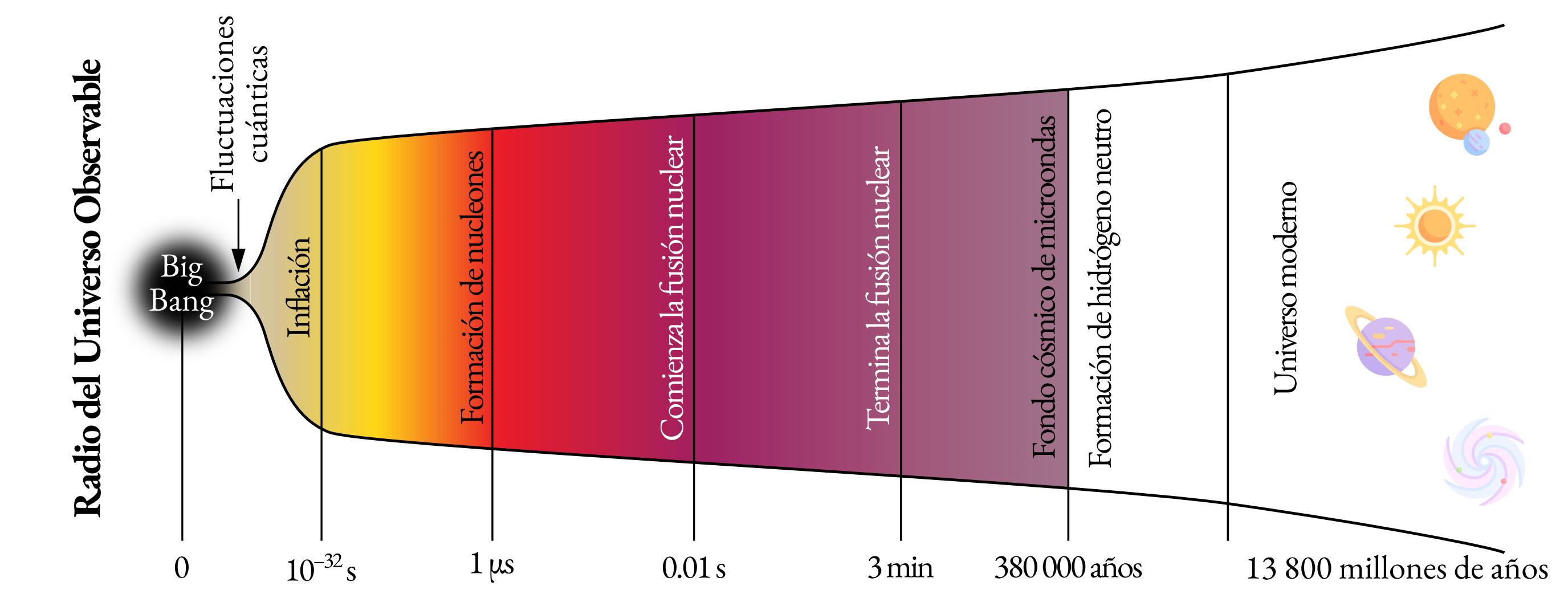
Es la teoría que describe tres de las cuatro interacciones fundamentales de la naturaleza conocidas (electromagnética, nuclear fuerte y nuclear débil), además de clasificar todas las partículas elementales conocidas.



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>.