

# Modelo Atómico



Modelo Atómico



E  
L  
E  
C  
T  
R  
O  
N  
E  
S



Donde se ubican  
en el Átomo



Que energía  
tienen



Como interactúan



2

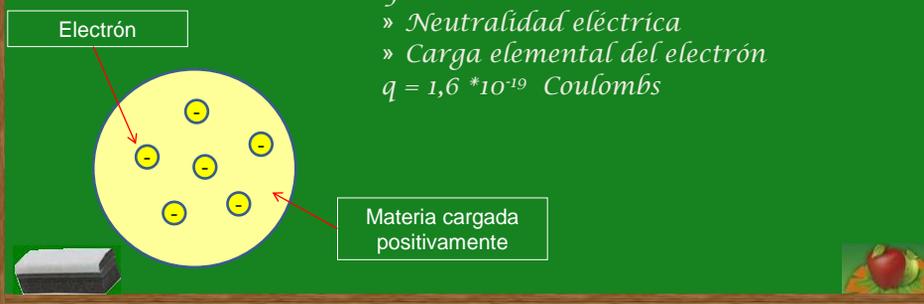


## Thompson (1898):

*Esfera uniforme de materia con carga (+) en la cual se encuentran embebidos los electrones con carga (-)*

- *Conceptos:*

- » *Neutralidad eléctrica*
- » *Carga elemental del electrón*  
 $q = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Coulombs



## Rutherford (1911)

- *Núcleo formado por protones (+ q) y neutrones (sin carga) con casi la totalidad de la masa del átomo*
- *Núcleo rodeado de un número de electrones (- q) igual al número de protones del núcleo para neutralidad eléctrica*

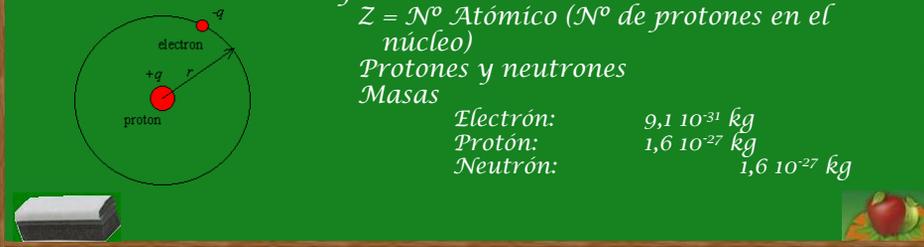
- *Conceptos:*

$Z = N^{\circ}$  Atómico ( $N^{\circ}$  de protones en el núcleo)

Protones y neutrones

Masas

Electrón:	$9,1 \cdot 10^{-31}$ kg
Protón:	$1,6 \cdot 10^{-27}$ kg
Neutrón:	$1,6 \cdot 10^{-27}$ kg



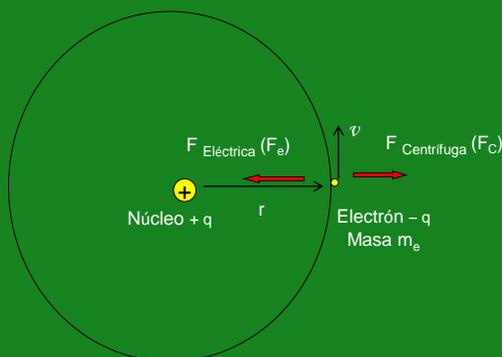
## Modelo del Átomo de Rutherford

$$F_C = m \cdot v^2 / r$$

$$F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r^2}$$

$$F_C = F_e$$

$$\frac{m v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r^2}$$



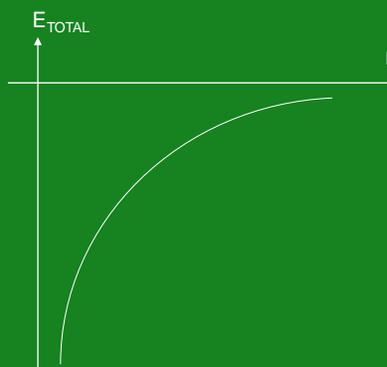
## Energía del Electrón

$$\frac{m v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r^2}$$

$$E_c = 1/2 m v^2 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$$

$$E_p = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$$

$$E_{TOTAL} = E_c + E_p = - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$$



-El electrón al girar tiene un Momento Angular Orbital (MAO)

$$-MAO = m \cdot v \cdot r = \omega \cdot m \cdot r^2$$

$$- \omega \text{ (velocidad angular)} = v / r$$

-El electrón al girar es una espira de corriente y tiene Momento Dipolar Magnético ( $\mu$ )

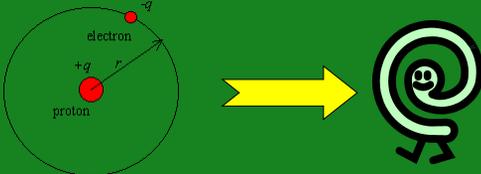
$$\mu = I \times A = (-q / 2m) \times MAO$$



Modelo de Rutherford → Física clásica (Newton) →

- Fuerzas
- Momentos
- Energía

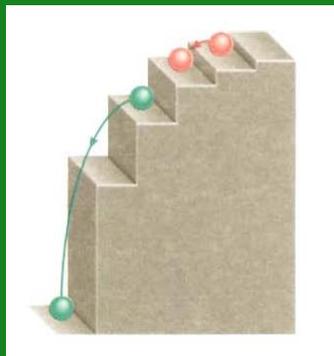
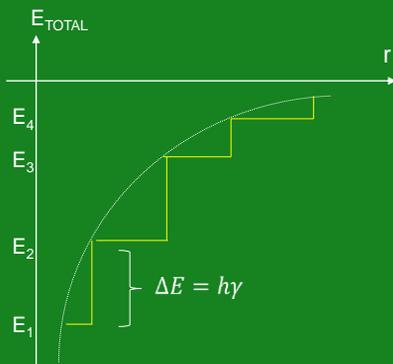
- El modelo no es estable, no está de acuerdo con la Teoría de Maxwell
  - *"Toda carga acelerada irradia energía"*
- El electrón del modelo está acelerado por lo que debería irradiar energía y  $E_{TOTAL}$  debería ir disminuyendo por lo que el radio de giro se hace cada vez menor acercándose al núcleo



## Hipótesis de Bohr (1913)

- 1) Un electrón en el átomo se mueve en una órbita alrededor del núcleo sujeto a las leyes de la Física clásica (Fuerza de atracción eléctrica = Fuerza centrífuga)
 
$$-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$
- 2) No todas las órbitas definidas por la Física Clásica son posibles. El electrón se puede mover solo en aquellas órbitas que cumplen la condición:
 
$$- \quad MAO = m v r = n (h / 2 \pi) \quad h \longrightarrow \text{Constante de Plank}$$
- 3) Las órbitas definidas por la condición anterior son estables (El electrón puede permanecer indefinidamente en ese estado sin irradiar energía – "órbitas no radiantes").

- 4) El electrón irradiará energía sólo cuando salte de una órbita a otra de menor energía, cuyo estado no esté ocupado. En ese caso irradiará un cuanto de frecuencia  $f$ , tal que
- $$-\Delta E = h \gamma$$



- 5) El electrón podrá saltar de una órbita estable a otra de mayor energía, si recibe la energía necesaria  $\Delta E$  por medio de la absorción de un cuanto de energía, por excitación mecánica, o por choque.



9



-Usando las hipótesis de Bohr nos queda un sistema con solución única y **cuantizada** para la velocidad, el radio y la energía del electrón en el átomo

Ecuación 1

$$\frac{m v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r^2}$$

Ecuación 2

$$m v r = n \frac{h}{2\pi}$$

SOLUCIONES

$$v = \frac{1}{2 \epsilon_0} \frac{q^2}{h} \frac{1}{n}$$

$$r = \frac{\epsilon_0}{\pi} \frac{h^2 n^2}{q^2 m}$$

$$E_{\text{TOTAL}} = - \frac{q^4 m}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



## El modelo de BOHR se basa en :

### 1. Propiedad corpuscular de las onda (Planck 1900):

"Una onda de frecuencia  $f$  esta compuesta por paquetes de energía (cuantos) cuyo valor es  $E = h \cdot f$ "

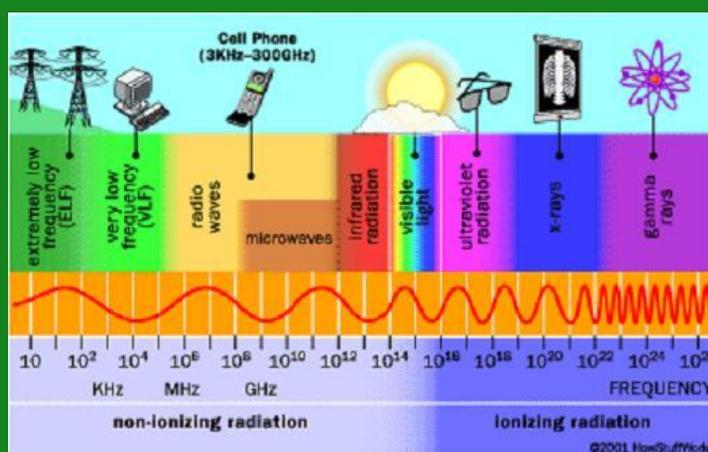


"Cuando la frecuencia del cuanto cae dentro del espectro visible se lo denomina  *fotón* "

Fenómeno que explica: Efecto Fotoeléctrico



## Ondas Electromagnéticas



## 2. Propiedad ondulatoria de la materia (De Broglie 1926):

Una partícula con una cantidad de movimiento  $p = m v$  se puede asociar a una onda cuya longitud  $\lambda$  vale

$$\lambda = h / p = h / m v$$

$h =$  constante de Planck =  $6,63 \times 10^{-34}$  Joule.seg

PARTÍCULA CON CANTIDAD DE MOVIMIENTO

$p$



ONDA DE LONGITUD

$\lambda$

Fenómeno que explica: Difracción de electrones



Partícula de masa  $m$  moviéndose a velocidad  $v$

Tiene asociada una

ONDA DE LONGITUD

$\lambda$

Onda luminosa



Campo electromagnético variable en el espacio y el tiempo

Onda sonora



Presión variable en el espacio y el tiempo

Onda de De Broglie



FUNCION DE ONDA

$\Psi$

EL VALOR DE LA FUNCION DE ONDA  $\Psi$  ESTA RELACIONADO CON LA PROBABILIDAD DE ENCONTRAR LA PARTICULA EN UN PUNTO PARTICULAR DEL ESPACIO EN UN INSTANTE DETERMINADO



15



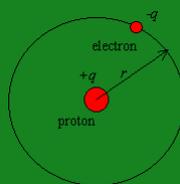
- El electrón girando en la órbita de radio  $r$  con una velocidad  $v$  puede asociarse a una onda de longitud

$$\lambda = h / m v$$

- La longitud de la circunferencia descrita por la órbita será  $2 \pi r$
- Si las dos longitudes son iguales

$$h / m v = 2 \pi r \quad \longrightarrow \quad m v r = h / 2 \pi$$

*La longitud de la circunferencia de la órbita de un estado estable, debe ser igual a un número entero de longitudes de onda del electrón que gira en esa órbita (considerado como onda)*



## • El modelo de Bohr no puede explicar

- Probabilidad de que ocurra una transición
- La formación de los enlaces moleculares en los átomos
- Las líneas del espectro de emisión en presencia de un campo magnético



## Ecuación de Schrödinger (1926)

- Erwin Schrödinger, utilizando la función de onda  $\psi$ , propuso un procedimiento matemático para calcular los estados energéticos permitidos para los electrones en el átomo

ATOMO



Ecuación de Schrödinger



Estados permitidos para los electrones en el átomo

ATOMO



Ecuación de Schrödinger



Números Cuánticos



## Ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

$\psi(x, y, z, t)$ : Función de onda de la partícula

$m$ : masa de la partícula     $E$ : Energía total     $V$ : Energía potencial

- El cuadrado del modulo de la función de onda de una partícula, esta asociado a la densidad de probabilidad de encontrarla en las coordenadas  $x, y, z$ , en el instante  $t$
- La solución de la ecuación de Schrödinger para un átomo especifica los posibles estados energéticos que los electrones puede ocupar en ese átomo
- Estos estados energéticos se caracterizan por un conjunto de números cuánticos



## NUMEROS CUANTICOS

- Se obtienen al resolver la Ecuación de Schrödinger para el átomo
- Están relacionados con los niveles energéticos que pueden tener los electrones en el átomo

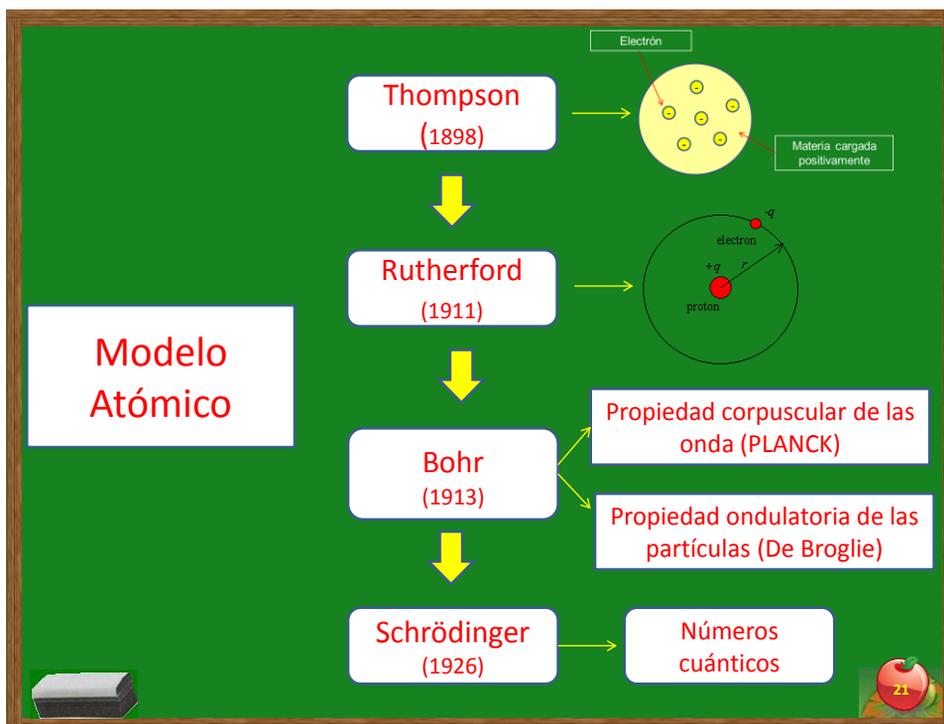
$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

$$m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, \ell$$

$$m_s = \pm 1/2$$

- $n$  : N° cuántico principal, asociado con la energía o radio medio de giro del electrón
- $\ell$  : N° cuántico orbital, asociado con el modulo del momento angular orbital (MAO)
- $m_\ell$  : N° cuántico magnético, asociado con la dirección del vector MAO
- $m_s$  : N° cuántico Spin, asociado con el momento dipolar magnético del giro del electrón sobre su eje



## Configuración electrónica de los átomos

- Conociendo los niveles de energía posibles en el átomo podemos obtener su configuración electrónica.
- La configuración electrónica me indica como se ubican los electrones en el átomo.
- Este orden esta indicado por:
  1. el Principio de exclusión de PAULI
  2. la secuencia de los números cuánticos

### Principio de exclusion de PAULI

*En un sistema, dos electrones no pueden ocupar el mismo estado "mecánico-cuántico"*

*Por lo tanto, en el átomo no puede haber dos electrones en el mismo estado cuántico (tener los mismos números cuánticos)*



### Secuencia de los números cuánticos

- Numero cuántico  $n$  indica la capa  
 $n = 1, 2, 3, \dots$
- Numero cuántico  $l \rightarrow$  sub-capa

$$l = 0 \rightarrow s \quad l = 1 \rightarrow p \quad l = 2 \rightarrow d \quad l = 3 \rightarrow f$$

$$N = 2 n^2$$

	$n$	$l$	$m$	$s$
1s	1	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
2s	2	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
2p	2	1	1, 0, -1	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
3s	3	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
3p	3	1	1, 0, -1	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
3d	3	2	2, 1, 0, -1, -2	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
4s	4	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
4p	4	1	1, 0, -1	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
4d	4	2	2, 1, 0, -1, -2	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
4f	4	3	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$



n	ℓ	ml	ms	electrones	Capa -	electrones
					Subcapa	
1	0	0	± 1/2	2	1s	2
	0	0	± 1/2	2	2s	
2	1	-1	± 1/2	6	2p	8
		0	± 1/2			
		1	± 1/2			
	0	± 1/2	2	3s		
3	1	-1	± 1/2	6	3p	18
		0	± 1/2			
		1	± 1/2			
	2	-2	± 1/2	10	3d	
		-1	± 1/2			
		0	± 1/2			
		1	± 1/2			
		2	± 1/2			
4	0	0	± 1/2	2	4s	32
	1	-1	± 1/2	6	4p	
		0	± 1/2			
		1	± 1/2			
	2	-2	± 1/2	10	4d	
		-1	± 1/2			
		0	± 1/2			
		1	± 1/2			
		2	± 1/2			
		-3	± 1/2			
		-2	± 1/2			
	3	-1	± 1/2	14	4f	
		0	± 1/2			
		1	± 1/2			
2		± 1/2				
3		± 1/2				

- El orden de llenado de los electrones en el átomo sigue el criterio de "menor energía", los electrones tratan de ubicarse en el nivel disponible de menos energía
- El nivel de energía dentro del átomo está relacionado con el número  $n$  (número cuántico principal)  $E_{n1} < E_{n2}$
- Dentro del nivel  $n$  la energía se ordena según las subcapas  $s < p < d < f$
- La secuencia para ir ubicando los electrones en el átomo es entonces
 
$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 3d < 4s < 4p < 4d < 4f$$
- Para átomos poli electrónicos el "apantallamiento" puede alterar al secuencia anterior

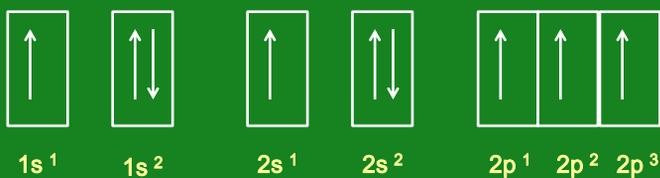
## Notación para indicar la configuración electrónica

Capa

Nº de electrones

Sub - Capa

$1s^x$



## Configuración electrónica de los elementos

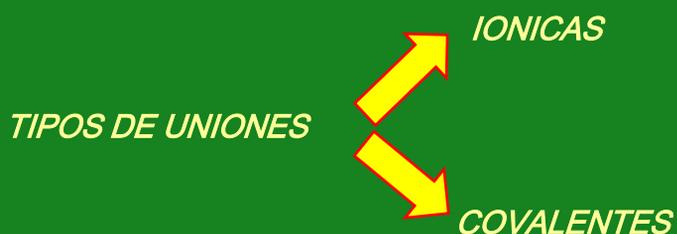
1	Hydrogen	H	$1s^1$						
2	Helium	He	$1s^2$						
3	Lithium	Li	$1s^2$	$2s^1$					
4	Beryllium	Be	$1s^2$	$2s^2$					
5	Boron	B	$1s^2$	$2s^2$	$2p^1$				
6	Carbon	C	$1s^2$	$2s^2$	$2p^2$				
7	Nitrogen	N	$1s^2$	$2s^2$	$2p^3$				
8	Oxygen	O	$1s^2$	$2s^2$	$2p^4$				
9	Fluorine	F	$1s^2$	$2s^2$	$2p^5$				
10	Neon	Ne	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$				
11	Sodium	Na	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^1$			
12	Magnesium	Mg	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$			
13	Aluminum	Al	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^1$		
14	Silicon	Si	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^2$		
15	Phosphorous	P	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^3$		
16	Sulfur	S	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^4$		
17	Chlorine	Cl	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^5$		
18	Argon	Ar	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$		
19	Potassium	K	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$4s^1$	
20	Calcium	Ca	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$4s^2$	
21	Scandium	Sc	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^1$	$4s^2$
22	Titanium	Ti	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^2$	$4s^2$





## UNIONES QUIMICAS

- Los átomos tratan de unirse para obtener el estado mas estable
- El estado mas estable es aquel en el que las capas y sub capas de la configuración electrónica están mas completas



### UNION IONICA



### UNION COVALENTE



A las sub capas  $p^2$  le faltan 4 electrones para estar completa

- Al establecer el solido, cada átomo se asocian con 4 átomos vecinos compartiendo los electrones externos en busca de llegar a un estado mas estable

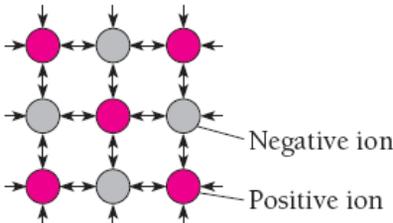


## UNION COVALENTE NO SATURADA (METALICA)

Al:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$  ← A la sub capa  $p^1$  le faltan 5 electrones para estar completa

- Cuando se unen dos átomos de Al, cada uno aporta un electrón y 5 lugares, la combinación da 2 niveles ocupados y 10 disponibles
- Cuando se agrupan los átomos para formar el Xtal (alrededor de  $10^{23}/\text{cm}^3$ ) hay muchos mas lugares disponibles que ocupados
- Podemos considerar que los electrones de esa subcapa no están ligado a ningún átomo en particular y pueden desplazarse por el Xtal. (Gas Electrónico)

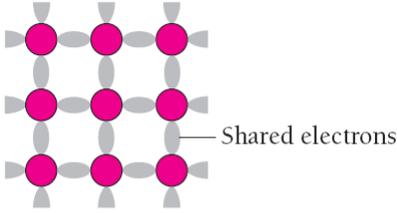


Type	Ionic
Lattice	 <p>Negative ion</p> <p>Positive ion</p>
Bond	Electric attraction
Properties	Hard; high melting points; may be soluble in polar liquids such as water; electrical insulators (but conductors in solution)
Example	Sodium chloride, NaCl $E_{\text{cohesive}} = 3.28 \text{ eV/atom}$

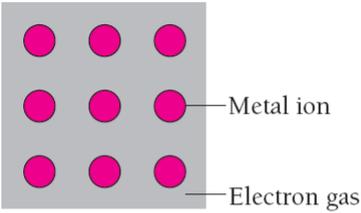


33



Type	Covalent
Lattice	
Bond	Shared electrons
Properties	Very hard; high melting points; insoluble in nearly all liquids; semi-conductors (except diamond, which is an insulator)
Example	Diamond, C $E_{\text{cohesive}} = 7.4 \text{ eV/atom}$

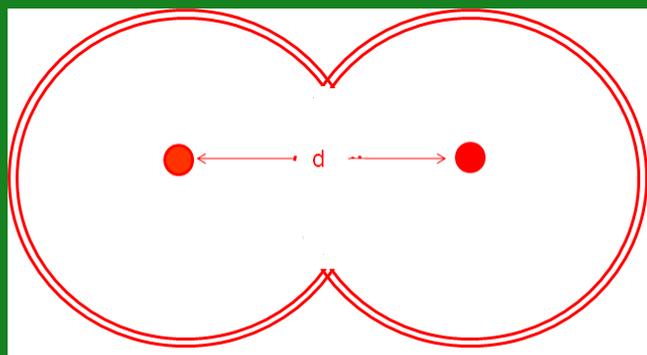
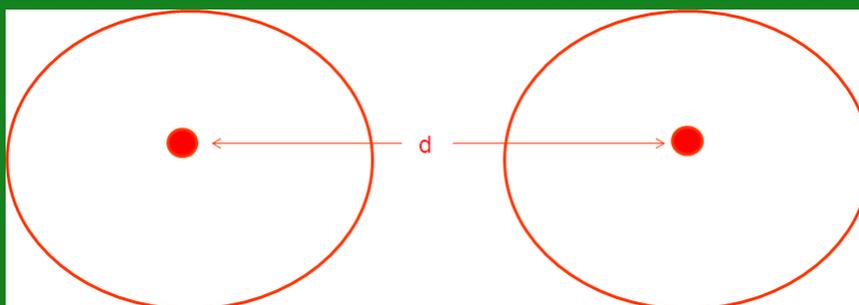
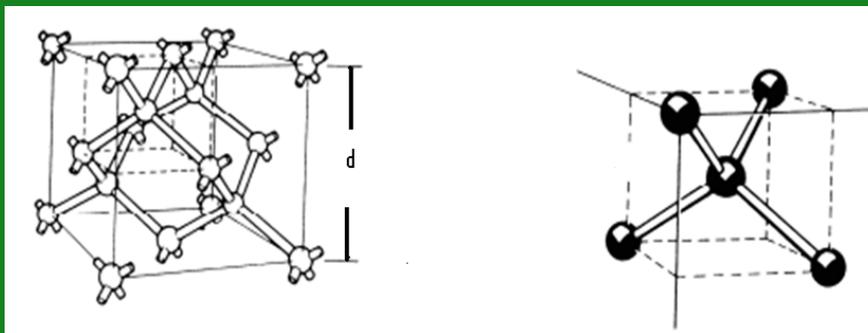
34

Type	Metallic
Lattice	
Bond	Electron gas
Properties	Ductile; metallic luster; high electrical and thermal conductivity
Example	Sodium, Na $E_{\text{cohesive}} = 1.1 \text{ eV/atom}$

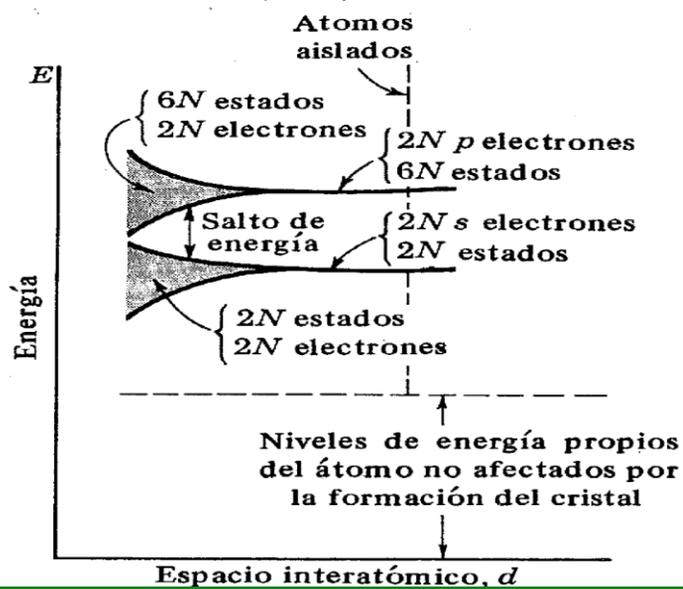
35

## TEORIA DE BANDAS

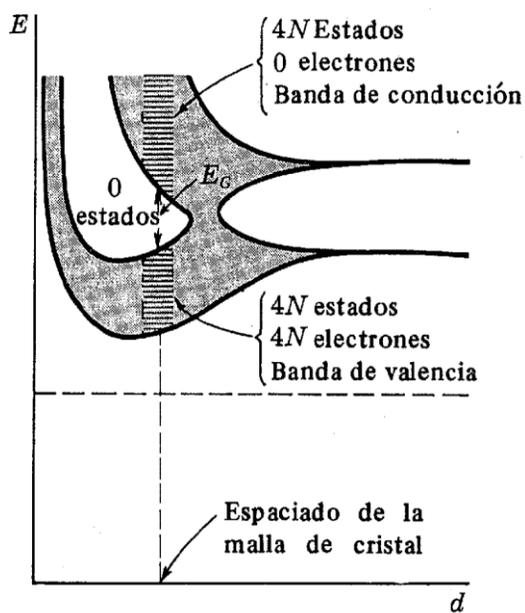
- Cuando los átomos se unen para formar el estado sólido (materia sólida) establecen un sistema atómico en el cual se debe cumplir el Principio de Exclusión de PAULI



## TEORIA DE BANDAS



## TEORIA DE BANDAS



## TEORIA DE BANDAS

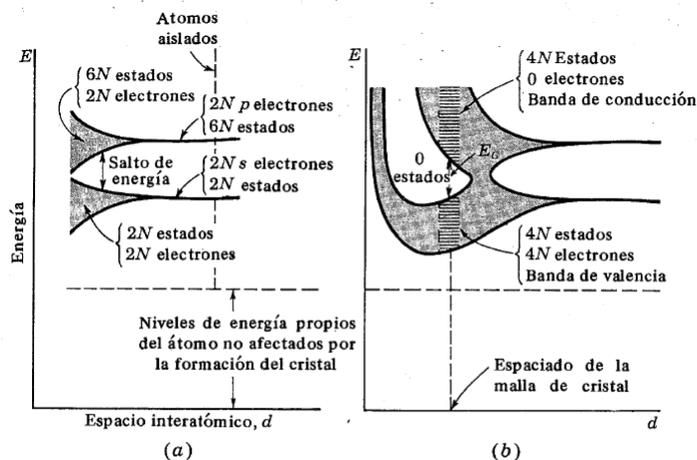


Fig. 1-3. Como se distribuyen los niveles de energía de los átomos aislados en bandas de energía, cuando estos átomos están próximos a otros para constituir un cristal.

## Aislantes

Banda de  
Conducción

Banda  
Prohibida

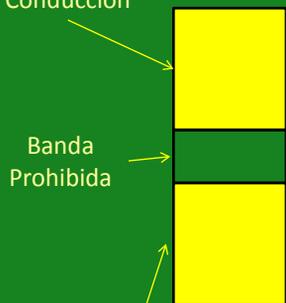
Banda de  
Valencia



Se lo denomina como un mal conductor. Tiene una gran Banda Prohibida ( $E_G \approx 6\text{eV}$ ), que separa la Banda de Valencia llena de la Banda de Conducción Vacía. La energía que se le podría suministrar desde un campo exterior es demasiado pequeña para llevar la partícula desde la Banda Llena a la vacía. Como el electrón no puede adquirir la suficiente Energía, la conducción es imposible.

## *Semiconductores*

Banda de  
Conducción



Banda  
Prohibida

Banda de  
Valencia

Los semiconductores más conocidos son:  
Silicio ( $E_g \approx 1.21\text{eV}$ ) Germanio ( $E_g \approx 0.785\text{eV}$ )  
Arseniuro de Galio ( $E_g \approx 1.38\text{eV}$ )

Cuya energía, a bajas temperaturas, no se puede adquirir normalmente desde un campo aplicado exteriormente. Por ello, la banda de valencia permanece llena y la de conducción vacía, comportándose como un aislante.

A medida que la temperatura aumenta, algunos de estos electrones de valencia adquieren una energía térmica mayor que  $E_g$ , y por lo tanto se mueven en la banda de conducción. A partir de este momento, son electrones libres en el sentido de que pueden moverse bajo la influencia de cualquier campo exterior aplicado.



## *Conductores*

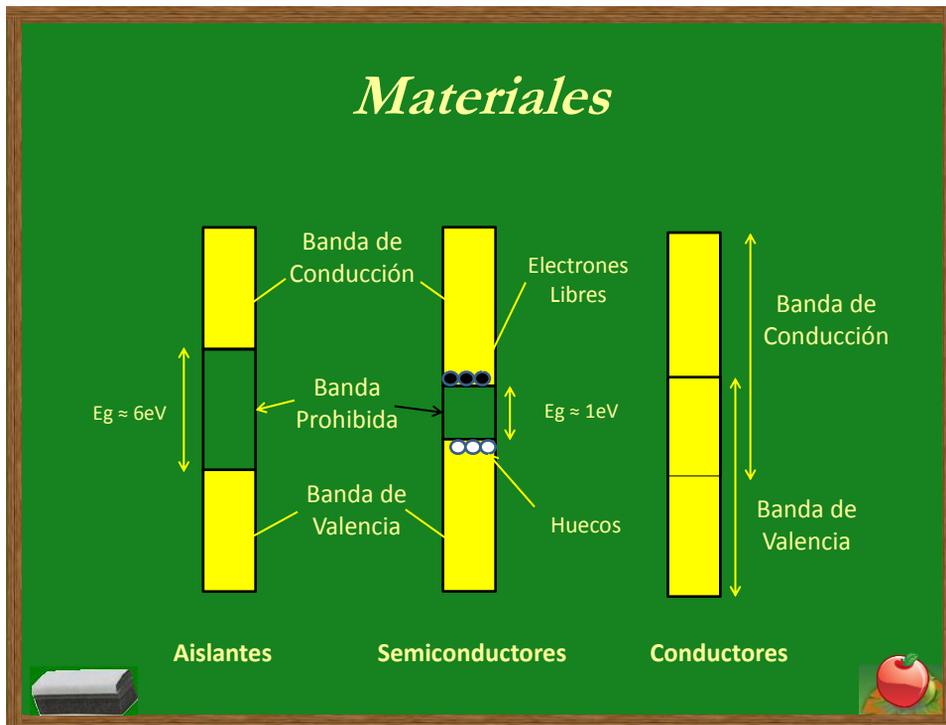


Banda de  
Conducción

Banda de  
Valencia

Con la influencia de un campo eléctrico los electrones pueden adquirir una energía adicional y cambiar a etapas más elevadas. Ya que estos electrones móviles constituyen una corriente, estos materiales son conductores y la región parcialmente llena es la banda de conducción.





### • Bibliografía

- Libro de Química Autor CHANG Capitulo 7
- Electronica Integrada "Millman y Halkias" Capitulo 1
- Guia N° 1 Modelos atomicos Ing AGL marzo 2012"
- Capitulo 1-2 Libro B. Van Zeghbroeck, 2004

