

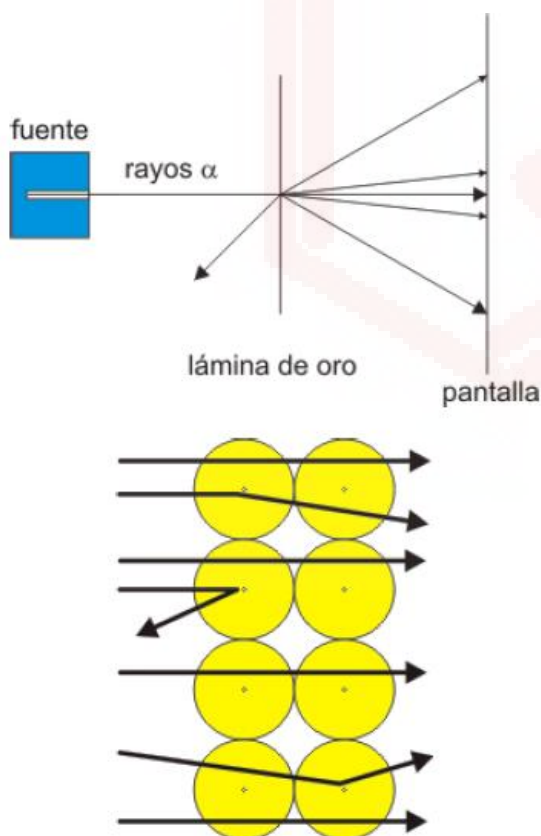


TEMA 1.EL ÁTOMO.

HISTORIA DEL ÁTOMO

El conocimiento de la estructura atómica es fundamental para poder entender el comportamiento químico de las sustancias. El descubrimiento de las partículas subatómicas como los protones, los electrones y los neutrones, a finales del siglo XIX, impulsó a los químicos de la época a proponer modelos para explicar cómo estaban constituidos los átomos.

El primer modelo atómico fue propuesto por **Thompson** a finales del siglo XIX. Según Thompson, los átomos eran esferas macizas, cargadas positivamente, en las que se encontraban embebidos los electrones. Años más tarde, en 1911, un estudiante de doctorado de Thompson, llamado **Rutherford**, estableció el siguiente modelo atómico. Este modelo está basado en el experimento que se muestra en la figura.



El experimento de Rutherford

estudiosfarmaceuticos.com

J.J. Thomson, tras ciertos experimentos, descubre que los átomos anteriormente propuestos Sí son divisibles, y estos están compuestos por unas partículas positivas y otras negativas.

Por otro lado, **Rutherford** y sus colaboradores, realizaron un experimento: bombardearon una lámina con un partículas alfa , estudiando así las partículas que se desviaban. Aportan así que el átomo está, en su mayoría, vacío, conteniendo una parte positiva que es la que provoca la repulsión de las partículas y una parte dispersa que sería la correspondiente a la negativa.



Explica la masa atómica (electrones + protones) y cuantifica el tamaño de los átomos que descubre **Chadwich**, propone la existencia de neutrones.

Monseley, irradia un elemento puro con un haz de electrones y produce los llamados rayos X. Los analiza y se encuentra con una relación entre la intensidad de los rayos X y un número al que llama número másico (protones + neutrones).

Además encuentra una relación entre la frecuencia de las líneas del espectro con el número atómico que corresponde a las cargas positivas.

Z = nº de protones = nº de electrones. → nº másico.

A = nº de protones + nº de neutrones → peso atómico.

ESPECTROS ATÓMICOS.

Es un conjunto de líneas que indican las frecuencias que el átomo absorbe o emite distintas energías.

Las teorías anteriores no explicaban muchas de las cosas de los espectros.

Fue entonces cuando **Plank**, en 1900, propuso la discontinuidad de la energía, que no se absorbe ni se emite de forma continua, sino que viene dada por paquetes, o cuantos de Plank.

$$E = h \cdot \nu \quad \begin{aligned} h &= 6.626 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s} \\ h &= 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ j.s} \end{aligned}$$

Si una línea aparece en el espectro de **absorción**, ésta, no aparecerá en el de **emisión**, ya que ambos son complementarios.

El hecho de que aparezcan las líneas del espectro, se debe a la transición de electrones de unos niveles a otros, emitiendo o absorbiendo energía.

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h \cdot \nu$$

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

$$\nu = \frac{1}{\lambda}$$

$$E = h \cdot \nu \cdot c$$

Como vieron la regularidad de las líneas, las agruparon en series:

Lyman: hasta n=1

Balmer: hasta n=2

Paschen: hasta n=3

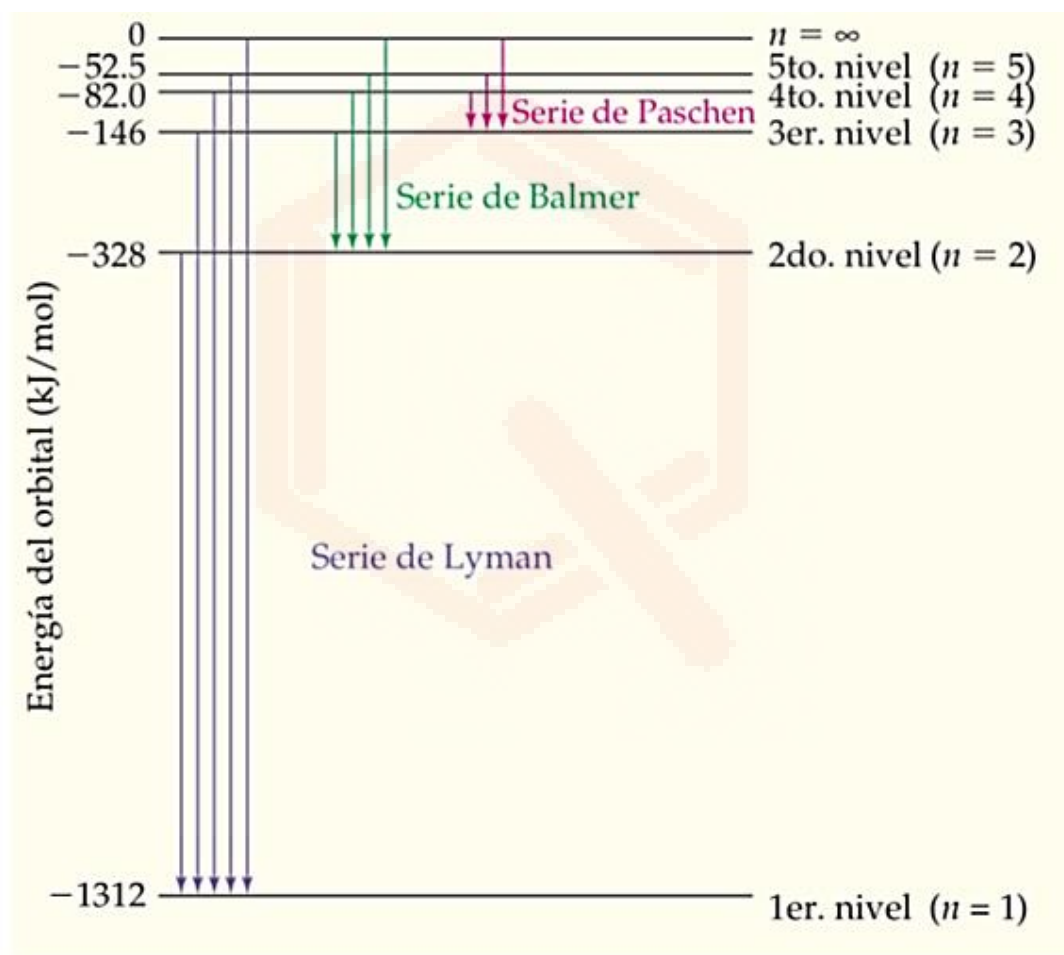
Bracket: hasta n=4

Pfund: hasta n=5



Y siguiendo estos experimentos, Rydberg, encuentran una relación:

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right) \quad R = 1,0973 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$$



Las diferentes series espectrales corresponden a transiciones electrónicas desde orbitales de niveles externos a distintos niveles internos

1. Serie ultravioleta (**Lyman**):

$$\bar{\nu} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3, 4, 5 \dots$$

2. Serie visible (**Balmer**):

$$\bar{\nu} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5 \dots$$

3. Serie infrarroja (**Paschen**):

$$\bar{\nu} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, 6 \dots$$



4. Serie Bracket

$$\bar{\nu} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, 6, 7 \dots$$

Así, se dan cuenta de que la ecuación de Rydberg no está tan desencaminada, y emplean su constante para una forma más general, de esta forma, y ampliándolo a un campo general, podemos hablar de:

$$\bar{\nu} = Z^2 * R * \left[\frac{1}{n_o^2} - \frac{1}{n_f^2} \right]$$

Donde $R = 10^5 \text{ cm}^{-1}$: Donde $R = 10^5 \text{ cm}^{-1}$ que coincide con la constante de Rydberg

Las primeras órbitas calculadas:

$$n=1 \rightarrow 0,529 \text{ Å}$$

$$n=2 \rightarrow 2,12 \text{ Å}$$

$$n=3 \rightarrow 4,76 \text{ Å}$$

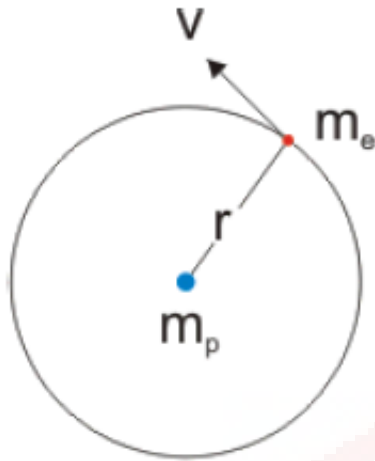
$$n=4 \rightarrow 8.46 \text{ Å}$$

En 1913, **Niels Bohr** propone un nuevo modelo atómico para poder explicar la discontinuidad de los espectros atómicos y solucionar los problemas que planteaba el modelo de Rutherford. El modelo de Bohr constaba de una serie de postulados:

- El átomo está constituido por una zona central o *núcleo* donde se concentra toda la masa y la carga positiva del átomo.
- Los electrones giran entorno al núcleo en *órbitas circulares estacionarias*, de modo que $F_c = F_a$. (F_c = fuerza centrífuga; F_a = fuerza centrípeta).
- Los electrones sólo se mueven en órbitas estables, que son aquellas cuyo momento angular presenta un valor que es un múltiplo entero de la constante de Plank:

$$H = mvr = nh/2\pi, \text{ donde } n = 1, 2, 3, \dots (n, \text{ número cuántico}).$$

estudiosfarmaceuticos.com



El átomo de hidrógeno de Bohr

Es decir, para Bohr el radio de las órbitas está *cuantizado*, de forma que el electrón no puede ocupar cualquier órbita sino aquellas que cumplan la condición señalada arriba:

$$R = \frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 m \cdot Z \cdot e^2}$$

Obviamente, si las órbitas están cuantizadas las energías correspondientes a las mismas también lo estarán:

$$E = E_c + E_p = - \frac{2\pi \cdot m \cdot Z^2 \cdot e^4}{2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

- *Los electrones que giran en órbitas estacionarias no absorben ni emiten energía durante su movimiento.* Los electrones pueden absorber o emitir energía cuando saltan de una órbita a otra de distinto radio.

estudiosfarmaceuticos.com

La teoría atómica de Bohr explica bien la estructura del átomo de hidrógeno y su espectro electrónico, pero posee varios inconvenientes, como son, su aplicabilidad exclusiva a átomos hidrogenoides (de un sólo electrón) y el suponer una mezcla, un tanto arbitraria, de la física clásica y de la física cuántica. Por otra parte, este modelo tampoco explica el efecto Zeeman, o desdoblamiento de las líneas espectrales cuando el espectro atómico se realiza bajo la acción de un campo eléctrico. Para poder explicar estos efectos se amplió la teoría de Bohr y dando lugar al modelo de Bohr-Sommerfeld, en el que las órbitas de los electrones no sólo son circulares sino también elípticas y en ellas aparecen los números cuánticos l y m .



TEORIA DE BROGLIE DE LA DUALIDAD ONDA-PARTÍCULA

En 1924 **De Broglie** presenta su teoría denominada dualidad onda-partícula: *una partícula lleva asociada siempre una onda*. La longitud de onda λ (distancia entre dos máximos consecutivos de la onda) es inversamente proporcional al momento lineal p de la partícula, de acuerdo con la siguiente expresión:

$$\lambda = h/p \longrightarrow p = h/\lambda$$

De esta relación se deduce que cuanto mayor sea el momento lineal de la partícula menor será la longitud de onda que lleva asociada

Una consecuencia más importante de la naturaleza dual de la materia es **el principio de incertidumbre de Heisenberg**. Dicho principio sostiene que *es imposible especificar, simultáneamente y con exactitud, la posición y el momento lineal de una partícula*, y se expresa matemáticamente de la forma siguiente:

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

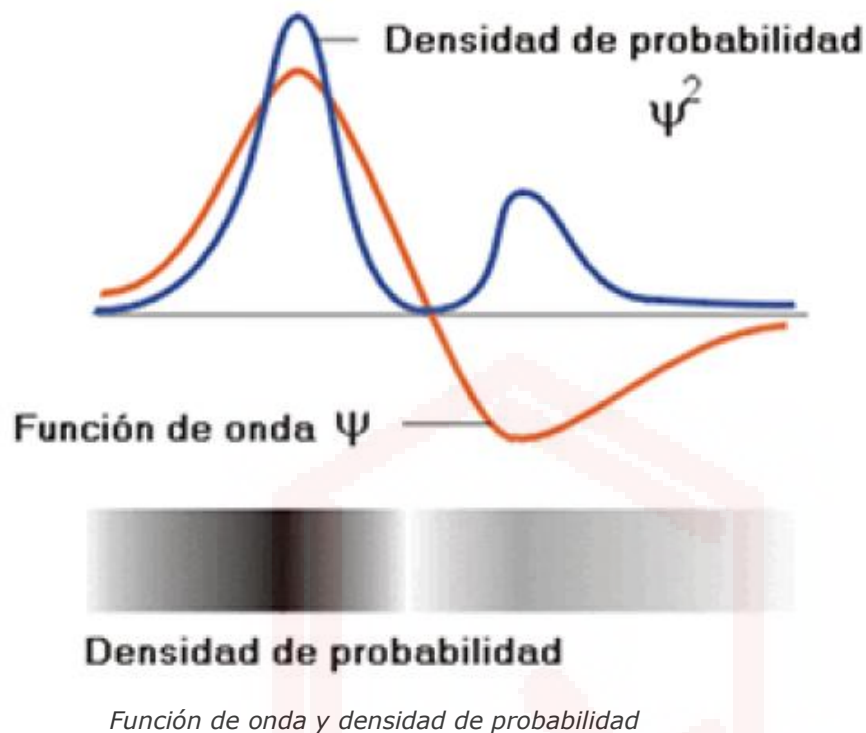
Según este principio no es posible atribuir al electrón órbitas precisas alrededor del núcleo, porque ello implicaría el conocer exactamente la posición y la velocidad del electrón en cada instante. En consecuencia, para discutir el movimiento del electrón, con una energía dada o velocidad conocida, alrededor del núcleo es necesario hablar en términos de probabilidad de encontrar a dicho electrón en una determinada posición.

LA APROXIMACIÓN MECÁNICO-CUÁNTICA

El concepto fundamental en el que se basa la mecánica cuántica es que *la materia tiene propiedades ondulatorias*. Este atributo no es evidente para objetos macroscópicos pero domina la naturaleza de partículas subatómicas como el electrón. En esta aproximación, el comportamiento de una partícula microscópica puede explicarse en términos de una **función de onda**, Ψ , que es una función matemática que depende de las coordenadas espaciales (x , y , z).

Esta función de onda sólo describe a dicha partícula si se obtiene al solucionar la **ecuación de Schrödinger**, que en su forma simplificada puede escribirse como $H\Psi = E\Psi$.

El término H es el operador Hamiltoniano, y engloba varios términos dependientes de cada sistema, mientras que el término E es la energía de la partícula. Así pues, cuando se aplica el Hamiltoniano a una función de onda, se obtiene la misma función de onda multiplicada por un valor E , que corresponde a la energía de la partícula definida mediante el Hamiltoniano.



Es muy importante destacar la inexistencia de significado físico alguno de **la función de onda Ψ** . Sin embargo, el cuadrado de la función de onda es proporcional a la probabilidad de encontrar la partícula en un volumen infinitesimal del espacio. Esto se conoce como la interpretación de Born (no confundir con Bohr).

En la figura anterior se representa gráficamente la función de **onda Ψ** así como la denominada **función de densidad de probabilidad, Ψ^2** . De acuerdo con esta interpretación, existe una elevada probabilidad de encontrar a la partícula cuando Ψ^2 es grande y la partícula no será encontrada si Ψ^2 es cero.

La consecuencia más importante de la interpretación de Born es la introducción del concepto de probabilidad, frente al concepto clásico de posición.

estudiosfarmaceuticos.com