

ESTRUCTURA EXTRANUCLEAR DEL ATOMO

Tema 6.- Estructura extranuclear del átomo.- Partículas fundamentales. Ideas de Rutherford y modelo atómico. Espectros atómicos de emisión. Espectro del hidrógeno. Modelo atómico de Bohr. Carácter ondulatorio de los electrones; orbitales, números cuánticos. Configuraciones electrónicas de los átomos polielectrónicos; principio de exclusión (Pauli); principio de máxima multiplicidad (Hund).

Tema 6.-Estructura extranuclear del átomo.

6.1.-Partículas fundamentales. 6.1.1.-La conductividad en los gases. 6.1.2.-El electrón. 6.1.3.-Modelo atómico de Thomson. 6.1.4.-El protón. 6.1.5.-El neutrón.

6.2. Modelo atómico de Rutherford. 6.2.1. Antecedentes: La radiactividad 6.2.2. Experiencia de Rutherford. 6.2.3. Modelo atómico de Rutherford 6.2.4. Las partículas fundamentales forman los diversos elementos. 6.2.5. Insuficiencia del modelo de Rutherford.

6.3. Espectros. 6.3.1. Espectro electromagnético de la luz. 6.3.2.-Espectros continuos y discontinuos. 6.3.3.Espectros de rayos X.

6.4. El espectro del átomo de hidrógeno. 6.4.1. El efecto fotoeléctrico.

6.5. Modelo atómico de Bohr. 6.5.1. Dificultades del modelo de Bohr: nuevos números cuánticos. 6.5.2. Orbitas elípticas: número cuántico de momento angular. 6.5.3. Efecto Zeeman. Número cuántico magnético. 6.5.4. Spin del electrón. Número cuántico de Spin.

6.6. Física Cuántica. 6.6.1. Hipótesis de De Broglie. 6.6.2. Principio de incertidumbre de Heisemberg. 6.6.3. La función de ondas: ecuación de Schrödinger.

6.7. Los números cuánticos.

6.8. Configuraciones electrónicas de los átomos polielectrónicos. 6.8.1 Principio de máxima multiplicidad o de Hund. 6.8.2 Principio de exclusión de Pauli.

6.1. Partículas fundamentales.

Antecedentes de la divisibilidad del átomo.

La hipótesis de la discontinuidad de la materia fue la base del desarrollo de la química del siglo XIX. Gran parte de la física del siglo XX se fundamenta en la hipótesis de la discontinuidad de la energía. El desarrollo de esta hipótesis permitió adentrarse en el conocimiento de la estructura de los átomos.

Los trabajos de Faraday sobre electrólisis habían llevado a intuir una estrecha relación entre materia y electricidad y sugirieron que la electricidad misma estaba constituida por partículas materiales. Los estudios sobre la conductividad eléctrica de los gases confirmaron esta hipótesis.

6.1.1. La conductividad en los gases.

Los gases, en condiciones ordinarias, son aislantes, pero a presiones inferiores a 0,01 atm y

sometidos a elevados voltajes se vuelven conductores y emiten luz. Para estudiar la conductividad de los gases se utiliza el aparato de descarga de gases. Fig. (6.1). A medida que va disminuyendo la presión del gas, la conducción persiste y la luminosidad va disminuyendo. A una presión de 10^{-4} atm la pared opuesta al cátodo empieza a fluorecer y emite una luz amarillo verdosa. Esta fluorescencia es debida a los impactos que producen sobre el vidrio unos rayos que proceden del cátodo, los rayos catódicos.

6.1.2. El electrón.

En 1.897 Thomson estudió la naturaleza de dichos rayos y demostró las siguientes características figuras (6.2 a 6.5):

- a) La naturaleza y comportamiento de estos rayos no depende de la naturaleza del gas introducido en el tubo.
- b) Se propagan en línea recta.
- c) Poseen masa, cantidad de movimiento. Son partículas materiales.
- d) Se desvían por campos eléctricos y magnéticos. Por lo tanto tienen carga.
- e) La relación carga/masa (q/m) es muy grande, 1840 veces mayor que la conocida para los iones de hidrógeno.

Se dedujo que eran partículas materiales de masa mínima, procedentes del cátodo (independientemente de la naturaleza del cátodo) y cargadas negativamente. ELECTRÓN.

En 1911 Millikan determinó la carga del electrón mediante el experimento de gotas de aceite cargadas en un condensador.

En 1919 Aston comprobó la relación q/m en un espectrógrafo de masas.

6.1.3. Modelo atómico de Thomson.

Thomson había demostrado que los electrones eran partículas constituyentes del átomo y puesto que éste debía ser eléctricamente neutro dedujo que debían existir partículas cargadas positivamente. Ya que la masa de los electrones con respecto a la masa del átomo era muy pequeña, la mayor contribución a la masa atómica debía corresponder a las partículas cargadas positivamente.

Thomson elaboró el primer modelo atómico suponiendo que el átomo era una esfera cargada positivamente dentro de la cual, como muy pequeños gránulos, se encontrarían embebidos los electrones de manera que la disposición electrostática resultara estable y neutra.

Este modelo explicaba los hechos experimentales conocidos como la formación de iones, la electricidad estática, la electrólisis y la corriente eléctrica.

6.1.4. El protón.

Cuando se trabaja con un tubo de descarga de gases con el cátodo perforado junto con los rayos catódicos aparece una nueva radiación, Fig (6.6) Es una radiación que se identificó bastante más tarde y que en esencia presenta las siguientes propiedades:

- a) Es una radiación material que transporta más masa que los rayos catódicos.
- b) Surge de todos los puntos del interior de tubo, esto es, se origina en el seno del gas y no en un electrodo.
- c) Su energía cinética depende de la naturaleza del gas.

d) Está cargada positivamente pues se desvía hacia el polo negativo en el interior de un campo eléctrico.

La explicación que recibieron estos rayos, llamados "rayos positivos" o "rayos canales", es que se producían al chocar los rayos catódicos con los átomos del gas encerrado en el interior del tubo de descarga.

En el choque, alguno de los electrones corticales de dichos átomos eran arrancados con lo que se transformaban en iones positivos. Debido a su carga positiva se dirigían hacia el cátodo.

Cuando el gas en el interior del tubo era hidrógeno se encontró la mayor relación q/m. Se dedujo entonces que los rayos positivos eran debido al átomo de hidrógeno sin el electrón. Otra partícula elemental: el PROTÓN.

El conjunto de las experiencias en los tubos de descarga de gases nos proporciona valiosos datos sobre la estructura de la materia:

- 1) El átomo contiene partículas materiales subatómicas.
- 2) Algunas de estas partículas, los electrones, tienen carga eléctrica negativa. Cada electrón posee una carga eléctrica elemental.
- 3) Los electrones deben estar situados en la parte exterior del átomo pues se "arrancan" con bastante facilidad.
- 4) El resto del átomo tiene carácter positivo y debe estar situado en el interior del núcleo.
- 5) El átomo es eléctricamente neutro, tiene que haber igual número de partículas positivas que negativas.

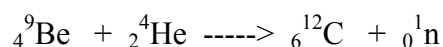
6.1.5. El neutrón.

Rutherford demostró teóricamente en 1920 la necesidad de su presencia en el núcleo como consecuencia de la exigencia de estabilidad del núcleo.

Dificultad de aislamiento debido a que es una partícula sin carga.

Su existencia fue probada en 1932 por Chadwick al bombardear núcleos ligeros por partículas alfa.

Reacción nuclear.



Partículas elementales.

Nombre	Símbolos	Carga relativa	Carga en Coulombs	masa en reposo (uma) aproxim.	masa en reposo (uma)
Electrón	e, e ⁻	-1	-1,6 10 ⁻¹⁹	1/1840	0,0005486
Protón	p, p ⁺ , ${}_1^1\text{H}$	+1	+1,6 10 ⁻¹⁹	1	1,00728
Neutrón	n, ${}_0^1\text{n}$	0	0	1	1,00867

El problema de las partículas elementales.

En junio de 1984, el italiano Carlo Rubbia (1934), investigador del CERN de Ginebra, anunció la identificación de una nueva partícula, el quark *top+. Este hallazgo puso fin a una de las cacerías científicas más largas de este siglo.

Como hemos visto anteriormente, mediada la década de los treinta, el número de partículas que no se podían dividir quedó reducido a cuatro: electrón, protón, neutrón y neutrino (que ya había sido postulado, para explicar ciertos fenómenos radiactivos, en 1933). Aparte se tenían que tener en cuenta las posibles antipartículas.

Para bien o para mal la cosa no quedó ahí. Entre los años cincuenta y los sesenta el número de partículas *elementales+ (volvía a acercarse al centenar! El protón y el neutrón sólo eran los miembros más populares de una extensa familia de partículas: los hadrones. Y había otras familias...

Ahora bien, entre los científicos que se dedicaban a desentrañar la estructura de la materia ha habido siempre una idea obsesiva: la materia tiene que estar formada por pocas unidades elementales. Se ha creído siempre que el problema de fondo es el de la combinación de partículas elementales antes que el de una gran variedad de partículas.

A mediados de los sesenta el modelo quark venía a aligerar de nuevo la situación con una reducción drástica del número de partículas fundamentales a cambio de postular un nivel más profundo de organización.

El modelo fue propuesto por Murray Gell-Mann y George Zweig del Instituto de Tecnología de California. El nombre de quark lo tomó Gell-Man de un personaje de la obra de James Joyce Finnegan's Wake, un personaje que no daba nunca la cara. El modelo postula que los constituyentes elementales de la materia son unas partículas que se pueden agrupar en dos familias: los quarks y los leptones

QUARK	UP	DOWN	CHARM	STRANGE	TOP	BOTTOM
	arriba	abajo	encanta-dor	extraño	cima	fondo
carga eléctrica	+2/3	-1/3	+2/3	-1/3	+2/3	-1/3

Además , cada quark puede tener tres posibles tipos de una nueva propiedad que se denomina carga de color para diferenciarla de la carga eléctrica. Teniendo en cuenta el color, el número de quarks se eleva a 18 (6x3=18)

LEPTONES	ELECTRON	MUON	TAUON	NEUTRINO ELECTRONICO	NEUTRINO MUONICO	NEUTRINO TAUONICO
Carga	-1	-1	-1	0	0	0

El panorama actual presenta todas las formas de materia construibles a partir de los 18 quarks y de los 6 leptones, mientras que se necesitan 12 partículas más para justificar todas las interacciones conocidas. Esto hace que el número de partículas elementales vuelva a elevarse a 36, a las que hay que sumar las correspondientes antipartículas.) Es este número demasiado elevado para la sensibilidad de los científicos? La confirmación de la existencia del último quark parece que les debería proporcionar un bien ganado descanso, aunque, teniendo en cuenta los precedentes, es fácil apostar a que no durará mucho...

6.2. Modelo atómico de Rutherford.

6.2.1. Antecedentes: La radiactividad

En 1896 un año antes de la experiencias de Thomson con rayos catódicos, Becquerel encontró que algunos compuestos de uranio emitían radiaciones análogas a los rayos X. Pensó que estas sustancias emitían radiaciones cuando eran expuestas a la luz ultravioleta, pero después se comprobó que no sólo en esa circunstancia emitían radiaciones, sino que en la oscuridad también lo hacían, incluso con más intensidad.

Los esposos **Curie** comprobaron más tarde que no sólo los compuestos de uranio emitían radiaciones, sino que otros de distintos elementos (polonio, radio, torio) también la emitían, y de mayor intensidad. A esta capacidad que poseían algunas sustancias se la llamo **radiactividad**.

Se comprobó que estas radiaciones eran de distinta naturaleza, ya que, al someterlos a la acción de un campo magnético, había una que se desviaban, comportándose como un haz de electrones, radiación β ; otra se desviaba comportándose como partículas cargadas positivamente de mayor masa, radiación α (núcleos de helio); y otra parte que no se desviaba, radiación γ (radiación electromagnética).

6.2.2. Experiencia de Rutherford.

Rutherford hizo incidir partículas alfa procedentes de un material radiactivo sobre láminas delgadas de Au, Ag, Al y otros metales; encontró los siguientes hechos (fig 6.7 y 6.8):

- **Casi todas las partículas alfa atravesaban la lámina sin sufrir desviación.**
- **Aproximadamente una partícula de cada 10.000 se desviaba ligeramente de su trayectoria.**
- **Un número extraordinariamente pequeño de la partículas que llegaban a la lámina, rebotaban en ella.**

"Esto era lo más increíble que me había ocurrido en mi vida. Tan increíble como si un proyectil de 15 pulgadas, disparado contra una hoja de papel de seda, se volviera y lo golpeará a uno"

Conclusiones:

- **Atomo vacío.**
- **El rebote solo se explica si se supone toda la masa concentrada (núcleo) muy pequeño.**
- **Las grandes desviaciones observadas no podían achacarse a choques elásticos por lo que las atribuyó a fuertes repulsiones electrostáticas; es decir, sólo son explicables con una concentración de carga positiva.**
- **Electrones situados a distancias relativamente grandes.**

6.2.3. Modelo atómico de Rutherford

Consecuentemente con su interpretación de los resultados experimentales, Rutherford postuló la existencia en el átomo de un pequeño núcleo que encerraba toda la carga positiva y prácticamente toda la masa del átomo (Fig 6.9).

Cálculos de tipo electrostático permiten evaluar las dimensiones del núcleo, que tiene un diámetro del orden del fermi ($1 \text{ fermi} = 10^{-15} \text{ m}$), es decir, 100.000 veces menor que el diámetro del átomo. El diámetro de un átomo es del orden del angstrom ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) (Un campo de fútbol y la cabeza de un alfiler).

Los electrones se movían por la corteza.

Como el número de protones (Z) es mucho menor que la masa atómica de un elemento (aproximadamente la mitad), Rutherford tuvo que suponer que en el núcleo había otras partículas pesadas, sin carga eléctrica, a las que llamo neutrones, y de masa aproximadamente igual a la de los protones.

También hacia falta para explicar la estabilidad del núcleo la existencia de fuerzas nucleares: fuerza nuclear fuerte y fuerza nuclear débil. La fuerza nuclear fuerte es de corta distancia y se da entre los nucleones; a una distancia del orden del fermi esta fuerza es diez veces más intensa que la fuerza de repulsión electrostática entre los protones, a distancias superiores la fuerza electrostática es superior a la fuerza nuclear fuerte. La fuerza nuclear débil da origen a una cierta estabilidad en el núcleo; también es de corto alcance y es la responsable de la radiación beta, es decir de la transformación de un neutrón en un protón y un electrón y la emisión de este último.

6.2.4. Las partículas fundamentales forman los diversos elementos.

Si el átomo está compuesto por tres partículas fundamentales, ¿cómo surge de ahí la pluralidad de los diversos elementos?

Un átomo se distingue del de otro elemento precisamente en el número de partículas fundamentales.

Al disponer los elementos del más ligero al más pesado, se comprueba que al pasar de uno al siguiente, el número de protones (y, por tanto, el de electrones) aumenta de una en una unidad.

Ejemplos y excepciones en el orden másico. Como estudiaremos posteriormente el orden es el del número de protones.

Un elemento se caracteriza por el número de protones que tenga, Z , número atómico, como demostró Moseley en el estudio del espectro discontinuo de rayos X

Z , número atómico es el número de protones de un átomo en el núcleo.

Cuando dos átomos tienen igual Z pero distinto número de neutrones son átomos del mismo elemento (isótopos, ocupan el mismo lugar en el orden de la tabla de periodos).

Ejemplos. Se conocen dos variedades estables de átomos con tres protones:

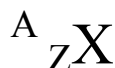
10	3p, 3n, 3e ($A=6$)		${}^6\text{Li}$
		ambos son Li	
20	3p, 4n, 3e ($A=7$)		${}^7\text{Li}$

Las dos variedades se diferencian en el número de neutrones, N , y, por tanto, en su masa atómica, que es aproximadamente igual a la suma del número de protones y de neutrones. Por ello, el número entero que da esta suma se llama número másico A

$$A = Z + N$$

A número másico es el número de nucleones (protones mas neutrones) del núcleo de un átomo.

Un átomo se simboliza



Ejemplos

Isótopos son átomos que poseen el mismo Z pero distinto A

Esto explica que las masas atómicas de algunos elementos (formados por varios isótopos) difieran bastante de ser números enteros. Por ejemplo, el cloro, formado por dos isótopos:

Isótopos	Partículas fundamentales	Masa isotópica	Abundancia	Masa atómica
Cloro-35	17p, 18n, 17e	34,97	75,5%	35,45
Cloro-37	17p, 20n, 17e	36,94	24,5%	

Según se aprecia, la masa atómica de un elemento depende de la abundancia de sus isótopos, así como de las masas isotópicas de cada uno de ellos.

Formación de iones. Ejemplos.

6.2.5. Insuficiencia del modelo de Rutherford.

- El modelo de átomo de Rutherford estaba en contradicción con las leyes electromagnéticas clásicas desarrolladas por Maxwell, ya que, según éstas el electrón al girar, tenía que emitir energía radiante con lo que iría perdiendo energía y al final caería sobre el núcleo; por lo tanto era un modelo de átomo inestable.

- No explicaba los espectros de rayos X y los espectros atómicos, que mostraban claramente el carácter cuantizante de la energía.

- El efecto fotoeléctrico confirmó la hipótesis de Planck postulada en el estudio del calor específico de los sólidos y de la radiación del cuerpo negro. El modelo de Rutherford no la contemplaba.

- No se conocían los neutrones, por lo que los cálculos basados en el modelo de Rutherford son necesariamente incorrectos.

6.3. Espectros.

Espectro es el análisis de las longitudes de onda de una radiación electromagnética mediante el espectroscopio.

El espectroscopio consta de una fuente luminosa, prisma separador de la radiación y cámara espectroscópica. (Fig 6.10)

6.3.1. Espectro electromagnético de la luz.

Cuando un haz de luz blanca pasa a través de un prisma Fig(6.11), se dispersa dando lugar a un conjunto de colores: rojo, naranja, amarillo, verde, azul y violeta y toda la gama de colores intermedios, formando lo que se denomina el espectro visible. Cada uno de estos colores corresponde a una radiación electromagnética de longitud de onda λ y frecuencia características ν . La relación entre λ y ν viene dada por:

$$c = \lambda \nu$$

donde $c = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$ es la velocidad de propagación de la radiación electromagnética en el vacío.

En realidad el espectro visible constituye una porción muy reducida del espectro electromagnético.

Espectro electromagnético de la luz. Fig (6.12)

6.3.2. Espectros continuos y discontinuos.

Si un espectro contiene todas las longitudes de onda en un amplio intervalo de ellas, como el espectro electromagnético, se dice que es continuo. Cuando se excita un gas a baja presión, éste emite únicamente radiación de ciertas frecuencias, dando lugar a un espectro de emisión discontinuo, el cual es característico del gas emisor. Este hecho hace que este espectro sea un método muy utilizado para la identificación de las sustancias.

Espectros de emisión y espectros de absorción. Distinguir.

6.3.3. Espectros de rayos X.

Cuando en un tubo de rayos catódicos se emplea como anticátodo (ánodo) un metal duro aparece una radiación (Fig 6.13), en principio de origen misterioso, que se le llamó rayos X.

Características de estos rayos:

- No son materiales.
- Elevada energía.
- Ionizan los gases.
- Impresionan placas fotográficas estando ocultas y atraviesan sustancias opacas no muy densas. (aplicación médica).

Cuando se analizó dicha radiación se pudo observar dos tipos de espectros:

a) Un espectro continuo

El origen de este espectro es debido a la transformación de la energía cinética de los rayos catódicos en energía electromagnética, que tiene lugar en el choque en el anticátodo. Como la energía cinética de los rayos catódicos puede tomar cualquier valor (dependerá de la diferencia de potencial) la radiación emitida contiene todas las frecuencias comprendidas entre cero y un valor máximo, espectro continuo.

b) Un espectro discontinuo formado por unas rayas nítidas superpuesto con el anterior. Este espectro es característico del elemento químico que forma el anticátodo.

En 1914, Moseley utilizó diversos elementos como anticátodo y encontró una relación entre la frecuencia de la radiación y el número atómico del elemento.

Esta ecuación de Moseley jugó un papel importante en la clasificación periódica de los elementos.

6.4. El espectro del átomo de hidrógeno.

A finales del siglo XIX se observó que las frecuencias del espectro discontinuo de un elemento en estado gaseoso (fig 6.14) se podían agrupar en conjuntos denominados **series espectrales** y que, en algunos casos, las frecuencias dentro de una determinada serie podían calcularse a partir de una fórmula empírica sencilla.

La primera de estas series la encontró Balmer en 1885, al estudiar el espectro visible del átomo de hidrógeno Fig (6.15). A medida que aumenta la frecuencia, las líneas espectrales se aproximan unas a otras cada vez más hasta alcanzar el límite de la serie.

La fórmula empírica hallada por Balmer para esta serie es:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right]$$

Donde $n = 3, 4, \dots$

En esta expresión aparece la magnitud $\bar{\nu}$, que se denomina número de ondas $\bar{\nu} = 1/\lambda$, e indica el número de longitudes de onda que hay por unidad de longitud.

La constante R se denomina constante de Rydberg y su valor es $1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

Explicar con un gráfico ilustrativo la diferencia entre $\bar{\nu}$ y λ . Dibujar una onda transversal cuya λ sea de 25 cm y completar cuatro ondas hasta la distancia de 1 m; entonces $\bar{\nu}$ el número de ondas por unidad de longitud será 4 ondas/m, es decir, 4 m^{-1} , $1/0,25 \text{ m}$.

Además de la serie de Balmer existen otras series que quedan fuera de la zona visible del espectro.

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

En dichas series, los números de onda de las líneas espectrales vienen dadas por la ecuación:

Para $n_1 = 1$ y $n_2 = 2, 3, 4, \dots$, los números de onda corresponden a la serie Lyman en el ultravioleta lejano.

Para $n_1 = 2$ y $n_2 = 3, 4, 5, \dots$, los números de onda corresponden a la serie Balmer en el visible.

Para $n_1 = 3$ y $n_2 = 4, 5, 6, \dots$, los números de onda corresponden a la serie Paschen en el infrarrojo muy cercano.

Para $n_1 = 4$ y $n_2 = 5, 6, 7, \dots$, los números de onda corresponden a la serie Brackett en el infrarrojo cercano.

Para $n_1 = 5$ y $n_2 = 6, 7, 8, \dots$, los números de onda corresponden a la serie Pfund en el infrarrojo cercano.

Las conclusiones a las que podríamos llegar después de los datos experimentales obtenidos en el estudio de los espectros atómicos serían:

- No se emite cualquier radiación ni toda la radiación.
- Cada elemento tiene un espectro de rayos específico (su "huella dactilar") que sirve para

identificarlo.

- **La radiación procede del estado excitado del átomo, por lo que es una manifestación del elemento en ese estado.**

- **Cualquier teoría que quiera explicar la estructura interna del átomo debe explicar los espectros atómicos.**

6.4.1. El efecto fotoeléctrico. Naturaleza corpuscular de la luz.

En 1887, Hertz observó que la intensidad de la descarga eléctrica entre dos electrodos metálicos aumentaba al iluminarlos con luz ultravioleta. Este hecho se explicó suponiendo que la luz al incidir sobre la superficie metálica arrancaba electrones. El fenómeno por el cual los electrones son arrancados de un metal por efecto de la luz, se denominó **efecto fotoeléctrico**. Los electrones emitidos recibieron el nombre de fotoelectrones.

Aplicación de este efecto a células fotoeléctricas, descripción y utilidades (Fig 6.16)

Partiendo de la teoría de Maxwell que concibe la luz como una onda electromagnética, que como tal onda, distribuirá uniformemente su energía, considerar a título de hipótesis la influencia de la frecuencia y la intensidad luminosa sobre la emisión de electrones (la cantidad de electrones emitidos por segundo, su energía cinética, el tiempo que tardarán en ser emitidos...). Ver también el efecto de cambiar de metal.

Las predicciones de la teoría de Maxwell, la física clásica serían:

a) La energía cinética de los electrones liberados dependerá de la intensidad de la onda y de la frecuencia.

b) Existirá un tiempo de retardo entre el choque de la luz sobre la superficie y la emisión de los electrones porque como toda la energía de la luz está distribuida uniformemente en el frente de onda, es necesario un intervalo de tiempo- menor cuanto mas intensa sea la onda- durante el cual el electrón está absorbiendo energía de la luz hasta que acumule la suficiente para escapar.

c) Para un metal dado, el efecto fotoeléctrico debe ocurrir para cualquier frecuencia de la luz, con la única condición de que la luz sea lo bastante intensa para proporcionar la energía necesaria para expulsar los electrones.

El estudio experimental del efecto fotoeléctrico puso de manifiesto los siguientes hechos:

1 - Para un metal dado, el efecto fotoeléctrico sólo se presenta por encima de una cierta frecuencia umbral ν_0 , sea cual sea la intensidad luminosa.

2 - Si la frecuencia ν se mantiene constante por encima de un valor mínimo ν_0 , el número de electrones crece con la intensidad luminosa, pero no ocurre así con la energía cinética de dichos electrones que se mantiene constante.

3 - La energía cinética de los electrones crece linealmente con la frecuencia ν a partir de un valor umbral ν_0 , característico de cada metal de acuerdo con la figura (6.17).

4 - La emisión de electrones superada la frecuencia umbral es prácticamente instantánea.

Figura del resultado de los datos experimentales

Estos hechos experimentales estaban en contradicción con lo que predice la Física clásica según la cual la energía cinética de los electrones liberados dependería de la intensidad de la onda y debiera existir un tiempo de retardo entre el choque de la luz sobre la superficie y la emisión de electrones, porque como la energía de la luz está distribuida uniformemente en el frente de onda sería necesario una acumulación de energía en el electrón para que pudiera liberarse.

En 1905, Einstein dio una explicación satisfactoria del efecto fotoeléctrico al aplicar las ideas de Planck sobre la discontinuidad de la energía a la luz misma. Consideró a la luz como un corriente de corpúsculos, que denominó **fotones**, y asignó a cada uno de ellos una energía:

$$E = h \nu$$

Y supuso que la energía de cada fotón era capturada por un electrón. Una parte de esta W , denominada energía de extracción, se empleaba en arrancar el electrón del metal y el resto le comunicaba la energía cinética observada.

$$h \nu = W + \frac{1}{2} m v_{\max}^2$$

De acuerdo con el principio de conservación de la energía:

La energía de extracción W es la energía necesaria para extraer el electrón sin comunicarle energía cinética. Si hacemos $\frac{1}{2} m v_{\max}^2 = 0$ en la ecuación anterior obtenemos:

$$h \nu_0 = W$$

Donde ν_0 es la frecuencia umbral, a partir de la cual los electrones adquieren una determinada velocidad. Así pues, la ecuación puede escribirse:

$$E_c = \frac{1}{2} m v_{\max}^2 = h \nu - h \nu_0$$

La cual concuerda con la gráfica (6.17), obtenida experimentalmente.

Es interesante remarcar que, si bien la teoría del efecto fotoeléctrico fue un gran apoyo a la teoría de Planck y extendió la hipótesis de la discontinuidad de la energía a la misma radiación, en cambio, volvió a resucitar la vieja controversia acerca de la naturaleza de la luz: ¿ondulatoria o corpuscular? El dilema se resolvió admitiendo que la naturaleza de la luz es dual, es decir, algunos fenómenos, tales como las interferencias y la difracción deben explicarse con la teoría ondulatoria, en cambio, otros, como por ejemplo el efecto fotoeléctrico, deben explicarse con la teoría corpuscular.

6.5. Modelo atómico de Bohr.

En 1913 Niels Bohr dio una explicación satisfactoria del espectro del átomo de hidrógeno,

constituido por un protón y un electrón. Para ello hizo las siguientes hipótesis:

1 - El electrón se mueve en órbitas circulares estacionaras alrededor del núcleo.

2 - Las únicas órbitas permitidas, estacionarias, son aquellas en las que el momento angular, L , del electrón es un múltiplo entero de $h/2\pi$.

$$L = n h/2\pi$$

3 - Mientras el electrón se mueve en una órbita permitida, estacionara, no emite energía radiante. Cuando el electrón pasa de una órbita de energía E_2 a otra de energía E_1 , siendo $E_1 < E_2$, emite radiación

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

cuya frecuencia viene dada por:

Veamos como a partir de estas hipótesis Bohr encontró una expresión para las frecuencias de la radiación emitida por el átomo de hidrógeno, que coincidía con las fórmulas empíricas mencionadas anteriormente.

La fuerza centrípeta que mantiene unido al electrón alrededor del núcleo es debida a la atracción

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

electrostática entre ambos, por lo tanto:

(Ecuación 6.5)

Donde m es la masa del electrón, e su carga eléctrica, v su velocidad alrededor del núcleo y r es el radio de la órbita.

La segunda hipótesis de Bohr implica:

$$L = m v r = n h/2\pi$$

Donde $n = 1,2,3,\dots$ número entero.

$$r_n = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2 ; r_n = r_1 n^2$$

De las dos ecuaciones anteriores se deduce que el valor de r viene dado por la expresión: siendo r_1 el valor del radio de la primera órbita, cuando $n = 1$. Por tanto los radios de las distintas órbitas son múltiplos de la primera y depende de n^2 .

En la fig 6.18 se han representado algunas órbitas posibles.

El paso siguiente consiste en calcular el valor de la energía correspondiente a cada órbita permitida. La energía total del electrón viene dada por la suma de sus energías cinética y potencial:

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 r}$$

El signo menos es debido a que se toma el cero de energía potencial cuando $r \rightarrow \infty$. Teniendo en

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) = \frac{1}{2} m v^2$$

cuenta la ecuación (6.5)

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

De donde:

$$E_n = -\frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} ; E_n = -\frac{E_1}{n^2}$$

Sustituyendo r por su valor (ecuación (6.5)), se obtiene:
(Ecuación 6.6)

Esta expresión demuestra que los valores de la energía total del electrón dependen del número entero n . Dicho número n recibe el nombre de **número cuántico principal**.

E_1 es la energía de la primera órbita, cuando $n=1$. Estudiar la variación de la energía de las distintas órbitas y comprobar que cuando $n \rightarrow \infty$ el valor de la energía tiende a cero es decir el electrón no estaría entonces bajo el influjo del núcleo, se habría ionizado.

A los valores de la energía dados por la ecuación anterior se les denomina niveles de energía del átomo de hidrógeno y están representados en la figura (6.19). El nivel más bajo, E_1 , se llama estado fundamental y los demás E_2, E_3, \dots **estados excitados**. Puede observarse que, cuanto mayor es el valor de n , más pequeño es el espaciado energético entre niveles, lo que da lugar a una distribución casi continua de la energía.

Teniendo en cuenta la tercera hipótesis de Bohr y la ecuación (6.6) la frecuencia de la radiación emitida cuando el electrón pasa de un estado de energía E_2 a otro de energía E_1 , siendo $E_1 < E_2$, viene dado

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

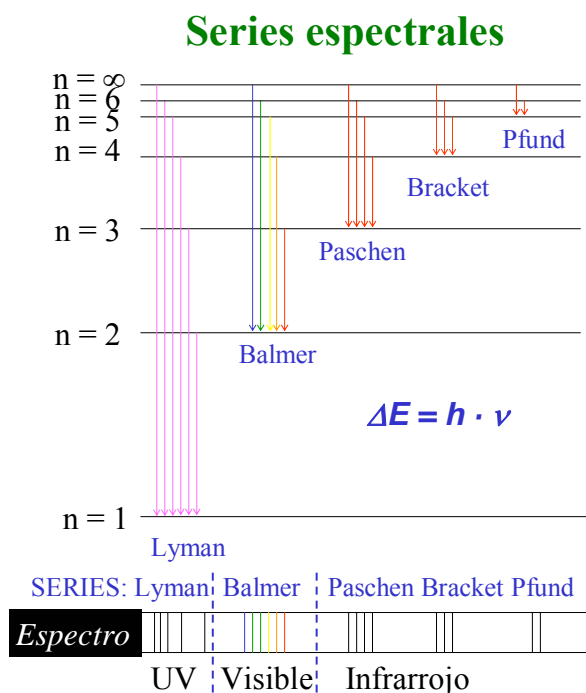
por la expresión:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

Si se utiliza el número de ondas tenemos:

Esta expresión es análoga a las fórmulas empíricas dadas anteriormente, y al sustituir en la ecuación anterior los valores numéricos de las constantes que en ella aparecen obtenemos un valor que coincide con el valor de la constante de Rydberg calculado experimentalmente por los espectroscopistas, lo cual constituye un buen apoyo a la hipótesis de Bohr.

Explicación del espectro del átomo de hidrógeno y del potencial de ionización.



La teoría de Bohr puede ampliarse a sistemas que tienen un solo electrón. El He^+ , helio ionizado, y el Li^{++} , litio doblemente ionizado, son ejemplos de sistemas que se comportan de forma análoga al átomo de hidrógeno.

DATO: Valores de la constante de Rydberg R

$$R = 109.678 \text{ cm}^{-1}$$

$$R = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$R = 1,09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$R = 3,3 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

Nota:

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = hc\bar{\nu}$$

De acuerdo con la ecuación de Plank:

el valor de la energía se puede expresar en J, Hz, cm^{-1} o m^{-1} ya que hay una proporcionalidad directa entre ellos.

6.5.1. Dificultades del modelo de Bohr: nuevos números cuánticos.

A pesar del éxito inicial del modelo de Bohr pronto se vio que éste no podía explicar los espectros de elementos con más de un electrón, debido a que las líneas espectrales aparecían a mayores valores que los experimentales, y además si se observaba los espectros con espectroscopios más potentes aparecían más frecuencias de las previstas (dobletes, tripletes). Ello indicaba que debía haber más niveles energéticos muy próximos.

6.5.2. Orbitas elípticas: número cuántico de momento angular.

Sommerfeld amplió la teoría de Bohr mediante la consideración de que la órbita del electrón era elíptica.

Como resultado de esta ampliación los niveles de energía definidos por el número cuántico n , se desdoblán en subniveles, los cuales se caracterizan por un nuevo número cuántico, l , que recibe el nombre de **número cuántico de momento angular**. Para un valor dado de n los valores que puede tomar l son: 0, 1, 2,.... ($n-1$).

En el modelo de Sommerfeld el valor del momento angular del electrón viene dado por la

$$L = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$$

expresión:

El número cuántico l da idea de la excentricidad de la órbita elíptica. Fig (6.20)

6.5.3. Efecto Zeeman. Número cuántico magnético.

Cuando se obtiene el espectro de un átomo bajo la influencia de un campo magnético externo B , el número de rayas espectrales aumenta. Este efecto se conoce con el nombre de **efecto Zeeman**. Este puede explicarse si se supone que el plano de la órbita del electrón únicamente puede tener ciertas orientaciones respecto a la dirección del campo magnético B . Las orientaciones permitidas son aquellas en las que la componente del momento angular en la dirección del campo magnético L_z , toma algunos valores dados por la expresión:

$$L_z = m_l h/2\pi$$

Donde m se denomina **número cuántico magnético** y, para un valor dado del número cuántico l , puede tomar los valores:

$$-l, -(l-1), \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, (l-1), l$$

El número de orientaciones permitidas para un valor determinado de l es $(2l+1)$. En la fig (6.21) se han representado las posibles orientaciones para $l=2$.

6.5.4. Spin del electrón. Número cuántico de Spin.

Al utilizar un espectroscopio de elevada resolución y sometido el átomo bajo la influencia de un campo magnético externo, se observa que las rayas espectrales son dobles. Esta duplicidad se puede explicar si se supone que el electrón, además de girar alrededor del núcleo, gira sobre sí mismo. En su movimiento orbital debido a que el electrón es una partícula con carga eléctrica, crea un campo magnético. Pero al girar sobre sí mismo también se comporta como un pequeño imán cuyo campo magnético, tal como se ve en la fig (6.22), puede tener sentido igual u opuesto al anterior.

De esta forma en lugar de un nivel de energía hay dos muy próximos. Consecuencia de esto es la introducción de un cuarto **número cuántico de spin** s , cuyos valores pueden ser $+1/2$ y $-1/2$ en unidades $h/2\pi$.

La Figura 6.23 muestra un ejemplo de los desdoblamientos de las líneas espectrales debido a estos efectos.

2.6. Física Cuántica.

A pesar de las sucesivas correcciones del modelo atómico de Bohr, éste se manifestaba insuficiente para dar explicación de todos los fenómenos y experiencias atómicas.

La necesidad de introducir, de forma un tanto arbitraria, nuevos números cuánticos para poder explicar los nuevos hechos experimentales mediante la teoría original de Bohr, es consecuencia del hecho de que ésta es una aplicación de las ideas cuánticas a la mecánica clásica. Es decir, los principios y leyes de la escala microscópica se aplican a escala microscópica con algunas correcciones y lo que hemos de cambiar es el planteamiento del problema, un nuevo "punto de vista" bajo el cual observamos el fenómeno.

Crisis de la física clásica

Es necesario por tanto, una teoría mejor.

En este apartado estudiaremos el inicio de una teoría mucho más general para la comprensión de la estructura atómica. Esta teoría nace en 1924 y se denomina mecánica cuántica o mecánica ondulatoria, cuyas bases son:

- **Ecuación de Planck** $E = h \nu$

- **Hipótesis de De Broglie** $\lambda = h / p$

- **Principio de incertidumbre de Heisenberg** $\Delta x \Delta p \geq h/2\pi$

6.6.1. Hipótesis de De Broglie .

Aunque los trabajos de Planck, Einstein, Bohr y otros habían confirmado de manera rotunda la naturaleza cuántica, discontinua de la luz y de los sistemas atómicos, dichos trabajos sólo pudieron ser considerados como los orígenes de la nueva concepción de la materia que habría de sustituir a las teorías clásicas

En efecto, podemos considerar que el establecimiento de la física cuántica se inicia en 1924 con los trabajos de Luis De Broglie, en los que introduce una nueva y atrevida hipótesis consistente en atribuir a los electrones y, en general, a cualquier objeto, un comportamiento ondulatorio, además de su evidente comportamiento corpuscular.

) Cuáles son los argumentos en favor de la hipótesis de De Broglie?

Si admitimos una cierta simetría en la naturaleza y se ha demostrado que la luz poseía conjuntamente con sus evidentes propiedades, ondulatorias propiedades típicamente corpusculares; y si existen objetos materiales, los fotones, con esta doble característica ondulatoria-corpuscular, ¿por qué no concebir la posibilidad de que este mismo se de en cualquier objeto material?

De Broglie no se limitó a enunciar simplemente una hipótesis cualitativa sino que trató de relacionar las magnitudes características del movimiento ondulatorio, la frecuencia o la longitud de onda, con las del corpuscular, cantidad de movimiento. Podemos establecer la relación para un fotón, a partir de la energía dada por la ecuación de Planck $E = h \nu$, según la relatividad $E = m c^2$, generalizando después el resultado para todos los objetos materiales.

$$E = h \nu$$

$$\lambda = h / p$$

$$E = m c^2$$

Aplicación:

Determinar la longitud de onda de los siguientes cuerpos comparándola con la de los rayos X (del orden de 10^{-10} m):

- Una pelota de tenis de 10 g lanzada a 1 m/s
- Un electrón que sometido a un campo eléctrico ha adquirido la velocidad de $6 \cdot 10^5$ m/s ($m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ Kg)

La longitud de onda predicha por la hipótesis de De Broglie para el electrón indicado resulta del orden de 10^{-9} m, comparable a la de los rayos X, pudiéndose, pues, pensar en la posibilidad de detectar su existencia. Por el contrario, la longitud de onda de los objetos macroscópicos es tan pequeña (10^{-32} m) que es imposible detectarla, lo que justifica el hecho de que dichos objetos no muestren comportamiento ondulatorio.

En 1.927 Davisson y Germer verificaron la hipótesis de De Broglie al estudiar las figuras de difracción obtenidas cuando se hacía pasar un haz de electrones a través de una delgada lámina metálica. Los diagramas debidos a la difracción de electrones son comparables a los obtenidos en la difracción de rayos X. Aplicación de la difracción de electrones al microscopio electrónico.

) Cómo se puede interpretar el comportamiento ondulatorio de objetos como los electrones?) En qué pueden consistir dichas ondas?

Interpretaciones:

- "onda asociada", guía o piloto de la partícula, con una relación entre ellas similar a la existente entre las planchas del "surf" y las olas que la arrastran. No explica la indisoluble unidad entre la onda y la partícula.

- Reducir el aspecto corpuscular a un efecto puramente ondulatorio, considerando al electrón como un "paquete de ondas". Sin embargo, un paquete de ondas por muy compacto que sea, se difunde rápidamente por el espacio desapareciendo cualquier posible comportamiento corpuscular.

- Suponer que los electrones son simples corpúsculos y que el comportamiento ondulatorio aparece debido al gran número de ellos. Sin embargo la difracción observada en los electrones no debería presentarse al trabajar con un número muy reducido de ellos y no es así.

Es decir, todos los intentos de reducir la complejidad onda/corpúsculo a un sólo efecto fracasaron y necesitamos una nueva interpretación: "los electrones o los fotones, por ejemplo, no son ni pequeñas bolas

(partículas) ni pequeñas olas (ondas), no es ninguna de las dos, y deben ser absolutamente concebidos como objetos de tipo nuevo, los **cuantones**" (Levy-Leblond 1.984).

Por tanto, un cuantón no es ni una partícula clásica ni una onda clásica, que sólo son modelos aproximados que describen el comportamiento de un gran número de cuantones, aunque en circunstancias extremas se asemejen a una partícula y en otras a una onda.

Con la hipótesis de De Broglie se deduce fácilmente el segundo postulado de Bohr al considerar que las órbitas estables estacionarias son aquellas en que la longitud de la órbita es un múltiplo entero de la longitud de onda, de esta manera no se "perdería" en el espacio al no tener interferencias con las ondas de otros electrones por lo que no emitiría energía, es decir:

6.6.2. Principio de incertidumbre de Heisemberg.

La mecánica clásica permite, si conocemos la ecuación del movimiento $\vec{r} = \vec{r}(t)$ y el estado de un sistema en un instante dado, condiciones iniciales, determinar el estado en cualquier otro instante. En ello reside la base del **determinismo** clásico, doctrina que afirma que si se conoce el estado presente de un sistema y su ley de fuerzas es posible predecir con exactitud el resultado de cualquier medida sobre el mismo.

El carácter ondulatorio del electrón viene asociado cualitativamente a la idea de una cierta deslocalización que impide situar en un punto determinado al electrón e introduce, por tanto, una cierta indeterminación en el movimiento que puede seguir el electrón, por lo cual, éste carecerá de una trayectoria absolutamente determinada.

Cuando realizamos alguna medida, siempre existe alguna incertidumbre o error. Ejemplos. No obstante, esperamos que utilizando instrumentos mas precisos podamos hacer infinitamente pequeña la incertidumbre de la medida.

Ahora bien, según la mecánica cuántica existe realmente un límite a la precisión de ciertas medidas. Este límite no constituye una restricción a lo bien que puedan construirse los instrumentos, sino que es inherente a la naturaleza. Es el resultado de dos factores: la dualidad corpúsculo-onda y la inevitable interacción entre la cosa observada y el instrumento de observación.

Ejemplos.

Veamos ahora dónde entra en juego la dualidad corpúsculo-onda. Imaginemos un experimento pensado en el cual intentemos medir con fotones la posición de un electrón (u otro objeto pequeño), aunque los razonamientos serían los mismos si utilizáramos un microscopio electrónico. De acuerdo con la teoría ondulatoria los objetos se pueden ver con una precisión no mayor que la longitud de onda de la radiación utilizada. Por tanto, si queremos una medida precisa de la posición deberemos utilizar una longitud de onda corta. Pero ésta correspondería a una frecuencia elevada y a una energía elevada ($E = h\nu$) y cuanto más energía tengan los fotones mayor cantidad de movimiento podrán comunicar a nuestro electrón cuando choquen con él. Si se utilizaran fotones de mayor longitud de onda y por tanto menor energía, el movimiento del electrón no se vería tan afectado, si bien su posición se conocería con menor precisión. Vemos, pues, que el acto de observar produce una incertidumbre importante tanto en la posición como en la cantidad de movimiento del electrón. Esta es la esencia del **principio de incertidumbre** enunciado por Heisenberg en 1927.

Cuantitativamente, podemos realizar un cálculo aproximado de la magnitud de este efecto. Si utilizamos luz de longitud de onda λ , la posición se medirá con una precisión, como máximo, igual a λ . Es decir, la incertidumbre Δx de la medida de la posición es

$$\Delta x \approx \lambda$$

Supongamos que el objeto se puede detectar con un solo fotón (éste es el caso más favorable; normalmente serán necesarios muchos fotones). El fotón tiene una cantidad de movimiento $p = mv = h/\lambda$; y cuando choque con nuestro objeto le cederá parte de su cantidad de movimiento o toda ella. Por tanto, la cantidad de movimiento final de nuestro objeto la conoceremos con una incertidumbre

$$\Delta p \approx h/\lambda$$

ya que no podemos decir de antemano cuánta se cederá. El producto de dichas incertidumbres es

$$(\Delta x)(\Delta p) \approx h$$

Desde luego, las incertidumbres podrían ser peores que ésta, según cuál sea el aparato. En el cálculo más preciso efectuado por **Heisenberg** encontró que, como máximo,

$$\Delta x \Delta p \geq h/4\pi$$

En el razonamiento anterior puede no quedar claro que el problema no es determinar con precisión la posición del electrón, sino que la imposibilidad de determinar **simultáneamente** con precisión absoluta la posición x y la cantidad de movimiento p del electrón, y los límites de precisión vienen dados por las relaciones de indeterminación de Heisenberg

Cabe suponer que dicha imprecisión reaparecerá en la determinación de otras magnitudes cuyo producto tenga las mismas dimensiones que h , como por ejemplo, la energía y el tiempo. Efectivamente Heisenberg estableció también que:

$$\Delta E \Delta t \geq h/4\pi$$

Implicaciones de las relaciones de indeterminación:

- **La imposibilidad del conocimiento simultáneo de x y p .**
- **Consecuentemente, el concepto de trayectoria deja de tener sentido.**

- El establecimiento de los límites de validez de la Física Clásica (aspecto que desarrollamos ahora).

Aplicación:

Determinar la imprecisión en la posición de:

a) un grano de polvo (10^{-8} m de diámetro) que pese 10^{-8} Kg y avance a una velocidad de $1,00 \sqrt{0,01}$ m/s.

b) un electrón (tamaño convencional 10^{-18} m) que avance con la misma velocidad ($m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ Kg)

¿Qué importancia tendrá dicha imprecisión respecto al tamaño de ambos?

La indeterminación para los objetos macroscópicos ($\Delta x = 10^{-25}$ m) es absolutamente despreciable frente al tamaño del objeto, al contrario de lo que sucede en los microscópicos ($\Delta x = 10^{-1}$ m) que es billones de veces superior al atribuido experimentalmente. Por ello, **el principio de indeterminación no juega ningún papel en las medidas de posición y velocidad a menos que se trate de objetos microscópicos**. De ahí que, las relaciones de indeterminación establecen los límites más allá de los cuales no se pueden aplicar los conceptos de la Física clásica.

Comentar las siguientes proposiciones señalando hasta que punto pueden considerarse correctas o incorrectas:

1 - La indeterminación puede considerarse fruto de la imprecisión de los instrumentos y técnicas de medida utilizadas y sólo es subsanable en la medida en que dichos instrumentos y técnicas se perfeccionan.

2 - La indeterminación es consecuencia del mismo proceso de medida que, como toda interacción, perturba aquello que se observa (así para ver a un electrón hay que iluminarlo y al hacerlo se le comunica energía alterando su estado y modificando su posición). Según ello la indeterminación aparece indisociablemente unida a la observación.

Otros ejemplos: medida de la temperatura de pequeñas cantidades de líquido; comprobar si en una habitación oscura existe una bola de billar y su velocidad disponiendo solamente de bolas de billar para averiguarlo...

3 - La indeterminación hace referencia a la propia naturaleza de la materia, que no se presenta en forma de objetos con contornos absolutamente definidos, que siguen trayectorias perfectamente determinadas.

Visión mecano-cuántica de los átomos.

La hipótesis de De Broglie al establecer una relación entre el aspecto corpuscular y el ondulatorio para todos los objetos físicos, venía al mismo tiempo a invalidar la leyes clásicas de descripción del movimiento y exigía nuevos conceptos y nuevos principios, es decir, una nueva Mecánica, que incluyera la clásica como caso particular.

Según la mecánica cuántica, los electrones no existen en las órbitas circulares perfectamente definidas de la teoría de Bohr, sino que están distribuidos por el espacio, en forma de "nube" de carga negativa. Se puede calcular la forma y tamaño de la nube de electrones para un estado dado del átomo. La

nube electrónica correspondiente al estado fundamental del hidrógeno tiene simetría esférica, ver figuras. Queda claro que la orbita es "difusa". La nube electrónica indica burdamente el "tamaño" del átomo; pero al igual que una nube no tiene una frontera marcada, los átomos no tienen un contorno preciso o un tamaño bien definido.

6.6.3. La función de ondas: ecuación de Schrödinger.

¿Cómo podría describirse en Física clásica el estado de movimiento de una partícula? ¿Y el de una onda? Por el contrario, ¿cómo podría describirse en Física cuántica el estado de, por ejemplo, un electrón?

Dado que los electrones (o los cuantones), no son ni simplemente ondas ni simplemente partículas es necesaria una nueva descripción del estado de un sistema cuántico. Para ello Schrödinger introdujo una función ψ que se denominó función de ondas o función de estado.

¿Cuál es su significado? En sí misma, no tiene significado físico alguno, solamente tiene significado matemático de descripción del estado de un sistema; en cambio sí lo tiene su cuadro ψ^2 . De igual manera que la cantidad variable que caracteriza a las ondas clásicas es su amplitud, cuyo cuadrado es proporcional a la intensidad, el cuadrado de la función de ondas está relacionado con la intensidad de las ondas de De Broglie; y ya que éstas describen el movimiento de una partícula, se puede decir que las regiones del espacio en las cuales es más probable encontrar a dicha partícula son aquellas en las que el valor de ψ^2 es más grande.

ψ^2 significa pues la probabilidad por unidad de volumen de encontrar la partícula en una cierta región del espacio.

Por tanto sustituimos el concepto de trayectoria definida por una partícula por el de probabilidad de localizarla en una determinada región del espacio.

En 1926 Schrödinger halló la ecuación que relaciona ψ con las características de la partícula en movimiento, la ecuación de estado o ecuación de ondas:

$$H \psi = E \psi$$

Y así como la ecuación de Newton, $F = m a$, nos da en mecánica clásica la evolución de un sistema, en cuántica es la ecuación de Schrödinger.

Al resolverse esta ecuación compleja, hay diversas funciones posibles (correspondientes a valores propios de la energía) que son soluciones de esta ecuación. Y estas soluciones deben cumplir en general que:

- ✓ Para valores de la energía $E < 0$, es decir, para estados ligados de la partícula, la ecuación de Schrödinger sólo presenta soluciones distintas de cero para la función de ondas ψ para determinados valores de la energía, haciéndose nula en los demás casos. Estos valores de la energía están cuantificados por una serie de números (n, l, m) que coinciden exactamente con los valores introducidos en la explicación de los espectros y que caracterizan, por tanto el estado de un electrón.

- ✓ Por el contrario, para valores de energía $E > 0$, que corresponden a estados no ligados o libres, la ecuación de Schrödinger proporciona siempre una solución distinta de cero para la función de ondas ψ lo que significa que una partícula libre puede tomar cualquier valor de la energía.

La interpretación física del hecho es que, en los estados ligados, la función de ondas sólo existe para ciertos valores de la energía, es decir, aparece la discontinuidad en los valores posibles de la energía, lo cual ya había sido obtenido por Bohr.

Sin embargo, estos niveles de energía surgen como consecuencia del carácter ondulatorio del electrón y no ligados a la supuesta existencia de órbitas electrónicas que carecen de sentido.

En efecto, en vez de órbitas, la ecuación de ondas nos proporciona funciones de onda ψ , caracterizadas no por un sólo número cuántico, como la órbitas de Bohr, sino por tres números (n, l, m) que nos describen el estado de energía E , el momento angular l , y la tercera componente del momento angular m_l . Además el módulo al cuadrado de la función de ondas nos proporciona la probabilidad de encontrar al electrón en una determinada zona del espacio. Dichas funciones de estado son los que se denomina habitualmente **orbitales**.

El orbital ψ está determinado por números cuánticos $\psi (n,l,m)$ y caracterizan el estado del electrón y, además, permite calcular la probabilidad de encontrar el electrón ψ^2 a través de representaciones de superficies límites que encierran un 99 % de probabilidad de encontrar al electrón.

En la fig 6.24 se representan las superficies límites para distintos orbitales.

Las palabras "ocupar", "llenar", "colocar" referidas a los orbitales no se deben tomar literalmente. *“Los orbitales no son un juego de cajas colocados rígidamente en una escala de energía. Cuando decimos que el electrón está en un orbital o estado estamos diciendo simplemente que el electrón está comportándose de una cierta forma” (Mahan 1.977).*

6.7. Los números cuánticos.

Los números cuánticos en la teoría atómica de Bohr y en las sucesivas correcciones de la teoría eran números que "cuantificaban" a priori el estado energético del electrón y que permitían explicar las desdoblamientos de las líneas espectrales. Por el contrario, en la teoría de Schrödinger los números cuánticos son condiciones matemáticas que se exigen para resolver la ecuación de ondas, esto es, aparecen de forma natural en la resolución de la ecuación de ondas.

En la resolución de la ecuación de Schrödinger para el electrón del átomo de hidrógeno sólo aparecen tres números cuánticos y anteriormente se ha visto la necesidad de introducir un cuarto número cuántico denominado de espín. En el desarrollo de la mecánica ondulatoria éste surge al tener en cuenta los efectos relativistas.

En las figuras 6. a 6. se da un resumen de los valores permitidos a los cuatro números cuánticos, de las propiedades que determinan (su significado físico) y la notación utilizada.

- **n** es el **número cuántico principal**. Puede tener valores naturales $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Determina el

"tamaño" del orbital y su energía.

Lo introdujo Bohr en su segundo postulado para explicar el espectro atómico del hidrógeno.

- l se denomina **número cuántico secundario o acimutal**. Puede tener valores enteros para cada valor de n desde 0 hasta $n-1$.

Determina la "forma" general del orbital y en menor medida la energía. Sería el subnivel de energía dentro de un nivel.

La "forma" debe ser entendida como la simetría espacial de la superficie límite de encontrar el electrón en una determinada región del espacio.

Herencia, todavía de la antigua terminología de los espectroscopistas, es común designar los orbitales como:

$l = 0$	----->	orbital s (sharp)
$l = 1$	----->	orbital p (principal)
$l = 2$	----->	orbital d (diffuse)
$l = 3$	----->	orbital f (fundamental)

- m_l es el **número cuántico magnético**. Puede tomar valores enteros, para cada valor de n y de l , desde $-l$ hasta $+l$.

Determina la orientación espacial del orbital, la dirección de máxima densidad electrónica.

Se denomina magnético porque esta orientación espacial se acostumbra a definir en relación a un campo magnético externo. (efecto Zeeman normal).

Los orbitales con igual n y l y distinto m tienen la misma energía, son degenerados, pero cuando se aplica un campo magnético externo la interacción con éste hace que se modifiquen sus energías.

- m_s es el llamado **número cuántico de spin** (que en inglés significa giro).

Puede valer sólo $+1/2$ y $-1/2$ en unidades de $h/2\pi$.

Se dice a menudo que representa el sentido de giro del electrón sobre sí mismo. Aunque no tiene sentido que el electrón gire sobre sí mismo, se mantiene esta descripción porque, de ser cierta, proporcionaría los mismos resultados que los observados.

Se introdujo para explicar el efecto Zeeman anómalo.

6.8. Configuraciones electrónicas de los átomos polieletrónicos.

Niveles energéticos en átomos polieletrónicos.

Ver figuras.

6.8.1 Principio de máxima multiplicidad o de Hund.

6.8.2 Principio de exclusión de Pauli.

Vamos a considerar cómo se distribuyen los electrones en un átomo polieletrónico (configuración electrónica). Se basan en el principio de construcción o de constitución de Aufbau y en el orden creciente de los átomos según su número atómico:

"La determinación de la configuración de un átomo de número atómico Z se establece a

partir del átomo de número atómico $Z-1$ colocando el electrón adicional diferenciador en el siguiente orbital atómico disponible".

El orbital atómico disponible se basa en otros tres principios:

1 - Principio de Exclusión de Pauli. "Dos electrones de un átomo no pueden tener sus cuatro números cuánticos iguales" Por lo tanto en un orbital sólo caben dos electrones con sus espines apareados.

2 - Principio de mínima energía. El estado fundamental (más estable) de un electrón en un átomo es el de menor energía.

La energía de un orbital viene determinada por los tres números cuánticos que lo definen n , l y m , pero, en ausencia de un campo magnético externo, sólo depende de n y de l . La importancia de n es mayor que la de l si bien no se debe pensar que l no importa. Para saber cuál de los dos orbitales tiene menos energía, se suman los valores de n y l :

* Un orbital tiene menos energía cuanto más bajo sea el valor de $n+l$

* Si dos orbitales tienen el mismo valor de $n+l$, tiene menos energía aquel que tiene el valor de n más pequeño.

A veces, se recurre a diagramas mnemotécnicos que pueden ayudar a escribir los orbitales en el orden energético correcto. Figura 6.

3 - Principio de máxima multiplicidad o de Hund. Establece que cuando se "llenan" orbitales diferentes que poseen la misma energía (degenerados) como los orbitales p , d ó f , los electrones permanecen desapareados al máximo manteniendo sus espines paralelos.

Configuraciones electrónicas. Realizar. Ver figuras.

Explicación de por qué los niveles energéticos son distintos para cada átomo:

- Cada átomo tiene diferente carga nuclear.
- Cada átomo tiene diferente número de electrones.

Por lo tanto cada átomo tiene un espectro atómico de emisión característico, su "huella dactilar"

Algunos enlaces interesantes:

<http://eos.cnice.mecd.es/mem2002/quimica/>

www.puc.cl/sw_educ/qda1106/CAP2/

www.edu.aytolacoruna.es/aula/fisica/fisicaInteractiva/Ef_Fotoelectrico/TeoriaEF.htm

www.maloka.org/f2000/elements_as_atoms/

perso.wanadoo.es/cpalacio/NumerosCuanticos12.htm

<http://www.educaplus.org/sp2002/orbita.php>

<http://www1.ceit.es/Asignaturas/quimica/Curso0/MC+orbitales.htm>

<http://centros5.pntic.mec.es/ies.victoria.kent/Rincon-C/Simulaci/atomphoton/index.html>

http://www.cnet.clu.edu/quim/Q_3451/modulo1/modulo1e_files/teoria.html

<http://micro.magnet.fsu.edu/electromag/java/atomicorbitals/>