



Universitat de les Illes Balears
Departament de Química

1. Un espectro de emisión es una especie de “huella dactilar atómica”. Los diferentes aceros son aleaciones de hierro i carbono y contienen normalmente uno o más metales. Basándose en las líneas principales de sus espectros atómicos ¿Cuál de los metales de la siguiente tabla probablemente está presente en una muestra de acero cuyo espectro de emisión hipotético es el que se muestra en la figura? ¿es posible que haya más metales? Explíquelo.

Tabla 1.

Principales líneas espectrales de algunos metales de transición del Período 4, en nm.								
V	306,64	309,31	318,40	318,54	327,11	437,92	438,47	439,00
Cr	357,87	359,35	360,53	361,56	425,44	427,48	428,97	520,45
Mn	257,61	259,37	279,48	279,83	403,08	403,31	403,45	
Fe	344,06	358,12	372,00	373,49	385,99			
Ni	341,48	344,63	345,85	346,17	349,30	351,51	352,45	361,94

Espectro de emisión del acero:



Solución:

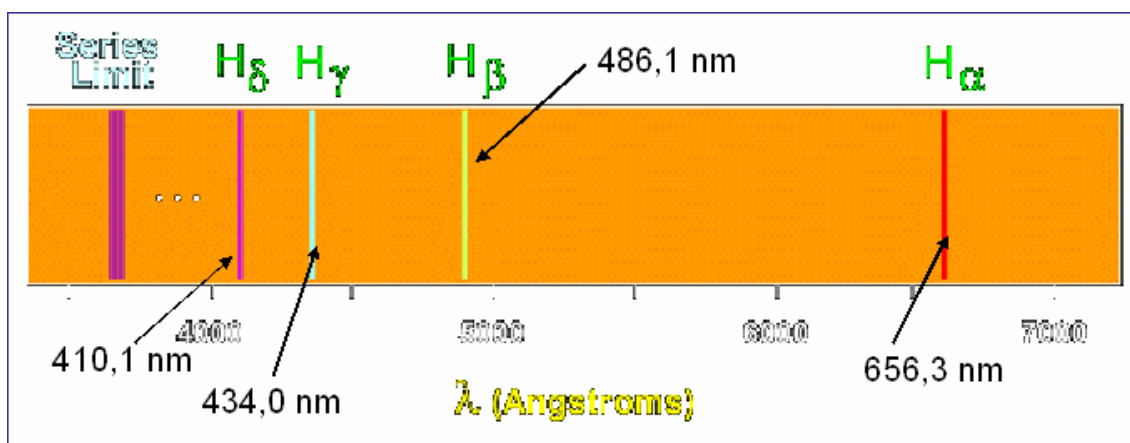
Si un elemento metálico está contenido en la muestra, necesariamente hemos de encontrar sus líneas espectrales en el espectro global. No

obstante, la resolución del espectro que nos dan no es muy buena, así que sólo podremos identificar las líneas de una manera aproximada.

- El V presenta líneas a 306,64 y 309,31 nm. Sin embargo el espectro global no tiene ninguna línea entre 300 y aproximadamente 313 nm. Tampoco aparecen líneas entre aproximadamente 429 y 450, en donde el V tiene 3 líneas. Por tanto, la muestra no contiene Vanadio.
- La muestra tampoco contiene Mn. Claramente el Manganese tiene líneas de emisión en la zona de los 400 nm y sin embargo en el espectro global de la muestra, estas líneas no aparecen.
- En la muestra deben aparecer las 5 líneas del Fe, ya que la muestra es un acero. Su identificación en el espectro nos da una idea del error con el que estamos leyendo las líneas. La 344,06 nm aparece a 344 nm; 358,12 nm aparece a 357nm; 372,00 nm aparece a 371nm; 373,49 nm aparece a 373nm; 385,99nm aparece a 386 nm. Parece, por tanto que el error está en la unidad de nanómetro.
- Aparecen también todas las líneas del Ni, la de 341 nm y las cuatro líneas entre 344,6 y 349,3. También aparecen las líneas a 351 y 352 nm y la de 361 nm, por tanto la muestra contiene Ni.
- ¿Podría contener Cr? Podría contener Cr, ya que en el espectro aparece unas líneas a 425, 427 y 428 nm que pueden ser las líneas patrón que se dan en la tabla. Así mismo aparecen 3 líneas a casi 360, 361 y 362 nm, que también podrían corresponder al patrón del Cr. El nivel de precisión del espectro no nos permite distinguir entre 361,55 del Cr y 361,94 del Ni. Finalmente la línea a 357,87 del patrón del Cr será difícilmente distinguible de la línea 358,12 del patrón del Fe. La única duda que se nos ofrece a esta asignación es que la diferencia entre las líneas 427,48 y 425,44 (2,44 nm) es mayor que la diferencia entre 428,97 y 427,48 (1,09 nm), mientras que en el espectro real esta diferencia parece alterada.
- Por otro lado en el espectro aparecen líneas a 313 nm, 315 nm y 317 nm que no pertenecen a ninguno de los metales indicados y que, de no pertenecer al C, serán debidos a otros metales de la muestra.

2. Parece ser que Balmer dedujo su fórmula para el espectro visible del hidrógeno por tanteo. Un procedimiento científico habitual es representar los datos experimentales y encontrar una ecuación matemática para describir el gráfico. Demuestre que la ecuación [1] describe una línea recta. Indique las variables que se deben representar y determine qué valores numéricos deben tener la pendiente y de la ordenada en el origen de esta línea. Utilice los datos de la figura para confirmar que las cuatro líneas del espectro visible del hidrógeno se encuentran en la línea recta de la gráfica.

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



Dato: $R = 3,2281 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$

Solución:

Efectivamente es la ecuación de una línea recta, ya que:

$$\nu = \frac{R}{2^2} - R \frac{1}{n^2}; n = 3, 4, 5, \dots, \infty$$

Por tanto, si tomamos la frecuencia como función (Y) y $1/n^2$ como variable (X), la ecuación que queda es la de una línea recta en donde $R/2^2$ es el valor de su ordenada en el origen y $-R$ es su pendiente.

Valor de la ordenada en el origen: $3,2281 \cdot 10^{15} / 4 = 8,0703 \cdot 10^{14}$

Valor de la pendiente; $-3,2281 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$

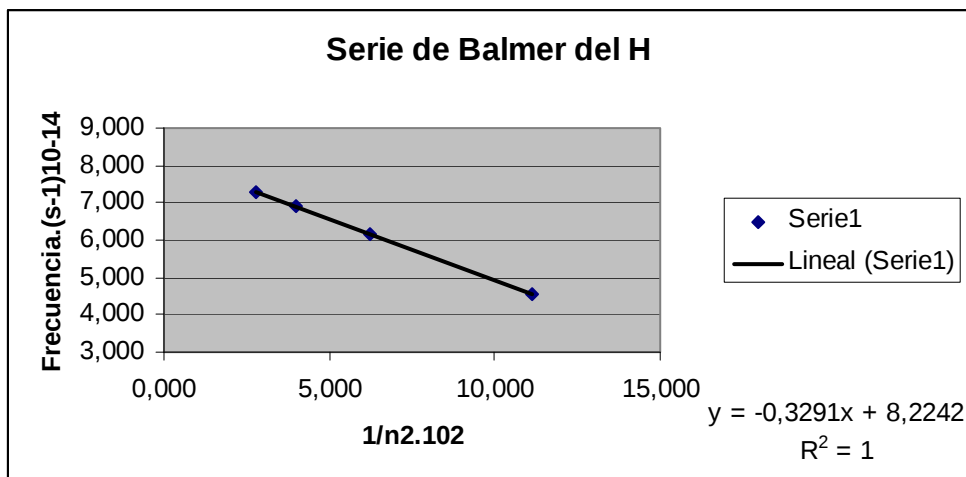
Tabla de valores para la representación

$\lambda \cdot 10^9 \text{ (m)}$	$\nu \cdot 10^{-14} \text{ s}^{-1}$	n	$1/n^2 \cdot 10^2$	
656,3	4,568	2	11,11	

486,1	6,167	3	6,250	
434,0	6,908	4	4,000	
410,1	7,310	5	2,778	

($c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ m/s}$)

($v = c/\lambda$)



Los datos del ajuste proporcionan un valor de $3,291 \cdot 10^{15}$ para la pendiente, tal como se había previsto, y un valor de $8,2242 \cdot 10^{14}$ para la ordenada en el origen, ligeramente superior a lo previsto (error de 2%)

3.- Trabajos sobre el concepto de probabilidad y densidad de probabilidad

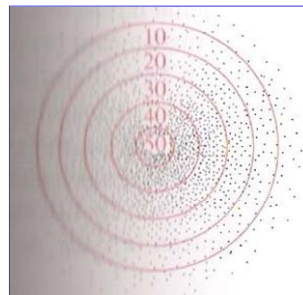
Enlace Químico y Estructura de la Materia

J. Donoso. Curso 07-08

Concepto de Probabilidad

1500 tiradas. Reparto:

200 puntos	 "50"	 13,3%
300	 "40"	 20%
400	 "30"	 26,7%
250	 "20"	 16,7%
200	 "10"	 13,3%
150	 fuera de la diana	10%



Probabilidad/Área = Densidad de probabilidad

Figura 9.31 de Petrucci

Ejercicio para seminario de lunes, 20 de Octubre:

Datos, los que aparecen en la diapositiva. Supóngase que el radio de la zona "50" es 1cm; de la zona "40", 2 cm, de la zona "30", 3 cm, y así sucesivamente.

Representar en función del radio:

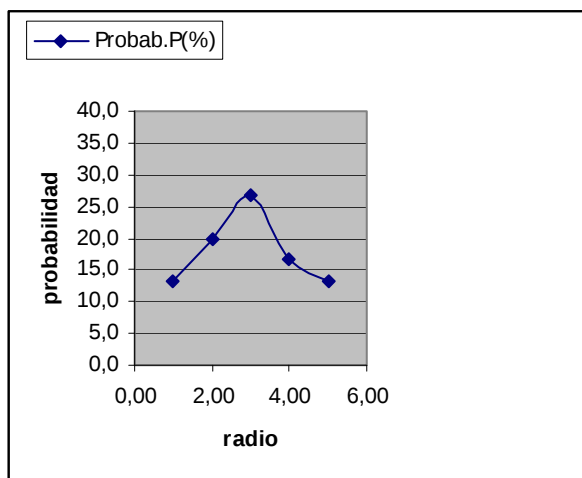
- La probabilidad en cada región
- La densidad de probabilidad en cada región

Fundamentos de la Química Cuántica

Zona	radio (u.a)	Puntos	Probabilidad (P)	Probab.P(%)	Área círculo/pi	Área sector/pi (A)
"50"	1,00	200	0,133	13,3	1,00	1,00
"40"	2,00	300	0,200	20,0	4,00	3,00
"30"	3,00	400	0,267	26,7	9,00	5,00
"20"	4,00	250	0,167	16,7	16,0	7,00
"10"	5,00	200	0,133	13,3	25,0	9,00
fuera diana		150	0,100	10,0		
		1500	1,000	100,0		

Dens Prob.
P(%) / A

13,3
6,67
5,33
2,38
1,48



Primera representación gráfica. Variación de la probabilidad con el radio del sector de impacto.

Segunda representación gráfica. Variación de la densidad de probabilidad con el radio del sector de impacto.

