

Desde Estructura Atómica hasta Enlaces

Plan de Trabajo:

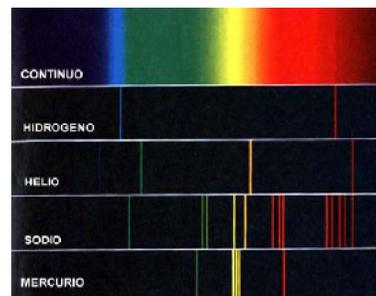
- Estructura del átomo
- Estructura de los átomos al estado fundamental
- Tabla periódica
- Electronegatividad
- Enlaces: primarios, secundarios y mixtos

Conceptos básicos del átomo

- Electrones: carga $-1e$; m_e
- Protones: carga $+1e$; $m_p = 1836 m_e$
- Neutrones: neutros; $m_n \approx m_p$
- Átomo al estado fundamental
- Número atómico Z
- Z electrones orbitando
- Z protones en el núcleo
- Neutrones en el núcleo (isótopos), ≥ 0 .
- Átomos ionizados o enlazados

Estructura del Átomo. Modelos

La evidencia experimental disponible: Espectros



Modelo de Bohr (H)

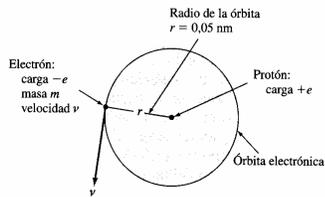
- Modelo planetario, de órbitas planas.
- Órbitas estacionarias. Experimental y postulado.
- Equilibrio de fuerza centrífuga y fuerza electrostática
 - Electrón: carga e negativa y masa m .
 - Núcleo: carga e positiva
 - Variables: radio de la órbita, r , y velocidad del electrón, v .
- La energía total del electrón se escribe como la suma de la energía cinética y de la energía electrostática.
- Geometría órbita inicialmente supuesta: circular
- Ya se sabe de ondas electromagnéticas y del efecto fotoeléctrico
- Muchos datos de espectros de emisión de elementos.

Ecuaciones

- Equilibrio de fuerzas
 - $F_{centrifuga} = F_{centripeta}$
 - Energía
 - $Energía\ total : E_{cinética} + E_{electrostática}$
 - Cuantificación de la cantidad de movimiento angular (Ec. nueva, análoga)
 - $mvr = n (h/2\pi), n = 1, 2, 3 \dots$
- De las tres primeras se obtiene v, r y E , como función de n y de constantes físicas (m, e y h).
- Cuarta ecuación, moderna

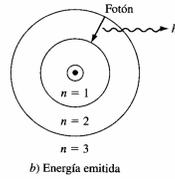
Resultados Bohr para el H (Z=1), de las tres primeras ecuaciones.

$$E = (2\pi m^2 e^2) / (n^2 h^2) = 13,6 / n^2 [\text{eV}] \text{ con } n = 1, 2, 3 \dots$$



e : carga del electrón
 m : masa del electrón
 h : constante de Planck
 n : número cuántico principal

Explicación de los espectros de emisión, debida a Bohr. (Cuarta ec.)



$\Delta E = h\nu$ (Ec. ya conocida)
 E : energía de una radiación electromagnética de frecuencia ν .
 h : constante de Planck

Idea de Bohr (correcta)
 Si un electrón decae, por ejemplo, desde un estado de energía $E(3)$ a $E(2)$, se sabe que emite una radiación electromagnética; entonces, la frecuencia de dicha radiación queda dada por:

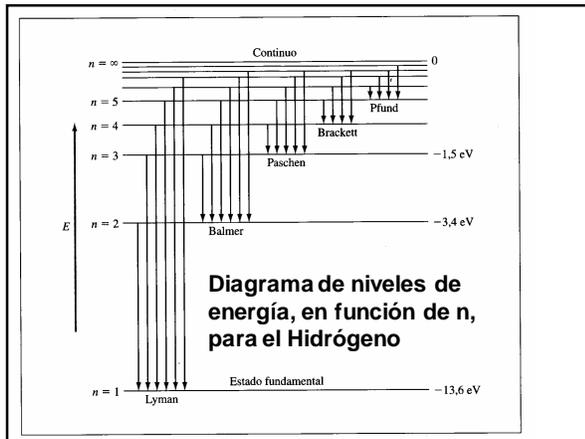
$$(E(3) - E(2)) = h \nu_{3 \rightarrow 2}$$

$$\nu_{3 \rightarrow 2} = [(E(3) - E(2))] / h$$

Sea un átomo de H es excitado, de modo que su único electrón pasa desde $n=1$ a $n=3$. Después, este electrón tenderá a bajar su n , para minimizar su energía. Podría bajar a $n=2$ o a $n=1$.

Como ejemplo, supongamos que pasa a $n=2$. Al pasar de un n mayor a uno inferior, debe perder energía. Se sabe que emite una radiación electromagnética (fotones)

Esto permitió explicar las frecuencias del espectro de emisión del H.



Validación experimental

Así, por ejemplos las rayas espectrales determinadas antes experimentalmente por Balmer para el H, corresponden a las transiciones electrónicas desde $n \geq 3$ hasta $n=2$.

Esto es, Bohr determinó correctamente las frecuencias de las ondas electromagnéticas emitidas por el H al ser excitado.

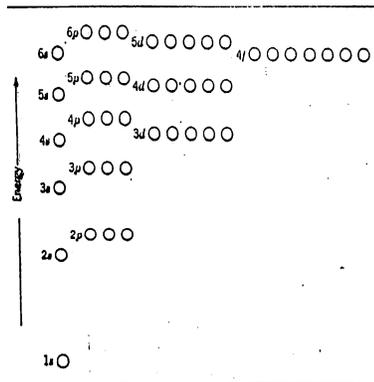
Complementando el Modelo de Bohr

- Ya tenemos el primer número cuántico, n .
- Pero fue necesario explicar el desdoblamiento de ciertos máximos en los espectros experimentales, ante la aplicación de un campo magnético.
- Aparecen entonces subniveles de energía cuantificada, por lo que se tiene otros números cuánticos.

Varios términos energéticos

- $E_{total} = E(n) + E(l) + E(m) + E(s)$
- Los 3 primeros números cuánticos son números enteros propios del orbital. Los números n, l y m caracterizan un orbital.
- En tanto que el número s es propio del electrón.
- El primer sumando del segundo miembro es el mayor de todos.

Niveles de energía permitidos, relacionados con los números cuánticos (n,l,m).



Estructura de cajas.

Geometrías y número l

- En el modelo de Bohr mejorado (Sommerfeld, etc.) las órbitas son elipses con diferente excentricidad.
- Al tenerse distintas geometría de órbitas electrónicas, se tienen distintos dipolos magnéticos asociados a la órbita.
- A lo anterior se asocian distintos términos complementarios de energía magnética, al interactuar las órbitas con un campo magnético externo.
- Energías cuantificadas: Número l .

Orientación magnética y número m

- Además, la orientación de esos dipolos en un campo magnético también es no clásico.
- Así aparece el tercer número cuántico, m , relacionado con la orientación relativa en el espacio de las órbitas de un mismo tipo (n, l).
- Puede haber más de una orientación posible, a diferencia de, por ejemplo, el caso clásico de una brújula en el campo magnético terrestre.

Multiplicidad de los números.

- Aquí nos interesa más la multiplicidad de cada nuevo número cuántico que el valor de la energía asociada.
- | | | |
|---------|----------------------|------------------|
| • n | 1 2, 3, ... | Principal |
| • l : | 0, 1... +(n-1) | Secundario. |
| • m : | -l, ..., 0, ..., + l | Magnético. |
| • s . | +1/2, -1/2 | Spin (fermiones) |

Resultados de Bohr y paso al Modelo Moderno

- Este modelo, con mejoras en que participaron otros autores, sí explicó bien las **frecuencias** del espectro del H, incluyendo desdoblamientos de máximos. Introdujo los números cuánticos de las órbitas n, l y m .
- PERO, por ser un modelo semi-clásico semi-moderno, el modelo de Bohr tiene inconsistencias internas que limitan su aplicación. Así, por ejemplo:
 - NO explica las intensidades del H.
 - NO explica frecuencias espectrales para $Z > 1$.

El Modelo Moderno y resultados de nuestro interés

- Así es como el Modelo Moderno (MM) reemplazó al de Bohr.
- En el MM:
 - reaparecen los números cuánticos n, l y m , de valores e interpretación similares a los de Bohr.
 - y surge el concepto de orbitales (nubes de probabilidad espaciales), reemplazando al concepto de órbitas (líneas 2D).

Ideas básicas del Modelo Moderno (1)

- Los electrones se tratan como ondas. Postulado por *de Broglie*, por analogía con los fotones. (Los electrones, como los fotones, tienen un carácter doble: corpuscular y ondulatorio). Poco después esto se demostró experimentalmente.
- Como los estados electrónicos son estables, es un problema de ondas electrónicas estacionarias. Schrödinger planteó la ecuación de onda estacionaria a resolver.
- Condiciones de borde: dependen del elemento.

Ideas básicas del Modelo Moderno (2)

- Para los electrones se aplica el Principio de Incertidumbre de Heisenberg:
 $\Delta x \Delta p \geq h/2\pi$, donde:
 Δx : error en la posición
 Δp : error en la cantidad de movimiento
 h : constante de Plank

En consecuencia, el problema se resuelve en términos probabilísticos.

Modelo Moderno

- La búsqueda matemática de soluciones es compleja para este curso. Veremos entonces directamente los resultados.
- Hay que resolver las ecuaciones de onda estacionaria 3D, en términos de:
 - longitud de onda, λ , relacionada con la energía.
 - amplitud, Ψ . Esto requirió una interpretación especial. (Geometría orbits.)
- Reaparecen los números cuánticos

Interpretación de la Amplitud, Ψ . Modelo Moderno

- Supongamos que ya se tiene determinada la función $\Psi(x,y,z)$ en un punto (x,y,z) del espacio.
- Por analogía con los fotones, Born propuso:
 $\Psi^2(x,y,z)dV$: Probabilidad de encontrar al electrón en un volumen dV ubicado en (x,y,z) . La solución espacial lleva, para cada trío de números cuánticos (n,l,m) u orbital, a una nube de probabilidad 3D.

Esquema analogía ondas electromagnéticas y electrónicas

General: I proporcional a A^2
 I : intensidad y A : amplitud

Nomenclatura: $\psi = A$, $\psi(x,y,z)$

Ondas electromagnéticas:
 $I = \text{Fotones} / (\text{Área local pantalla})$

Entonces, ondas electrónicas:

$I = \text{Electrones} / (\text{Volumen local})$

$\psi^2 = \text{Probabilidad de encontrar un electrón} / (\text{Volumen local } (x,y,z) \text{ del orbital})$

$\psi^2 dV = \text{Probabilidad de encontrar un electrón en } dV$

Orbitales

<http://www.educaplus.org/play-234-Orbitales-at%C3%B3micos.html>

Corresponde a cada una de las soluciones de onda electrónica estacionaria de un átomo dado.

A cada solución u orbital, caracterizado por un trío (n,l,m) corresponde una cierta energía y una geometría.

Tal geometría se asocia a una nube de probabilidad 3D. Dentro de ella, el electrón se desplaza aleatoriamente respetando una distribución de probabilidad de ubicación espacial.

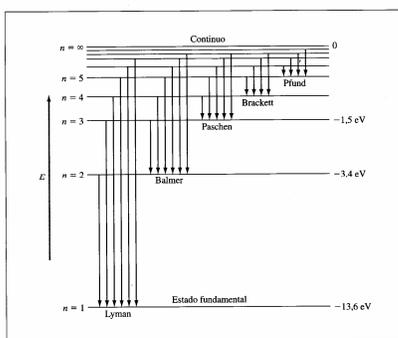
Multiplicidad de los números.

- Aquí nos interesa más la multiplicidad de cada nuevo número cuántico que el valor de la energía asociada.
- n 1 2, 3, ... Principal
- l : 0, 1... +(n-1) Secundario.
- m : -1, ..., 0, ..., +1 Magnético.
- s . +1/2, -1/2 Spin (fermiones)

Ejemplo

- Cada trío (n, l, m) caracteriza un subnivel energético (orbital)
- Considere $n=2$
 - a) Identifique, por sus números cuánticos todos los subniveles asociados a ese valor n .
 - b) ¿Hasta cuántos electrones podría haber en tal conjunto de subniveles? ¿Por qué?

Diagrama de niveles de energía para el Hidrógeno, por n .



Ejemplo

Cada trío (n, l, m) caracteriza un subnivel energético (orbital)

- Considere $n=2$
 - a) Identifique, por sus números cuánticos todos los subniveles asociados a ese valor n .
 - b) ¿Hasta cuántos electrones podría haber en tal conjunto de subniveles? ¿Por qué?

Pregunta

- Considere un valor dado de $n \geq 2$ y $l = 0$ (s).

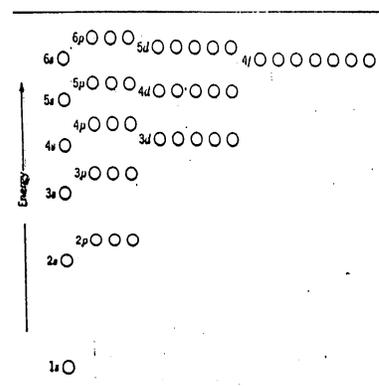
Pregunta 1. En un átomo dado, para $l=0$ (orbitales s) ¿cuántos orbitales de este tipo puede haber?

Pregunta 2. En un átomo dado, para $l=1$ (orbitales p) ¿cuántos orbitales de este tipo puede haber?

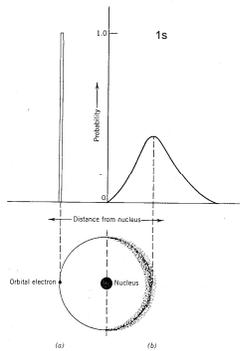
Pregunta 3. ¿Y para $l=3$ y $l=4$?

Niveles de energía permitidos, relacionados con los números cuánticos (n, l, m) .

Estructura de cajas.



Orbital tipo s ($l=0$)



- Representación de un orbital tipo s, según: a) el Modelo de Bohr (2D), y b) el Modelo Moderno (3D).
- En el Modelo Moderno los orbitales corresponden a nubes de probabilidad. Para el caso del orbital s, la probabilidad de encontrar un electrón en un punto del espacio ($\psi^2 dV$) depende sólo de r (posición radial); es decir, **tiene simetría esférica**.

Comparación de características de los modelos atómicos de Bohr y Moderno.		
Modelo	Bohr	Moderno
Fundamentos	Modelo pionero. Física Clásica y Moderna. (Inconsistencias básicas) Introdujo la aplicación de los conceptos de cuantificación de la energía a este problema.	Física Moderna. Aplica conceptos considerados correctos para el tema. Problema de ondas electrónicas estacionarias y no determinístico (probabilidades).
Evidencia experimental disponible	Espectros de los átomos. Variables: intensidad y frecuencia de las rayas espectrales. Espectros de emisión y de absorción	
Resultados de nuestro interés: Electrones en niveles de energía cuantificada y con una cierta geometría. Números cuánticos.	Hace aparecer e interpreta los números cuánticos. Con estos números se calculan las energías de los niveles permitidos. Explica el espectro del H ($Z=1$), en términos de frecuencias. (Muy limitado). Dadas las energías de los niveles de energía, indica cómo calcular las frecuencias de los espectros. Idea muy importante y correcta.	Aquí reaparecen los números cuánticos con la misma interpretación de Bohr. Muy poderoso, aunque a veces limitado a complejidades de cálculo. Explica frecuencias e intensidades de los espectros. Interpretación de las soluciones de onda: - λ : relacionada con energía del electrón - $A(x,y,z)$: geometría orbitales
	Propone órbitas planas: círculos y elipses. (Incorrecto incluso para el H)	Determina correctamente la geometría de los orbitales: nubes de probabilidad 3D.