

Zona Cortical del Átomo

Antes del surgimiento de la física cuántica, toda la física atómica se basaba en:

- Las leyes de Newton
- Las ecuaciones electromagnéticas de James Maxwell
- La termodinámica

Los átomos eran poco comprendidos y la luz se consideraba una onda continua.

Nacimiento de Física Cuántica

La radiación del cuerpo negro ideal (Planck, 1900)

La **radiación electromagnética** es energía que puede ser absorbida por un objeto. Cuando un objeto absorbe radiación electromagnética, sus partículas (especialmente los electrones) ganan energía, lo que incrementa su movimiento (vibración o excitación, es decir, los electrones saltan a niveles de energía más altos). Este aumento del movimiento interno eleva la temperatura del objeto.

Cualquier carga acelerada, como un electrón vibrando, genera campos eléctricos y magnéticos variables — que se propagan hacia afuera como ondas electromagnéticas. Así es como el objeto **emite radiación térmica**.

Cuanto más caliente está el objeto: - Más energía emite - Más corta es la longitud de onda media de la radiación que emite

(Los objetos azulados emiten longitudes de onda más cortas que los objetos rojizos)

Un **cuerpo negro** es un objeto teórico ideal, con las siguientes características: - Absorbe perfectamente toda la radiación electromagnética que incide sobre él - Refleja un 0% → por eso es negro, a diferencia de una manzana que refleja la luz roja - Su radiación térmica depende **únicamente de su temperatura**, no de su material o color (a diferencia de un objeto real)

La **curva de radiación del cuerpo negro** (o **curva de Planck**) muestra cuánta energía emite un cuerpo negro a cada longitud de onda, para una temperatura dada.

- El eje X representa la longitud de onda
- El eje Y representa la intensidad (energía emitida por unidad de área por unidad de longitud de onda)

¿Qué muestra la curva?

1. Espectro continuo

La curva es suave — el cuerpo negro emite radiación en **todas** las longitudes de onda.

2. El pico se desplaza con la temperatura

- A medida que aumenta la temperatura, el pico de la curva se desplaza hacia la izquierda, a longitudes de onda más cortas
- Un objeto más caliente emite más en el rango **azul/ultravioleta**
- Un objeto más frío emite más en el rango **rojo/infrarrojo**

Pero, a finales del siglo XIX, los físicos notaron algo problemático: al aplicar las leyes clásicas a esta radiación térmica, se predecía que, al aumentar la frecuencia (o reducir la longitud de onda), la energía emitida debía aumentar sin límite. Esta predicción, conocida como la **catástrofe ultravioleta**, contradecía los datos experimentales: los objetos no emiten energía infinita en el ultravioleta.

En 1900, Max Planck propuso una idea revolucionaria:

La energía no se emite de forma continua, sino en pequeños paquetes discretos llamados cuantos.

Cada cuanto de energía depende de la frecuencia: $E = h \cdot f$, donde h es la constante de Planck. Esto significa que las radiaciones de alta frecuencia (como el ultravioleta) requieren más energía por cuanto.

Efecto fotoeléctrico (Einstein, 1905)

Problema: Al proyectar luz sobre un metal, a veces no se expulsaban electrones, incluso si la luz era muy intensa. Sin embargo, la luz de menor intensidad y mayor frecuencia (como la UV) sí expulsaba electrones.

Propuesta de Einstein (1905): - La luz está compuesta de fotones (partículas de luz) - partícula-onda dualidad - Cada fotón transporta energía: $E = h \cdot f$ - Solo los fotones con suficiente energía (frecuencia suficientemente alta) pueden expulsar electrones del metal.

Conclusión: Si la energía del fotón es menor que la función de trabajo del metal, no se emiten electrones, independientemente de la intensidad de la luz.

Espectros atómicos

Problema: Cuando se analizaba la luz emitida por átomos (especialmente hidrógeno), se observaban líneas muy precisas en el espectro, no una distribución continua como predecía la física clásica.

El hidrógeno, por ejemplo, mostraba líneas muy definidas en el visible. Pero no se entendía por qué los átomos solo emitían ciertas longitudes de onda específicas.

Modelos atómicos anteriores a la Mecánica Cuántica

Antes, se pensaba que los átomos eran neutros, pero sin una explicación clara de cómo se equilibraban las cargas positivas y negativas.

Los científicos creían que el átomo era - Indivisible, pequeñas esferas sólidas e indestructibles. - No existía evidencia experimental de partículas subatómicas - Aunque se sabía que existían fenómenos eléctricos (como la electricidad estática y las corrientes eléctricas, de Maxwell), no se relacionaba esto con la estructura atómica.

Modelo atómico de Thomson

El modelo atómico de Thomson (1904) fue el primero en incluir el descubrimiento del electrón (que él mismo había identificado en 1897). Propuso que un átomo es una esfera de carga positiva en la que están incrustados electrones de carga negativa, como “pasas en un pudín”. La carga positiva se distribuye uniformemente en todo el átomo, equilibrando la carga negativa de los electrones y haciendo que el átomo sea neutro en conjunto.

Modelo atómico de Rutherford

Para probar la teoría de Thomson, Ernest Rutherford y su equipo organizaron un experimento, utilizando polonio-210, un elemento inestable y radiactivo, como fuente de partículas alfa, ya que este sufre desintegración radiactiva y se transforma en plomo-206. Cuando el núcleo del polonio emite una partícula alfa, esta sale expulsada con una gran cantidad de energía cinética y mueve con velocidad hacia frente.

Para generar un haz estrecho y controlado, el polonio fue encerrado dentro de un contenedor de plomo con un pequeño orificio. Este orificio permitía que solo pasaran las partículas alfa emitidas en línea recta, formando un haz. El haz se movía hacia una lámina extremadamente delgada de oro, elegida porque el oro puede ser usado ultrafino sin romperse. Alrededor de la lámina se colocó una pantalla de detección fluorescente recubierta con sulfuro de cinc, que producía pequeños destellos de luz cada vez que una partícula alfa la impactaba. Esta pantalla permitía a los científicos observar la dirección en la que se dispersaban las partículas tras chocar contra la lámina.

La mayoría de las partículas alfa atravesaron la lámina sin desviarse. Sin embargo, algunas se desviaron en pequeños ángulos, y una cantidad muy pequeña fue desviada en ángulos grandes —incluso en dirección

opuesta. Esto no podía explicarse con el modelo del pudín de pasas. Rutherford concluyó que el átomo debía estar formado principalmente por espacio vacío, con un centro denso y cargado positivamente. A este centro lo llamó el núcleo.

Propuso un modelo para átomos que tienen solo un electrón, **átomos hidrogenoides**, por ejemplo: 1-hidrógeno, helio ionizado, litio doblemente ionizado. Hay tantos átomos hidrogenoides como núclidos, ya que basta con que un átomo neutro pierda todos sus electrones menos uno.

Modelo planetario: Rutherford imaginó que el átomo era como un sistema solar en miniatura:

- El núcleo es como el Sol (con carga positiva)
- El electrón es como un planeta, girando a su alrededor en una órbita circular
- El electrón puede moverse a cualquier distancia del núcleo (no hay niveles definidos)

Rutherford usó las leyes de Newton y electrostática para describir el movimiento del electrón. Su energía total consiste de:

Energía cinética (K) - energía del movimiento

Cuando una partícula se mueve en círculo, necesita una fuerza centrípeta que la mantenga girando hacia el centro. En este caso esa fuerza centrípeta es provocada por la atracción eléctrica entre el electrón (negativo) y el núcleo (positivo). Ambas apuntan hacia el centro.

$$F_{\text{centrípeta}} = \frac{mv^2}{r}$$

$$F_{\text{electroestática}} = \frac{kZe^2}{r^2}$$

$$F_{\text{centrípeta}} = F_{\text{electroestática}}$$

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{kZe^2}{r^2}$$

$$mv^2 = \frac{kZe^2}{r}$$

$$K = \frac{1}{2}mv^2$$

$$K = \frac{1}{2} \cdot \frac{kZe^2}{r^2} \text{ - la energía cinética del electrón}$$

- siempre positiva
- aumenta cuando el radio de la órbita disminuye (más cerca del núcleo \rightarrow más velocidad)

Energía potencial (U) - energía de atracción

Definimos que la energía potencial es cero cuando el electrón está infinitamente lejos del núcleo - Cuando el electrón se mueve más cerca del núcleo, su energía potencial disminuye (más negativa)

$$U = -k \cdot \frac{Ze^2}{r}$$

Energía total

$$K = -\frac{1}{2} \cdot U$$

$$E = K + U = -\frac{1}{2} \cdot U + U = \frac{1}{2} \cdot U$$

$$E < 0$$

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2}{2r}$$

La energía total del electrón negativa, lo que indica que el electrón está ligado al átomo.

A medida que el radio de la órbita aumenta: La energía total se vuelve menos negativa. Tiende a cero por la izquierda, es decir: valores negativos cada vez más cercanos a cero

Limitaciones

1. **Inestabilidad del átomo.** Un electrón en una órbita circular está en aceleración constante (aunque su velocidad no cambie, su dirección sí cambia). Según las ecuaciones de Maxwell, toda carga acelerada emite radiación electromagnética. Eso significa que el electrón pierde energía mientras gira. Entonces el electrón debería caer en espiral hacia el núcleo. Pero los átomos son estables, y los electrones no se colapsan en el núcleo.
2. **No explica los espectros atómicos.** Los átomos, como el hidrógeno, emiten luz en longitudes de onda muy específicas. Esto produce un espectro de líneas (no un arco continuo). Significa que los electrones solo pueden tener ciertos valores de energía. En el modelo de Rutherford, el electrón puede girar a cualquier distancia del núcleo. Entonces puede tener cualquier valor de energía. Eso implicaría que el átomo debería emitir un espectro continuo, no líneas específicas.
3. **No hay niveles de energía definidos** (no hay cuantización). En el modelo clásico de Rutherford, no hay nada que limite las órbitas del electrón. Puede tener cualquier radio, velocidad y energía.
4. **Asume el núcleo fijo.** El modelo considera que solo se mueve el electrón, cuando en realidad ambos cuerpos giran alrededor del centro de masas. Esto se corrige más adelante con el uso de masa reducida.

Modelo atómico de Bohr

Bohr conocía las limitaciones de Rutherford y la teoría de Planck, que introducía la idea revolucionaria de que la energía está cuantizada, es decir, que solo puede intercambiarse en valores específicos, no continuos.

Primer postulado: *“Mientras un electrón se mueve en una órbita estable alrededor del núcleo, no emite energía radiante.”*

Bohr introdujo este postulado de manera ad hoc (sin derivarlo de ninguna teoría previa), como una regla especial para los sistemas atómicos.

Segundo postulado: *La longitud de la órbita del electrón multiplicada por su momento lineal ha de ser un múltiplo entero positivo de la constante de Planck.*

- Planck (1900) propuso que la energía no se emite de forma continua, sino en paquetes discretos.
- Einstein (1905) usó esta idea para explicar el efecto fotoeléctrico
- Bohr (1913) llevó esta idea más lejos: pensó que no solo la energía, sino también el movimiento del electrón (su momento angular) estaba cuantizado — solo ciertos valores son posibles.

El electrón solo puede ocupar órbitas donde su momento angular sea un múltiplo discreto de una unidad fundamental. $\frac{h}{2\pi}$ sea la unidad de las órbitas.

El momento angular fue elegido para cuantizar los niveles de energía – conexión entre la física clásica y la física moderna. El comportamiento rotacional del electrón alrededor del núcleo no es libre de tomar cualquier valor. Solo se le permite tener momento angular en bloques de $\hbar, 2\hbar, 3\hbar$, etc.

Según Bohr, el momento angular debe ser

$$L = m_e \cdot v \cdot r = n\hbar \rightarrow 2\pi r p = n\hbar$$

Esto no se derivó de la mecánica clásica — se asumió como un puente entre las órbitas clásicas y el comportamiento cuántico.

Como en el modelo de Rutherford, se asume que la fuerza centrípeta que mantiene al electrón en una órbita circular está proporcionada por la atracción electrostática de Coulomb entre el electrón y el núcleo.

Fuerza centrípeta = Fuerza de atracción electrostática:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{kZe^2}{r^2}$$

$$mv^2 = \frac{kZe^2}{r}$$

$L = m \cdot v \cdot r = n \cdot \hbar$ - cuantificación del momento angular.

$v = \frac{n \cdot \hbar}{m \cdot r}$, sustituir en la ecuación anterior

$$m \cdot \left(\frac{n \cdot \hbar}{m \cdot r} \right)^2 = \frac{kZe^2}{r}, \text{ despejar } r, v, E$$

$$r = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m \cdot kZe^2}$$

Para el hidrógeno esto da el radio de Bohr: $r_1 = 5,29 \times 10^{-11}m$

$$v = \frac{kZe^2}{n \cdot \hbar}$$

Para el hidrógeno, $v_1 \approx 2,19 \times 10^6, m/s$

$$E = -\frac{m \cdot k^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{2 \cdot n^2 \cdot \hbar^2}$$

Para el hidrógeno, $E_1 \approx 13,6eV$

Notación compacta:

$$r_n = r_1 \cdot n^2$$

$$v_n = \frac{v_1}{n}$$

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

Tercer postulado: *La absorción o emisión de energía del electrón puede hacerse solo por “saltos” del electrón de una órbita a otra. Las transiciones entre niveles de energía implican la emisión o absorción de fotones.*

Excitación: Un electrón puede ganar energía desde el exterior — por ejemplo mediante calor, mediante una colisión con otra partícula, mediante una descarga eléctrica. Si gana justo la cantidad adecuada de energía, salta a una órbita más alta — más alejada del núcleo. Esa órbita corresponde a un número cuántico mayor. Este estado excitado es inestable — el electrón no permanecerá allí para siempre.

Emisión: Eventualmente, el electrón cae de nuevo a una órbita inferior. Cuando lo hace, pierde energía — pero esa energía no simplemente desaparece. Se libera en forma de un fotón (una partícula de luz). La energía del fotón es igual a la diferencia de energía entre las dos órbitas: $E_{\text{fotón}} = E_{\text{superior}} - E_{\text{inferior}}$

Explicación de las líneas espectrales: Cada elemento, especialmente el hidrógeno, emite colores muy específicos de luz cuando se excita. Estos aparecen como líneas brillantes en un espectro — las llamamos líneas de emisión. Antes de Bohr, nadie podía explicar por qué esas líneas eran: tan precisas, repetibles, y por qué solo aparecían ciertos colores.

El modelo de Bohr resolvió el misterio: Cada línea espectral corresponde a un salto específico entre dos órbitas. El color (o frecuencia o longitud de onda) de la luz depende de la diferencia de energía entre esas órbitas. Dado que los niveles de energía están cuantizados, los colores también lo están.

Esto coincidía con la fórmula de Balmer-Rydberg, una ecuación descubierta experimentalmente en el siglo XIX que predecía con precisión el espectro del hidrógeno, aunque en ese momento se desconocía la causa física detrás de ella. Los científicos habían observado que las longitudes de onda de la luz emitida seguían un patrón matemático claro, pero no comprendían por qué ocurría.

Limitaciones:

1. **Supone que el núcleo está fijo.** En realidad, tanto el electrón como el núcleo orbitan un centro de masa compartido.
2. **No puede aplicarse a átomos con más de un electrón.** El hidrógeno es simple: 1 protón, 1 electrón. Pero helio, litio, etc., tienen múltiples electrones, que se repelen entre sí. El modelo de Bohr no considera esas interacciones, por lo tanto, no funciona para la mayoría de los átomos.

Modelo atómico de Sommerfeld

Primera modificación válida para los átomos hidrogenoides: *la masa reducida*

Cuando dos cuerpos giran uno alrededor del otro, el sistema se comporta como si una sola partícula con masa reducida orbitara un punto fijo. Tanto el electrón como el núcleo se mueven: ambos giran alrededor de un centro de masas común.

La masa reducida se define como: $\mu = \frac{m_e \cdot m_N}{m_e + m_N}$

Por lo tanto, Sommerfeld sustituyó la masa m en las ecuaciones de Bohr por la masa reducida μ , y así modificó las fórmulas para:

Radio orbital: $r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi \mu e^2 Z} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots)$

Niveles de energía: $E_n = -\frac{\mu e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots)$

Definimos la constante a : $\frac{\epsilon_0 h^2}{\pi \mu e^2} = a$

Entonces el radio orbital queda: $r_n = \frac{a}{Z} \cdot n^2 \quad (n = 1, 2, \dots)$

Estas ecuaciones ahora dependen de la masa reducida, lo que significa que:

- Los valores cambian ligeramente dependiendo de la masa del núcleo (la cual varía con cada elemento).
- La fórmula de energía (originalmente derivada por Bohr) también se modifica:

$$E = -13,6 \cdot \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

Si se desprecia el movimiento del núcleo (caso límite cuando $m_N \rightarrow \infty$), entonces $\mu \approx m_e$ y se obtiene la constante a_0 , correspondiente al radio de Bohr para el hidrógeno: $a_0 = 0,5292 \text{ \AA}$.

Segunda modificación: *órbitas elípticas*

Sommerfeld mejoró el modelo de Bohr permitiendo que los electrones se movieran en órbitas elípticas, no solo circulares.

1. Número cuántico principal (n) - el nivel de energía o capa del electrón en el átomo.
2. Número cuántico azimutal (l) - el subnivel o subcapa dentro de un nivel de energía dado.
 - Para cada valor de n , existen n posibles órbitas elípticas.
 - ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$)
 - Antes : $k = (1, 2, \dots, n-1)$
 - *A mayor l , más circular es la órbita. A menor k , más alargada es la órbita. Si $l = n-1$, la órbita es perfectamente circular.*
1. Número cuántico magnético m_l - la orientación espacial de la órbita.
 - $m_l = -l, -(l-1), \dots, 0, \dots, (l-1), +l$
 - Por ejemplo, si $l = 1$ (orbital p), m_l puede ser $-1, 0$ o $+1$, lo que corresponde a los tres orbitales p orientados en diferentes direcciones (px, py, pz).
 - Si $l = 2$ (orbital d), m_l puede ser $-2, -1, 0, +1$ o $+2$, lo que da lugar a cinco orbitales d con distintas orientaciones.

Tercera modificación de Sommerfeld: *efectos relativistas*

Sommerfeld fue más allá al considerar un efecto de la relatividad: la masa del electrón aumenta ligeramente cuando su velocidad aumenta.

Según la relatividad: $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$

- En órbitas circulares, la velocidad del electrón es constante, por lo tanto la masa relativista también lo es (ligeramente mayor que la masa en reposo).
- En órbitas elípticas, el electrón se mueve más rápido cuando está cerca del núcleo, y más lento cuando está más lejos. Por lo tanto, su velocidad cambia constantemente, y su masa también.

A pesar de estas mejoras, el modelo de Sommerfeld seguía siendo semiclásico y no era capaz de explicar átomos con más de un electrón ni el efecto Zeeman anómalo. Por eso fue eventualmente reemplazado por la mecánica cuántica moderna (Heisenberg, Schrödinger, Dirac...).