

# Modelos Atómicos

Los modelos atómicos son relevantes dentro del área de **espectroscopia**, en la cual se estudian las líneas espectrales de átomos. Las líneas espectrales no son más que radiación lumínica y surgen cuando estas sustancias químicas se encuentran en un estado excitado. La particularidad de las líneas o bandas es que son características de cada átomo, por lo que reconocer su espectro nos permite identificarlos en otros elementos o sustancias.

Sin embargo, el descubrimiento de líneas espectrales le significó un problema grande a la física clásica. Esta es capaz de describir espectros continuos - como los de difracción - pero no podía explicar porque surgían líneas y bandas tan marcadas como las que observaban a fines del siglo XIX. Particularmente este estudio se realizó con el elemento más sencillo de todos, el hidrógeno, y fue un tema de gran interés para los científicos de la época.

## Primeras observaciones

La primer contribución a una descripción fenomenológica se la debemos a Johann Balmer, quien en 1885 descubrió que la emisión del átomo de hidrógeno se podía describir por la siguiente fórmula (en el rango visible y cerca del ultravioleta):

$$\lambda_n = 346,6 \frac{n^2}{n^2 - 4} \text{ nm}, \quad (1)$$

donde  $n = 3, 4, 5, \dots$  y la variable es tal que predice la longitud de onda  $\lambda$  de las líneas espectrales del hidrógeno. En la Figura 1 se pueden ver estas mismas líneas y se marcan valores predichos por el modelo de Balmer

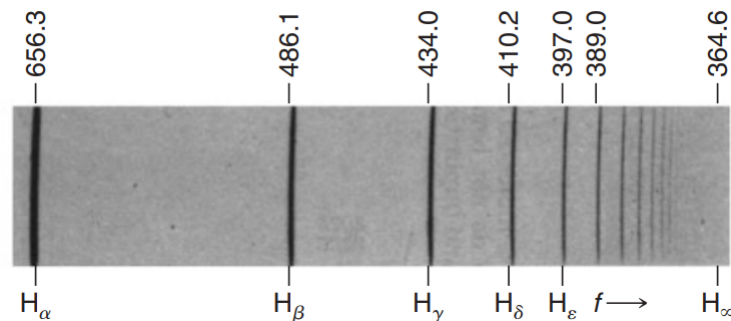


Figura 1: líneas espectrales del átomo de hidrógeno. Se marcan las longitudes de onda predichas por la Ec. 1. Imagen extraída y adaptada de *Modern Physics*, P. A. Tipler and R. A. Llewellyn.

Balmer tenía la intuición de que la fórmula que desarrolló era un caso particular de una descripción más abarcativa de átomos hidrogenoides (i.e. átomos excitados con un único electrón orbitando). Esta fórmula más general fue desarrollada por Rydberg y Ritz (sin conocer la Ec. 1) y la longitud de onda se obtiene mediante

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{con } n > m, \quad (2)$$

donde  $m$  y  $n$  son variables enteras y  $R$  es la denominada constante de Rydberg y es distinta para cada átomo (pero la misma para cada valor de  $m$  por átomo). Para el caso del hidrógeno se tiene  $R_H = 1,096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ . Este tipo de fórmulas fueron particularmente útiles para predecir líneas espectrales por fuera del rango visible. Volviendo a la Ec. 1, esta es equivalente a la Ec. 2 fijando

$m = 2$ . Esta es una de varias líneas espectrales que llevan los nombres de quienes las descubrieron previamente, como ocurre también con las líneas de Lyman ( $m = 1$ ) y de Paschen ( $m = 3$ ).

## Primeros modelos

### Modelo de Thomson

El primer modelo que intentó describir la composición de un átomo fue el modelo de Thomson. Su planteo consistió en varios modelos de electrones inmersos en un fluido cuya masa sería la mayor contribución a la masa del átomo y tuviera la suficiente carga positiva para contrarrestar la carga negativa de los electrones. Recordemos que los átomos no excitados son eléctricamente neutros. Con este planteo inicial Thomson buscaba configuraciones estables que a la vez tengan modos normales que se puedan corresponder con las líneas espectrales observadas. Sin embargo, este modelo no podía ser estable únicamente con fuerzas electrostáticas. Por lo tanto era necesario considerar cargas aceleradas y esto implicaría radiación constante (porque sabemos que una partícula cargada que acelera emite radiación) que no es observada. Más allá de los esfuerzos de Thomson este modelo no pudo describir los fenómenos observados.

### Modelo de Rutherford

El modelo de Thomson fue reemplazado por el modelo propuesto por Rutherford junto a sus alumnos Geiger y Marsden. Este modelo fue particularmente exitoso ya que los experimentos que lo pusieron a prueba lograron determinar la existencia de un núcleo atómico. Estos experimentos consistían en un haz de partículas  $\alpha$ <sup>1</sup> emitido a una fina lámina de oro. A través del ángulo de dispersión luego del choque de las partículas  $\alpha$  con las de oro se podía determinar el tamaño del núcleo de oro. Lo que fue sorprendente de este experimento es que se observaron ángulos que se correspondían con tamaños mucho más pequeños de lo que estimaba el modelo de Thomson, el cual planteaba átomos cuyo diámetro estuviera en el orden de los  $10^{-10}\text{m}$ . Con estos experimentos se determinó la existencia de un núcleo mucho más chico que el valor del modelo anterior, obteniendo que el diámetro del núcleo del oro debía ser de  $3 \times 10^{-10}\text{m}$ <sup>2</sup>.

### Modelo de Bohr

El modelo superador a los anteriores (y previo a la formulación de la cuántica) es el modelo de Bohr, en el cual junta las ideas de Planck, Einstein y Rutherford. Si bien el modelo de Rutherford era capaz de asignarle masa y carga al núcleo este no decía nada sobre la distribución de carga y de masa de los electrones. La hipótesis importante del modelo de Bohr es suponer que los electrones tienen una órbita fija alrededor del núcleo. La física clásica admite orbitas circulares o elípticas. Bohr asumió orbitas circulares por simplicidad<sup>3</sup>.

El modelo plantea el potencial de Coulomb

$$V = -\frac{kZe^2}{r}, \quad (3)$$

donde  $k$  es la constante de Coulomb,  $Z$  es el número atómico ( $Z = 1$  para el hidrógeno),  $e$  es la carga del electrón y  $r$  es la distancia del electrón al núcleo (este último se considera quieto en el caso más sencillo). Sin embargo, al tener una trayectoria circular el electrón presenta una aceleración y esto conllevaría a una radiación constante que le haría perder energía hasta colapsar con el núcleo. Bohr sabía que esto no ocurría así que planteo los siguientes postulados:

<sup>1</sup>Hoy en día sabemos que estas partículas  $\alpha$  son partículas de helio doblemente ionizadas, i.e. 2 protones y 2 neutrones.

<sup>2</sup>Quienes están interesados en ver más en detalle el experimento y los cálculos asociados pueden referirse al Capítulo 4 de *Modern Physics*, P. A. Tipler and R. A. Llewellyn.

<sup>3</sup>Uno podría asumir orbitas elípticas pero no llevan a ningún resultado superador a los resultados más importantes de este modelo.

1. Los electrones tienen orbitas circulares fijas en las cuales no emiten radiación. A estas orbitas les dio el nombre de **estados estacionarios**.
2. El átomo irradia cuando el electrón salta de una órbita a otra, i.e. cambia de un estado estacionario a otro, donde la frecuencia de emisión está relacionada con la teoría de Planck mediante

$$hf = E_i - E_f, \quad (4)$$

donde  $h = 6,62607015 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  es la constante de Planck,  $f$  la frecuencia de emisión y  $E_{i,f}$  las energías de los estados iniciales y finales, respectivamente.

3. En el límite de orbitas grandes los resultados del modelo deben corresponderse con los de la física clásica. A este postulado se lo conoce como el **principio de correspondencia**.

Uno de los resultados importantes de este modelo es la **cuantización del impulso angular**. Bohr encontró que el impulso angular del electrón solamente puede tomar valores según

$$L_n = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5)$$

siendo que ahora definimos  $\hbar = 1,055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  como la constante reducida de Planck y  $n$  solo puede tomar valores enteros. Con esta formulación uno encuentra que también se cuantizan los radios y las energías de cada orbita, obteniendo

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{mkZe^2} = \frac{n^2 a_0}{Z} \quad \text{y} \quad E_n = \frac{-mk^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}, \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

definiendo  $a_0 = 0,0529 \text{ nm}$  como el radio de Bohr y  $-E_0$  se define como la energía del estado fundamental. Luego, la diferencia de energías entre estados en conjunto con la Ec. 4 nos da la fórmula

$$hf = E_0 Z^2 \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{E_0 Z^2}{hc} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (7)$$

donde se utilizó la relación  $\lambda f = c$  con  $c$  la velocidad de la luz. Luego,  $E_0 Z^2 / hc$  es la predicción de este modelo sobre la constante de Rydberg. Para el caso del hidrógeno,  $-E_0 = 13,6 \text{ eV}$  y se corresponde con la energía necesaria para ionizar el hidrógeno, i.e. ‘arrancarle’ el electrón. Es importante notar que el valor de  $n$  da toda la información sobre el nivel al que se encuentra el electrón.

Ahora vamos a tratar el **problema 2 de la guía 6** de la materia. Este nos pide considerar que el átomo no está fijo, lo cual se corresponde a asumir que la masa del núcleo tiende a  $\infty$ .

Como ahora asumimos que el núcleo tiene una masa  $M$  apreciable nos conviene escribir la energía cinética de este:

$$T_M = \frac{Mv_M^2}{2} = \frac{p_M^2}{2M}, \quad (8)$$

definiendo  $p_M$  el momento del núcleo. Para poder aplicar esta corrección al modelo que describimos necesitamos considerar que el momento total del átomo es nulo, por lo que tenemos que el momento del núcleo y del electrón deben ser iguales. De esta manera, la energía cinética total es

$$T_{\text{tot}} = \frac{p_M^2}{2M} + \frac{p_m^2}{2m} = \frac{p_M^2}{2M} + \frac{p_M^2}{2m} = \frac{M+m}{2mM} p_M^2 = \frac{p_M^2}{2\mu}, \quad (9)$$

donde se define la masa reducida del sistema

$$\mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{m}{1+m/M}, \quad (10)$$

para la cual se ve que si  $M \rightarrow \infty$  se recupera tener únicamente la masa del electrón  $m$ .

Lo interesante de esta corrección es que se modifica la constante de Rydberg en el modelo, obteniendo la fórmula

$$R^* = R \left( \frac{1}{1 + m/M} \right). \quad (11)$$

Aquellas personas que estén interesadas en revisar las cuentas que no están con detalle en este apunte pueden revisar la bibliografía (léase usen *Modern Physics*, P. A. Tipler and R. A. Llewellyn.), así como apuntes de los docentes que dictan la materia.