
FÍSICA Y QUÍMICA
1º Bachillerato

I. FÍSICA

II. QUÍMICA

Estructura de la Materia

Prof. Jorge Rojo Carrascosa

Índice general

1. ESTRUCTURA DE LA MATERIA	2
1.1. PARTÍCULAS SUBATÓMICAS	2
1.2. ESPECTROS ATÓMICOS	3
1.3. LEY DE PLANCK	3
1.4. MODELOS ATÓMICOS	4
1.4.1. EL MÓDELO CUÁNTICO DE BOHR	4
1.4.2. MODELO MECANOCUÁNTICO	6
1.4.2.1. PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI	7
1.4.2.2. PRINCIPIO DE MÁXIMA MULTIPLICIDAD DE HUND	7
1.4.2.3. PRINCIPIO DE AUFBAU (Diagrama de Moeller)	7
1.5. PROBLEMAS PROPUESTOS	9

Capítulo 1

ESTRUCTURA DE LA MATERIA

El descubrimiento de los rayos catódicos en 1895, identificados por J.J. Thomson como unas partículas cargadas negativamente a las que denominó **electrones**, junto con la radiactividad natural descubierta por Becquerel en 1896 y el avance de la espectroscopía, provocó un gran avance en el estudio de la estructura de la materia y en el conocimiento del ÁTOMO.

1.1. PARTÍCULAS SUBATÓMICAS

El átomo está compuesto por un núcleo, en el que se encuentran los protones y neutrones, y por electrones que *giran* en torno al él. Para que un átomo sea neutro el número de electrones debe ser igual al número de protones existentes en el núcleo.

Los **protones**, **p**, son partículas con carga positiva ($1,6 \cdot 10^{-19} C$) y con una masa de $1,673 \cdot 10^{-27} kg$. En los elementos del sistema periódico existe un número denominado **número atómico**, **Z** que se corresponde con el número de protones que tiene un átomo de ese elemento en su núcleo.

Los **neutrones**, **n**, descubiertos por Chadwick en 1932, son partículas neutras, esto es, no tiene carga eléctrica. La masa de los neutrones es prácticamente la misma que la de los protones. La suma de los protones y neutrones existentes en un átomo nos da el conocido **número másico**, **A=Z+n**, también presente en el sistema periódico. Cuando átomos de un mismo elemento (que por tanto tienen el mismo número de protones) tienen distinto número másico (distinto número de neutrones) se habla de **Isotopos**.

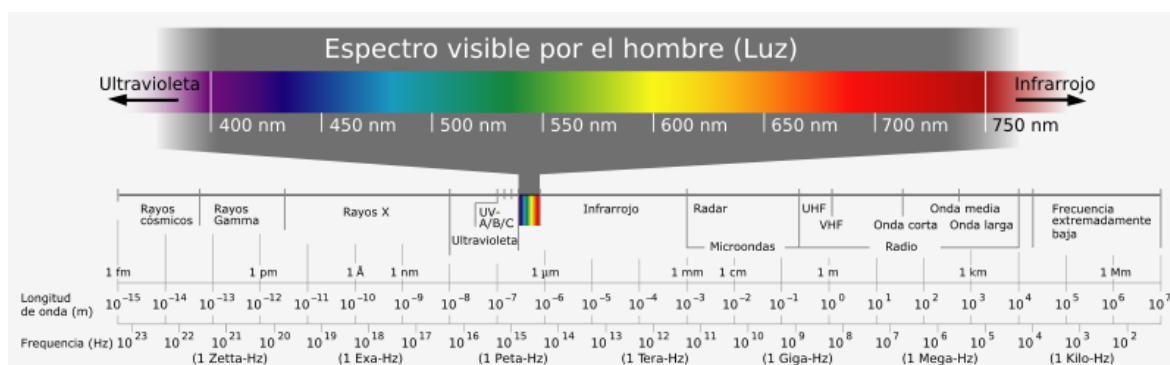
Los **electrones**, e , son partículas fundamentales con carga negativa ($-1,6 \cdot 10^{-19} C$) y con una masa mil veces menor que la de los protones y neutrones, $9,109 \cdot 10^{-31} kg$.

1.2. ESPECTROS ATÓMICOS

Cuando un elemento, en estado gaseoso, se calienta o se excita por medio de una descarga eléctrica, emite una radiación que constituye su *espectro atómico de emisión*. Estos espectros atómicos no son continuos, presentan rayas luminosas de frecuencias distintas separadas por zonas oscuras. Como cada elemento tiene su propio espectro, éstos sirven para identificar los distintos elementos del sistema periódico.

La luz o radiación electromagnética se propaga en el vacío a una velocidad c igual a $3 \cdot 10^8 m/s$. En el espectro visible, el azul posee mayor frecuencia ν , y el rojo, la menor, por tanto recordando la relación entre frecuencia y longitud de onda, $\lambda = \frac{c}{\nu}$, la λ del rojo será mayor que la del azul.

En los *espectro atómicos de absorción* se incide luz blanca sobre el elemento en estado gaseoso para luego atravesar la radiación de salida por un prisma que la descompone en sus diferentes frecuencias. El espectro obtenido en este caso está formado por el espectro de la luz blanca pero en el que se intercalan una líneas oscuras que se corresponden con las líneas observadas en el espectro de emisión.



1.3. LEY DE PLANCK

Las líneas encontradas en los espectros de emisión (o las líneas negras de los de absorción) vienen dadas por unas frecuencias características las cuales tienen su equivalencia energética mediante la expresión $E = h\nu$. Esta expresión fue establecida

por Planck cuando estudiaba la radiación del cuerpo negro, en ella observó que la luz emitida por la materia al calentarse no era continua, sino que se radia en unidades pequeñas de energía denominadas *cuantos*, siendo la energía de cada cuanto,

$$E = h\nu$$

con h la constante de Planck $6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

1.4. MODELOS ATÓMICOS

El primer *modelo atómico* fue dado por **Dalton**, su teoría perduraría casi un siglo sin embargo durante este intervalo de tiempo se fueron observaron y estudiando ciertos fenómenos que ponían en duda el modelo de átomo indivisible e indestructible propuesto por John Dalton. En 1904, **J. J. Thomson** enunciaba el primer modelo atómico en el que el átomo estaría formado por partículas cargadas eléctricamente. En éste, el átomo estaba constituido por una distribución continua de cargas positivas y por partículas negativas, siendo la distribución continua de carga positiva la que tendrían mayor masa dentro del átomo y a la vez, mayor volumen. En este *plum-pudding* los electrones se encontrarían en unas posiciones fijas pero en número suficiente para que el conjunto resultara neutro. De esta forma este modelo explicaba la formación de iones positivos o negativos, la electricidad estática y la corriente eléctrica.

Posteriormente, **Rutherford**, comprobando la validez del modelo de Thomson bombardeando con partículas α , núcleos de He, procedentes del Radio una lámina de oro, da una nueva interpretación para el átomo. En el *modelo nuclear de Rutherford* no existe tal distribución continua de carga positiva, sino que la totalidad de la carga positiva se encontraba en un núcleo central y los electrones giraban alrededor para no caer sobre él por atracción eléctrica. El modelo que explica muy bien los efectos eléctricos del átomo descubierto hasta el momento, carecía de un peso teórico fundamental ya que según las leyes del electromagnetismo clásico, el electrón al girar debería emitir energía radiante, perdiendo energía y cayendo sobre el núcleo.

Ambos modelos fueron incapaces de explicar los espectros atómicos, interacción de la luz con la materia descubiertos por Balmer en 1860, puesto que en estos modelos, la energía podía tomar cualquier valor.

1.4.1. EL MÓDELO CUÁNTICO DE BOHR

Niels Bohr, en 1913, explicó el espectro del átomo de hidrógeno al aplicar la teoría cuántica de Planck al modelo de Rutherford. La visión de Bohr del átomo se fra-

guo en una idea, **el átomo estaba cuantizado**, esto es, sólo podía tener ciertas cantidades de energía permitidas. Los postulados de su modelo son:

1. El electrón gira alrededor del núcleo en órbitas circulares sin emitir energía radiante, en ellas los electrones poseen una energía determinada.
2. Sólo son posibles (o estables) aquellas órbitas en las que el electrón tiene un momento angular, $L = mvr$, múltiplo entero de $h/2\pi$.

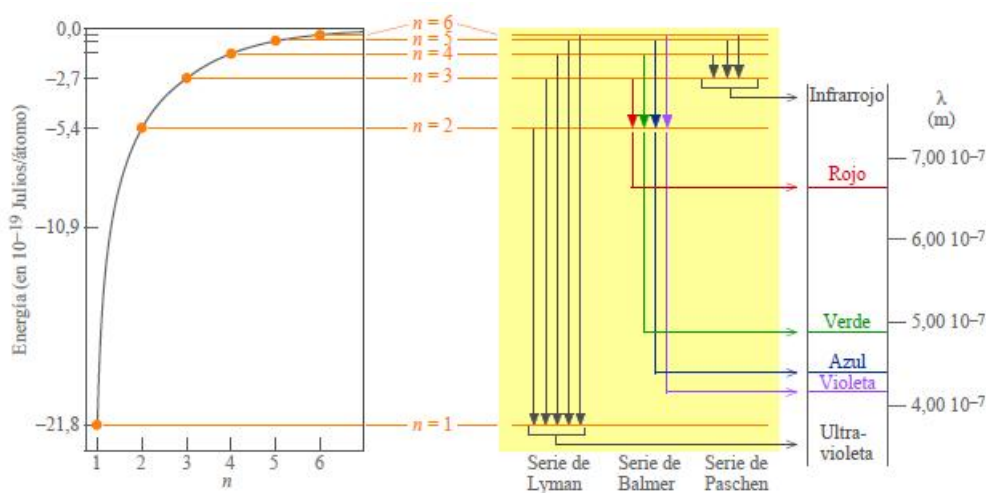
Siendo $n = 1, 2, 3, \dots$ se obtienen los radios de las órbitas permitidas. Con $n = 1$ tenemos la órbita de menor radio y el estado fundamental (más estable) del hidrógeno.

3. La energía liberada al caer un electrón desde una órbita a otra de menor energía se emite en forma de fotón, cuya frecuencia viene dada por la ecuación de Planck. $\Delta E = E_i - E_f = h\nu$.

Si calculamos la energía total del electrón (cinética más potencial), ésta nos quedará en función del valor n .

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

Donde $R_H = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$. Normalmente se trabaja con espectros de emisión, de ahí que tengamos las series de Lyman, Balmer, Paschen, ... si la caída del electrón se realiza sobre el nivel $n=1$, $n=2$, $n=3$, ... respectivamente.



Energía de las orbitas y series espectrales

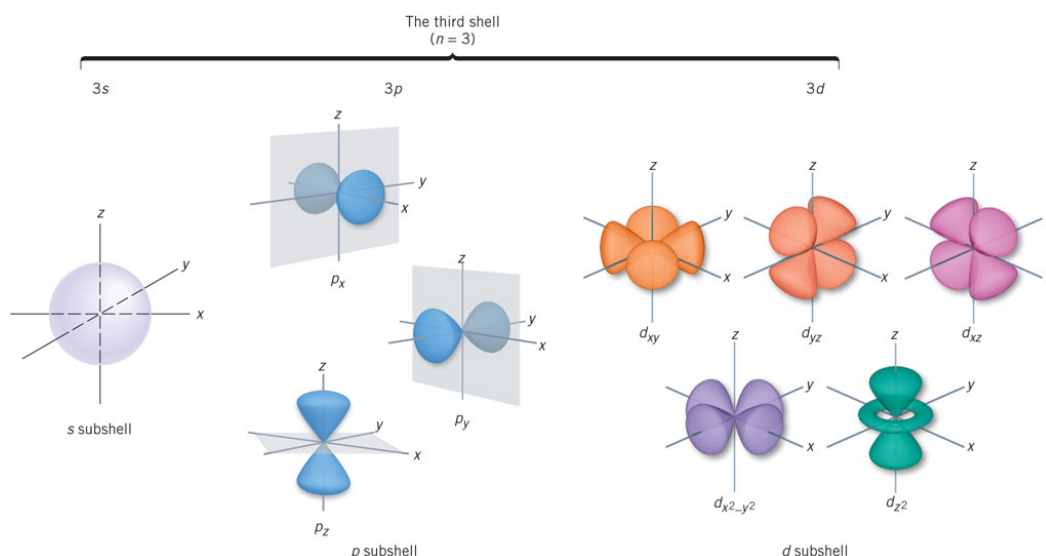
Sin embargo, este modelo sólo se pudo aplicar al átomo de hidrógeno y átomos monoeléctricos, además el segundo postulado era más que arbitrario.

1.4.2. MODELO MECANOCUÁNTICO

El modelo actual para el estudio de la materia viene marcado por la mecánica cuántica. Ésta, nos describe el comportamiento, la energía de las partículas subatómicas y la estructura de éstas. Así, nos encontramos que los electrones en su movimiento se pueden describir mediante diferentes niveles energéticos que se denominan **orbitales atómicos**. Para describir estos orbitales se utilizan tres números cuánticos, n, l, m_l , es decir, cada trío de estos números representa un orbital. Las características de cada número cuántico son:

- **Número cuántico principal, n** Este número representa el nivel energético dónde se encuentra el electrón y el tamaño de éste. Puede tomar valores $1, 2, 3, \dots$. Estos niveles se estructuran en capas que se corresponden con los periodos del sistema periódico; así, $n = 1 \rightarrow \text{capa K}$, $n = 2 \rightarrow \text{capa L}$, $n = 3 \rightarrow \text{capa M}$, \dots . El número de orbitales situado en un mismo nivel energético es igual a n^2 .
- **Número cuántico azimutal o secundario o de momento angular, l** Toma valores desde $0, \dots, (n-1)$. Representa la forma del orbital y el subnivel energético en donde está el orbital, su valor se representa mediante letras, $l = 0$ (orbital s (sharp)), $l = 1$ (orbital p (principal)), $l = 2$ (orbital d (difuse)), $l = 3$ (orbital f (fundamental)), \dots . Este tipo de notación se conoce como notación espectral.
- **Número cuántico magnético, m_l** Describe la orientación del orbital en el espacio y puede tomar los valores $-l, \dots, 0, \dots, +l$. Para cada valor de l existen $(2l + 1)$ valores de m_l . Los orbitales con igual n y l se dice que están degenerados, esto es, que tienen igual Energía.

La forma, geometría y orientación para los posibles orbitales del número cuántico principal $n=3$ quedan representados en la siguiente figura. Podemos observar la forma esférica del orbital s , las lobulares de los orbitales p y d y además, la dirección espacial de estos últimos.



Forma y geometría de los orbitales para n=3

Con el desarrollo de las técnicas espectroscópicas, se observó como se desdoblaban las líneas espectrales de un átomo al introducirlo en un campo magnético (efecto Zeeman). Su estudio, dio lugar a otro número cuántico correspondiente al giro del electrón sobre su propio eje denominado número cuántico de spin, m_s . Los valores que puede tomar son $+1/2$ y $-1/2$. Por tanto, el número máximo de electrones por nivel es $2n^2$.

Finalmente, para realizar la distribución electrónica en un átomo hay que tener en cuenta tres principios fundamentales:

1.4.2.1. PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI

El *principio de exclusión de Pauli* nos dice que en un sistema cuántico (átomo o molécula) no pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales. De ahí, que un orbital solamente puede ocuparse con dos electrones, los cuales comparten 3 números cuánticos y difieren en el número cuántico de spin.

1.4.2.2. PRINCIPIO DE MÁXIMA MULTIPLICIDAD DE HUND

Indica que para orbitales de igual energía (p, d, f, \dots), los electrones tienden a estar desapareados manteniendo spines paralelos mientras queden orbitales libres.

1.4.2.3. PRINCIPIO DE AUFBAU (Diagrama de Moeller)

La distribución electrónica de un elemento en su estado fundamental muestra como los electrones entran en el átomo en los distintos orbitales de energía ocupando

primero los de menor energía. Al irse llenando los orbitales por los electrones, la repulsión que se genera por la mayor densidad electrónica modifica la energía de los orbitales, ésta disminuye y se estabilizan.

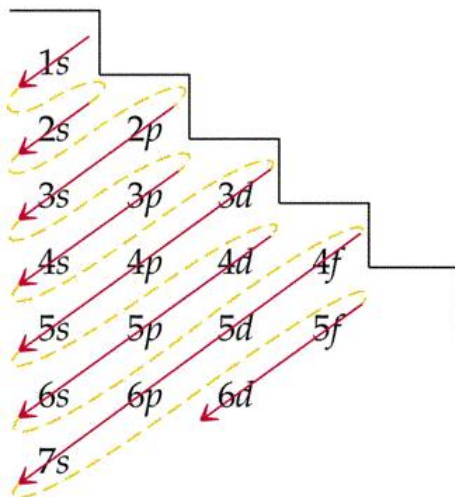


Diagrama de Moeller

1.5. PROBLEMAS PROPUESTOS

1. Una radiación de 300 nm que incide sobre una lámina de cinc es capaz de provocar la ionización del metal. Determina la frecuencia y Energía de la radiación incidente. Datos: $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$; $c = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$

Gracias a la relación entre la longitud de onda, la frecuencia de la onda electromagnética y la Ley de Planck, podemos averiguar rápidamente ambas soluciones.

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = 1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$E = h\nu = 6,62 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

2. La diferencia energética entre dos niveles de la corteza del átomo de hidrógeno es $0,30 \cdot 10^{-18} \text{ J}$. Determina la longitud de onda de la radiación emitida cuando un electrón pasa del nivel superior de energía al nivel inferior. ¿A qué zona del espectro electromagnético corresponde?

De nuevo aplicamos la Ley de Planck para hallar la frecuencia y posteriormente la longitud de la onda

$$\Delta E = h\nu \Rightarrow \nu = 4,52 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \lambda = 6,64 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

La frecuencia y/o longitud de onda muestran que la emisión corresponde a la región visible del espectro, más concretamente, al color rojo.

3. Calcula la Energía de las transiciones electrónicas responsables de la primera y segunda líneas de Balmer. Datos: $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$; $R_H = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$.

Las primeras transiciones de Balmer se corresponden con las transiciones electrónicas que van desde la órbita $n=3$ a $n=2$ (primera línea) y $n=4$ a $n=2$ (segunda línea). Utilizamos la expresión energética que da la diferencia de energía entre dos orbitas en el modelo de Bohr.

$$E_{3 \rightarrow 2} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 3,03 \cdot 10^{-19}$$

$$E_{4 \rightarrow 2} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 4,09 \cdot 10^{-19}$$

4. Dados los valores de números cuánticos: $(4,2,3,-1/2)$; $(3,2,1,1/2)$; $(2,0,-1,1/2)$; y $(1,0,0,1/2)$:
- Indique cuáles de ellos no están permitidos.
 - Indique el orbital en el que se encontrarían los electrones definidos por los valores de los números cuánticos permitidos.
- a) Para resolver este apartado hay que tener en cuenta las reglas de selección de los números cuánticos. Así, teniendo en cuenta que el valor de $n = 0, 1, 2, \dots$, $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$, $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$ y que $m_s = \pm \frac{1}{2}$, tenemos que para los cuartetos dados, el primero y el tercero no cumplen con las reglas y por tanto, no están permitidos.
- b) El orbital en el que se encuentra el electrón para el segundo cuarteto es el $3d_1$ y el del cuarto, el $1s$. Recordar que el orbital está definido por los tres primeros números cuanticos, los cuales dan la energía del orbital, la forma y la dirección.
5. Razone cuáles de las siguientes configuraciones electrónicas cumplen el principio de exclusión de Pauli en el estado fundamental:
- $1s^2 2s^2 2p^7$
 - $1s^2 2s^3$
 - $1s^2 2s^2 2p^5$
 - $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

El principio de exclusión de Pauli expresa que *como máximo, un orbital sólo puede estar ocupado por dos electrones y estos con disinto número cuántico de spin*. Por tanto,

- Configuración electrónica incorrecta. El orbital p , formado por tres orbitales p (uno en cada dirección del espacio), sólo puede estar ocupado por 6 electrones.
- Configuración electrónica incorrecta. El orbital s sólo admite 2 electrones.
- Configuración electrónica correcta.
- Configuración electrónica correcta.