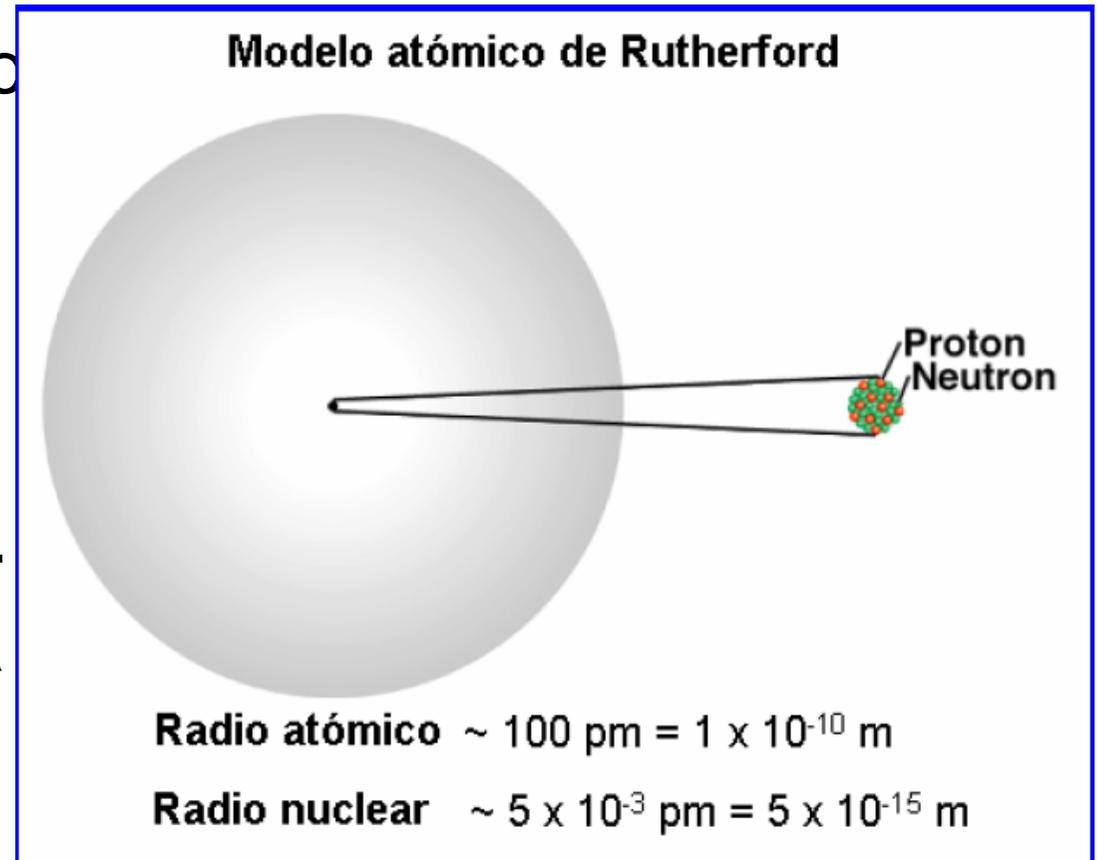
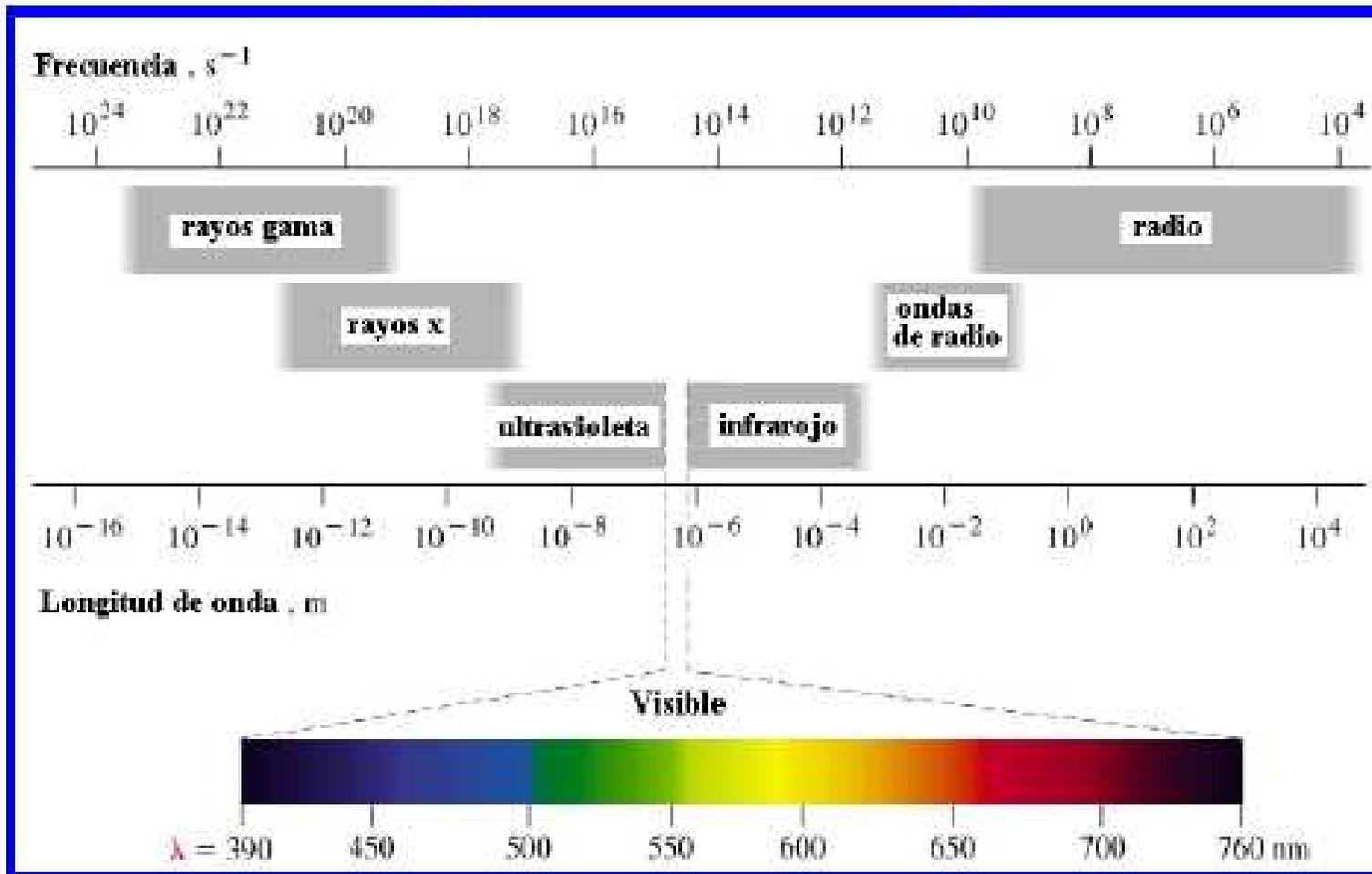


Modelo de Rutherford

- El núcleo ocupa un volumen muy pequeño comparado con el volumen ocupado por los electrones.
- El átomo es eléctricamente neutro.
- El núcleo concentra la carga positiva (protones)

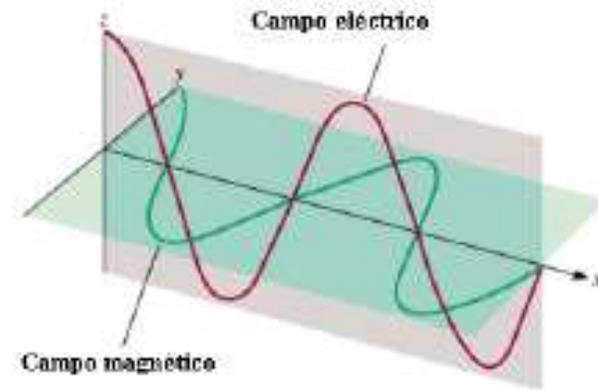


Radiación electromagnética



Teoría Clásica de la Luz

- La luz visible consiste en ondas electromagnéticas.
- Velocidad de la luz en el espacio = $3.00 \times 10^8 \text{ m/s}$
- Se cumple: $\lambda \cdot \nu = c$



La luz como un haz de partículas

En 1900, Max Planck estudió la radiación emitida por un "cuerpo negro" y observó que sólo podía explicar el comportamiento apartándose totalmente de la teoría clásica ondulatoria de la luz. Postuló que la luz es emitida en porciones discretas de energía que llamó cuantos y cuya energía es igual a:

$$E = h \nu$$

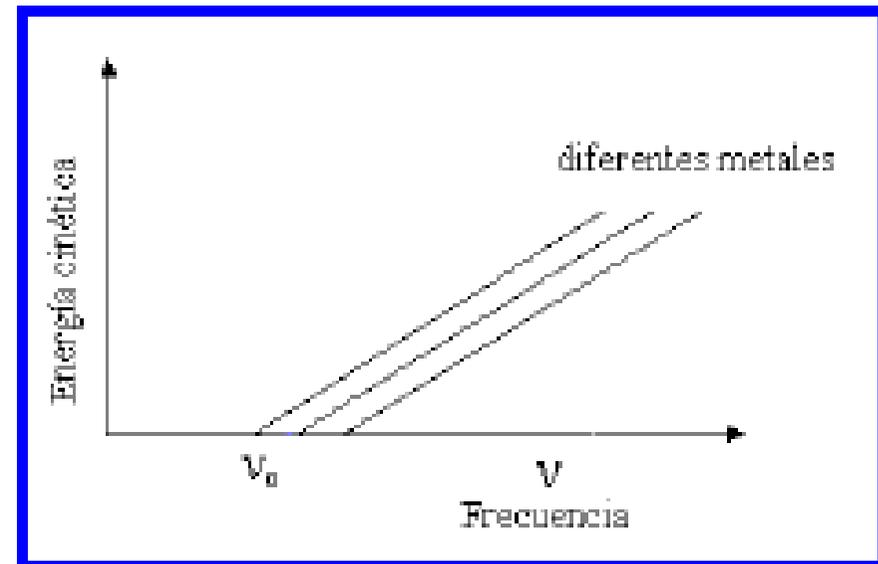
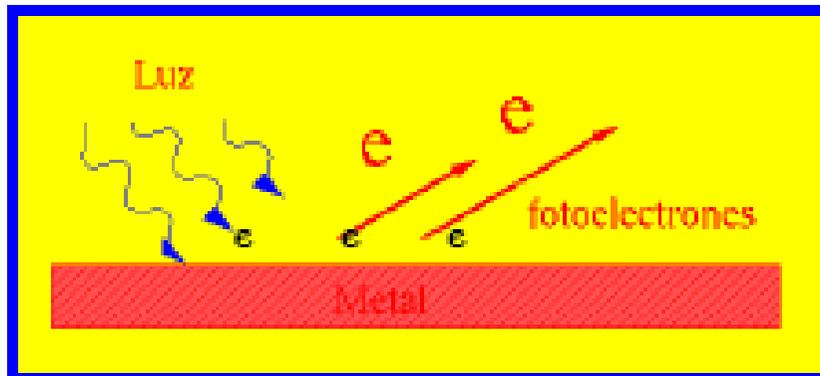
donde ν es la frecuencia de la luz emitida y $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}$, y se denomina constante de Planck

La luz presenta dualidad de comportamiento

ONDA - PARTICULA

El efecto fotoeléctrico

Heinrich Hertz (1888)



Albert Einstein 1905

$$\frac{1}{2} mv^2 = h\nu - h\nu_0$$

Diagrama que muestra la ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico. El término $\frac{1}{2} mv^2$ está etiquetado como "energía del electrón". El término $h\nu$ está etiquetado como "energía del fotón". El término $h\nu_0$ está etiquetado como "energía de ligazón del electrón".

El modelo atómico de Bohr.

En 1913 Niels Bohr utilizó la teoría cuántica de Planck-Einstein para proponer un modelo de átomo que explicaba las líneas que aparecen en el espectro de emisión del átomo de hidrógeno.

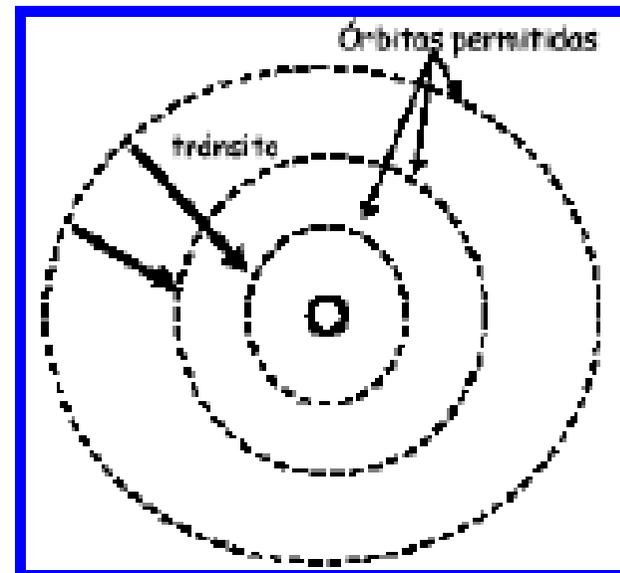
Postulados del Modelo de Bohr

1. El electrón se mueve en órbitas circulares alrededor del núcleo.
2. No todas las órbitas son permitidas. Sólo aquellas para las que el momento angular es un múltiplo entero de $h/2\pi$
3. El electrón solo absorbe o emite energía cuando pasa de una órbita permitida a otra. En una órbita dada el electrón no emite energía.

El modelo de Bohr implica que el átomo **no puede estar en cualquier estado de energía**

El átomo sólo puede absorber, emitir fotones por **tránsitos** entre estados (órbitas permitidas)

Eso explicaría la aparición de líneas a frecuencias fijas en los espectros



Fuerza Coulombiana = Fuerza centrífuga

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = mv^2$$

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m Z e^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Definiendo a_0 (radio de Bohr) como:

$$a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}$$

$$r = \frac{n^2}{Z} a_0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$a_0 = 0,52918 \text{ \AA}$$

$$E = -\frac{1}{2} mv^2 = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

$$E = -\frac{m e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

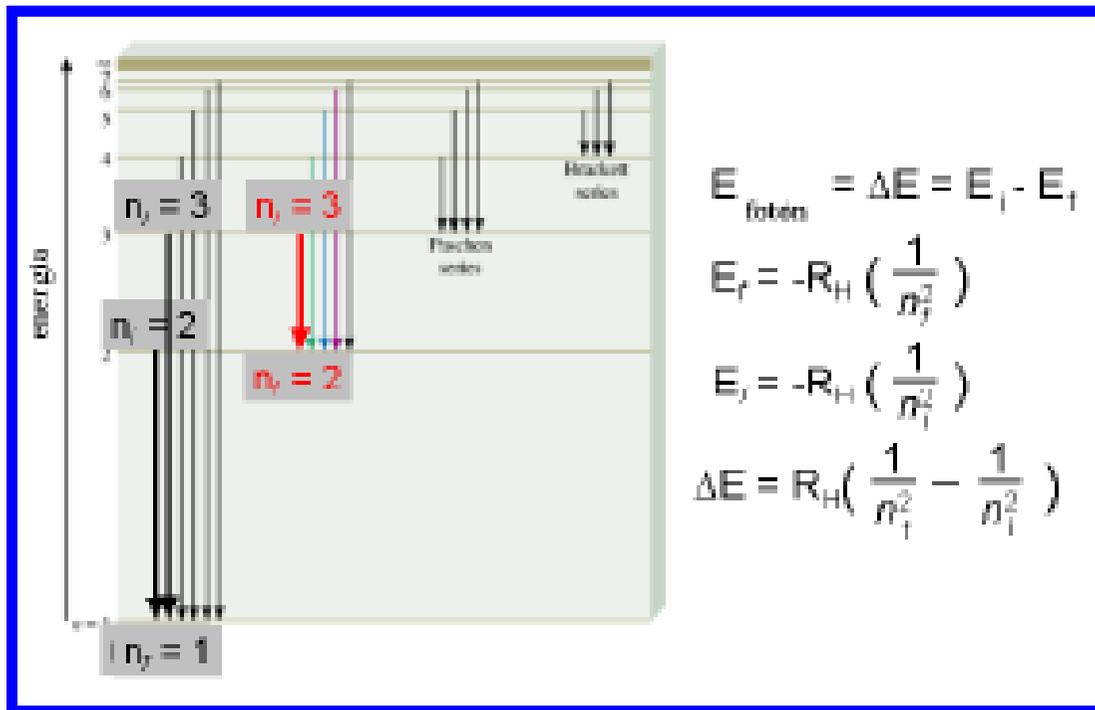
y definiendo la unidad atómica de energía, hartree, como:

$$1 \text{ unidad atómica (u. a.)} = 1 \text{ hartree} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \\ = 4,3598 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_{(u.a.)} = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = -R_H \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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



$$\Delta E = h\nu = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \text{ Joules}$$

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

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

$$\nu = 3,29 \times 10^{15} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \text{ Hz}$$

Dualidad onda-corpúsculo

La explicación de la emisión de radiación por un cuerpo negro y del efecto fotoeléctrico mostraba que la radiación electromagnética tiene una doble naturaleza de onda y corpúsculo

¿Tienen las partículas de materia también doble naturaleza de onda y corpúsculo?

En 1924 Luis De Broglie propuso esa posibilidad

Ecuación de Einstein:

$$E = m c^2 \quad (c \text{ velocidad de la luz})$$

Ecuación de Planck:

$$E = h\nu$$

Combinando ambas ecuaciones Luis De Broglie propuso que una partícula pequeña que se mueve posee asociada una onda de longitud de onda, λ , igual a:

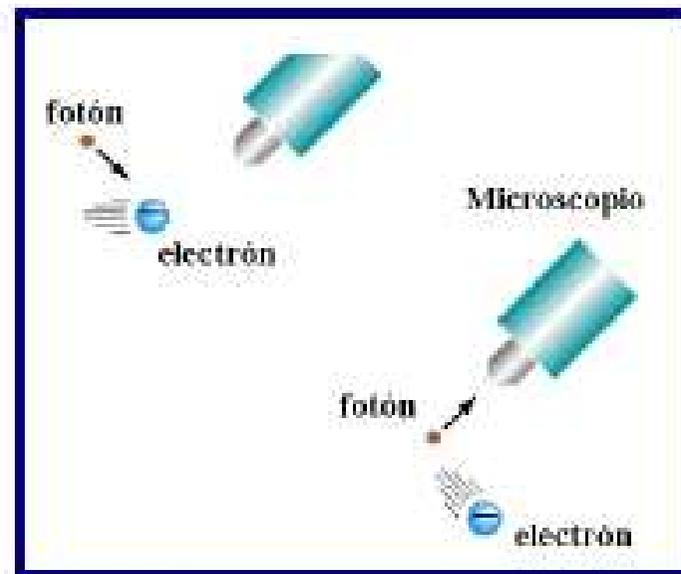
$$\lambda = h / p$$

en que h es la constante de Planck y p es el momento de la partícula

Principio de incertidumbre de Heisenberg y Mecánica Cuántica

Indicios:

1. Las partículas de materia tienen una doble naturaleza de corpúsculo y onda. ¿Hasta qué punto tiene sentido definir una posición y una velocidad para lo que es una onda?
2. La medición de la posición y velocidad de una partícula implica interactuar con dicha partícula (por ejemplo con un fotón de luz). Para partículas muy pequeñas ello implicaría una **indeterminación** en la medición de su posición debido a esta interacción.



Heisenberg (1927): "Es imposible conocer la posición y el momento lineal de una partícula simultáneamente"

$$\Delta p \Delta x \geq h/4 \pi$$

Δp = incerteza en el momento

Δx = incerteza en la posición

El error en la determinación de la posición de una bala de 1g cuya velocidad se conoce con una precisión de 1 mm s^{-1} es de $5 \cdot 10^{-26} \text{ m}$.

El error en la determinación de la velocidad de un electrón en un espacio unidimensional de anchura $2a_0$, es 500 km s^{-1} .

EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

El átomo de hidrógeno es el único que se puede resolver exactamente, el resto solo se puede resolver en forma aproximada. Para ello se utilizan las funciones de onda encontradas para el átomo más simple: el hidrógeno. La ecuación de Schrödinger aplicada al átomo de hidrógeno queda:

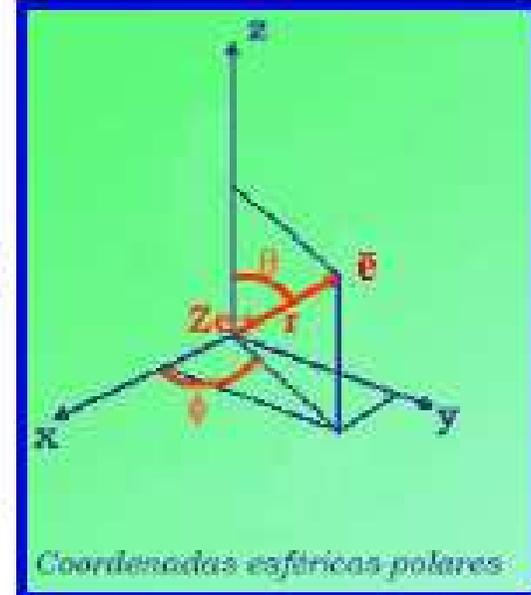
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

Dado que V se puede expresar más fácilmente, en términos de la distancia electrón-núcleo, r , entonces es más conveniente trabajar en coordenadas esféricas polares, con el núcleo en el origen. V queda expresado como:

$$V = -\frac{Ze^2}{r}$$

Entonces, la función de onda que es solución, se puede expresar en función de las coordenadas polares:

$$\Psi(x, y, z) \equiv \Psi(r, \theta, \phi)$$



En coordenadas esféricas polares, la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno queda:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] - \frac{Ze^2}{r} \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi)$$

De esta manera, se pueden separar variables y las soluciones de la ecuación de Schrödinger, $\Psi(r, \theta, \phi)$, se pueden expresar como un producto de tres funciones independientes, una que depende solo de r , la función radial $R(r)$, y dos que dependen de las coordenadas angulares $\Theta(\theta)$, $\Phi(\phi)$. Las funciones totales representan los orbitales atómicos. $R(r)$ determina el tamaño e $Y(\theta, \phi)$ la forma del orbital

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$$

Así como en la resolución de la ecuación de Schrödinger para una partícula aparecen números cuánticos que cuantizan los estados de energía permitidos, al resolver el átomo de hidrógeno aparecen tres números cuánticos:

n = número cuántico principal que determina la energía del electrón en el átomo de hidrógeno, y puede tomar los valores 1, 2, 3, ...

l = número cuántico azimutal que cuantiza el momento angular orbital, y puede tomar valores de 1, 2, 3, ..., $(n-1)$.

m = número cuántico magnético que cuantiza la componente del momento angular a lo largo del eje z , y puede tomar los valores de $l, l-1, l-2, \dots, 0, -1, -2, \dots, -l$.

El momento angular de espín del electrón

- El espín es un momento angular intrínseco, propio y característico de cada partícula que no tienen una imagen clásica.
- Puede explicarse a partir de la Mecánica Cuántica Relativista (Dirac)

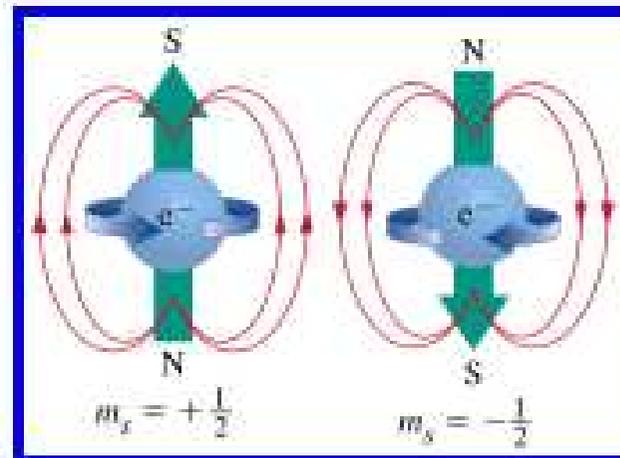
$$|\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)} h$$

Para el electrón $s=1/2$

Su componente $S_z = m_s h$; $m_s = \pm 1/2$

si $m_s = +1/2$ estado a ; si $m_s = -1/2$ estado b

Cuarto número cuántico: m_s



Para describir completamente un electrón en un átomo se requieren cuatro números cuánticos: n , l , m_l y m_s

$$\Psi_{(\text{total})} = \Psi_{(n,l,m)} m_s$$

Primeros estados de energía permitidos al electrón en el átomo de hidrógeno

orbital	n	l	m_l	m_s	m_s	número posible de estados	número total de estados por n
1s	1	0	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	2
2s	2	0	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
2p	2	1	1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	8
			0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
			-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
3s	3	0	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	18
3p	3	1	1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
			0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
			-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
3d	3	2	2	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
			1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
			0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
			-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	
			-2	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	

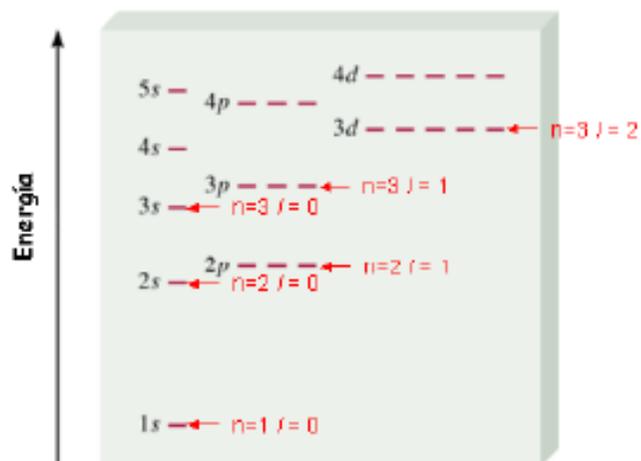
Configuración electrónica

Principio de "aufbau" o de "building-up": En los átomos polielectrónicos en su configuración electrónica fundamental, las funciones de onda de sus diferentes electrones son aquellas que corresponden a los orbitales de menor energía.

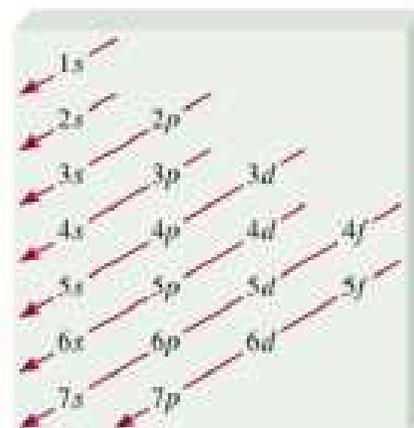
Principio de Exclusión de Pauli: En un átomo polielectrónico no pueden existir dos electrones con la misma función de onda, es decir con los cuatro números cuánticos iguales (n, l, m, m_s)

Energía de los orbitales en un átomo multi-electrónico

La energía depende de n y l



Orden de llenado de orbitales



$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s$

Regla de máxima multiplicidad de Hund: Cuando varios electrones están descritos por orbitales degenerados, la mayor estabilidad energética es aquella en donde los espines electrónicos están desapareados

Configuraciones electrónicas fundamentales: llenado de orbitales

	Z	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	Símbolo
H	1	↑					1s ¹
He	2	↑↓					1s ²
Li	3	↑↓	↑				1s ² 2s ¹
Be	4	↑↓	↑↓				1s ² 2s ²
B	5	↑↓	↑↓	↑			1s ² 2s ² 2p ¹
C	6	↑↓	↑↓	↑	↑		1s ² 2s ² 2p ²
N	7	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	1s ² 2s ² 2p ³
O	8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	1s ² 2s ² 2p ⁴
F	9	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	1s ² 2s ² 2p ⁵
Ne	10	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	1s ² 2s ² 2p ⁶

Algunas excepciones

Cr $[Ar]4s^13d^5$ y no $[Ar]4s^23d^4$
Cu, Ag, Au: $[] ns^1(n-1)d^{10}$ y no $[] ns^2(n-1)d^9$

Ni $[Ar] 4s^2 3d^8$
Pd $[Kr] 5s^1 4d^9$
Pt $[Kr] 5d^{10}$

Ni^{2+} $[Ar] 4s^0 3d^8$
 Ni^{2+} $[Ar] 3d^8$