

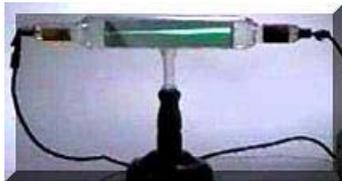
ESTRUCTURA DEL ÁTOMO

DESCUBRIMIENTO DEL ELECTRÓN

Mientras se desarrollaba el modelo atómico-molecular de la materia se fue conociendo un conjunto de hechos que ponen en cuestión una de sus principales hipótesis: la supuesta inmutabilidad e indivisibilidad de los átomos. Algunos de estos hechos son: 1) El comportamiento eléctrico de la materia, que mostró la posibilidad de extraer electrones de muchas sustancias diferentes. 2) El descubrimiento de la radioactividad, que mostró la emisión por parte de algunos minerales de radiaciones formadas por partículas subatómicas. 3) El enlace químico, que también sugería algún tipo de estructura interna de los átomos para justificar la formación de moléculas.

Entre todos estos hechos, el descubrimiento del electrón fue el que tuvo mayor relevancia en el cuestionamiento inicial del átomo indivisible.

La existencia del electrón había sido postulada inicialmente por Stoney (1826 -1911) como una unidad de carga en el campo de la electroquímica. Stoney estudiaba la estructura de la materia y realizó una primera evaluación del número de Avogadro. Estas investigaciones le condujeron a establecer la hipótesis de que la electricidad era creada por unos corpúsculos elementales a los que llamó inicialmente "electrinos" (en 1874) y, más adelante (en 1891), electrones. Pero, el mérito principal del descubrimiento del electrón se concede a Thomson (1856 - 1940), que determinó su existencia y



estableció la relación entre sus propiedades gravitacionales y eléctricas en una serie de experimentos destinados a resolver una controversia existente a finales del siglo XIX acerca de la naturaleza de los rayos catódicos. Se había descubierto que al aplicar una diferencia de potencial de varios miles de voltios entre dos electrodos de un tubo de descarga relleno de un gas enrarecido, se producen destellos luminosos, que se propagan a modo de rayos entre los electrodos del dispositivo. Se llamaron rayos catódicos porque viajan desde el electrodo negativo (cátodo) al positivo (ánodo).

Sobre este fenómeno se planteó una discrepancia entre las dos principales escuelas científicas: Por un lado los físicos británicos y franceses consideraban que los rayos catódicos eran un flujo de partículas electrificadas. En cambio, la escuela alemana planteaba que los rayos se producían en el éter (un hipotético medio que supuestamente propagaba la luz) y diferían, tanto de la luz ordinaria, como de los rayos X.

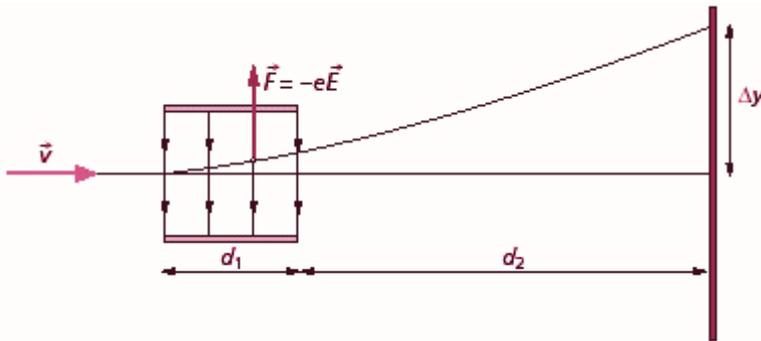
Intentando resolver esta discrepancia, Thomson realizó de forma consecutiva varios experimentos: Primero investigó si



las cargas negativas se podían separar de los rayos catódicos por medio de magnetismo. Para ello, construyó un tubo de rayos catódicos terminado en un par de cilindros con ranuras, y conectó esas hendiduras a un electrómetro. Observó que si los rayos se desvían de forma que no entren en las ranuras, el electrómetro registra poca carga. De ello concluyó que la carga negativa era inseparable de los rayos. Tras este hallazgo investigó la desviación de rayos por un campo eléctrico. Otros científicos no la habían observado, pero

él creía que sus experimentos eran defectuosos porque contenían trazas de gas. Para demostrarlo construyó un tubo de rayos catódicos con un vacío casi perfecto y con uno de los extremos recubierto de pintura fosforescente. Con este dispositivo verificó que los rayos se desvían bajo la influencia del campo eléctrico y concluyó que se trataba de un flujo de corpúsculos dotados de carga eléctrica. Finalmente, Thomson determinó la relación entre la carga y la masa de los rayos

catódicos, midiendo cuánto se desvían por un campo eléctrico y la cantidad de energía que llevan. Encontró que la relación carga/masa era más de un millar de veces superior a la del ión Hidrógeno, lo que indica que las partículas son muy livianas y/o muy cargadas.



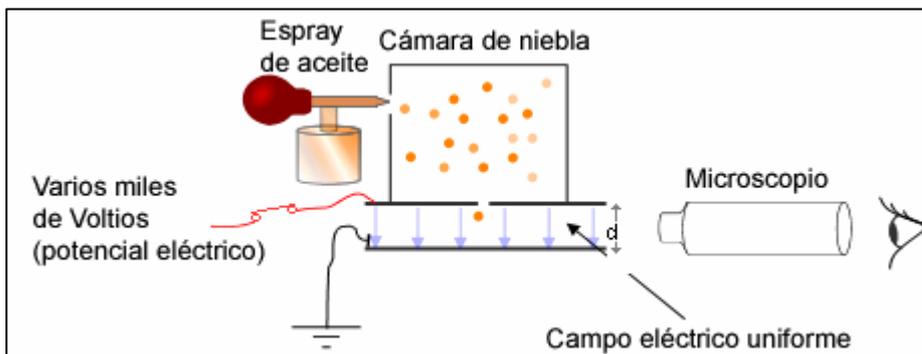
A la izquierda se representa un esquema del experimento: Los rayos catódicos se hacen pasar por un colimador para limitar la anchura del haz y, después, por unas placas metálicas en las que se aplica el campo eléctrico, antes de proyectarse sobre una pantalla fluorescente. Midiendo la desviación de los rayos, Δy , la intensidad del campo aplicado E , y la velocidad de los electrones v , se obtiene el valor de la

relación entre la carga, e , y la masa, m , de los rayos catódicos, por tanto, del electrón. Esta relación es $e/m = 1,758796 \times 10^{11} \text{ C/kg}$. Thomson puso en evidencia que este resultado era independiente de las condiciones en las que se produjeran los rayos y de la naturaleza del gas encerrado en el tubo.

En 1906 Thomson fue galardonado con el Premio Nobel de Física por su *trabajo sobre la conducción de la electricidad a través de los gases*.

Una vez obtenida la relación carga-masa del electrón, se precisaba determinar el valor de una de estas magnitudes para conocer ambas. Tras varios intentos aproximativos de otros científicos, [Millikan](#) (1868-1953) lo logró en 1913 mediante un ingenioso experimento que se llamó *de la gota de aceite*.

Entre 1909 y 1913 Millikan había perfeccionado un complejo montaje experimental, que se representa de forma simplificada en el dibujo adjunto. Básicamente, se trata de aplicar un campo eléctrico entre las placas de un condensador



modificando su valor hasta conseguir que se mantenga inmóvil y suspendida una gotita de aceite. En ese momento no actúa el rozamiento del aire con la gota de aceite y se equilibran la fuerza gravitatoria, F_g , y la fuerza electrostática, F_{er} que actúan sobre ella (la fuerza de empuje sobre la gota se puede

despreciar porque la densidad del aceite, unos 800 kg/m^3 , es mucho mayor que la del aire, $1,29 \text{ kg/m}^3$). Por tanto, al ser $F_g = F_{er}$, se verifica la relación, $mg = qE$, de la cual se puede obtener la carga de la gota, q , si se conoce su masa. Millikan comprobó que los valores de las cargas q de todas las gotas eran siempre múltiplos de una carga elemental, la del electrón, e ($e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$). Conocida la carga del electrón, se deduce también inmediatamente el valor de su masa, m_e ($m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$).

En 1923, Millikan recibió el premio Nobel de Física por este trabajo y también por sus investigaciones sobre el efecto fotoeléctrico.

MODELO ATÓMICO DE THOMSON

Después de observar que los rayos catódicos se producían para diferentes gases y, tener en cuenta el orden de magnitud de la relación entre la masa y la carga de los corpúsculos o electrones, Thomson formuló la hipótesis de que dichos electrones procedían de dentro de los átomos de los electrodos, lo que indicaba que los átomos son divisibles.

Lo expresó así: *Después de largas meditaciones acerca de los experimentos, me pareció que eran ineludibles las conclusiones siguientes: 1) Los átomos no son indivisibles; porque de ellos se pueden arrancar partículas cargadas de electricidad negativa, por la acción de fuerzas eléctricas, el choque de átomos que se mueven con rapidez, la luz ultravioleta o el calor. 2) Todas esas partículas son iguales en cuanto a la masa y llevan la misma carga de electricidad negativa, sea cual fuere la especie de átomos de que salgan, y son elementos constitutivos de todo átomo. 3) La masa de dichas partículas es menos de un millonésimo de la masa de átomo de hidrógeno* (fragmento de la obra: *Recollections and Reflections*)

Sobre la base de estas hipótesis, Thomson fue el primer científico que planteo un modelo de estructura del átomo. Al ser tan pequeña la masa de los electrones, supuso que prácticamente toda la masa del átomo acumulaba la carga positiva y ocupaba todo el volumen atómico. Creyó también que esa masa de carga positiva era fluida y los electrones podían penetrar o incrustarse en ella. Como tienen carga negativa imaginó que estaban adheridos a la masa principal (de carga positiva) y se distribuían en posiciones equidistantes y lo más alejadas posible entre sí.



A la izquierda se representan las estructuras de los átomos de los seis primeros elementos, siguiendo el modelo de Thomson. Por razones de simetría el primero de ellos (átomo de Hidrógeno) tendría su único electrón en el centro. El siguiente (átomo de Helio) tendría dos electrones los más separados posible, etc.

El modelo de Thomson pudo explicar de forma cualitativa algunos hechos experimentales, entre ellos la electrización por frotamiento y la emisión de luz por los átomos. Aunque en este modelo los electrones ocupan posiciones fijas en el seno de la masa positiva, las acciones exteriores pueden desplazarlos de esas posiciones e, incluso arrancarlos. Así se explicaría la electrización por frotamiento. Por otro lado, al pasar cerca del átomo una carga eléctrica, esta actuará sobre el electrón desplazándolo de su posición de equilibrio. Una vez alejada la carga, el electrón recuperará la posición inicial describiendo un movimiento vibratorio responsable de la emisión de luz.

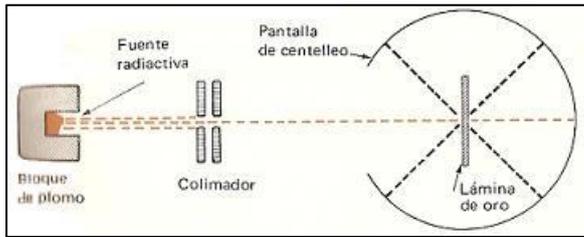
Como curiosidad diremos finalmente que el modelo atómico de Thomson se llamó modelo de "pudding de pasas", estableciendo una analogía entre el pastel inglés y el átomo. La masa del "pudding" representaría a la masa del átomo cargada positivamente y las pasas incrustadas en el pastel serían los electrones.



DESCUBRIMIENTO DEL NÚCLEO. MODELO DE RUTHERFORD

El modelo de Thomson necesitaba ser puesto a prueba para contrastar su validez. Pero hay que tener en cuenta que el tamaño de los átomos es muy pequeño (por ejemplo, el diámetro estimado del átomo de hidrógeno es del orden de $0,00000001\text{ cm}$), por lo que no resulta fácil detectar experimentalmente como están formados. El descubrimiento de la

radiactividad a finales del siglo XIX proporcionó la posibilidad de bombardear la materia con partículas cargadas muy rápidas y contrastar el modelo.



Rutherford (1871 - 1937) concibió un experimento que consistía en lanzar partículas alfa (α) contra una finísima película de oro. La trayectoria de las partículas se podía observar, según se ve en el esquema de la figura adjunta, por los destellos que producían al chocar sobre una pantalla de sulfuro de cinc (ZnS). Aceptando el modelo de Thomson, las partículas tendrían que sufrir desviaciones

muy pequeñas. Hay que tener en cuenta que, según ese modelo, la masa del átomo es fluida y está uniformemente repartida, por lo que no debería presentar resistencia excesiva al paso de las partículas α que portan una gran cantidad de movimiento.

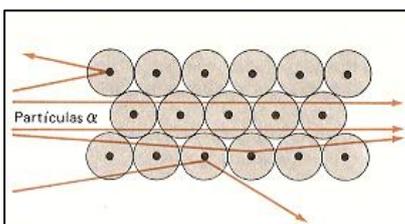
Sin embargo los resultados fueron bastante diferentes de lo esperado: Aunque, la mayor parte de las partículas α se comportaban según lo previsto y atravesaban la lámina de oro sin sufrir desviaciones aparentes, unas pocas sorprendentemente sufrían grandes desviaciones, llegando incluso en algunos casos al retroceso. Rutherford prestó la máxima atención a las partículas que sufrían grandes desviaciones, llegando a la conclusión de que el átomo no podía ser homogéneo, idea que le hizo rechazar el modelo de Thomson y proponer el suyo.



Rutherford (1871 - 1937)

Lo contó así: *Había observado la dispersión de partículas y el Dr. Geiger, en mi laboratorio, la había examinado detenidamente. Encontró que la dispersión producida por piezas de metal delgadas era generalmente pequeña, del orden de un grado. Un día Geiger vino y me dijo: "¿No cree usted que el joven Marsden, a quien he preparado en los métodos radiactivos, debía empezar una pequeña investigación?". Yo había pensado lo mismo y le dije: "¿Por qué no le dejamos ver si las partículas pueden sufrir una gran dispersión con un gran ángulo?. Debo decirle en confianza que yo no lo creo, puesto que las partículas son muy rápidas, de gran masa y gran energía, y si la dispersión fuera debida a la acumulación de de pequeñas dispersiones, la probabilidad de que fuese dispersada en el retroceso sería muy pequeña". Recuerdo que dos o tres días después vino Geiger con una gran excitación y me dijo: "Hemos logrado obtener el retroceso de algunas partículas". Es lo más increíble que me ha sucedido en mi vida, Casi tan increíble como si usted disparase una bala de 15 pulgadas contra un papel de seda y el proyectil se volviese contra usted. Al considerar el fenómeno, llegué a la conclusión de que el retroceso debía ser el resultado de una simple colisión, y al hacer los cálculos vi que era imposible obtener aquél orden de magnitud a no ser que se considere un sistema en la que la mayor parte del átomo se encuentre concentrada en un pequeño núcleo. Fue entonces cuando tuve la idea del átomo formado por un núcleo masivo como centro y con carga.*

Así, Rutherford propuso en 1919 un modelo de un átomo prácticamente vacío, con un núcleo central en el que está



concentrada la carga positiva y la masa. Los electrones de cada átomo (en un número igual a la carga nuclear) están alrededor del núcleo, completando el volumen del átomo. Tal como indica el dibujo adjunto, este modelo permite explicar los resultados del experimento de bombardeo con partículas α , al considerar que la desviación de las partículas se produce únicamente por causa de los núcleos de los

átomos de la lámina de oro. No son afectadas por los electrones porque la masa de éstos es insignificante frente a la de los proyectiles.

Teniendo en cuenta que los electrones (de carga negativa) son atraídos por el núcleo central (de carga positiva), Rutherford planteó también que giran alrededor del núcleo como lo hacen los planetas alrededor del Sol, con lo que la fuerza de atracción electrostática dirigida hacia el núcleo da lugar a una aceleración centrípeta. Por ello, al modelo nuclear de Rutherford también se le llama modelo planetario.

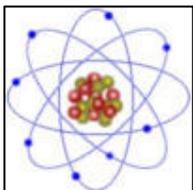


Dos datos pueden ayudar a comprender la vacuidad del átomo nuclear de Rutherford: 1) El radio del núcleo es del orden de $10^{-15}m$. 2) El radio del átomo (medido desde el núcleo hasta el último electrón de dicho átomo) es del orden de $10^{-10}m$ (ambos datos para un átomo medio, semipesado). Esos datos dicen que si se agrandara el núcleo del átomo hasta que fuese similar a una canica, el tamaño del átomo sería mayor que un campo de fútbol.

PROBLEMA DE LA ESTABILIDAD NUCLEAR. DESCUBRIMIENTO DEL PROTÓN Y DEL NEUTRÓN

El modelo atómico de Rutherford trajo un avance muy importante respecto del primer modelo atómico que había planteado Thomson. Pero, como aquél, encontró desde el mismo momento de ser formulado importantes dificultades. Nos referimos aquí a una de ellas: La dificultad para entender la estabilidad del núcleo del átomo.

En 1913 Moseley (1887 - 1915) había enunciado una ley empírica que establece una relación sistemática entre la longitud de onda de rayos X emitidos por distintos átomos y su número atómico, Z . Esta ley apoya la hipótesis de la existencia de partículas con carga positiva en el núcleo de los átomos. En 1918, un año antes de plantear su modelo, Rutherford consideró expresamente dichas partículas. Había comprobado que al disparar las partículas alfa contra un gas de nitrógeno, sus detectores de centelleo muestran los mismos signos que los núcleos de hidrógeno y dedujo que esos núcleos de hidrógeno procedían de dentro de los núcleos del nitrógeno. Concluyó que el núcleo de hidrógeno era una nueva partícula fundamental con carga positiva: el protón. Sin embargo, al plantear el modelo nuclear, vio que este hallazgo traía una dificultad: Puesto que la carga positiva del núcleo del átomo es igual a la carga negativa total de los electrones de dicho átomo, el núcleo contiene varios protones (tantos como electrones tiene el átomo). Al estar cargados positivamente, ¿Por qué se mantienen fuertemente unidos dentro del núcleo?

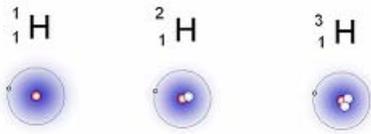


Para resolver este problema Rutherford supuso que en el núcleo atómico, además de los protones, debía haber otras partículas sin carga eléctrica. Planteó esta idea en una conferencia ante la Royal Society (1920) y añadió que si se encontrara esa partícula neutra sería mucho más útil como proyectil que las partículas alfa. Los protones y las partículas neutras debían ejercerse fuerzas atractivas de una nueva naturaleza y de gran intensidad para explicar la estabilidad del núcleo a pesar de la repulsión eléctrica entre los protones. Esta hipótesis es compatible con el hecho de que la masa del átomo de hidrógeno es muy aproximadamente la suma de las masas del electrón y el protón. Sin embargo, la masa de todos los demás átomos es mayor que la suma de las masas de sus protones más sus electrones.

En 1932, Chadwick (1891 - 1924), que había sido alumno de Rutherford, encontró experimentalmente la nueva partícula neutra a la que se le llamó neutrón. Como premio por este descubrimiento se le otorgó la Medalla Hughes de la Royal Society en 1932 y el Premio Nobel de Física en 1935.

El descubrimiento del protón y del neutrón, trajeron un gran avance a la interpretación del comportamiento eléctrico de la materia. Con estos conceptos en la mano, el modelo de Rutherford da una base a la ordenación de los elementos en el sistema periódico. Los elementos se definen en función de la carga nuclear del átomo, igual al número atómico, Z , y se disponen en el sistema periódico en orden creciente de dicho número.

El modelo también interpreta el concepto de isótopo, es decir, el hecho de que en bastantes casos existen diferentes variedades alotrópicas del mismo elemento, definidas por tener el mismo número atómico (por tanto, un determinado número de protones en el núcleo y los mismos electrones alrededor de él) pero diferente número de neutrones en el núcleo.



Así, por ejemplo, del Hidrógeno (de número atómico 1) existen tres isótopos, cuyos núcleos tienen respectivamente 1 protón (Hidrógeno), un protón más un neutrón (Deuterio), y un protón más dos neutrones (Tritio). El número atómico de todos ellos es $Z = 1$, pero la masa atómica es respectivamente 1, 2 y 3. La proporción de Deuterio y Tritio existente es muy inferior a la de Hidrógeno, por lo que la masa atómica relativa del elemento Hidrógeno es 1,0079.

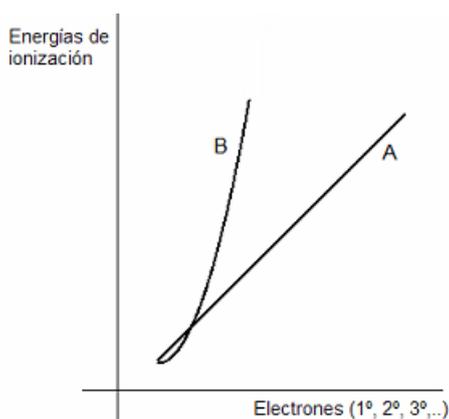
Deuterio y Tritio existente es muy inferior a la de Hidrógeno, por lo que la masa atómica relativa del elemento Hidrógeno es 1,0079.

PROBLEMA DE LA DISPOSICIÓN DE LOS ELECTRONES. INFORMACIÓN DE LOS ESPECTROS ATÓMICOS

Nos referimos ahora a otra importante dificultad del modelo de Rutherford: No podía explicar los resultados de los estudios sobre los espectros atómicos. Estos resultados ya eran conocidos cuando se formuló el modelo y sugerían que los electrones en el átomo sólo pueden tener unas determinadas cantidades de energía. Este hecho se relaciona con la disposición de los electrones en volumen atómico a la que el modelo de Rutherford no impone ningún tipo de restricción. En principio, los electrones podrían situarse a cualquier distancia del núcleo.

Para obtener información empírica sobre la disposición de los electrones en el átomo se puede determinar el trabajo que se necesita para arrancar o extraer cada uno ellos, lo que se llaman **energías de ionización** (la primera energía de ionización es la mínima energía que hay que suministrar a un átomo neutro, en su estado fundamental, para arrancarle un electrón; la segunda energía de ionización es la energía precisa para sustraer el segundo electrón y así sucesivamente)

Nos planteamos a modo de hipótesis, como pueden variar estas energías para un átomo determinado a medida que se le van extrayendo electrones. Las gráficas adjuntas, A y B, expresan dos posibles respuestas a esta cuestión. Se basan en suponer a los electrones distribuidos de forma más o menos aleatoria a diferentes distancias del núcleo. Lógicamente, la primera energía de ionización (corresponde a la extracción del electrón más alejado del núcleo y, por tanto, el menos

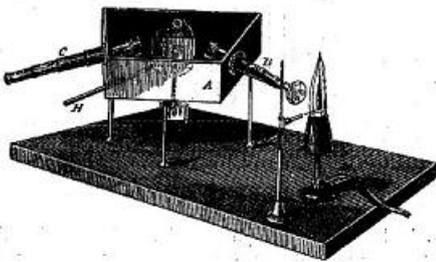


atraído) tiene que ser la menor, la segunda tiene que ser mayor que la primera, la tercera mayor que la segunda, y así sucesivamente. A medida que se extraen electrones, los que quedan son más atraídos por el núcleo, porque se encuentran más próximos a él, y también porque sufren menos repulsión de los electrones restantes (colocados por debajo de ellos). Teniendo en cuenta además que, según la ley de Coulomb, la fuerza eléctrica de atracción del núcleo al electrón es inversamente proporcional al cuadrado de la distancia que los separa, se deduce que la hipótesis más razonable es la representada por una gráfica del tipo B.

Los estudios de los espectros atómicos permitieron dar una respuesta experimental a esta cuestión. La espectroscopía se había iniciado en el siglo XVII con el experimento del prisma de Newton (1665), en el que comprobó que la luz blanca se descompone en el espectro de colores del arco iris. Y se desarrolló en los siglos XVIII y XIX, cuando el prisma inicial usado para descomponer la luz fue reforzado con rendijas y lentes telescópicas, consiguiendo una herramienta más potente y precisa para examinar luz procedente de distintas fuentes.

En 1814, Fraunhofer (1787 - 1916), utilizó un telescopio y un difractómetro diseñado por él mismo, para investigar por primera vez con detalle las líneas de absorción en el espectro del Sol. Lo hizo siguiendo indicaciones de Wollaston (1776 - 1828), un físico inglés que había descubierto en él rayas oscuras. Fraunhofer enumeró con exactitud 754 de esas líneas, que desde entonces se denominan líneas de Fraunhofer.

Después de Fraunhofer, se concede a Bunsen (1811 - 1899) y Kirchhoff (1824- 1887) el principal mérito de haber desarrollado en 1859 el espectroscopio para estudiar la luz generada en laboratorio mediante el calentamiento de diferentes fuentes como gases, metales y sales.



En el espectroscopio original de Bunsen y Kirchhoff, un objetivo [B] conduce luz emitida por la llama del mecherillo "Bunsen" hasta un prisma [A], que produce la separación de los diversos colores. Un brazo [H], situado después del prisma, contiene una escala graduada sobre vidrio, colocada de forma que su imagen se refleja sobre una de las caras del prisma y se dirige hacia otro objetivo [C]. Gracias a este diseño, el observador puede contemplar a través del objetivo [C] dos imágenes superpuestas: la de la escala graduada y la procedente de la muestra con las líneas espectrales. Para analizar dichas líneas se calibra el instrumento mediante líneas producidas por algunas sustancias cuyo espectro es conocido.

Como resultado de sus experimentos, Kirchhoff planteó tres leyes empíricas que describen la emisión de luz por objetos incandescentes. Estas leyes ponen de manifiesto que **cada átomo produce un espectro de emisión y otro de absorción, que son característicos y discontinuos**. La discontinuidad de las rayas implica una discontinuidad de las energías que cada átomo emite y absorbe. Dichas cantidades de energía se emiten o se absorben cuando alguno de los electrones aumenta o disminuye su energía cinética y potencial. El conocimiento del espectro permite deducir las energías de ionización del átomo.

Para dejar una huella permanente de un espectro, la luz que ha sido descompuesta por el prisma se hace incidir sobre una placa fotográfica, donde quedan impresionadas las rayas. La colocación de cada raya indica su frecuencia, mientras que su intensidad se determina por el grado de ennegrecimiento de la placa. A modo de ejemplo se muestra el espectro

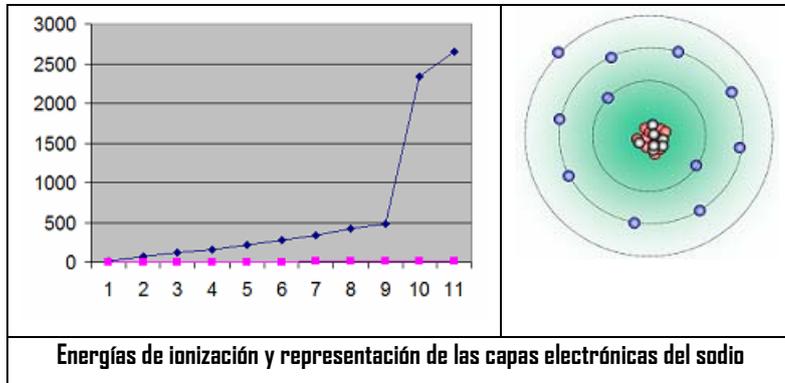


de emisión del sodio. Su línea principal (amarilla) fue observada por Kirchhoff y Bunsen en el análisis de la luz emitida por un incendio lejano (se quemaba una fábrica de salazones). Al comprobar que era similar a la línea emitida en el laboratorio por sodio incandescente, concibieron la idea de utilizar el análisis espectral de la luz procedente del Sol para deducir la composición solar.

Ya hemos dicho que de los datos del espectro se pueden deducir las energías de ionización. En el caso del sodio, estas energías tienen los valores que se indican en la tabla adjunta.

E. I. ($J \cdot 10^{-19}$)	8	75	115	158	222	276	333	423	480	2341	2648
Electrón extraído	1º	2º	3º	4º	5º	6º	7º	8º	9º	10º	11º

Tras analizar estas energías y representarlas gráficamente se observa que sus valores no corresponden a una disposición aleatoria de los electrones a diferentes distancias del núcleo. En lugar de ello, sugieren una disposición de los electrones alrededor del núcleo formando 3 "capas". Dos electrones (el 10º y el 11º) estarían "en una capa muy interna" siendo necesario para extraerlos del átomo aplicar comparativamente una enorme energía.

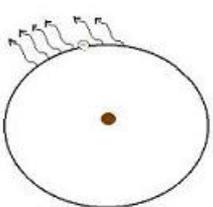


Otros 8 electrones (del 2º al 9º) estarían en una segunda capa. Debido al orden de magnitud empleado no se observa bien en la gráfica, pero los valores de las energías de ionización también indican que el electrón más externo (el 1º) estaría él sólo en una tercera capa, puesto que se necesita casi 10 veces menos energía para extraerlo que para hacerlo con el siguiente.

Los espectros de otros átomos producen resultados similares, en el sentido de indicar que a todos les es aplicable la idea de distribución de los electrones en capas. Se constata además que cada capa o nivel de energía puede tener un determinado número máximo de electrones (2 la capa más interna, 8, la segunda, otros 8 la tercera,..) y que en su estado fundamental o de mínima energía, los electrones de cada átomo ocupan las capas electrónicas o niveles de energía accesibles en orden creciente.

PROBLEMA DE LA ESTABILIDAD DE LOS ELECTRONES. POSTULADOS DE BOHR

Nos referimos ahora a la tercera dificultad, la más importante, que tuvo el modelo atómico de Rutherford: No podía explicar la estabilidad de las órbitas electrónicas.



El modelo de Rutherford considera al electrón girando alrededor del núcleo. En estas condiciones el electrón ha de tener aceleración (centrípeta) y, de acuerdo con la teoría electromagnética, toda carga acelerada emite radiación. Por tanto, el electrón debería estar emitiendo energía ininterrumpidamente, tal como indica el dibujo más a la izquierda. Esto le haría perder velocidad: El electrón no podría mantener la órbita y caería finalmente sobre el núcleo. Es decir, el modelo atómico de Rutherford es un modelo "autodestructivo", que contradice la indudable estabilidad de los átomos. Esta dificultad se combina con el hecho, evidenciado por los resultados experimentales de los espectros atómicos, de que los átomos emiten y absorben energía de forma discreta, es decir, sólo para determinadas cantidades que corresponden a niveles de energía que puede tener el electrón.

A la vista de estos hechos, Bohr (1885 - 1952), trabajando en equipo con Rutherford, se planteó el problema de la estabilidad del átomo y recurrió a una teoría que apenas comenzaba a ser conocida sobre *la naturaleza cuántica de las radiaciones*. Esta nueva teoría de la radiación iba a representar, junto con la teoría de la relatividad, una revolución de los conceptos físicos. Tal como se explica en la sección que desarrolla el Debate histórico acerca naturaleza de la luz, en el año 1900 Plank (1858-1947) había formulado la hipótesis de que la energía que puede absorber o emitir la materia en forma de radiación electromagnética es siempre múltiplo de una cantidad a la que llamó "quantum" o "cuanto de energía" (posteriormente llamado **fotón**). En 1905 Einstein dio un paso más en la hipótesis de Plank y planteó que los "cuantos"

de energía no se han de considerar sólo cuando un cuerpo absorbe o emite radiación electromagnética, sino que constituyen la propia radiación (es decir, la luz) cuando ésta se propaga. Operativamente, la ley de Plank-Einstein dice que la energía de un "quantum" es $E = h \cdot n$, siendo n la frecuencia de la radiación luminosa y h una constante universal llamada constante de Plank ($h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$).

Bohr tuvo el acierto de aplicar esta ley al átomo de Rutheford, modificándolo para que pudiera acomodarse a los hechos experimentales relativos a la emisión de luz. En 1913 publicó un trabajo denominado "*Sobre la constitución de átomos y moléculas*", donde desarrolló su propuesta para un nuevo modelo atómico. Dicha propuesta se puede derivar de los siguientes postulados:

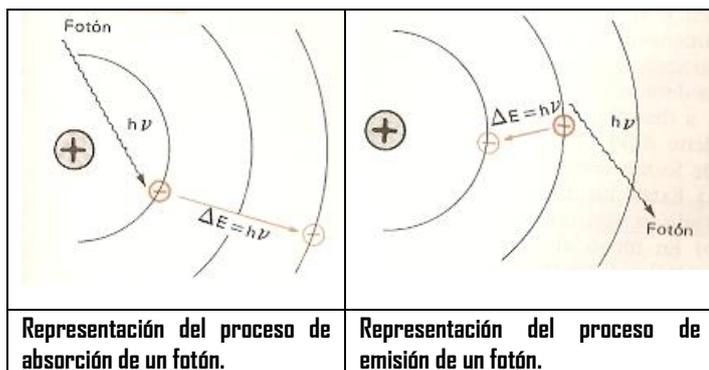
I. El electrón gira alrededor del núcleo del átomo en una órbita circular. Las órbitas electrónicas son estacionarias y el electrón cuando se mueve en ellas, no radia energía.



II. El impulso angular del electrón, L [$L = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times (m\mathbf{v})$, lo que, para una órbita circular, es $L = rmv$] está cuantizado, lo que significa que de las infinitas órbitas que podría tener, sólo son posibles las que cumplen que el impulso angular es un múltiplo entero de $h/2\pi$ (h es la constante de Plank).

III. Cuando un electrón "salta" desde una órbita superior, de energía E_2 , a otra inferior, de energía E_1 , la energía liberada se emite en forma de radiación. La frecuencia (ν) de la radiación viene dada por la expresión: $E_2 - E_1 = h\nu$.

En las figuras adjuntas se representan los procesos de absorción y de emisión de radiación por el átomo de Bohr. El electrón se encuentra en una de las órbitas posibles (aquellas que verifican la condición impuesta por el postulado II) sin radiar energía (tal como exige el postulado I).



Un fotón le comunicará su energía ($E = h \cdot n$) solo si esta energía tiene un valor exactamente igual a la diferencia de energía que hay entre dos de las órbitas posibles que puede tener el electrón en ese átomo (postulado III). El electrón "salta" a otra órbita más alejada (Dibujo a la izquierda) y el átomo queda excitado. De forma análoga puede un átomo emitir radiación cuando alguno de sus electrones "salta" desde una órbita alejada a otra más cercana al núcleo (Dibujo a la derecha)

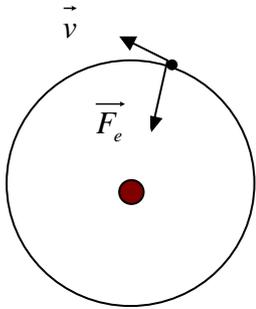
DESARROLLO DEL MODELO DE BOHR

El modelo de Bohr fue capaz de deducir tres resultados de gran interés: La ley de Moseley sobre la longitud de onda de los rayos X emitidos por átomos, la determinación de las órbitas permitidas de átomos e iones hidrogenoides (átomos o iones con un electrón) y la ley de Balmer-Rydberg sobre las series espectrales del Hidrogeno.

Ya hemos comentado que Moseley (1887 -1915) obtuvo una ley empírica sobre la longitud de onda de los rayos X emitidos por distintos átomos. Como se explica en la sección dedicada al concepto de campo, los rayos X se producen cuando electrones enviados mediante rayos catódicos inciden en un metal. Entonces cada elemento emite radiación de

una determinada longitud de onda y la ley de Moseley establece una relación entre esa longitud de onda y el número atómico del elemento, Z . Esta ley tuvo una gran importancia histórica, porque era la primera vez que el número atómico se relacionó cuantitativamente con una cantidad física medible.

Bohr explicó este hecho suponiendo que cuando un electrón de los rayos catódicos saca a un electrón atómico de su órbita, otro ha de ocupar enseguida su lugar. Cuando es grande la diferencia de energía entre las dos órbitas entre las que se produce el "salto" del segundo electrón, la longitud de onda emitida (obtenida aplicando el tercer postulado) corresponde a la radiación X.



En cuanto a la determinación de las órbitas permitidas de los átomos con un electrón, de acuerdo con el primer postulado dicho electrón gira alrededor del núcleo en una órbita circular estacionaria. En ella, la fuerza de atracción electrostática que ejerce el núcleo sobre el electrón tiene que ser igual al producto de su masa por su aceleración (centrípeta).

$$F_e = \frac{Ke^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad [1]$$

Además, de acuerdo con el segundo postulado, las órbitas permitidas son aquellas para las que el impulso angular del electrón se relaciona con un número, n , que indica el estado de energía:

$$m v_e r = n \frac{h}{2\pi} \quad (n=0, 1, 2, ..) \quad [2]$$

Combinando las ecuaciones [1] y [2], se obtienen la siguiente expresión del radio, r , de las órbitas permitidas:

$$r = \frac{h^2}{4\pi^2 e^2 K m_e} n^2 \quad (n=0, 1, 2, ..) \quad [3]$$

Esta expresión manifiesta el carácter cuantizado de las órbitas electrónicas. Sólo son posibles las que tienen los valores del radio que calcula la ecuación en función del valor del número, n , o **número cuántico principal** ($n=1,2,3..$)

En cuanto a la energía total del electrón, es la suma de su energía cinética más potencial eléctrica:

$$E_c = \frac{m_e v_e^2}{2} \quad E_p = -\frac{ke^2}{r} \quad [4]$$

Al sumar los dos tipos de energía [4], teniendo en cuenta la ecuación [1], se obtiene la siguiente expresión de la energía total del electrón en su órbita:

$$E = E_c + E_p = -\frac{Ke^2}{2r} \quad [5]$$

Sustituimos ahora el radio por el valor hallado en [3], para obtener las energías permitidas para el electrón:

$$E = -\frac{2\pi^2 K^2 e^4 m_e}{h^2} \frac{1}{n^2} \quad (n=0, 1, 2, \dots) [6]$$

Expresión que indica que sólo están permitidos al electrón determinados estados de energía, cuyo valor depende, como ocurre con los radios de las órbitas, del número cuántico principal, n .

Respecto a los espectros atómicos, a finales del siglo XIX bastantes científicos buscaron regularidades en los espectros de emisión de los átomos, como paso previo necesario a una posible interpretación de los mismos. En 1885 Balmer (1825 - 1898) encontró una fórmula empírica que relaciona las longitudes de onda de las líneas de emisión del hidrógeno. Cuando dio a conocer esa fórmula, Balmer sugirió que quizá fuera un caso especial de otra más general aplicable a otras series de líneas en otros elementos. Rydberg (1854 - 1919) inició entonces la búsqueda de una fórmula con esas características y en 1889, a partir de la gran cantidad de datos disponibles, encontró varias series espectrales que encajaban en la siguiente fórmula empírica, que demostró que era equivalente a la fórmula de Balmer.

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

En esta fórmula de Balmer-Rydberg, λ es la longitud de onda de la raya espectral, n_i y n_f son, respectivamente, dos números que indican los estados inicial y final de energía del electrón, y R_H es la constante de Rydberg. Aunque no da ninguna explicación del fenómeno estudiado, la fórmula de Balmer-Rydberg generó mucha atención en la Comunidad Científica porque se ajustaba muy bien a los datos experimentales y daba la posibilidad de predecir la existencia de nuevas líneas, aún no conocidas. Utilizando dicha fórmula se estableció la existencia de cinco series espectrales para el hidrógeno.

Un gran éxito del modelo de Bohr fue deducir la fórmula de Balmer-Rydberg. Según el tercer postulado, la diferencia entre las energías de dos órbitas electrónicas permitidas $E_2 - E_1$ es igual a la energía de un fotón de frecuencia ν que el electrón absorbe si "salta" a una órbita más alejada o emite si "salta" a una órbita más próxima:

$$E_2 - E_1 = h\nu \quad [1]$$

Por tanto, habiendo obtenido la expresión que proporciona los valores posibles de la energía del electrón en un átomo:

$$E = -\frac{2\pi^2 K^2 e^4 m_e}{h^2} \frac{1}{n^2} \quad (n=0, 1, 2, \dots) [2]$$

Basta tener en cuenta la relación entre la frecuencia y la longitud de onda de la luz ($c=\lambda \cdot \nu$) para deducir la siguiente expresión, que proporciona las longitudes de onda que el átomo puede emitir o absorber.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{2\pi^2 K^2 e^4 m_e}{ch^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Para comprobar que la expresión obtenida coincide con la ley empírica de Balmer-Rydberg hay que calcular el valor de la constante:

$$R_H = \frac{2\pi^2 K^2 e^4 m_e}{ch^3}$$

Se obtiene $R_H = 1.09 \cdot 10^{-7} \text{m}$ que coincide con el valor experimental.

Llegados aquí, aconsejamos visitar la Web, donde se dispone de dos animaciones acerca de estos conceptos. La primera procede de [FisquiWeb](#) (se reproduce con permiso del autor, Luís Ignacio García) y simula los procesos que producen las líneas espectrales del átomo de Hidrógeno, enfatizando el concepto, que ya hemos explicado, según el cuál los saltos del electrón entre dos niveles de energía no significan que se produzca ningún recorrido de dicho electrón entre ellos. La segunda (autores: C. Bluck, J. Gans, A. Gleixner, Prof. W. Heimbrodtt, Dr. Maddocks, Dr. S. Stallmann) indica todos los "saltos" electrónicos que corresponden a cada una de las series del átomo de Hidrógeno.

En resumen, el modelo de Bohr trajo un gran avance al conocimiento de la estructura atómica. El cálculo de las órbitas permitidas del electrón, obteniendo los niveles de energía del átomo de Hidrógeno, y la interpretación de los correspondientes espectros, eran un éxito similar al que había obtenido Newton al explicar las órbitas de los planetas con la ley de gravitación universal. En 1922 Bohr recibió el Premio Nobel de Física "*por sus servicios a la investigación de la estructura de los átomos y la radiación emitida por ellos*".

AMPLIACIÓN DEL MODELO DE BOHR. NÚMEROS CUÁNTICOS

A pesar del gran avance logrado por el modelo de Bohr, su éxito tampoco fue muy duradero y casi inmediatamente después de su aplicación fue necesario revisarlo para atender a los resultados de los espectros atómicos. Los espectros de átomos poli-electrónicos ya habían evidenciado una estructura mucho más compleja en la que, en lugar de cada línea "gruesa" que podía corresponder a un nivel de energía del modelo de Bohr, se encontraba un conjunto de líneas más finas. Al utilizar espectroscopios más potentes, el espectro de Hidrógeno enseguida mostró que sus rayas espectrales también estaban desdobladas.

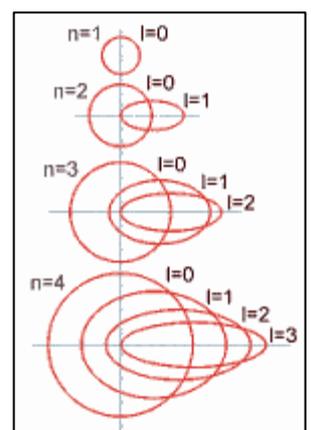
En 1916 Sommerfield (1868 -1951) dio una interpretación de estos hechos proponiendo una mayor complejidad en la estructura electrónica que la que había considerado el modelo inicial de Bohr: "El desdoblamiento de las líneas espectrales se debe a que cada nivel de energía calculado a partir de los postulados de Bohr en realidad esta formado por varios subniveles".



Relacionó esta propuesta con la suposición de que las órbitas del electrón podían ser elípticas y con diferentes excentricidades. Recordemos que el modelo de Bohr inicial utiliza un único parámetro, n , para caracterizar los niveles de energía permitidos del electrón. Este parámetro se llama número cuántico principal y puede tomar los valores: 1, 2, 3... Para cada uno de estos valores, se obtiene la energía y el radio de una órbita electrónica que se supone siempre circular.

Para tener en cuenta el desdoblamiento de las líneas espectrales iniciales del átomo de Hidrógeno, Sommerfield introdujo un segundo parámetro, l (**número cuántico secundario**), que puede tomar los valores los valores $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$.

Así, para cada valor de n se permiten varias órbitas electrónicas de diferente excentricidad. Tal como se indica en la figura adjunta $l=0$ corresponde a la órbita circular, $l=1$ a la órbita elíptica menos excéntrica, $l=2$ a la siguiente, de mayor excentricidad que la anterior,.. (La excentricidad de una elipse aumenta cuanto mayor sea la separación entre sus dos focos; una



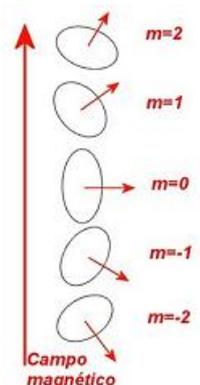
circunferencia es una elipse de excentricidad nula, en la que coinciden los dos focos en el centro de la circunferencia).

Formalmente el número cuántico secundario se liga a una cuantización del momento cinético o cantidad de movimiento angular del electrón en su órbita, puesto que decir que el electrón sólo puede tener determinadas órbitas elípticas es lo mismo que afirmar que su momento cinético sólo puede tener determinados valores. Por ello, al número cuántico secundario se le denomina número cuántico del momento angular o **número cuántico azimutal**. Por otra parte, los subniveles $l = 0, 1, 2$ y 3 se designan respectivamente con las letras s, p, d y f , derivadas de la terminología inglesa para la espectroscopía. Así, por ejemplo, $2s$ designa el subnivel de número cuántico principal 2 y número cuántico secundario 0, $3p$ designa el subnivel de número cuántico principal 3 y número cuántico secundario 1, etc.

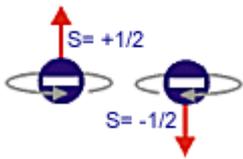
Otros hechos iban a complicar aún más este modelo de Bohr-Sommerfeld. En 1896, al estudiar la acción de campos magnéticos sobre los espectros de algunos gases, Zeeman (1865-1943), había descubierto el efecto que lleva su nombre: Las líneas espectrales de una fuente luminosa sometidas a un campo magnético intenso se dividen en varios componentes, cada uno de ellos polarizado. Este descubrimiento se enmarcaba en una investigación dirigida por su maestro, Lorentz (1853 - 1928), con el propósito de suministrar pruebas a favor de la teoría electromagnética de la luz. Además de contribuir a este objetivo, el efecto descubierto enseñó otra complejidad en la estructura del átomo. Para dar cuenta de dicha complejidad, se interpretó el desdoblamiento espectral considerando que un electrón girando alrededor de un núcleo es equivalente a una corriente eléctrica, y como tal produce un campo magnético perpendicular al plano en el que se mueve el electrón (es decir, es un pequeño imán). Al aplicar un campo magnético externo al átomo, ese imán electrónico se orienta.

Entonces, el hecho de que al aplicar el campo magnético al átomo la línea espectral se divide en un número determinado de ellas, indica que esa orientación de la corriente electrónica afectada por el campo magnético también está cuantizada, o, dicho de otro modo, indica que la corriente electrónica sólo puede tener determinadas orientaciones. Estas orientaciones permitidas dependen de la dirección en la que se aplica el campo magnético externo y de la corriente electrónica que lo sufre, la cual a su vez depende del momento angular del electrón y se caracteriza por el número cuántico azimutal, l .

Usando estos razonamientos se introdujo un tercer número cuántico, m (**número cuántico magnético**), cuyos valores posibles dependen de l . El número magnético m puede tener todos los valores enteros entre $-l$ y $+l$, incluyendo el cero. Así, por ejemplo, para $l = 2$, m puede valer $-2, -1, 0, 1, 2$, lo que implica que el subnivel d se desdobra en otros 5. La figura adjunta representa estos 5 desdoblamientos sobre la imagen de una corriente electrónica equivalente a un pequeño imán. En 1902 Zeeman y Lorentz, fueron galardonados con el Premio Nobel de Física *por su investigación conjunta sobre la influencia del magnetismo en la radiación, originando la radiación electromagnética*.

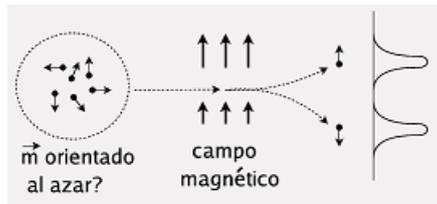


Con la introducción de los números azimutal y magnético se explicaban los tripletes (subnivel p) y quintupletes (subnivel d) del efecto Zeeman. Pero, se vio que el efecto Zeeman también presentaba otras colecciones de líneas, que no eran explicadas con estos números y se llamó efecto Zeeman anómalo. Se trata de dobletes que inicialmente se observaron en el subnivel s , donde $l=0$ y sólo debería haber un valor posible de m ($m=0$). Posteriormente se comprobó que estos dobletes ocurren en todos los subniveles y en 1925 Uhlenbeck (1900 - 1988) y Goudsmit (1902 - 1978) introdujeron un cuarto número cuántico, s (**número cuántico de spin**) para explicarlos. Este cuarto número tiene la particularidad de no relacionarse con la órbita ocupada en el átomo y hacerlo en cambio con una hipotética rotación del electrón sobre sí mismo (en inglés *spin* significa giro o girar).



Imaginando al electrón como una partícula cargada que gira alrededor de un eje propio, se deduce que generará un campo magnético y se plantea que únicamente puede tener dos sentidos de giro posibles. A estos sentidos de giro de la hipotética rotación interna del electrón le corresponden dos posibles valores del spin: $+1/2$, $-1/2$, que más coloquialmente se denominan *spin* arriba o *spin* abajo.

Una manera más formal de interpretar el spin es asignar al electrón un momento angular intrínseco. Con el desarrollo de la mecánica cuántica, este concepto se extendió a todo tipo de partículas (aunque no tengan carga eléctrica) y se pudo comprobar mediante un notable experimento realizado en 1922 por Stern y Gerlach. En dicho experimento, un haz de átomos de plata era colimado por dos rendijas estrechas y atravesaba una bobina magnética. La interacción del campo



magnético producido por la bobina con el momento angular de los átomos de plata provoca que éstos se desvíen de su trayectoria. En principio, cada átomo podría tener cualquier orientación de su momento angular, sufriría una desviación distinta, y el haz se abriría de forma continua. Sin embargo, se observó que el haz inicial se divide en dos haces perfectamente definidos, lo que indica que el momento angular intrínseco de los átomos sólo tiene dos orientaciones (por tanto, dos posibles valores del spin).

LIMITACIONES Y CARÁCTER HÍBRIDO DEL MODELO DE BOHR

Hemos visto como la necesidad de justificar los hechos experimentales obligó a retocar el modelo de Bohr e introducir progresivamente los números cuánticos. A pesar de estas modificaciones el modelo aún no podía explicar aspectos básicos de la espectroscopía y otros no menos importantes. Por ejemplo:

¿Por qué no son posibles todos los saltos electrónicos? La comparación de las líneas espectrales obtenidas empíricamente, con los saltos electrónicos que se pueden considerar entre los diferentes estados cuánticos, mostró que no todos los saltos son posibles, sino únicamente los que cumplen determinadas reglas de selección. El modelo sólo podía introducir las reglas de selección "ad hoc" sin ningún fundamento teórico.

¿A qué se debe la luminosidad mayor de unas rayas sobre otras? En todos los espectros algunas líneas son mucho más brillantes que otras, lo que indica una mayor probabilidad de transición entre algunos estados cuánticos, que entre otros. El modelo no proporciona ninguna explicación para este hecho o, dicho de otro modo, no aporta ningún mecanismo para calcular las probabilidades de transición entre estados estacionarios.

¿Cómo se justifica la existencia de direcciones privilegiadas en los enlaces atómicos? Experimentalmente se conocía que al formar moléculas, los átomos se enlazan entre sí a lo largo de determinadas direcciones privilegiadas, lo que se refleja finalmente en la geometría de la molécula formada. Este hecho sugiere la existencia de unas orientaciones privilegiadas de los electrones más externos del átomo (los que participan en el enlace químico) que el modelo tampoco puede explicar.

Éstas y otras muchas cuestiones quedaban sin una respuesta satisfactoria en el modelo de Bohr, pese a sus sucesivos y sustanciales retoques. Pero, aún más que estas cuestiones pendientes, lo que producía mayor insatisfacción era el carácter híbrido del modelo, cuyos postulados son una mezcla de conceptos de mecánica clásica con las ideas de cuantización introducidas inicialmente por Plank y Einstein: Por un lado el electrón se mueve en órbita circular y obedece a las ecuaciones de movimiento de la mecánica clásica, pero por otro una magnitud como el momento angular solo puede

alcanzar una serie de valores discretos (una idea cuántica). Además, el electrón estando en órbita obedece a una ley del electromagnetismo clásico que es la ley de Coulomb, pero, al mismo tiempo, no cumple la ley clásica que garantizaría la radiación de energía por parte de una carga acelerada.

En esta situación, cada vez se hacía más evidente la necesidad de un replanteamiento global de las bases teóricas que abrazara de forma coherente los nuevos hechos. Este replanteamiento condujo al establecimiento de la mecánica cuántica, cuyo primer éxito fue precisamente la correcta explicación de la estructura del átomo.

TRES CONCEPTOS FUNDAMENTALES DE MECÁNICA CUÁNTICA

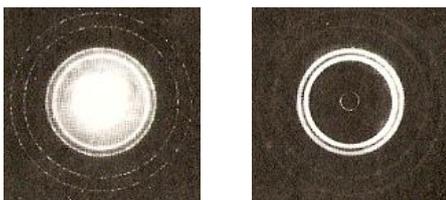
El estudio del átomo desempeñó un papel esencial en la crisis de la física y, a su vez, se convirtió en la primera conquista de la mecánica cuántica surgida de dicha crisis. En este apartado resumimos tres conceptos fundamentales que sustentan esta teoría de la física actual.

Dualidad onda-corpúsculo

En la sección dedicada al Debate histórico sobre la naturaleza de la luz se expone la Hipótesis de De Broglie (1892-1987), quien en su tesis doctoral de 1924 atribuyó a toda partícula con impulso, \mathbf{p} (para una partícula de masa, m , y velocidad, \mathbf{v} , $\mathbf{p}=m\mathbf{v}$), una onda asociada de longitud de onda $\lambda = h/p$ (h es la constante de Plank). La generalización de esta ley de De Broglie a todos los objetos materiales inició el desarrollo de la física cuántica, donde se establece que toda entidad individual (las partículas y también los fotones) tiene una **naturaleza dual**, de modo que su comportamiento global presenta dos aspectos complementarios: ondulatorio y corpuscular. Dependiendo de la situación predomina uno de estos dos aspectos.

Así por ejemplo, consideramos el ejemplo de una mota de polvo que se desplaza a una velocidad de 1m/s (masa aproximada = $0.01\text{g} = 1\cdot 10^{-5}\text{Kg}$, , radio aproximado = $1\cdot 10^{-3}\text{m}$). Su longitud de onda es del orden de 10^{-28}m ($\lambda = h/m\cdot v = 6.67\cdot 10^{-34}/1\cdot 10^{-5} = 6.67\cdot 10^{-29}\text{m}$), por tanto 10^{-25} veces más pequeña que su tamaño, lo que hace totalmente insignificante el carácter ondulatorio de la mota de polvo. Dicha mota de polvo se comporta, a todos los efectos, como una partícula.

En contraposición, consideramos ahora a un electrón impulsado por un campo eléctrico, como, por ejemplo, el generado entre las placas de un condensador ($m_e = 9.1\cdot 10^{-31}\text{Kg}$, $v_e = 2\cdot 10^6\text{m/s}$). Su longitud de onda es del orden de entre 10^{-10}m y 10^{-9}m ($\lambda = h/m\cdot v = 6.67\cdot 10^{-34}/9.1\cdot 10^{-31}\cdot 2\cdot 10^6 = 3.6\cdot 10^{-9}\text{m}$), siendo 10^{-10}m (1Angstrom) una longitud del orden de magnitud del tamaño atómico. Por lo tanto, en su contexto el electrón tiene una masa y una cantidad de movimiento (propiedades corpusculares), y también una longitud de onda (propiedad ondulatoria), significativas. En una colisión de



Comparación de las figuras de difracción obtenidas con rayos X (foto izquierda) y con electrones (foto derecha)

dos electrones predomina el comportamiento corpuscular de ambos, pero también ocurre que un haz de electrones se difracta cuando pasa por un pequeño orificio circular de tamaño comparable a su longitud de onda. En 1927 Davidson (1881-1958) y Germer (1856-1951) realizaron un experimento pionero demostrativo del carácter ondulatorio del electrón. Hicieron incidir muy oblicuamente un haz de electrones sobre un cristal de níquel. La

distancia entre los átomos de níquel es del orden de magnitud de la longitud de onda de los electrones. Por tanto, el cristal ejerció de red de difracción de éstos cuanto los electrones eran reflejados tras penetrar débilmente en el interior del cristal. Se tomaron "fotografías" (usando un detector de partículas cargadas) que mostraron con claridad la difracción

de los electrones y los cálculos realizados a partir de las figuras de difracción proporcionaron valores de la longitud de onda predicha por la hipótesis de De Broglie.

Principio de incertidumbre

El sentido físico de la longitud de onda de una partícula es señalar la existencia de una cierta deslocalización o, lo que es igual, de una indeterminación en el movimiento que puede seguir la partícula. Significa que la partícula carece de una trayectoria absolutamente determinada y como consecuencia se tiene una imposibilidad, al contrario de lo que suponía la mecánica clásica, de determinar de forma simultánea con precisión absoluta su posición y su velocidad. El formalismo matemático de la mecánica cuántica permite deducir los límites de dicha imprecisión, mediante las siguientes relaciones:

$$\Delta x \cdot \Delta(mv_x) \geq h/2\pi \quad \Delta y \cdot \Delta(mv_y) \geq h/2\pi \quad \Delta z \cdot \Delta(mv_z) \geq h/2\pi$$

Estas relaciones son expresión del **principio de incertidumbre**, planteado en 1927 por Heisenberg (1901 - 1976). Es



Heisenberg (1901-1976)

uno de los principios fundamentales de la mecánica cuántica. Indica que existe un límite en la precisión con la que podemos medir simultáneamente la posición y la velocidad de un objeto, límite que viene dado por el valor de la constante de Planck, h , y por la masa, m , del objeto. La imprecisión impuesta por el principio de incertidumbre a las magnitudes posición y velocidad (cantidad de movimiento), también se aplica a otras parejas de magnitudes relacionadas con éstas y cuyo producto tiene las mismas dimensiones que tiene el producto de posición y cantidad de movimiento. Así, la determinación simultánea de la energía y el tiempo, viene afectada por un límite del que es expresión la siguiente ecuación: $\Delta E \cdot \Delta t \geq h/2\pi$.

Para entender por qué pasó desapercibido para la física clásica el principio de incertidumbre consideramos un objeto de pequeñas dimensiones, como un grano de polvo de $10^6 m$ de diámetro que se mueve con una velocidad de $1 m/s$. Si se determina su velocidad con una imprecisión $\Delta v = 10^{-3} m$ (muy pequeña con relación al valor de v), la imprecisión en la determinación de su posición es $\Delta x = 10^{29} m$, absolutamente despreciable frente al tamaño del objeto. En este caso, la posición y, por tanto, la trayectoria del grano de polvo se pueden determinar casi perfectamente. Rehaciendo estos mismos cálculos para un electrón que avanzara hipotéticamente a la misma velocidad y se determinara con la misma precisión, obtenemos una imprecisión en su posición de $\Delta x = 10^1 m$, que es billones de veces superior al tamaño convencional del electrón ($10^{-15} m$). Por tanto, dicho electrón queda totalmente deslocalizado.

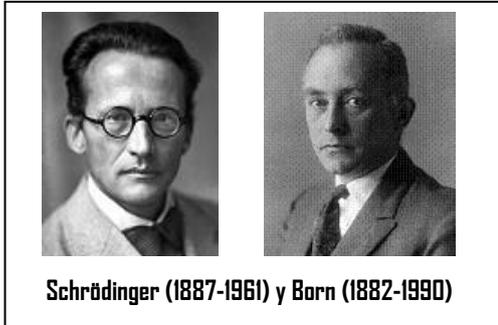
La indeterminación que expresa el principio de incertidumbre de Heisenberg no se ha de atribuir a posibles faltas de precisión de los instrumentos y/o técnicas utilizadas (subsanales en mayor o menor grado con un perfeccionamiento de dichos instrumentos o técnicas) ni tampoco se ha de entender como un límite impuesto por la naturaleza a la posibilidad de conocerla. Por el contrario, el principio de indeterminación supone un conocimiento más profundo de la realidad, que hace referencia a la propia naturaleza de la materia, e informa, por ejemplo, de que el electrón no es ese objeto puntual que creíamos, sino algo mucho más complejo.

Ecuación de Schrödinger

La crítica radical de los conceptos clásicos sobre el movimiento que realizó la mecánica cuántica, de la que son expresión la ecuación de De Broglie y la relación de incertidumbre de Heisenberg, exigió una modificación igualmente radical del

formalismo matemático utilizado para describir el movimiento o, más en general, para describir el estado de un sistema y su evolución.

En la física clásica, el estado de movimiento de un objeto en un instante determinado se describe dando los valores de su posición y su velocidad. Como acabamos de ver, en la mecánica cuántica esto no es posible y la descripción completa del estado del objeto sólo puede aspirar a predecir las probabilidades de los distintos valores que pueden obtenerse al medir la posición y la velocidad del objeto. Además, se ha de considerar su carácter dual, de modo que el estado del objeto



también viene en función de sus propiedades ondulatorias, como la longitud de onda. En 1925 Schrödinger (1887 -1961), modificó la ecuación general de los movimientos ondulatorios usando la relación de De Broglie, para que reflejase también las propiedades corpusculares. La ecuación obtenida permite calcular una función de onda, Ψ , que depende de la posición y el tiempo, $\Psi(x, t)$. Un año después, en 1926, Born (1882 - 1970), que había trabajado junto con Heisenberg, apreció que en la ecuación de Schrödinger,

el cuadrado de la función de onda Ψ^2 [formalmente, $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$] se podía interpretar como una densidad de probabilidad. Después de aplicar la ecuación (a un electrón, a un bloque de madera,..), el cuadrado de la función de onda obtenida como solución de dicha ecuación, representa la probabilidad de que el objeto sea detectado en un lugar y en un instante determinados. Esto es coherente con el carácter dual de la materia y con el concepto de deslocalización exigido por el principio de incertidumbre de Heisenberg. Schrödinger recibió el premio Nobel de Física en 1933 por haber desarrollado su ecuación y Born recibió el mismo galardón en 1954 por la interpretación probabilística de la función de ondas de dicha ecuación.

Es importante que se entienda que la mecánica cuántica no es una ampliación de la anterior mecánica clásica, sino una teoría autónoma, cuyo campo de aplicación se extiende allá donde se podía aplicar la mecánica de Newton y también, por supuesto, al ámbito donde las predicciones de la mecánica de Newton erraban (física atómica, nuclear, partículas). La ecuación de Schrödinger juega en la mecánica cuántica el mismo papel que juega la segunda ley de Newton en la mecánica clásica, de tal modo que en las situaciones en las que es insignificante el carácter ondulatorio de los objetos, la ecuación de Schrödinger (de aplicación general) se reduce a la segunda ley de Newton.

Decir finalmente que la ecuación de Schrödinger no tuvo en cuenta las predicciones de la relatividad y, por ello, sólo puede describir partículas cuya velocidad sea pequeña comparada con la velocidad de la luz. Otra limitación de la ecuación es que no incorporó el spin adecuadamente. Pauli (1900 -1958), que en 1924 había introducido el cuarto número cuántico, generalizó ligeramente la ecuación de Schrödinger introduciendo términos que predicen correctamente el efecto spin, y en 1928 Dirac (1902 - 1984) introdujo los efectos relativistas.

MODELO MECANO-CUÁNTICO DEL ÁTOMO

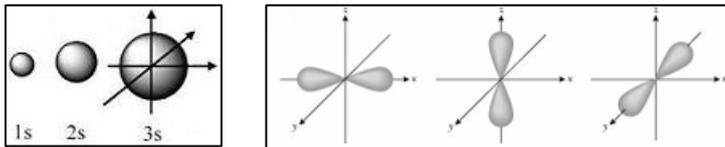
Resumimos ahora lo esencial del modelo mecano-cuántico, que se deriva formalmente de aplicar la ecuación de Schrödinger al átomo. En su forma más simplificada esta ecuación se puede escribir así: $H\Psi = E\Psi$, donde el término H es un "operador matemático" que representa por separado a la energía cinética y la energía potencial del sistema, Ψ es la función de onda, y E , la energía de dicho sistema.

Para cualquier valor de la energía, E , positivo, la ecuación de Schrödinger obtiene soluciones distintas de cero para Ψ . Esto implica que la probabilidad de que el sistema se encuentre en ese estado (dada por Ψ^2) también es distinta de cero,

lo que simplemente significa que ese sistema puede ocupar cualquier lugar del espacio y puede tener cualquier valor de la energía (siempre que no sobrepase la velocidad de la luz). Un sistema con energía, E , positiva es un sistema libre, no ligado, por ejemplo, el formado por las partículas de un gas, el constituido por un bloque de madera que se puede desplazar encima del suelo, etc.

En cambio, para cualquier valor negativo de la energía, E , la ecuación de Schrödinger sólo obtiene soluciones distintas de cero para determinados valores de E (ψ es nula para el resto de valores). Es el caso del electrón en el átomo: Su energía potencial eléctrica (negativa) supera a su energía cinética (positiva), por lo que la energía total, E , es negativa. La solución de la ecuación de Schrödinger dicta entonces que el electrón sólo puede tener determinadas cantidades de energía (como muestran los resultados experimentales de los espectros atómicos). Por tanto, la cuantización de la energía de los electrones en el átomo es una consecuencia natural de los principios de la mecánica cuántica, donde la ecuación de Schrödinger describe al sistema atómico. Al resolverla se obtienen todos los valores discretos de la energía y se confirma que la función ψ obtenida depende de cuatro parámetros, correspondientes a los números cuánticos que se introdujeron de forma poco rigurosa en el modelo de Bohr-Sommerfeld.

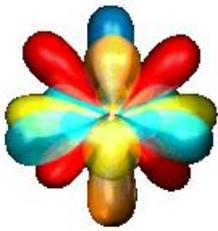
Evidentemente, en el modelo mecano-cuántico no tiene cabida el concepto de órbita electrónica ni se puede suponer al electrón una partícula localizable. En su lugar, el cuadrado de la función de ondas, ψ^2 , indica zonas del espacio en las que existe probabilidad de encontrar al electrón. Estas zonas reciben el nombre de nubes electrónicas u **orbitales** y tienen un número limitado como consecuencia del carácter ondulatorio del electrón: Cada capa sólo puede tener un número entero de ondas de De Broglie igual que es limitado el número de ondas estacionarias que se pueden formar en una cuerda fija en sus dos extremos.



Los orbitales presentan formas y tamaños diversos, dependiendo de la atracción existente entre los electrones y el núcleo, y la repulsión que se ejercen los orbitales entre sí por tener cargas de igual signo. Por

ejemplo, los orbitales de tipo s ($l=0$), que se presentan aislados ($m=0$), tienen simetría esférica centrados en el núcleo. En cambio, los orbitales de tipo p ($l=1$), que constituyen un conjunto de tres orbitales muy próximos ($m= -1, 0, 1$), se orientan en tres direcciones perpendiculares (x, y, z) para reducir al mínimo la repulsión entre ellos.

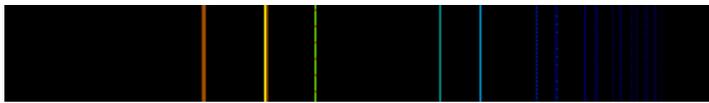
Es importante comprender que los orbitales no existen con independencia de los electrones. Allá donde haya uno o, como máximo, dos electrones atómicos, cuyo nivel de energía determina el número cuántico principal, n , se obtiene una zona de probabilidad de encontrar a ese electrón o a esa pareja a la que se llama orbital, y cuya forma y orientación determinan los números cuánticos, l y m .



Representación de un átomo con sus orbitales

El concepto de orbital implica una nueva interpretación de los espectros atómicos que supera las dificultades que tenía el modelo de Bohr, para el que el desnivel de energía que produce un espectro se debía a un salto del electrón entre dos órbitas. En el modelo mecano-cuántico tales órbitas carecen de realidad, sustituyéndolas por las nubes electrónicas de probabilidad, con formas y tamaños muy variados. La transición del electrón entre dos estados de energía implica un cambio en la forma y la posición de la nube electrónica y, por tanto, la emisión o absorción de un fotón provoca una "sacudida" del átomo haciéndole adoptar otra forma. Este proceso explica la diferente probabilidad de los distintos saltos electrónicos. La probabilidad de que se produzcan es mayor cuanto mayor sea la superposición o la interpenetración entre los orbitales inicial y final. Por eso, las transiciones entre determinados orbitales son muy poco probables y producen líneas espectrales muy débiles, como ocurre, por ejemplo, con la transición entre dos orbitales, s , ambos con simetría esférica con centro en el núcleo. En cambio, los orbitales s y p se superponen, la transición entre ellos es más probable y la línea espectral más intensa.

Un segundo aspecto que no pudo explicar el modelo de Bohr es el espesor de las rayas, en ocasiones muy considerable,



Espectro de emisión del sodio con líneas de diferente intensidad y espesor

sobre todo a elevadas temperaturas y presiones. Este hecho lo explica directamente la relación de incertidumbre de Heisenberg, según la cual existe una imprecisión de la energía (dada por $\Delta E \cdot \Delta t \geq h/2\pi$) y, por tanto, en la frecuencia del fotón emitido. La imprecisión en la energía es tanto menor cuanto mayor sea el tiempo, Δt , durante el cual el electrón permanece en un cierto estado de energía (estado estacionario) $\Delta E \rightarrow 0$, pero cuanto más rápidamente varíe la energía del electrón, mayor será la imprecisión, ΔE , que afecte a la energía y más anchas son las rayas del espectro. A temperaturas y presiones elevadas se producen de forma continuada numerosas transiciones de electrones, por tanto, las rayas del espectro son más anchas e imprecisas.

Otra cuestión pendiente de explicar por el modelo de Bohr es la existencia de direcciones privilegiadas en las uniones entre átomos, que está en el origen de la estructura y la geometría de las moléculas y redes atómicas obtenidas. Las distintas orientaciones de los orbitales y las formas de enlazarse orbitales atómicos para formar orbitales moleculares están en la base de la explicación de estos hechos.

En resumen, el modelo cuántico del átomo explica de forma más fundamentada hechos que en el modelo de Bohr-Sommerfeld habían necesitado de hipótesis "ad hoc" y sucesivos retoques. Además, interpreta de forma satisfactoria otras muchas cuestiones que el modelo de Bohr no pudo interpretar. Adicionalmente a su carácter explicativo, el modelo cuántico del átomo enseguida mostró un impresionante carácter predictivo, pudiéndose aventurar a partir del modelo múltiples aspectos del comportamiento de los elementos (dependiendo de su estructura atómica), sus propiedades periódicas, las sustancias que pueden formar y sus propiedades, etc. No es una exageración decir la química moderna, la física de materiales, incluso, la física nuclear y la física de partículas son deudoras del éxito que supuso la aplicación pionera de la teoría cuántica al átomo.

PROBLEMAS PENDIENTES. NUEVAS INVESTIGACIONES

El desarrollo de los modelos de estructura del átomo, desde el primer modelo que propuso Thomson, hasta el modelo atómico mecano-cuántico aceptado hoy, abrió el camino a nuevos e importantes problemas. Algunos de estos problemas son:

1) ¿Explica el modelo atómico las propiedades químicas de los elementos y su periodicidad?

El modelo de estructura del átomo y, en especial, la aclaración de la configuración electrónica trajo un gran avance a la interpretación de las propiedades química de los elementos y explicó su periodicidad. Esta cuestión se trata en el tema dedicado a la "Estructura atómica y Sistema Periódico de los elementos".

2) ¿Cómo se justifican las uniones entre átomos para formar las distintas sustancias?

También es la configuración electrónica de los átomos una clave fundamental para abordar esta cuestión, que se estudia en el tema dedicado al "Enlace químico".

3) ¿Cómo se justifica la estabilidad del núcleo?

Estos avances fueron únicamente el punto de partida de un largo y fértil desarrollo de una rama entera de la física, hoy de gran actualidad: La física nuclear.

4) ¿Existen otras partículas fundamentales, además de las identificadas en los modelos atómicos desarrollados (protones, neutrones y electrones)? ¿Tienen estas partículas a su vez una estructura interna?

Estas cuestiones ya se empezaban a investigar mientras se desarrollaba el modelo mecano-cuántico del átomo y hoy son de completa actualidad. Tras el descubrimiento de las tres partículas mencionadas se encontraron otras (neutrino, fotón,..), se descubrieron sus antipartículas (positrón, antiprotón, antineutrón,..) y se vio que por debajo de todas ellas, existen componentes más básicos (quark). Todo ello es objeto de estudio de una de las principales ramas actuales de la física: La física de partículas.

Las animaciones, materiales y referencias citadas en este documento están en la página (http://intercentres.edu.gva.es/iesleonardodavinci/Fisica/Estructura_atomo/Atomo.htm) dedicada a la "Estructura del átomo", dentro de la Web del Depto. de Física y Química del IES "Leonardo Da Vinci" de Alicante (<http://intercentres.edu.gva.es/iesleonardodavinci/Fisica/fisica.htm>)