

Capítulo 1. Antecedentes de la Química Cuántica y primeras Teorías Atómicas

Objetivos:

- Recordar y actualizar los conocimientos sobre las características de electrones, protones y neutrones
- Describir la estructura del átomo y definir el número atómico y el de masa. Comprender la naturaleza de los isótopos.
- Introducir y analizar hechos experimentales que permitan entender la dualidad onda-partícula de la luz
- Introducir y analizar hechos experimentales que permitan entender la cuantización de la energía
- Analizar brevemente la primera teoría “cuántica” sobre la estructura del átomo (Bohr). Subrayar la necesidad del establecimiento de otra teoría distinta de la mecánica clásica que permita dar una explicación adecuada al comportamiento de átomos y moléculas.

Conceptos de estudio individualizado

- El descubrimiento de los electrones. ¿Qué son los rayos catódicos?¿cómo se producen?¿cómo midió J. Thompson la relación carga/masa del electrón?¿cómo midió Millikan la carga del electrón?
- El descubrimiento del protón. ¿Qué son los rayos canales?¿cómo se producen?
- ¿Qué es la radiactividad?¿cuántos tipos de radiación hay y cuales son sus características?
- Experimentos de Rutherford para explicar la estructura del átomo.
- El descubrimiento del neutrón.
- La organización de los átomos de acuerdo con la Tabla Periódica de los Elementos.

Bibliografía

Química General.Vol 1. Enlace Químico y Estructura de la Materia. 8ª Ed. R.H. PETRUCCI, W.S. HARWOOD, F.G. HERRING. Prentice Hall. Madrid. 2002

Química y Reactividad Química. 5ª ed. J. C. KOTZ, P.M. TREICHEL. Ed. Paraninfo-Thomson Learning. Madrid. 2003

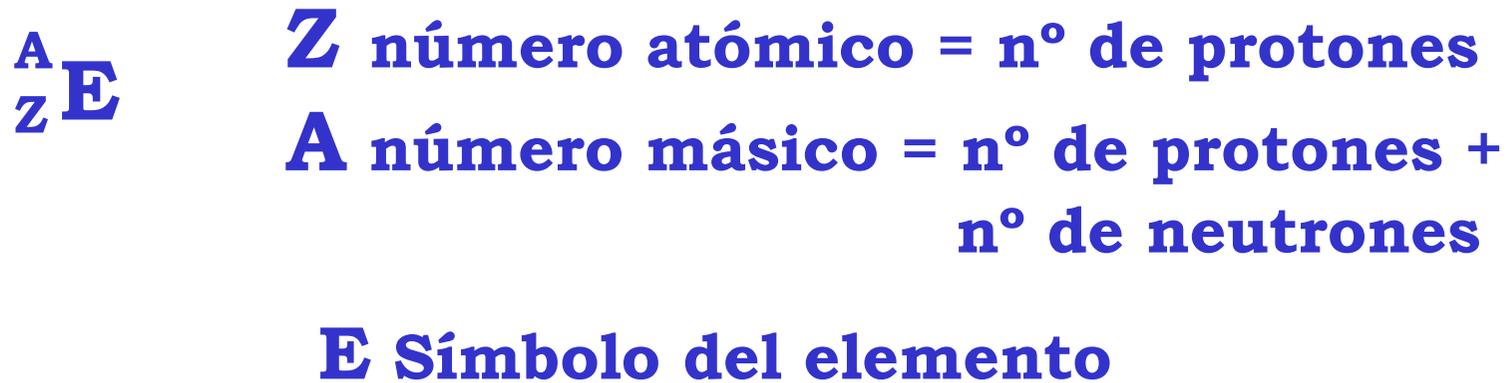
Enlace Químico y Estructura Molecular, O. MÓ, M. YÁNEZ, 2ª ed., Cálamo Producciones Editoriales, 2002

Características de electrones protones y neutrones

	Carga eléctrica		Masa		Espín
	SI (C)	Atómica	SI(g)	Atómica (uma)	
Protón	+1,6021 10⁻¹⁹	+1	1,6725 10⁻²⁴	1,0073	1/2
neutrón	0	0	1,6748 10⁻²⁴	1,0087	1/2
electrón	-1,6021 10⁻¹⁹	-1	9,1091 10⁻²⁸	0,0005486	1/2

(uma). Unidad de masa atómica = (1/12) masa del Carbono-12
1 uma = 1,661.10⁻²⁴ g

Notación de los isótopos de un elemento:



Iones:



Cuestiones para el seminario:

¿Cómo contribuye cada isótopo a la masa atómica de un elemento?

¿Qué es la espectrometría de masas?

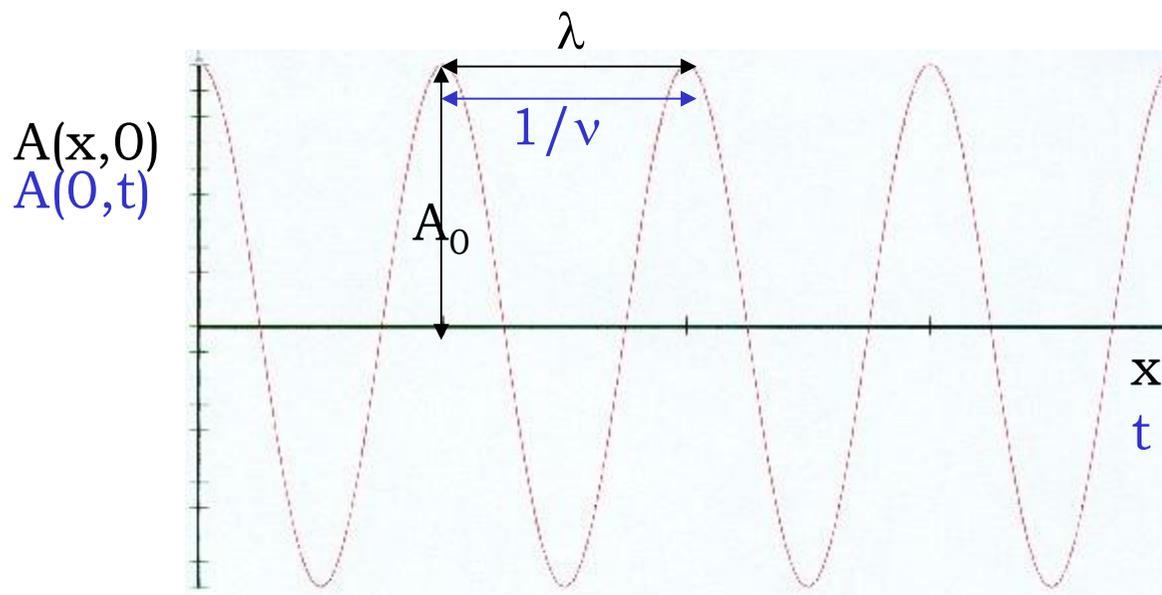
Cap2. Petrucci

(Introducción de repaso) (cap 9 petrucci)

Onda: perturbación periódica que se transmite a través de un medio o del vacío.

$$A(x,t) = A_0 \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right]$$

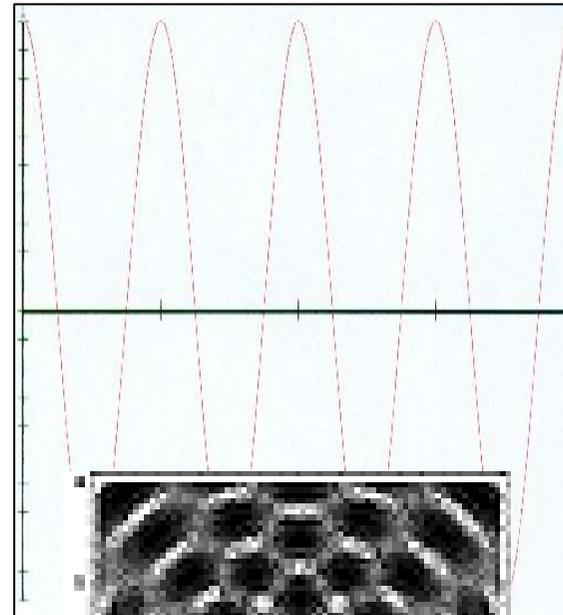
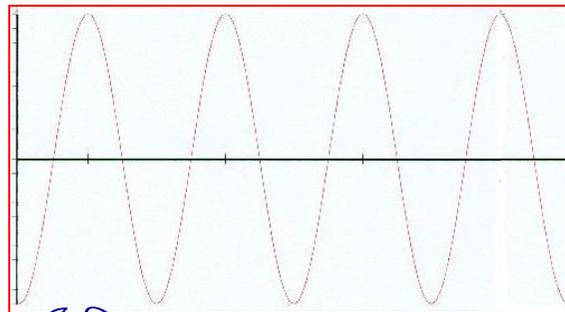
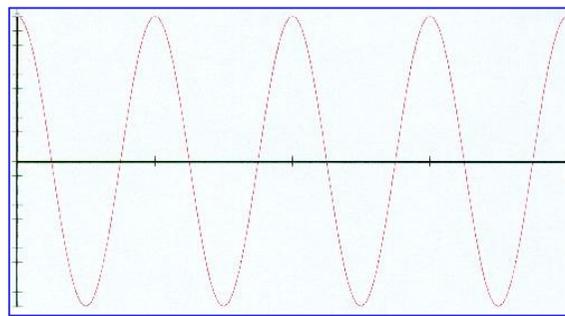
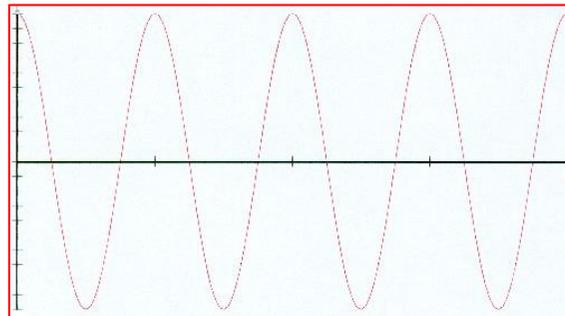
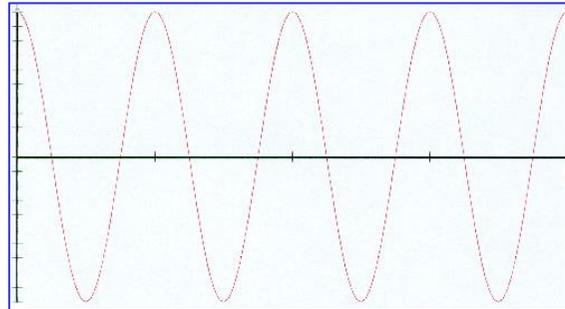
Ecuación de una onda monodimensional



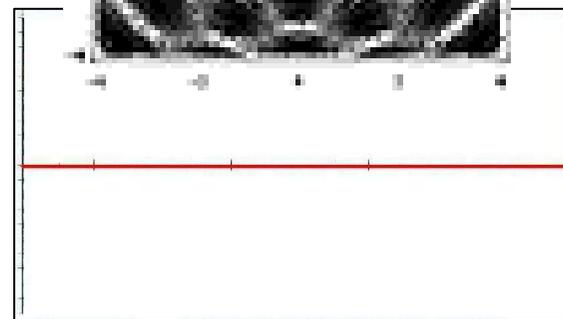
A_0 = Amplitud
 λ = longitud de onda (L)
 $1/\nu = \tau$ = periodo (T)
 ν = frecuencia (T^{-1})
 s^{-1} = Herz; Hz

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

ν = velocidad de propagación
(depende del medio)



Interferencia constructiva, Ondas en fase



Interferencia destructiva, Ondas en oposición de fase

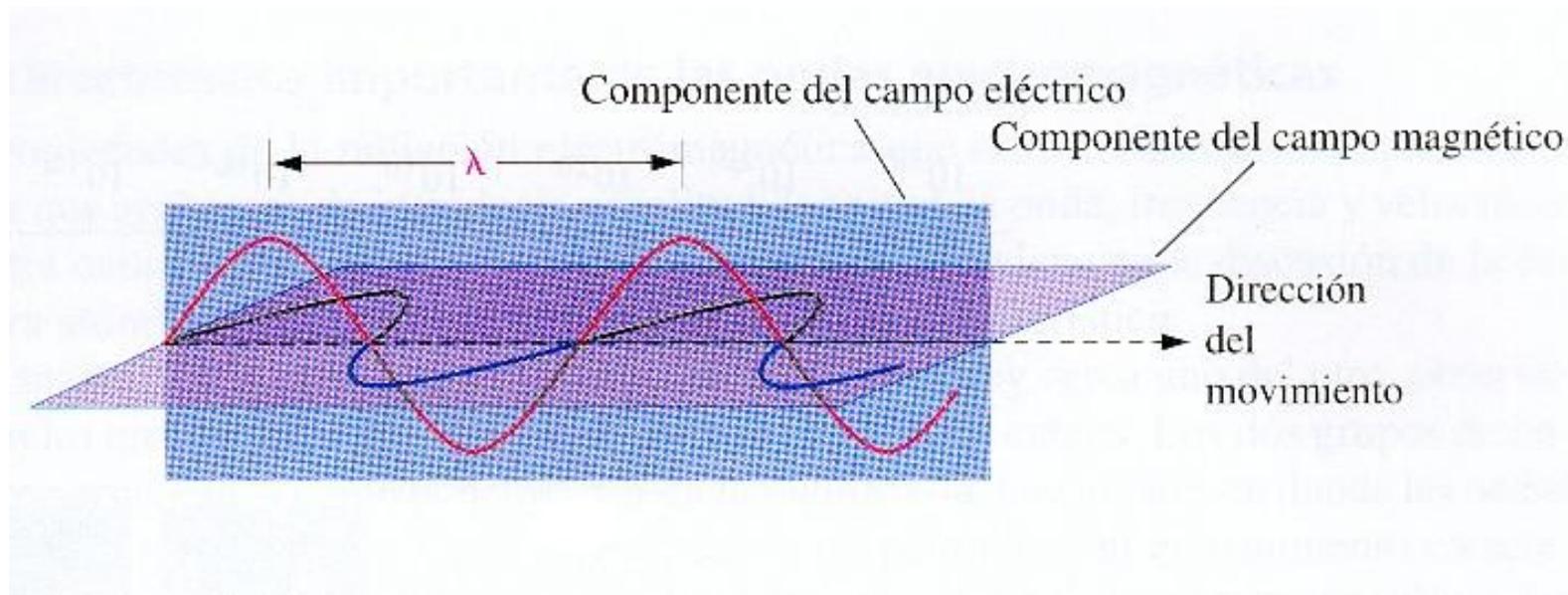
Interferencias. Propiedad característica de las ondas

La radiación electromagnética (luz):

Teoría clásica del electromagnetismo de Maxwell:

radiación electromagnética (luz polarizada) son dos campos oscilantes en fase y situados en planos perpendiculares uno eléctrico y otro magnético.

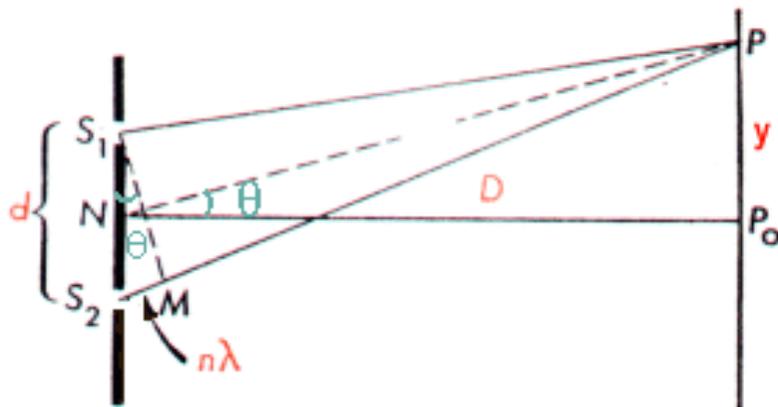
<http://acacia.pntic.mec.es/~jrui27/interf/emwaves/emWave.html>



La radiación electromagnética: naturaleza ondulatoria

<http://acacia.pntic.mec.es/~jrui27/interf/young.htm>

Interferencias de Young



Esquema del experimento de *interferencias* de Young de un rayo de luz que pasa por dos rendijas

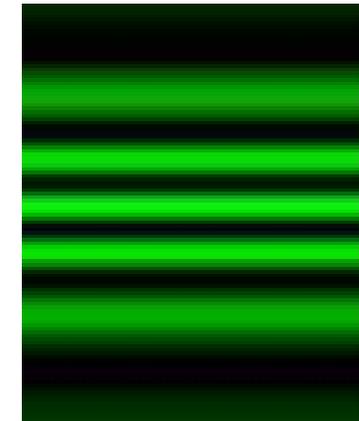


Figura de interferencia

Condición de interferencia constructiva:

$$n\lambda = d \sin \theta \quad ; n = 1, 2, 3, \dots$$

Para ángulos pequeños: $\tan \theta \cong \sin \theta$

Puntos de intensidad máxima: $y = n \frac{\lambda D}{d}$

La radiación electromagnética: naturaleza ondulatoria

Fenómenos de refracción y dispersión de la luz:

$$n = \frac{c}{v}$$

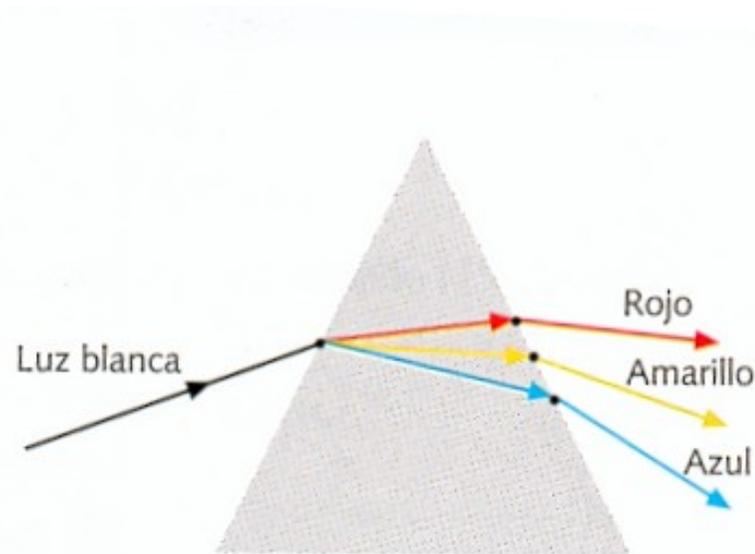
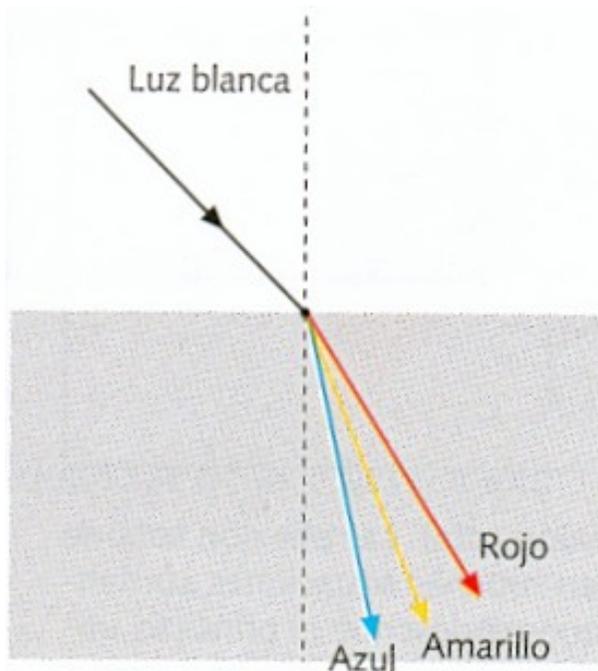
n = índice de refracción;

¿Qué es la difracción?

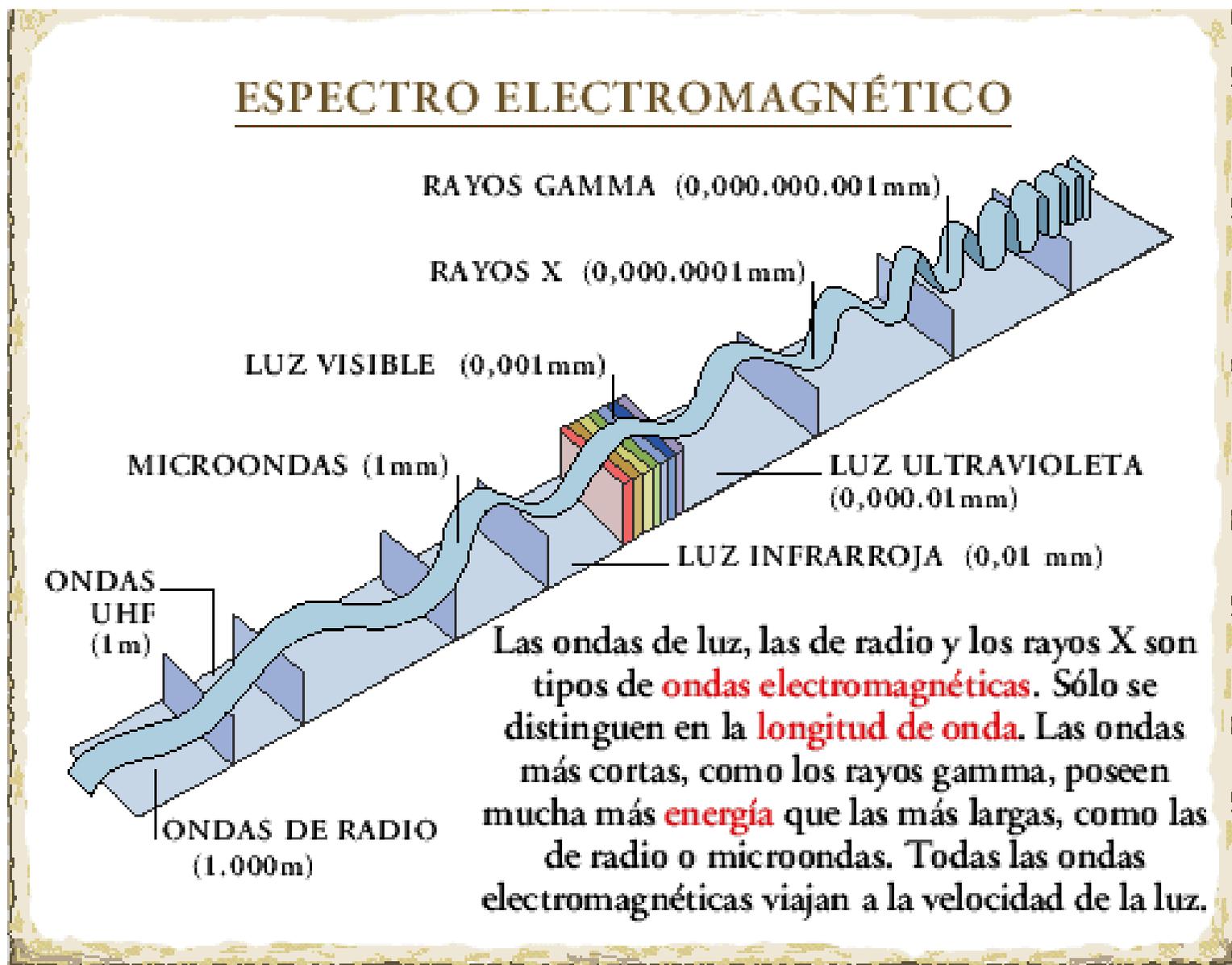
c = velocidad de propagación en el vacío= $2,997925 \cdot 10^8 \text{m.s}^{-1}$

v = velocidad de propagación en el medio

(depende de la frecuencia de la radiación)

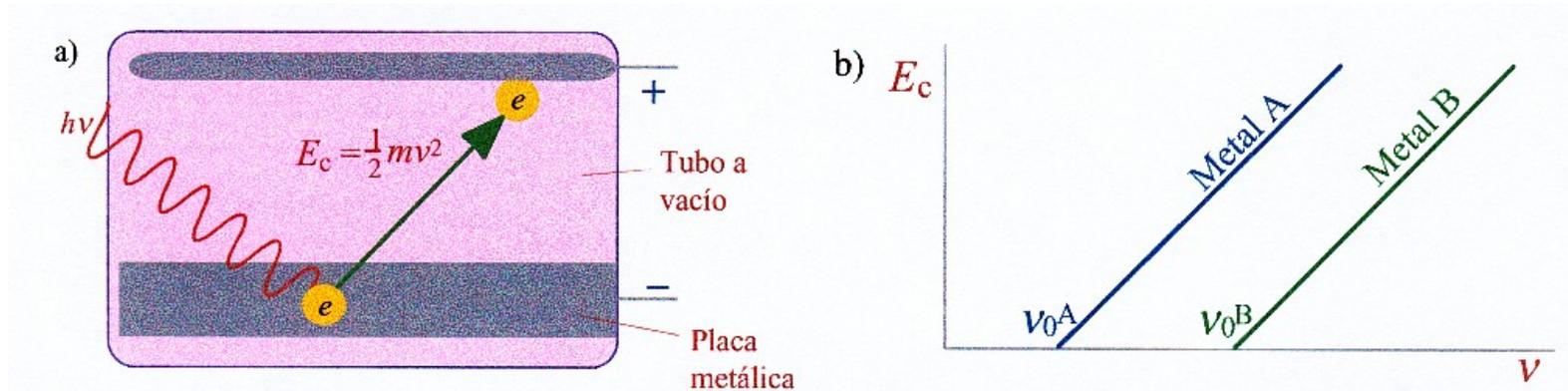


La radiación electromagnética: el espectro electromagnético



Radiación electromagnética: naturaleza corpuscular (material)

El efecto fotoeléctrico



ν_0 = frecuencia umbral, característica de cada metal

- La intensidad de corriente es nula si la radiación no excede una cierta ν_0
- Superada la ν_0 se produce expulsión de e y la intensidad de corriente es proporcional a la intensidad de la misma
- La energía cinética de los e aumenta linealmente con la frecuencia de la radiación incidente pero es independiente de su intensidad

Hipótesis de Einstein: Luz está compuesta por “partículas”, **fotones**,

$$h\nu = \Theta + \frac{1}{2}mu^2$$

de **energía**= $h\nu$;

h =constante de Planck= $6,62607 \cdot 10^{-34}$ J.s

$$h\nu_0 = \Theta$$

Θ = **Trabajo umbral**

u = **velocidad del electrón**

<http://acacia.pntic.mec.es/~jrui27/interf/fotoelectrico/fotoelectrico/fotoelectricojesus.htm>

Radiación electromagnética: naturaleza corpuscular (material)

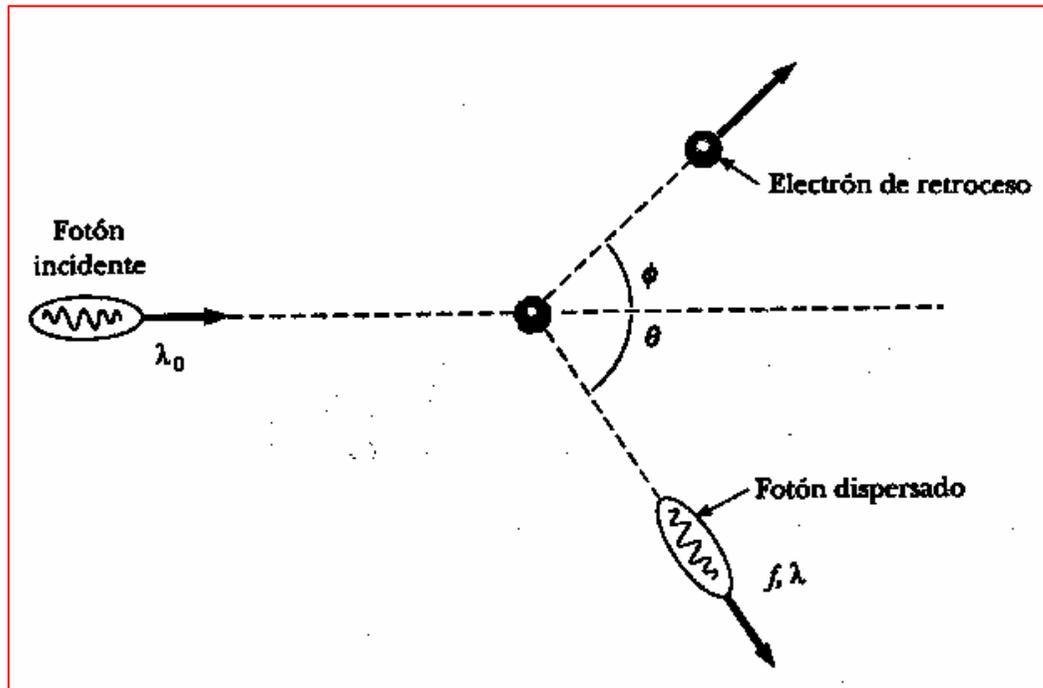
El efecto Compton (choque elástico entre dos partículas: fotón y electrón)

El fotón tiene una masa en reposo nula

Su energía = $p.c$; p = momento

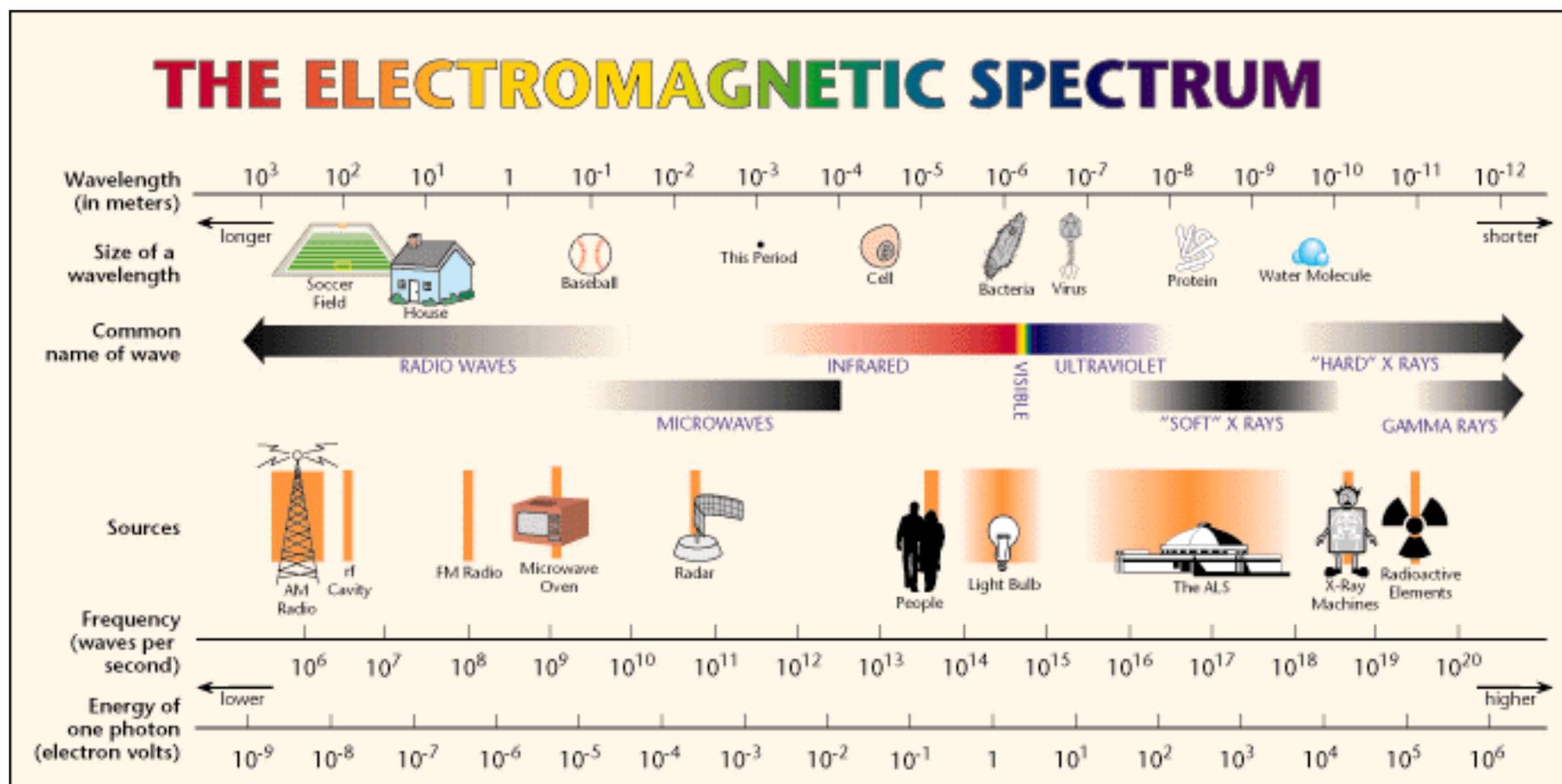
$$E = p.c = h\nu = h\frac{c}{\lambda} \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

Momento que puede transferirse a otra partícula en una colisión



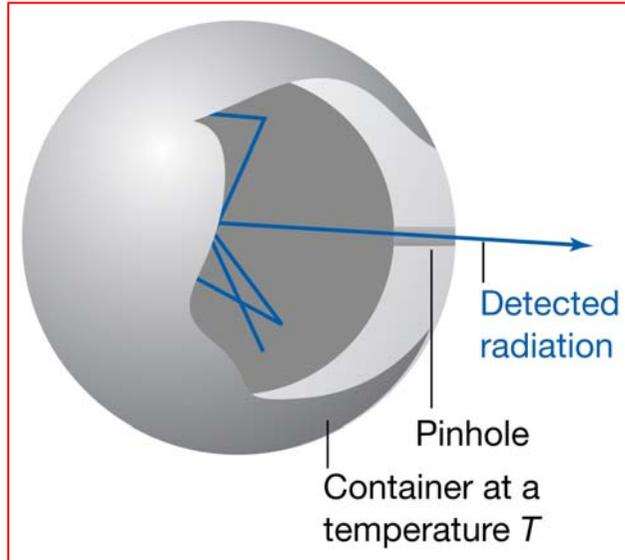
<http://scsx01.sc.ehu.es/sbweb/fisica/cuantica/compton/Compton.htm#Actividades>

El espectro electromagnético (equivalencia en términos energéticos y movimientos moleculares)

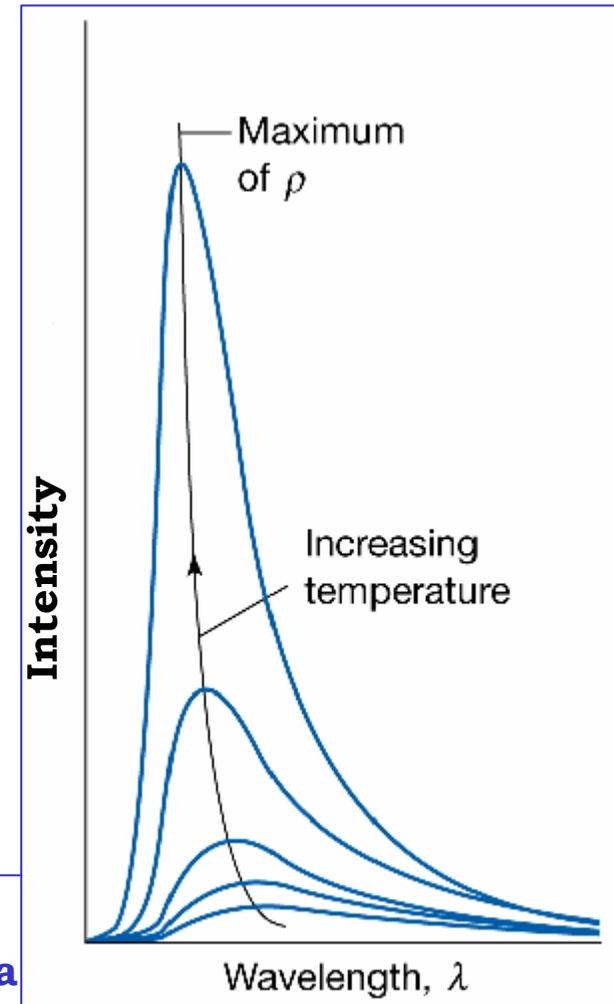


Naturaleza discreta (cuántica) de la energía

Radiación del cuerpo negro



Variación de la intensidad de la radiación emitida con la longitud de onda de la radiación y con la temperatura del cuerpo caliente (negro)

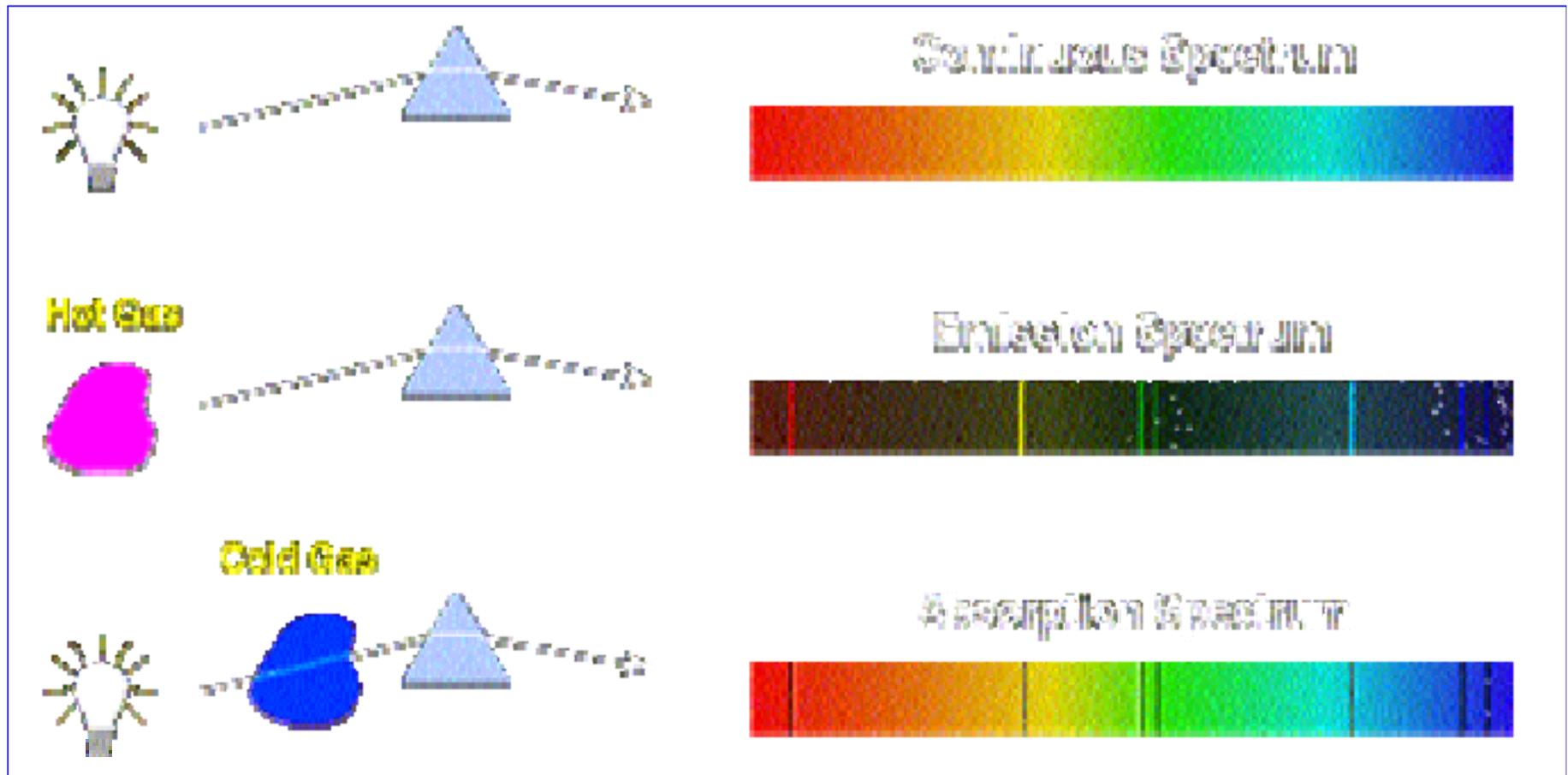


Hipótesis de Planck:

- La materia se comporta como si estuviera compuesta por osciladores que vibraran a una frecuencia, ν
- La energía de estos osciladores no puede ser continua sino discreta (cuantizada) $E = nh\nu$ $n = 0, 1, 2, \dots$
- La energía sólo se puede intercambiar en forma de "cuantos". La energía de un "cuanto" = $h\nu$

Naturaleza discreta (cuántica) de la energía

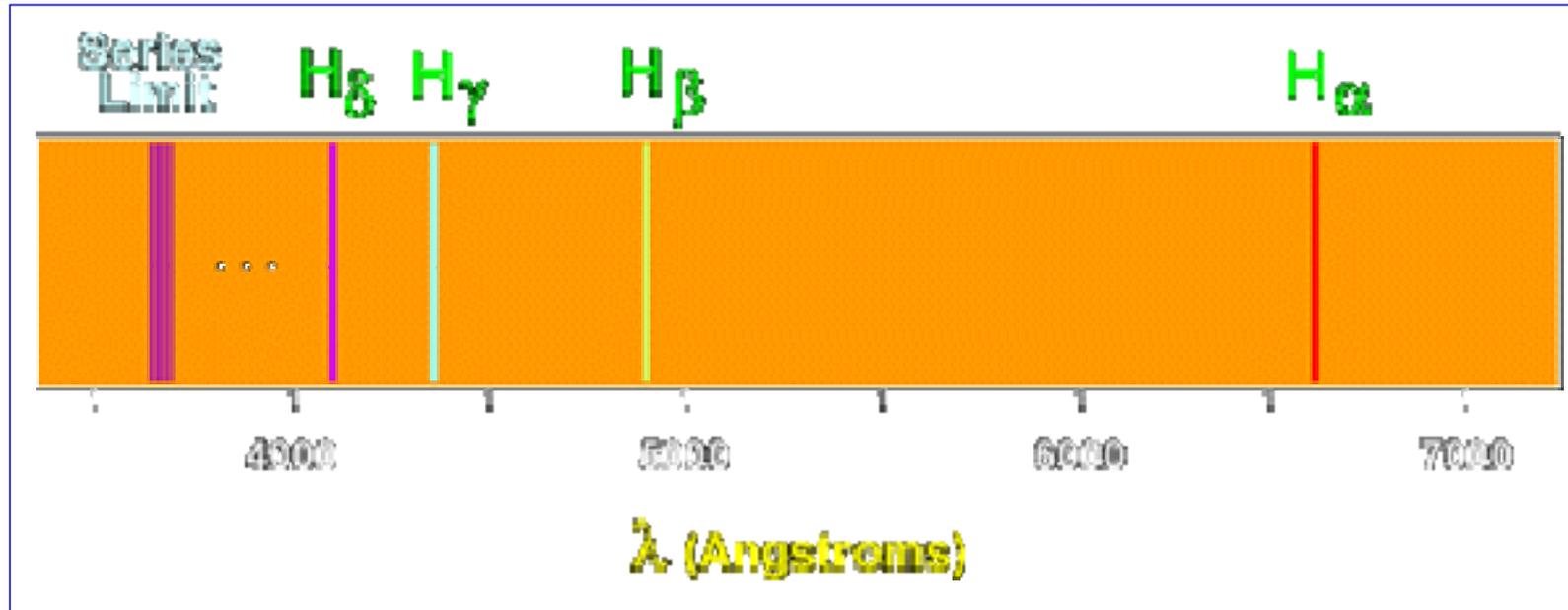
Espectros atómicos



La materia solo absorbe o emite luz de unas frecuencias determinadas
Energía \Leftrightarrow frecuencia de la radiación \Rightarrow La materia no puede tener cualquier estado de energía.

Naturaleza discreta (cuántica) de la energía

Espectros atómicos: el espectro del hidrógeno



Serie de Balmer (visible) del espectro de emisión del hidrógeno atómico

Fórmula de Rydberg:

$$\nu = 3,2281 \cdot 10^{15} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) s^{-1} \quad n > 2, \text{ entero}$$

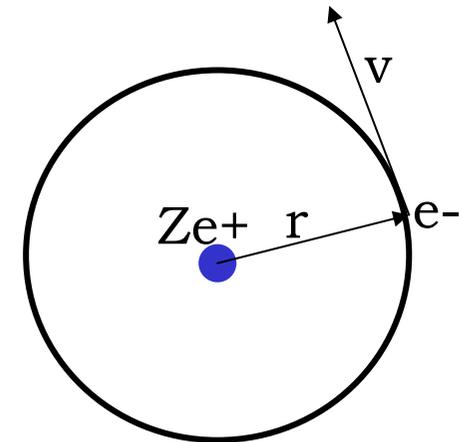
Términos espectrales, $T_n = R Z^2 / n^2$; R = constante de Rydberg, depende del átomo

$$\nu = T_n - T_m = R Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m > n, \text{ enteros}$$

Un modelo para el átomo: Bohr (1913)

Postulados:

1. El electrón se mueve alrededor del núcleo en órbitas circulares según las **leyes del movimiento de la mecánica clásica** (Modelo de Rutherford)
2. Solo están permitidas aquellas órbitas, en las que el momento angular l , cumpla la relación, $l = n h/2\pi$ $n = 1, 2, 3, \dots$ (número cuántico). En estas condiciones las órbitas son estacionarias y el electrón no emite energía: **estado estacionario**
3. El paso de unos estados estacionarios a otros solo se puede hacer mediante la emisión o absorción de cantidades fijas de energía (cuantos) y si la energía es radiante, da lugar a los espectros de emisión o de absorción



Un modelo para el átomo: Bohr (1913)

Tamaño de las órbitas

$$r = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2} \frac{n^2}{Z} = a_0 \frac{n^2}{Z}$$

r = radio de la órbita estacionaria
a₀ = radio de Bohr = 0,53 Å
m_e = masa del electrón
e = carga del electrón
ε₀ = permitividad del vacío

La energía total

$$E = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{2r} = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} \frac{Z^2}{n^2}$$

Diferencia de energía entre estados

$$E_2 - E_1 = \frac{m_e e^4 Z^2}{8h^2 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

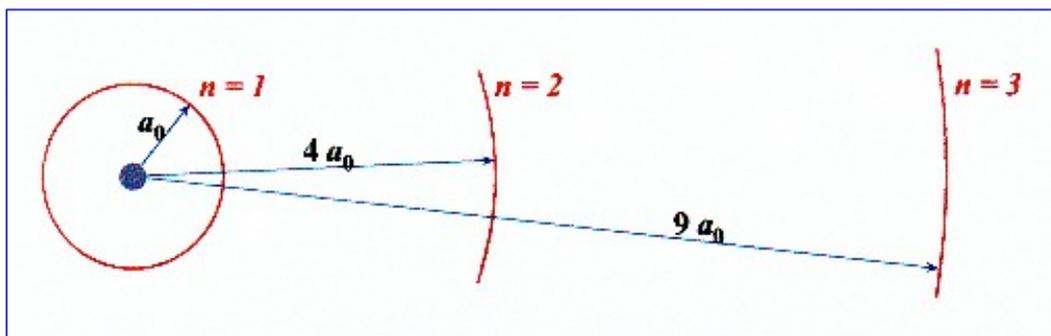
Frecuencia de la radiación emitida o absorbida

$$\nu = \frac{m_e e^4 Z^2}{8h^3 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

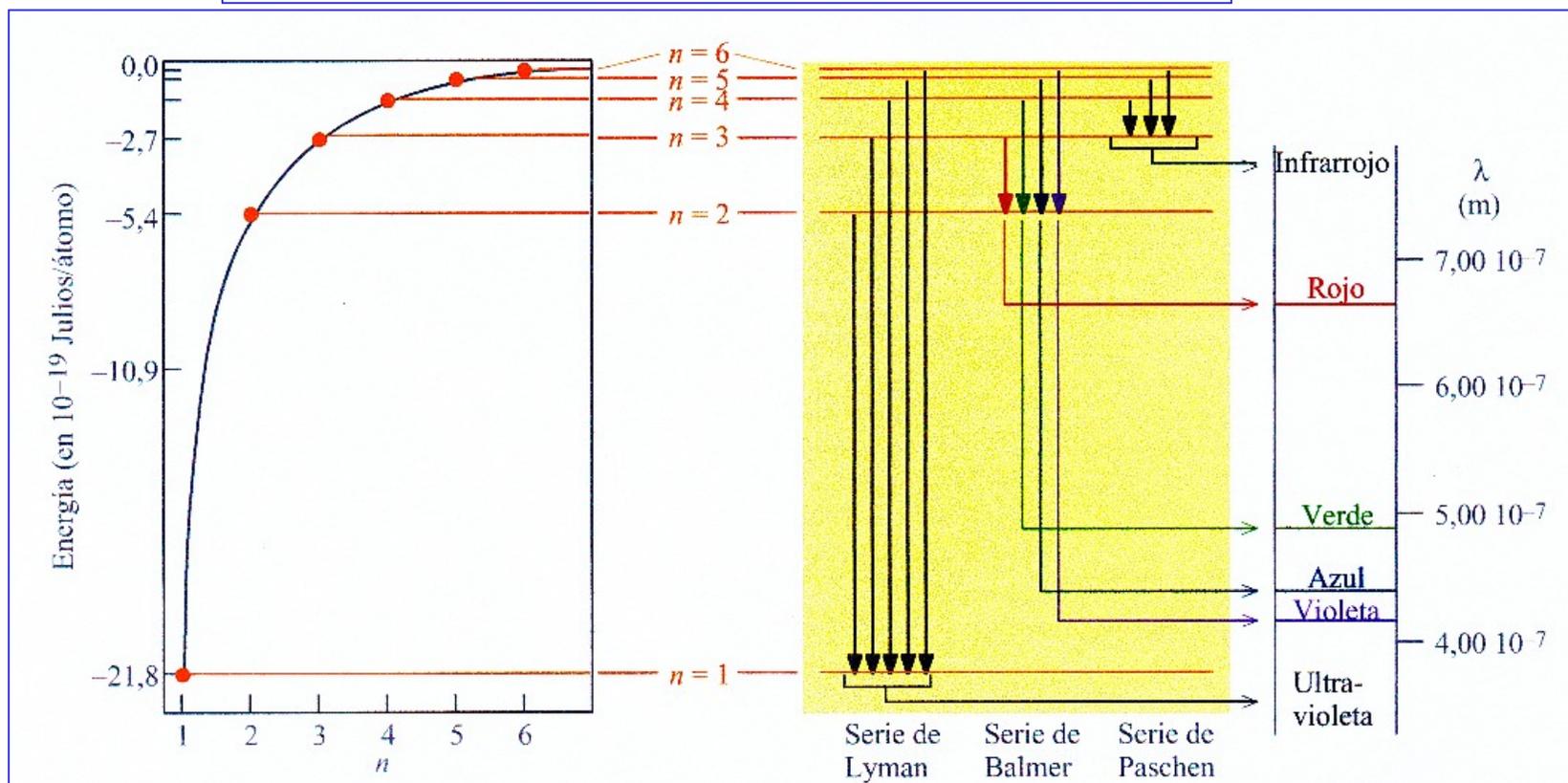
(Ver información de la web de la asignatura)

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0^2} \quad ; \text{ Constante de Rydberg (s}^{-1}\text{)}$$

Un modelo para el átomo: Bohr (1913)



Las órbitas



La energía

El espectro de emisión

Capítulo 9 de

Química General. 8ª Ed. R.H. PETRUCCI, W.S. HARWOOD, F.G. HERRING. Prentice Hall. Madrid. 2002

Capítulo 7 de

Química y Reactividad Química. 5ª ed. J. C. KOTZ, P.M. TREICHEL. Ed. Paraninfo-Thomson Learning. Madrid. 2003