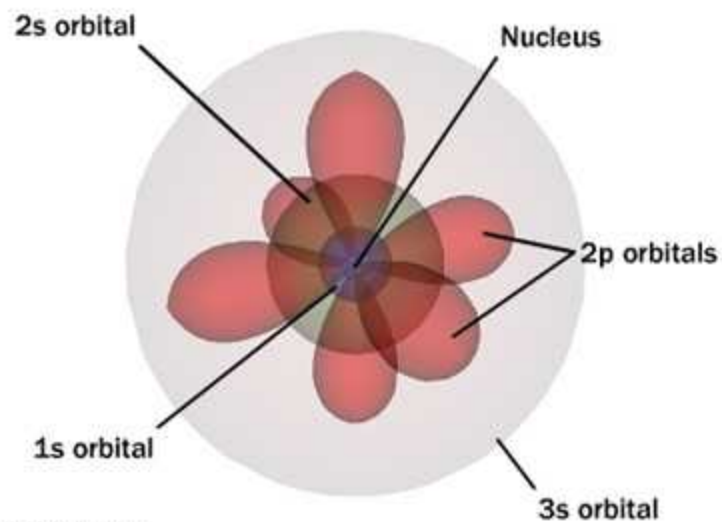
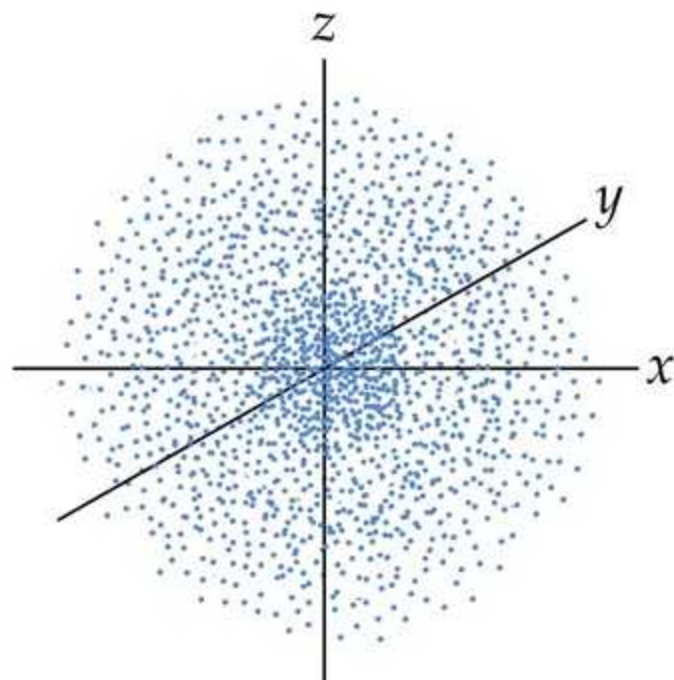


UNIDAD I

MODELO MECANO – CUÁNTICO



©2001 How Stuff Works



OBJ. Conocer algunos descubrimientos y aportes importantes para comprender el comportamiento de los átomos.

LÍNEA DE TIEMPO RELACIONADO AL ÁTOMO.

Leucipo y Demócrito	→	400 años A.C	→	Concepto de átomo.
John Dalton	→	1808	→	Teoría atómica.
James Maxwell	→	1873	→	Radicación electromagnética.
Eugen Goldstein	→	1886	→	Descubre el protón
Wilhelm Roentgen	→	1895	→	Rayos X
Henry Beckerel	→	1896	→	Radiactividad natural
J.J. Thomson	→	1897	→	Descubre el electrón

Pierre y Marie Curie	1898	→	Po y Ra
Max Planck	1900	→	Teoría cuántica.
E. Rutherford y Frédérick Soddy	1902	→	Radiactividad por trans. esp.
Albert Einstein	1905	→	Fenómeno fotoeléctrico.
Ernest Rutherford	1911	→	Descubre el núcleo.
Niels Bohr	1913	→	Espectros de absorción y em.
James Chadwick	1932	→	Descubre el neutrón.

INICIOS...

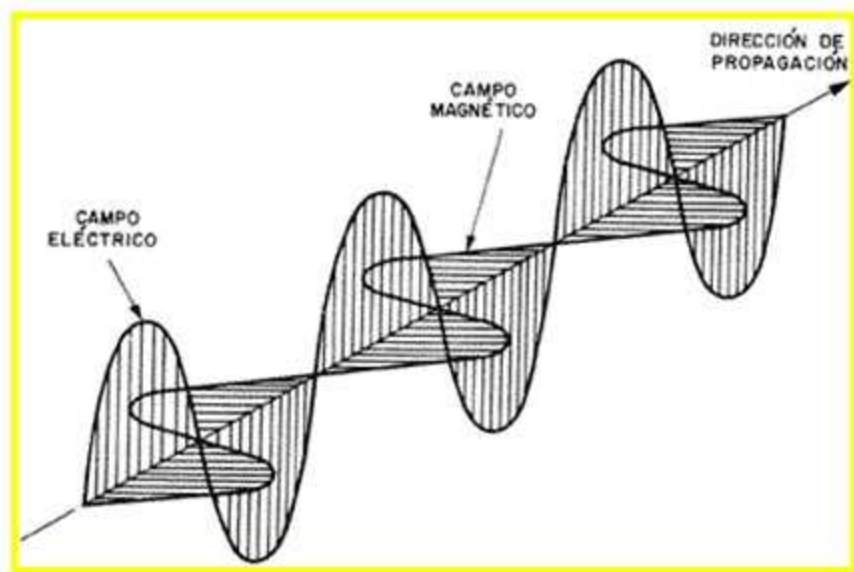
Las propiedades de los átomos y moléculas no responden a las mismas leyes físicas que los objetos más grandes.

Para entender a los átomos y moléculas debemos utilizar los principios de la mecánica cuántica, que es una rama de la física, cuya teoría fue creada por Max Planck en 1900.

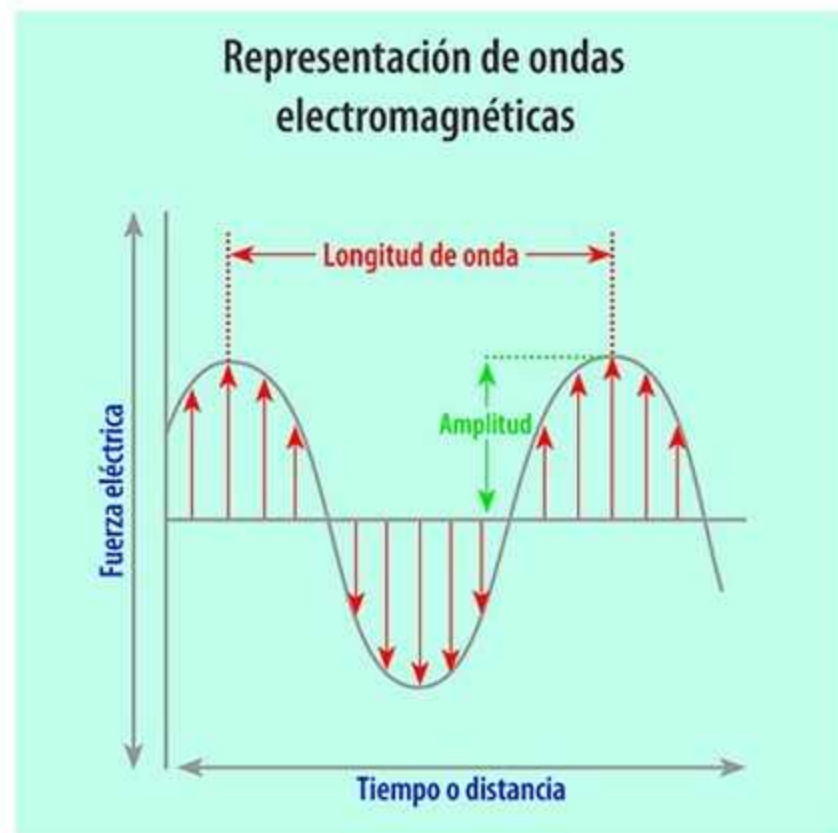
Para entender la base de esta teoría, es necesario tener cierto conocimiento sobre las ondas.

1. RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA - TEORÍA DE MAXWELL

Según Maxwell, la luz visible se compone de ondas electromagnéticas. Propone un modelo que describe como se puede propagar la energía en forma de radiación a través del espacio como una vibración de campos eléctricos y magnéticos.



<http://www.educaplus.org/play-321-Onda-electromagn%C3%A9tica.html>



Las ondas electromagnéticas viajan a $3 \cdot 10^8$ m/s (treientos millones de metros por segundo). Este valor corresponde a la velocidad de la luz.

La radiación electromagnética viene determinada por su frecuencia " ν " o por su longitud de onda " λ ", relacionadas entre sí por:

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

Donde:

c: corresponde a la velocidad con que una radiación se desplaza en el vacío. ($3,00 \times 10^8 \text{m/s}$) o ($3,00 \times 10^5 \text{km/s}$)

v: frecuencia, se expresa en $1/\text{s}$, s^{-1} o Hertz (Hz)

λ : longitud de onda, se puede expresar en cm, m, nm(nanómetros) o en Angstrom.

$$1 \text{nm} = 1 \times 10^{-9} \text{m}$$

$$1 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-10} \text{m}$$

Se llama **espectro electromagnético** al conjunto de todas las radiaciones electromagnéticas desde muy bajas longitudes de ondas como los rayos γ (10^{-12} m) hasta kilómetros (ondas de radio).

Tipos de radiaciones electromagnéticas según λ .



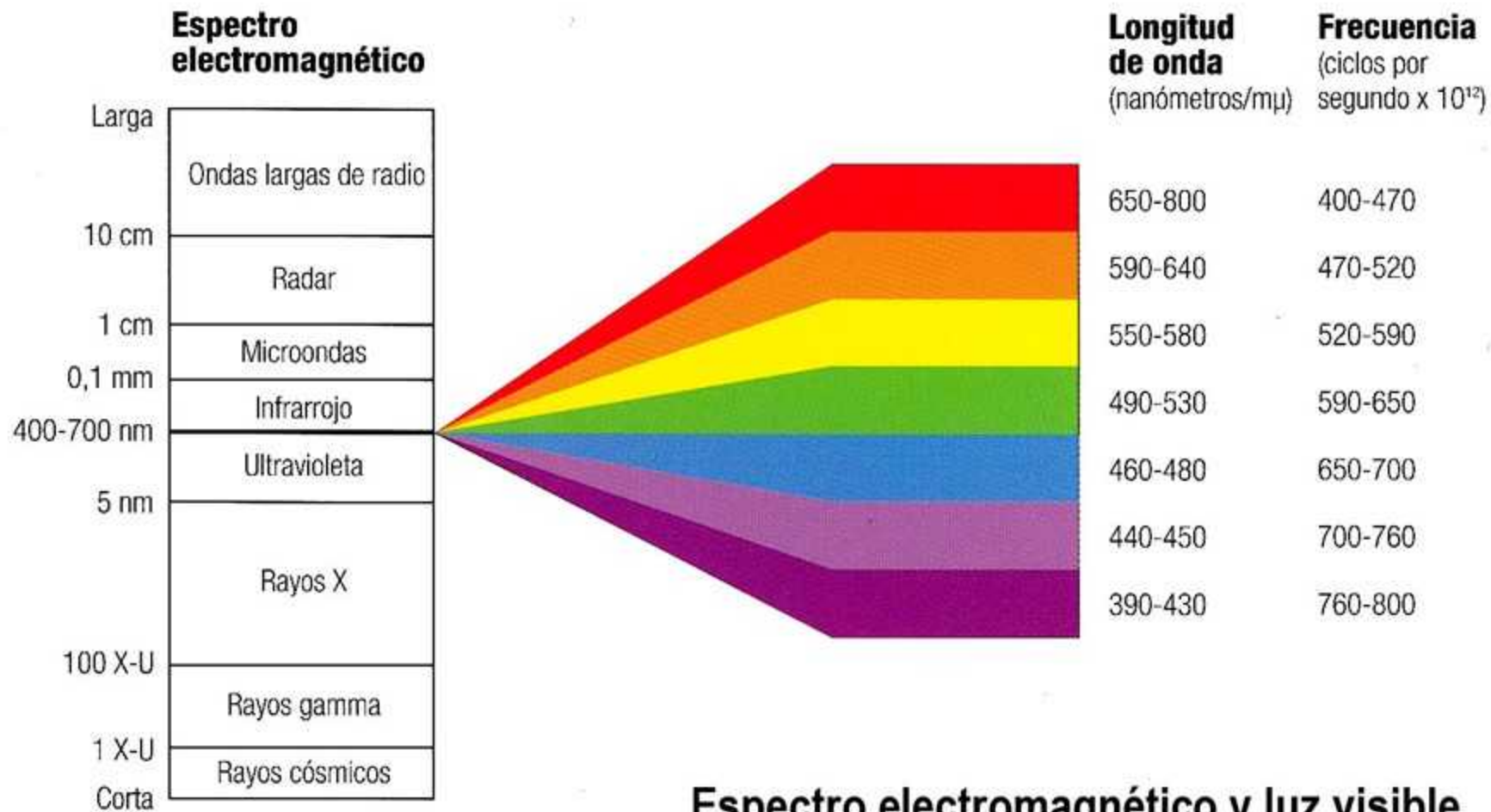
- Rayos γ
- Rayos X
- Rayos UV
- Radiación visible.
- Rayos IR
- Microondas
- Ondas de radio

- Ondas de radar
- Ondas de TV.
- Onda ultracorta
- Onda corta.
- Onda media.
- Onda larga

ESPECTRO ELECTROMAGNÉTICO



Las ondas de luz, las de radio y los rayos X son tipos de **ondas electromagnéticas**. Sólo se distinguen en la **longitud de onda**. Las ondas más cortas, como los rayos gamma, poseen mucha más **energía** que las más largas, como las de radio o microondas. Todas las ondas electromagnéticas viajan a la velocidad de la luz.



Espectro electromagnético y luz visible

1 nanómetro = 1 milimicrón (mμ) = 10⁻⁹m

2. TEORÍA CUÁNTICA DE PLANCK

Cuando los sólidos se someten a calentamiento emiten radiación electromagnética que abarca una amplia gama de longitudes de onda.



Gracias al estudio de este fenómeno de emisión de energía por parte de los sólidos calentados, le permitió a Planck , el año 1900, postular que los átomos y moléculas emiten o absorben energía sólo en cantidades definidas, como pequeños “paquetes”.

A esta mínima cantidad de energía que se podía emitir o absorber en forma de radiación electromagnética, Planck la llamó **cuanto**.

La energía proveniente de esta radiación electromagnética viene dada por la siguiente ecuación:

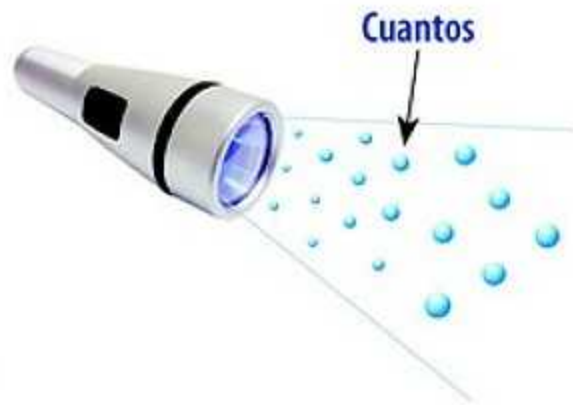
$$E = h\nu$$

Donde:

E: energía

ν : frecuencia de la radiación (s^{-1})

h : constante de Planck ($6,63 \times 10^{-34} \text{ Jxs}$)



3. FENÓMENO FOTOELÉCTRICO

Einstein utilizó la teoría cuántica de Planck para resolver el efecto fotoeléctrico, fenómeno en el que los electrones son expulsados desde la superficie de ciertos metales que se han expuesto a la luz de una determinada frecuencia mínima.

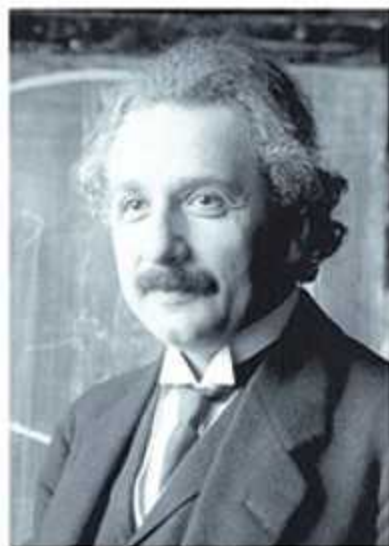
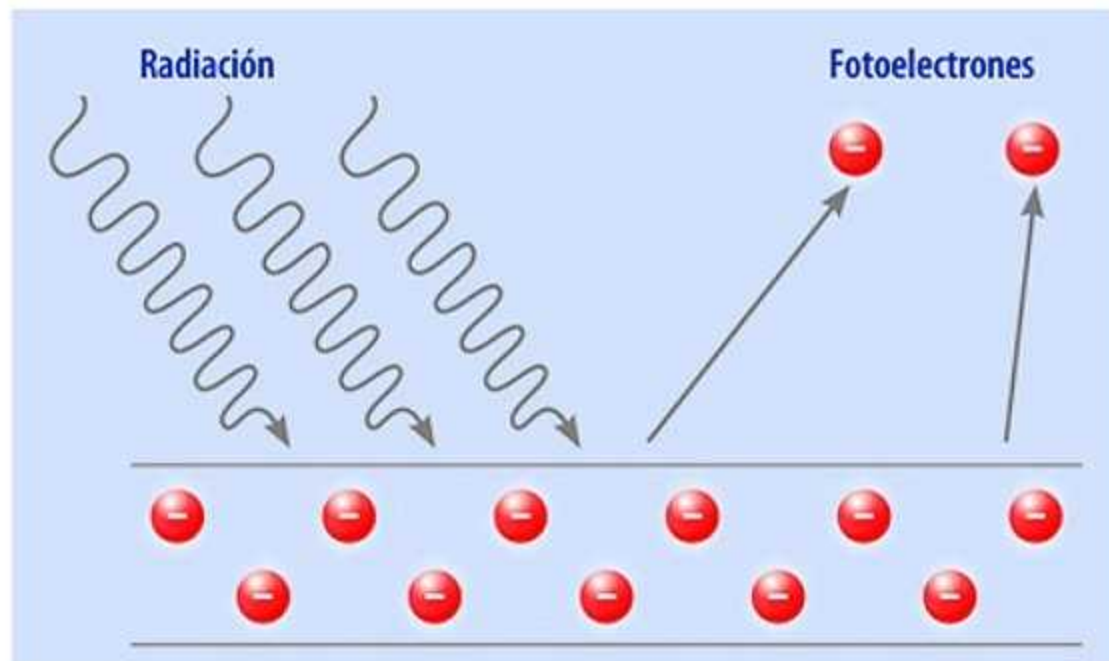
Explicó que un rayo de luz es en realidad un haz de partículas, a las que llamó **fotones**. La energía de cada fotón es proporcional a la longitud de onda:

$$E = h\nu$$

Si consideramos, además, la relación de Einstein, publicado en su teoría de la relatividad,

$$E = m C^2$$

Constatamos que la energía tiene masa, esto quiere decir que, a un fotón de energía le corresponde una cierta masa.



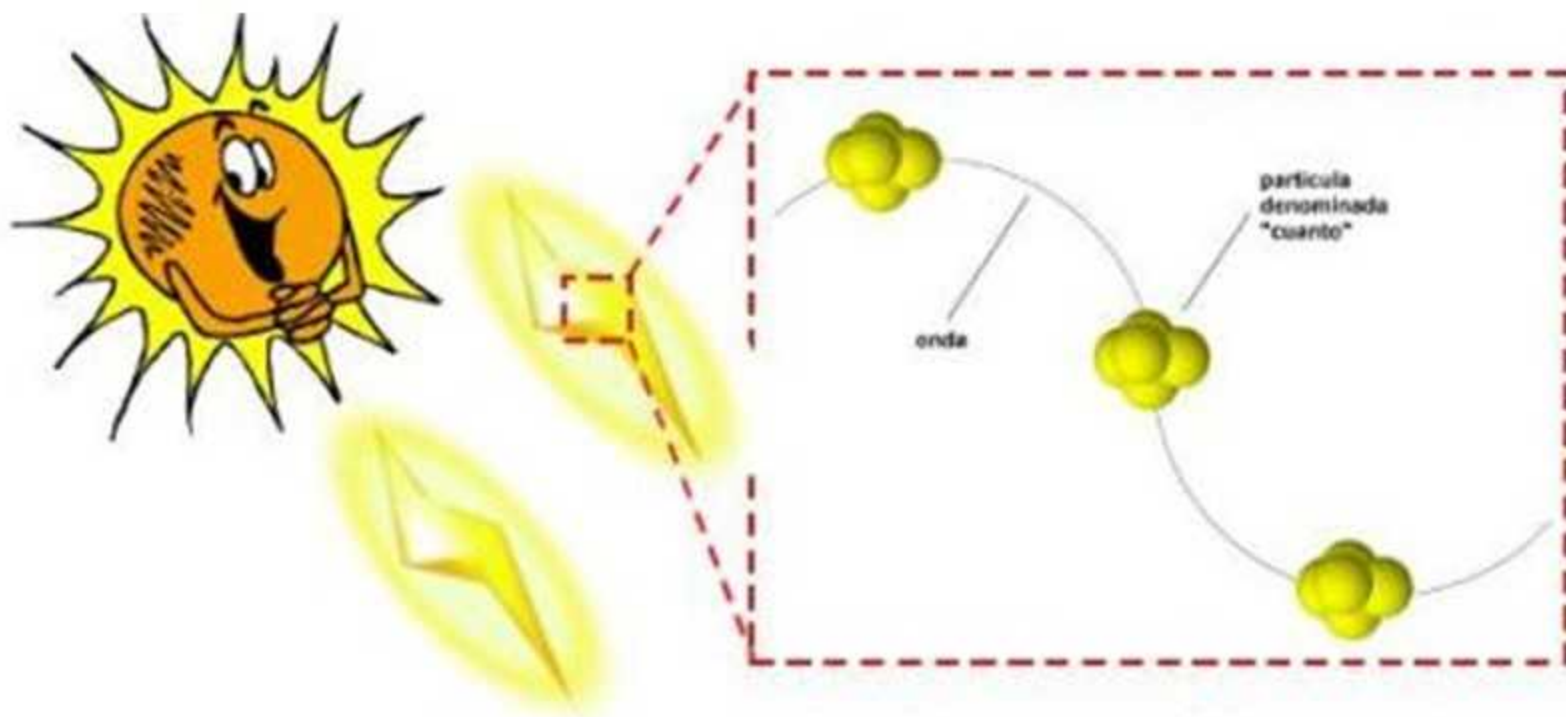
Dentro del complejo mundo físico se concibe la luz y otras formas de energía bajo dos formas complementarias: como onda y como partícula.

Este hecho se conoce como **comportamiento dual onda – partícula de la luz.**

¿QUÉ ES LA LUZ EFECTIVAMENTE?

No lo sabemos con precisión. Ante algunos fenómenos se comporta como onda y en otros como partícula.

En la realidad debe tener un comportamiento específico, pero no somos capaces de explicarlo en un modelo único, lo que nos lleva a aceptar su dualidad.



Representación esquemática del comportamiento dual de la materia, específicamente de los rayos del Sol, constituida por cuantos o paquetes de energía y ondas.

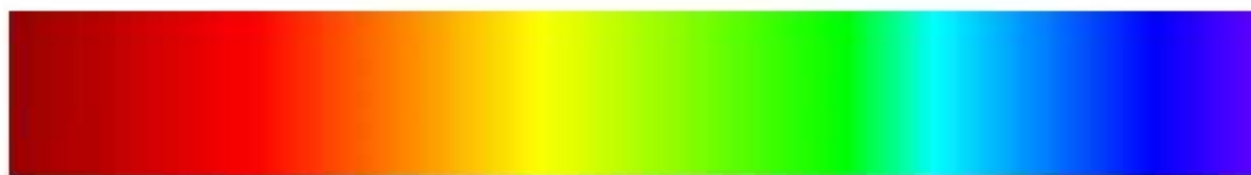
4. TEORÍA DE BOHR PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO.

Las investigaciones de Einstein prepararon el camino para resolver los misterios de los espectros de emisión de los átomos.

4.1. ESPECTROS ATÓMICOS

Los espectros de emisión de los sólidos calentados son continuos, mientras que los espectros de emisión de los átomos en estado gaseoso no tienen una distribución continua del rojo al violeta, sino que sólo producen líneas de ciertos colores.

Este tipo de espectro se denomina espectro de líneas, y corresponde a la emisión de luz solo a ciertas longitudes de onda.



Espectro de emisión continuo, producido por la luz blanca.



Litio



Sodio



Potasio

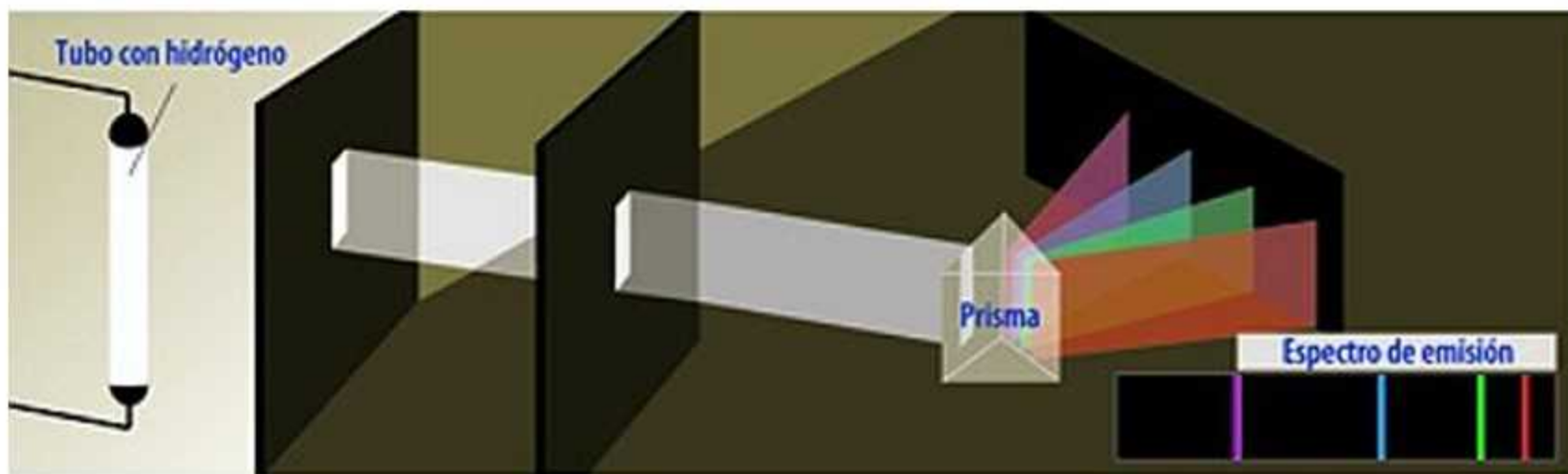
Espectro de emisión discontinuo producido por algunos metales.

La luz blanca o solar al pasar por un prisma se dispersa en sus diferentes colores, mostrando un espectro continuo desde el color rojo hasta el violeta.

Bohr, en sus experimentos, excitaba los electrones del hidrógeno en estado gaseoso por medio del calentamiento. Al hacerlo, el gas emitía una luz que, de manera similar a la luz blanca, después de cruzar un prisma se descomponía en ángulos distintos, que al incidir en un detector, cada ángulo representaba una franja de luz de color diferente.

A las diferentes franjas de la luz emitida por este elemento, Bohr las llamó **ESPECTROS DE EMISIÓN**.

4.1.1. Espectro de emisión del hidrógeno.



Los espectros emisión se deben a las radiaciones emitidas por un electrón. La radiación es una emisión continua de energía que se propaga como ondas. Cuando un electrón excitado en un nivel alto de energía desciende a un nivel de energía inferior, el electrón pierde energía y lo hace en forma de luz.

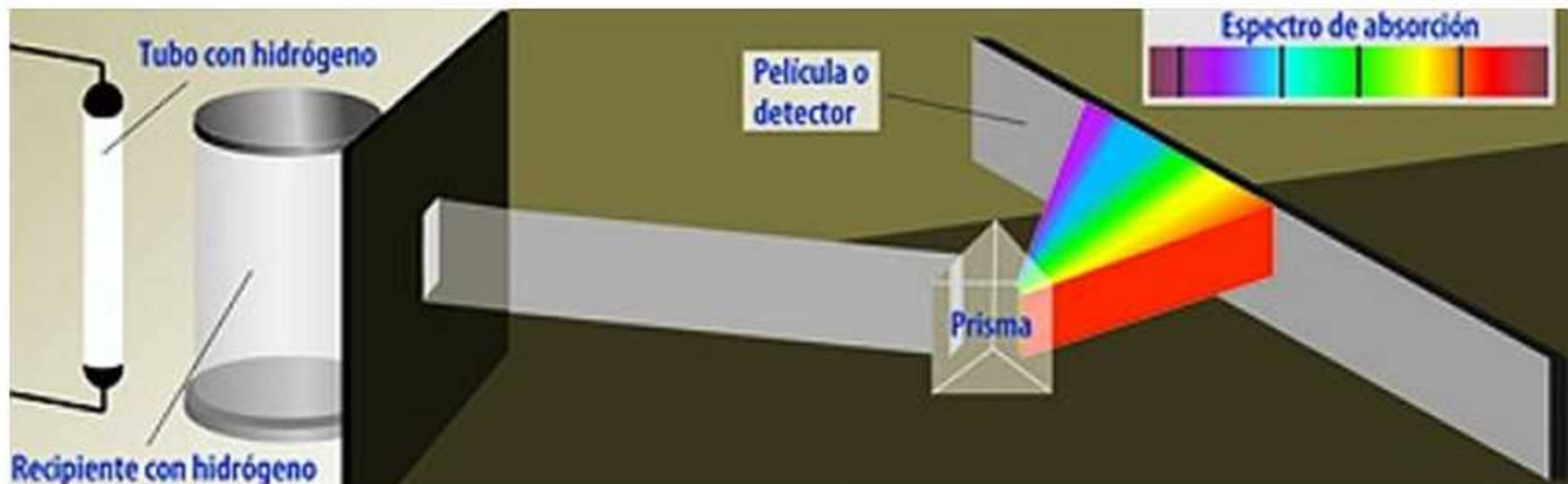
Bohr realizó otro experimento en el que hizo pasar un rayo de luz blanca a través de un recipiente con hidrógeno en estado gaseoso, y el rayo resultante se hizo pasar por un prisma.

El hidrógeno absorbe o captura porciones de luz blanca cuando esta luz lo cruza.

Este fenómeno se puede observar en las líneas oscuras que aparecen en el detector.

El espectro que se define a partir de estas observaciones se llama **ESPECTRO DE ABSORCIÓN**.

4.1.2. Espectro de absorción del hidrógeno



Los espectros de absorción se originan cuando los electrones absorben energía de la radiación y ascienden desde un nivel de energía hasta otro de mayor energía.

MODELO ATÓMICO DE NIELS BOHR

- 1913 Niels Bohr



Bohr afirmó que:

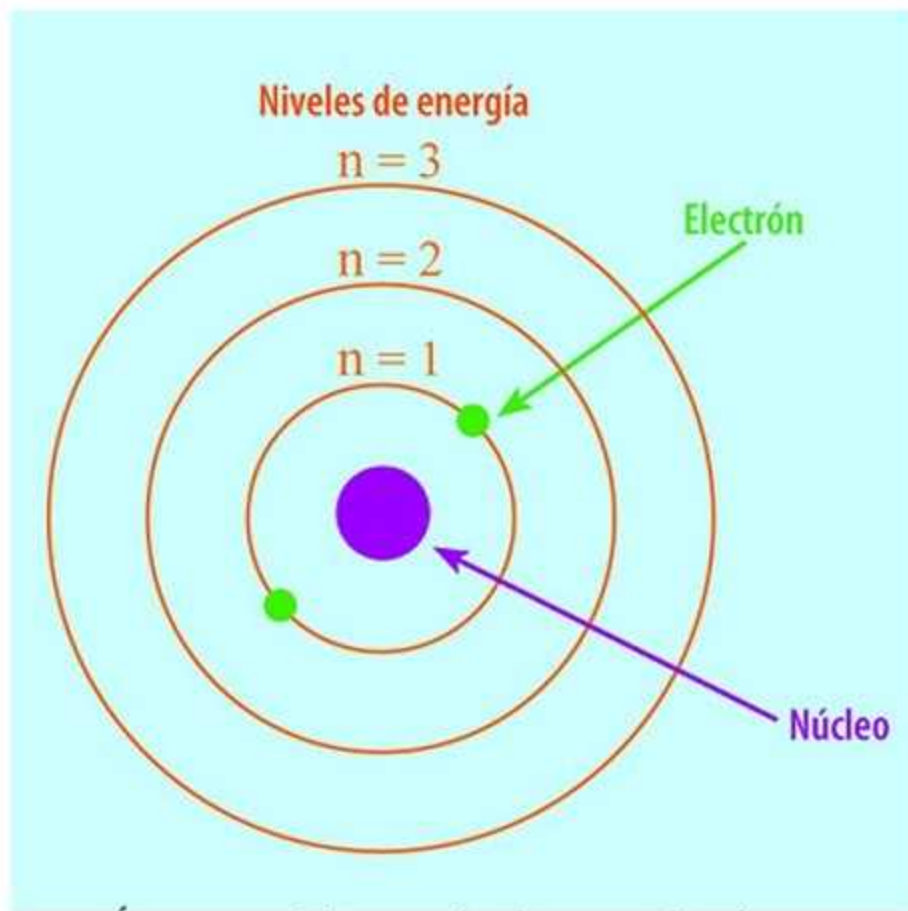
- a) Los electrones giran en órbitas circulares en torno al núcleo.
- b) El electrón sólo puede girar en determinadas órbitas y que no absorbe ni desprende energía mientras no cambie de órbita. Su energía está dada por:

$$E_n = -E/n^2$$

Donde $E = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$

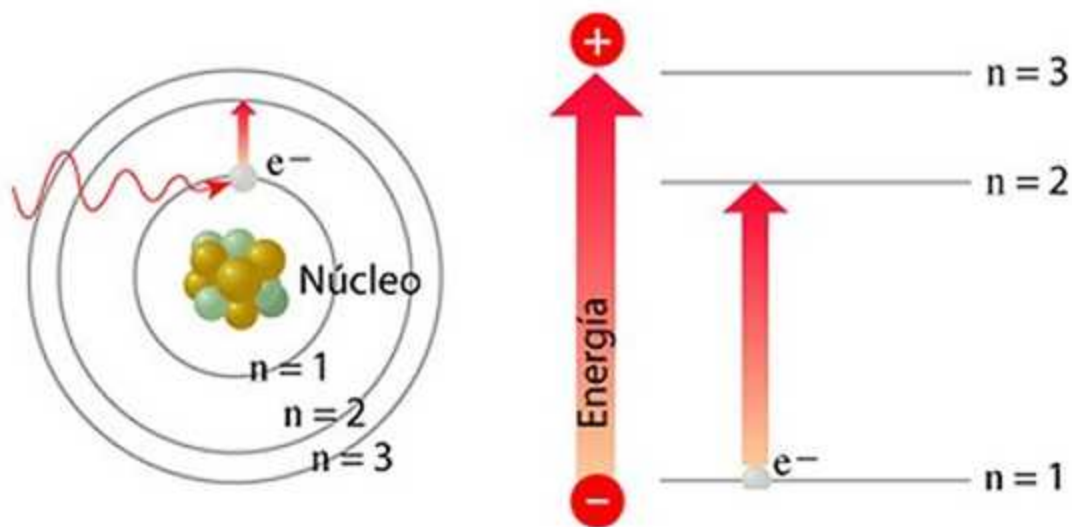
Observa que a mayor valor de n , el valor absoluto es menor, pero debido al signo negativo la energía E_n es mayor.

A las órbitas más alejadas del núcleo les corresponden niveles de energía más elevados que a las más próximas a él. La energía del fotón emitido o absorbido es igual a la diferencia entre las energías de los dos niveles.



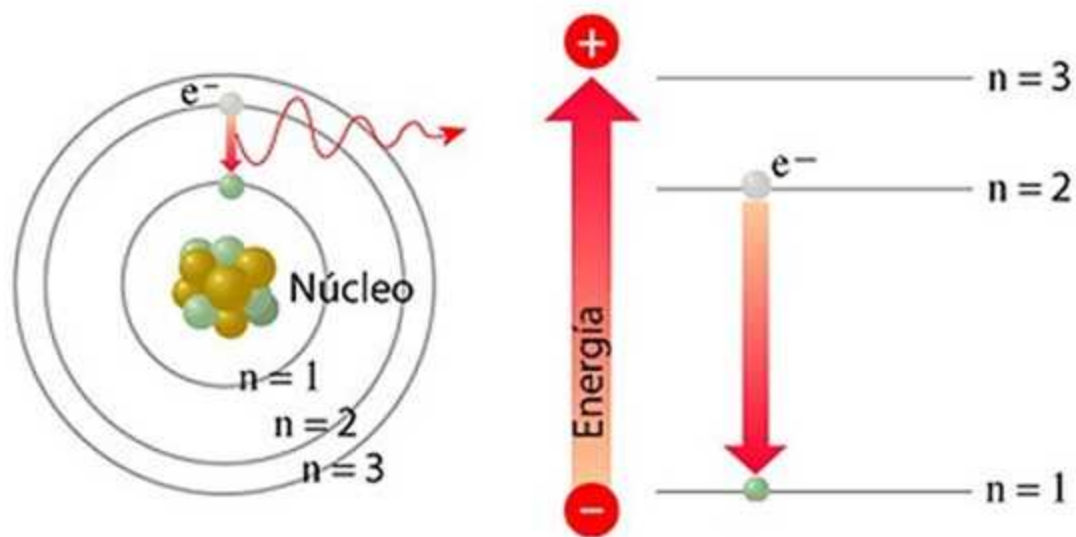
c) Cuando el electrón absorbe energía, el electrón salta hacia un nivel externo, como se muestra en la imagen.

Espectro de absorción en el modelo atómico de Bohr



d) Cuando el electrón regresa a un nivel interno, emite energía.

Espectro de emisión en el modelo atómico de Bohr



e) Si el electrón absorbe o emite energía lo hace en forma de cuantos, cuya magnitud de energía está dada por la ecuación de Planck.

$$E = h \cdot \nu$$

Cuando el electrón cambia de órbita la diferencia de energía entre ellas está dada por:

$$\Delta E = h \cdot \nu$$

Además de las hipótesis anteriores, la mecánica cuántica tiene tres principios adicionales:

1. La hipótesis de De Broglie.
2. El principio de incertidumbre de Heisenberg
3. La ecuación de Schrodinger

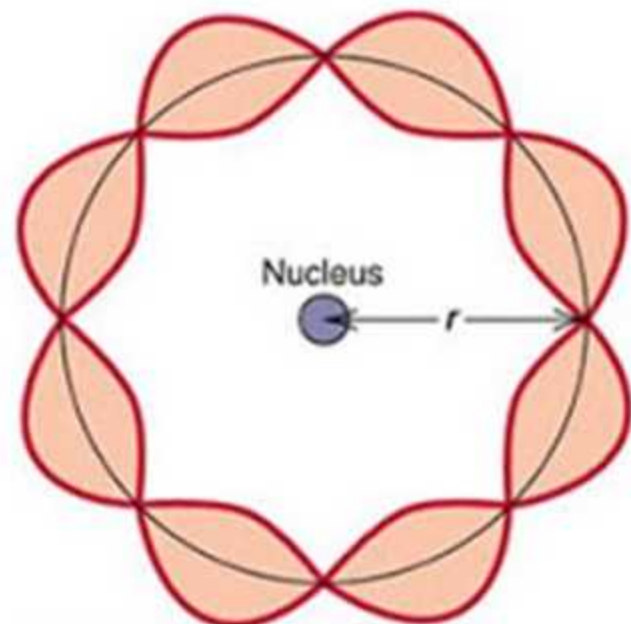
1. Hipótesis de Onda – Partícula de De Broglie

En 1923 Louis De Broglie postuló que “todas las partículas elementales, manifiestan un dualismo onda-partícula y llevan asociada una longitud de onda, que está determinada por la siguiente ecuación:

$$\lambda = \frac{h}{m \times v}$$

Cuanto mayor es el momento lineal (mv), menor será la longitud de onda (λ).

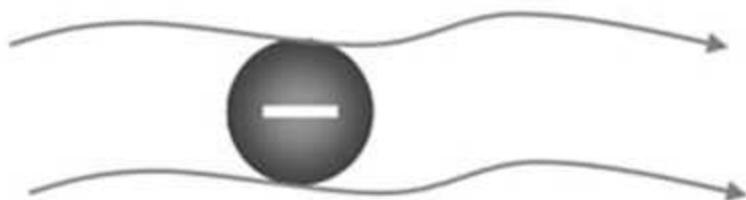
Esta hipótesis fue comprobada experimentalmente para el caso de los electrones, protones e incluso las moléculas de hidrógeno y átomos de helio.



Copyright 1998 by John Wiley and Sons, Inc. All rights reserved.

Matter as Waves

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



Note: v is for velocity and not for frequency as shown before.

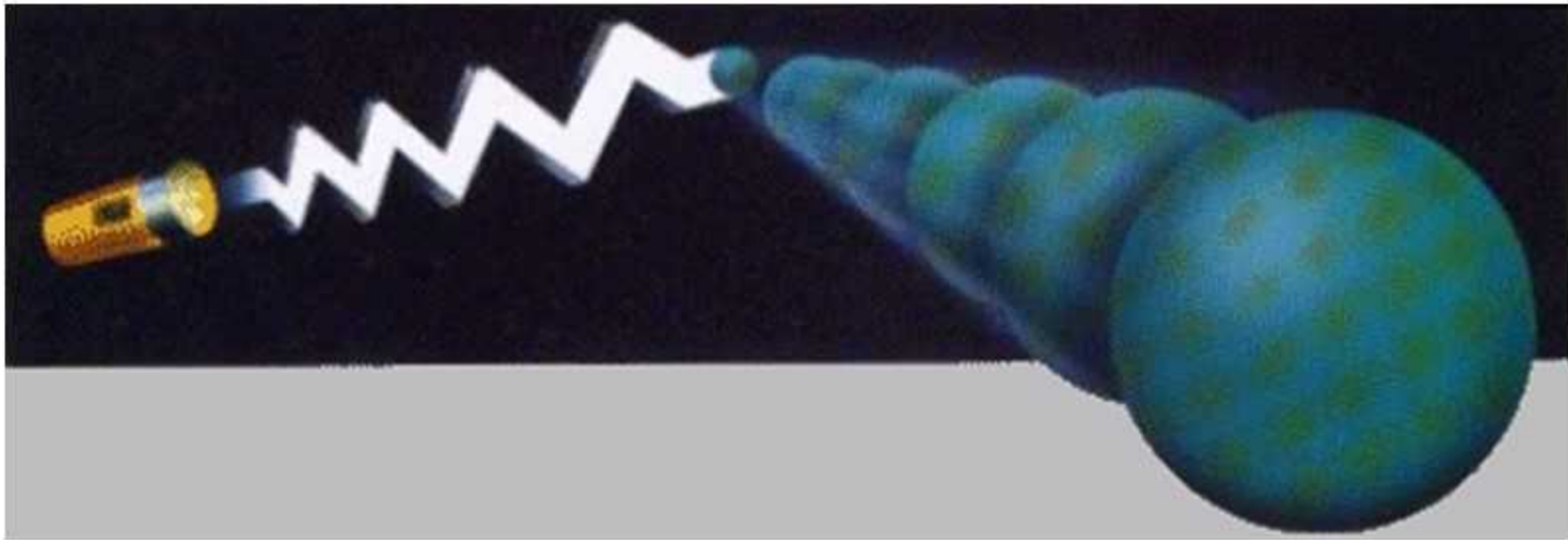


Louis de Broglie

2. Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Es imposible conocer simultáneamente y con exactitud la posición y el momento lineal de una partícula en movimiento. Cuanto más exacta sea la determinación de uno de ellos, más inexacta será la otra.

Por ejemplo, un observador puede determinar o bien la **POSICIÓN EXACTA** de una partícula en el espacio o su **MOMENTO** (el producto de la velocidad por la masa) **EXACTO**, pero nunca ambas cosas simultáneamente. Cualquier intento de medir ambos resultados conlleva a imprecisiones.



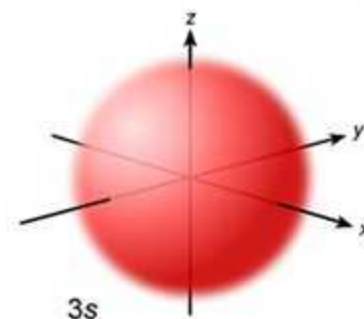
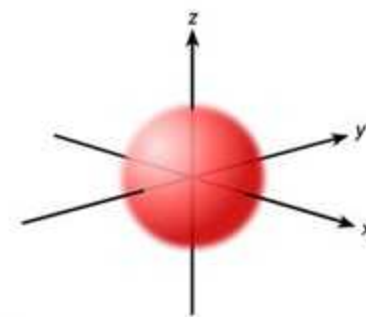
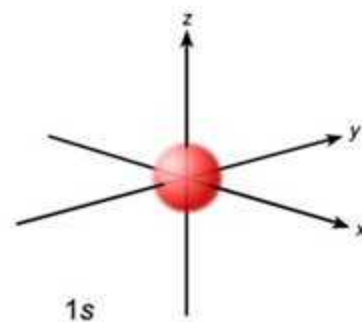
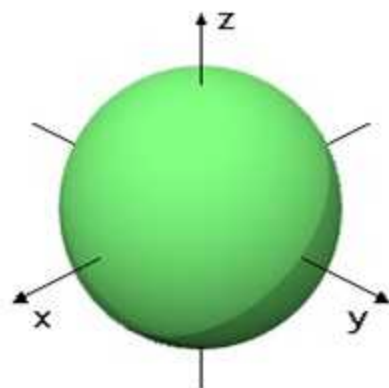
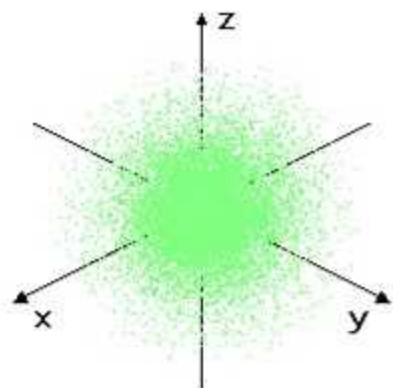
Cuando un fotón emitido por una fuente de luz colisiona con un electrón (turquesa), el impacto señala la posición del electrón. En el proceso, sin embargo, la colisión cambia la velocidad del electrón. Sin una velocidad exacta, el impulso del electrón en el momento de la colisión es imposible de medir.

Las consecuencias de este principio son enormes. En la física clásica todas las magnitudes observables relativas a un sistema físico pueden ser determinadas, en principio con cualquier grado de precisión, dependiendo casi exclusivamente de los instrumentos empleados.

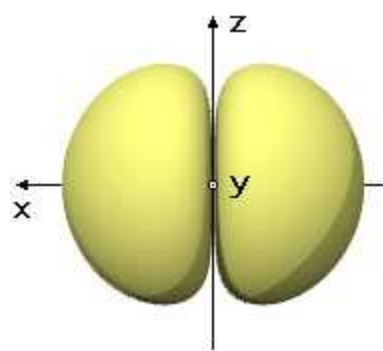
Pero en la física cuántica, esto no ocurre. Así, al no ser posible ubicar la posición de un móvil en un instante nos impide definir el concepto de trayectoria. Entonces, no tiene sentido hablar de orbitas electrónicas en los átomos, tan solo se puede referir a zonas en la que la probabilidad de encontrar el electrón es elevada (**ORBITAL**)

2.1. LOS ORBITALES ATÓMICOS.

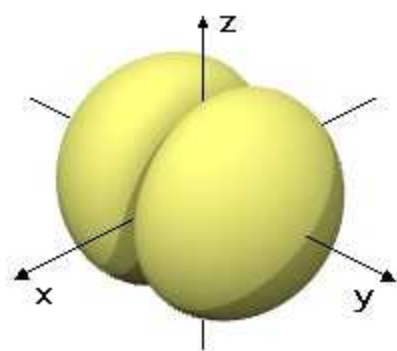
a) Orbital **S**: Tienen forma esférica y pueden contener hasta un máximo de dos electrones.



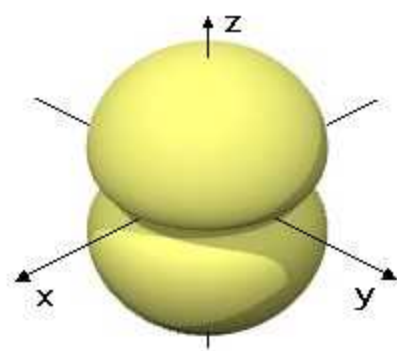
b) Orbital **p**: Es un conjunto de tres parejas de lóbulos orientadas en las tres dimensiones cada uno de estos tres orbitales puede tener un máximo de dos electrones, por lo tanto un orbital p lleno contiene 6 electrones. El orbital p puede encontrarse a partir del segundo nivel de energía.



Orbital p_x

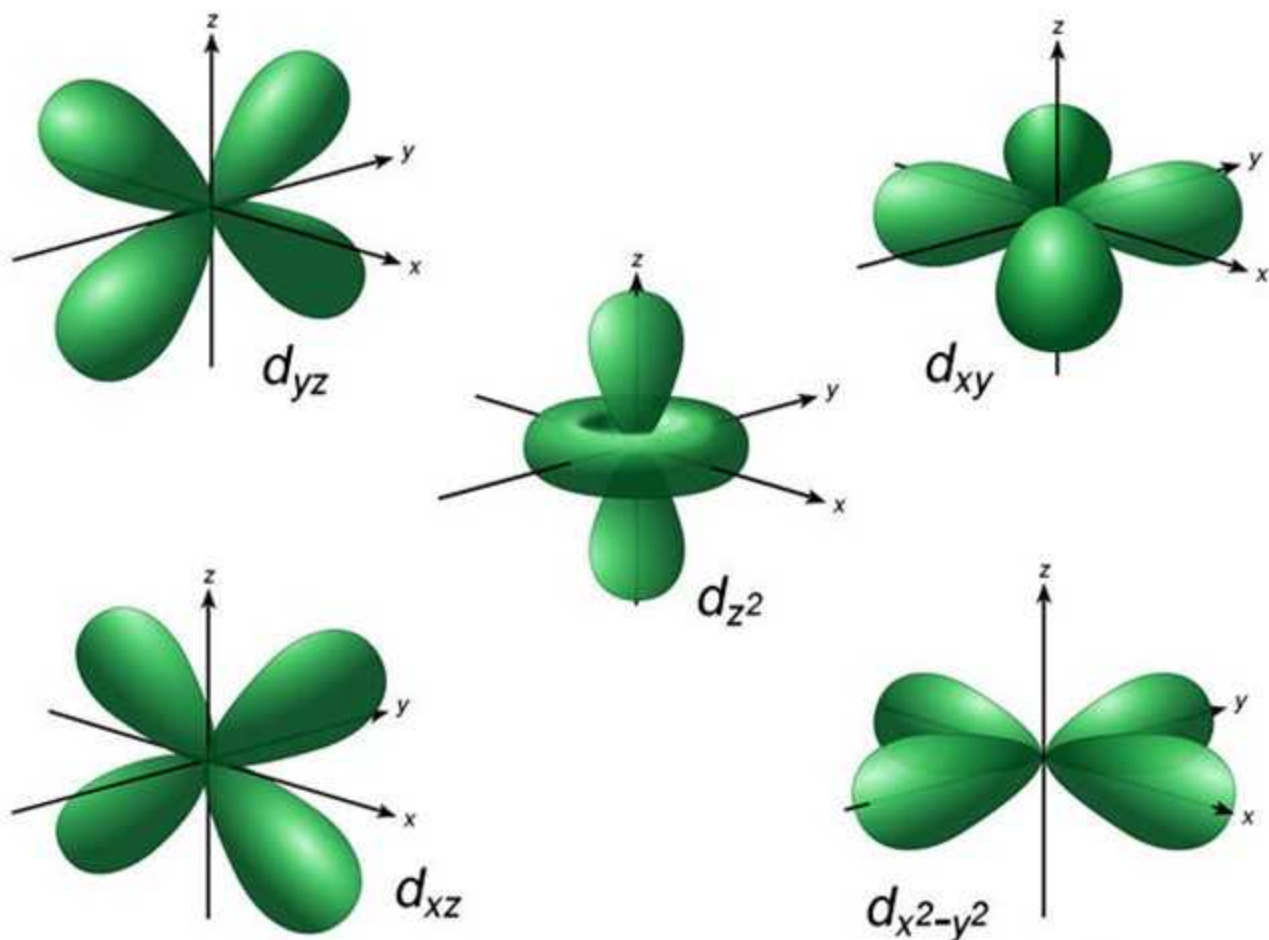


Orbital p_y

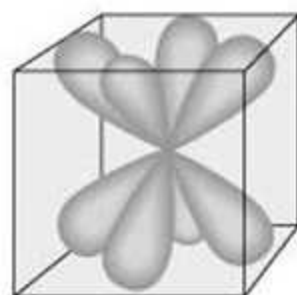
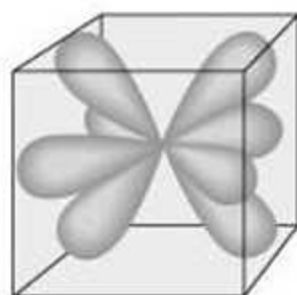
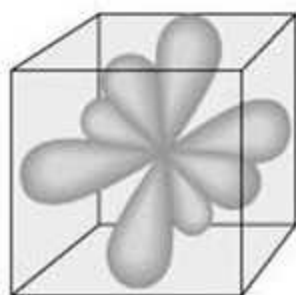
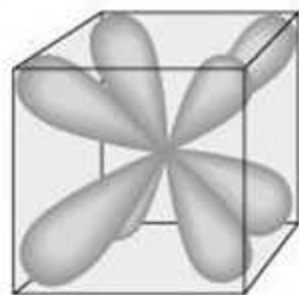
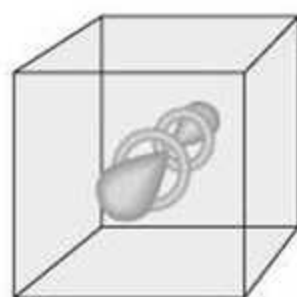
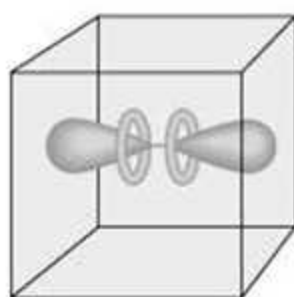
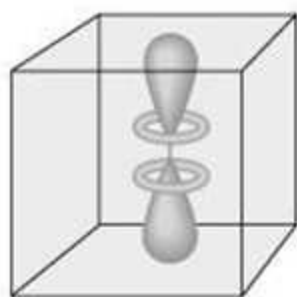
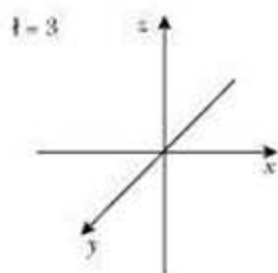


Orbital p_z

c) Orbital **d**: el orbital d es un conjunto de cinco orbitales, dispuestos en los planos X, Y, Z cada uno de estos cinco orbitales puede tener un máximo de 2 electrones, por lo que un orbital d completo tiene 10 electrones. Los orbitales d se encuentran a partir de la tercera etapa.



d) Orbitales **f**: El orbital f es un conjunto de 7 orbitales, simétricamente distribuidos sobre los planos X, Y, y Z. En cada uno de estos siete orbitales puede haber un máximo de 2 electrones, por lo que un orbital f puede tener hasta 14 electrones. Se encuentran a partir de la cuarta capa.



3. Ecuación de onda de Schrödinger y números cuánticos

En 1926 Erwin Schrödinger plantea que los electrones podían ser considerados como ondas materiales y, por lo tanto, sus movimientos ondulatorios alrededor del núcleo están descritos mediante ecuaciones matemáticas.

Así, la posición del electrón y su entorno espacial quedan definidos como una función de onda Ψ . Para determinar la función de onda, es necesario definir parámetros restrictivos. Estos parámetros restrictivos se denominan **Números Cuánticos**.

El modelo actual propuesto por Schrödinger es un resultado de los trabajos de Bohr, De Broglie y Heisenberg.

El modelo actual llamado Mecano-Cuántico, no circunscribe al electrón en una orbita fija, sino que a una zona llamada **NUBE ELECTRÓNICA**, dentro de la cual existe una alta **PROBABILIDAD DE ENCONTRAR AL ELECTRÓN**. De acuerdo con estas ideas, los modelos matemáticos utilizados para representar la posición y los niveles de energía de los electrones en el átomo se basan en Los Números Cuánticos.

3.1 LOS NÚMEROS CUÁNTICOS.

a) Número cuántico principal (n)

El número cuántico principal, **n**, determina el tamaño del orbital. Puede tomar cualquier valor natural distinto de cero: $n = 1, 2, 3, 4 \dots$

Varios orbitales pueden tener el mismo número cuántico principal, y de hecho lo tienen, agrupándose en capas. Los orbitales que tienen el mismo número cuántico principal forman una capa electrónica.

Cuanto mayor sea el número cuántico principal, mayor será el tamaño del orbital y, a la vez, más lejos del núcleo estará situado.

b) Número cuántico secundario (l)

El número cuántico azimutal, l , indica la forma del orbital, que puede ser circular, si vale 0, o elíptica, si tiene otro valor.

El valor del número cuántico azimutal depende del valor del número cuántico principal. Desde 0 a una unidad menos que n .

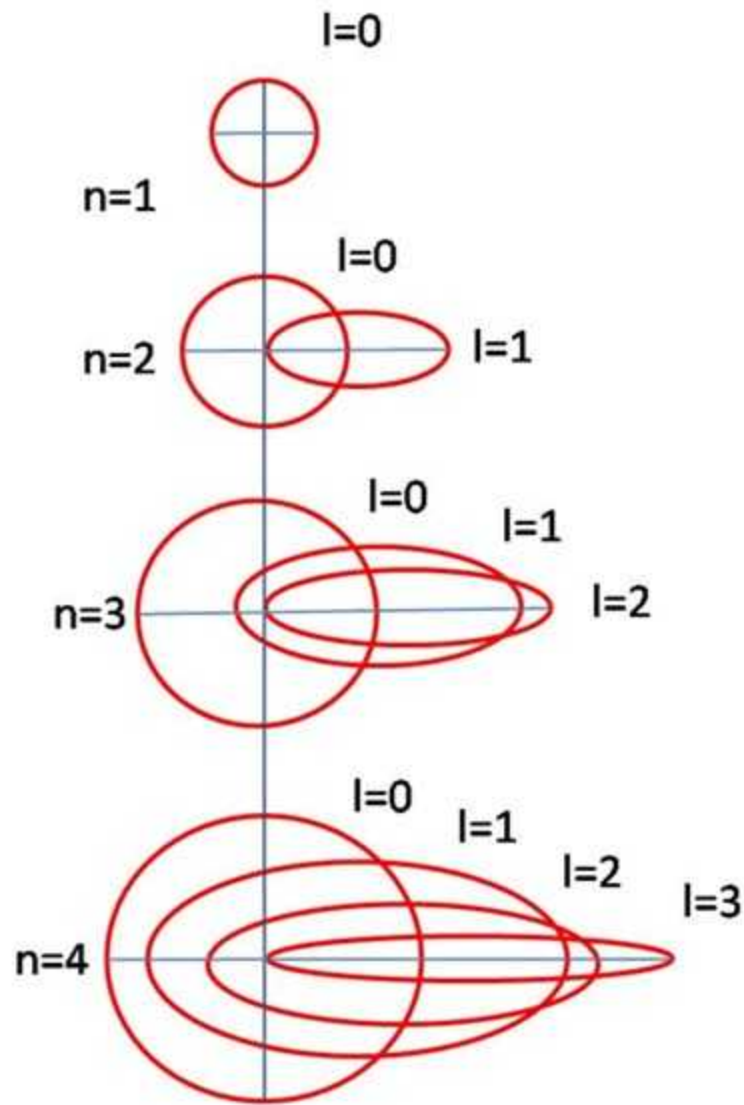
Si el número cuántico principal vale 1, $n = 1$, el número cuántico azimutal sólo puede valer 0.

$$l = 0, 1, 2, \dots (n-1)$$

Cada valor de l corresponde a un tipo de orbital denominados:

Subnivel	l
s	0
p	1
d	2
f	3

- Cuanto mayor sea el número cuántico azimutal, más elíptico y achatado será el orbital.



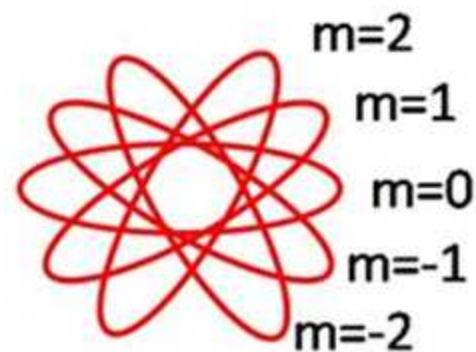
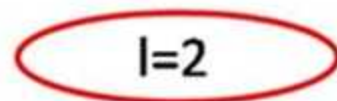
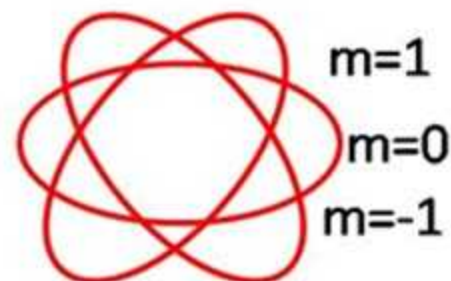
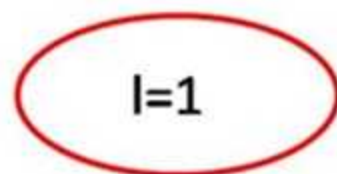
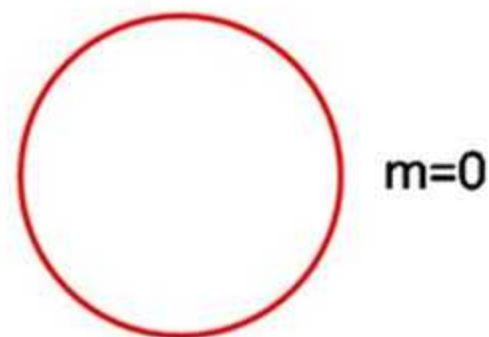
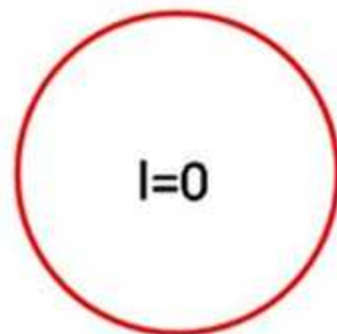
c) Número Cuántico Magnético (m)

El número cuántico magnético, m , determina la orientación del orbital. Los valores que puede tomar dependen del valor del número cuántico azimutal. Los valores van desde $-l$ a $+l$, incluyendo el cero.

l	0	1	2	3
m	0	-1, 0, +1	-2, -1, 0, +1, +2	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3

En general, para un valor l , habrá $2 \cdot l + 1$ orbitales:

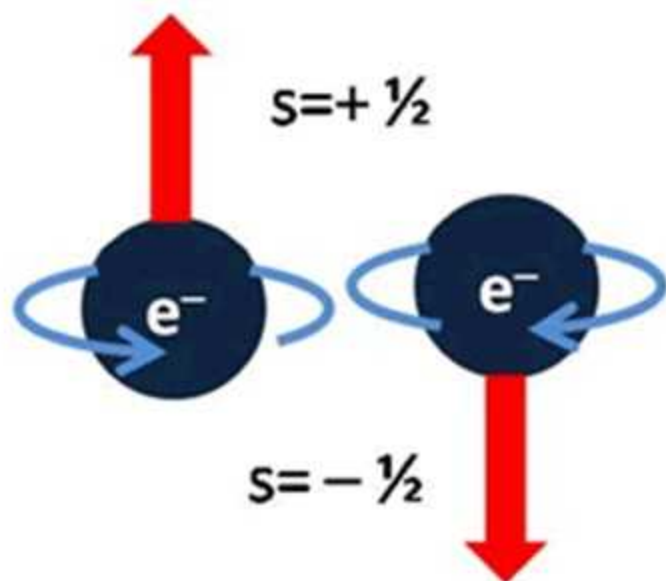
l	Tipo	Orbitales
0	s	1
1	p	3
2	d	5
3	f	7



d) Número cuántico de Spin (s)

El giro del electrón sobre sí mismo está indicado por el número cuántico de espín, que se indica con la letra s .

Como puede tener dos sentidos de giro, el número de espín puede tener dos valores: $\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$.



EN RESUMEN...

Para determinar a un electrón, hay que indicar el orbital atómico en el que se encuentra y su spín, es decir, hacen falta cuatro números cuánticos:

