

Tema 1. Estructura de la materia

1. Interpretación de espectros. Parámetros de una onda

Velocidad de propagación $v = \lambda \nu$ donde λ longitud de onda, es la distancia entre dos máximos ó dos mínimos sucesivos en la onda. Se mide en metros.

Periodo T tiempo que tarda en recorrer la longitud de onda (segundos)

Frecuencia número de oscilaciones, que pasan por cada punto en la unidad de tiempo (Hercios Hz).

Número de ondas, es la inversa a la longitud de onda. Es el número de oscilaciones que hay en la unidad de longitud.

Regiones del espectro electromagnético: a) radiaciones ionizantes (uv, rayos X), b) visibles, c) radiaciones no ionizantes (rayos infrarrojos, microondas, radiofrecuencias)

2. Hipótesis cuántica de Planck

Un átomo absorbe o emite cantidades discretas de energía o cuantos. La energía de cada cuanto, es proporcional a su frecuencia ν . $E = h \nu$.

La energía de la radiación es discontinua y está cuantizada.

3. Efecto fotoeléctrico

El efecto fotoeléctrico, es la capacidad que tienen algunos metales de emitir electrones al ser sometidos a la radiación de una onda cuya frecuencia es superior a una frecuencia mínima o frecuencia umbral.

Según la interpretación de Einstein, la luz está compuesta por partículas o fotones, cuya energía es proporcional a su frecuencia. Así la energía de la luz incidente = energía umbral o trabajo de extracción del metal + la energía cinética de salida del electrón.

La ecuación que interpreta el fenómeno es $h \nu = h \nu_0 + \frac{1}{2} m_e v^2$.

4. Espectros atómicos: son espectros discontinuos. Pueden ser de emisión (luz que emite un átomo excitado cuando vuelve a su estado fundamental) o de absorción (luz que absorbe un átomo en estado fundamental para pasar a un estado excitado). El espectro del Hidrógeno viene determinado por la ecuación de Rydberg:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

donde m y n son números enteros mayores de 1 .

Series del espectro del hidrógeno: Lyman, Balmer, Paschen, Bracket y Pfund.

5. Modelo atómico de Bohr

Es un modelo precuántico, ya que se basa en la Física clásica, aunque introduce la hipótesis cuántica de Planck. Se basa en tres postulados:

- 1) los electrones se mueven en orbitas esféricas y estables. La Fuerza de atracción electrostática se ve compensada por la fuerza centrífuga.
 $mv^2/r = KZe^2/r^2$
- 2) el momento angular orbital esta cuantizado $L = mvr = n h/2\pi$ $r = A n^2$. El radio de las orbitas permitidas depende el número cuántico principal n .
- 3) Un electrón puede saltar de una orbita a otra, emitiendo o absorbiendo energía según el modelo de Planck. $E_{n2} - E_{n1} = h \nu$ donde $E = - B/n^2$

Interpreta correctamente el espectro del hidrógeno; y calcula la constante de Rydberg desde un punto de vista teórico.

6. Números cuánticos. Correcciones al modelo de Bohr

Según el modelo de Bohr del **número cuántico principal** n depende el radio de la orbita, y la energía del electrón en la orbita. $r = An^2$ y $E = - B/n^2$.

Para explicar la estructura hiperfina de los espectros Sommerfield introduce el **número cuántico secundario**, permitiendo la existencia de orbitas elípticas. Este número cuántico está relacionado con la excentricidad de la elipse y toma valores $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

- Si $l=0$ el orbital es s ,
- si $l=1$ el orbital es p ,
- si $l=2$ el orbital es d ,
- si $l=3$ el orbital es f .

El **número cuántico magnético** m está relacionado con la orientación de las orbitas respecto a un campo magnético externo. Se introduce para explicar el efecto Zeeman y toma valores de $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$.

El **número cuántico de spin** s que toma valores de $s = \pm 1/2$ y está relacionado con el giro del electrón sobre sí mismo.

7. Modelo mecano cuántico

Se basa en tres principios:

a) Dualidad onda-corpúsculo. Luis de Broglie

$$E = m c^2; \quad E = h \nu = h c/\lambda \text{ de donde } \lambda = h/mv$$

Cada partícula lleva una onda asociada, cuya longitud de onda depende de la constante de Planck y del momento lineal de la partícula.

b) Principio de incertidumbre.

Es imposible conocer la posición y el estado de movimiento del electrón en un átomo. $\Delta x \Delta p_x \geq h/2\pi$. En el modelo mecano cuántico, se habla de probabilidad de encontrar al electrón en un punto o en una zona.

c) Ecuación de Schrödinger

Schrödinger pretende conocer la posición de un electrón en un átomo, resolviendo la ecuación de ondas, asociada al electrón $H\psi = E\psi$. Los números cuánticos aparecen como condiciones de contorno que dan significado físico a la ecuación de ondas. $\Psi = \psi(n, l, m)$. ψ^2 representa la probabilidad de encontrar al electrón en una determinada zona. Se define el orbital como una zona del espacio donde existe una gran probabilidad de encontrar al electrón. Así los orbitales *s* son esféricamente simétricos, mientras que los orbitales *p* son los que se concentran a lo largo de los ejes coordinados.

8. Configuraciones electrónicas

Se basan en la distribución de los electrones en los átomos. Se basan en tres principios:

- a) Principio de exclusión de Pauli: en un átomo no pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales.
- b) Principio de construcción: los electrones rellenan los orbitales por orden creciente de energía. El orden de energía creciente depende de los valores de los números cuánticos $n + l$. En ellos se basa el diagrama de Moeller.
- c) Regla de máxima multiplicidad de Hund. Cuando los electrones rellenan los orbitales del mismo valor de *l* y distinto valor de *m*, y por tanto de la misma energía se sitúan lo mas desapareados posibles.

9. Clasificación periódica de los elementos

Las propiedades químicas de los distintos elementos dependen de su número atómico. En cada grupo se sitúan elementos que tienen el mismo número de electrones en su capa de valencia; mientras que los periodos están formados por elementos que van completando la misma capa. Existe una clara correspondencia entre la posición de un elemento en el sistema periódico y sus configuraciones electrónicas.

10. Propiedades periódicas

Energía de ionización es la energía que hay que suministrar a un átomo en estado gaseoso y fundamental para arrancarle su electrón más externo.

En los elementos de un mismo periodo, al aumentar Z , aumenta la energía de ionización, como consecuencia del aumento de la carga nuclear efectiva.

$Z_{ef} = Z - \sigma$ donde σ tiene en cuenta el apantallamiento de los electrones internos.

Si bajamos en un grupo, disminuye la energía de ionización, ya que al aumentar el radio disminuye la fuerza atractiva del núcleo sobre los electrones.

Afinidad electrónica es la energía que se desprende cuando un átomo en su estado gaseoso y fundamental capta un electrón y se transforma en un ión negativo.

En los grupos aumenta al aumentar Z , a consecuencia del aumento de la carga nuclear efectiva, y en los grupos disminuye al descender en el grupo, ya que los electrones se sitúan mas lejos del núcleo, y por tanto éste los atrae con menos fuerza.

Electronegatividad es la capacidad que tiene un átomo para atraer hacia sí el par de electrones de un enlace. En los periodos aumenta de izquierda a derecha, y disminuye al bajar en un grupo. La escala mas utilizada es la de Pauling, que da valores a los elementos del 2º periodo, partiendo del 1 para el Li y llegando a 4 para el F. El elemento menos electronegativo es el Fr con un valor de 0,7. El H tiene un valor de 2,1 y los metales valores ≤ 2 .

Radio atómico

Radio metálico es la mitad de la distancia internuclear en las redes metálicas.

Radio de los no metales, es la mitad de la distancia de enlace de una molécula homonuclear, unida por enlace covalente, por lo que se le llama radio covalente.

Los radios aumentan al descender en un grupo, y disminuyen al avanzar en un periodo a consecuencia del aumento de la carga nuclear efectiva.

Radios iónicos

Los cationes tienen radios menores que los átomos neutros; mientras que los aniones tienen radios mayores, que los átomos neutros.

Para iones isoelectrónicos, los radios iónicos disminuyen al aumentar la carga en el catión; y por la misma razón aumentan al aumentar la carga en el anión.