

MATERIALES Y DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS (Ing Computación)

MATERIALES ELÉCTRICOS (Ing. Eléctrica, Electrónica y Biomédica)

GUIA DE ESTUDIO

MODELOS ATÓMICOS

Los átomos están compuesto por:

- **Núcleo**, de carga eléctrica positiva donde reside casi la totalidad de la masa del átomo.
- **Nube electrónica**, formada por los electrones, de carga eléctrica negativa, en movimiento permanente, girando alrededor del núcleo en orbitales a gran distancia.

El **Núcleo** está formado por Neutrones y Protones.

- **Neutrón**: partícula material sin carga eléctrica (neutra)
- **Protón**: partícula material con carga eléctrica positiva (igual en módulo a la del electrón).

La cantidad de protones en el núcleo, que es igual al número de electrones en la nube. Si +e es la carga del protón, la carga total del núcleo será +Ze, donde Z es el Número Atómico.

Propiedades de las partículas nucleares			
Partícula	Masa en reposo	Carga eléctrica	Masa partícula Masa del electrón
Electrón	9,1095E-31 kg	-1,602 189E-19 Cb	1
Protón	1,6726E-27 kg	+1,602 189E-19 Cb	1836,325
Neutrón	1,6750E-27 kg	0	1838,740

Los electrones que forman la **Nube electrónica** se mueven permanentemente alrededor del núcleo. Siguen trayectorias que no podemos conocer ni especificar. Para cada electrón solo podemos conocer la característica promedio de su movimiento orbital (alrededor del núcleo) caracterizada por el **Momento Angular Orbital M_{ao}** o también “L” y del movimiento de rotación sobre si mismo (spin) con **Momento Angular Spin M_{as}** .

Los electrones giran alrededor del núcleo de modo que su fuerza centrífuga es igual a la atracción electrostática, pero de sentido contrario.

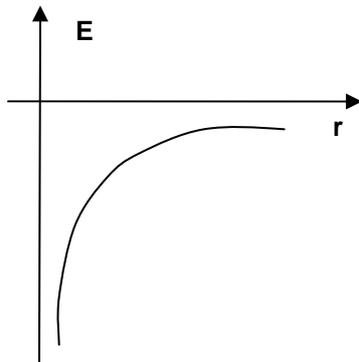
Fuerza de atracción eléctrica = fuerza centrífuga

$$q^2/(4*\pi*\epsilon_0 *r^2) = m*v^2/r$$

Para visualizar la atracción del núcleo sobre los electrones de la nube, analicemos la Energía Potencial U(r) que experimenta un electrón orbital, debida a las cargas eléctricas del núcleo.

$$U(r) = - q^2/(4*\pi*\epsilon_0 *r)$$

Representando U(r) en función del radio r, veremos un pozo de energía potencial dentro del que está confinado cada electrón orbital.



Cada electrón orbital se mueve, dentro del pozo de potencial del núcleo, con velocidad tangencial v . **El Momento Angular Orbital será $m \cdot v \cdot r$.**

Según la **Mecánica Cuántica** en cada orbital debe entrar un número entero de longitudes de onda de De Broglie puesto que el electrón se debe comportar como una onda estacionaria en el átomo.

Según **De Broglie**: Toda partícula material de masa m que se encuentra en movimiento, velocidad v y cantidad de movimiento o momento p

$$p = m \cdot v$$

se puede representar por una onda matemática (u onda de probabilidad) de longitud de onda λ . La relación entre la longitud de onda λ y la cantidad de movimiento p es:

$$\lambda = h / p$$

Con “ h ”: constante de Planck = $6.62 \cdot 10^{-34}$ Joule · segundo

Entonces suponiendo una orbita circular en su perímetro debe entrar un número “ n ” de longitudes de onda $2 \cdot \pi \cdot r = n \lambda = n (h / p)$

Donde n es el número **cuántico principal** y solo puede tener valores enteros 1, 2, 3 ... n

Observamos que el radio también puede tener ciertos valores discretos determinados por n

Entonces la energía total será calculando energía cinética más energía potencial de los orbitales permitidos. O también podemos decir que “Las energías de los estados permitidos” serán:

$$E = - m \cdot q^4 / 2 \cdot (2 \cdot \epsilon_0 \cdot h \cdot n)^2$$

Este es el llamado átomo de Bhor

La hipótesis de Bohr que justifica su modelo es que el Mao está cuantificado. Sólo puede adoptar valores

$$Mao = L = m \cdot v \cdot r = 2 \cdot \pi \cdot m \cdot \omega \cdot r^2 = n \cdot (h/2\pi)$$

m es la masa en reposo del electrón,

v es la velocidad tangencial

ω es la velocidad angular

r es el radio de la supuesta órbita circular que describe,

n es el número cuántico principal,

h es la constante de Planck

Las Hipótesis de Bohr:

1. Las únicas orbitales permitidas son aquellas que cumplen que

$$Mao = L = m \cdot v \cdot r = 2 \cdot \pi \cdot m \cdot \omega \cdot r^2 = n \cdot (h/2\pi)$$

2. Las orbitales definidas por la condición anterior son estables. El electrón puede permanecer indefinidamente en ese estado sin irradiar energía aunque esté sometido a la aceleración centrípeta correspondiente.
3. El electrón orbital irradiará energía sólo cuando salte de una orbital a otra de menor energía, cuyo estado no esté ocupado. En ese caso irradiará un fotón de frecuencia f , tal que

$$\Delta E = h \cdot f$$

4. El electrón orbital podrá saltar de una orbital estable a otra de mayor energía, si recibe la energía necesaria ΔE por medio de la absorción de un fotón o por excitación mecánica por choque.

Las energías de los estados permitidos serán:

$$E = - m \cdot q^4 / 2 \cdot (2 \cdot \epsilon_0 \cdot h \cdot n)^2$$

Donde n es el número cuántico principal.

Para el caso del Hidrógeno que es el elemento más simple tenemos:

Energía de los primeros estados permitidos para el átomo de Hidrógeno						
n	1	2	3	4	5	6
E_n	-13,58 eV	-3,39 eV	-1,51 eV	-0,85 eV	-0,543 eV	-0,378 eV

Para caracterizar completamente al electrón dentro del átomo de Hidrogeno para que responda a los datos experimentales, son necesario otros tres números cuánticos:

l , número cuántico orbital,

m_l , número cuántico magnético, m_l

m_s , número cuántico spin. m_s

Los números cuánticos juegan el rol de ser las coordenadas de cada estado permitido. Son cuatro y se identifican por letras minúsculas.

El Número cuántico principal n: Determina el valor de la energía del estado que define. En realidad define el orden de magnitud, pues los otros tres números también contribuyen a definir el valor de cada estado. Puede adoptar valores positivos y enteros a partir de 1 (uno).

$$E = - m \cdot q^4 / 2 \cdot (2 \cdot \epsilon_0 \cdot h^*)^2 \cdot (1/n)^2$$

El Número cuántico orbital "l": El Momento Angular Orbital del electrón en su movimiento alrededor del núcleo, que Bohr había postulado que debe estar cuantificado por la relación

$$\mathcal{M}_{ao} = L = m \cdot v \cdot r = 2 \cdot \pi \cdot m \cdot \omega \cdot r^2 = n \cdot (h/2\pi)$$

En realidad puede asumir varios valores desde cero hasta ese valor.

La relación actualizada dice que el modulo del vector $\mathcal{M}_{ao} = L$ puede adoptar los siguientes valores:

$$|\mathcal{M}_{ao}| = (h/2\pi) \cdot (l(l+1))^{1/2}$$

A su vez l está comprendido entre cero (0) y (n-1).

Es decir que, cuando n = 1, al ser l = 0 el Momento Angular Orbital será nulo.

El electrón orbital se mueve, pero de tal manera que su \mathcal{M}_{ao} es nulo.

l	$(l(l+1))^{1/2}$	$\mathcal{M}_{ao} = L$	
0	0	0 Joule seg	0 eV seg
1	1,4142	1,4920E-34	9,3093E-16
2	2,4495	2,5892E-34	1,6124E-15
3	3,4641	3,6546E-34	2,2803E-15

Para otros valores de l calculamos los módulos del vector Momento Angular Orbital. Tengamos en cuenta que este número me dice solo del valor del **módulo del vector**. Nada acerca de su orientación espacial.

El Número cuántico magnético "ml": El \mathcal{M}_{ao} de un electrón orbital (carga -q) podemos asociarlo a un **espira de corriente**. Esta espira define un Momento Dipolar Magnético (imán elemental) de valor:

$$\mu_m = I \cdot A$$

Este Momento μ_m es un vector normal al plano de la espira de corriente. Podemos verlo como en la dirección del \mathcal{M}_{ao} pero de sentido opuesto por el signo negativo de la carga del electrón.

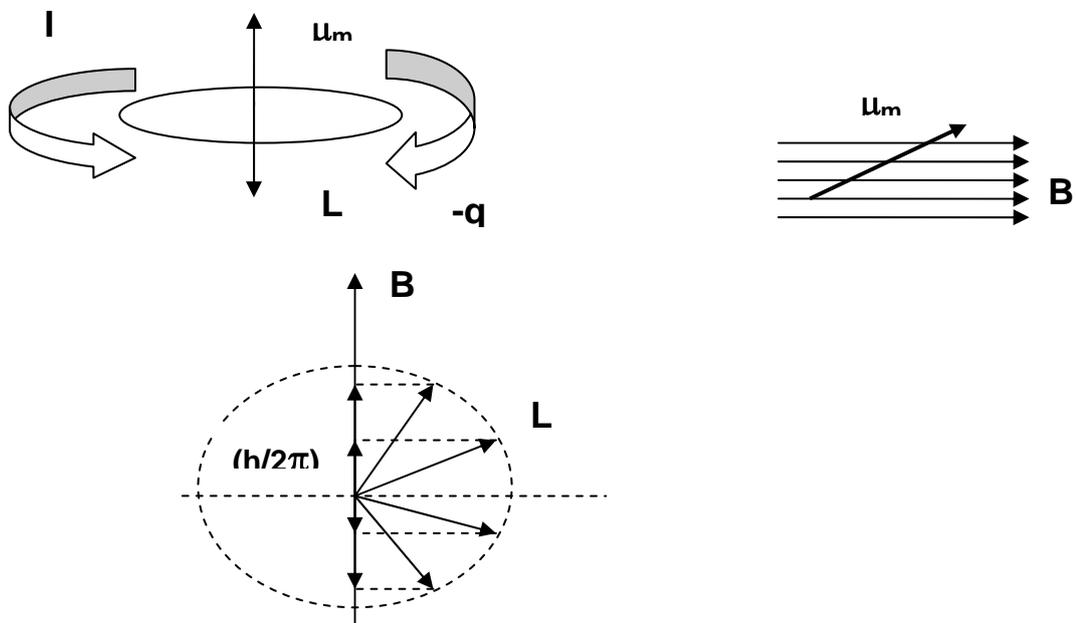
$$\mu_m = -(q/m) \cdot \mathcal{M}_{ao}$$

Resumiendo: l cuantifica el Momento Angular Orbital y también al módulo del Momento Magnético Orbital.

Cuando aparece un Campo Magnético externo B , el momento dipolar magnético reaccionará de alguna manera.

Aparecerá sobre el imán elemental un par proporcional al producto vectorial entre el momento dipolar magnético y la densidad de flujo magnético externo B . Esto hará aparecer una energía potencial magnética tendiente a ordenar a todos los momentos dipolares magnéticos en el mismo sentido.

Aquí aparece otra cuantificación: están limitadas las posiciones posibles del dipolo magnético. En cada posición posible, el valor del M_{ao} proyectado en la dirección del campo magnético externo será $m_l * (h/2\pi)$
 m_l puede adoptar los valores comprendidos entre $-l$ hasta $+l$, pasando por cero.



Ejemplo de aplicación

Para investigar los estados posibles de ser ocupados por electrones orbitales dentro del pozo de energía potencial del núcleo completaremos la tabla siguiente. Asignaremos los valores posibles de n , entre 1 y 3. A partir de ellos, los valores posibles de l y m_l . La cuarta columna la reservamos para el cuarto número cuántico.

Combinaciones de los números cuánticos			
N	l	m_l	
1	0	0	
2	0	0	
2	1	-1	
2	1	0	
2	1	+1	
3	0	0	
3	1	-1	
3	1	0	
3	1	+1	
3	2	-2	
3	2	-1	
3	2	0	
3	2	+1	
3	2	+2	

Con $n = 1$ encontramos un solo estado permitido.

Con $n = 2$ hay uno con $l = 0$ y tres con $l = 1$.

Para $n = 3$, nuevamente un estado para $l = 0$, tres para $l = 1$ y cinco para $l = 2$.

Es hora entonces de analizar el cuarto número cuántico.

Número cuántico spin m_s

Cada electrón orbital de la nube está sometido además, a un movimiento de rotación sobre sí mismo. Como si fuera un trompo que gira sobre su eje.

Una carga eléctrica (el electrón) que gira sobre sí misma se comporta como una pequeña espira de corriente. Es decir que estamos ante un nuevo Momento Dipolar Magnético que llamamos Spin.

El Momento Angular Spin Mas dependerá de un número cuántico angular spin llamado s , que adopta un único valor 0,5.

El módulo del vector Mas responde a un modelo similar al Mao, pero con un valor único:

$$M_{as} = (h/2\pi) * (s (s +1))^{1/2} = 0,866*(h/2\pi)$$

La proyección del vector Mas sobre el campo magnético actuante adoptará solo dos valores: +0,5 y -0,5. En fase y en contrafase con el campo magnético actuante.

La presencia de estos valores de m_s hace que, por cada estado definido en la tabla anterior haya un desdoblamiento en dos estados reales. Es decir que, la tabla quedaría así:

Combinaciones de los números cuánticos			
n	l	m_l	m_s
1 capa K	0 subcapa S	0	+0,5 -0,5
		0	+0,5 -0,5
2 capa L	1 subcapa p	-1	+0,5 -0,5
		0	+0,5 -0,5
		+1	+0,5 -0,5
	0 subcapa S	0	+0,5 -0,5
		0	+0,5 -0,5
3 capa M	2 subcapa d	-2	+0,5 -0,5
		-1	+0,5 -0,5
		0	+0,5 -0,5
	1 subcapa p	+1	+0,5 -0,5
		0	+0,5 -0,5
		-1	+0,5 -0,5
		-2	+0,5 -0,5
	0 subcapa S	0	+0,5 -0,5
		0	+0,5 -0,5

Se dice que todos los electrones de un átomo que tienen el mismo valor de n están en la misma capa electrónica y se las identifica como capa K, L, M y N para n=1,2,3,4 respectivamente.

Un capa se divide en subcapas para cada "l" y se identifican s,p,d,f para l= 0,1,2,3

Completado así el estudio de los números cuánticos, estamos en condiciones de analizar la estructura electrónica de los distintos elementos de la Tabla Periódica.

Estructura electrónica de los elementos

La cantidad de estados permitidos, posibles de ser ocupados por electrones, está relacionada con el número de electrones de cada átomo. Z = número atómico.

Estructura electrónica de los elementos				
n	l	m_l	m_s	Z
1	0	0	2 estados	1 y 2 Helio
2	0	0	2 estados	3 y 4
2	1	3 valores	6 estados	5 al 10 Neón
3	0	0	2 estados	11 y 12
3	1	3 valores	6 estados	13 al 18 Argón
4	0	0	2 estados	19 y 20
3	2	5 valores	10 estados	21 al 30
4	1	3 valores	6 estados	31 al 36 Kripton

Vemos que no se trata de una estructura rígida, donde se van llenando los estados siguiendo el orden creciente de los números cuánticos. El llenado se hace según los valores de las energías de los estados.

Por eso la primer anomalía que aparece cuando se llenan primero los dos estados de $n = 4$ y $l = 0$, antes de completar $n = 3$ y $l = 2$.

Más adelante se producen otras anomalías, por lo que nos detenemos en $Z = 36$.

Constantes de interés		
Planck	$h = 6,626E-34$ Joule seg	$4,136E-15$ eV seg
Boltzmann	$k = 1,381E-23$ Joule/K	$8,62E-5$ eV/K
Número de Avogadro	$N_A = 6,023E23$ moléculas/mol	
$(h/2\pi)$	$1,055E-34$ Joule seg	$6,583E-16$ eV seg

Referencia:

Visitar el sitio: www.maloka.org/f2000/TOC_Full.html

En el Índice de la página principal, buscar:
Átomo Cuántico