

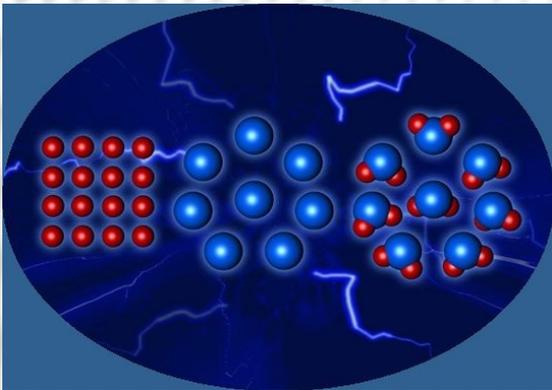
ESTRUCTURA ATÓMICA

JULIA SALVADOR RODRIGUEZ
C.E. LUIS VIVES

TEORÍA ATÓMICA DE DALTON

La materia está formada por partículas muy pequeñas, llamadas átomos, que son indivisibles e indestructibles.

Con esta idea, Dalton publicó en 1808 su Teoría Atómica que podemos resumir:



Todos los átomos de un mismo elemento tienen la misma masa atómica.

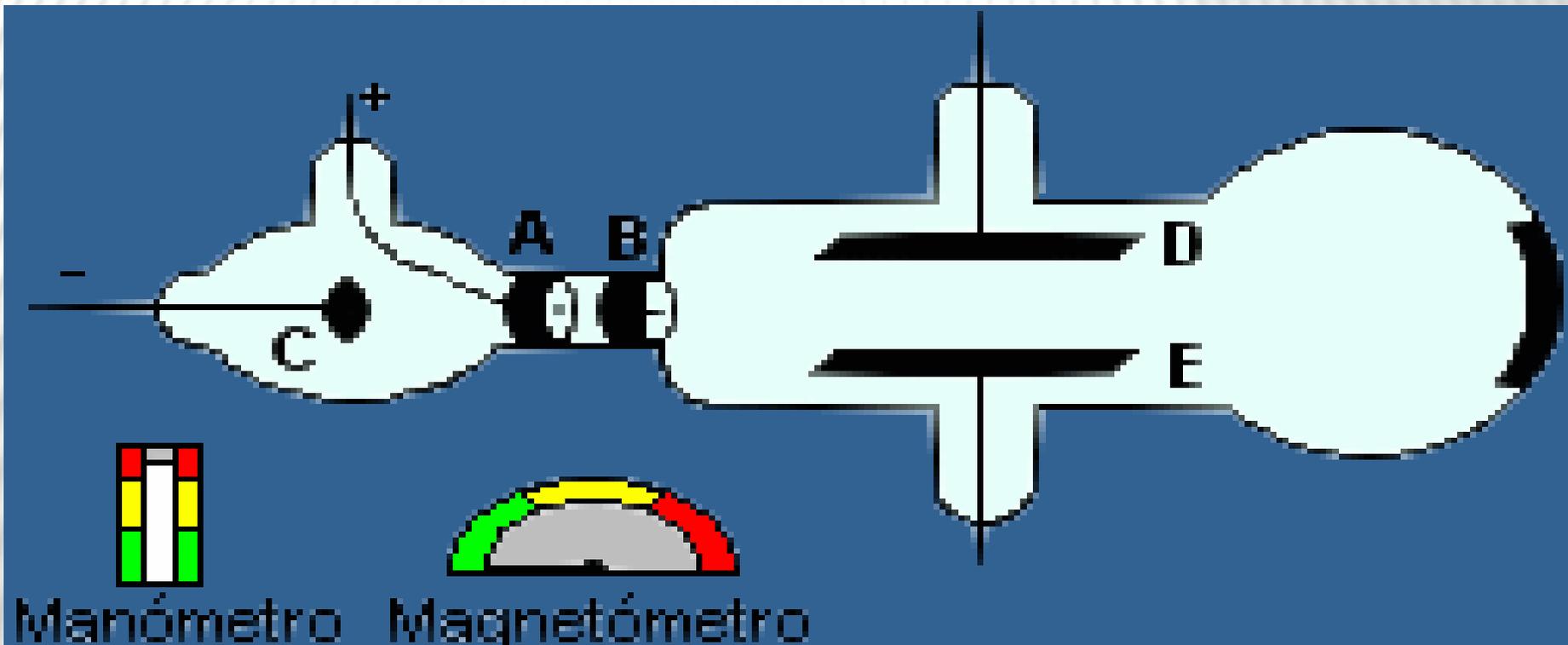
Los átomos se combinan entre sí en relaciones sencillas para formar compuestos.

Los cuerpos compuestos están formados por átomos diferentes. Las propiedades del compuesto dependen del número y de la clase de átomos que tenga.

DESCUBRIMIENTO DE Joseph John Thomson

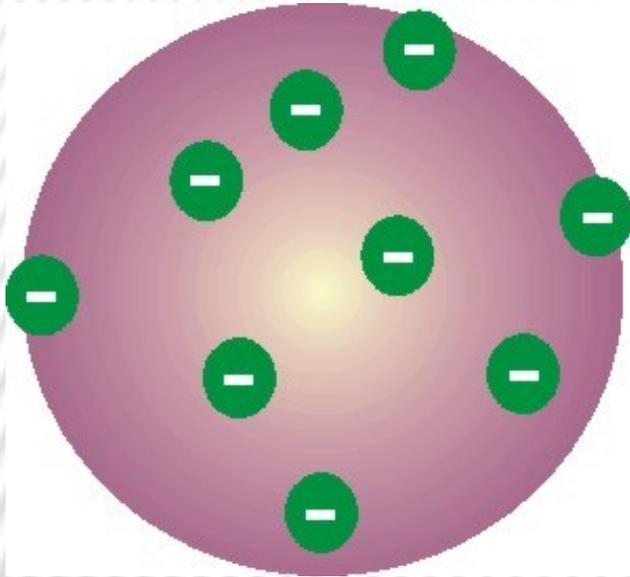
Descubrió que los rayos catódicos estaban formados por partículas cargadas negativamente (**electrones**), de las que determinó la relación entre su carga y masa.

Tubo de rayos catódicos utilizado por Thomson



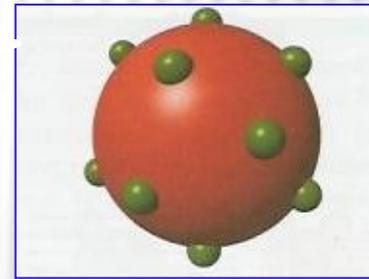
Cuando se sitúan unas aberturas en A y B, el brillo se limita a un punto bien definido sobre el vidrio, este punto puede desviarse mediante campos eléctricos o magnéticos.

MODELO ATÓMICO DE THOMSON



Considera el átomo como una gran esfera con carga eléctrica positiva, en la cual se distribuyen los electrones como pequeños granitos (de forma similar a las semillas en una sandía)

Modelo atómico de Thomson



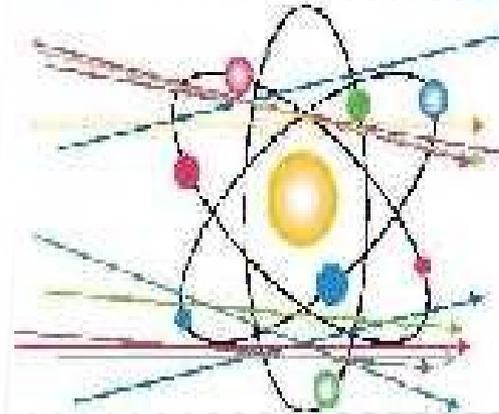
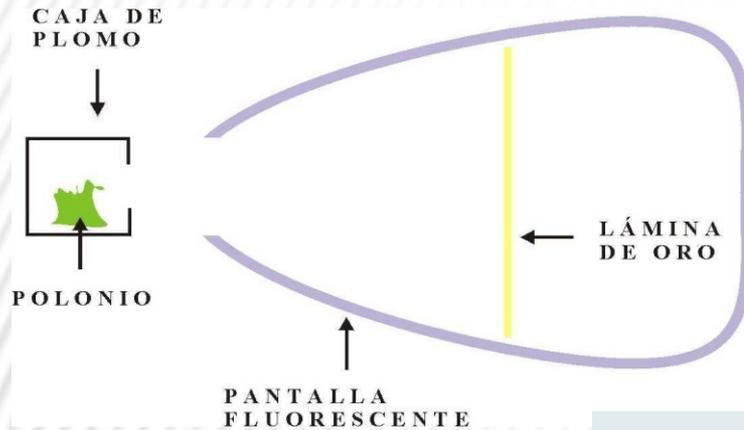
Para Thomson, el átomo es como una esfera de carga positiva uniforme en la cual están incrustados los electrones.

Ernest Rutherford

Estudió experimentalmente la naturaleza de las radiaciones emitidas por los elementos radiactivos.

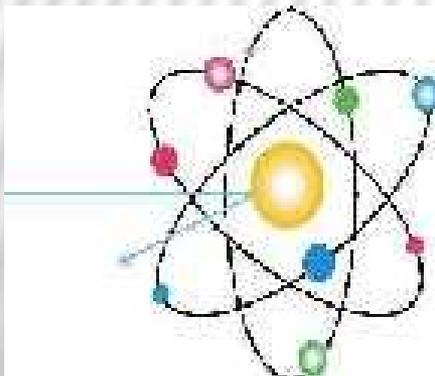
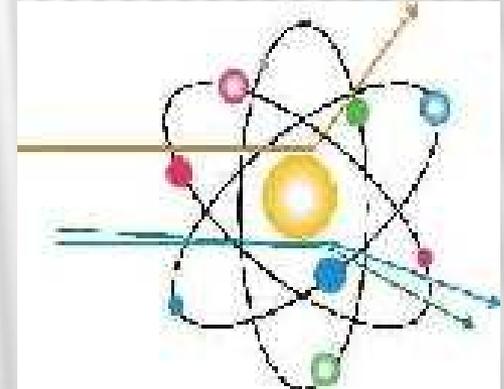
Basándose en la dispersión de las partículas alfa al incidir sobre láminas metálicas, Rutherford modifica el modelo de Thomson dando explicación a los efectos observados

Experimento para determinar la constitución del átomo



La mayoría de los rayos alfa atraviesa la lámina sin desviarse, porque la mayor parte del espacio de un átomo es espacio vacío.

Algunos rayos se desviaban, porque pasan muy cerca de centros con carga eléctrica del mismo tipo que los rayos alfa (CARGA POSITIVA).



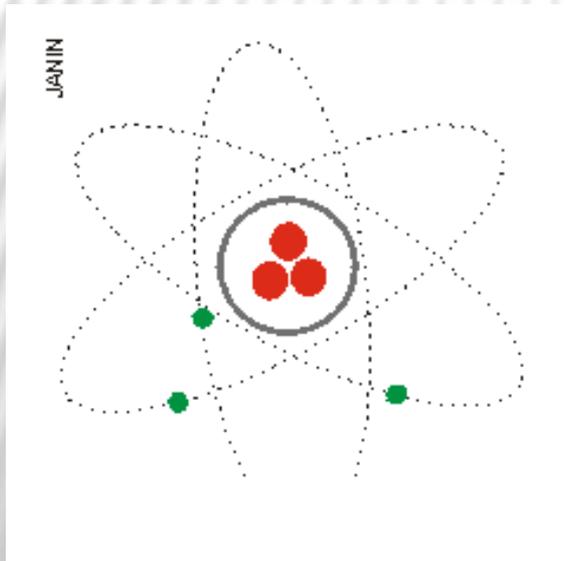
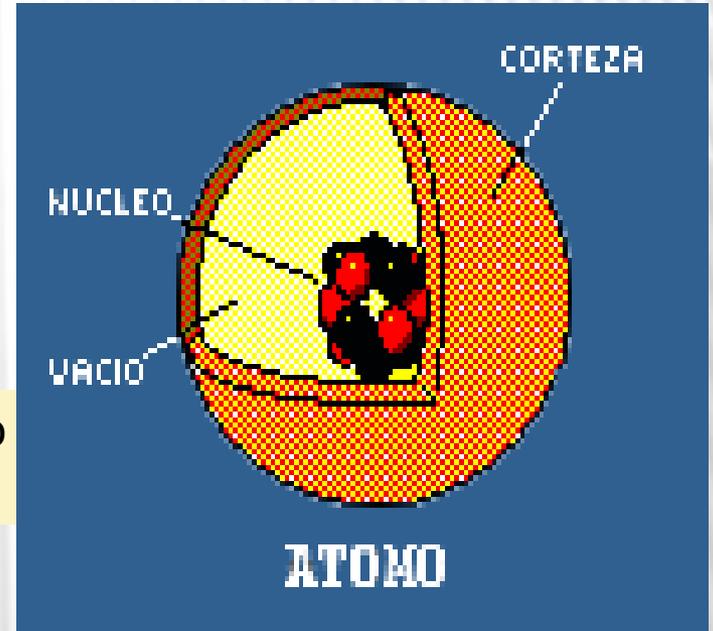
Muy pocos rebotan, porque chocan frontalmente contra esos centros de carga positiva.

MODELO ATÓMICO DE RUTHERFORD

- Todo átomo está formado por un núcleo y corteza.

- Existiendo un gran espacio vacío entre el núcleo y la corteza donde se mueven los electrones.

Los protones en el núcleo y los electrones girando alrededor.

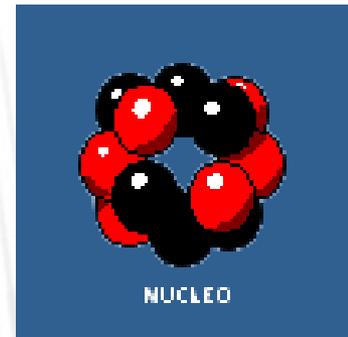


- El núcleo, muy pesado, y de muy pequeño tamaño, formado por un número de protones igual al NÚMERO ATÓMICO, donde se concentra toda la masa atómica.

NÚMERO ATÓMICO= número de protones del núcleo que coincide con el número de electrones si el átomo es neutro.

En 1932 el inglés Chadwick al bombardear átomos con partículas observó que se emitía una nueva partícula sin carga y de masa similar al protón, el NEUTRÓN

En el núcleo se encuentran los neutrones y los protones.



PARTÍCULAS FUNDAMENTALES EN EL ÁTOMO

Partícula	Carga	Masa
PROTÓN p ⁺	+1 unidad electrostática de carga = $1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	1 unidad atómica de masa (u.m.a.) = $1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
NEUTRON n	0 no tiene carga eléctrica, es neutro	1 unidad atómica de masa (u.m.a.) = $1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
ELECTRÓN e ⁻	-1 unidad electrostática de carga = $1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	Muy pequeña y por tanto despreciable comparada con la de p ⁺ y n

Los protones y neutrones determinan la masa de los átomos y los electrones son los responsables de las propiedades químicas.

NÚMERO ATÓMICO (Z) al número de protones que tiene un átomo. Coincide con el número de electrones si el átomo está neutro. Todos los átomos de un mismo elemento tienen el mismo número de protones, por lo tanto, tienen el mismo número atómico.

NÚMERO MÁSIKO (A) a la suma de los protones y los neutrones que tiene un átomo.

ISÓTOPOS a átomos de un mismo elemento que se diferencian en el número de neutrones. Tienen por tanto el mismo número atómico (Z) pero diferente número másico(A).

Un átomo se representa por:

- Su símbolo = una letra mayúscula o dos letras, la primera mayúscula que derivan de su nombre. Ca , H , Li, S, He....
- Su número atómico (Z) que se escribe abajo a la izquierda.

Su número másico (A) que se escribe arriba a la izquierda.



IONES a átomos o grupos de átomos que poseen carga eléctrica porque han ganado o perdido electrones. Pueden ser:

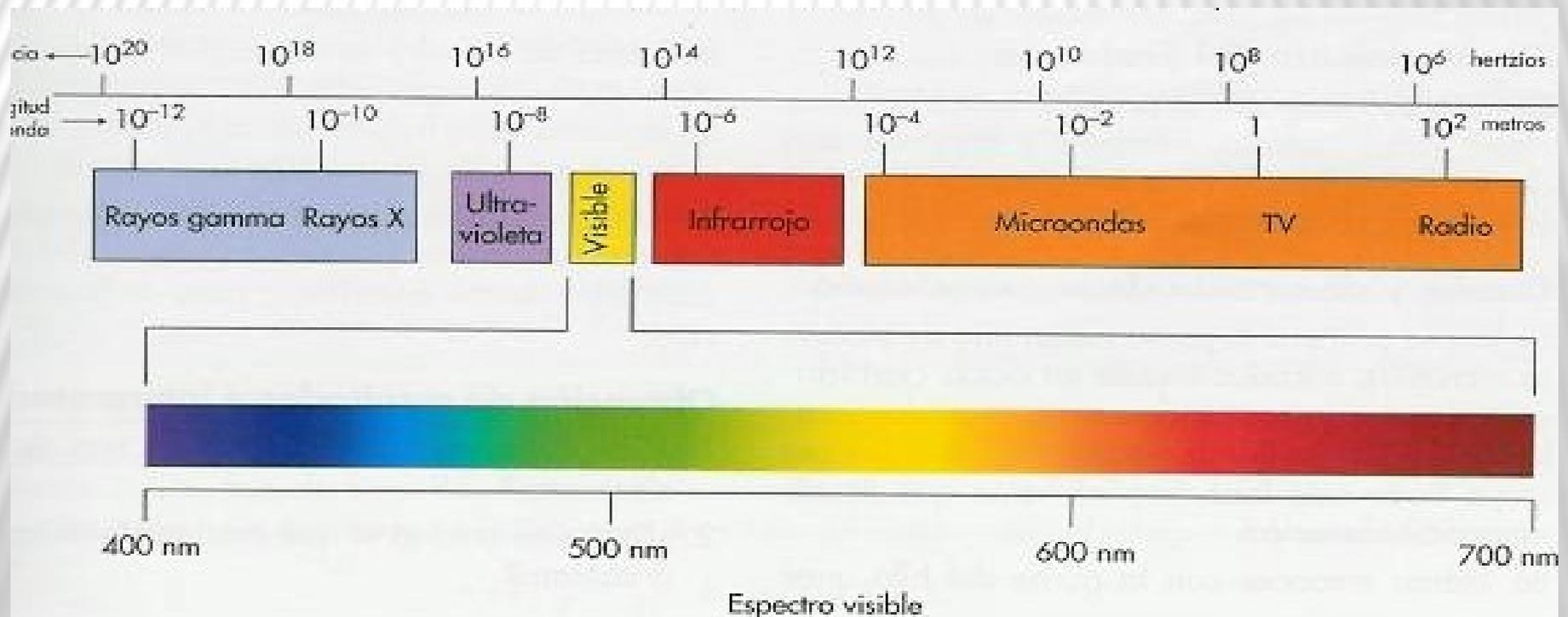
CATIONES si poseen carga positiva y, por tanto, se han perdido electrones.

ANIONES si poseen carga negativa y, por tanto, se han ganado electrones.

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.
- Viene determinada por su frecuencia “ ν ” o por su longitud de onda “ λ ”, relacionadas entre sí por:

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



ESPECTO ELECTROMAGNÉTICO

Es el conjunto de todas las radiaciones electro-magnéticas desde muy bajas longitudes de ondas (rayos γ $10^{-12} m$) hasta kilómetros (ondas de radio)

Espectro continuo de la luz es la descomposición de la luz en todas su longitudes de onda mediante un prisma óptico.

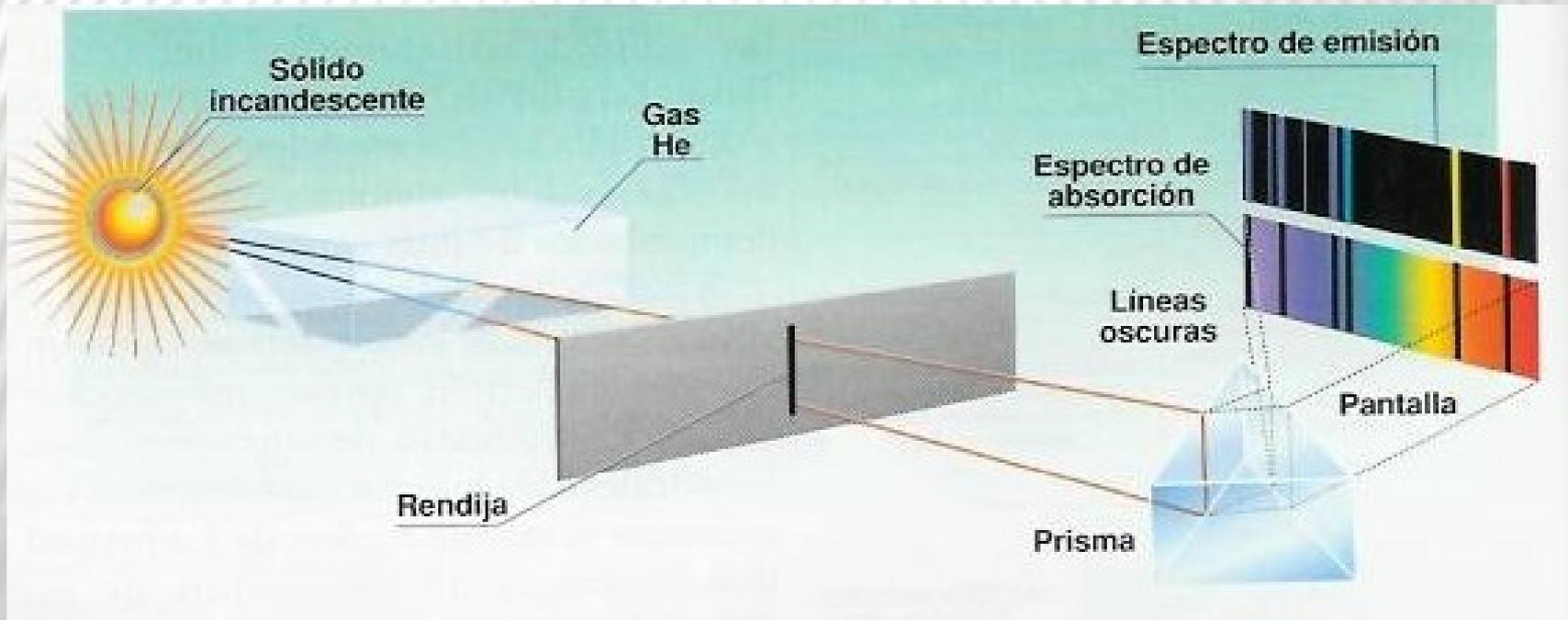
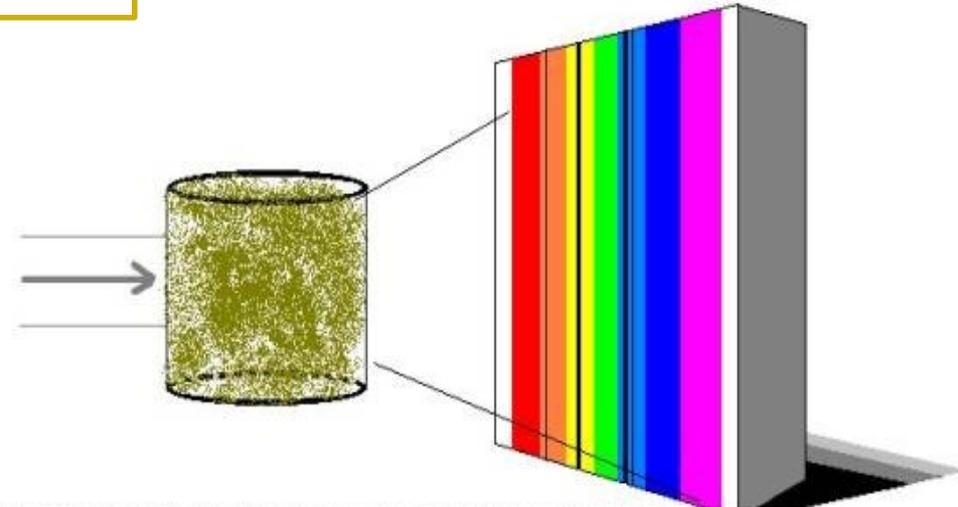
Existen dos tipos de espectros:

- Espectro de absorción
- Espectro de emisión

Espectro atómico de absorción

Cuando la radiación atraviesa un gas, este absorbe una parte, el resultado es el espectro continuo pero con rayas negras donde falta la radiación absorbida.

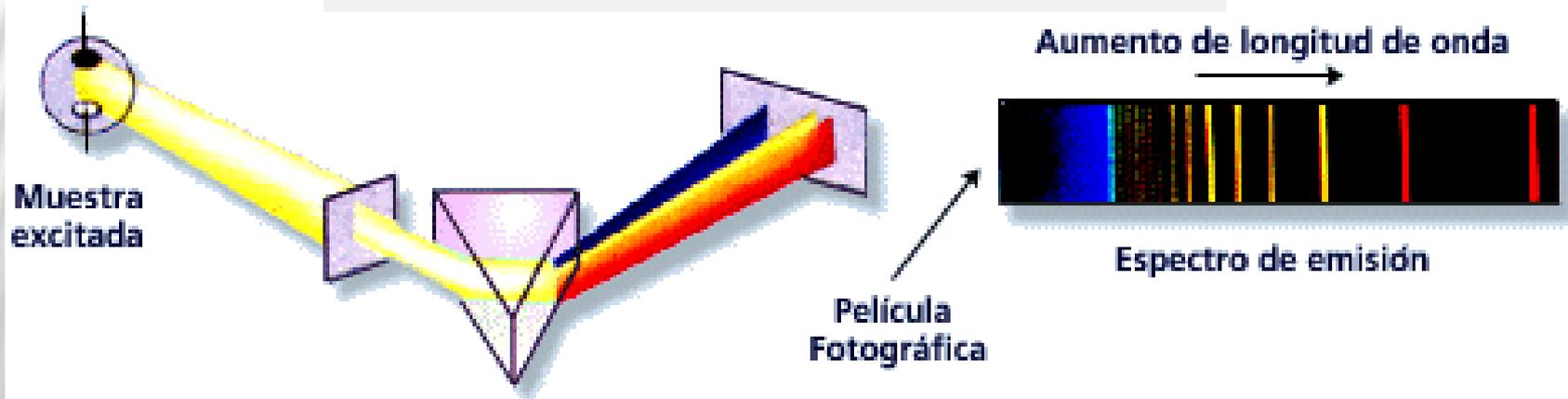
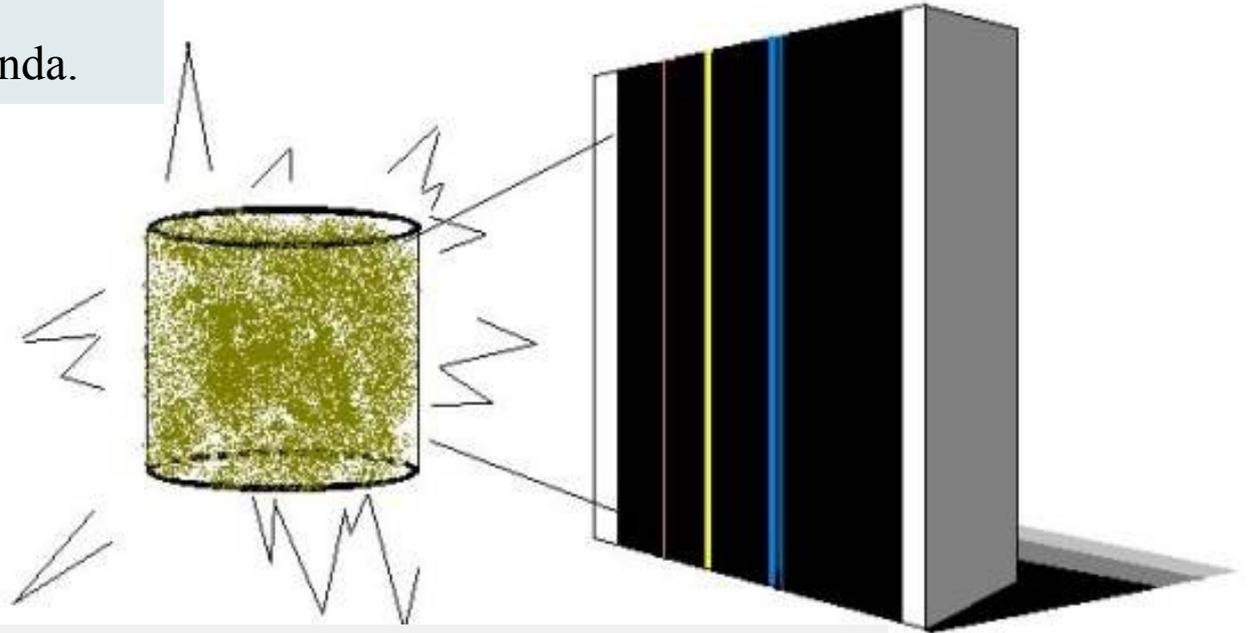
ESPECTRO DE ABSORCIÓN



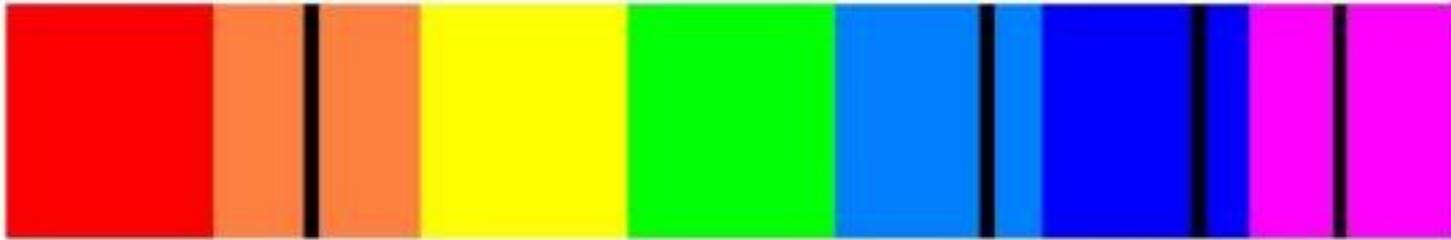
ESPECTRO DE EMISIÓN

Cuando a los elementos en estado gaseoso se les suministra energía (descarga eléctrica, calentamiento...) éstos emiten radiaciones de determinadas longitudes de onda.

Estas radiaciones dispersadas en un prisma de un espectroscopio se ven como una serie de rayas, y el conjunto de las mismas es lo que se conoce como **espectro de emisión**



Espectro de absorción del Hidrógeno:



Espectro de emisión del Hidrógeno:



Cada elemento tiene un espectro característico; por tanto, un modelo atómico debería ser capaz de justificar el espectro de cada elemento.

TEORÍA CUÁNTICA DE PLANCK

La teoría cuántica se refiere a la energía:

Cuando una sustancia absorbe o emite energía, no puede absorberse o emitirse cualquier cantidad de energía, sino que definimos una unidad mínima de energía, llamada cuanto (que será el equivalente en energía a lo que es el átomo para la materia).

O lo que es lo mismo, cualquier cantidad de energía que se emita o se absorba deberá ser un número entero de cuantos.

Cuando la energía está en forma de radiación electromagnética (es decir, de una radiación similar a la luz), se denomina energía radiante y su unidad mínima recibe el nombre de fotón. La energía de un fotón viene dada por la ecuación de Planck:

$$E = h \cdot \nu$$

h: constante de Planck = $6.62 \cdot 10^{-34}$ Joule · segundo
v: frecuencia de la radiación

MODELO ATÓMICO DE BÖHR

Primer postulado

El electrón gira alrededor del núcleo en órbitas circulares sin emitir energía radiante.

Así, el Segundo Postulado nos indica que el electrón no puede estar a cualquier distancia del núcleo, sino que sólo hay unas pocas órbitas posibles, las cuales vienen definidas por los valores permitidos para un parámetro que se denomina número cuántico principal n .

Tercer Postulado

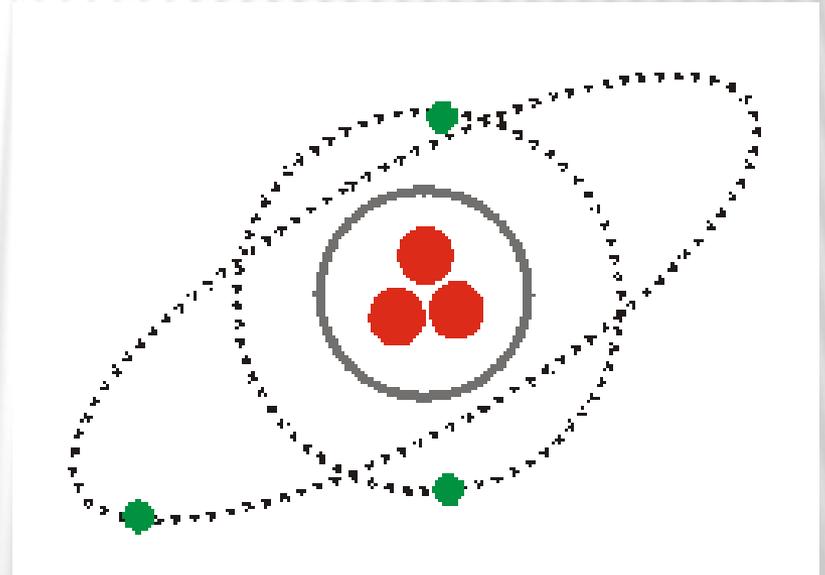
La energía liberada al caer el electrón desde una órbita a otra de menor energía se emite en forma de fotón, cuya frecuencia viene dada por la ecuación de Planck:

$$E_a - E_b = h \cdot \nu$$

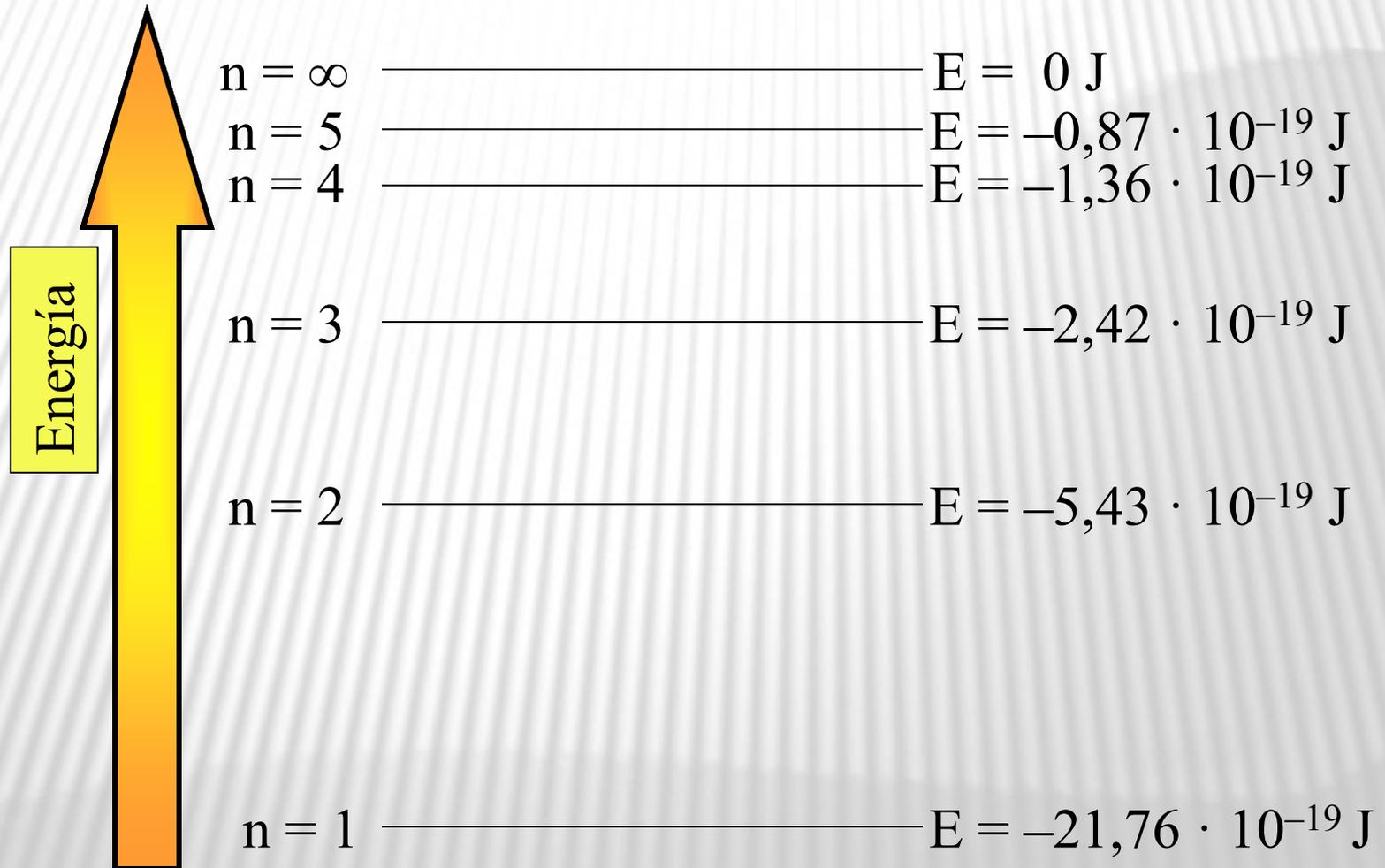
Así, cuando el átomo absorbe (o emite) una radiación, el electrón pasa a una órbita de mayor (o menor) energía, y la diferencia entre ambas órbitas se corresponderá con una línea del espectro atómico de absorción (o de emisión).

Segundo postulado

Sólo son posibles aquellas órbitas en las que el electrón tiene un momento angular que es múltiplo entero de $h / (2 \cdot \pi)$
ÓRBITAS ESTACIONARIAS



Niveles permitidos según el modelo de Bohr (para el átomo de hidrógeno)

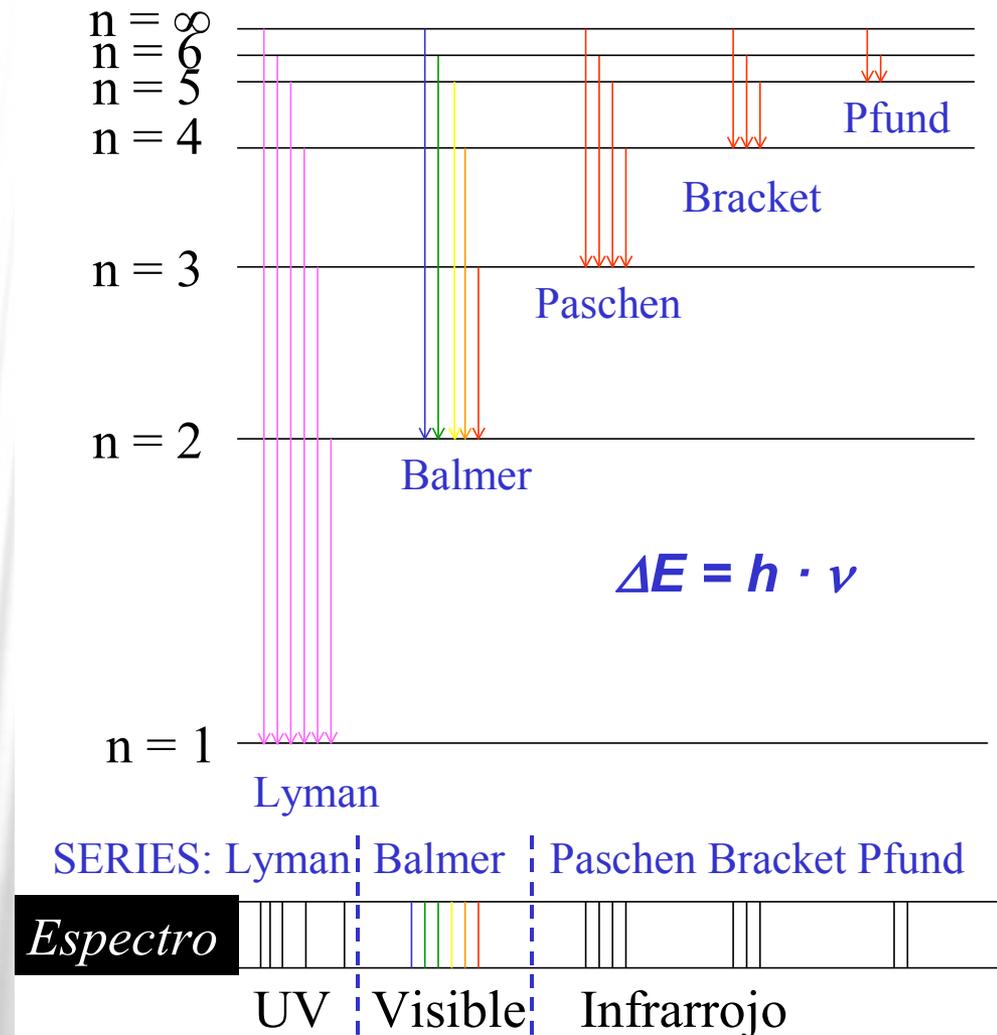


SERIES ESPECTRALES: y su explicación con el modelo de Bohr

Los espectroscopistas habían calculado y estudiado a fondo las rayas del espectro atómico más sencillo, el del átomo de hidrógeno. Cada uno estudió un grupo de rayas del espectro:

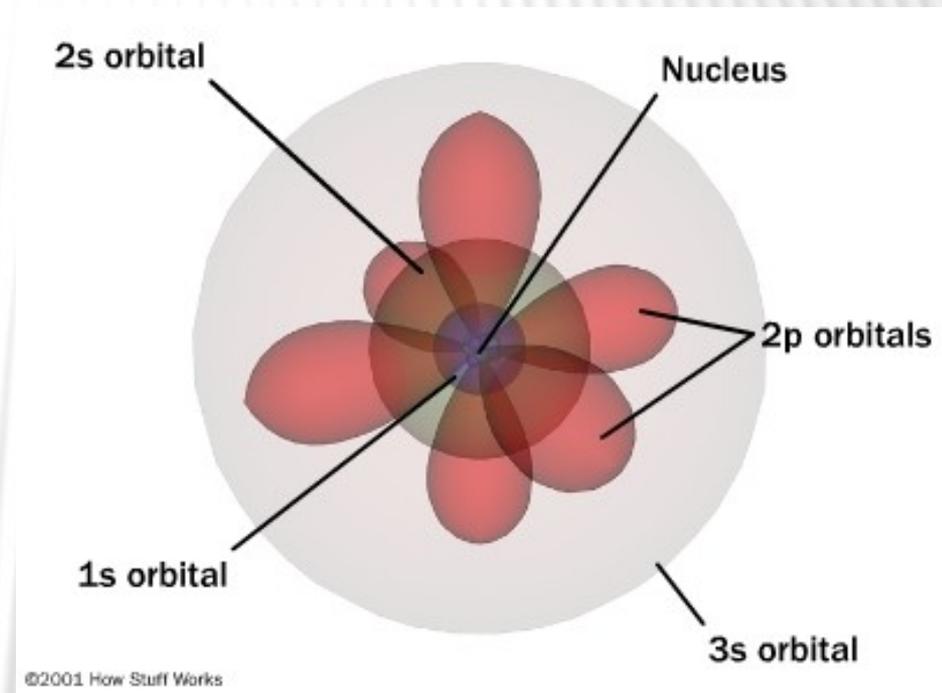
- **Serie Balmer:**
aparece en la zona visible del espectro.
 - **Serie Lyman:**
aparece en la zona ultravioleta del espectro.
 - **Serie Paschen**
 - **Serie Bracket**
 - **Serie Pfund**
- Aparecen en la zona infrarroja del espectro*

Series espectrales



MODELO MECANOCUÁNTICO

- ✘ En 1926 se dispone ya de un modelo de átomo plenamente cuántico (Schrodinger) , donde han desaparecido dos conceptos básicos del modelo anterior:
- ✘ Los electrones no son considerados como partículas sino como ondas
- ✘ No existen órbitas electrónicas sino orbitales.



MODELO MECANOCUÁNTICO

- × Basado en las ecuaciones propuestas por W Heisenberg y por E. Schrödinger por separado y llegando a resultados similares
- × Los aspectos más importantes de este modelo quedan reflejados en las siguientes teorías:
 - + Dualidad onda partícula
 - + Principio de indeterminación de Heisenberg
 - + Principio de exclusión de Pauli
 - + Regla de la máxima multiplicidad de Hund
 - + Principio de construcción (Aufbau)

DUALIDAD ONDA PARTÍCULA

- × Según la hipótesis de De Broglie, cada partícula en movimiento lleva asociada una onda, de manera que la dualidad onda-partícula puede enunciarse de la siguiente forma: una partícula de masa m que se mueva a una velocidad v puede, en condiciones experimentales adecuadas, presentarse y comportarse como una onda de longitud de onda, λ . La relación entre estas magnitudes fue establecida por el físico francés Louis de Broglie en 1924.

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

- × *cuanto mayor sea la cantidad de movimiento (mv) de la partícula menor será la longitud de onda (λ), y mayor la frecuencia (ν) de la onda asociada.*

PRINCIPIO DE INDETERMINACIÓN DE HEISENBERG

- × **W. Heisenberg (Premio Nobel de Física 1932)** enunció el llamado principio de incertidumbre o principio de indeterminación, según el cual es imposible medir simultáneamente, y con precisión absoluta, el valor de la posición y la cantidad de movimiento de una partícula.
- × Esto significa, que la precisión con que se pueden medir las cosas es limitada, y el límite viene fijado por la constante de Planck.

Δx : indeterminación en la posición
 Δp_x : indeterminación en la cantidad de movimiento
h: constante de Planck ($h=6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$)

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

- × Es importante insistir en que la incertidumbre no se deriva de los instrumentos de medida, sino del propio hecho de medir. Con los aparatos más precisos imaginables, la incertidumbre en la medida continúa existiendo. Así, cuanto mayor sea la precisión en la medida de una de estas magnitudes mayor será la incertidumbre en la medida de la otra variable complementaria.
- × La posición y la cantidad de movimiento de una partícula, respecto de uno de los ejes de coordenadas, son magnitudes complementarias sujetas a las restricciones del principio de incertidumbre de Heisenberg. También lo son las variaciones de energía (E) medidas en un sistema y el tiempo, t empleado en la medición.

NÚMEROS CUÁNTICOS.

En el modelo original de Böhr, se precisa un único parámetro (el número cuántico principal, n), que se relaciona con el radio de la órbita circular que el electrón realiza alrededor del núcleo, y también con la energía total del electrón. n indica los diferentes niveles electrónicos (órbitas estacionarias en el modelo de Bohr).

Los valores que puede tomar este número cuántico principal son los enteros positivos: 1, 2, 3...

Sin embargo, pronto fue necesario modificar el modelo para adaptarlo a los nuevos datos experimentales, aparición de nuevas rayas espectrales con lo que se introdujeron otros tres números cuánticos para caracterizar al electrón:

número cuántico secundario o azimutal (l)
número cuántico magnético (m)
número cuántico de espín (s)

SIGNIFICADO DE LOS NÚMEROS CUÁNTICOS.

- n , principal, se refiere a la energía de las órbitas, o los niveles energéticos y al tamaño de la órbita

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (\text{n}^\circ \text{ de capa o nivel})$$

- l , orbital, se refiere a un subnivel energético, cuando hablamos de una órbita específica

$$l = 0, 1, 2, \dots (n - 1) \quad (\text{forma del orbital o subnivel})$$

- m_l , magnético, se refiere a la orientación del orbital

$$m = -l, \dots, 0, \dots, l \quad (\text{orientación orbital o orbital})$$

- m_s , spin, se refiere al movimiento de rotación del electrón o su orientación en un campo magnético externo.

$$s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \quad (\text{spín rotación del electrón})$$

CONCEPTO DE ORBITAL

ORBITAL: ZONA DEL ESPACIO EN TORNADO AL NÚCLEO DONDE LA POSIBILIDAD DE ENCONTRAR AL ELECTRÓN ES MÁXIMA

Los electrones se sitúan en orbitales, los cuales tienen capacidad para situar dos de ellos:

- 1ª capa: 1 orb. "s" (2 e⁻)
- 2ª capa: 1 orb. "s" (2 e⁻) + 3 orb. "p" (6 e⁻)
- 3ª capa: 1 orb. "s" (2 e⁻) + 3 orb. "p" (6 e⁻)
5 orb. "d" (10 e⁻)
- 4ª capa: 1 orb. "s" (2 e⁻) + 3 orb. "p" (6 e⁻)
5 orb. "d" (10 e⁻) + 7 orb. "f" (14 e⁻)
- Y así sucesivamente...

s²

p⁶

d¹⁰

f¹⁴

Primero se indica el nivel que es el número cuántico principal n

Los valores del número cuántico L (subnivel) indican la letra del orbital que corresponde: (L=0 es s ; L=1 es p ; L=2 es d ; L=3 es f)

Los valores de m indican los diferentes orbitales que caben en cada subnivel.

En cada orbital solo caben dos electrones uno girando de un lado y otro del otro +1/2 y -1/2 número de spin

DISTRIBUCIÓN DE ORBITALES Y ELECTRONES POR NIVELES

	<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	<i>s</i>
<i>1s</i>	1	0	0	$\pm 1/2$
<i>2s</i>	2	0	0	$\pm 1/2$
<i>2p</i>	2	1	-1,0,1	$\pm 1/2$
<i>3s</i>	3	0	0	$\pm 1/2$
<i>3p</i>	3	1	-1,0,1	$\pm 1/2$
<i>3d</i>	3	2	-2,-1,0,1,2	$\pm 1/2$
<i>4s</i>	4	0	0	$\pm 1/2$
<i>4p</i>	4	1	-1,0,1	$\pm 1/2$
<i>4d</i>	4	2	-2,-1,0,1,2	$\pm 1/2$
<i>4f</i>	4	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	$\pm 1/2$

COLOCACIÓN DE LOS ELECTRONES EN UN DIAGRAMA DE ENERGÍA

Se siguen los siguientes principios:

- Principio de mínima energía (Aufbau)
- Principio de máxima multiplicidad (regla de Hund)
- Una vez colocados se cumple el principio de exclusión de Pauli.

Principio de mínima energía (Aufbau)

- Se rellenan primero los niveles con menor energía.
- No se rellenan niveles superiores hasta que no estén completos los niveles inferiores.

Principio de máxima multiplicidad (regla de Hund)

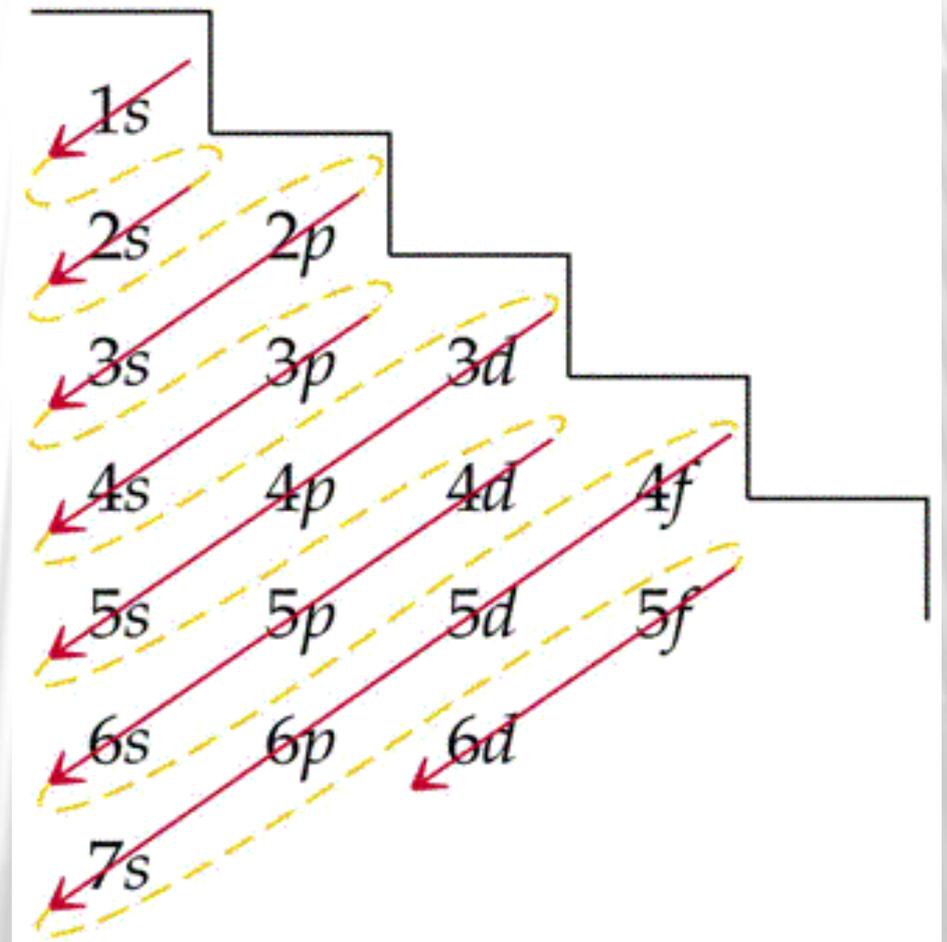
- Cuando un nivel electrónico tenga varios orbitales con la misma energía, los electrones se van colocando lo más desapareados posible en ese nivel electrónico.
- No se coloca un segundo electrón en uno de dichos orbitales hasta que todos los orbitales de dicho nivel de igual energía están semiocupados (desapareados).

Principio de exclusión de Pauli.

“No puede haber dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales en un mismo átomo”. En un orbital, como mucho, caben dos electrones

PRINCIPIO DE CONSTRUCCIÓN (AUFBAU): CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

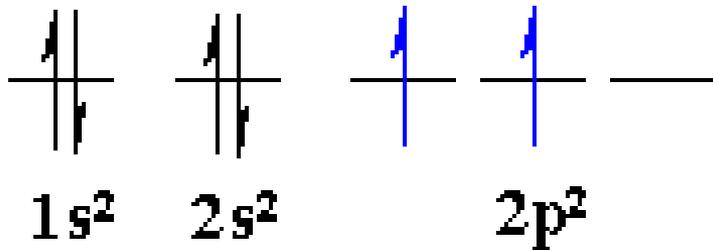
En su estado fundamental la distribución electrónica de un elemento se construye a partir del inmediato anterior, adicionándole un electrón de modo que le confiera la máxima estabilidad (menor energía)



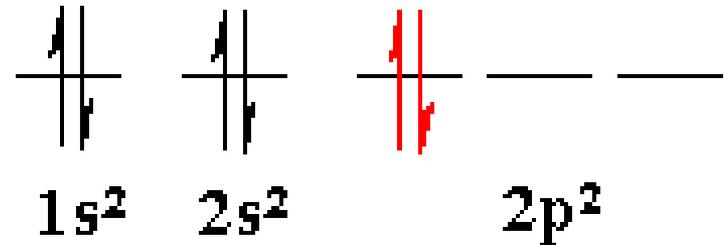
REGLA DE LA MÁXIMA MULTIPLICIDAD DE HUND: CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

Cuando una serie de orbitales de igual energía (p, d , f) se están llenando con electrones, éstos permanecerán desapareados mientras sea posible, manteniendo los espines paralelos

correct



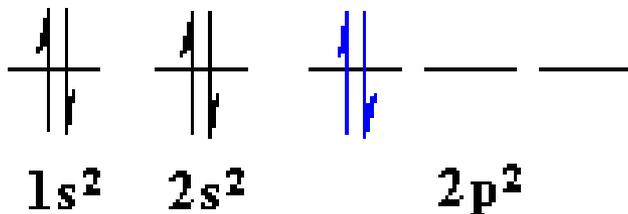
incorrect



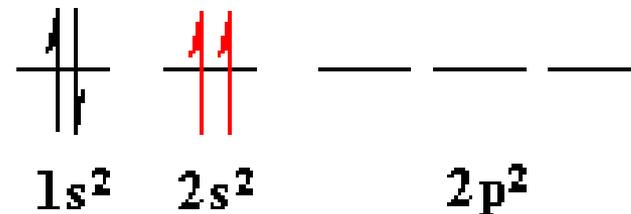
PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI LA CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA

- ✗ En un determinado sistema cuántico (átomo o molécula) no pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos idénticos
- ✗ Por tanto, en un orbital sólo caben dos electrones que compartirían tres números cuánticos y se diferenciarían en el número cuántico de spin (s)

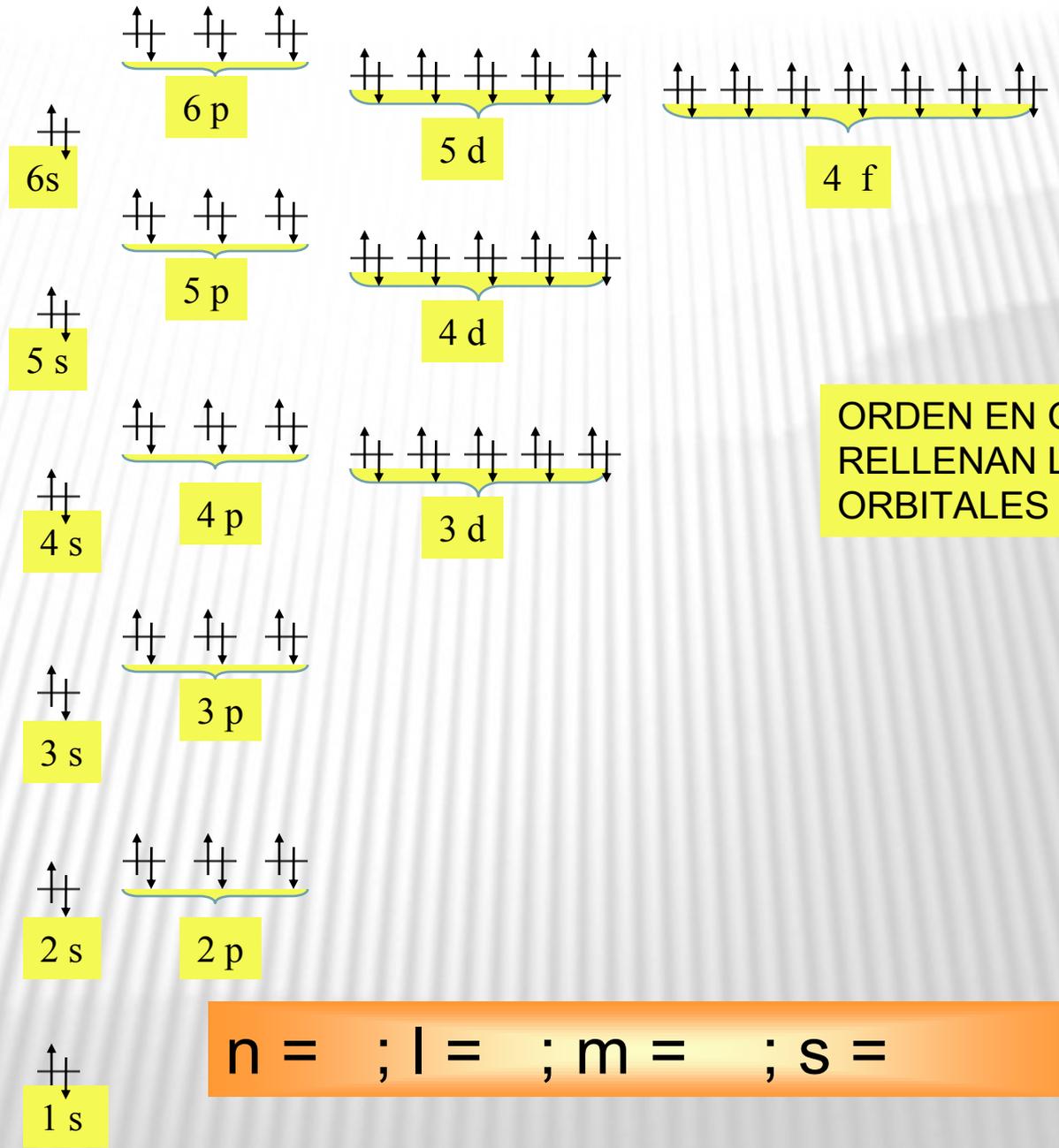
correct



incorrect



Energía



ORDEN EN QUE SE RELLENAN LOS ORBITALES

$n =$; $l =$; $m =$; $s =$