

UNIDAD II

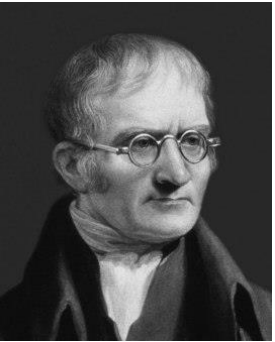
ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

- 1.1 Evolución de los modelos atómicos. Modelo actual del átomo.
- 1.2 Números cuánticos y la configuración electrónica de los átomos.
- 1.3 Estructura de la Tabla Periódica de los elementos en función de la configuración electrónica de los átomos. Diagramas de Lewis.
- 1.4 Propiedades periódicas de los elementos. Radios atómicos, energía de ionización, radios iónicos, afinidad electrónica y electronegatividad.

EVOLUCIÓN DE LOS MODELOS ATÓMICOS

Modelos basados en
la Física Clásica

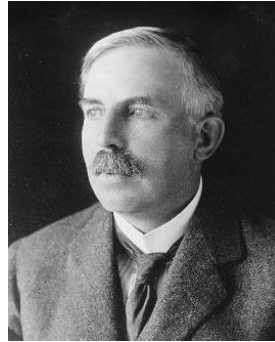
Dalton (1803)



Thomson (1904)



Rutherford (1911)

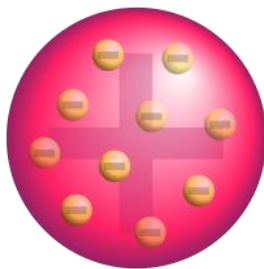


Modelos basados en
la Física Cuántica

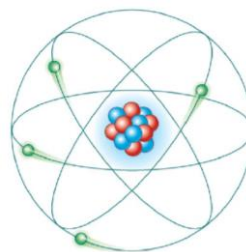
Bohr (1913)



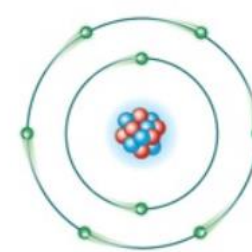
Schrodinger (1927)



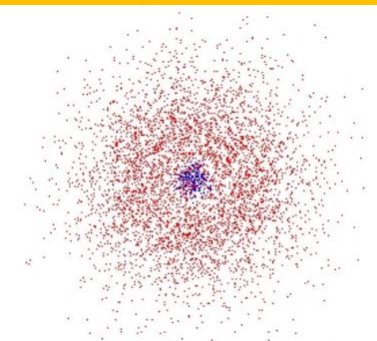
Cargas positivas
y negativas



Núcleo
atómico



Niveles de
energía



Modelo de la nube
electrónica

DE LA FÍSICA CLÁSICA A LA TEORÍA CUÁNTICA

Las propiedades de los átomos y de las moléculas no son gobernadas por las mismas leyes físicas que rigen a los objetos más grandes.

FÍSICA CLÁSICA



MECÁNICA CUÁNTICA

APLICABLE A OBJETOS MUY PEQUEÑOS COMO ÁTOMOS

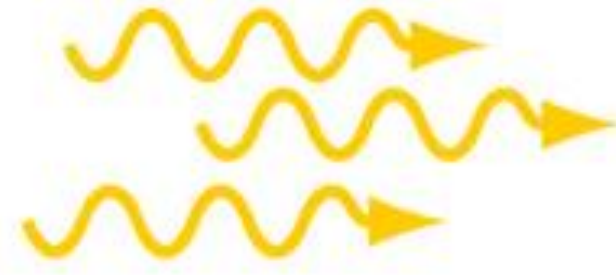


TEORÍA DE LA RELATIVIDAD

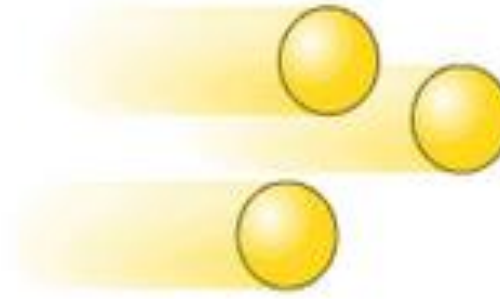
APLICABLE A FENÓMENOS QUE OCURREN A GRAN VELOCIDAD



Naturaleza de la luz



¿Ondas?



o ¿partículas?



Christiaan Huygens (1629-95):

**Modelo ondulatorio
(1690)**

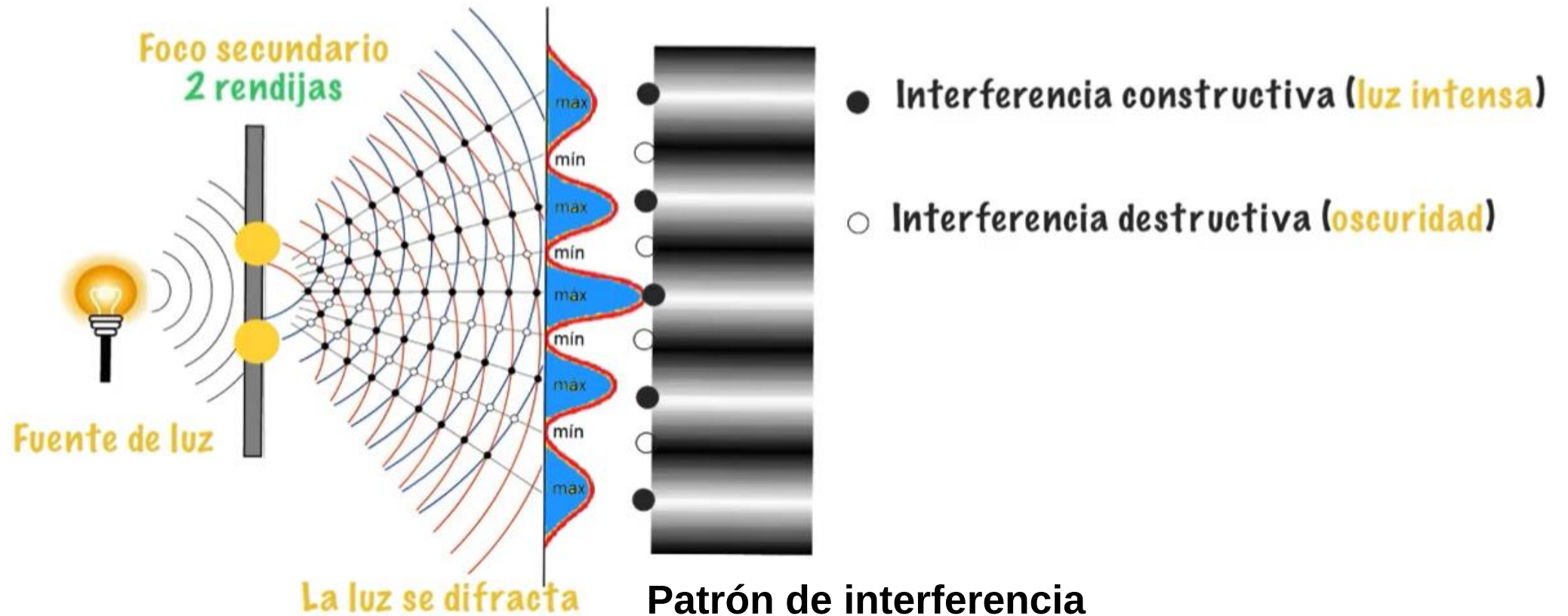


Isaac Newton (1643-1727):

**Modelo corpuscular
(1704)**

Naturaleza de la luz

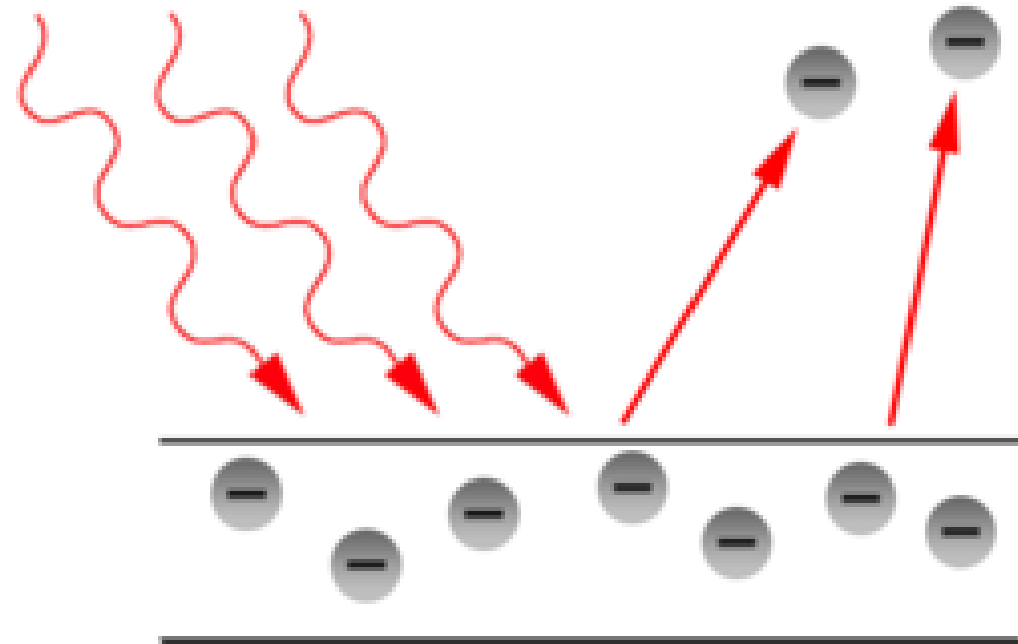
- En 1801 **Thomas Young** demuestra la naturaleza ondulatoria de la luz.
- **El experimento de la doble rendija**



Patrón de interferencia
(es característico de ondas
mecánicas o electromagnéticas)

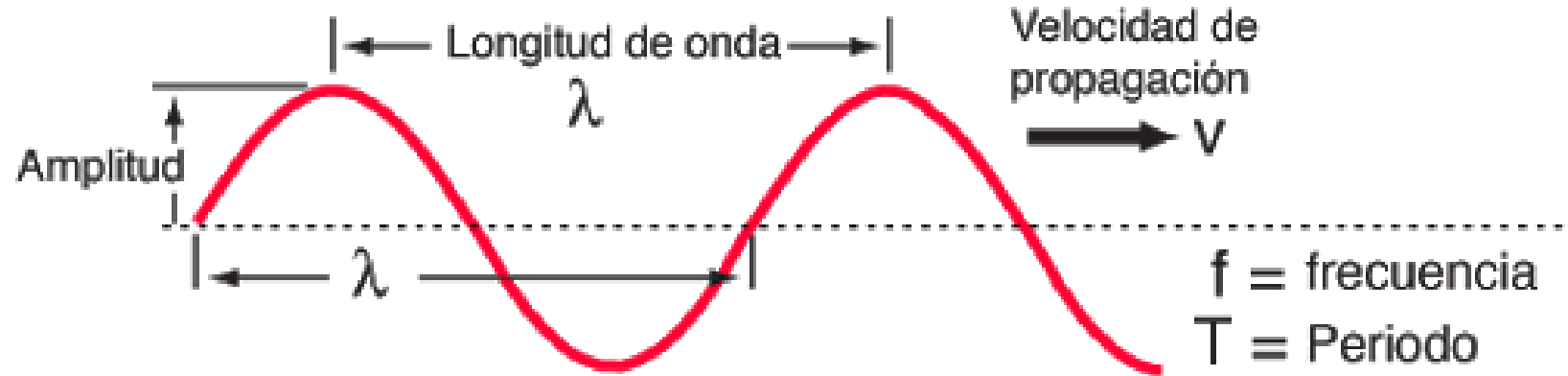
Naturaleza de la luz

- **Albert Einstein** describe el fenómeno que demuestra el comportamiento dual de la luz:
- **El Efecto Fotoeléctrico**
- Premio Nobel de Física en 1922



Concepto de onda

- Podemos pensar en una onda como una alteración vibrátil mediante la cual se transmite la energía.

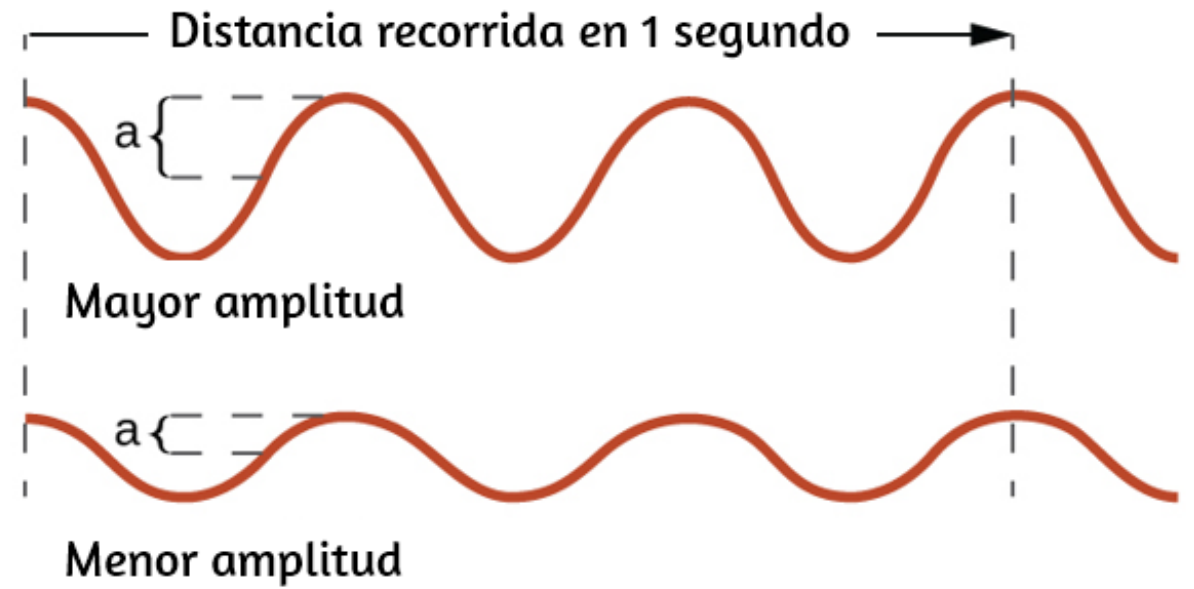


$$\lambda = \frac{v}{f}$$

$\lambda = \text{longitud de onda (m)}$
 $v = \text{velocidad de propagación (m/s)}$
 $f = \text{frecuencia (Hz, ciclos/s)}$

- Frecuencia.** Es el número de veces que la onda se repite en una unidad de tiempo.
- Longitud de onda.** Es la distancia entre dos crestas consecutivas de la ondulación.

Concepto de onda



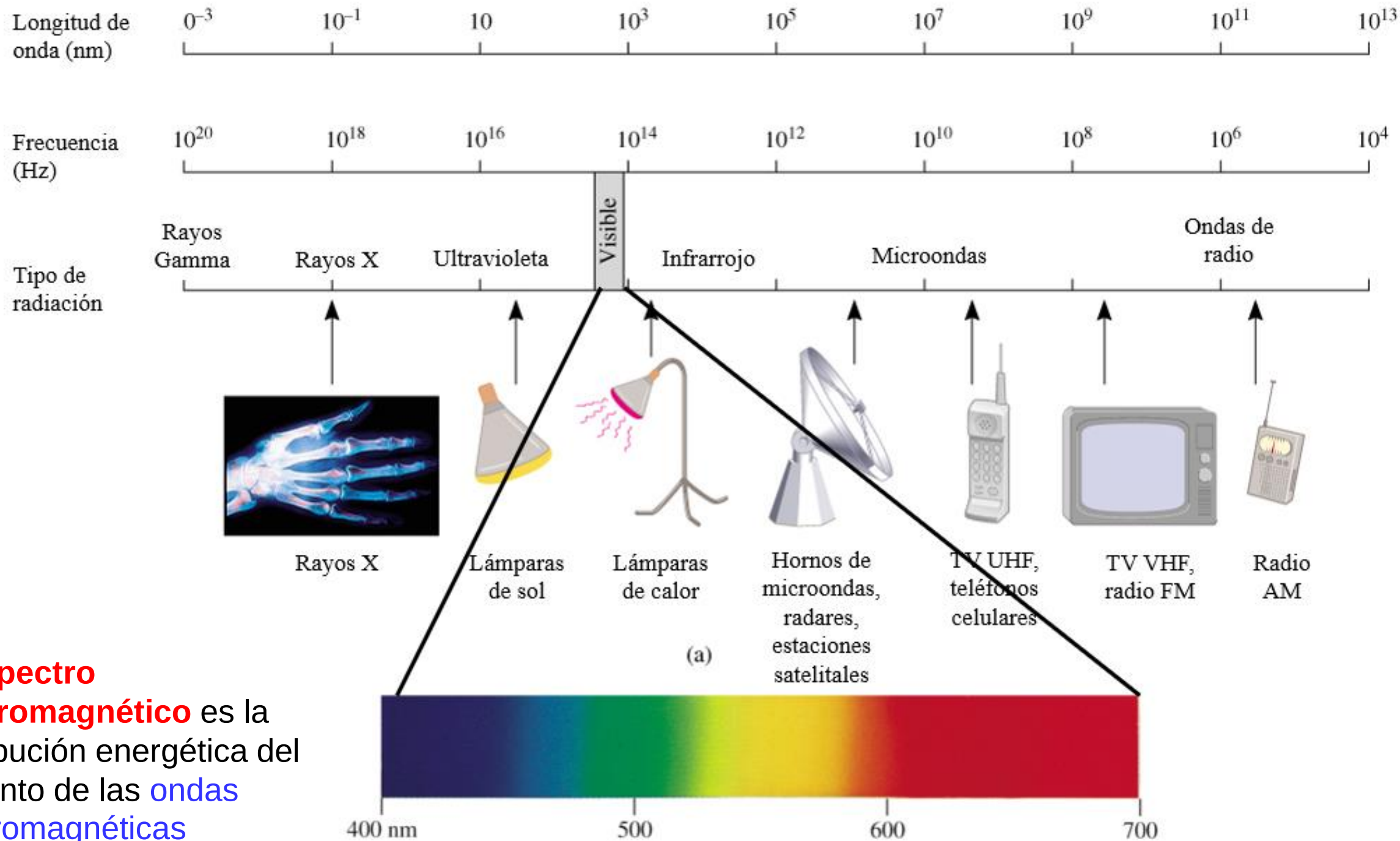
Concepto de onda

Según el medio en que se propagan:

- **Ondas mecánicas.** Precisan de un medio elástico (líquido, gaseoso o sólido) y de condiciones determinadas de temperatura y presión, para propagarse efectivamente. Ejemplo: las ondas sonoras que se propagan por el aire o por el agua.
- **Ondas electromagnéticas.** No requieren de un medio porque se pueden propagar en el vacío. Por ejemplo: la luz.
- **Ondas gravitacionales.** Alteraciones del espacio-tiempo (recién confirmadas por la ciencia).

RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA

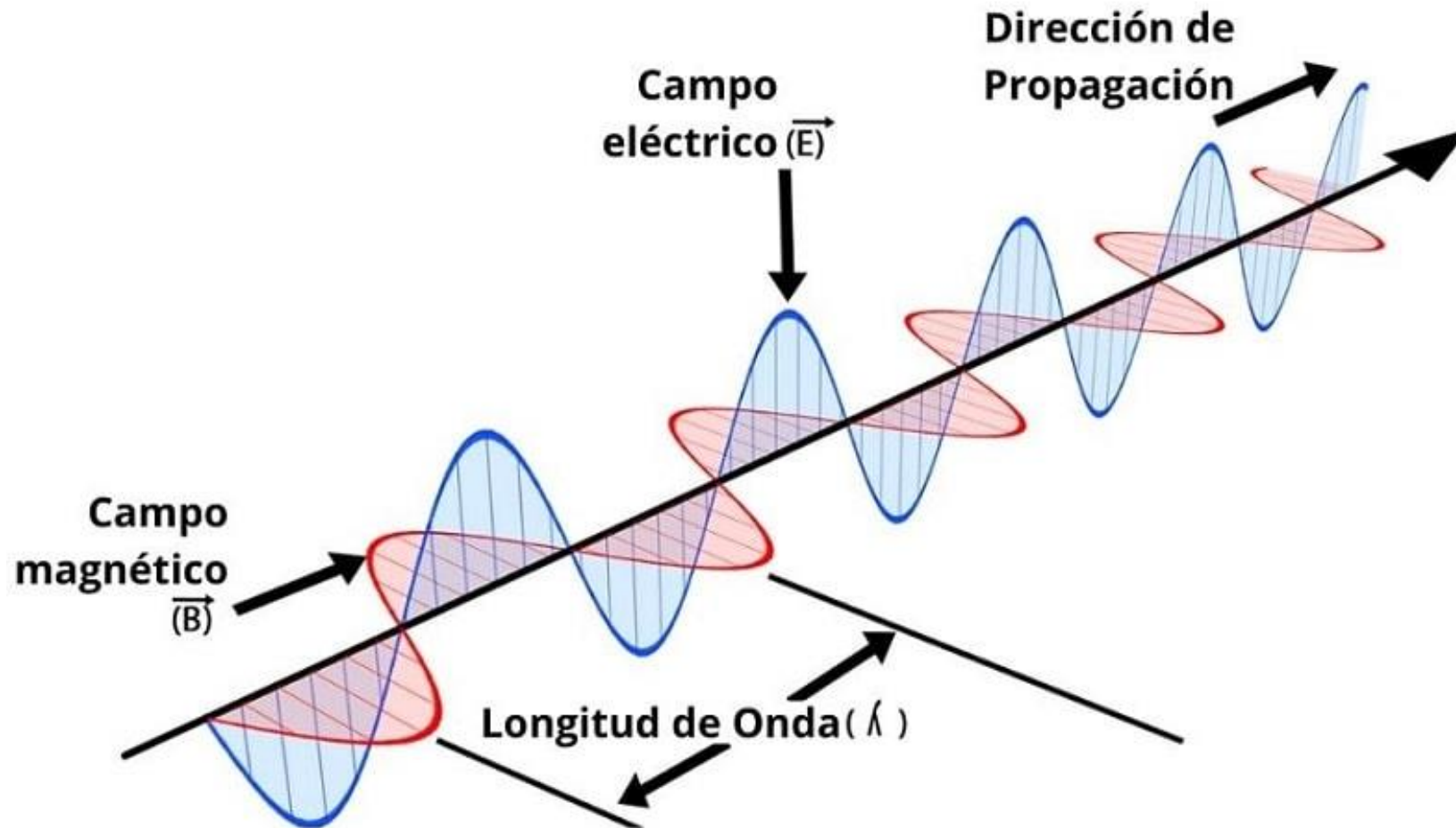
- La **radiación electromagnética** transporta energía a través del espacio.
- La luz que vemos con nuestros ojos, la luz visible, es un tipo de radiación electromagnética.
- Hay muchos tipos de radiación electromagnética además de la luz visible.
- Todos los tipos de radiación electromagnética se mueven a través del vacío a una velocidad de **$2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$** , la velocidad de la luz. Ningún objeto material puede desplazarse a esta velocidad.



El **espectro electromagnético** es la distribución energética del conjunto de las **ondas electromagnéticas**

RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA

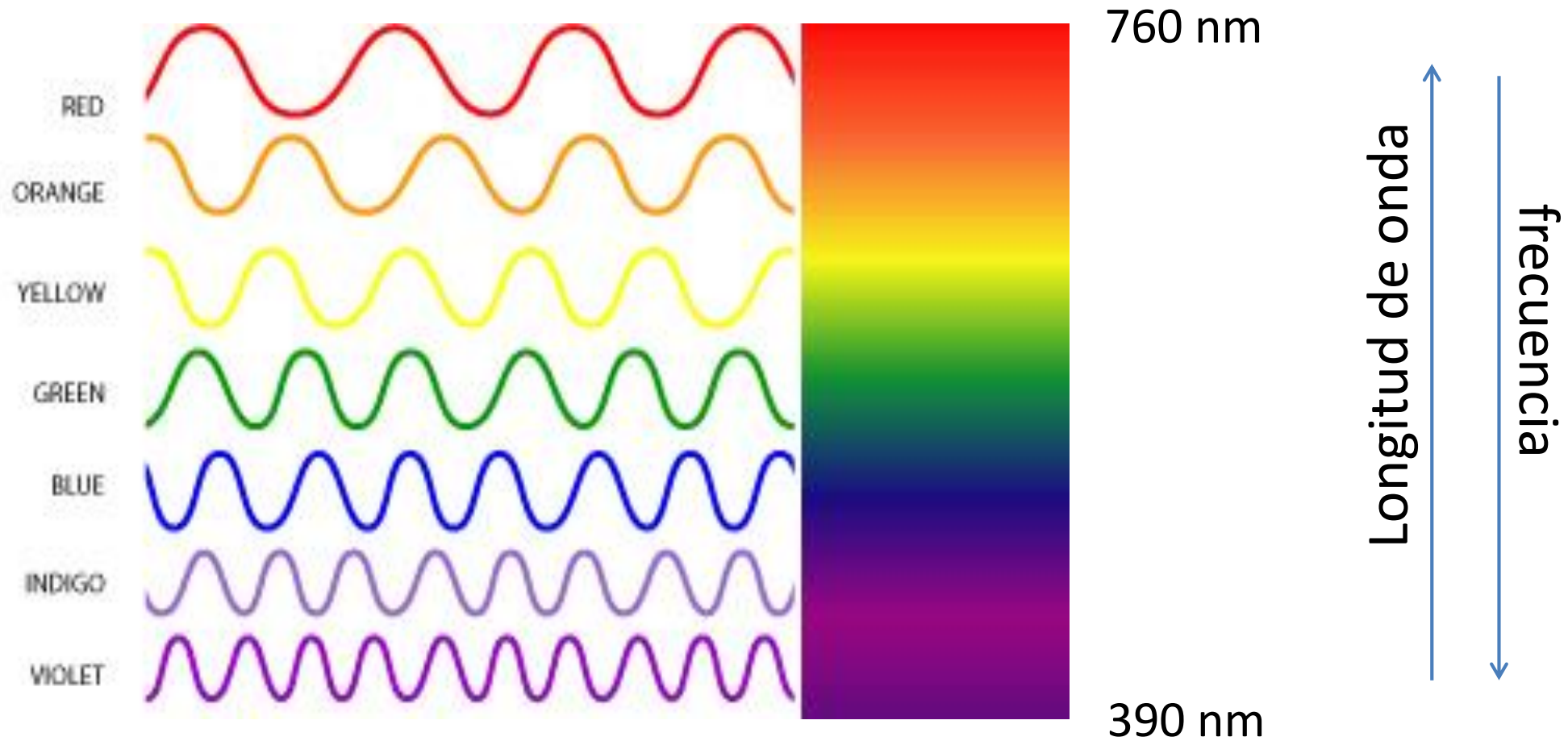
- Una onda electromagnética consiste en la oscilación de un campo eléctrico y otro magnético en direcciones perpendiculares entre sí, y a su vez, perpendiculares ambos a la dirección de propagación.

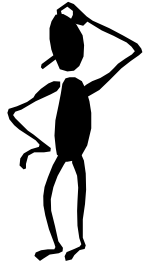


$$\lambda = \frac{c}{f}$$

λ = longitud de onda
 c = velocidad de la luz
 f = frecuencia

- En el espectro visible. la frecuencia de una onda de luz determina su color.





Un fotón tiene una frecuencia de $6.0 \times 10^4 \text{ Hz}$. Convertir esta frecuencia a longitud de onda (nm).
¿Esta frecuencia cae en la región visible?

$$f = 6.0 \cdot 10^4 \text{ Hz}$$

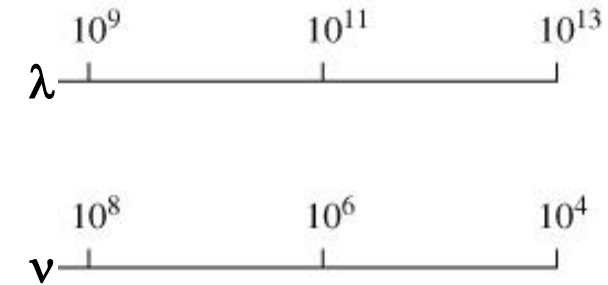
$$\lambda = \frac{c}{f}$$

$$\lambda = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{6.0 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}} = 5 \cdot 10^3 \text{ m}$$

Convertimos m a nm:

$$\lambda = 5 \cdot 10^3 \text{ m} = 5 \cdot 10^{12} \text{ nm}$$

Ondas de radio



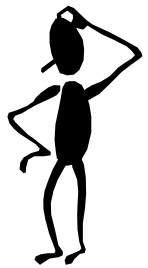
Ondas de
radio



TV VHF,
radio FM



Radio
AM

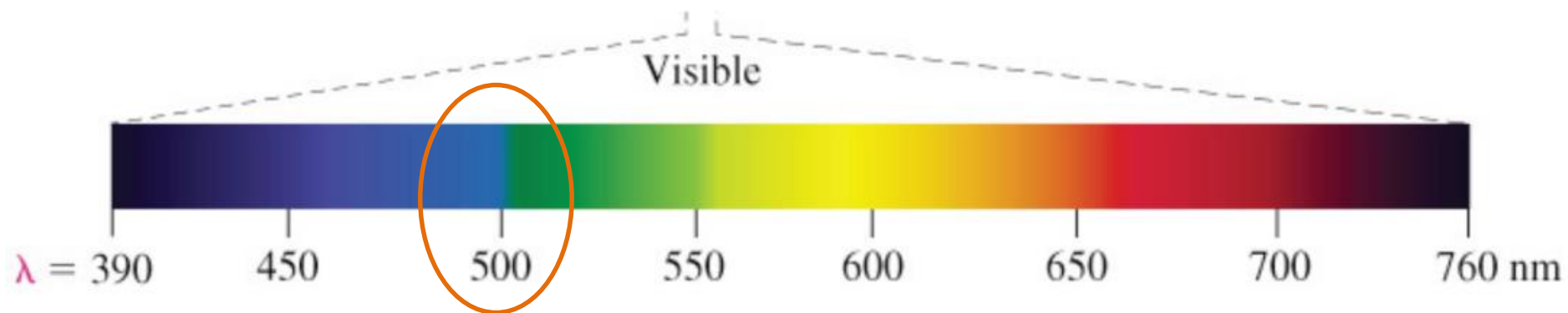


Calcula la longitud de onda de la luz cuya frecuencia es $0.6 \times 10^{15} \text{ seg}^{-1}$. ¿A qué región del espectro corresponde esa radiación?

$$f = 0.6 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

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

$$\lambda = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{0.6 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 500 \text{ nm} \rightarrow \text{luz visible}$$



Teoría cuántica de Max Planck

- Energía cuantizada y Fotones

"Los intercambios de energía entre materia y radiación tienen lugar no de manera continua, sino por cantidades discretas e indivisibles o cuantos de energía. El cuanto de energía es proporcional a la frecuencia de la radiación":

$$E = h \cdot f$$

h = constante de Planck = $6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{seg}$

f = frecuencia de la radiación



Max Planck (1858-1947)

Nobel de Física en 1918

Partícula

Nuestro conocimiento tradicional de partícula referencia a algo que está **“LOCALIZADO”**- confinado en el espacio con una posición y un momento definido.



Onda

Nuestro conocimiento tradicional de una onda está relacionado con algo **“DE-LOCALIZADO”**- disperso en el espacio y el tiempo



¿Cómo podríamos representar tanto a una onda como a una partícula?

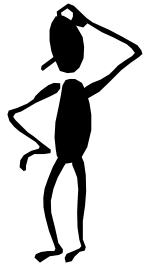
Paquete de onda



Una partícula de luz recibe el nombre de fotón y la energía de cada fotón es un cuanto de energía.

- La energía de un fotón expresada en Julios es muy pequeña.
- A escala microscópica es conveniente emplear como unidad de energía el electrón-voltio:

$$1eV = 1.6 \cdot 10^{-19}J$$



Cuando el cobre es bombardeado con electrones de alta energía, se emiten rayos X. Calcule la energía (en Joules) asociada con los fotones si la longitud de onda de los rayos X es 0.154 nm.

$$E = hf = h \frac{c}{\lambda}$$

$$h = \text{constante de Planck} = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{seg}$$

f = frecuencia de la radiación

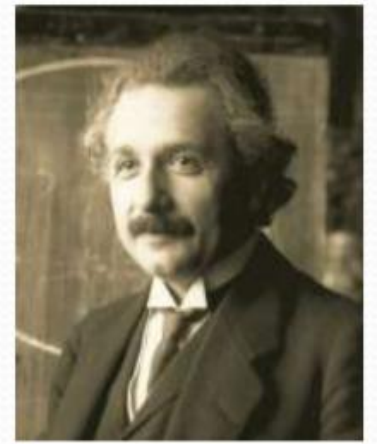
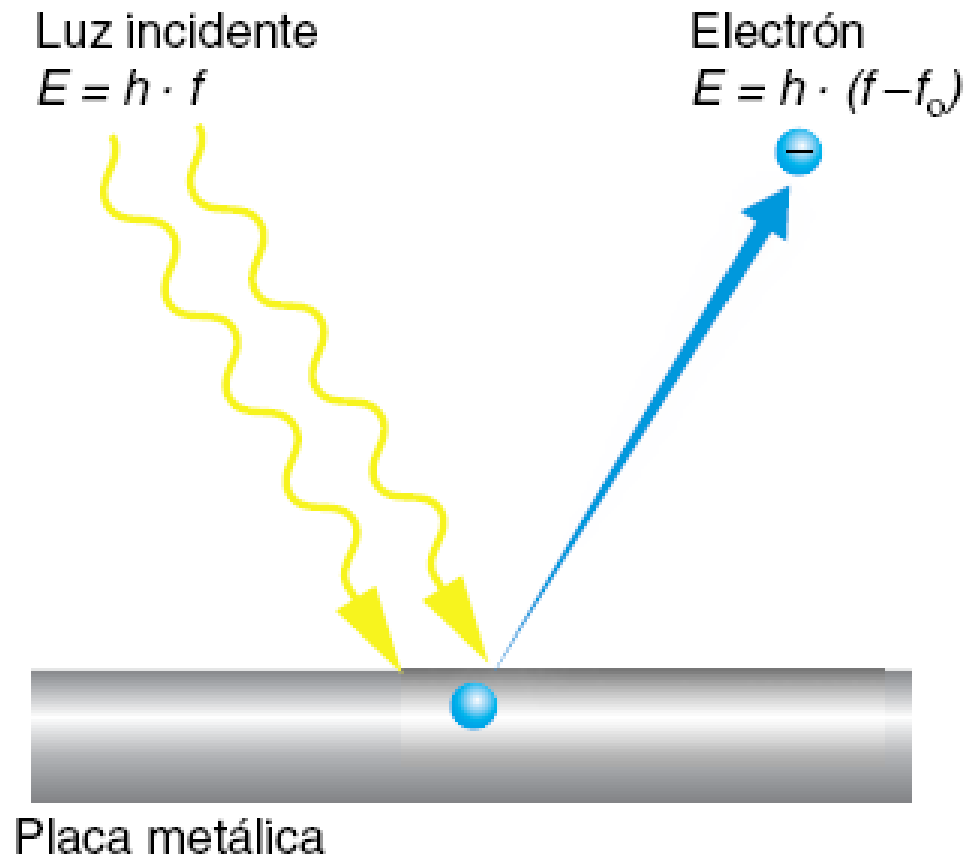
$$E = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{0.154 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = 1.29 \cdot 10^{-15} \text{ J}$$

Los átomos de sodio excitados pueden emitir radiación a una longitud de onda de 5890 Å. ¿Cual es la energía expresada en julios y en eV de los fotones de esta radiación?

$$E = hf = h \frac{c}{\lambda} = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{5890 \cdot 10^{-10} \text{ m}} = 3.37 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2.11 \text{ eV}$$

Efecto Fotoeléctrico

- El **efecto fotoeléctrico** consiste en la emisión de electrones por un metal o fibra de carbono cuando se hace incidir sobre él una radiación electromagnética (luz visible o ultravioleta, en general).

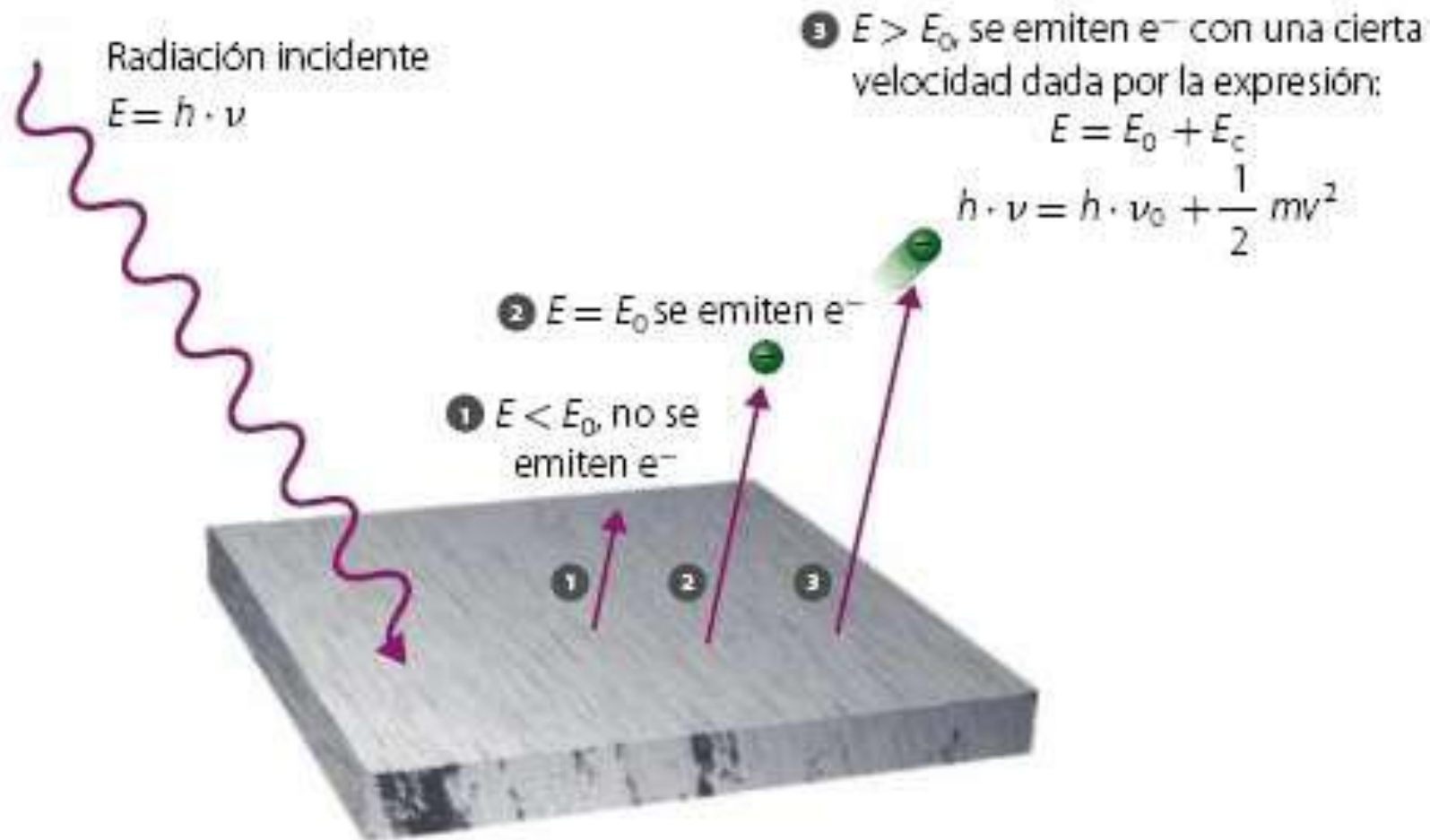


Premio Nobel de Física 1921

- En 1905, Albert Einstein (1879-1955) usó la teoría cuántica de Planck para explicar el efecto fotoeléctrico

Efecto Fotoeléctrico

- Cuando un fotón choca con el metal, el fotón podría transferir su energía a un electrón del metal. Se requiere cierta cantidad de energía para que el electrón venza las fuerzas de atracción que lo mantienen dentro del metal.



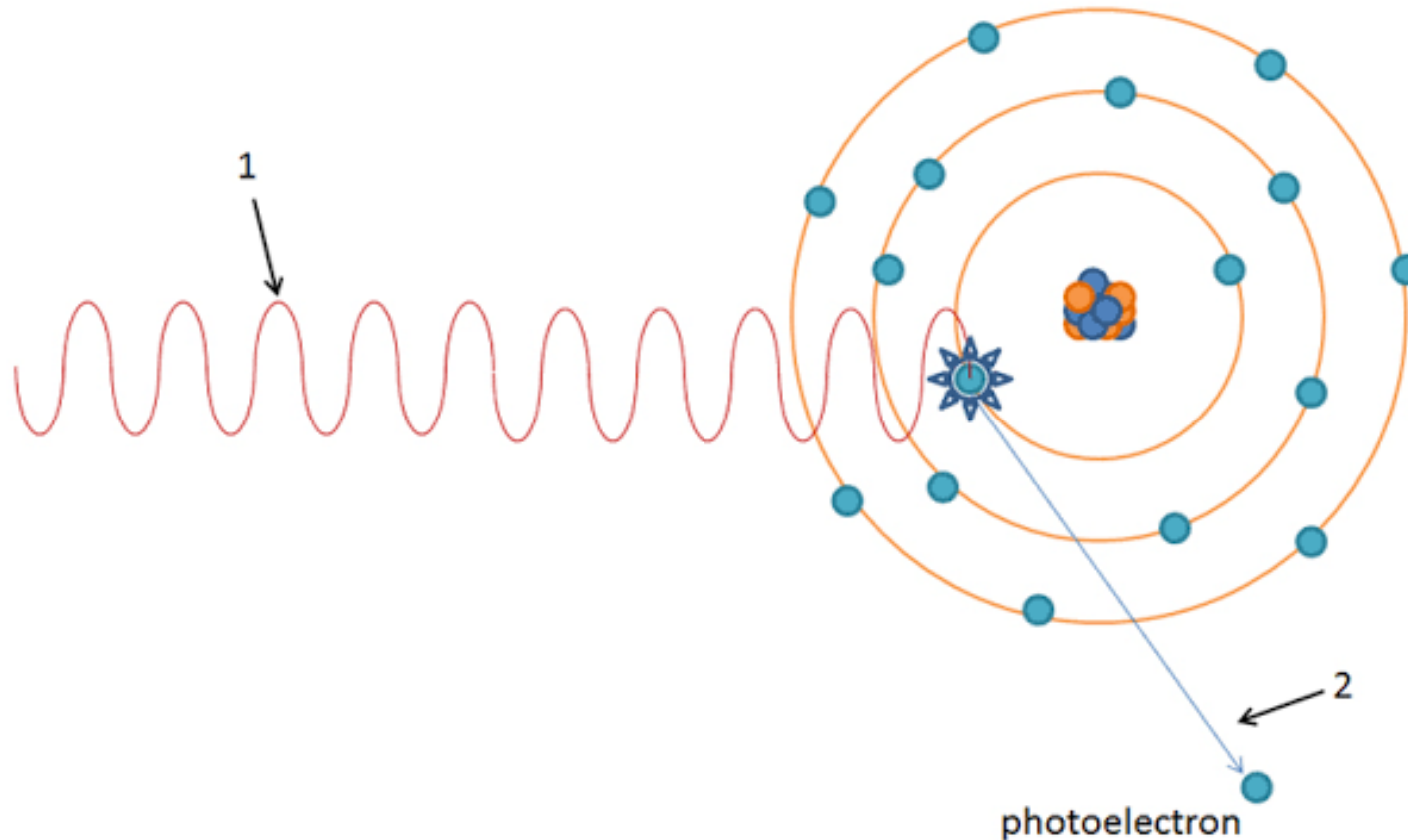
$$E = E_0 + E_c$$

$$hf = hf_0 + E_c$$

$$h \frac{c}{\lambda} = h \frac{c}{\lambda_0} + E_c$$

Efecto fotoeléctrico

- Cuando una radiación luminosa incide sobre la superficie de un metal, los átomos de éste absorben la energía de los fotones.
- Si esta energía es suficiente para vencer la atracción electrostática que liga los electrones al metal, se producirá el efecto fotoeléctrico; de lo contrario, no se produce la emisión.



Efecto Fotoeléctrico

- Para explicar el efecto fotoeléctrico, Einstein supuso que la energía radiante que incidía sobre la superficie metálica es una corriente de diminutos paquetes de energía. Cada paquete de energía, llamada **fotón**, se comporta como una pequeñísima partícula.
- Extendiendo la teoría cuántica de Planck, Einstein dedujo que cada fotón debía tener una energía proporcional a la frecuencia de la luz. Así, la energía radiante misma está cuantizada.

$$E = \text{energía de un fotón} = hf = h \frac{c}{\lambda}$$

$$h = 6.62 \cdot 10^{-34} J \cdot s$$

Efecto Fotoeléctrico

$$E(\text{fotón incidente}) < E(\text{umbral})$$

Si los fotones de la radiación tienen menos energía que este umbral energético, el electrón no podrá escapar de la superficie metálica, aunque el haz de luz sea intenso.

$$E(\text{fotón incidente}) > E(\text{umbral})$$

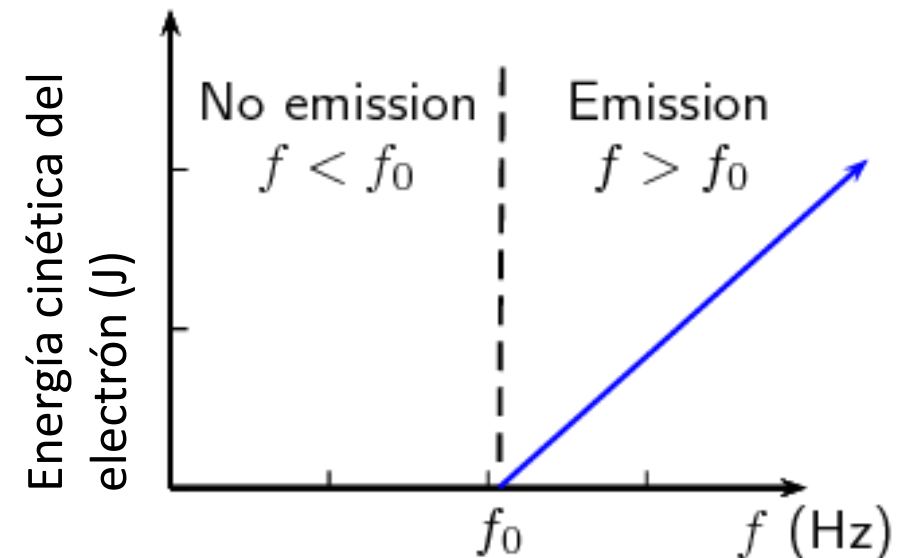
Si los fotones tienen más que la energía mínima necesaria para liberar electrones, el exceso aparece como energía cinética de los electrones emitidos.

$$E = E_0 + E_C$$

E = energía del fotón incidente

E_0 = energía umbral

E_C = energía cinética del electrón



Efecto fotoeléctrico

- Como los átomos de los metales son diferentes, también lo es la energía necesaria para que se emitan los electrones.
- Para cada metal existirá un valor mínimo de energía que debe tener el fotón incidente para que se produzca la emisión de un electrón. Ese valor mínimo de energía se le conoce como **trabajo de extracción del metal o energía umbral o función de trabajo**.

$$E = W_0 + E_c$$

La energía umbral es igual al trabajo de extracción del metal, W_0 .

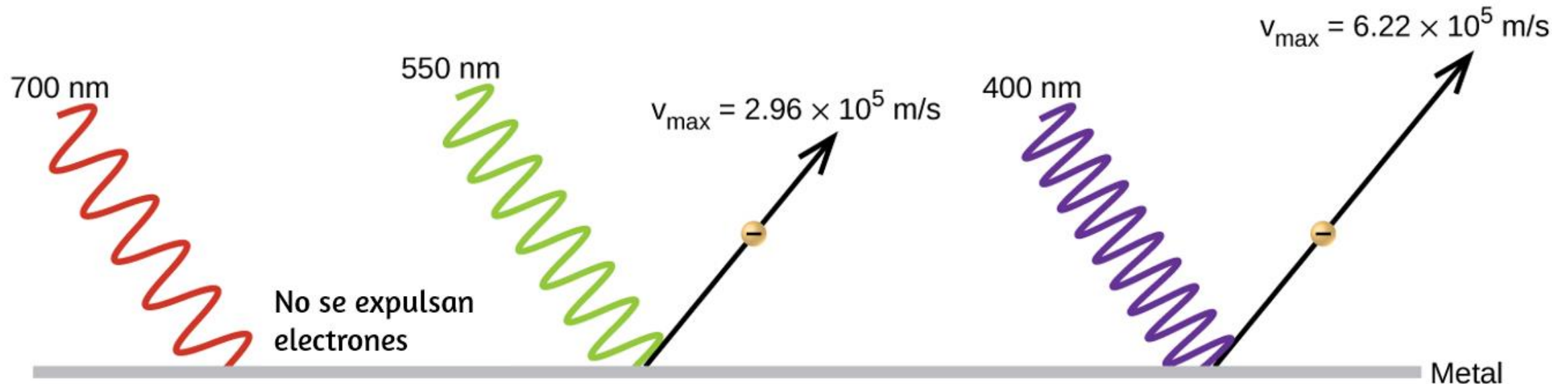
Efecto Fotoeléctrico

$$E = E_0 + E_C$$

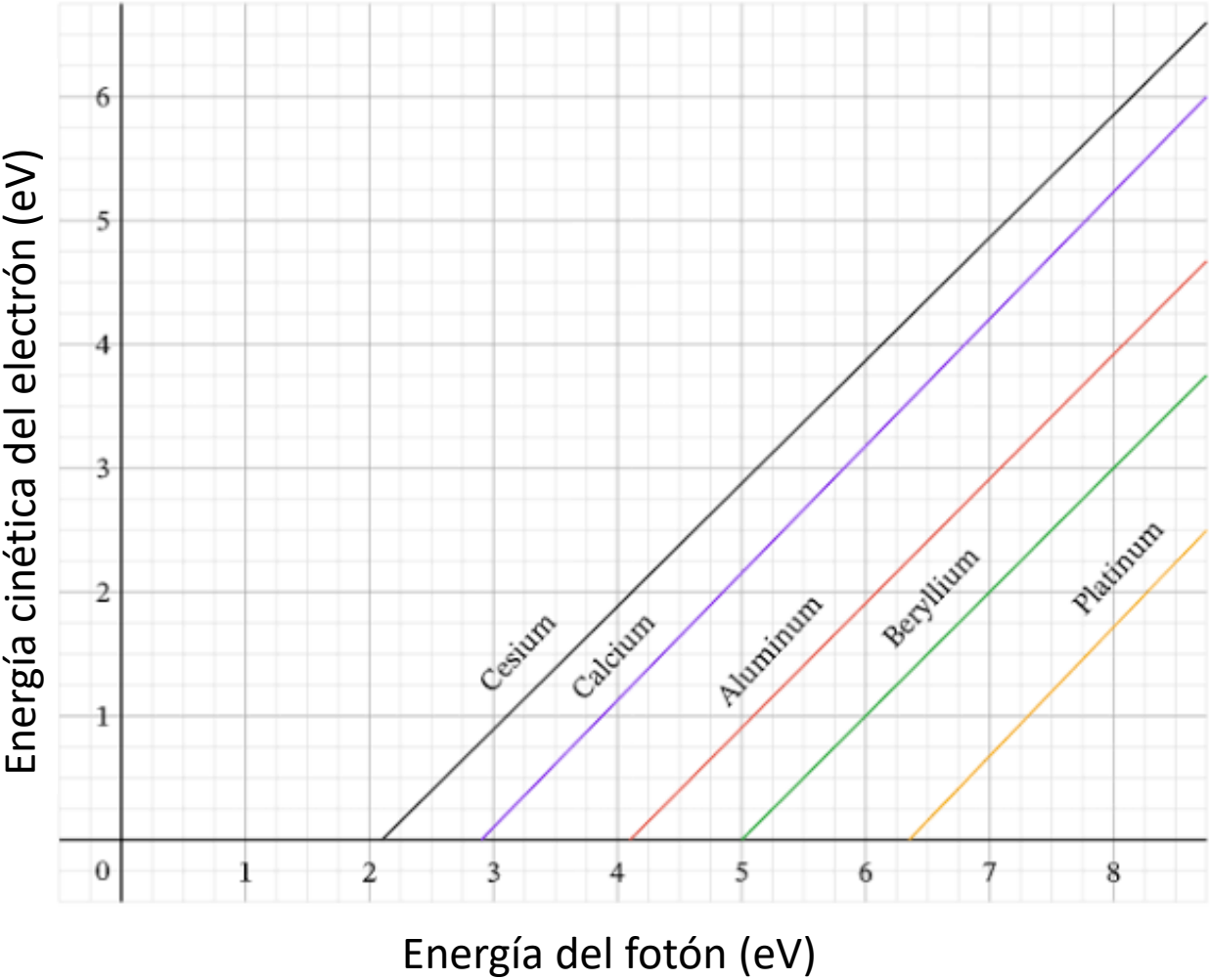
E = energía del fotón incidente

E_0 = energía umbral

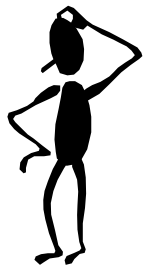
E_C = energía cinética del electrón



$E = \text{energía de un fotón} = hf = hf_0 + E_c$



Elemento	Función trabajo W_0		Longitud de onda umbral λ_0	Frecuencia umbral f_0
	eV	J	nm	Hz
Ag	4,73	$7,58 \cdot 10^{-19}$	262	$1,14 \cdot 10^{15}$
Al	4,08	$6,54 \cdot 10^{-19}$	304	$9,87 \cdot 10^{14}$
As	3,75	$6,01 \cdot 10^{-19}$	331	$9,07 \cdot 10^{14}$
Au	5,1	$8,2 \cdot 10^{-19}$	243	$1,2 \cdot 10^{15}$
Ba	2,7	$4,3 \cdot 10^{-19}$	459	$6,5 \cdot 10^{14}$
Be	4,98	$7,98 \cdot 10^{-19}$	249	$1,20 \cdot 10^{15}$
Bi	4,34	$6,95 \cdot 10^{-19}$	286	$1,05 \cdot 10^{15}$
C	5	$8 \cdot 10^{-19}$	248	$1,2 \cdot 10^{15}$
Ca	2,87	$4,60 \cdot 10^{-19}$	432	$6,94 \cdot 10^{14}$
Cd	4,08	$6,54 \cdot 10^{-19}$	304	$9,87 \cdot 10^{14}$
Ce	2,9	$4,7 \cdot 10^{-19}$	428	$7,0 \cdot 10^{14}$
Co	5	$8,0 \cdot 10^{-19}$	248	$1,2 \cdot 10^{15}$
Cr	4,5	$7,2 \cdot 10^{-19}$	276	$1,1 \cdot 10^{15}$
Cs	2,14	$3,43 \cdot 10^{-19}$	579	$5,17 \cdot 10^{14}$
Cu	4,7	$7,5 \cdot 10^{-19}$	264	$1,1 \cdot 10^{15}$
Fe	4,81	$7,71 \cdot 10^{-19}$	258	$1,16 \cdot 10^{15}$
Ga	4,32	$6,92 \cdot 10^{-19}$	287	$1,04 \cdot 10^{15}$
Hg	4,475	$7,170 \cdot 10^{-19}$	277,1	$1,082 \cdot 10^{15}$
K	2,29	$3,67 \cdot 10^{-19}$	541	$5,54 \cdot 10^{14}$
La	3,5	$5,6 \cdot 10^{-19}$	354	$8,5 \cdot 10^{14}$
Li	2,93	$4,69 \cdot 10^{-19}$	423	$7,08 \cdot 10^{14}$
Mg	3,66	$5,86 \cdot 10^{-19}$	339	$8,85 \cdot 10^{14}$
Mn	4,1	$6,6 \cdot 10^{-19}$	302	$9,9 \cdot 10^{14}$
Mo	4,95	$7,93 \cdot 10^{-19}$	250	$1,20 \cdot 10^{15}$
Na	2,36	$3,78 \cdot 10^{-19}$	525	$5,71 \cdot 10^{14}$
Nb	4,3	$6,9 \cdot 10^{-19}$	288	$1,0 \cdot 10^{15}$
Ni	5,35	$8,57 \cdot 10^{-19}$	232	$1,29 \cdot 10^{15}$
Os	5,93	$9,50 \cdot 10^{-19}$	209	$1,43 \cdot 10^{15}$
Pb	4,25	$6,81 \cdot 10^{-19}$	292	$1,03 \cdot 10^{15}$
Pd	5,6	$9,0 \cdot 10^{-19}$	221	$1,4 \cdot 10^{15}$
Pt	5,93	$9,50 \cdot 10^{-19}$	209	$1,43 \cdot 10^{15}$
Rb	2,261	$3,623 \cdot 10^{-19}$	548,4	$5,467 \cdot 10^{14}$
Re	4,72	$7,56 \cdot 10^{-19}$	263	$1,14 \cdot 10^{15}$
Sb	4,7	$7,5 \cdot 10^{-19}$	263	$1,1 \cdot 10^{15}$
Sc	3,5	$5,6 \cdot 10^{-19}$	354	$8,5 \cdot 10^{14}$
Se	5,9	$9,5 \cdot 10^{-19}$	210	$1,4 \cdot 10^{15}$
Si	4,85	$7,77 \cdot 10^{-19}$	256	$1,17 \cdot 10^{15}$
Sn	4,42	$7,08 \cdot 10^{-19}$	281	$1,07 \cdot 10^{15}$
Sr	2,59	$4,15 \cdot 10^{-19}$	479	$6,26 \cdot 10^{14}$
Te	4,95	$7,93 \cdot 10^{-19}$	250	$1,20 \cdot 10^{15}$
Ti	4,33	$6,94 \cdot 10^{-19}$	286	$1,05 \cdot 10^{15}$
U	3,90	$6,25 \cdot 10^{-19}$	318	$9,43 \cdot 10^{14}$
V	4,3	$6,9 \cdot 10^{-19}$	288	$1,0 \cdot 10^{15}$
W	5,22	$8,36 \cdot 10^{-19}$	238	$1,26 \cdot 10^{15}$
Zn	4,3	$6,9 \cdot 10^{-19}$	288	$1,0 \cdot 10^{15}$
Zr	4,05	$6,49 \cdot 10^{-19}$	306	$9,79 \cdot 10^{14}$



Calcule la energía de un fotón de luz amarilla cuya longitud de onda es de 589 nm

$$E = hf = h \frac{c}{\lambda} = 6.62 \cdot 10^{-34} Js \cdot \frac{3 \cdot 10^8 m/s}{589 \cdot 10^{-9} m} = 3.37 \cdot 10^{-19} J$$

Un láser emite luz con una frecuencia de $4.69 \cdot 10^{14} s^{-1}$. a) Calcule la energía de un fotón de la radiación de este láser. b) El láser emite una ráfaga o pulsación de energía que contiene 5.0×10^{17} fotones de esta radiación. Calcule la energía total de esa pulsación. c) Si el láser emite $1.3 \times 10^{-2} J$ de energía durante una pulsación, ¿cuántos fotones emite durante esa pulsación? 4.2×10^{16} fotones

$$E = hf = 6.62 \cdot 10^{-34} Js \cdot 4.69 \cdot 10^{14} s^{-1} = 3.1 \cdot 10^{-19} J$$

$$E = 3.1 \cdot 10^{-19} J \cdot 5 \cdot 10^{17} \text{ fotones} = 0.155 J$$

La energía de un fotón es: $E = 3.1 \cdot 10^{-19} J$

La energía total emitida es: $E = 1.3 \cdot 10^{-2} J$

$$\text{Número de fotones} = \frac{1.3 \cdot 10^{-2} J}{3.1 \cdot 10^{-19} J} = 4.1 \cdot 10^{16} \text{ fotones}$$



Si la energía necesaria para extraer un electrón al sodio es de $3.7 \times 10^{-19} \text{ J}$, calcula la frecuencia mínima que debe tener un fotón para que produzca el efecto fotoeléctrico. Con que velocidad saldrá el electrón si el fotón posee una energía de $8.00 \times 10^{-19} \text{ J}$?

$$E_0 = 3.7 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$f_{\min} = \frac{E_0}{h} = \frac{3.7 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}} = 5.6 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$E = 8 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

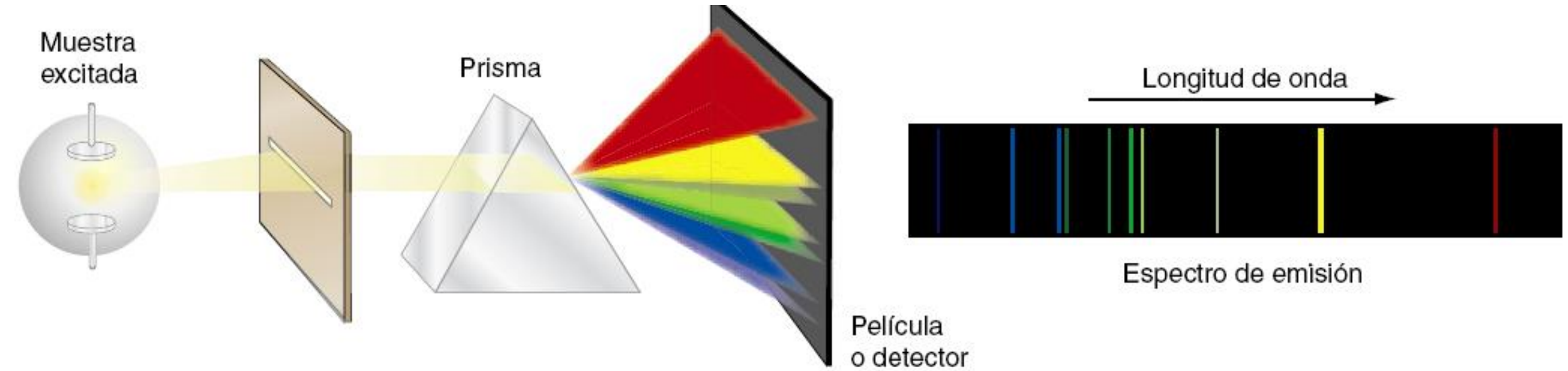
$$E_C = \frac{1}{2} m v^2 \quad \longrightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2E_C}{m}}$$

$$E = E_0 + E_C \quad \longrightarrow \quad E_C = E - E_0 = 8 \cdot 10^{-19} \text{ J} - 3.7 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 4.3 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$v = \sqrt{\frac{2E_C}{m}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 4.3 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}} = 0.972 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

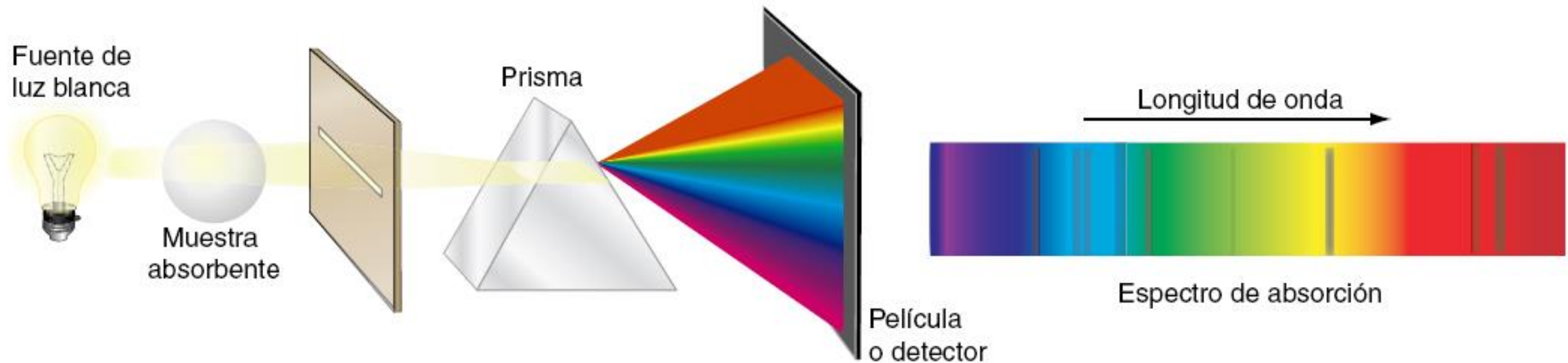
Espectros atómicos de absorción y emisión

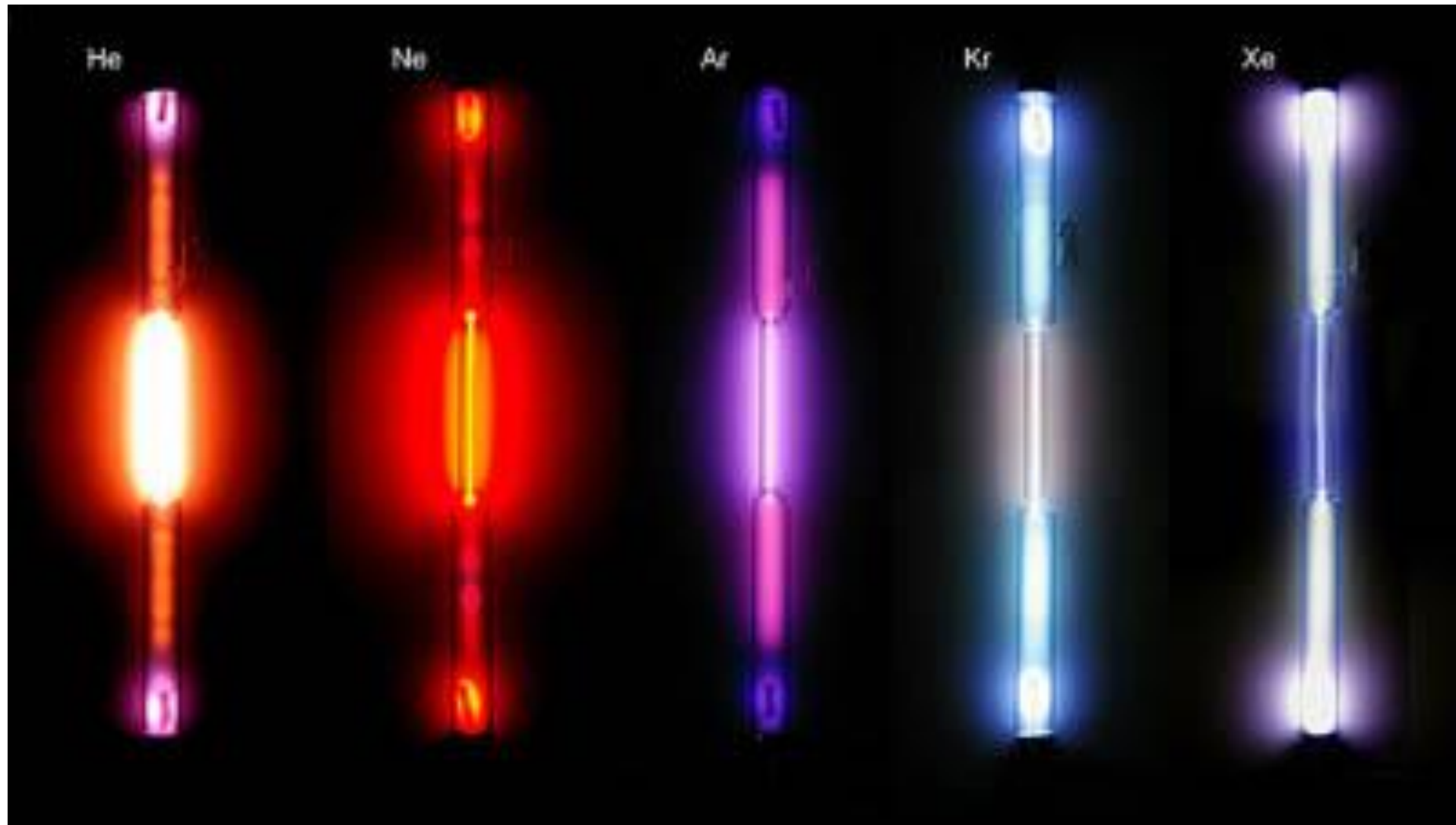
- La excitación de un gas le hace emitir radiación, pero solo emite en ciertas longitudes de onda.
- Es su **espectro de emisión**, característico de cada sustancia.



Espectros atómicos de absorción y emisión

- Cuando la radiación atraviesa un gas, este absorbe una parte del espectro.
- El resultado es su **espectro característico de absorción** donde faltan las bandas absorbidas, apareciendo en su lugar líneas negras.





Tubos de descarga conteniendo gases nobles, excitados eléctricamente, mostrando la luz emitida.

Espectros atómicos de absorción y emisión

- El espectro de absorción de un elemento es complementario al de emisión: cada elemento absorbe las mismas radiaciones que es capaz de emitir.
- La suma de los espectros de absorción y emisión de un elemento nos proporciona la luz blanca.



Espectro continuo de la luz blanca



Espectro de emisión del H

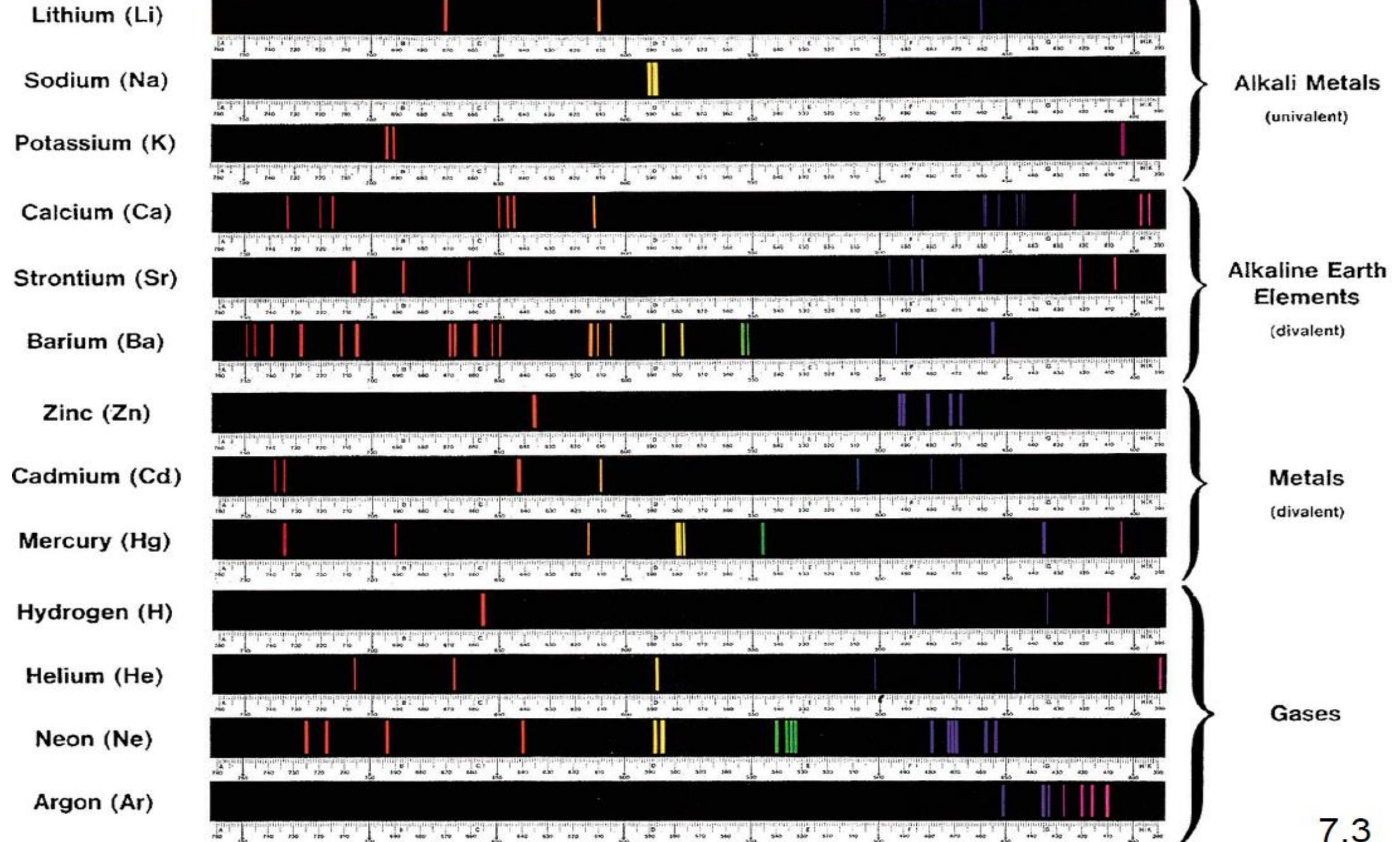


Espectro de absorción del H

Espectros atómicos de absorción y emisión

- El estudio de los espectros constituyó un nuevo método de análisis químico que permitió el descubrimiento de nuevos elementos.
- Los **espectros de emisión** tienen como característica fundamental que cada elemento químico presenta un espectro característico propio, específico y diferente de los del resto de elementos, que sirve como "**huella digital**" permitiendo identificarlo fácilmente.
- De esa forma se descubrió el helio, identificando un elemento desconocido al realizar el análisis espectral de la radiación solar durante un eclipse de sol en 1868.

Bright-line Spectra



Espectro de emisión del átomo de Hidrógeno

Primera aproximación para explicar el espectro de emisión del átomo de H

- 1885 Johann Jacob Balmer
- las cuatro líneas espectrales conocidas de la zona visible del espectro de emisión del hidrógeno, comúnmente conocidas como $H\alpha$ (roja), $H\beta$ (verde), $H\gamma$ (azul) y $H\delta$ (violeta).



$$\lambda = 3645,6 \frac{n^2}{n^2 - 4} \text{ (Å)}$$

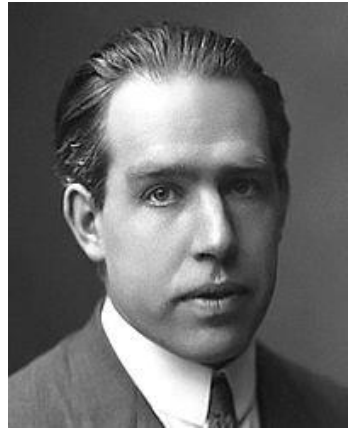
$n = 3$ para $H\alpha$

$n = 4$ para $H\beta$

$n = 5$ para $H\gamma$

$n = 6$ para $H\delta$

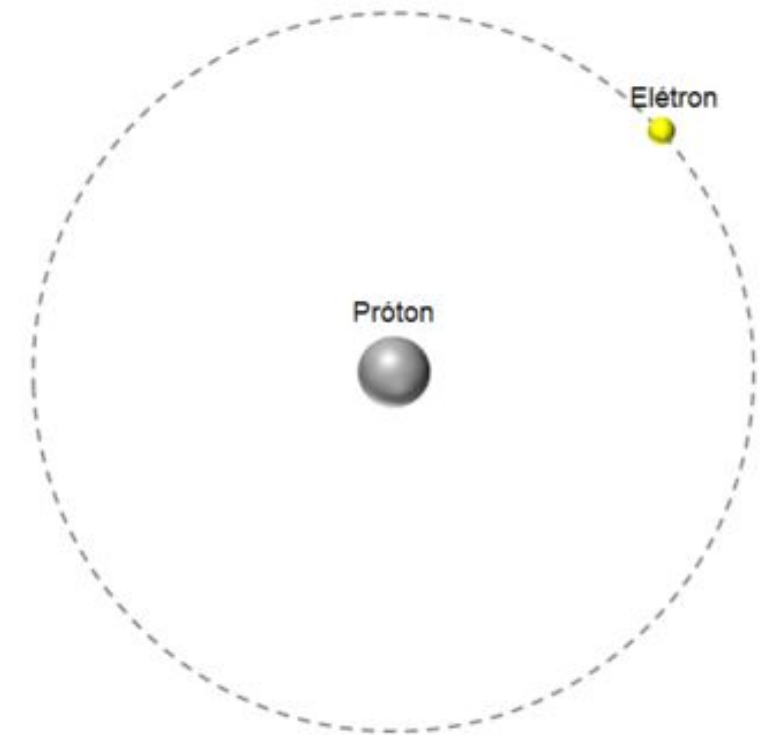
MODELO ATÓMICO DE BOHR (1913)



- Bohr introduce un modelo atómico con órbitas cuantificadas.
- Basó su modelo en el fenómeno de líneas espectrales (Los átomos no pueden emitir energía de manera continua, sino sólo en cantidades muy precisas)
- Es un modelo semi-cuántico

Modelo atómico de Bohr:

1. La energía de los electrones en los átomos está cuantizada.
2. Sólo están permitidas órbitas con ciertos radios, correspondientes a energías definidas.
3. Un e- en estas órbitas está en un estado de energía permitido y no irradia energía (no cae al núcleo)



MODELO ATÓMICO DE BOHR (1913)

- Las órbitas permitidas se denominan también **niveles de energía** y se representan por n .
- Bohr demostró que las energías de las órbitas permitidas en el átomo de H son:

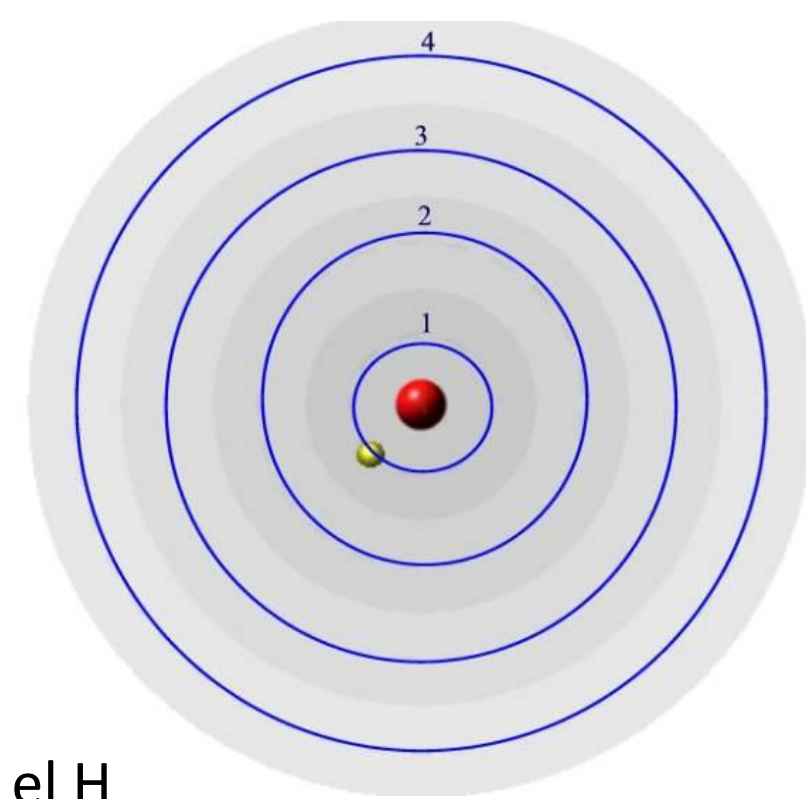
$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

R_H = constante de Rydberg para el H

$$R_H = 109677.6 \text{ cm}^{-1}$$

$$R_H = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$$

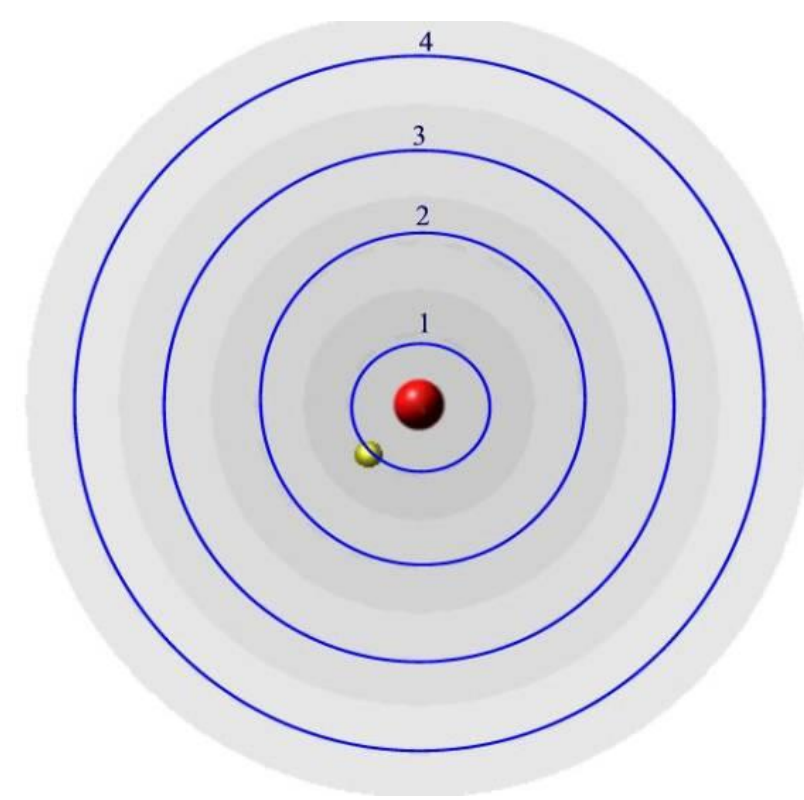
n = número cuántico principal = 1, 2, 3,...



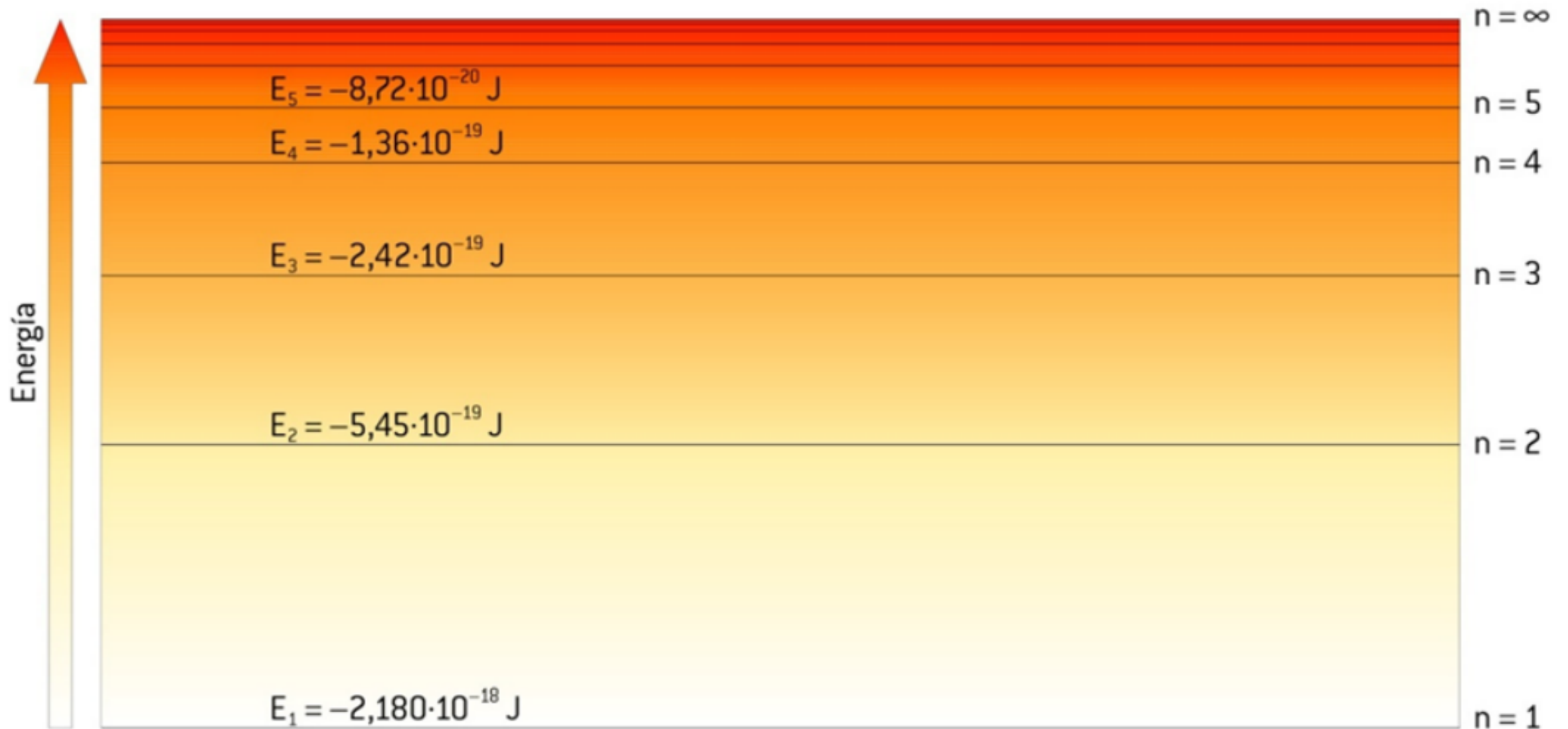
- El signo negativo es un convenio arbitrario que indica que la E del electrón en el átomo es menor que la del electrón libre (a una distancia infinita del núcleo).
- Para el electrón libre $n \rightarrow \infty$ y $E \rightarrow 0$.

MODELO ATÓMICO DE BOHR (1913)

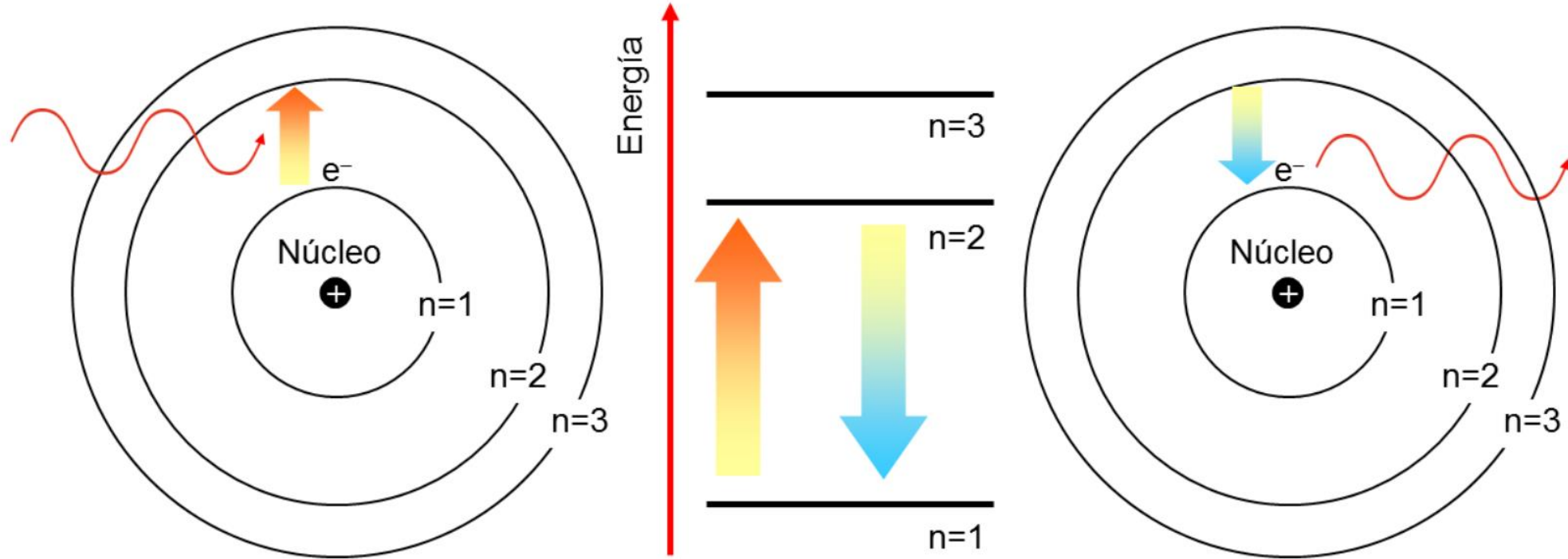
- La órbita o nivel de energía más baja corresponde a $n = 1$, y se le llama **nivel fundamental** (estado basal), y corresponde al estado electrónico más estable.
- A los estados electrónicos con $n > 1$ (2, 3, 4...) se les conoce como **estados excitados** y todos tienen una energía más alta que el estado basal.
- Cuanto mayor es n , mayor es la energía del nivel.
- El número n indica el orden de los niveles de energía, y recibe el nombre de **número cuántico principal**.



$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right) = -2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot \left(\frac{1}{n^2} \right)$$



Transiciones electrónicas



Absorción

Emisión

$$\Delta E = E_f - E_i$$

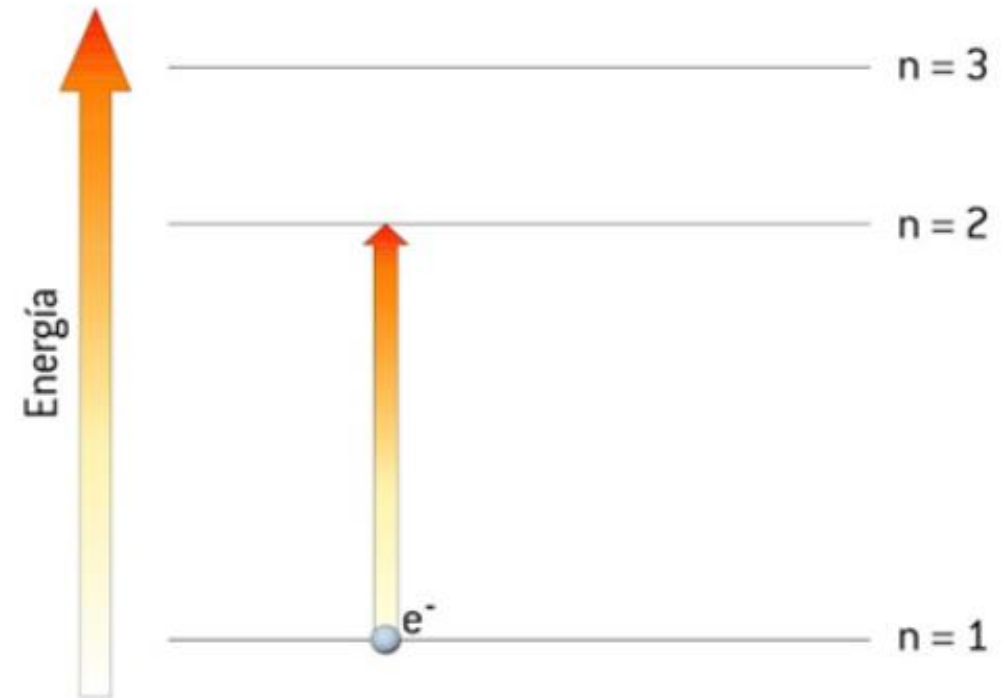
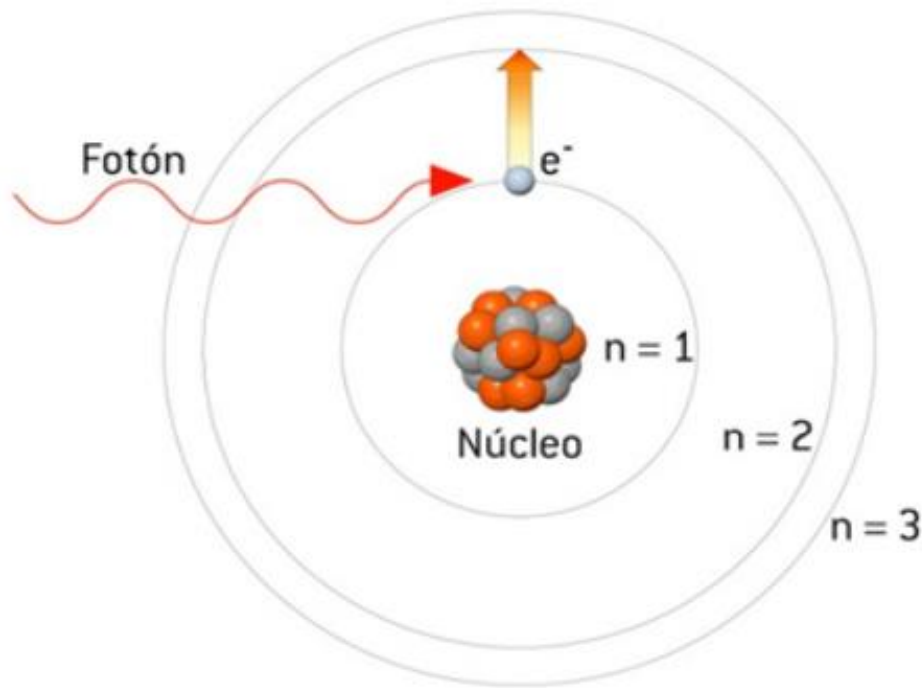
$$E = hf = h \frac{c}{\lambda}$$

Transiciones electrónicas



Espectro de absorción

- Los **espectros de absorción** se originan cuando los electrones de los fotones y ascienden desde un nivel n_i hasta otro nivel de absorben la energía mayor energía n_f .



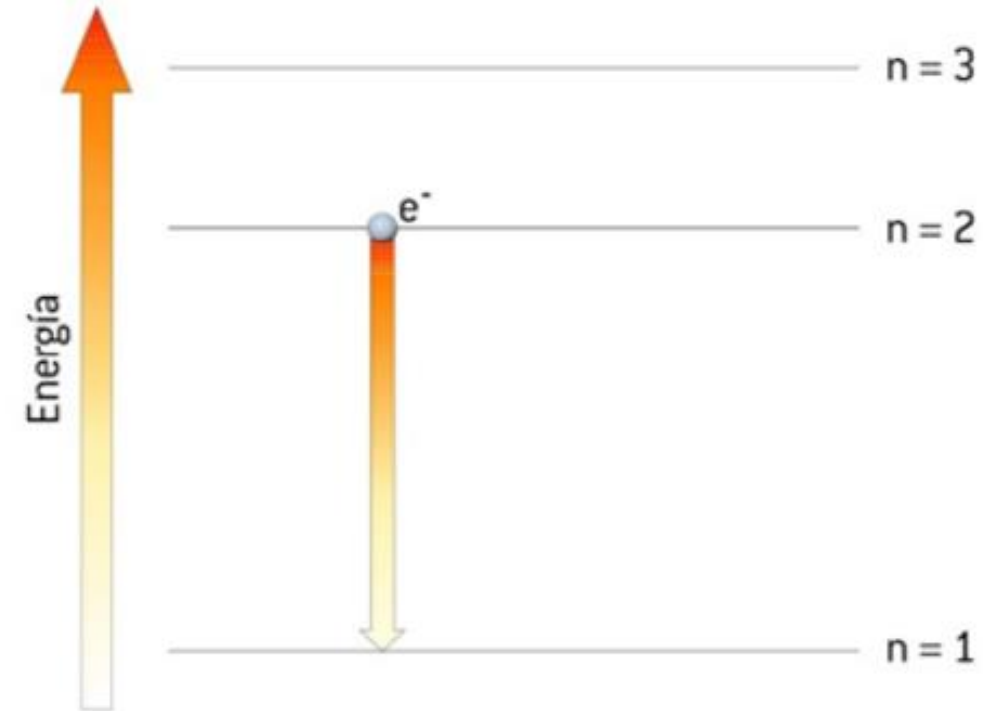
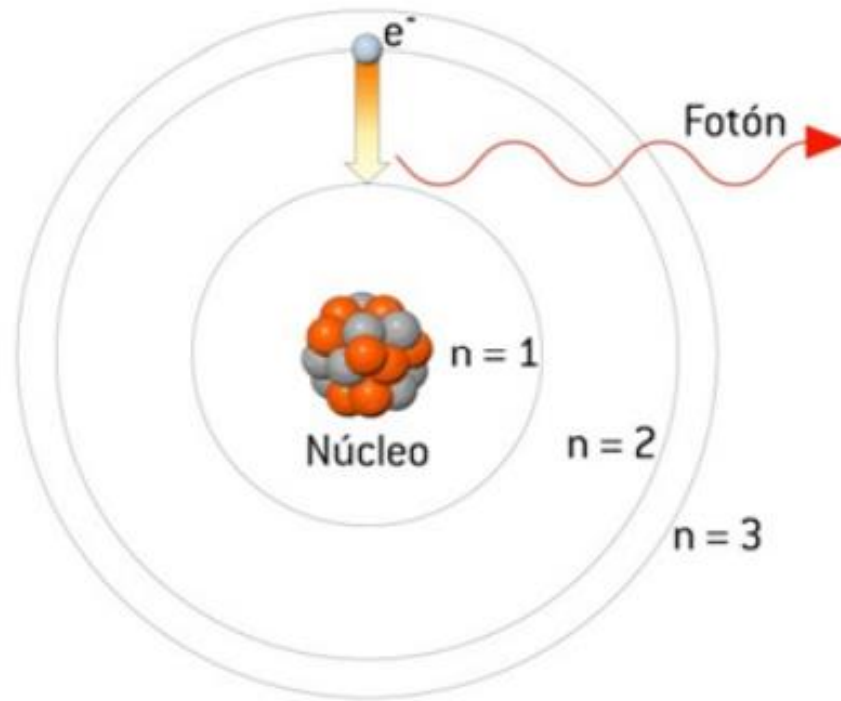
$$E = hf = h \frac{c}{\lambda}$$

Transiciones electrónicas



Espectro de emisión

- Los **espectros de emisión** se deben a las radiaciones emitidas cuando un electrón “excitado” en un nivel alto desciende a otro nivel de energía inferior.



$$E = hf = h \frac{c}{\lambda}$$

Transiciones electrónicas

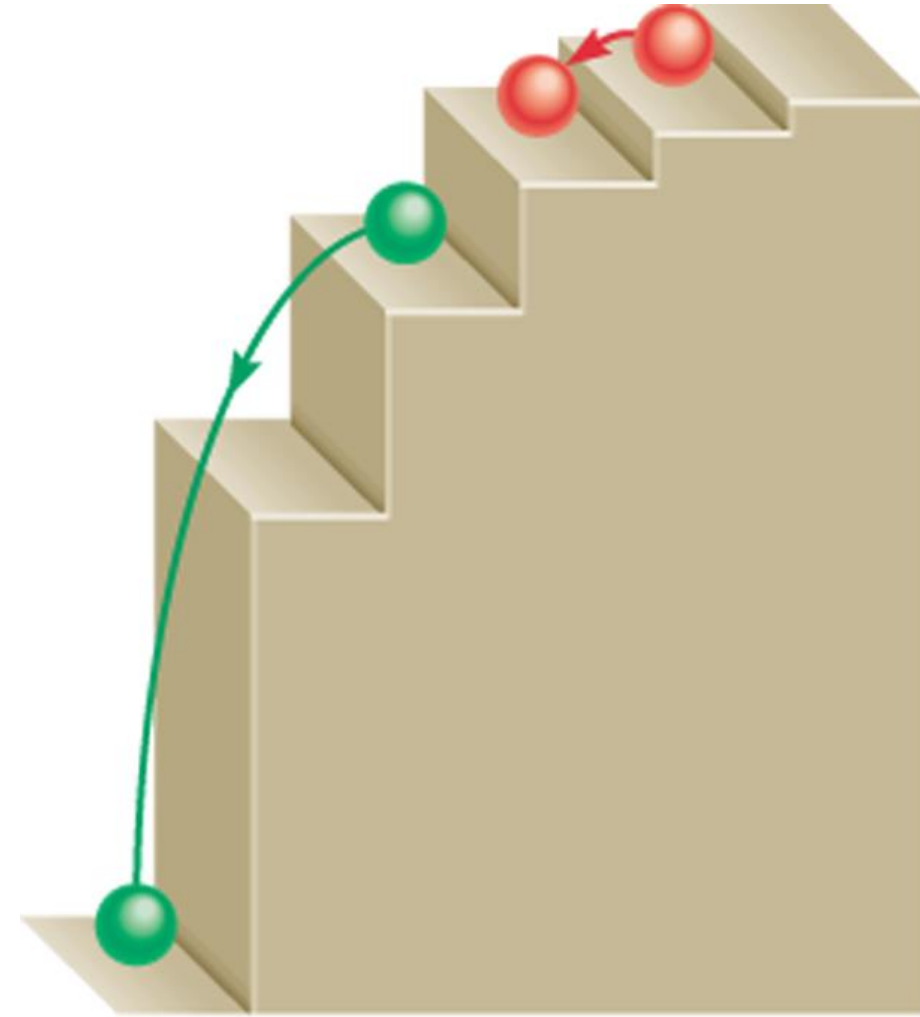
$$\Delta E = E_f - E_i$$

$$E_f = -R_H \left(\frac{1}{n_f^2} \right)$$

$$E_i = -R_H \left(\frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\Delta E = \left(\frac{-R_H}{n_f^2} \right) - \left(\frac{-R_H}{n_i^2} \right)$$

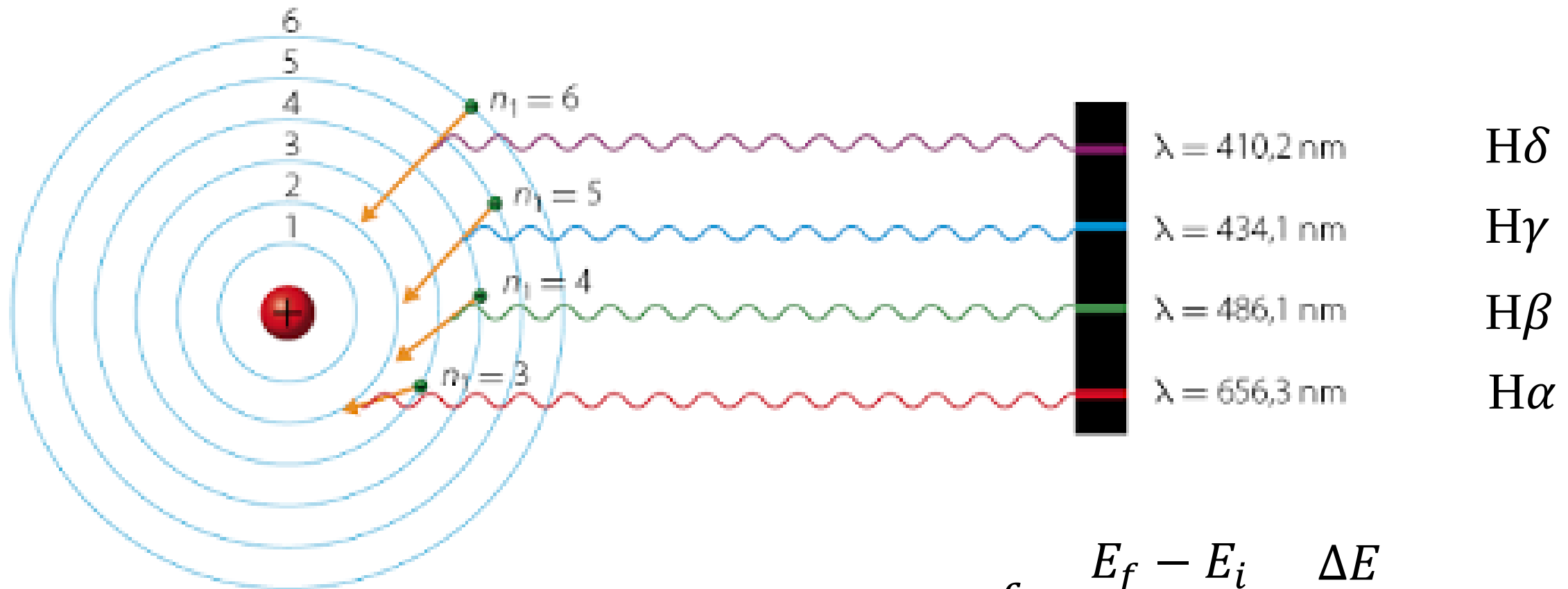
$$= R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$



Analogía mecánica de los procesos de emisión. La pelota puede descansar en cualquier peldaño pero no entre ellos.

Transiciones electrónicas

- Bohr explica las líneas que aparecen en el espectro de emisión del átomo de H
- estas líneas corresponden a las longitudes de onda (o frecuencias) de la energía emitida cuando un electrón excitado retorna al segundo nivel de energía desde otro nivel superior.



$$f = \frac{E_f - E_i}{h} = \frac{\Delta E}{h}$$

La teoría de Bohr explicaba el espectro de emisión del H pero no podía explicar los espectros de emisión de átomos con más de un electrón como por ej. He y Li.

Aunque sí la de sus iones He^+ y Li^{2+} . Estos, como el H, tienen un solo e^- . O sea la teoría de Bohr funciona para átomos parecidos al H o **átomos hidrogenoides**.

Átomos Hidrogenoides: H , He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} ,...

MECÁNICA CUÁNTICA

- La Mecánica Cuántica surge ante la imposibilidad de dar una explicación satisfactoria, con el modelo de Bohr, a los espectros de átomos con más de un electrón.
- Se fundamenta en dos hipótesis:

Dualidad onda-corpúsculo

De Broglie sugirió que un electrón puede mostrar propiedades de onda. La longitud de onda asociada a una partícula de masa m y velocidad v , viene dada por

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

donde h es la constante de Planck

Principio de incertidumbre de Heisenberg

Heisenberg propuso la imposibilidad de conocer con precisión, y a la vez, la posición y la velocidad de una partícula. Se trata al electrón como una onda y se intenta determinar la probabilidad de encontrarlo en un punto determinado del espacio

DUALIDAD ONDA-PARTÍCULA

Los físicos quedaron fascinados con la teoría de Bohr. Pero...

¿Por qué el electrón del átomo de Bohr está forzado a girar en órbitas fijas alrededor del núcleo?

- En 1924, de Broglie resolvió el enigma.
- Razonó que si las ondas luminosas se comportan como una corriente de partículas (fotones), tal vez las partículas también tengan propiedades ondulatorias.

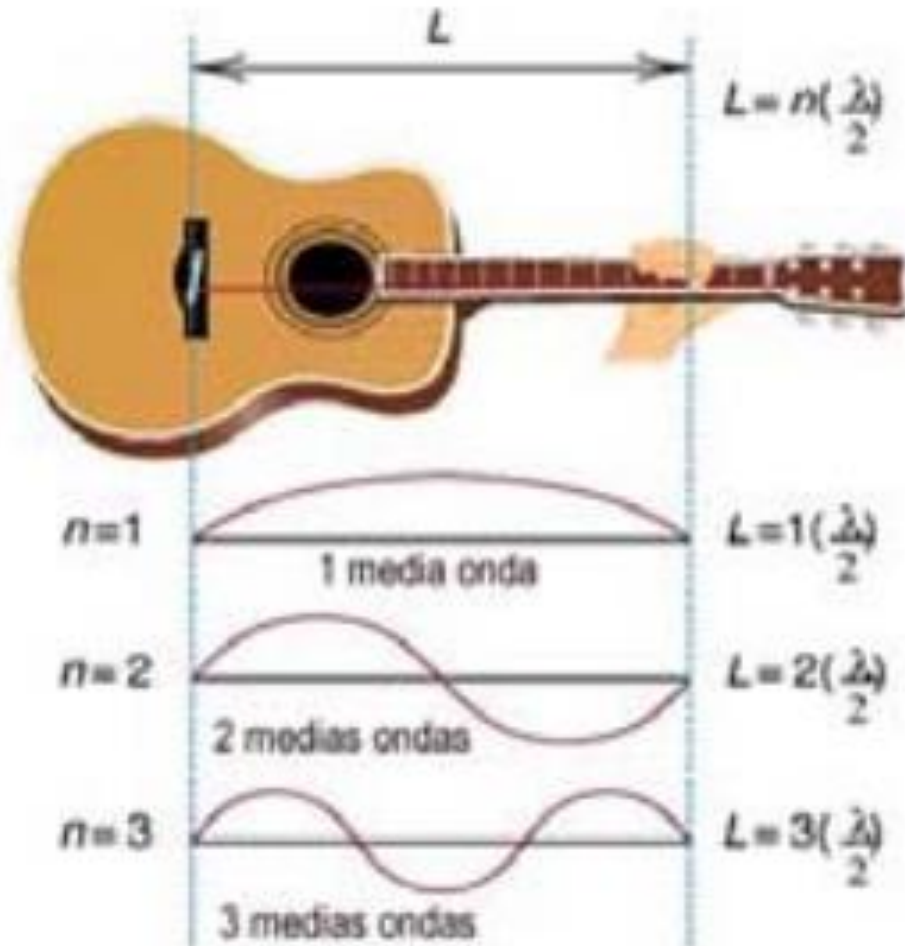
La dualidad onda-partícula de la luz no es exclusiva de esta, se manifiesta también en los electrones, protones y neutrones.



Louis Victor de Broglie
(1892-1987)
Premio Nobel
de Física 1929

DUALIDAD ONDA-PARTÍCULA

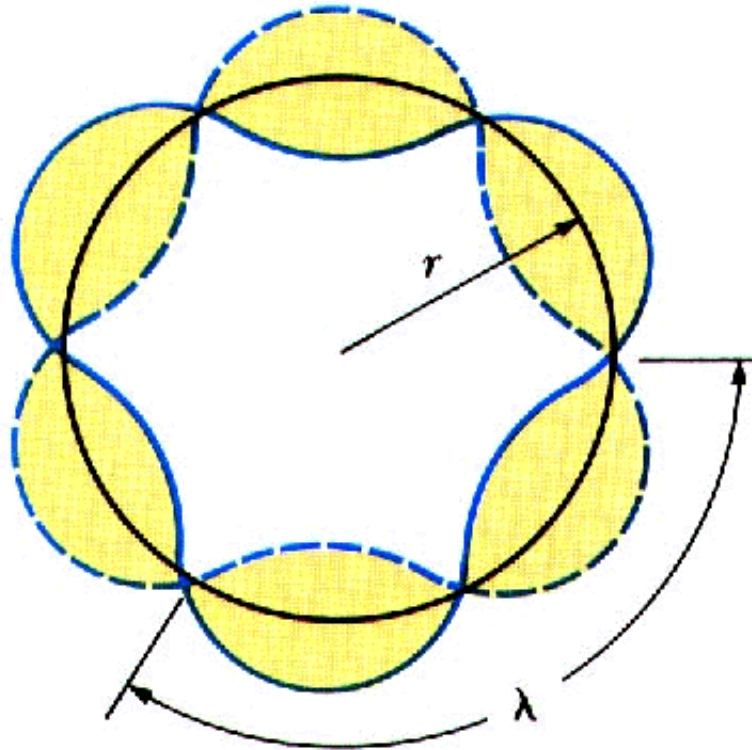
- Según de Broglie, un e- en un átomo (enlazado al núcleo) se comporta como una **onda estacionaria**, del mismo modo que pasa con las cuerdas de una guitarra.



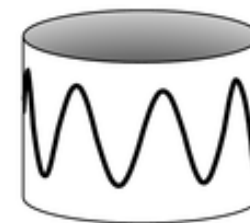
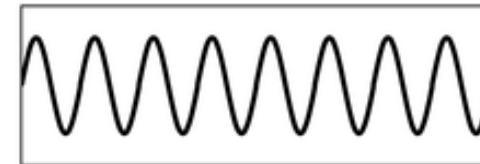
- La onda no se puede desplazar libremente, está confinada a la longitud de cuerda (fija, condiciones de contorno)
- NODOS** - puntos de la cuerda que no se mueven, tienen amplitud cero.
- Mientras menor es la longitud de onda, mayor es la frecuencia y el número de nodos.

Hipótesis de De Broglie

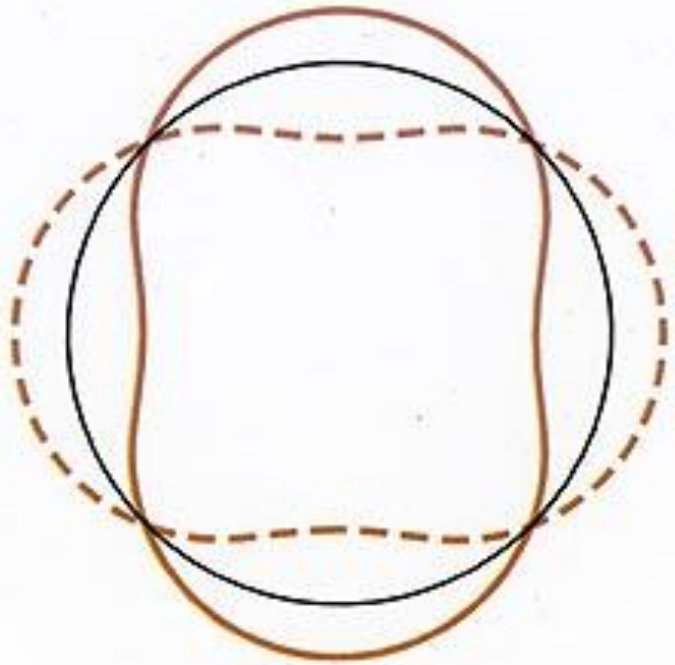
- Las trayectorias de los electrones alrededor del núcleo se corresponden a las de ondas estacionarias.
- El perímetro de las orbitas tiene que ser múltiplo de la λ asociada al movimiento del electrón.



$$2\pi r = n\lambda \quad n = 1, 2, \dots$$



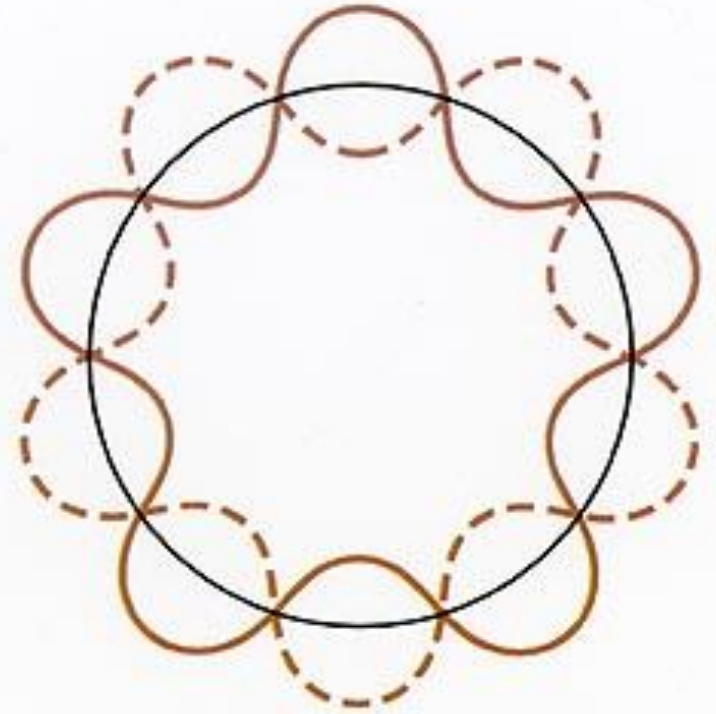
Hipótesis de De Broglie



$n = 2$



$n = 3$



$n = 5$

$$2\pi r = n\lambda \quad n = 1, 2, \dots$$

Hipótesis de De Broglie

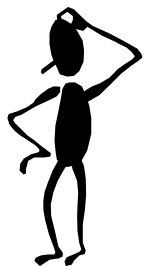
Toda partícula en movimiento lleva una onda asociada.

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} \quad \text{o} \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

$$Ec = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mEc} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mEc}}$$

*La longitud de onda será
inversamente proporsional a la
masa de la partícula*

$$\lambda = \frac{h}{m v} \longrightarrow \text{velocidad}$$



Calcular la longitud de onda de De Broglie (en nanómetros) asociada a una pelota de ping-pong de 2.5 gramos que viaja a una velocidad de 15.6 m/s.

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

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{(2.5 \times 10^{-3} \text{ kg}) \left(15.6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \right)} = 1.7 \times 10^{-32} \text{ m}$$

$$\lambda = 1.7 \times 10^{-32} \text{ m} = 1.7 \times 10^{-23} \text{ nm}$$

Recordando
1 átomo de carbono ~0.34 nm

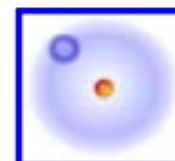
~10²² veces
más pequeña

Imposible medir λ

En el mundo macroscópico el comportamiento ondulatorio de la materia no es observable

$\lambda \ll$ dimensiones
de interés

Mecánica Clásica



$\lambda \cong$ dimensiones
de interés

~~Mecánica Clásica~~

Mecánica Cuántica

Con el descubrimiento del comportamiento ondulatorio de los electrones surgió otro problema: ¿cómo precisar la posición de una onda?

Para objetos macroscópico esto no es un problema, por ejemplo para una pelota que se mueve siempre podemos calcular exactamente su posición, velocidad y dirección de movimiento. Pero...

¿Para un electrón, que tiene propiedades ondulatorias, podremos hacer lo mismo?

Una onda se extiende en el espacio, por lo tanto su posición no está definida con precisión, entonces querrá esto decir que es imposible conocer la posición de los electrones ???

PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

En 1927 Heisenberg concluyó que la doble naturaleza de las partículas subatómicas (onda-partícula) impone una limitación a la precisión con la que podemos medir simultáneamente ciertos pares de variables, como la posición y el momento ($p=mv$).



Werner Karl Heisenberg
(1901-1976)
físico alemán

Premio Nobel de Física (1932)

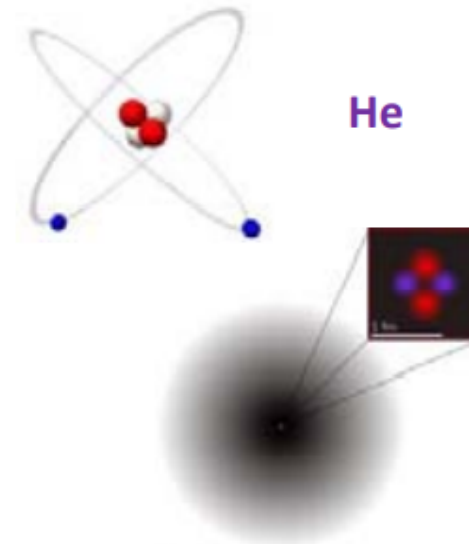
El producto de las incertidumbre asociada a dichas mediciones que tiene un valor mínimo:

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

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

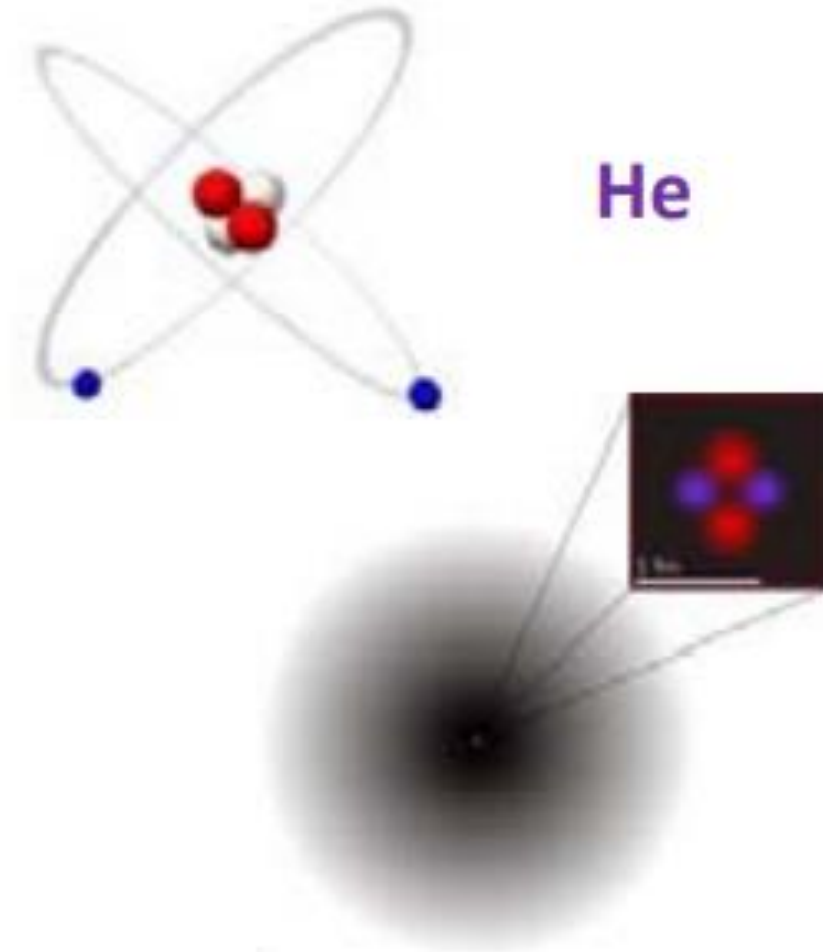
Una consecuencia directa de este principio es que no es adecuado imaginar a los electrones moviéndose en órbitas circulares bien definidas alrededor del núcleo como proponía Bohr.

Si determinamos la posición y el momento de una partícula cuántica (ej. e-), los resultados fluctúan en torno a valores medios y lo que cobra sentido es hablar de la probabilidad de encontrar al e- en una región del espacio, en lugar de hablar de su posición.



PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

- **Trayectorias y órbitas:** si no es posible seguir la trayectoria de un electrón, posición y velocidad en cada instante, porque lo prohíbe el principio de Heisenberg, nos vemos obligados a renunciar al concepto de trayectoria y de órbita de un electrón alrededor del núcleo atómico.
- **Funciones de onda y orbitales:** el concepto de órbita debe sustituirse por el de función de onda o función orbital (orbital atómico o molecular) que es la región del espacio alrededor del núcleo del átomo donde la probabilidad de hallar al electrón es más alta (se acostumbra a representar un 90 o un 95 % de probabilidad de presencia).



LA ECUACIÓN DE SCHRODINGER

- En 1926 Schrodinger, mediante un desarrollo matemático complejo, formuló una ecuación que describe el comportamiento y la energía de las partículas subatómicas (onda y partícula).
- Es el análogo en Mecánica Cuántica de las Leyes de Newton para la Mecánica Clásica (objetos macroscópicos)



*Erwin Rudolf
Josef Alexander
Schrödinger
(1887-1961)
físico austriaco*

Premio Nobel de
Física (1933)

Hamiltonian

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Wave function

Energy

Resolver esta ecuación implica realizar cálculos avanzados que no se estudian este curso. Lo que sí es importante saber es que esta ecuación incorpora tanto el comportamiento de partícula (en términos de la m) como el de onda (mediante la **función de onda** Ψ).

LA ECUACIÓN DE SCHRODINGER

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Diagram illustrating the components of the Schrödinger equation:

- Hamiltonian** (points to $\hat{H}$)
- Wave function** (points to Ψ)
- Energy** (points to E)

La función de onda no tiene significado físico directo, pero su cuadrado (Ψ^2) es proporcional a la **probabilidad** de encontrar al e- en cierta región del espacio (alrededor del núcleo).

A Ψ^2 también se le llama **densidad de probabilidad** o **distribución de densidad electrónica**.



Con la ecuación de Schrödinger nace una nueva era en la física y en la química, ya que dio origen a un nuevo campo: la **mecánica cuántica** o **mecánica ondulatoria**.

LA ECUACIÓN DE SCHRODINGER

Expresión general
simplificada $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$

Expresión independiente
del tiempo $\hat{H}\Psi = E\Psi$

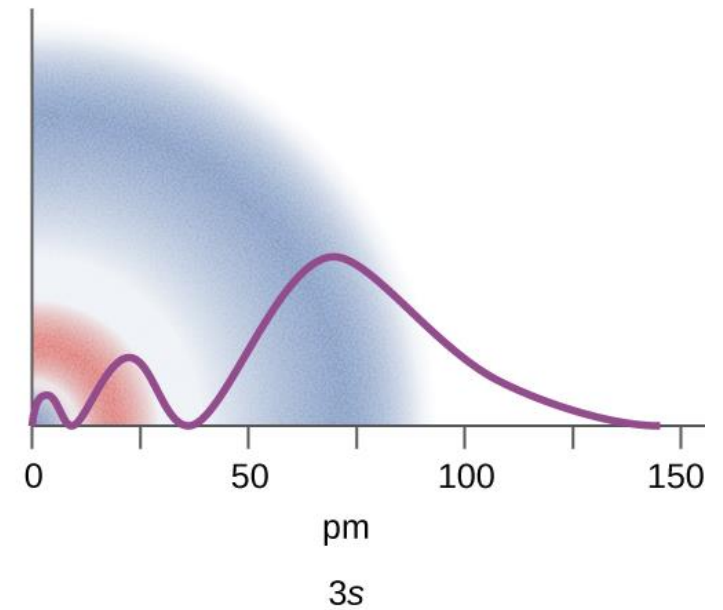
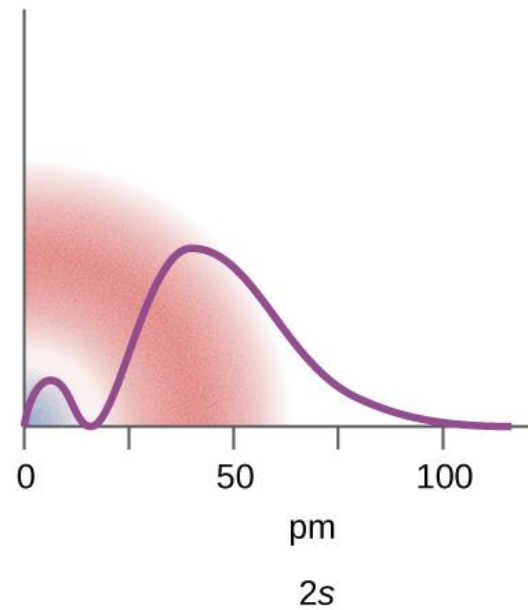
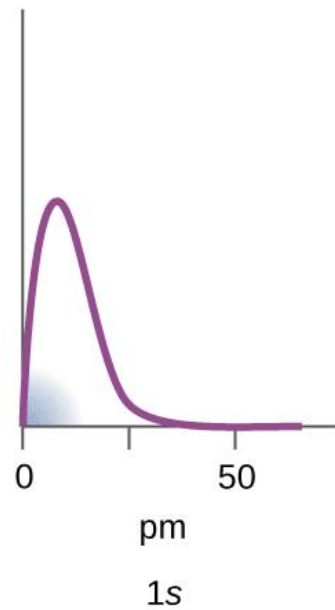
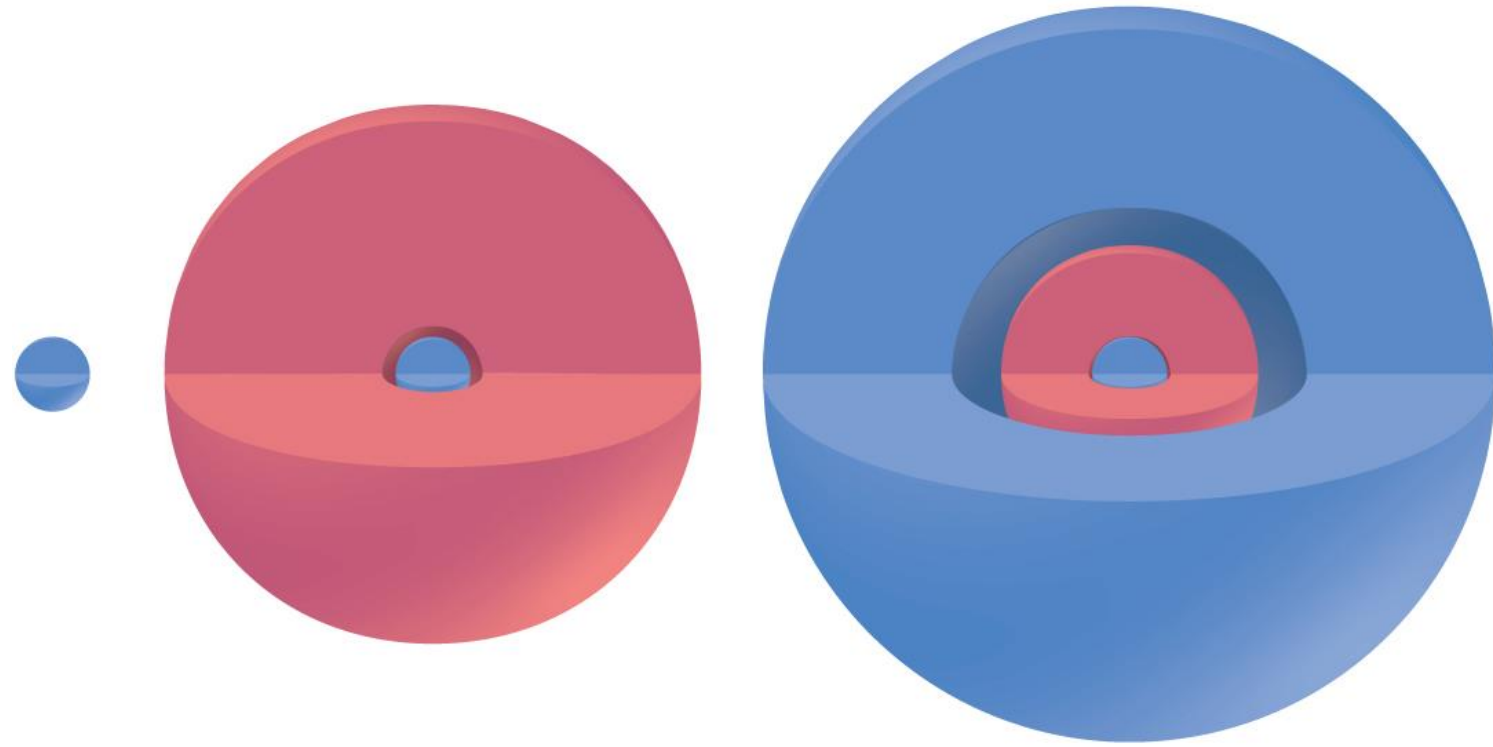
Reemplaza las trayectorias (enfoque clásico)
por funciones de onda (enfoque cuántico)

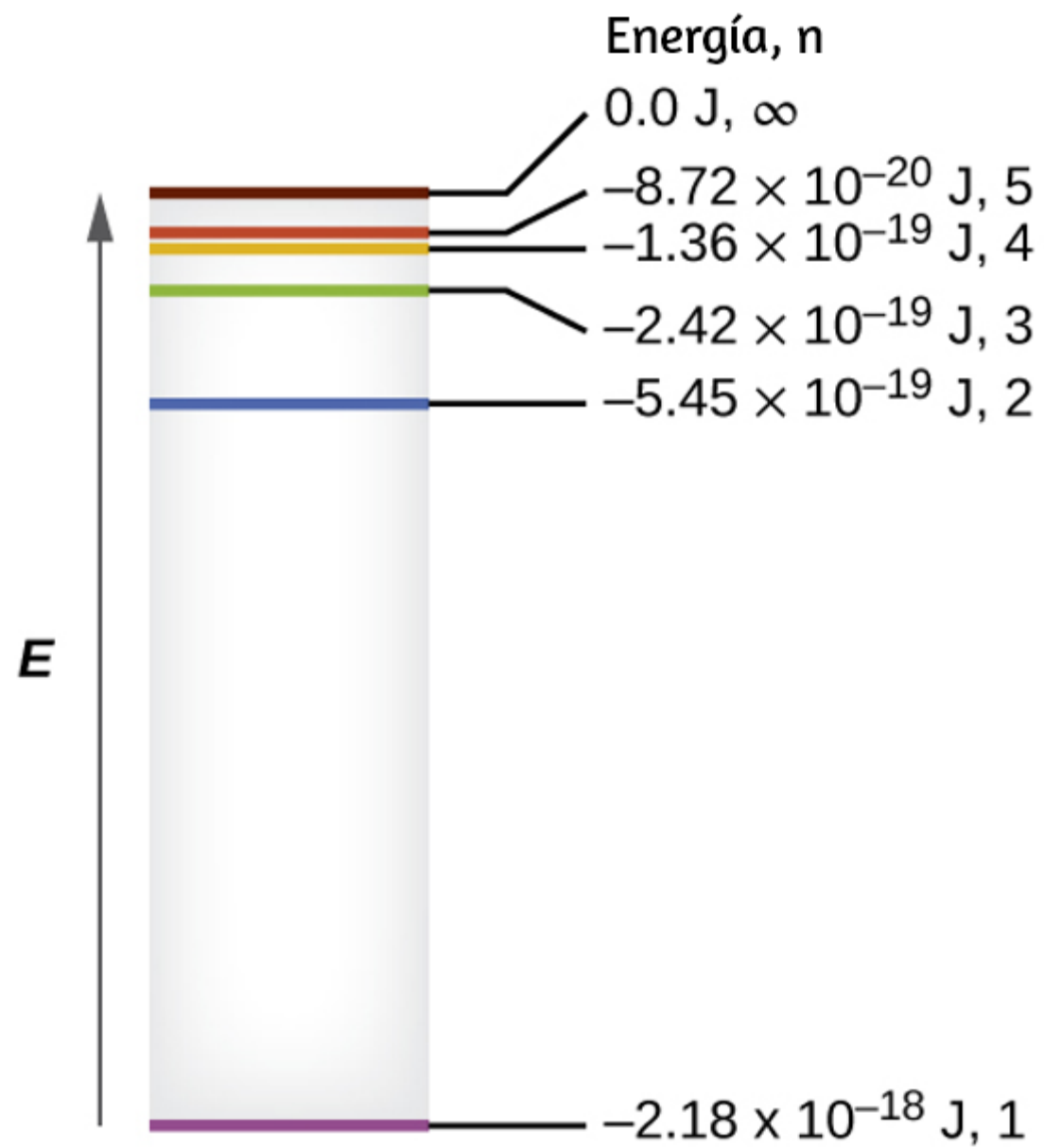
Las predicciones de la mecánica cuántica
tienen carácter probabilístico

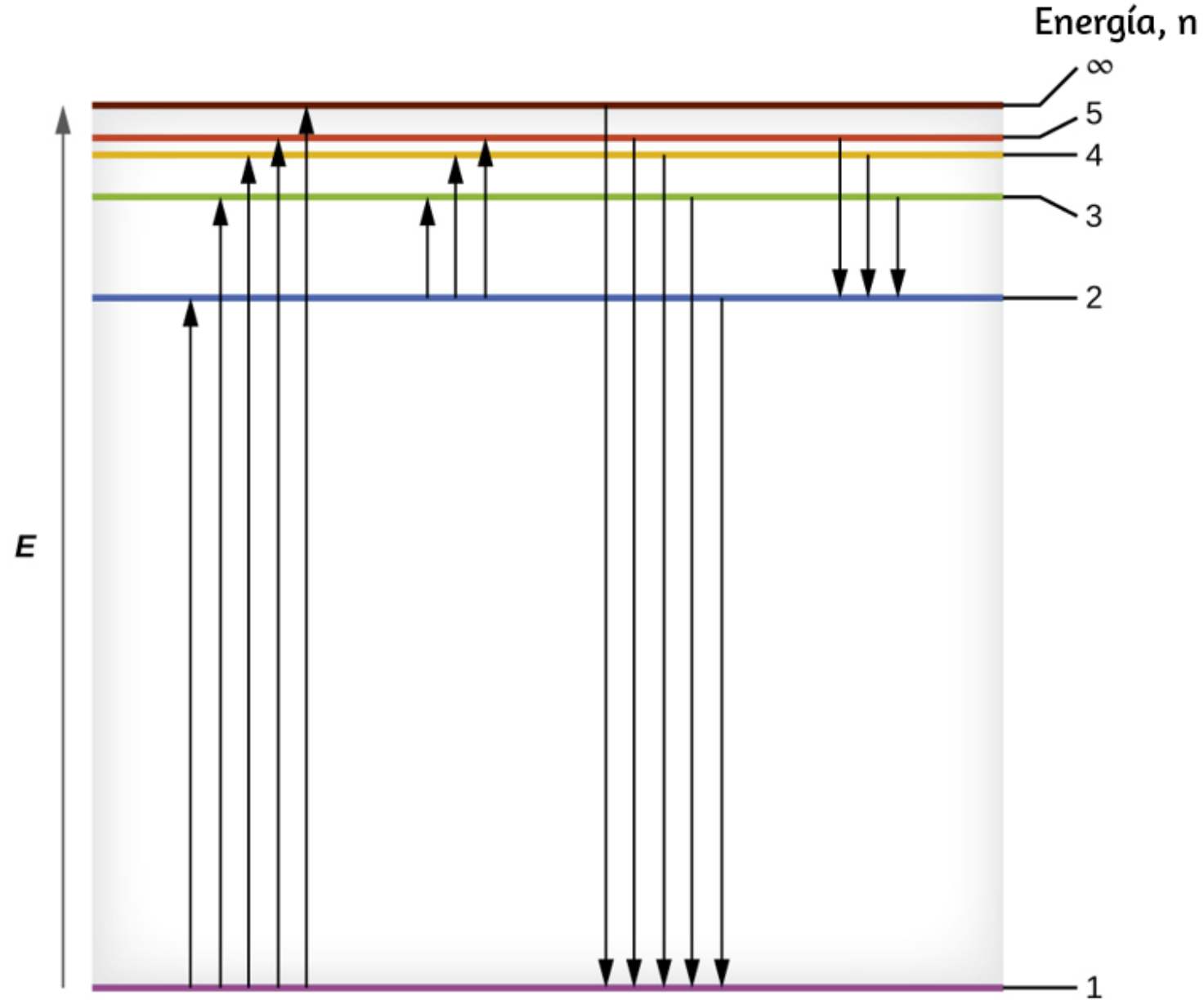
Paradoja:



Probabilidad (eje y) de encontrar un electrón para los orbitales 1s, 2s, 3s en función de la distancia desde el núcleo.







Los electrones se mueven hacia una energía más alta a medida que la luz es absorbida

Movimiento de electrones a menor energía a medida que se emite la luz