

## Espectro Visible

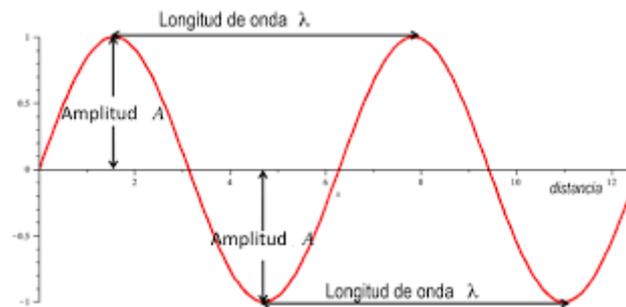
A principios del siglo XX los científicos comprobaron que las ondas de radio y las radiaciones infrarrojas, la luz visible y ultravioleta eran ondas electromagnéticas que se diferenciaban en su longitud de onda.

La característica fundamental es que todas estas ondas se desplazan en el vacío con una velocidad constante ( $c$ ), de valor  $3,0 \times 10^8$  m/s.

Para estas ondas es posible definir:

Longitud de onda ( $\lambda$ ), amplitud y frecuencia que se representa con la letra nu ( $\nu$ ).

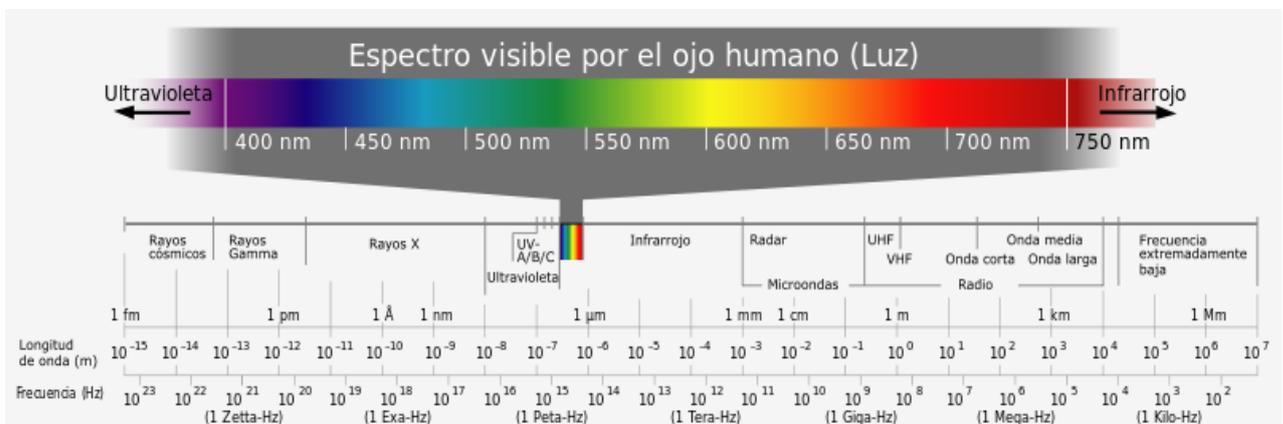
**La frecuencia ( $\nu$ )** se define con el número de ciclos de una onda en movimiento que pasa por un punto dado por unidad de tiempo.



**La velocidad de la onda ( $c$ )**, es constante para todas las radiaciones electromagnéticas y se define como el producto de la frecuencia por la longitud de la onda:

$$c = \nu \cdot \lambda$$

El conjunto de variadas longitudes de onda constituye los espectros electromagnéticos.



Como vemos la luz visible es una porción muy pequeña de la totalidad del espectro electromagnético. Podemos apreciar esta luz visible debido a las reacciones químicas que provoca en nuestros ojos. A pesar de no poderla observar nuestro cuerpo detecta la radiación

infrarroja por el calor que pueda recibir y quizás causar una quemadura si la exposición dura un largo período.

La luz ultravioleta proveniente de los rayos solares no puede provocar desde un agradable bronceado hasta una importante quemadura y el cáncer de piel.

La sobreexposición de los rayos X puede ocasionar daños a los tejidos y también cáncer.

Esta diversidad de efectos, la mayoría no deseados, es debido a la diferencia de energía que caracteriza cada radiación.

La radiación de alta frecuencia, o sea de corta longitud de onda tiene mayor energía que la de menor frecuencia y por lo tanto de mayor longitud de onda.

**Max Planck**, un científico alemán propuso en 1900 la relación cuantitativa entre la energía y la frecuencia, que fue una de las bases fundamentales de la teoría cuántica.

$$E = h \cdot \nu$$

Donde E es la energía expresada en Joule (J) y h es una constante conocida como constante de Planck y su valor es  $6,64 \times 10^{-34}$  J/s.

Como  $C = \nu \cdot \lambda$  Podemos plantear

$$E = \frac{h \cdot \nu}{\lambda}$$

Los físicos del siglo XIX, anteriores a Planck, creían que todos los cambios de energía eran continuos, es decir que no había restricciones sobre la cantidad de una forma de energía que se podía convertir en otra.

Planck basándose en los fenómenos descubiertos pocos años antes de su propuesta tales como la radiación del cuerpo negro, es decir la radiación visible que emite un objeto caliente como puede ser la hornalla de una cocina, elaboró una teoría que explica entre otras cosas esta radiación del cuerpo negro.

Las leyes de la física clásica no podían, entonces explicar el espectro de luz emitido por un cuerpo negro, por lo que Planck propone en su teoría que los cambios de energía asociados con la radiación del cuerpo negro no son continuos, sino que la energía solo puede ser liberada en "paquetes o cuantos" de un tamaño mínimo que pueden determinarse con la ecuación anterior.

De acuerdo a la expresión de Planck sólo están permitidas energías que correspondan a números enteros de coeficientes de  $h$  estando prohibido cualquier valor. Por lo tanto podemos afirmar que las energías permitidas están cuantificadas o cuantizadas.

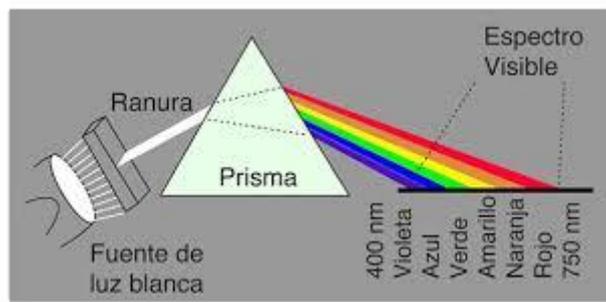
El incremento de energía más pequeño de energía a una frecuencia dada  $h\nu$  se denomina cuanto de energía.

### Espectros continuos y discontinuos (lineales).

A fines del siglo XVII Newton fue uno de los primeros en demostrar, utilizando un prisma que la luz blanca se halla formada por varios colores, en un extremo el rojo y en el otro el violeta.

Tal como hemos indicado, el espectro electromagnético continúa a ambos lados de la pequeña región visible.

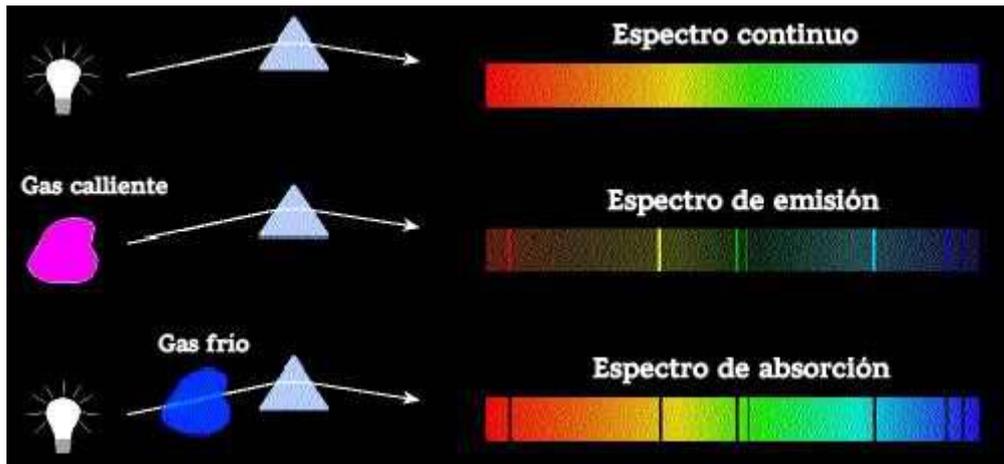
El término espectro fue puesto por Newton porque pensaba que era el alma de la luz, se define un espectro a la imagen producida cuando la radiación de una fuente luminosa se separa en sus componentes de longitudes de onda diferente.



No todas las fuentes de radiación producen un espectro continuo, es decir, con todos los colores y sus longitudes de onda. Cada color tiene una longitud de onda asociada y el espectro de la luz del sol resulta un espectro continuo.

Cuando se utilizan “tubos de vacío”, es decir tubo de vidrio cerrado se inyecta a un gas a presión reducida, como por ejemplo el hidrógeno, y se le aplica un alto voltaje, emite luz.

Cada gas emite luz de diferentes colores y es la que comúnmente apreciamos en los luminosos de los comercios, si es de gas neón será rojo anaranjado, el vapor de sodio emite color amarillo característico de ciertas luces del alumbrado.



Podemos definir a este tipo de espectros, que contiene radiación de longitud de ondas específicas, como espectro de emisión de líneas o espectro discontinuo.

Intentando explicar el espectro del hidrógeno, se elaboró un modelo atómico. Observaciones más precisas del espectro de líneas del hidrógeno demostraron que hay tres grupos distintos de líneas. Estos tres grupos o series recibieron el nombre de los científicos que lo descubrieron.

La serie de **Lyman** aparece en la región ultravioleta, la de **Balmer** en una gran porción del visible y parte del ultravioleta y las de **Paschen** en el infrarrojo.

En 1885 **J. Rydberg** propuso una expresión general que permitía determinadas posiciones de todas las líneas.  $R_H$  es una constante cuyo valor es  $2,28 \times 10^{-18} \text{ J}$ .

$$\Delta E = -R_H \left( \frac{1}{nf^2} - \frac{1}{ni^2} \right)$$

En 1914 Böhler utilizó la teoría cuántica de Planck para explicar el espectro de líneas del átomo de hidrógeno, estableciendo un nuevo modelo atómico. Lo fundamental de este modelo era la cuantificación de la energía de los electrones en la periferia nuclear.

### Concepto de Orbital

La teoría cuántica se puede utilizar para determinar los estados de energía permitidos para los electrones de los átomos.

La energía que posee un electrón es el resultado de su energía potencial, debida a la atracción que ejerce del núcleo sobre él y de su energía cinética. La mecánica cuántica tiene en cuenta las propiedades **ondulatorias del electrón**.

**Erwin Schrödinger (1887-1961)**, propuso una ecuación matemática, actualmente denominada **ecuación de onda de Schrödinger**, que tiene en cuenta ese comportamiento ondulatorio del electrón.

Esta ecuación llega a una serie de soluciones que describen estados de energía permitidos de los electrones. Esas soluciones se representan con la letra griega minúscula **psi** y se denominan funciones de onda.

Una función de onda nos da información respecto a la ubicación del electrón en el espacio cuando está en determinado estado de energía permitido.

El principio de **incertidumbre de Heisenberg**, afirma que si conocemos el momento del electrón con gran exactitud, nuestro conocimiento de su ubicación será incierto. Esto nos indica que no podemos conocer con exactitud la ubicación de un electrón particular en un determinado instante. Podemos si conocer **la probabilidad** de que el electrón se encuentre en determinada región del espacio, alrededor del núcleo la cual se conoce con el nombre de **orbital**.

Cada orbital describe una distribución específica de la densidad electrónica en el espacio.

En consecuencia, un orbital tiene una forma característica así como también una energía que le es propia.

### **Orbitales y números cuánticos.**

El modelo de Böhrr introdujo un numero sencillo entero "n" para describir una órbita. A dicho número que intervienen en ecuaciones de energía y que solo puede tener determinados valores posibles, es decir que es un "parámetro", se lo denomina "número cuántico", El modelo de la mecánica cuántica utiliza en cambio tres números cuánticos, "n", "l" y "ml" para describir el orbital.

#### ***El número cuántico principal "n"***

Puede tener un valor entero de 1 a infinito teóricamente, aunque solo se conoce hasta el 7.

A medida que aumenta "n" el volumen del orbital se hace mayor y el electrón se encuentra durante más tiempos lejos del núcleo. El electrón posee también una energía superior lo que hace que este unido con menos fuerza al núcleo.

#### ***El número cuántico azimutal "l"***

Este número también denominado número cuántico secundario, puede adoptar valores enteros desde 0 hasta n-1 para cada valor de n.

Este número cuántico define la forma del orbital:

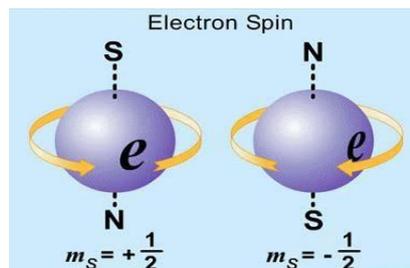
$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
Orbital s	Orbital p	Orbital d	Orbital f

### ***Número cuántico magnético “ $m_l$ ”***

Este número cuántico adopta valores enteros entre “ $l$ ” y “ $-l$ ”, incluyendo el cero. Este número cuántico describe la orientación del orbital en el espacio.

### ***Spin del electrón “ $m_s$ ”***

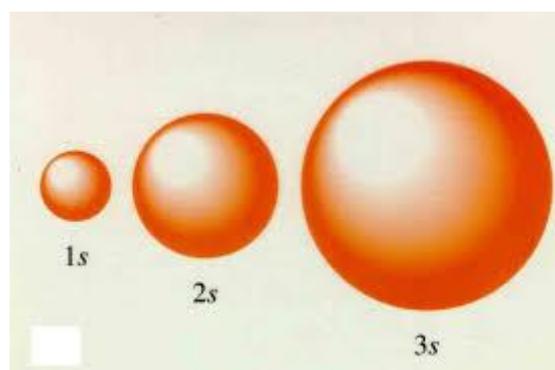
En 1925, los físicos holandeses George Uhlenbeck y Samuel Goudsmit postularon que los electrones poseen una propiedad llamada spin, que indica el sentido de giro del electrón sobre sí mismo, alrededor de un eje imaginario. Este número solo puede tener dos valores  $+1/2$  y el valor  $-1/2$ , lo cual se puede interpretar como dos sentidos de giro del electrón, en sentido horario y antihorario.



## **Forma de los Orbitales**

### **Orbitales s**

Los orbitales s son esféricos, simétricos con respecto al núcleo del átomo y existe uno por cada nivel energético siendo su radio cada vez mayor.

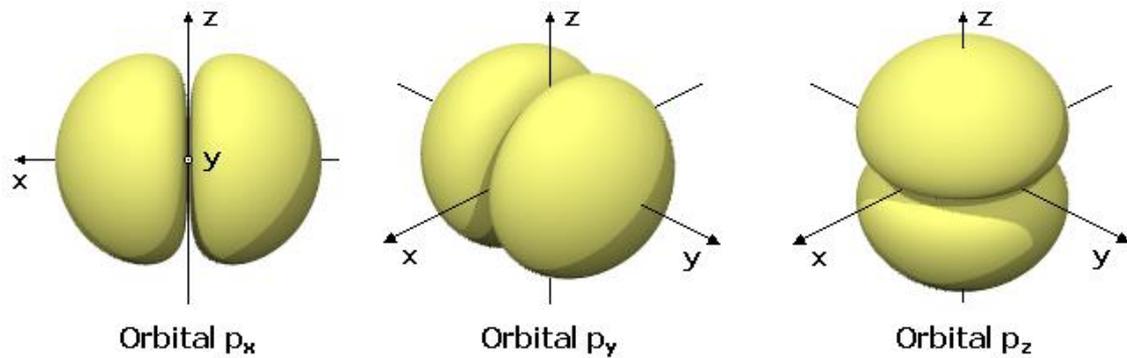


## Orbitales p

La densidad electrónica se concentra en dos lados diferentes respecto al núcleo, separados por una zona que pasa por él, denominada zona nodal o nodo donde la probabilidad de encontrar al electrón es prácticamente nula.

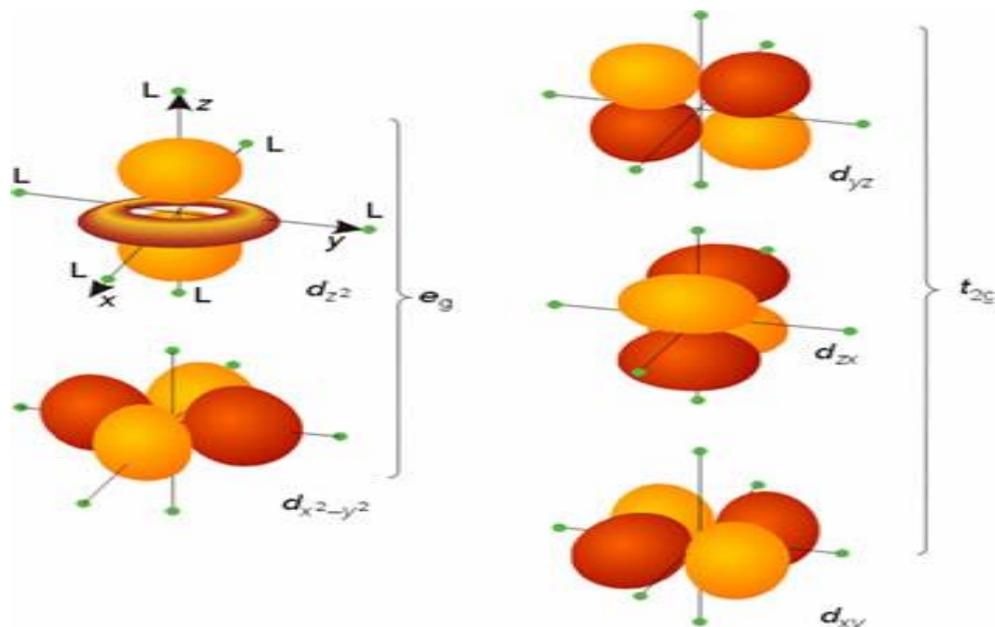
Corrientemente se dice que los orbitales p poseen dos lóbulos. Por cada nivel energético, a partir del nivel 2 existen tres orbitales p, que se orientan en el espacio según los ejes cartesianos, es decir que adoptan, en el espacio, direcciones perpendiculares entre si, por eso se le representa como  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$ .

Estos tres orbitales tienen igual energía por eso se dicen que son degenerados.



## Orbitales d

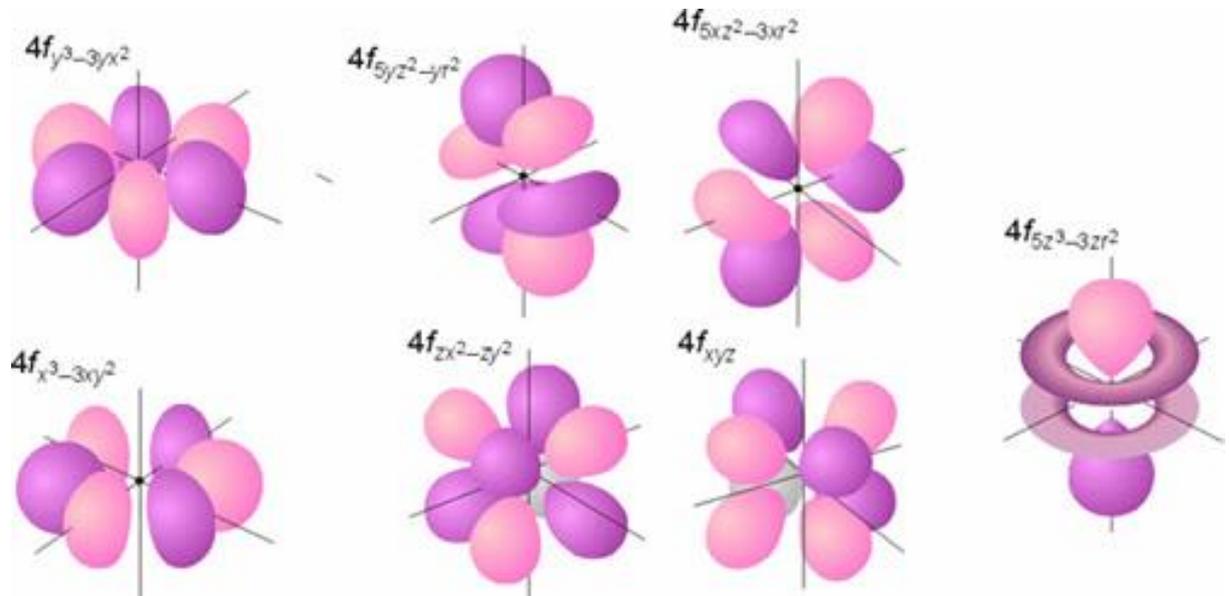
A partir del nivel 3 aparece otro tipo de orbital denominado "d", los cuales son cinco por cada nivel energético y adoptan en el espacio cinco orientaciones diferentes y son degenerados (tienen la misma energía).



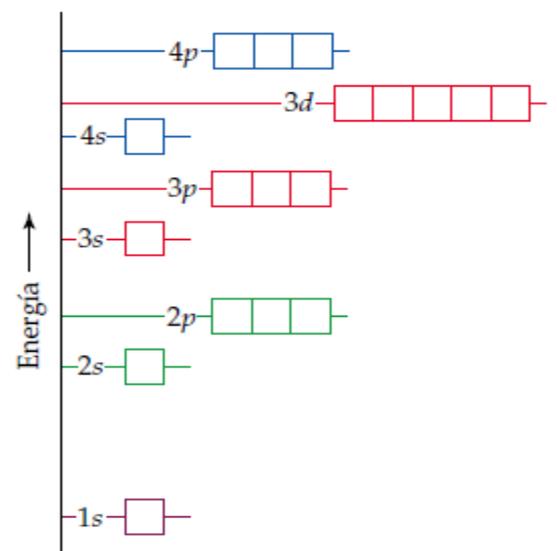
## Orbitales f

A partir del nivel 4 encontramos un cuarto tipo de orbital denominado "f".

Estos orbitales son siete por cada nivel y adoptan siete orientaciones diferentes en el espacio. Estos orbitales son degenerados y son difíciles de representar en diagramas de contorno tridimensionales.



En un átomo con muchos electrones, las repulsiones electrón-electrón provocan que dentro de una misma capa existan electrones con diferente energía como se aprecia en el siguiente esquema.



## Principio de construcción de átomos polielectrónicos.

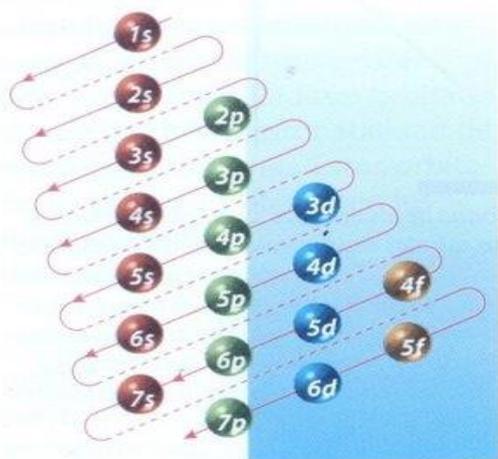
Se utilizan tres principios o reglas de llenado de orbitales:

### Principio de exclusión de Pauli

En 1925, Wolfgang Pauli, descubrió el principio que gobierna el arreglo de los electrones en los átomos polielectrónicos. A este principio se le conoce como principio de exclusión de Pauli, el que establece que no pueden existir dos electrones en un átomo que tengan los mismos valores de los números cuánticos.

Para un orbital dado, los valores de "n", "l" y "ml" son fijos, por lo tanto si deseamos acomodar más de un electrón en n mismo orbital, y satisfacer el principio de Pauli, la única opción es que dichos electrones tengan su cuarto número cuántico diferente, es decir tendrán "spin contrario".

### Principio de construcción o proceso de aufbau



Fue sugerido por Pauli, e implica que los electrones disponibles se ubican en orden creciente de energía. En ausencia de un campo magnético o eléctrico la energía del electrón depende de "n" y "l", los números cuánticos del tamaño y forma del orbital y no de "ml" el número cuántico de la orientación del espacio.

El orden creciente de energía se puede esquematizar en los que ese conoce como el nombre de regla de la lluvia o regla de Simmons como se indica a continuación.

### Regla de Hund

Cuando los electrones se incorporan a los orbitales del mismo contenido energético, como por ejemplo los tres orbitales p, los cinco orbitales d y los siete orbitales f de un mismo nivel energético, cada uno se colocará en un orbital disponible y solo una vez que todos tengan uno, recién se irán apareando. Esta regla se conoce como el nombre de **regla de Hund**.

Este comportamiento es comprensible en términos de repulsión electrónica. Dos electrones, uno en un orbital p y otro en el otro orbital p por ejemplo, estarán más separados que dos electrones apareados en un mismo orbital p. Una consecuencia de la regla de Hund es que el conjunto de orbitales semiocupados, es decir cada uno con un electrón desapareado es una ordenación particularmente favorable.

