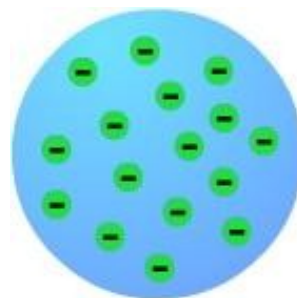




J. J. Thomson (1856-1940)

Primeiro modelo de átomo composto (Thomson, 1897)

Os electróns, diminutas partículas con carga eléctrica negativa, están incrustadas nunha nube de carga positiva de forma similar ás pasas nun pastel (modelo do "pastel de pasas")

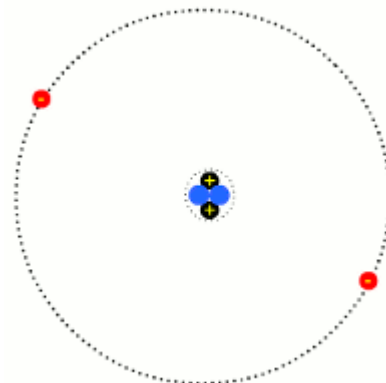


Modelo de átomo planetario (Rutherford, 1911)

E. Rutherford realiza en **1911** un experimento crucial co que trataba de comprobar a validez do modelo atómico de Thomson.

Partículas alfa (procedentes dun material radiactivo) son aceleradas e fanse incidir sobre unha lámina de ouro moi delgada, visualizándose a dirección en que emerxen tras atravesar os átomos da lámina.

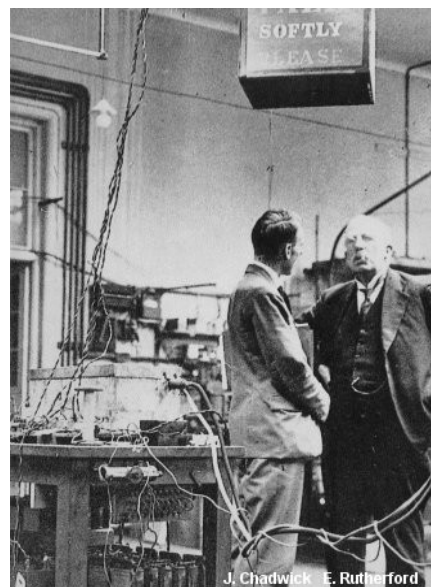
A análise dos resultados obtidos leva a Rutherford a propor a existencia dun núcleo (moi pequeno en relación co volume total do átomo) no que se concentra a práctica totalidade da masa do átomo, e cuxa carga positiva compensará a negativa dos electróns que xiran arredor do núcleo de forma análoga a como os planetas orbitan arredor do Sol (modelo planetario).



En 1918 o propio Rutherford considerou que os núcleos de hidróxeno (que foran identificados en reaccións nucleares) deberían de ser unha partícula fundamental que se encontraría aloxada nos núcleos dos átomos, propondo o nome de **protón** para esta partícula.

O **neutrón** foi proposto tamén por Rutherford en 1920, sendo identificado por J. Chadwick en 1932 como produto da reacción nuclear producida ao bombardear núcleos de berilio con partículas alfa.

O diámetro dun átomo típico é da orden de 10^{-10} m (0,1 nm), mentres que o núcleo atómico é 10 000 veces máis pequeno (10^{-14} m). Os protóns e neutróns teñen un diámetro da orde de 10^{-15} m, e o diámetro do electrón é da orde de 10^{-18} m.



E. Rutherford (de fronte) e J. Chadwick (de lado) no laboratorio.

A crise do modelo de Rutherford



J.C. Maxwell (1831 -

J. C. Maxwell, apoiándose en traballos anteriores de Oersted, Faraday e Ampere, que relacionaban electricidade e magnetismo, deu forma matemática á **teoría electromagnética** durante a década de 1860. Esta teoría predecía a existencia de ondas electromagnéticas.

O feito de as ondas electromagnéticas propágarensen con idéntica velocidade ca a luz levou á consideración de que **a luz mesma non é máis ca unha onda electromagnética**. A teoría de Maxwell unificaba óptica e electromagnetismo.

Existen unha gran variedade de ondas electromagnéticas que van desde os raios gamma, moi enerxéticos e fortemente ionizantes (son quen de arrincar electróns dos átomos producindo ións), deica as ondas de radio no extremo oposto do espectro.

Hertz confirmou en 1888 a predición de Maxwell ao xerar e recibir ondas electromagnéticas no laboratorio.

O modelo de átomo planetario proposto por Rutherford mostrou axiña algúns inconvenientes teóricos que o facían inviábel:

- **Contradicía a teoría electromagnética de Maxwell.** Segundo esta teoría unha carga eléctrica acelerada debería de emitir ondas electromagnéticas.

Un electrón ao xirar en círculos arredor do núcleo debería emitir, polo tanto, ondas electromagnéticas. **Esta emisión provocaría unha perda de enerxía que faría que o electrón describise órbitas de raio decrecente até caer sobre o núcleo.** O modelo atómico de Rutherford era, xa que logo, inviábel desde o punto de vista da física clásica.

- **Non daba unha explicación satisfactoria dos espectros atómicos.** Se encerramos nun tubo hidróxeno ou helio e sometémolo a voltaxes elevadas, o gas emite luz. Se facemos pasar esa luz a través dun prisma, as cores que a constitúen sepáranse permitíndonos obter o espectro da luz analizada.

Moi logo se concluíu que a emisión de luz se podería deber a que os electróns absorbían enerxía da corrente eléctrica e saltaban a órbitas superiores para, deseguido, volver caer ás órbitas máis próximas ao núcleo emitindo o exceso de enerxía en forma de enerxía luminosa.

Esta interpretación conducía, no entanto, a afirmar que os espectros deberían de ser continuos, xa que ao existir órbitas de calquera raio (e enerxía) todos os saltos son posíbeis. A experiencia, pola contra, mostraba que os espectros dos átomos son descontinuos. Constan de raias de diversas cores sobre un fondo negro (ver imaxe).



Espectro continuo. Obsérvanse todas as cores que o ollo humano pode percibir.



Espectros de emisión de H (arriba) e do He (abaixo). Non son continuos. Constan de raias de diversas cores separadas por amplias zonas negras nas que non se observa luz.

O comezo da Física Cuántica. Modelo atómico de Bohr (1913)

Co obxectivo de resolver os problemas acumulados sobre o modelo de átomo planetario, e para explicar o espectro do átomo de hidróxeno, Niels Bohr propón en 1913 un novo modelo atómico sustentado en tres postulados:

1. **Calquera que for a órbita descrita por un electrón, este non emite enerxía.** As órbitas son consideradas como **estados estacionarios de enerxía**. A cada unha delas correspóndelle unha enerxía, tanto maior, canto máis afastada se encontre do núcleo.
2. **Non todas as órbitas son posíbeis.** Unicamente poden existir aquelas órbitas para as que o momento angular do electrón sexa un múltiplo enteiro de $h/2\pi = \hbar$ (léase "hache cruzada").

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

NOTA

O momento angular (L) dunha partícula inclúe as magnitudes que caracterizan unha partícula que xira: a masa, a velocidade e a distancia ao centro de xiro. Para unha partícula de masa m que xire con velocidade v nunha circunferencia de raio r, o momento angular vén dado por: $L = m v r$.



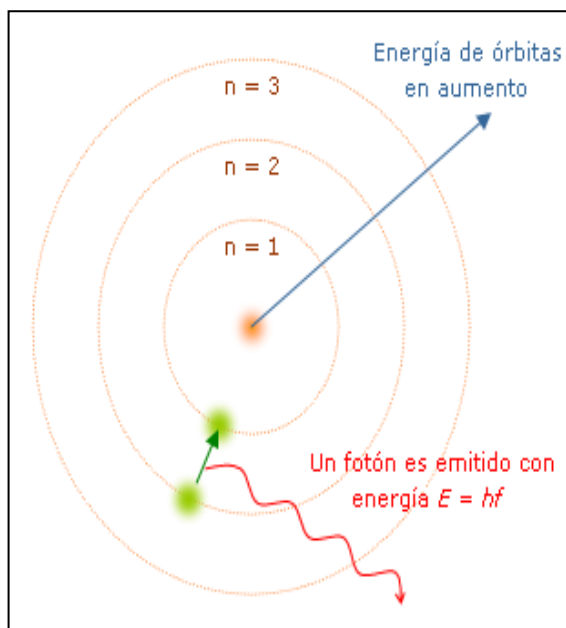
Niels Bohr (1885-1962)

O número, **n**, que determina as órbitas posíbeis, é denominado **número cuántico principal**. As órbitas que se correspondan con valores non enteiros do número cuántico principal, **non existen**.

3. **A enerxía liberada ao caer un electrón desde unha órbita superior, de enerxía E_2 , a outra inferior, de enerxía E_1 , é emitida en forma dun cuanto de luz (fotón). A frecuencia (f) do cuanto vén dada pola expresión:**

$$E_2 - E_1 = h f$$

h (constante de Planck) = $6,62 \cdot 10^{-34}$



Modelo atómico de Bohr (1913)
Fonte: Wikimedia Commons

Os cálculos baseados nos postulados de Bohr daban excelentes resultados á hora de interpretar o espectro do átomo de hidróxeno, pero cómpre ter en conta que contradicían algunhas das leis máis asentadas da Física:

O primeiro postulado ía en contra da teoría electromagnética de Maxwell, xa que segundo esta teoría calquera carga eléctrica acelerada debería de emitir enerxía en forma de radiación electromagnética.

O segundo postulado era aínda máis sorprendente. Na física clásica era inaceptábel supor que o electrón non puidese orbitar a determinadas distancias do núcleo, ou que non puidese ter determinados valores de enerxía. A afirmación era equivalente a supor que un obxecto que describe circunferencias atado a unha corda, non pode describir aquelas cuxo raio non sex, por exemplo, múltiplo de dous.

O terceiro postulado afirmaba que a luz se emitía en forma de pequenos paquetes ou cuantos, o que apesar de xa ter sido proposto por Planck en 1900, non deixaba de sorprenden nua época en que a idea de a luz ser unha onda estaba firmemente arraigada.

O átomo de Bohr era, simplemente, un síntoma de que a física clásica, que tanto éxito viña tendo na explicación do mundo macroscópico, non servía para describir o mundo do moi pequeno, o dominio dos átomos.

Posteriormente, na década de 1920, unha nova xeración de físicos (Schrödinger, Heisenberg, Dirac...) elaborarán unha nova física, a Física Cuántica, destinada á descrición dos átomos, que supuxo unha ruptura coa física existente até daquela.

Espectros atómicos

Estudando a distribución de liñas do espectro visíbel do hidróxeno, xa en 1885 **Balmer** deducira, de forma empírica, que a posición das liñas cumpría a seguinte fórmula matemática:

$$f = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right); R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}; n = 3, 4, \dots$$

En espectroscopía é empregada unha fórmula similar á mostrada máis arriba, coñecida co nome de **fórmula de Rydberg**. A única diferenza é que se calcula o inverso da lonxitude de onda ou número de onda.

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

A constante R_H , chamada **constante de Rydberg**, para o átomo de hidróxeno vale: $1,0967757 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

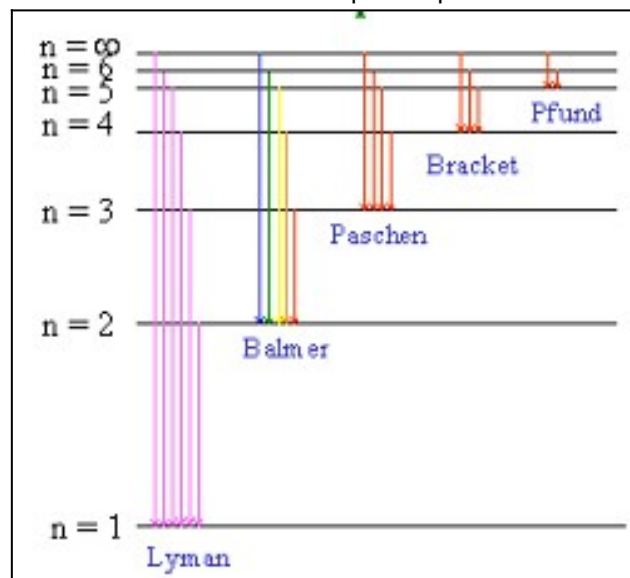
Con esta fórmula pódense calcular as distintas liñas para o espectro do átomo de hidróxeno que se poden clasificar en distintas series.

Serie de Lyman. Constituída polas liñas que aparecen cando os electrones caen desde órbitas superiores **á primeira órbita** ($n_1 = 1$; $n_2 = 2, 3, 4, \dots$). As liñas desta serie están situadas no **ultravioleta**.

Serie de Balmer. Formada polo conxunto de liñas obtidas cando os electróns caen desde órbitas superiores **á segunda órbita** ($n_1 = 2$; $n_2 = 3, 4, 5, \dots$). As liñas desta serie están situadas no **visible**.

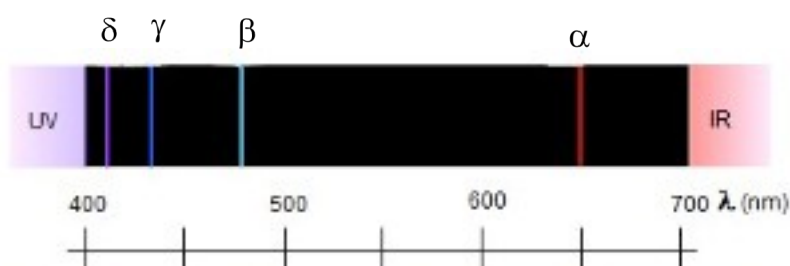
Serie de Paschen. Integrada polo conxunto de liñas obtidas cando os electróns caen desde órbitas superiores **á terceira órbita** ($n_1 = 3$; $n_2 = 4, 5, 6, \dots$). As liñas desta serie sitúanse no **infravermello**.

Tamén existen as **series de Brackett e Pfund**, situadas tamén no **infravermello** e formadas polo conxunto de liñas que se obteñen ao caer **á cuarta órbita** ($n_1=4$) e **á quinta órbita** ($n_1=5$), respectivamente.



Calcúlanse deseguido as lonxitudes das liñas correspondentes á serie de Balmer para o hidróxeno.

Línea	Long. onda (nm)
H _α	656,3 (vermello)
H _β	486,1 (azul-verde)
H _γ	434,1 (violeta)
H _δ	410,3 (violeta)



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

$$\frac{1}{\lambda_{\alpha}} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 0,15233 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_{\alpha} = 6,5647 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 656,5 \text{ nm}$$

$$\frac{1}{\lambda_{\beta}} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = 0,20565 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_{\beta} = 4,8626 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 486,3 \text{ nm}$$

$$\frac{1}{\lambda_{\gamma}} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right) = 0,23033 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_{\gamma} = 4,3416 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 434,2 \text{ nm}$$

$$\frac{1}{\lambda_{\delta}} = 1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{6^2} \right) = 0,24373 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} ; \lambda_{\delta} = 4,1029 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 410,3 \text{ nm}$$

Como se pode observar a concordancia coas medidas experimentales (táboa) é moi boa.

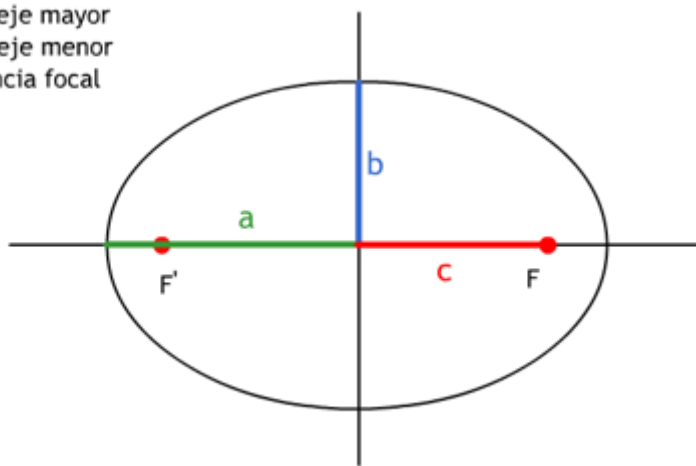
Extensión de Sommerfeld. Órbitas elípticas

Sommerfeld (en 1916) perfeccionou o átomo de Bohr considerando que se o electrón está sometido a unha forza inversamente proporcional ao cuadrado da distancia (lei de Coulomb), **debería de describir unha elipse**, non unha circunferencia.

Segundo a teoría desenvolvida por Bohr un electrón non pode posuír valores arbitrarios de enerxía cando orbita arredor do núcleo, hai valores permitidos e valores prohibidos, xa que existen órbitas permitidas e outras que están prohibidas.. **A enerxía está "cuantizada".**

Para fixar unha elipse necesitamos determinar dous parámetros: o valor do semieixo maior e o do semieixo menor.

a = semieje mayor
b = semieje menor
c = distancia focal



Os parámetros máis importantes da elipse son:

O semieixo maior, a.

O semieixo menor, b.

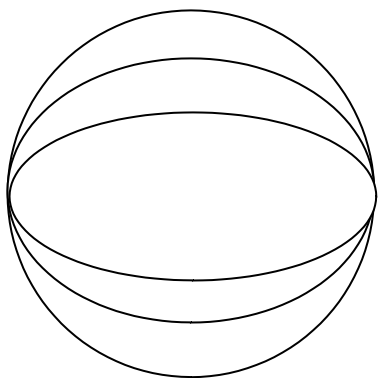
A distancia focal, c.

O eixo maior terá polo tanto unha lonxitude igual a $2a$, o menor a $2b$ e a distancia entre focos será igual a $2c$

Polo tanto, para determinar as posibles órbitas elípticas necesitamos dous números cuánticos:

n : Número cuántico principal. Cuantiza (fixa) o semieixo maior.

l : Número cuántico secundario. Cuantiza (fixa) o semieixo menor.



Co mesmo valor do raio (semieixo maior da elipse), existen moitas elipses que se diferencian na súa excentricidade (distinto valor do semieixo menor).

O número cuántico principal, **n**, fixa o valor do semieixo maior.

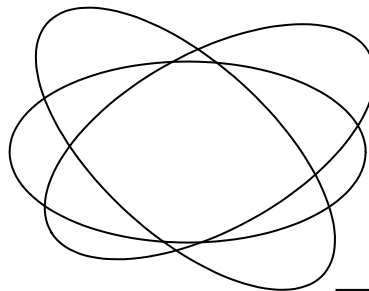
O número cuántico secundario, **l**, fixa o valor do semieixo menor.

O número cuántico secundario soamente pode tomar os valores enteiros comprendidos entre cero e n-1:

$$l = 0, 1, 2, 3 \dots (n-1)$$

Se consideramos un espazo tridimensional, vemos que as elipses (órbitas electrónicas) poden adquirir diversas orientacións.

Outro número cuántico, m_l , **número cuántico magnético**, fixa (cuantiza) as orientacións permitidas.



Unha mesma elipse (órbita) pode ter moitas orientacións no espazo.
O número cuántico magnético fixa as orientacións permitidas

O número cuántico magnético adquire valores enteiros comprendidos entre $-l$ e $+l$ (incluíndo o valor cero).

$$m_l = -l \dots 0 \dots +l$$

As órbitas posibles, en consecuencia, quedan fixadas por tres números cuánticos:

n : Número cuántico principal.

Cuantiza (fixa) o semieixo maior da órbita (elipse).

Valores: $n = 1, 2, 3 \dots$

l : Número cuántico secundario.

Cuantiza (fixa) o raio menor da órbita (elipse).

Valores: $l = 0, 1, 2, 3 \dots (n-1) \dots$

m_l : Número cuántico magnético.

Cuantiza (fixa) a orientación da órbita no espazo.

Valores: $m_l = -l \dots 0 \dots +l$

A cada órbita, determinada polos tres números cuánticos, correspóndelle un valor de enerxía.

Se agora consideramos o electrón como unha partícula situada en determinada órbita, á enerxía da órbita debemos sumarlle unha enerxía propia do electrón (podemos imaxinar o electrón como unha partícula que xira sobre o seu propio eixo). Esta enerxía está tamén cuantizada (é dicir, non pode tomar calquera valor) e é función dun cuarto número cuántico, m_s , chamado "**número cuántico de spin**".

En resumo, a enerxía dun electrón situado nunha órbita é función de catro números cuánticos: tres que fixan o valor da enerxía da órbita considerada: n , l e m_l , e o número cuántico de spin, m_s , que cuantiza a enerxía propia do electrón:

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