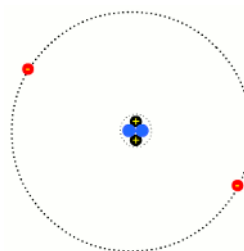


Primer modelo de átomo compuesto (Thomson, 1897)

Los electrones, diminutas partículas con carga eléctrica negativa, están incrustadas en una nube de carga positiva de forma similar a las pasas en un pastel (modelo de "pastel de pasas").



Modelo de átomo planetario (Rutherford, 1911)

El análisis de los resultados obtenidos con su famoso experimento (1911) lleva a Rutherford a **proponer la existencia de un núcleo** (muy pequeño en relación con el volumen total del átomo) en el que se concentra la práctica totalidad de la masa del átomo y cuya carga positiva compensará la negativa de los electrones corticales que giran alrededor del núcleo de forma análoga a como los planetas orbitan alrededor del Sol (modelo planetario).



El modelo de átomo planetario propuesto por Rutherford mostró pronto algunos inconvenientes teóricos que lo hacían inviable:

- **Contradecía la teoría electromagnética de Maxwell.** Según esta teoría una carga eléctrica acelerada debería de emitir ondas electromagnéticas.
- **No daba una explicación satisfactoria a los espectros atómicos**, ya que estos deberían de ser continuos, pues al existir órbitas de cualquier radio (y energía) todos los saltos son posibles. La experiencia, por el contrario, mostraba que los espectros de los átomos son discontinuos. Constan de rayas de diversos colores sobre un fondo negro.



Niels Bohr (1885-1962)

Niels Bohr propone en 1913 un nuevo modelo atómico sustentado en tres postulados:

1. **Cualquiera que sea la órbita descrita por un electrón, éste no emite energía.** Las órbitas son consideradas como **estados estacionarios de energía**.
2. **No todas las órbitas son posibles.** Únicamente pueden existir aquellas órbitas para las cuales el momento angular del electrón sea un múltiplo entero de $h/2\pi = \hbar$:

$$m v r = n \frac{h}{2\pi}$$

El número, **n**, que determina las órbitas posibles, se denomina **número cuántico principal**. Las órbitas que se correspondan con valores no enteros del número cuántico principal, **no existen**.

3. **La energía liberada al caer un electrón desde una órbita superior, de energía E₂, a otra inferior, de energía E₁, se emite en forma un cuanto de luz (fotón). La frecuencia (f) del cuanto viene dada por:**

$$E_2 - E_1 = h f$$

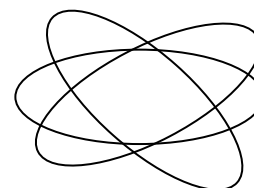
- **El primer postulado iba en contra de la teoría electromagnética de Maxwell.**
- **El segundo postulado era aún más sorprendente. En física clásica era inaceptable suponer que el electrón no pudiera orbitar a determinadas distancias del núcleo, o que no pudiera tener determinados valores de energía.**
- **El tercer postulado afirmaba que la luz se emitía en forma de pequeños paquetes o cuantos**, lo cual no dejaba de sorprender en una época en la que la idea de que la luz era una onda estaba firmemente arraigada.

Sommerfeld (en 1916) perfeccionó el átomo de Bohr considerando que si el electrón está sometido a una fuerza inversamente proporcional al cuadrado de la distancia, **debería de describir una elipse**, no una *circunferencia*.

El **número cuántico principal**, n, fija el valor del semieje mayor. (n = 1,2,3,4...)

El **número cuántico secundario**, l, fija el valor del semieje menor. (l = 0... n-1)

El **número cuántico magnético**, ml, fija la orientación. (ml = -l...0...+l)



Si consideramos al electrón como una partícula, a la energía de la órbita hemos de sumar una energía propia del electrón. Esta energía está también cuantizada y es función de un cuarto número cuántico, **m_s**, llamado **"número cuántico de spin"**.

En resumen, la energía de un electrón situado en una órbita es función de cuatro números cuánticos: tres que fijan el valor de la energía de la órbita considerada: n, l y m_l, y el número cuántico de spin, m_s, que cuantiza la energía propia del electrón:

$$E_{\text{Electrón}} = f(n, l, m_l, m_s)$$

Principio de Exclusión de Pauli

No pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos iguales

Principio de Máxima Multiplicidad (Regla de Hund)

A la hora de ocupar estados de energía degenerados los electrones tienden a situarse en ellos con idéntico spin.

Los tres fenómenos que propiciaron la formulación de la Física Cuántica fueron:

- El espectro de emisión del cuerpo negro.
- El efecto fotoeléctrico.
- Los espectros de los gases.

La explicación implicaba la aceptación de que la energía se absorbe y emite en forma de pequeños paquetes o "cuantos" de energía. El valor del cuanto de energía, depende de la frecuencia de la radiación ($E = h f$).



Louis De Broglie
(1892 - 1987)

Louis De Broglie (entre los años 1923-1925) **propuso extender la dualidad onda-partícula a toda la materia**, desarrollando la teoría que describe las **ondas de materia**.

Toda partícula en movimiento lleva asociada una onda, tal que su longitud de onda viene dada por:

$$p \lambda = h ; m v = \frac{h}{\lambda}$$

La materia tiene, por tanto, naturaleza dual. Puede comportarse como onda o como partícula



Erwin Schrödinger

E. Schrödinger, desarrollando la teoría de De Broglie, **considera al electrón como una onda e intenta obtener la correspondiente ecuación.**

En 1925 propone la llamada **ecuación de onda para un electrón** que describe su comportamiento en el átomo de hidrógeno:

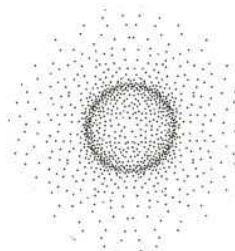
$$\nabla^2 \psi + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

La resolución de la ecuación de onda permite obtener la llamada **función de onda para el electrón, Ψ , u orbital atómico**, y su energía, E.

La función de onda lleva asociados unos **números cuánticos n, l y m** los cuales han de tener determinados valores para que la solución obtenida sea válida. **La energía del electrón no puede tomar valores cualesquiera**, sólo los correspondientes a los valores permitidos de los números cuánticos. **La energía del electrón en el átomo está cuantizada.**

En el tratamiento de Schrödinger, los números cuánticos surgen de forma espontánea como consecuencia de las condiciones impuestas a un electrón ligado al núcleo, **la cuantización de la energía surge de la propia teoría, no se impone.**

El desarrollo de Schrödinger dio lugar a una de las ramas de la Física Cuántica, **la Mecánica Ondulatoria.**



Max Born (1872-1970) propuso una interpretación que permite la conciliación de la mecánica de Heisenberg y la teoría ondulatoria de Schrödinger.

Según Born **el cuadrado de la función de onda de Schrödinger da la probabilidad de encontrar al electrón en un punto del espacio en un momento dado.**

No es posible hablar de órbitas, pero sí de regiones del espacio en las que existe una gran probabilidad de encontrar al electrón.

Werner Heisenberg desarrolló la otra rama de la Física Cuántica, conocida como **Mecánica de Matrices.**

Las conclusiones más sorprendentes que se extraen de la Mecánica de Matrices surgen cuando se analiza el proceso de medida:

- **No es posible determinar, en general, con absoluta certidumbre el resultado de una medida. O lo que es lo mismo, sólo es posible determinar la probabilidad de que la medida dé un valor dado.**
- **El hecho de medir origina una alteración drástica del propio sistema que se mide.**

En 1927 enuncia el llamado **Principio de Incertidumbre** o **Principio de Indeterminación** surgido como un consecuencia del desarrollo de su teoría:

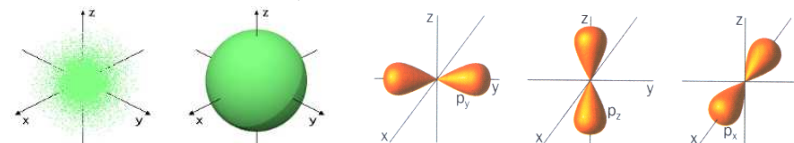
"Existen ciertos pares de magnitudes físicas (aquellas cuyo producto tenga las mismas dimensiones que h) que no pueden ser medidas de forma simultánea con total exactitud, ya que debe cumplirse que el producto de la indeterminación de las medidas debe ser igual o mayor que $h / 4 \pi$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4 \pi} = \frac{\hbar}{2}$$

El Principio de Incertidumbre echa por tierra la vieja imagen del átomo planetario. No nos podemos imaginar al electrón girando alrededor del núcleo siguiendo una trayectoria definida, ya que la observación de dicha trayectoria no es posible.



Werner Heisenberg



Una manera de dar sentido físico a los orbitales atómicos consiste en calcular la distribución de probabilidad de encontrar el electrón alrededor del núcleo y trazar una superficie tal que en su interior exista una gran probabilidad de encontrar al electrón (pongamos un 90%). Obtendremos de esta forma una representación muy útil de "la forma" de los orbitales.