

TEMA 1: ESTRUCTURA DE LA MATERIA. MODELOS ATÓMICOS

1. Modelo Atómico de RUTHERFORD

- Modelo predecesor de Thomson.
- Modelo atómico de Rutherford.
- Virtudes y defectos del Modelo de Rutherford.

2. Modelo Atómico de BOHR

- Ondas Electromagnéticas.
- Espectros Atómicos.
- Teoría de Plank.
- Modelo atómico de Bohr.
- Discrepancias espectroscópicas respecto al modelo de Bohr.

3. Modelo Atómico de BOHR-SOMMERFELD

4. Hechos experimentales base de la Mecánica Cuántica Moderna (únicamente leerlos)

- Dualidad Onda-Corpusculo. Principio de DE BROGLIE.
- Principio de incertidumbre de HEISENBERG.
- Efecto Fotoeléctrico de EINSTEIN.

5. Introducción al Modelo Mecánico-Cuántico Ondulatorio para el átomo de Hidrógeno

- Comparación entre el modelo de Heisenberg y el modelo de Schrödinger.
- Mecánica Ondulatoria de SCHRÖDINGER. Ecuación de Onda. Orbital.
- Los Números Cuánticos en la Teoría de Schrödinger.
 - Número cuántico Principal (NIVEL) “**n**”.
 - Número cuántico Secundario (SUBNIVEL) “**ℓ**”.
 - Número cuántico Magnético (ORBITAL, como si fuera una caja) “**m**”.
 - Número cuántico Spin (DEFINICIÓN COMPLETA DEL ELECTRÓN) “**s**”.
- Forma, tamaños y energías de los orbitales.
- Los diferentes Niveles de Energía.
- Principio de exclusión de Pauli.
- Regla de Hund o de máxima multiplicidad.
- Principio de construcción.
- Regla de Madelung. Ordenación de orbitales según su energía.

1. Modelo Atómico de RUTHERFORD

a. Modelo predecesor de Thomson.

En 1910 Thomson consideró que el átomo era una esfera maciza de carga eléctrica positiva, en la cual estaban incrustados los electrones en número suficiente para neutralizar la carga positiva.

b. Modelo atómico de Rutherford.

Rutherford bombardeó una lámina de oro con partículas α mostrando que la inmensa mayoría de las partículas atravesaban la lámina sin desviarse, unas pocas eran desviadas y poquísimas (un 0,005%) rebotaban.

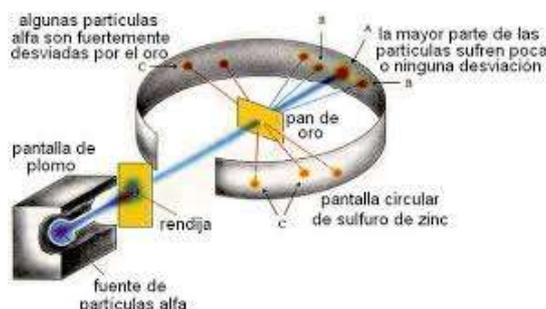
Así el modelo atómico de Rutherford podía resumirse de la siguiente manera:

- El átomo posee un núcleo central pequeño, con carga eléctrica positiva y que contiene casi toda la masa del átomo.
- Girando en órbitas circulares a grandes distancias alrededor del núcleo hay pequeñas masas con carga eléctrica negativa (los electrones). La atracción eléctrica entre los electrones y el núcleo es la fuerza centrípeta que permite a los electrones girar alrededor del núcleo.
- La suma de las cargas eléctricas negativas de los electrones debe ser igual a la carga positiva del núcleo, ya que el átomo es eléctricamente neutro.

c. Virtudes y defectos del Modelo de Rutherford.

Este modelo tenía la virtud de ser sencillo de comprender y se le denominaba “modelo planetario” (con el núcleo como el Sol y los electrones como planetas).

Pero los defectos que tenía según los principios del electromagnetismo clásico es que el electrón tendría que emitir continuamente energía en forma de ondas electromagnéticas. Esta continua pérdida de energía haría que el electrón acabara cayéndose sobre el núcleo, cosa que no ocurre. Por otro lado, su espectro de emisión sería continuo. Sin embargo, se observa que los espectros de emisión de los átomos son discontinuos.

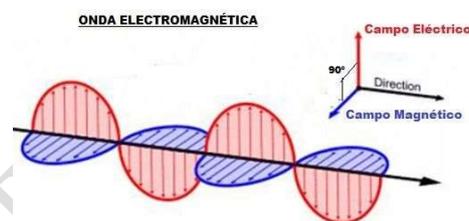


2. Modelo de BOHR

a. Ondas Electromagnéticas.

- Longitud de onda (λ) = Es la distancia mínima entre dos puntos que están en el mismo estado de vibración. Se mide en metros.
- Número de onda (K) = Es el inverso de la longitud de onda.
- Periodo (T) = Es el tiempo que tarda una onda en realizar una vibración completa. Se mide en segundos.
- Frecuencia (f) = Es el número de veces que la onda vibra en un segundo. Es el inverso del periodo. Se mide en Herzios.
- Velocidad (c) = Es la velocidad a la que viaja la onda. La misma para todas las ondas $3 \cdot 10^8$ m/s.

$$c = \lambda \cdot f = \frac{1}{K} \cdot f = \lambda \cdot \frac{1}{T}$$



b. Espectros Atómicos.

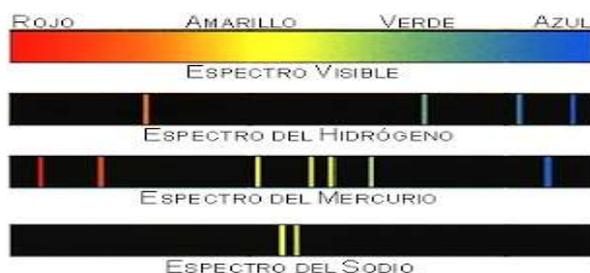
Se denomina espectro a la descomposición de una onda compuesta en ondas simples

Según se estudie la energía emitida o absorbida, los espectros se clasifican en:

- Espectro de emisión.
- Espectro de absorción.

Desde otro punto de vista, los espectros se pueden clasificar en:

- Espectro de rayas. La radiación emitida o absorbida por átomos individuales corresponde a los tránsitos electrónicos entre dos niveles. Este tipo de espectro es característico de cada átomo y sirve para identificarlo.
- Espectro de bandas. Cuando los átomos se asocian para formar moléculas, el único estado energético en un átomo aislado se convierte en un grupo de posibilidades.
- Espectros continuos. Es el caso del espectro de la luz solar o de los sólidos incandescentes.



c. Teoría de Planck.

Planck postuló que la emisión de radiación electromagnética se produce en forma de diminutas cantidades elementales que se llamaron “**cuanta**”.

Eso significa que la radiación no es continua, es decir, los átomos no pueden absorber o emitir cualquier valor de energía, sino solo unos valores concretos.

La energía correspondiente a cada uno de los **cuantos** se obtiene multiplicando su frecuencia (f) por una constante ($h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$), llamada constante de Planck.

$$E = h \cdot f$$

d. Modelo Atómico de Bohr.

Bohr enunció un modelo atómico que intentaba compaginar el modelo planetario de Rutherford con la teoría cuántica de Planck. El modelo estaba basado en los siguientes postulados:

1º Postulado. Los electrones giran alrededor del núcleo en órbitas estacionarias sin emitir energía.

2º Postulado. Solo son posibles las órbitas concretas en las que el momento angular del electrón es un múltiplo natural de $h/2\pi$.

3º Postulado. Cuando un electrón pasa de una órbita superior a una órbita inferior, la diferencia de energía entre ambas órbitas se emite en forma de radiación electromagnética.

Cuando el tránsito se produce en sentido contrario, de menor a mayor energía, el electrón necesita absorber esa radiación electromagnética.

$$E_j - E_i = h \cdot f$$

e. Discrepancias espectroscópicas respecto al modelo de Bohr.

Si el análisis espectrográfico se realizaba mientras los átomos eran sometidos a un campo magnético, aparecían nuevos desdoblamientos de las rayas del espectro. El hecho, conocido como efecto Zeeman, indicaba que el electrón podía tener varios estados con igual energía en ausencia de campo magnético, pero distinta si el campo magnético afectaba al átomo.

3. Modelo Atómico de BOHR-SOMMERFELD

Sommerfeld intentó ampliar el modelo de Bohr para dar explicación a las nuevas líneas que se descubrían al analizar los espectros atómicos con mayor resolución.

La principal modificación que introdujo Sommerfeld fue la suposición de que las órbitas electrónicas también podían ser elípticas.

4. Hechos experimentales base de la Mecánica Cuántica

a. Dualidad Onda-Corpúsculo. Principio de DE BROGLIE.

De Broglie sugirió que las masas en movimiento se pueden comportar también como ondas. No solamente los fotones tienen una onda asociada, sino que la dualidad es una propiedad general de la materia.

b. Principio de Incertidumbre de HEISENBERG.

Heisenberg enunció el llamado Principio de Incertidumbre o Principio de Indeterminación, según el cual es imposible medir simultáneamente, y con precisión absoluta, el valor de dos variables se estas son de las que los físicos llamamos conjugadas.

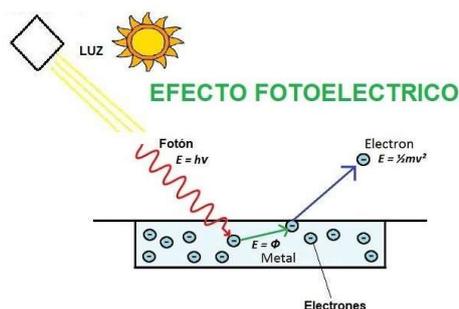
Así es imposible medir a la vez, y exactamente, valores de energía y de tiempo, o la posición y la cantidad de movimiento de una partícula.

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

c. Efecto Fotoeléctrico de EINSTEIN.

Un metal empieza a desprender electrones de su superficie cuando una luz incidente sobre él supera la energía umbral del metal. Es decir, la energía justa para arrancar un electrón. Se denomina función de trabajo y es característica de cada metal.

$$E_{\text{FOTÓN}} = h \cdot f_{\text{LUZ}} = W_0 + E_{\text{ELECTRÓN}}$$



5. Introducción al Modelo Mecánico-Cuántico Ondulatorio para el átomo de Hidrógeno

a. Comparación entre el modelo de Heisenberg y el modelo de Schrödinger.

En 1926, Schrödinger propuso que se describiera al electrón no como una partícula que giraba alrededor del núcleo, sino como una onda que vibraba alrededor de dicho núcleo, de modo que estaba al mismo tiempo en todos los puntos de la órbita. Por motivos obvios, su descripción es conocida como Mecánica Ondulatoria.

b. Mecánica Ondulatoria de SCHRÖDINGER. Ecuación de Onda. Concepto de ORBITAL.

La llamada ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial que permite obtener los números cuánticos de los electrones. Suponiendo que el electrón se pueda describir como una onda ψ , la ecuación de Schrödinger permite calcularla:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot (E - V) \cdot \Psi = 0$$

En esta ecuación:

- Ψ es la llamada Función de Onda, que contiene la información sobre cada electrón de un átomo. Se denomina también ORBITAL.
- El cuadrado de la Función de Onda $|\Psi|^2$ es la llamada Densidad de Probabilidad Relativa del Electrón y representa la probabilidad de encontrar el electrón en un punto del espacio.

La imagen de los orbitales habitualmente empleada consiste en una representación de una parte del orbital mediante superficies límites que engloban una zona del espacio donde la probabilidad de encontrar al electrón es del 99%.

La descripción del átomo mediante la mecánica ondulatoria está basada en el cálculo de las soluciones de la ecuación de Schrödinger. Cuando se hallan dichas soluciones, se observa que son unas funciones matemáticas que dependen de unas “variables” que solo pueden tomar valores enteros. Estas variables de las funciones de onda son designadas como **NÚMEROS CUÁNTICOS: “n”, “l”, “m” y “s”**.

c. Los Números Cuánticos en la Teoría de Schrödinger.

Los números cuánticos son una cuaterna de números (**n, ℓ, m, s**) que definen o localizan a un electrón dentro de un átomo cualquiera. Cada electrón está definido únicamente por sus cuatro números cuánticos.

A continuación, se resumen los nombres de los números cuánticos, sus valores permitidos y el papel que juega dentro de la cuaterna:

- El número cuántico “**n**” es el número cuántico principal. Define el **nivel** energético. Solo puede tomar valores naturales, excluido el cero: $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Determina el **tamaño** del orbital atómico.
- El número cuántico “**ℓ**” es el número cuántico secundario o azimutal. Define el **subnivel** energético. Puede tomar valores naturales desde el 0 hasta el $(n-1)$. Determina la **forma** del orbital atómico.
 1. Si $\ell = 0$. Orbital **s** Posee 1 orbital.
 2. Si $\ell = 1$. Orbital **p** Posee 3 orbitales.
 3. Si $\ell = 2$. Orbital **d** Posee 5 orbitales.
 4. Si $\ell = 3$. Orbital **f** Posee 7 orbitales.
- El número cuántico “**m**” es el número cuántico magnético. Define un **orbital**. Puede tomar valores enteros desde $-\ell$ hasta $+\ell$. Determina la orientación espacial del orbital.
- El número cuántico “**s**” es el número cuántico spin. Define completamente **un electrón**. Puede tomar valores de $-\frac{1}{2}$ o de $+\frac{1}{2}$. Determina el sentido de giro del electrón sobre sí mismo, dentro del orbital.

d. Formas, tamaños y energías de los orbitales.

- Todos los orbitales **s** ($\ell = 0$) tienen forma esférica. El tamaño será mayor o menor según sea el valor del número cuántico principal “**n**”.
- Los orbitales **p** ($\ell = 1$). Están formados por dos lóbulos idénticos que se proyectan a lo largo de un eje x, y o z. La zona de unión de ambos lóbulos coincide con el núcleo atómico. Hay tres orbitales p (que corresponden a los $m = -1; 0; +1$) de idéntica forma que difieren en su orientación a lo largo de los ejes x, y o z. Por ello reciben los nombres de p_x, p_y o p_z , según sea el eje por el que se encuentre el electrón.

- Los orbitales **d** ($\ell = 2$). Están formados por lóbulos. Hay cinco tipos de orbitales d (que corresponden a los $m = -2; -1; 0; +1; +2$).
- Los orbitales **f** ($\ell = 3$). También tienen aspecto multilobular. Existen siete tipos de orbitales f (que corresponden a los $m = -3; -2; -1; 0; +1; +2; +3$).

e. Los diferentes niveles de energía.

La energía de cada electrón depende de los cuatro números cuánticos. Según el valor de estos, se puede definir: el nivel, subnivel y orbital.

- Nivel (**n**).

Los electrones que tienen el mismo número cuántico principal “n”, se dice que forman parte de la misma capa o nivel energético.

- Subnivel (**n; ℓ**).

Cada capa o nivel tiene subcapas o subniveles formados por los electrones que, además del número cuántico principal, tienen en común el número cuántico secundario.

- Orbital (**n; ℓ; m**).

Entre los electrones que tienen los mismos números cuántico primario y secundario, algunos se diferencian por el número cuántico magnético y otros lo tienen igual. De aquellos que lo tienen igual, se dice que pertenecen al mismo orbital.

- Spin (**n; ℓ; m; $-\frac{1}{2}$**) o también (**n; ℓ; m; $+\frac{1}{2}$**).

En cada orbital, sea cual sea, caben como máximo dos electrones, que se diferencian por el cuarto número cuántico o spin.

OBSERVACIONES. Para conocer el número de electrones en un:

- | | | |
|------------|--------|---|
| ▪ Nivel | —————> | $2n^2$ |
| ▪ Subnivel | —————> | $2 \cdot (2\ell + 1)$ |
| ▪ Orbital | —————> | 2 |

f. Principio de exclusión de Pauli.

En un mismo átomo no puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales.

g. Regla de Hund o de máxima multiplicidad.

Mientras sea posible, los electrones se colocan **solitarios** en los orbitales de cada subnivel, evitando formar parejas en el mismo orbital.

h. Principio de construcción.

Los electrones de un átomo se colocan siempre ocupando los orbitales de menor energía.

De su aplicación resulta aquella disposición de electrones con la que el átomo tiene la menor energía posible, llamada **estado fundamental**.

Naturalmente, si un átomo recibe la energía apropiada, sus electrones pueden ser **excitados** y acceder a orbitales de mayor energía, aunque tarde o temprano, retornarán a la disposición propia del estado fundamental.

i. Regla de Madelung. Ordenación de orbitales según su energía.

La energía de un orbital depende de los tres números cuánticos que lo definen: n , ℓ y m , si bien en ausencia de campo magnético sólo depende de n y ℓ .

La importancia de n es mayor que de la de ℓ . Para saber cuál de dos orbitales cualesquiera dados tiene mayor energía, se suman los respectivos valores de n y ℓ , y se aplican las siguientes reglas:

- Tiene mayor energía el orbital que posee un valor de $n + \ell$ más alto.
- Si dos orbitales poseen el mismo valor de $n + \ell$, tiene mayor energía aquél que tiene el valor de n mayor.

