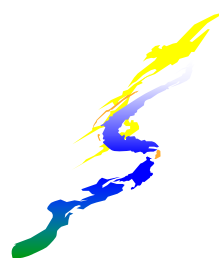




Modelos atómicos

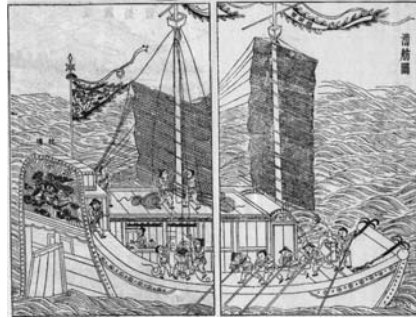
Fisicoquímica I (Q. e I.Q.)



-
- Los primeros focos importantes del saber científico, se desarrollaron en las [culturas orientales y medio orientales](#). Desde allí se transmitieron a través de las rutas comerciales de la región del área mediterránea.
 - Los conocimientos de geometría, cálculo y astronomía fueron notables en las [culturas mesopotámicas y egipcias](#). Entretanto en [China e India](#) se fueron desarrollando de forma independiente brillantes civilizaciones de avanzado interés por las cuestiones científicas.



- Los conocimientos de geometría, cálculo y astronomía fueron notables en las culturas mesopotámicas y egipcias. Entretanto en China e India se fueron desarrollando de forma independiente brillantes civilizaciones de avanzado interés por las cuestiones científicas.



3

La pólvora

- Historiadores consideran que la pólvora se descubrió 2000 Años a.C.
- azufre, carbón y saltpeter (antiguo termino para nitrato de potasio ; KNO_3)
- Fue llamado *huo yao*, o el “fuego químico”.



4

- La especial situación geopolítica de las urbes griegas entre los siglos 8 y 3 a. C. Permitió que actuaran como receptoras y re-elaboradoras de escuelas de pensamiento filosófico que cristalizaron en una actitud racionalista y universal frente a las diferentes facetas del conocimiento.



- El Acropolis, Atenas.

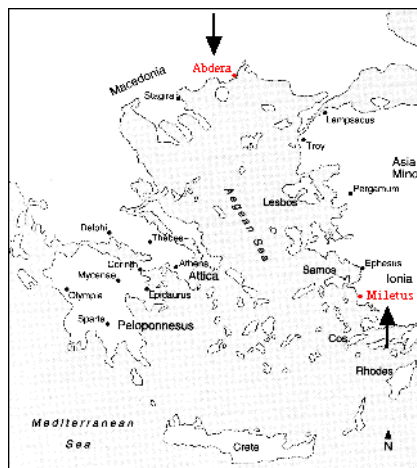
La escuela Jónica fundada por Tales de Mileto, la “Academia” de Platón o la escuela peripatética de Aristóteles.



5

Teoría atomista de la materia

Filosofía griega del siglo VI antes de cristo (a.C.)



- *Thales de Miletus,*
- *Pericles,*
- *Pitagoras*
- *Sócrates*
- *Anaxagoras (500? – 428 a.C.)*
- *Aristoteles*
- *y Eurípides*



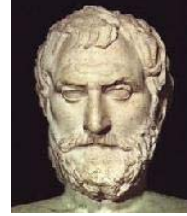
6

El inicio del pensamiento griego

Thales de Miletus (hoy Turquía)

Se cree que nació de madre fenicia en **624 a.C.** y **muere en 547 a.C.**
Fue educado en la ciencia oriental.

- considerado como el fundador de la ciencia griega, matemáticas y filosofía. Fue uno de los siete sabios de Grecia
- El hecho que más aseguró su reputación fue la **predicción** de un eclipse de sol en el año 585 A.C. (los **babilonios** habían descubierto métodos para la predicción exacta de eclipses, dos siglos antes de aquel tiempo).
- Convirtió la geometría (de los **egipcios**) en un estudio abstracto, siendo el primer hombre que sabemos que la consideraba tratando con líneas imaginarias. También fue el primero en emprender la tarea de probar exposiciones matemáticas.



7

• En las ciencias físicas fue el primero en estudiar el magnetismo.

• Pero aún más importante fue el primer hombre en preguntarse **¿de qué está hecho el universo?** y respondérselo sin recurrir **ni a dioses ni a demonios**.

Su propia respuesta consistía en que la materia fundamental del universo era agua, mientras que la tierra era un disco plano que flotaba en el océano infinito.

- <http://www.utm.edu/research/iep/t/thales.htm>



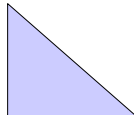
8

Anaximandro (c. 611-c. 547 a.C.),

- Ayudó a introducir en Grecia la ciencia del antiguo oriente. Fue el primer griego en usar reloj de sol, que ya se conocía desde hacía siglos en **Egipto** como en **Babilonia**.
- Fue también el primero en tratar de dibujar un mapa de toda la tierra según él la conocía. Llegó a la conclusión de que el firmamento giraba alrededor de la estrella polar, y dibujo el cielo como una esfera completa- fundador de la cartografía-
- También concluyo que la superficie terrestre tenia que ser curva, aunque considero que una curvatura de este a oeste era suficiente y dibujó la tierra como un cilindro situado alrededor de un eje en dirección Este-Oeste.
- La idea de Anaximandro sobre el universo era mucho más mística que la de Tales. Anaximandro intuyó una masa informe que era al mismo tiempo el origen y destino e todas las cosas materiales. A esta sustancia inobservable la llamo "*infinito*".



9

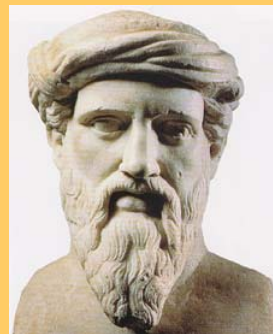


Pitágoras

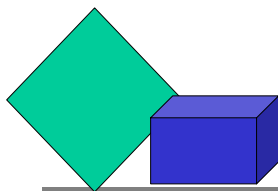
Nació en Samos (hoy Grecia), Jonia, Asia menor, hacia 580 a.C y murió en el siglo V A.C. en Crotona (hoy Italia).

El padre era fenicio y la madre griega. Fue alumno de Tales de Mileto y por consejo de este fue a Egipto, donde vivió durante 20 años. Cuando los persas invadieron Egipto, fue hecho prisionero y lo enviaron a Babilonia, donde estuvo 12 años.

- Pitágoras, es más famoso por haber descubierto la proporción (el cuadrado de la hipotenusa es igual a la suma de los cuadrados de los catetos) teorema de Pitágoras.
- Fue el primer griego que reconoció que el lucero del alba y el de la noche eran de hecho una sola estrella.
- También fue el primero en establecer que la órbita de la luna no esta en el plano del ecuador, sino inclinada y formando un ángulo con dicho plano.
- Fue el primer hombre conocido por nosotros que demostró que la tierra era esférica, también fue el primer filosofo griego en apuntar que el sol y a la luna y varios planetas seguían su propio camino.



10



Empédocles

Nació en la ciudad siciliana de Agrigento hacia el 490 a.C. Empédocles era de noble familia, se dice que rechazó la corona real, según unas versiones por sus ideas a favor del régimen democrático y según otras por que se tenía a sí mismo como un dios.

- Se encontraba bajo la influencia de Pitágoras, por ello hacia hincapié en el misticismo. Nunca puso objeción a que se le considerara un profeta y dijo que un día concreto sería remontado a los cielos y convertido en dios. Aquel día se supone que saltó al cráter del monte Etna, de modo que por el hecho de haber desaparecido repentinamente hizo que mucho creyeran en la predicción y lo consideraran un dios.
- Consideraba aparte de los elementos que ya se pensaba que eran básicos para el universo, que la tierra también debía constituir esa lista de elementos. Creía que todas las cosas estaban hechas de arreglos o distintas combinaciones de esta lista de elementos (*agua, aire, fuego*, y la agregada por Empédocles *tierra*).

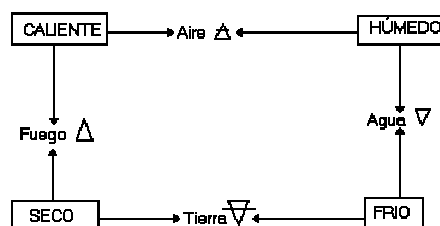


11

Teoría de los cuatro elementos

La "Teoría de la existencia de un principio permanente origen de todo", más conocida como la "*Teoría de los 4 elementos*" fue formulada por 4 de los más famosos filósofos de la Antigua Grecia: Tales, Anaxímenes, Heráclito, y más tarde Empédocles. Cada uno de estos elementos, los filósofos pensaban, eran el principio de todo. Dichos 4 elementos aparecen simbolizados en la teoría: *Agua, Aire, Fuego y Tierra*.

Años más tarde esta teoría es aprobada por otro de los grandes filósofos de la Cultura Clásica: *Aristóteles*.

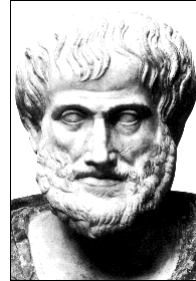


12

Aristoteles

Nació en Estagira (en el norte de Grecia) 384 a.C. y murió en Calsis 322 a.C.

- aceptó los cuatro elementos de Empédocles pero dándole más importancia a la **tierra**.
- Concordaba con los pitagóricos en cuanto a que la tierra y el cielo están sujetos a dos conjuntos diferentes de leyes naturales. En la tierra todo era mutable y estaba corrompido, mientras que en el cielo todo era permanente e inmutable.
- Concluyó en que los cuerpos celestes no pretendían llegar a ningún lado, era un movimiento constante, permanente igual y circular.



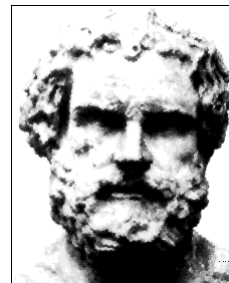
Rechazó el atomismo de Demócrito, pero por otro lado aceptó la idea de Pitágoras, de la redondez de la tierra.



13

Demócrito

- Poco se conoce acerca de la existencia de Demócrito, que vivió, según parece, entre los años 460 y 370 a.C.
- La tradición señala que residió en Abdera, ciudad de Tracia, en el norte de Grecia.
- Fue el filósofo griego más afortunado en cuanto a la exactitud de sus ideas, pero vivió a la sombra de su contemporáneo Sócrates.
- Se le conoce principalmente por su **teoría atomista**.
- Según Demócrito el movimiento de los átomos era obra de las leyes de la naturaleza, que eran definitivas e inquebrantables, y no obra de dioses o demonios.



14

Alrededor del año 440 a.C.

Leucippus de Miletus y su pupilo Democritus de Abdera desarrollaron la hipótesis atomista, esta constan de 5 principios básicos:

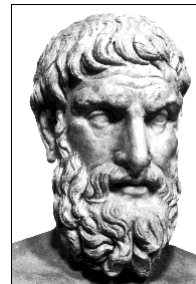
- 1) toda la materia esta compuesta de átomos (palabra griega compuesta que significa **indivisible**), los cuales son pedazos de materia tan pequeños como para ser vistos,
- 2) hay un *****, el cual es espacio vacío entre los átomos,
- 3) los átomos son completamente sólidos,
- 4) los átomos son homogéneos sin ninguna estructura interna y
- 5) los átomos son diferentes en su tamaño, su forma y su peso (propuesto por Epicurus).

Casi todo del escrito original de Leucippus y Democritus esta perdido, sin embargo su trabajo fue desarrollado posteriormente por Epicurus de Samos (341-270 a.C.) quien hizo las ideas mas generalmente conocidas



15

Epicurus de Samos desarrolló el trabajo de Demócrito y Leucippus



Mucho de la información sobre la teoría atomista proviene del poema "*De Rerum Natura*" (en la naturaleza de las cosas) escrito por el escritor Romano Lucretius (ca 95 – 55 a.C.), redescubierto en 1471.



16

GRECIA: 100 dracmas (Atenas, 1 de Octubre de 1967). 67 mm. / 158 mm.



En el anverso se muestra, a la izquierda, el busto de *Demócrito* (460-370 a.C.), filósofo griego, considerado uno de los fundadores de la teoría atomista. A la derecha de este anverso puede apreciarse el símbolo del átomo, aspecto físico al que se refirió *Demócrito* en sus estudios



En el reverso se muestra la imagen de la *Academia de Atenas*. En la esquina inferior izquierda del reverso se muestra la imagen de una lechuza. La lechuza era una de las representaciones de la diosa *Atenea*, protectora de la ciudad de Atenas. Este animal era también en la antigüedad un símbolo de inteligencia.

17

Edad Media

- Desde los tiempos más antiguos las ideas acerca de la combustión han procedido de una detallada observación del fuego. A partir de 1650 el interés por este fenómeno radicaba en la posibilidad de encontrar nuevas aplicaciones al fuego y, por medio de la máquina de vapor, obligarle a realizar los trabajos duros de la tierra. Este creciente interés llevó a los químicos a una nueva conciencia del fuego.
- Según las antiguas concepciones griegas, todo lo que puede arder contiene dentro de sí el elemento fuego, que se libera bajo condiciones apropiadas. Las nociones alquímicas eran semejantes, salvo que se concebían los combustibles como algo que contenía el principio de "azufre" (no necesariamente el azufre real).



18

Teoría del Flogisto

- Algunos historiadores afirman que puede considerarse como la primera gran teoría de la química moderna.
- En 1702, el médico **Georg Ernst Stahl** (1660-1734) siguiendo las ideas de su maestro J.J. Becher (1635-1682), propuso una explicación conjunta de la **calcinación** de los metales, la **combustión** de los cuerpos combustibles y la **respiración** de los animales, basada en la existencia de un "principio de la combustibilidad" que denominó "flogisto".
- De acuerdo con sus ideas, los metales estaban formados por **flogisto** y la cal correspondiente, de modo que, cuando se calcinaban, el **flogisto** se desprendía y dejaba libre la cal. Del mismo modo, para obtener el metal a partir de la cal, era necesario añadirle flogisto, el cual podía obtenerse a partir de una sustancia rica en este principio, como el carbón, por ejemplo.



Georg Ernst Stahl (1660 -1734)
(University of Pennsylvania. SCETI. Smith Collection)

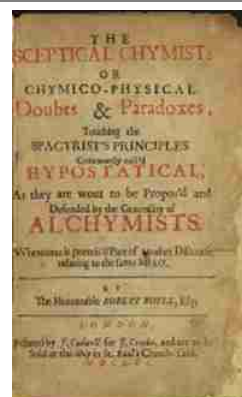


19

- En el siglo XVII destacan como aportaciones importantes a la química, los trabajos del holandés Juan Bautista VAN HELMONT (1577-1644) sobre los diversos componentes del aire que le llevaron al descubrimiento del dióxido de carbono, y sobre todo los trabajos de **Robert BOYLE** (1627-1691) que además de establecer la ley de los gases ideales que lleva su nombre, define, en su obra *The Sceptical Chymist* (El Químico Escéptico) aparecida en 1661, por primera vez aparece el concepto de elemento químico.



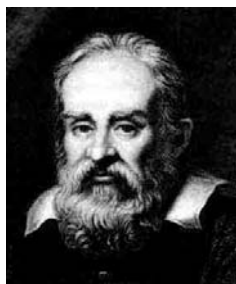
Portada de "The Sceptical Chymist" (1961) de Robert Boyle (University of Pennsylvania. SCETI)



Robert Boyle (1627-1691)
(University of Pennsylvania. SCETI. Smith Collection)



20



Galileo

Con Lavoisier se inicia la gran revolución química del siglo XVIII, motivada por dos razones fundamentales: el uso sistemático y preciso de la balanza, como aplicación de la ley de la conservación de la masa, y el reconocimiento de la función del oxígeno en los procesos de calcinación, combustión y respiración, que no es sino manifestaciones de un mismo fenómeno, la oxidación



Antoine Laurent Lavoisier



21

1743, **Antoine Laurent De Lavoisier** nace en París.

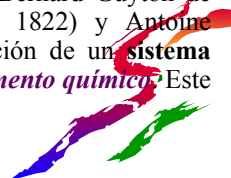
1768, Es nombrado miembro de la Academia de las Ciencias de París gracias a un ensayo sobre la mejora de las técnicas del alumbrado público mereciendo una medalla de oro otorgada por el Rey. Ese mismo año entró a formar parte de la *Ferme Générale*, un consorcio privado encargado de la recaudación de impuestos.

1773, Empleando la balanza, muestra de un modo indiscutible que toda combustión en el aire resulta de una combinación con una parte del aire. La **teoría del flogisto** recibe así un duro golpe.

1774, Comprueba experimentalmente la **Ley de Conservación de la Masa**.

1777, Identifica el oxígeno y el hidrógeno en el aire.

1780, En colaboración con otros químicos franceses, Louis Bernard Guyton de Morveau (1736-1816), Claude Louis Berthollet (1748- 1822) y Antoine François de Fourcroy (1755-1808), comienza la elaboración de un **sistema lógico de nomenclatura química** basado en la idea de **elemento químico**. Este trabajo le ocupará los siete años siguientes.



22



El Arresto de Lavoisier ("The Arrest of Lavoisier") de L. Langenmantel (1876)
(Universidad de Pennsylvania. SCETI. Smith Collection)

1781, Establece la composición del gas carbónico.

1787, triunfa la Revolución Francesa. Por entonces Lavoisier ocupaba otro cargo público en la Administración Real de Pólvoras, donde actúo como **director científico**, con derecho a vivir en el arsenal, donde instaló su laboratorio personal. Este laboratorio se encuentra actualmente en el Musée National des Techniques, en París. La demolición de La Bastilla contó con el asesoramiento de Lavoisier para evitar a los obreros la acción de los gases nocivos que se desprendían.

1790, Es nombrado miembro de la comisión para el establecimiento del nuevo sistema de pesos y medidas.

1791, Es nombrado secretario del Tesoro francés.

1793, A pesar de su prestigio internacional, es detenido junto a otros miembros de la recaudación de impuestos bajo la acusación de **atentar contra la salud pública**.

1794, Lavoisier, como funcionario de la monarquía, fue condenado a muerte y ejecutado en la guillotina en París.



23

renacimiento



24



Modelos atómicos

(de Dalton a Bohr; la vieja teoría atómica)

Alejandro Solano Peralta

Fisicoquímica I (Q. e I.Q.)



Modelo atómico de Dalton,

En 1808, John Dalton (1766-1844) publicó un libro intitulado "A New System of Chemical Philosophy". En el plantea sus ideas sobre la teoría del átomo, estas son:

- 1.- Los elementos químicos están formados por partículas muy pequeñas e indivisibles llamadas **átomos**.
- 2.- Todos los átomos de un elemento químico dado son idénticos en su masa y demás propiedades.
- 3.- Los átomos de diferentes elementos químicos son distintos, en particular sus masas son diferentes.
- 4.- Los átomos son indestructibles y retienen su identidad en los cambios químicos.
- 5.- Los compuestos se forman cuando átomos de diferentes elementos se combinan entre sí, en una relación de números enteros sencilla, formando entidades definidas (hoy llamadas moléculas).



TABLA DE PESOS ATOMICOS

ELEMENTS										Plate 4									
Simple																			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10										
11	12	13	14	15	16	17	18	19	20										
Binary																			
21	22	23	24	25	26	27	28	29	30										
Ternary																			
31	32	33	34	35	36	37	38	39	40										
Quaternary & Solenoidal																			
41	42	43	44	45	46	47	48	49	50										
Solenoidal																			
51	52	53	54	55	56	57	58	59	60										

1. Hydrogen, its relative weight 1

2. Azote 5

3. Carbone or charcoal 5

4. Oxygen 7

5. Phosphorous 9

6. Sulphur 13

7. Magnesia 20

8. Lime (calcium oxide, CaO) 23

9. Soda (sodium carbonate, Na₂CO₃) (washing

soda) 128

10. Potash (crude or purified potassium

carbonate, K₂CO₃) 42

11. Strontites 46

12. Barite (a barium sulfate (BaSO₄) mineral)

68

13. Iron 38

14. Zinc 56

15. Copper 56

16. Lead 95

17. Silver 100

18. Platina 100

19. Gold 140

20. Mercury 167

21. An atom of water or steam, composed of 1 of oxygen and 1 of hydrogen, retained in physical contact by a strong affinity, and supposed to be surrounded by a common atmosphere of heat; its relative weight = 8

22. An atom of ammonia, composed of 1 of azote and 1 of hydrogen 6

23. An atom of nitrous gas, composed of 1 of azote and 1 of oxygen 12

24. An atom of elephant gas, composed of 1 of carbone and 1 of hydrogen 6

25. An atom of carbonic oxide composed of 1 of carbone and 1 of oxygen 12

26. An atom of nitrous oxide, 2 azote + 1 oxygen 17

27. An atom of nitric acid, 1 azote + 2 oxygen 19

28. An atom of carbonic acid, 1 carbone + 2 oxygen 19

29. An atom of carburetted hydrogen, 1 carbone + 2 hydrogen 7

30. An atom of oxynitric acid, 1 azote + 3 oxygen 26

31. An atom of sulphuric acid, 1 sulphur + 3 oxygen 3432. An atom of sulphuretted hydrogen, 1 sulphur + 3 hydrogen 16

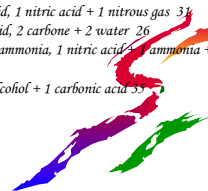
33. An atom of alcohol, 3 carbone, + 1 hydrogen 16

34. An atom of nitrous acid, 1 nitric acid + 1 nitrous gas 31

35. An atom of acetous acid, 2 carbone + 2 water 26

36. An atom of nitrate of ammonia, 1 nitric acid + 1 ammonia + 1 water 33

37. An atom of sugar, 1 alcohol + 1 carbonic acid 33



27

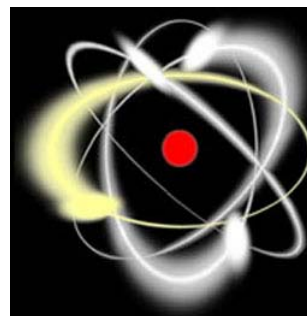
Descubrimiento del electrón

Invencción de la bomba de mercurio
(Heinrich Geissler en 1855)

Experimentación con tubos de descarga
(Sir William Crookes en 1870)

Relación e/m del electrón
(J.J. Thomson en 1895)

Determinación de la carga del electrón
(Robert A. Milliken y Harvey Fletcher en 1910)



28

Historia del Tubo de Rayos catódicos



- 1855 El inventor alemán Heinrich Geissler desarrollo la bomba de mercurio - produce primeramente tubos de buen vacío, estos tubos fueron modificados por Sir William Crookes, para producir los tubos de rayos catódicos.
- 1858 Julius Plücker mostró que los rayos catódicos se desvían bajo la influencia de un imán sugiriendo que estos están conectados de alguna manera.
- 1869 J.W. Hittorf encontró que colocando un cuerpo sólido enfrente de cátodo corta el glow de las paredes del tubo. Estableciendo que estos "rayos" viajan del cátodo en línea recta.
- 1871 C.F. Varley es el primero en publicar que los rayos catódicos son presumiblemente formados por partículas.
- 1874 **George Johnstone Stoney** estimo que la carga de la partícula desconocida es de aproximadamente 10^{-20} coulomb, cercano al valor actual de $1.6021892 \times 10^{-19}$ coulomb. James Clerk Maxwell reconoció los resultados de Stoney, pero no acepto la idea de la electricidad esta compuesta por partículas. Stoney tambien propuso el nombre de "electrino" para la unidad de carga en un Ion hidrógeno. En 1891, él cambio el nombre a "electrón."

29

Historia del Tubo de Rayos catódicos



- 1876 **Eugen Goldstein** muestra que la radiación producida en un tubo de vacío cuando una corriente eléctrica es forzada pasar a través del tubo inicia en el cátodo; Goldstein introduce el termino **rayo catódico** para describir la luz emitida.
- 1881 Herman Ludwig von Helmholtz muestra que las cargas eléctricas en átomos son divididas en porciones enteras definidas, sugiriendo que hay una unidad mínima de electricidad.
- 1883 Heinrich Hertz muestra que los rayos catódicos no son desviados por platos metálicos cargados eléctricamente, lo cual puede indicar (incorrectamente) que los rayos catódicos no pueden ser partículas cargadas.
- 1886 Eugen Goldstein observa que un tubo de rayos catódicos produce, además de los rayos catódicos, radiación que viaja en el sentido opuesto - **salían** del ánodo; estos rayos son llamados rayos canales debido a los hoyos (**canales**) **bored** en el cátodo.

30

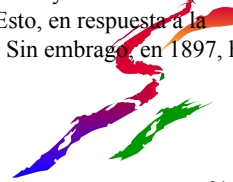
Historia del Tubo de Rayos catódicos



1890 Arthur Schuster calcula la relación carga / masa de las partículas que forman los rayos catódicos (hoy electrones) al medir la deflexión de los rayos catódicos por campos magnética. Joseph John (J.J.) Thomson es el primer interesado en la descarga de electricidad a través de un gas a baja presión, es decir, en los rayos catódicos.

1892 Heinrich Hertz quien primeramente había concluido(incorrectamente) que los rayos catódicos deben ser formas similares a las ondas, muestra que los rayos pueden penetrar una placa delgada de metal lo cual soporta su hipótesis de ondas. Philipp von Lenard desarrolla un tubo con un ventana delgada de aluminio que permite a los rayos escapar, esto permite a los rayos ser estudiados en el aire.

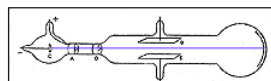
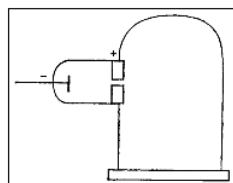
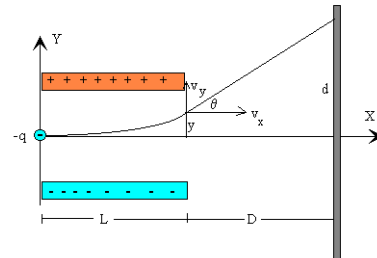
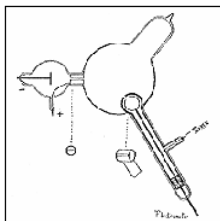
1894 J.J. Thomson anuncia que había encontrado que la velocidad de los rayos catódicos (1.9×10^7 cm/sec) es mucho menor que la de la luz (3.0×10^{10} cm/sec). Esto, en respuesta a la predicción de Lenard que podían moverse a la velocidad de la luz. Sin embargo, en 1897, he **distrusts** esta medición.



31



Relación e/m del electrón

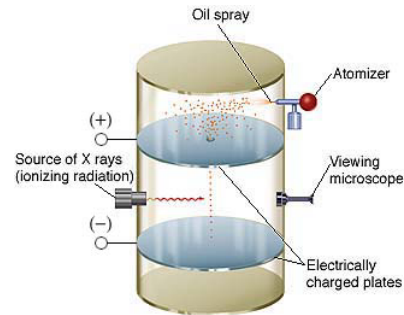


32

Determinación de la carga del electrón



En el periodo de 1909 – 1913, *Robert A. Mulliken y Harvey Fletcher* estudiando el comportamiento de gotas de aceite cargadas en un campo eléctrico opuesto al gravitacional, encontraron que todas las cargas (q) presentes en la gota satisfacían la relación; $q = ne$



$$e = 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$$
$$\therefore m_e = 9.1094 \times 10^{-28} \text{ g} \approx 1/1860 m_p$$

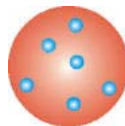


33

Modelo atómico de Thomson

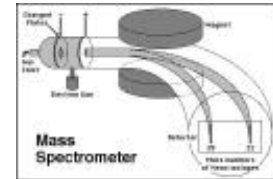
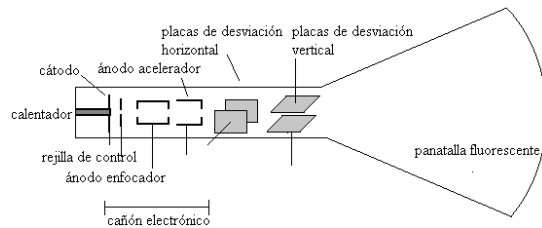


Propuso un modelo para el átomo en el que la mayoría de la masa aparecía asociada con la carga positiva (dada la poca masa del electrón en comparación con la del átomo) y suponiendo que había un cierto número de electrones distribuidos uniformemente dentro de esa masa de carga positiva (como una *especie de pastel* o *calabaza* en la que los electrones estuviesen incrustados como si fueran *trocitos de fruta* o *pepitas*).

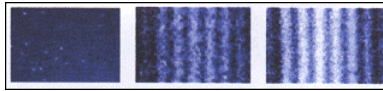


34

Aplicaciones del Exp. de Thomson



Espectrómetro de masas



Osciloscopio (TV)



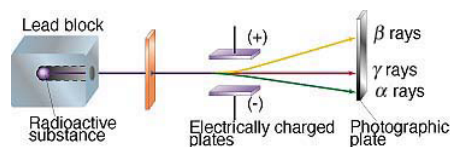
35

Los inicios de la química nuclear



36

En 1898, Rutherford (discípulo de Thomson y sucesor de su cátedra) identificó dos tipos de las radiaciones emitidas por el Uranio a las que llamo alfa (α) y beta (β), Poco después Paul Villard identificó un tercer tipo de radiaciones a las que llamo gamma (γ).



Rutherford mostró que las partículas α se combinan con los electrones para formar átomos de helio, así se concluye que una partícula α consiste de un núcleo de un átomo helio cargado positivamente (+2)

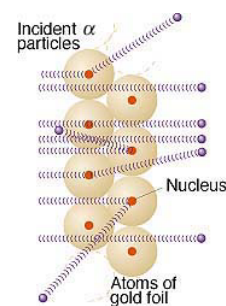
37

Experimento de la lamina de oro

La experiencia de Rutherford fue crucial en la determinación de la estructura atómica. Los párrafos que siguen son un extracto de su propia comunicación (1911):

Es un hecho bien conocido que las partículas alfa y beta sufren desviaciones de sus trayectorias rectilíneas a causa de las interacciones con los átomos de la materia.

Parece indudable que estas partículas de movimiento veloz pasan en su recorrido a través de los átomos, y las desviaciones observadas son debidas al campo eléctrico dentro del sistema atómico.

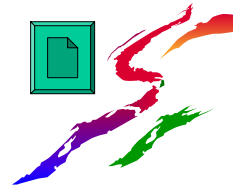
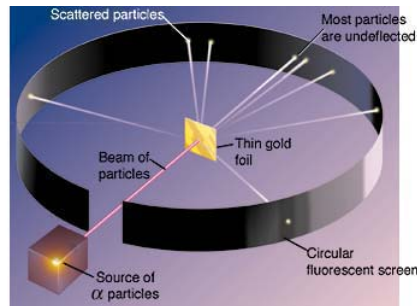


38

Experimento de la lamina de oro

Las observaciones de Geiger y Mardsen sobre la dispersión de partículas alfa, indican que algunas de estas partículas deben de experimentar en un solo encuentro desviaciones superiores a un ángulo recto.

Un cálculo simple demuestra que el átomo debe de ser asiento de un intenso campo eléctrico para que se produzca una gran desviación en una colisión simple..."

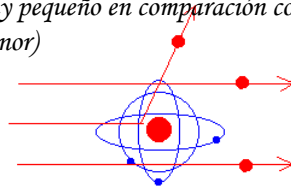
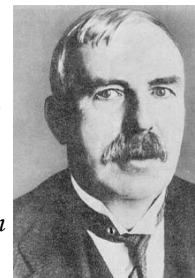


39

Modelo atómico de Rutherford

En 1911, Lord Rutherford propuso un modelo del átomo basado en los siguientes postulados:

- ✓ El átomo esta constituido por una zona central, a la que se le llama **núcleo**, en la que se encuentra concentrada toda la carga positiva y casi toda la masa del núcleo.
- ✓ Hay otra zona exterior del átomo, la **corteza**, en la que se encuentra toda la carga negativa y cuya masa es muy pequeña en comparación con la del átomo. La corteza esta formada por los electrones que tenga el átomo.
- ✓ Los **electrones** se están moviendo a gran velocidad en torno al núcleo.
- ✓ El tamaño del núcleo es muy pequeño en comparación con el del átomo (unas 100,000 veces menor)



Modelo de Rutherford



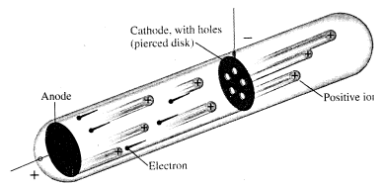
40

Rayos Canales

El pasar electricidad a través de gases a baja presión también resulta en el descubrimiento del **protón**.

Rayos Canales o rayos positivos,

- ✓ en 1886, Eugen Goldstein (nacido en Gleiwitz, Alemania, en 1850) empleando un tubo catódico con un cátodo perforado, descubrió una nueva radiación, que fluía por los orificios del cátodo en dirección opuesta a la de los rayos catódicos. La denominó *Kanalstrahlen* "rayos canales".



41

Rayos Canales

- ✓ Wilhelm Wien de 1897 hasta 1912 argumentó que estos rayos consisten de partículas cargadas positivamente, las cuales son la contraparte de los rayos catódicos cargados negativamente (electrones).
- ✓ En 1889, Wein encontró la relación carga masa, esta era menor a la del electrón y esta a su vez dependía del tipo de gas empleado. Así mismo encontró que el Hidrógeno tenía la menor relación masa carga (**1.0073 u.m.a.**)



42

Descubrimiento del protón

Puesto que los rayos canales se mueven en dirección opuesta a los rayos catódicos de carga negativa, **Thomson** propuso que se diera a esta radiación el nombre de "rayos positivos". Entonces se comprobó que las partículas de los "rayos positivos" podían atravesar fácilmente la materia. De aquí que fuesen considerados, por su volumen, mucho más pequeños que los iones corrientes o átomos. La desviación determinada, en su caso, por un campo magnético, puso de relieve que la más ínfima de estas partículas tenía carga y masa **similar** a las del ión hidrógeno, suponiendo que este ión contuviese la mínima unidad de carga positiva. Por consiguiente, se dedujo que la partícula del rayo positivo era la partícula positiva elemental, o sea, el elemento contrapuesto al electrón, **Rutherford** la llamó "**protón**" (del griego "lo primero").



43

Descubrimiento del protón

Propiedades de los rayos canales

- ✓ los rayos viajan en línea recta al ánodo.
- ✓ Ellos consisten de partículas.
- ✓ Estos rayos contienen una carga positiva.
- ✓ Su carga positiva es de igual magnitud a la carga del electrón o algunos múltiplos de estos.
- ✓ Estas partículas tienen una masa **1836** veces mayor a la del electrón.



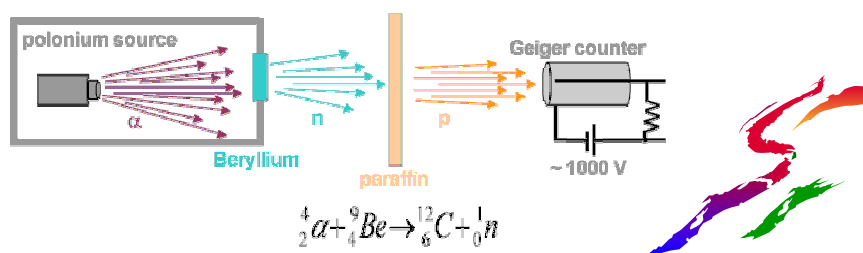
44

Descubrimiento del neutrón

En 1920, Rutherford postuló que debía haber otra partícula masiva y neutra en el núcleo del átomo (**neutrón**).

Inicialmente el neutrón fue observado en 1930 por Bothe y Becker al usar Polonio radioactivo y Berilio. En 1932, el físico inglés James Chadwick al realizar el mismo experimento y propuso que estas partículas eran los neutrones de Rutherford.

En 1935, Chadwick fue premiado con el premio Nóbel por su descubrimiento

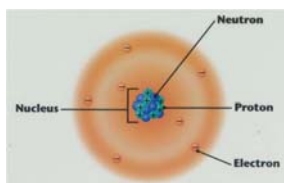
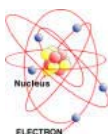
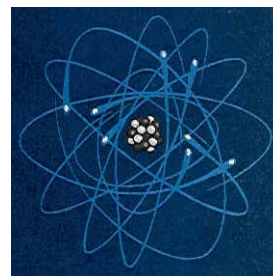


45

El **modelo atómico de Rutherford**, quedó completado en los siguientes términos:

- ✓ Los átomos constan de núcleos muy pequeños y sumamente densos, rodeados de una nube de electrones a distancias relativamente grandes de los núcleos.
- ✓ Todos los átomos, con excepción de la forma más común de hidrógeno, contienen protones y neutrones en su núcleo.

El neutrón de carga nula presenta una masa (1,00866 uma o 1.67482×10^{-27} kg) ligeramente superior a la del protón (1,00727 uma)



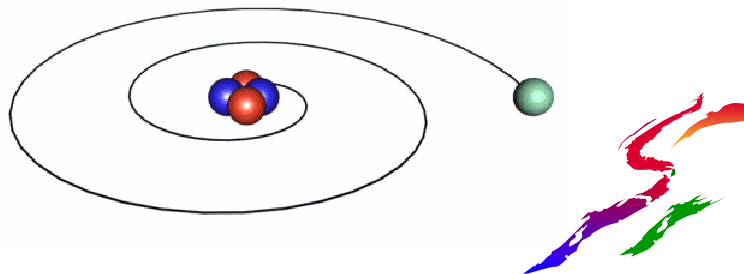
46

Limitaciones del modelo de Rutherford



Pero la teoría clásica de la radiación (ecuaciones de Maxwell) predice que el átomo pierde energía, en forma de radiación electromagnética dando un arco iris de colores, debido a la aceleración del electrón en las orbitas.

Clásicamente, el electrón se precipitara en espiral al núcleo.
(Efecto ***)

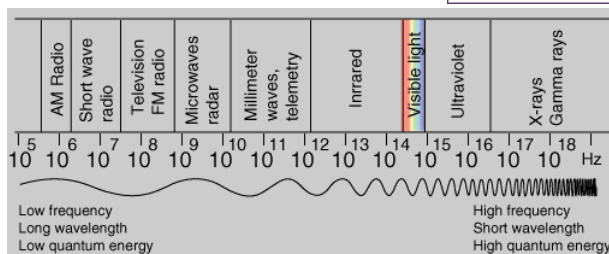
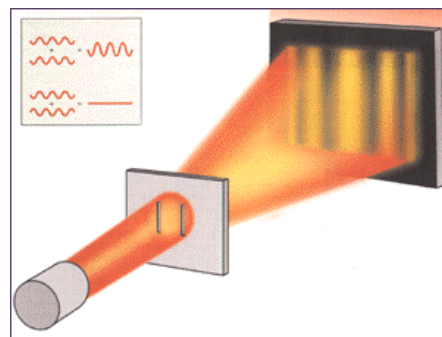


47

Antecedentes al modelo de Borh:



- *La luz y su interacción con la materia*
- *Radiación del cuerpo negro (sólidos)*
- *Efecto fotoeléctrico*
- *Espectros atómicos (gases)*



48

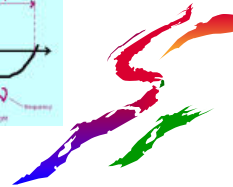
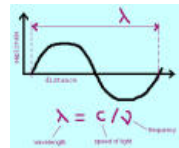
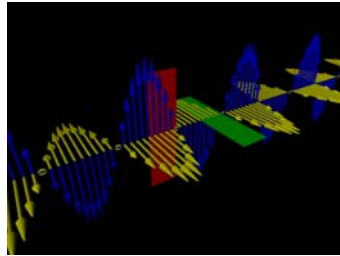
La radiación electromagnética

Las ondas electromagnéticas cubren una amplia gama de frecuencias o de longitudes de ondas y pueden clasificarse de acuerdo a ciertos parámetros. La clasificación no tiene límites precisos.

Estas se caracterizan por su *longitud de onda* " λ " la cual es la distancia entre dos crestas consecutivas de la onda y su *frecuencia* " ν " que es el número de crestas o valles por unidad de tiempo que pasan por cierto punto.

Ambos parámetros están relacionados por la ecuación:

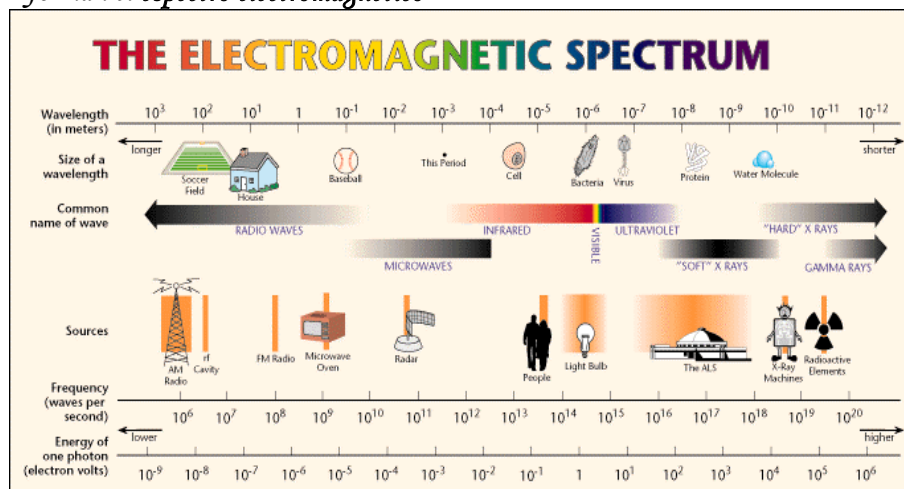
$$c = \lambda \nu \text{ donde } c \text{ es la velocidad de la luz } (2.998 \times 10^8 \text{ m/s}),$$



49

El espectro electromagnético

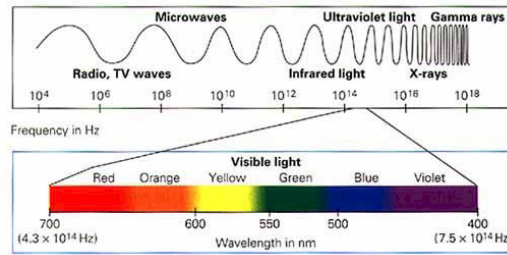
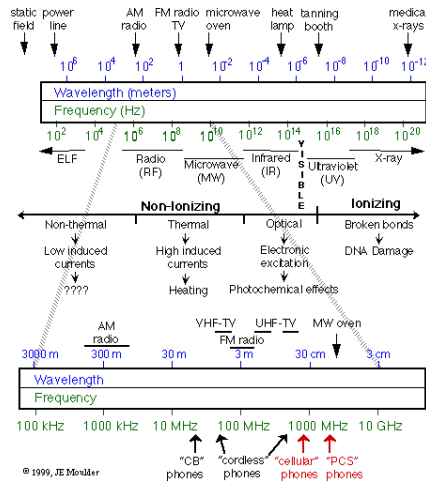
El conjunto de radiación electromagnética (indistinto de su longitud de onda) forman el **espectro electromagnético**



50

El espectro electromagnético y la luz (visible)

A.S.P.



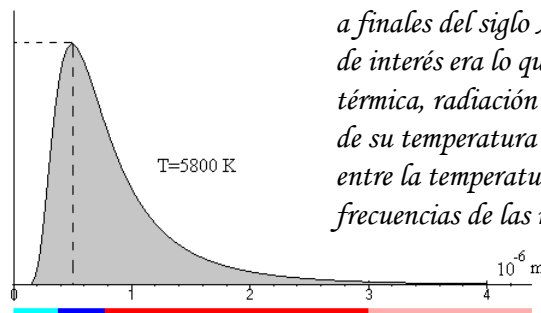
Espectro de la luz blanca (región del visible)



51

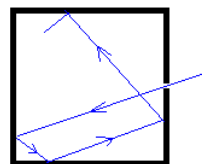
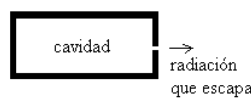
La materia y su interacción con la luz: Radiación del cuerpo negro

A.S.P.



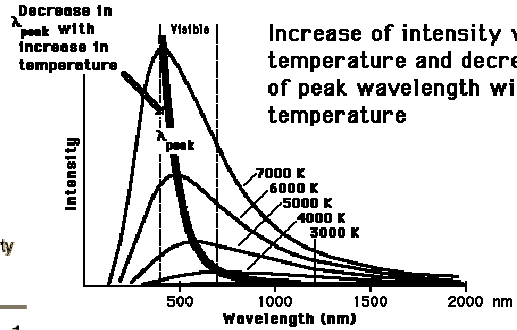
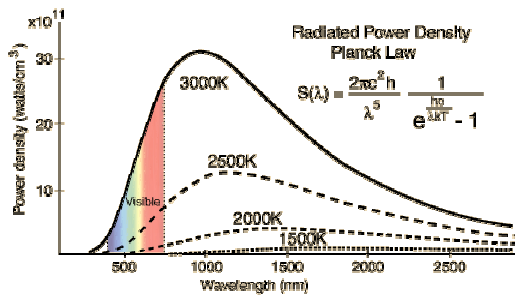
a finales del siglo XIX, una de las principales áreas de interés era lo que se conoce como radiación térmica, radiación emitida por un cuerpo por efecto de su temperatura a fin de encontrar una relación entre la temperatura de un cuerpo y el espectro de frecuencias de las radiaciones emitidas

Cuerpo negro; sistema que absorbe o emite todas las longitudes de onda



52

Cuando la temperatura de un radiador de cuerpo negro se incrementa, la energía irradiada total también incrementa y el pico de la curva de radiación se desplaza a longitudes de onda mas cortas.

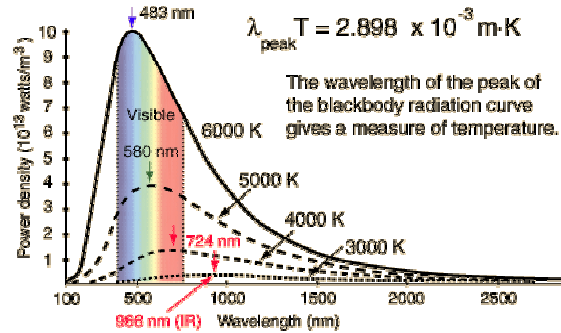


cuando el máximo es evaluada de la formula de radiación de planck, el producto de la longitud de onda y la temperatura se encuentra ser una constante.

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>

53

Esta relación es llamada **Ley de desplazamiento de Wein** y es usada para la determinar la temperatura de cuerpos radiantes calientes aislados de su alrededor, tales como estrellas.

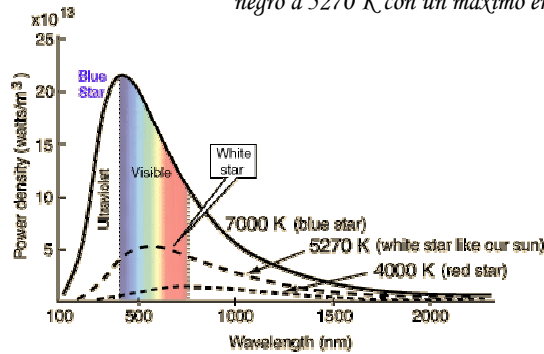


<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>

54

Ley de desplazamiento de Wein

Las estrellas se aproximan a un radiador de cuerpo negro y su espectro visible depende de la temperatura del radiador. Las curvas muestran los espectros de estrellas azules, blancas y rojas. El espectro de la estrella blanca se ajusta a la curva de un cuerpo negro a 5270 K con un máximo en longitud de onda de 550 nm.

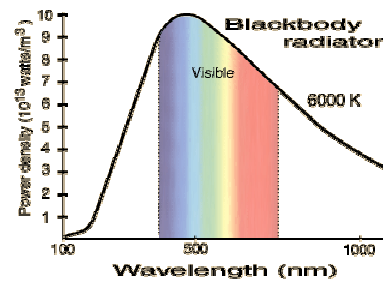
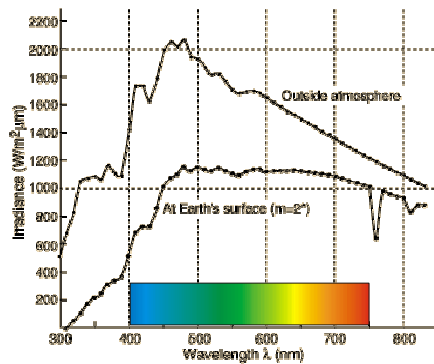


<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>



55

Espectro de irradiación del disco solar



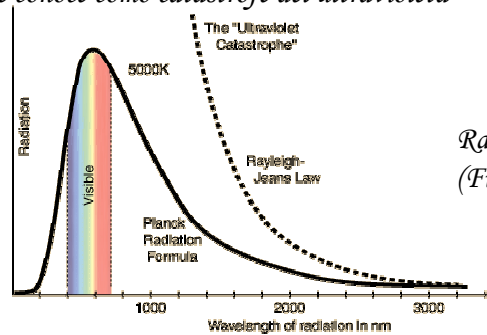
Thekaekara, M. P., Solar energy outside the earth's atmosphere, Solar Energy 14, 109 (1973).

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>

56

Catástrofe del ultravioleta

A fin de tratar de explicar la distribución de las radiaciones emitidas por un cuerpo negro, a finales del siglo XIX, diversos científicos propusieron una serie de ecuaciones que trataban de describir este fenómeno, sin embargo, dentro de las diversas modelos resalta la propuesta dada por Rayleigh y Jeans la cual estaba basada en conceptos de física clásica. Sin embargo, este modelo falla cuando abarcaba la región de ultravioleta del espectro electromagnético, razón por lo cual se le conoce como catástrofe del ultravioleta



Rayleigh –Jeans
(Física clásica)



57

la cuantización de la energía (Planck)

Históricamente, el nacimiento de la Mecánica Cuántica, se sitúa en el momento en el que **Max Planck** explica el mecanismo que hace que los átomos radiantes produzcan la distribución de energía observada. Planck sugirió en 1900 que:



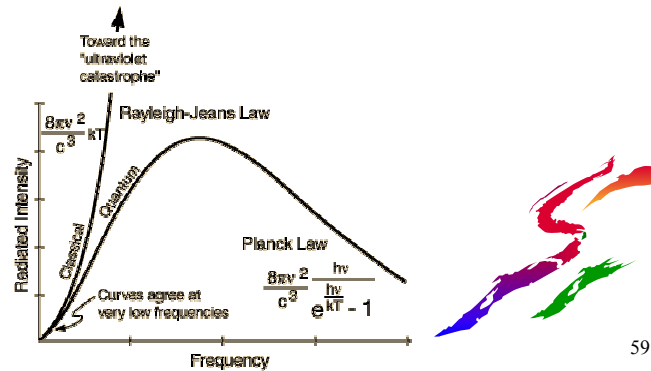
1. La radiación dentro de la cavidad está en equilibrio con los átomos de las paredes que se comportan como **osciladores armónicos** de frecuencia dada ν .
2. Cada oscilador puede absorber o emitir energía de la radiación en una cantidad proporcional a ν . Cuando un oscilador absorbe o emite radiación electromagnética, su energía aumenta o disminuye en una cantidad $h\nu$.



58

La segunda hipótesis de Planck, establece que la energía de los osciladores está cuantizada. La energía de un oscilador de frecuencia f sólo puede tener ciertos valores que son $0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots, nh\nu$.

$E = nh\nu$ donde h es conocida como constante de Planck
y $n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$



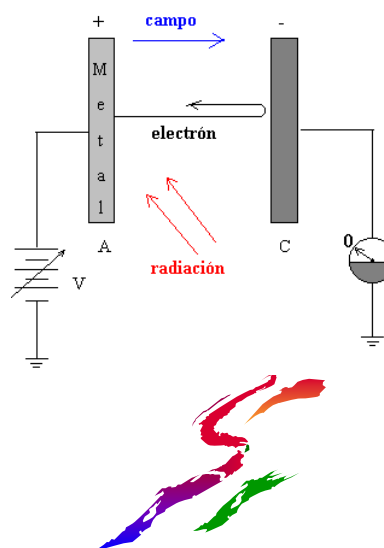
59

Efecto fotoeléctrico

La emisión de electrones por metales iluminados con luz de determinada frecuencia fue observada a finales del siglo XIX por Hertz y Hallwachs. El proceso por el cual se liberan electrones de un material por la acción de la radiación se denomina efecto fotoeléctrico o emisión fotoeléctrica.

Sus características esenciales son:

- ✓ Para cada sustancia hay una frecuencia mínima o umbral de la radiación electromagnética por debajo de la cual no se producen fotoelectrones por más intensa que sea la radiación.
- ✓ La emisión electrónica aumenta cuando se incrementa la intensidad de la radiación que incide sobre la superficie del metal, ya que hay más energía disponible para liberar electrones.



60

Efecto fotoeléctrico (Einstein)

En 1905, Einstein explicó las características del efecto fotoeléctrico, suponiendo que cada electrón absorbía un cuanto de radiación o fotón*.

Sea ϕ la energía mínima necesaria para que un electrón escape del metal. Si el electrón absorbe una energía $h\nu$, la diferencia $h\nu - \phi$, será la energía cinética del electrón emitido.

$$E_k = h\nu - \phi$$

Si la energía del fotón E , es menor que la energía de arranque ϕ , no hay emisión fotoeléctrica. En caso contrario, si hay emisión y el electrón sale del metal con una energía cinética E_k igual a $h\nu - \phi$.

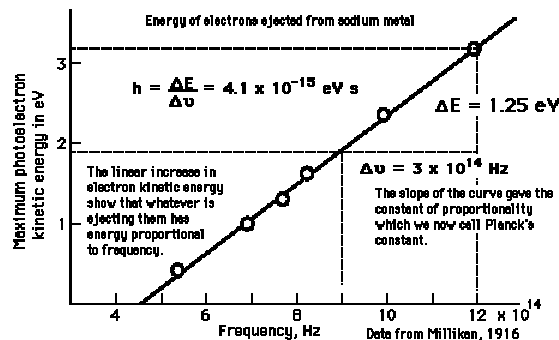


* Gilbert N. Lewis propone el nombre de fotón a un quantum de luz (Nature, Vol 118, Pt. 2, Diciembre 18, 1926), vease <http://www.nobeliefs.com/photon.htm>



61

El planteamiento de Einstein al efecto fotoelectrico fue comprobado experimentalmente por Mullikan.*



* Millikan, R. A., *Phys. Rev.*, 7, 362 (1916).



62

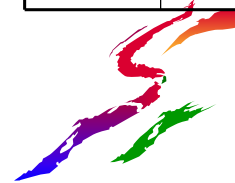
Funciones trabajo (ϕ) de algunos elementos químicos



Elemento	ϕ (eV)
Aluminio	4.08
Berilio	5.0
Cadmio	4.07
Calcio	2.9
Carbono	4.81
Cesio	2.1
Cobalto	5.0
Cobre	4.7

Elemento	ϕ (eV)
Hierro	4.5
Magnesio	3.68
Mercurio	4.5
Níquel	5.01
Niobio	4.3
Oro	5.1
Plata	4.73
Platino	6.35

Elemento	ϕ (eV)
Plomo	4.14
Potasio	2.3
Selenio	5.11
Sodio	2.28
Uranio	3.6
Zinc	4.3

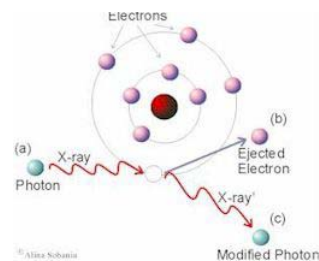


63

Efecto Compton



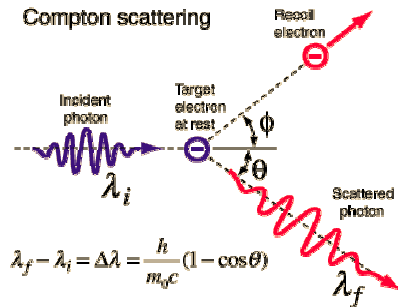
El desplazamiento en longitud de onda *upon scattering* de la luz por electrones estacionarios. El efecto Compton provee la confirmación final de la validez de la teoría cuántica de Planck que establece que la radiación electromagnética viene en paquetes discretos (fotones) con energía proporcional a la frecuencia.



En la época (inicio de los años 1920's) cuando la naturaleza corpuscular (fotón) de la luz sugerida por el efecto fotoeléctrico estaba siendo debatido, el experimento de Compton da evidencia clara e independiente del comportamiento corpuscular. Compton fue premiado con el premio Nóbel en 1927 por “el descubrimiento del efecto que lleva su nombre” (A. H. Compton, *Phys. Rev.* **21**, 483; **22**, 409 (1923)).



64

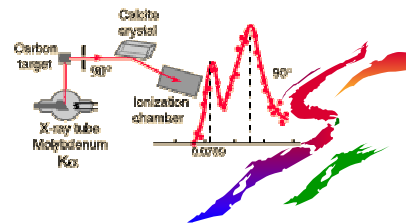


En 1923, Arthur H. Compton observó la scattering de rayos X por electrones en una pieza de carbón y encontró que el rayo scattered con una longitud de onda mayor a aquella que incide sobre la pieza.

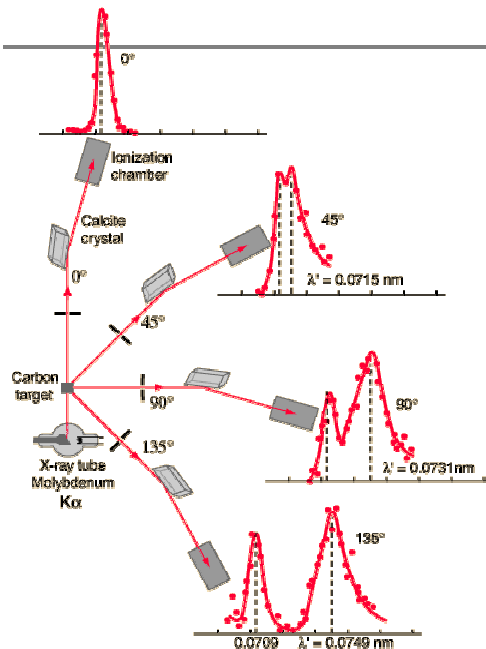
El desplazamiento de la longitud de onda aumento con el ángulo de scattering acorde con la formula de Compton:

Compton explico y modelo los datos asumiendo una naturaleza de partícula (fotón) para la luz y aplicando la ley de la conservación de la energía y del momentum a la colisión entre el fotón y el electrón. El fotón scattered tiene menor energía y por lo tanto una mayor longitud de onda de acuerdo a la ecuación de Planck.

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>



65

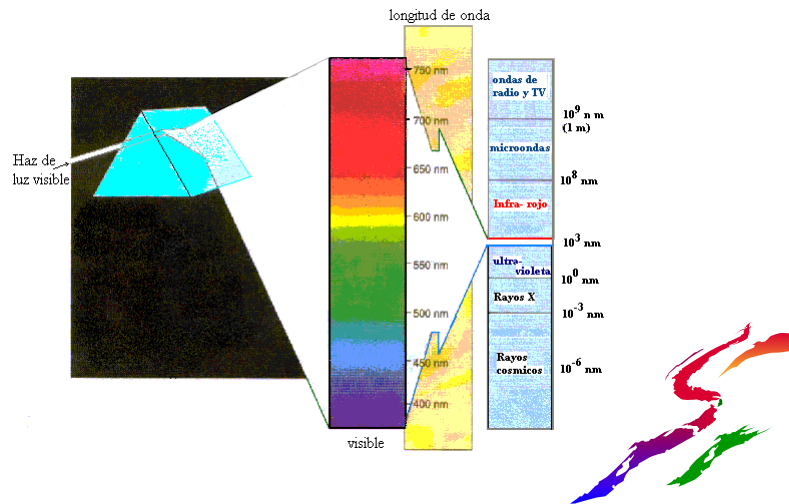


El cambio en la longitud de onda in such scattering depends only upon the angulo de scattering para una sustancia dada. (A. H. Compton, Phys. Rev. 21, 483; 22, 409 (1923))



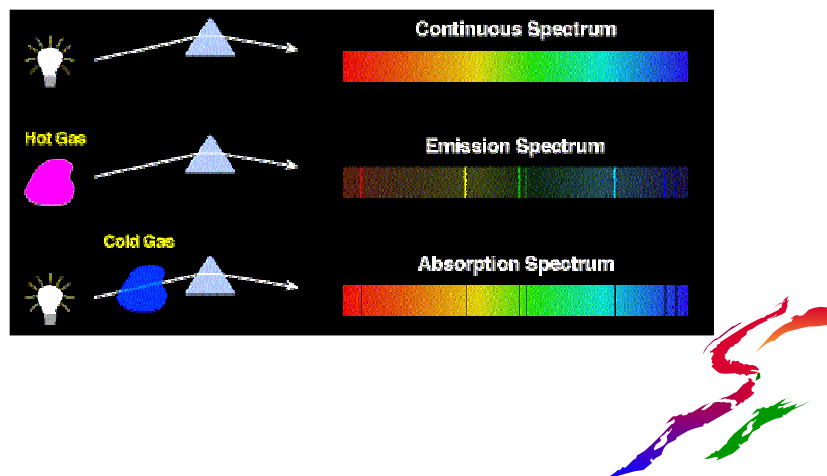
66

Espectros de emisión



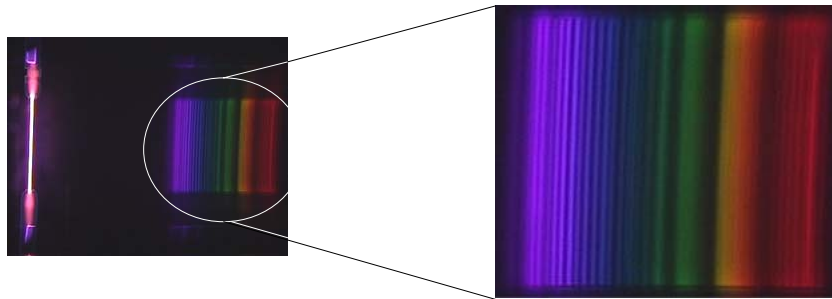
67

Espectros de emisión



68

Espectro atómico de Nitrógeno



69

Espectros atómicos (gases a baja presión)

Hidrógeno



Helio



Carbono



Sodio



<http://home.achilles.net/~jtalbot/data/elements/>



70

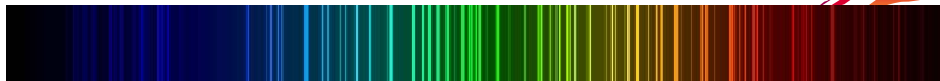
Hierro



Argón



Xenón



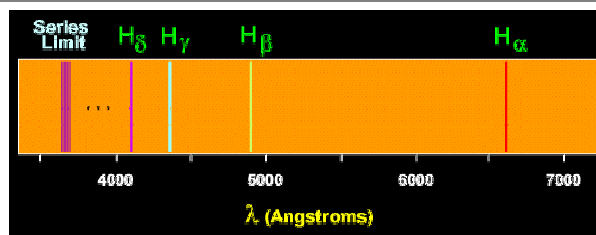
71

Espectros atómicos

En 1885, Balmer propone la ecuación empírica simple

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

donde $n = 3, 4, 5$, etc.



predice las longitudes de onda para las **primeras nueve líneas** de la serie conocida hasta entonces (para el átomo de hidrógeno) con una aproximación de 1/1000.

En 1890, Rydberg encontró conveniente trabajar con el recíproco de la longitud de onda:

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

; $n = 3, 4, 5, \dots$

donde R_H se le conoce como constante de Rydberg para el átomo de hidrógeno ($10967757.6 \text{ m}^{-1}$).

72

Modelo de Bohr

En 1913, el físico danés *Niels Henrik David Bohr* (1885-1962), premio Nóbel de Física en 1922, presentó el primer modelo de un átomo basado en la cuantización de la energía.



Supero las dificultades del modelo de Rutherford suponiendo simplemente que la Física clásica no se podía aplicar al universo atómico. No hay ninguna razón, decidió Bohr, para esperar que los electrones en los átomos irradian energía mientras no se les proporcione ninguna energía adicional. Igualmente los espectros atómicos de absorción y emisión de líneas eran indicativos de que los átomos, y más concretamente los electrones, eran capaces de absorber o emitir “*cuantos*” de energía en determinadas condiciones



73

Postulados del Modelo de Bohr

1.- Un electrón en un átomo se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción coulombica entre el electrón y el núcleo, sujetándose a las leyes de la mecánica clásica



2.- En lugar de las infinitas órbitas que serían posibles en la mecánica clásica, para un electrón solo es posible moverse en una órbita para la cual su impulso angular L ($L = m v r$) es un múltiplo entero de la constante de Planck dividida entre 2π , $\hbar$;

$$L = h/2\pi = n\hbar; \text{ donde } n = 1, 2, 3, 4, \dots$$



74

Postulados del Modelo de Bohr

3.- A pesar que el electrón se acelera constantemente cuando se mueve en una de estas orbitas permitidas, no radia energía electromagnética. Entonces su energía total E permanece constante.

4.- Se emite (o absorbe) radiación electromagnética si un electrón que inicialmente se mueve en una orbita de energía total E_i cambia su movimiento de manera discontinua para moverse en una orbita de energía total E_j , la frecuencia de la radiación emitida (ν) es igual a la cantidad $E_j - E_i$ dividida entre la constante de Planck, h .

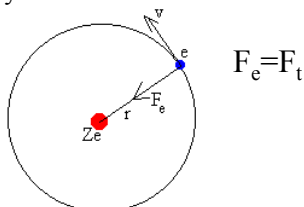
$$\Delta E = E_j - E_i = h\nu$$



75

Modelo de Bohr

De los postulados 1 y 2, y considerando estabilidad mecánica del electrón,



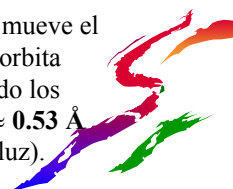
se obtiene;

$$r = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{mZe^2} \quad \text{y} \quad v = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{n\hbar}$$



Niels Bohr (a la derecha) con su hermano Harald

donde r es el radio del átomo y v es la velocidad con la que se mueve el electrón en la orbita con valor de n . Si se evalúa el radio de la orbita mas pequeña ($n=1$) para el átomo de hidrógeno, $Z=1$ y poniendo los valores conocidos de h , m_e y e , se obtiene $r = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m} \approx 0.53 \text{ \AA}$ (radio de Bohr, a_0) y $v = 2.2 \times 10^6 \text{ m/s}$ ($> 1\%$ la velocidad de la luz).



76

Modelo de Bohr

Es posible calcular la energía total (postulado 3) para el electrón en el orbital con *numero cuántico* n :

$$E = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \left(\frac{Z^2}{n^2} \right) = (-13.6 \cdot \text{eV}) \cdot \left(\frac{Z^2}{n^2} \right)$$

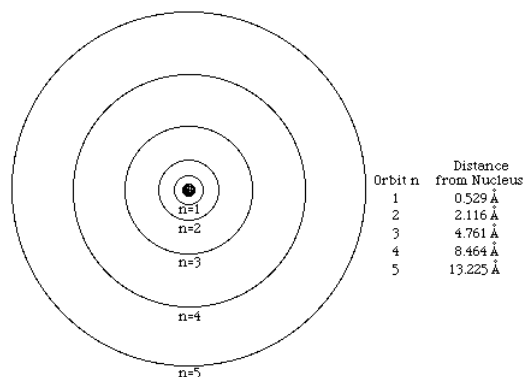
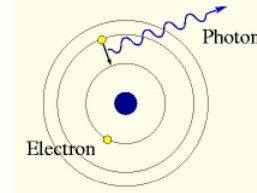
la cual coincide muy bien con la energía de ionización observada experimentalmente para el ^1H .

El postulado 4 permite calcular la frecuencia de la radiación electromagnética cuando un electrón que se mueve en una órbita caracterizada por el número cuántico n_i cambia su movimiento de manera discontinua hasta moverse en una órbita con número cuántico n_j :

$$\nu = \frac{E_j - E_i}{h} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

en términos $1/\lambda$, e igualando con la ecuación de Balmer, tenemos:

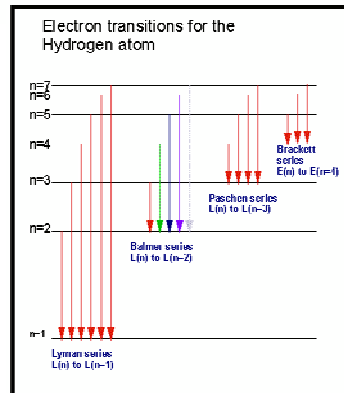
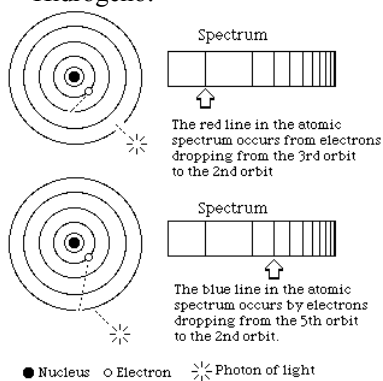
$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c} Z^2 \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \therefore \quad R_H = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c} \quad 77$$



Modelo de Bohr

El modelo de Bohr consigue salvar la inestabilidad recurriendo a la noción de cuantificación y junto con ella a la idea de que la física de los átomos debía ser diferente de la física clásica.

el modelo de Bohr suponía una explicación de los espectros discontinuos de los gases, en particular del más sencillo de todos, el Hidrógeno.



79

Modelo de Bohr

Logros y ventajas

- ✓ Explica el espectro de emisión del átomo de hidrógeno
- ✓ Fundamenta el efecto fotoeléctrico
- ✓ Es el primer modelo donde da un valor para el tamaño de los átomos.
- ✓ Es el primer modelo que aplica el concepto de la cuantización de la energía de Planck
- ✓ Emplea un número cuántico, n .

Desventajas y limitaciones

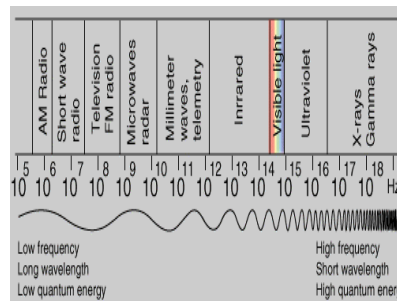
- ☒ Solo es aplicable a átomos de tipo hidrogenoide, es decir un núcleo de carga $Z+$ y un electrón.
- ☒ No es aplicable a átomos con dos o más electrones
- ☒ No permite explicar el enlace químico



80

Limitaciones del modelo de Bohr

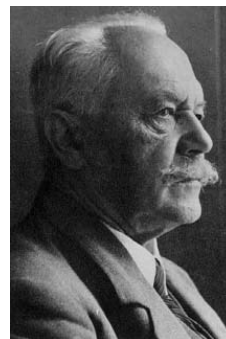
- En los años 1920s, experimentos adicionales mostraron que el modelo atómico de Bohr tenía algunos inconvenientes. El modelo era demasiado simple para describir elementos pesados, incluso para el átomo de hidrógeno.
- Líneas espectrales no aparecen correctamente cuando un campo magnético intenso es aplicado (efecto Zeeman)*



* Peter Zeeman, *The Effect of Magnetisation on the Nature of Light Emitted by a Substance*, *Nature*, 55, 11 81 (1897).

Ampliación del modelo

Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld incluyó **relatividad especial** a la teoría atómica de Niels Bohr y obtuvo orbitas elípticas en la cual los niveles de energía son desdoblados en componentes múltiples.



El publico sus resultados en *Atombau und Spektrallinien* (1922)



Una extensión al modelo de Bohr del átomo hidrogenoide para incluir una segunda condición de cuantización .

En el modelo de Sommerfeld, el numero cuántico principal es:

$$n = n_r + n_\theta$$

Obteniendo

Donde m es la masa, Z es el numero atómico, e es la carga del electrón, ϵ_0 es la permitividad del espacio libre (vacío), $\hbar$ es h barra, α es la constante de estructura fina, $n_r = 0, 1, \dots$ es el cuántico numero radial y $n_\theta = 1, 2, \dots$ es el cuántico numero azimutal.

la regla de selección para una transición es;

$$\Delta n_\theta = \pm 1$$



83

Así, acorde al modelo de Bohr-Sommerfeld, no solo los electrones viajan en ciertas orbitas sino que también las orbitas tienen distinta forma y las orbitas además pueden orientarse en presencia de un campo magnético.

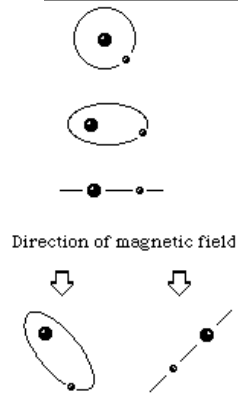
Las orbitas pueden aparecer de forma circular o elíptica, y pueden incluso formar con el núcleo una línea recta.

Quantum numbers		
Orbit		n
Shape		l
Tilt		m

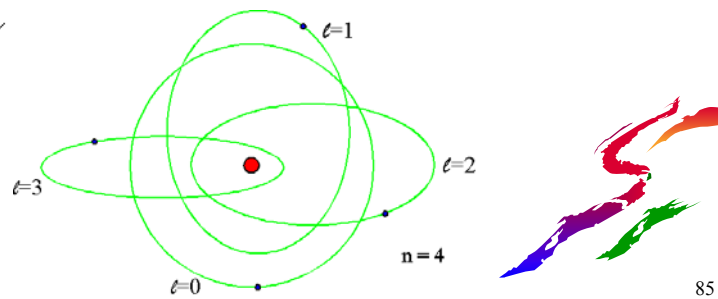
La situación del estado de la orbita es asignada por sus números cuánticos: numero de la orbita (n), forma de la orbita (l) y **tilt** de la orbita (m).



84



The orbit shapes and various angles to the magnetic field could only have certain shapes, similar to an electron in a certain orbit. As an example, the fourth orbit in a hydrogen atom can have only three possible shapes and seven possible traits. These added states allowed more possibilities for different spectral lines to appear. This brought the model of the atom into closer agreement with experimental data.



85

Modelos atómicos (*moderna teoría atómica*)

God said $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \Psi = E \Psi$
 and there was **Light!**

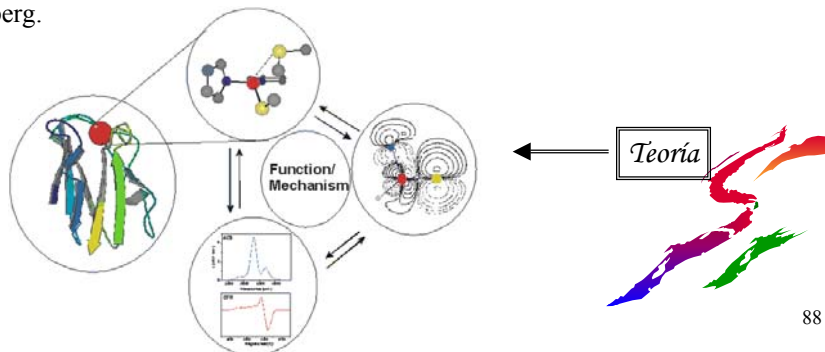


87

Nacimiento de una nueva teoría; la mecánica cuántica

La mecánica cuántica moderna surge hacia 1925 como resultado del conjunto de trabajos realizados por Heisenberg, Born, Jordan, Schrödinger, Dirac y otros, y es capaz de explicar de forma satisfactoria no sólo la constitución atómica sino otros fenómenos fisicoquímicos, además de predecir una serie de sucesos que posteriormente se comprobarán experimentalmente.

La mecánica cuántica se basa en la teoría de Planck, y toma como punto de partida la dualidad onda-partícula de Louis De Broglie y el principio de incertidumbre de Heisenberg.



88

Dualidad onda - partícula

En 1924, el príncipe francés Louis Víctor De Broglie extendió el carácter “dual” de la luz a los electrones, protones, neutrones, átomos y moléculas, y en general a todas las partículas materiales



pensó que si la luz se comportaba como onda y como partícula la materia también debería poseer este carácter dual, manifiesto en la siguiente ecuación;

$$\lambda = h/mv$$
 Ondas electromagnéticas $\rightarrow$ Partículas (masa finita)

Esta atrevida hipótesis fue experimentalmente confirmada en forma simultánea por Clinton Joseph Davisson, y su discípulo Germer, al difractar un haz de electrones sobre un cristal de Ni y por Sir George Paget Thomson (hijo de J. J. Thomson) al difractar un haz de electrones sobre una delgada lamina de metal. Ambos compartieron el premio Nóbel de Física en 1937



89

Comportamiento Ondulatorio del Electrón



George P Thomson
(Source: Science Museum)



Clinton Joseph Davisson



90

Principio de incertidumbre

En física clásica, es generalmente aceptado que la posición y el momento (cantidad de movimiento) de un objeto puede ser simultáneamente medidos con exactitud, es decir ninguna incertidumbre es involucrada en su descripción.

Pero en el mundo microscópico esto no es posible. Se ha encontrado que aun con nuestros instrumentos mas refinados hay una limitación fundamental a la precisión con la cual la posición y velocidad de una partícula microscópica puede ser conocida simultáneamente. Esta limitación fue expresada por el fisico alemán Werner Heisenberg en 1927 y conocida como “principio de incertidumbre de Heisenberg”.



Es imposible determinar tanto posición y momento de un electrón simultáneamente. Si una cantidad es conocida entonces la determinación de la otra cantidad será imposible.

sea Δx = incertidumbre en la posición y ΔP = incertidumbre en momentum. El producto de la incertidumbre en la posición y la incertidumbre en momentum es en el orden de $h/2\pi$, donde h es la constante de Planck.

$$\Delta P \times \Delta x \geq h$$



91

Principio de incertidumbre

RESULTADOS DEL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

- Es imposible ubicar un electrón alrededor del núcleo.
- El principio describe la incomplicación de teoría atómica de Bohr.
- De acuerdo al principio de incertidumbre de Heisenberg no hay orbita circular alrededor de el núcleo.
- La posición exacta de un electrón no puede ser determinada precisamente.



LIMITACIONES DEL PRINCIPIO

El principio de incertidumbre no es aplicable a nuestra vida diaria. Es solo aplicable a micro objetos i.e. partículas subatómicas.



92

Sir William Rowan Hamilton (1805 –1865)

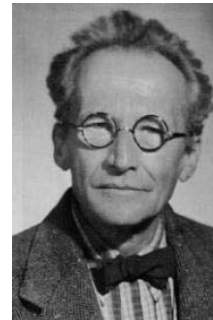
- La función de Hamilton (1835), función Hamiltoniana, expresa la velocidad de cambio en el tiempo para una serie de partículas en movimiento. Esta especifica la energía total (cinética & potencial) en términos de dinámica, posición y momento de partículas.
- Los Hamiltonianos son un método para encontrar el valor mínimo de una ecuación dada y son usados para calcular el camino de menor acción como las orbitas y trayectorias.



93

Modelo ondulatorio de Schrödinger

Inspirado en la hipótesis de De Broglie, el físico austriaco Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger en 1926 propuso un **modelo matemático** que trata de **describir el comportamiento del electrón** en términos de ecuaciones diferenciales similares a las que gobiernan el movimiento ondulatorio (de ahí que se le conozca como **teoría ondulatoria de la materia**).



Este modelo es **puramente** teórico y debe su validez a que sus resultados y conclusiones coinciden plenamente con hechos probados experimentalmente.

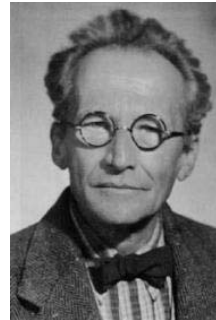


94

Modelo ondulatorio de Schrödinger

Postulados;

1) *Existe una función*



95

El átomo de Hidrógeno



96

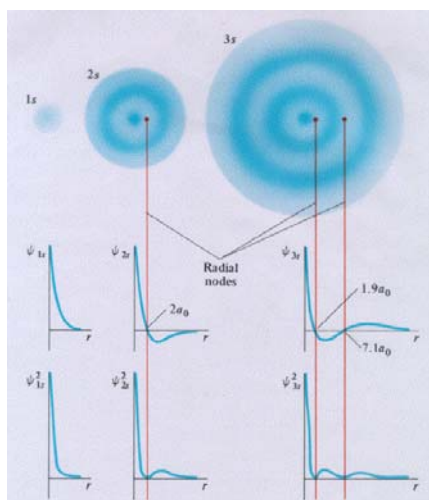
El átomo de Hidrógeno

Función $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$	orbital	Parte radial	Parte angular
$\Psi_{1,0,0}$	1s		
$\Psi_{2,0,0}$	2s		
$\Psi_{2,1,\pm 1}$	$2p_{x,y}$		
$\Psi_{2,1,0}$	$2p_x$		



97

El átomo de Hidrógeno



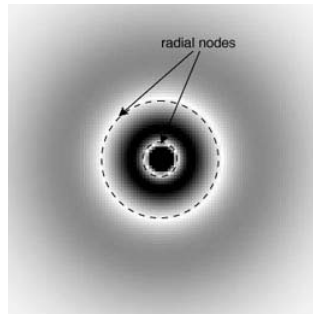
Orbital s



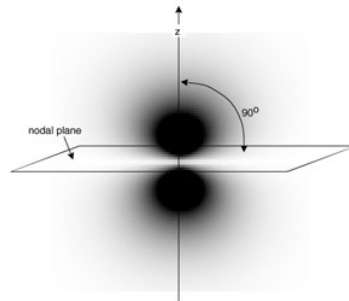
Orbital 2p

Orbital $3d_{z^2}$ Orbital $4f_{z^2}$ 

98



2s

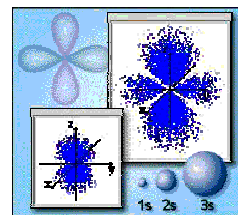
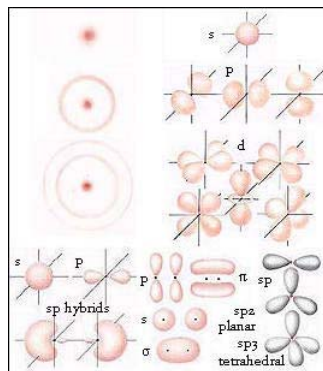


2p



99

El átomo de Hidrógeno



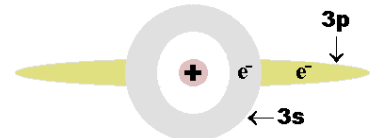
100

Degenerados: orbitales con el mismo nivel energético!

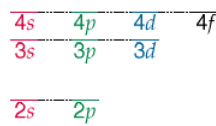
- Teóricamente, electrones en la misma capa poseen la misma energía. Esto no es cierto para átomos multi-electrónicos
la razón es el **ESCUDAMIENTO**!
El escudamiento resulta de la repulsión de los electrones en la misma capa o con capas internas.

Consideraremos el escudamiento de la misma capa.

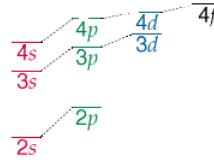
Energías de la 3^{er} capa: $3s < 3p < 3d$
estas diferencias son debidas al escudamiento!



3s Shields 3p
Electrons in 3p have higher energy



(a) Hydrogen

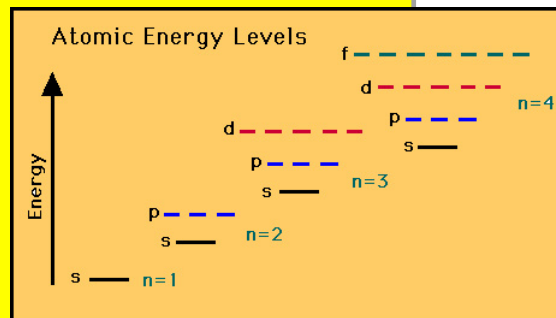


(b) Multielectron atoms



101

Los Orbitales son como "cuartos" dentro de los cuales los electrones "habitan". La subcapa s tiene un orbital s. La subcapa p tiene 3 orbitales p.

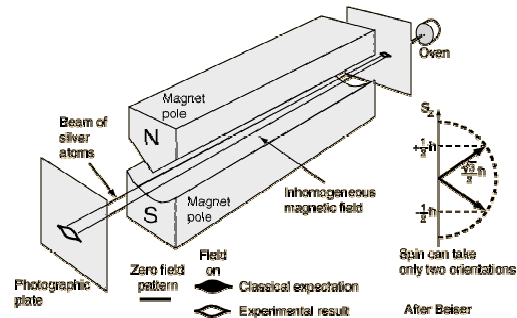


102

El espín del electrón

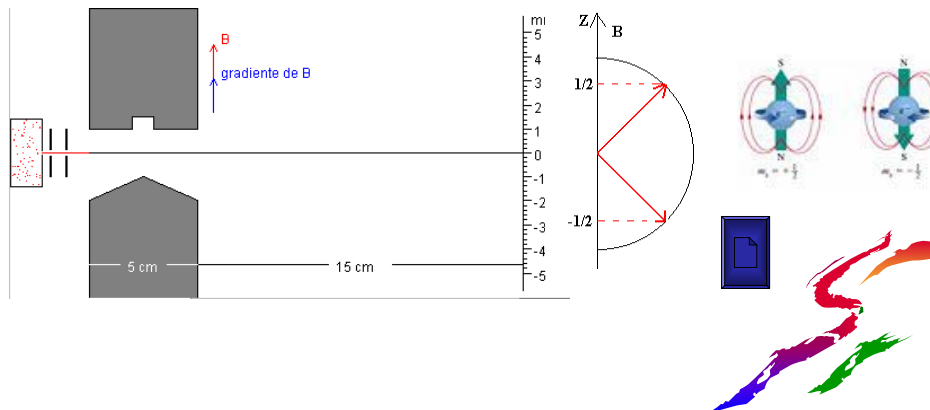


*Samuel Goudsmit
delivering his lecture in
1971.*

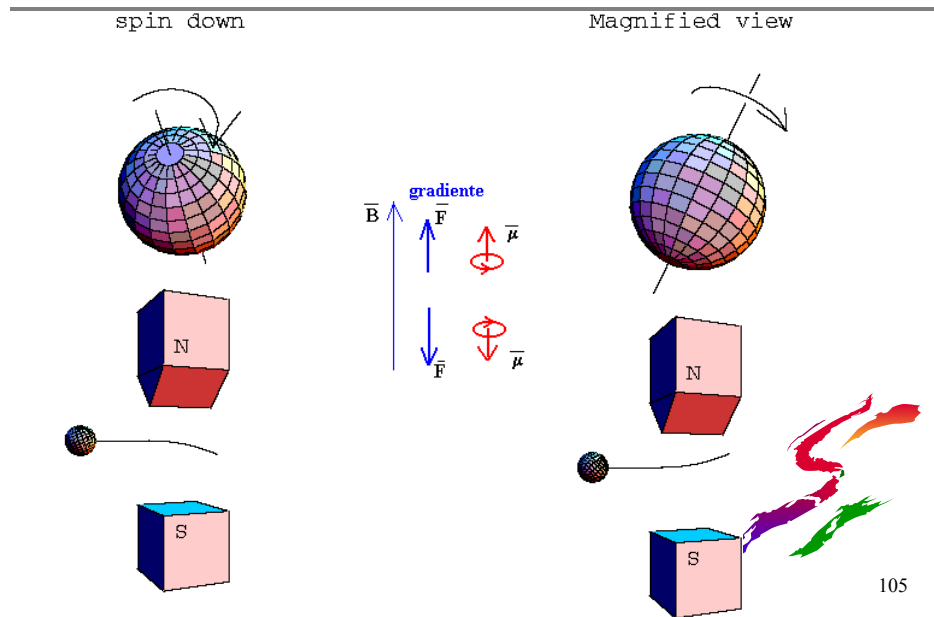


103

El espín del electrón (Experimento de Stern- Gerlach)



104



Criterios para el llenado de los niveles energéticos

Principio de construcción

Principio de exclusión

Regla de Hund



Configuración electrónica

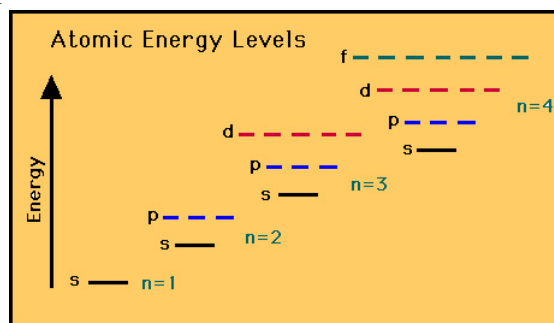
- ✓ Orden o ubicación de los electrones dentro del átomo



107

Principio de construcción o regla de *Aufbau*

- ✓ Los electrones se van ubicando en los orbitales del átomo en orden creciente de energía



1s
 2s 2p
 3s 3p 3d
 4s 4p 4d 4f
 5s 5p 5d 5f 5g
 6s 6p 6d 6f 6g 6h

Regla de las diagonales



108

Principio de exclusión

Wolfgang Pauli (1900-1958) nació en Viena

- ***Dos electrones en un átomo no pueden tener números cuánticos idénticos.***

Este es un ejemplo de un principio general el cual se aplica no solo a electrones sino también a otras partículas de espín fraccionario (Fermi-Dirac, Bosones). No se aplica a partículas de espín entero (Bose-Einstein, bosones).



- 1945, Pauli obtiene el premio Nóbel por el descubrimiento del principio de exclusión.



109

Principio de máxima multiplicidad o regla de Hund



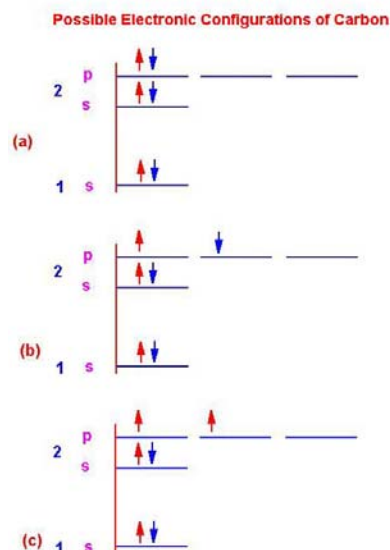
Friedrich Hund
nació en 1896

El termino de máxima multiplicidad de espín (Ms) es el de menor energía.

$$M_s = 2S_T + 1$$

Donde S_T es el espín total

$$S_T = \sum s_i$$



Configuración electrónica

✓ Orden de los electrones dentro del átomo

Así para el átomo ${}_{34}\text{X}$

Se tiene la siguiente configuración electrónica

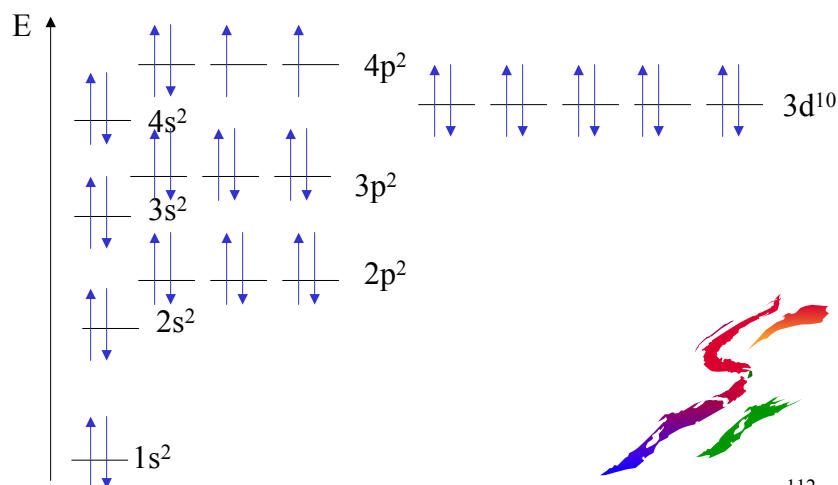
${}_{34}\text{X} ; 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 3p^4$



111

Configuración electrónica

${}_{34}\text{X} ; 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 3p^4$



112

Configuración electrónica de átomos con carga



En especies con carga positiva (cationes) o negativa (aniones), el número atómico (el número de protones en el núcleo) no cambia solamente el número de electrones así que estos se van a ubicar en espacios vacantes en el caso de aniones o van a dejar espacios libres dentro del átomo

${}_{34}\text{X}^+$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 3p^3$	cación
${}_{34}\text{X}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 3p^4$	especie neutra
${}_{34}\text{X}^-$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 3p^5$	anión monocargado
${}_{34}\text{X}^{2-}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 3p^6$	anión doblemente monocargado



113



Bibliografía

- T. Brown, E. Le May & B. E. Burnsted “**Química la ciencia central**”, Prentice Hall, 1999
- Casabo I Gispert, Jaume, “**Estructura atómica y enlace químico**”, Reverte S. A.
- D. Cruz, Chamizo, A. Garritz, “**estructura atómica: un enfoque químico**”, FEI, 1985
- Eisberg, R. & Resnick, R., “**Física cuántica; átomos moléculas, sólidos, núcleos y partículas**”, Limusa, 1994.
- P. A. Cox “**Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure (Oxford Chemistry Primers, 37)**”, Oxford University Press



114