

	O modelo cuántico de átomo	IES Castro Alobre Vilagarcía de Arousa
--	-----------------------------------	---

Nos últimos anos do s. XIX e comezos do XX **o estudo da interacción entre a materia e as ondas electromagnéticas** levou á formulación de importantes problemas cuxa resolución conduciu a unha concepción nova da física que rexe o comportamento dos átomos: a **Física Cuántica**.

Os tres fenómenos que deron as pistas para a formulación da Física Cuántica tiñan relación coa absorción e/ou emisión de ondas electromagnéticas polos átomos que constitúen a materia:

● **Análise do espectro de emisión dun corpo negro.**

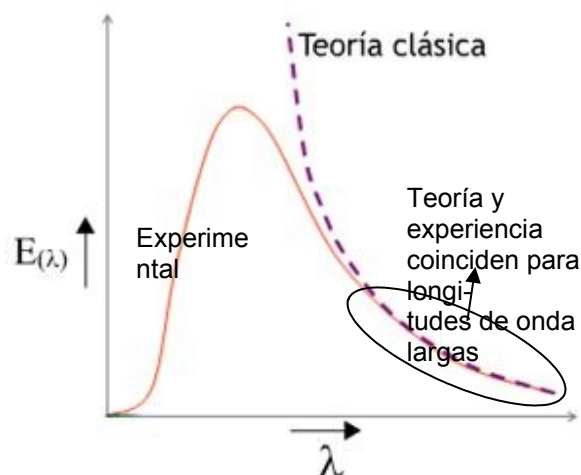
O termo "corpo negro" é usado en física para denominar un emisor ideal. Isto é, un material capaz de absorber e emitir enerxía de todas as frecuencias.

A análise do espectro da enerxía emitida por un corpo negro presentaba notábeis diferenzas co que o modelo teórico da física clásica predicía a finais do s XIX.

Max Planck (1858 - 1947), un científico alemán, proporcionou unha solución ao problema formulado.

En decembro de 1900 presentou unha expresión teórica que se adaptaba moi bien á curva experimental obtida para a emisión de radiación polo cuerpo negro:

$$E_{\lambda} = \frac{8 \pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h \nu}{kT}} - 1}$$



Para chegar a esta expresión, Planck tivo que introducir unha estraña hipótese:

"Os intercambios de enerxía entre materia e radiación teñen lugar non de maneira continua, senón por cantidades discretas e indivisíbeis ou cuantos de enerxía. O cuanto de enerxía é proporcional á frecuencia da radiación":

$$E = h f \quad h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

A constante de proporcionalidade introducida, **h**, ou **constante de Planck** está considerada actualmente como unha das constantes básicas da natureza.

O valor de "h" marca dalgún xeito a fronteira que separa o noso mundo (o mundo macroscópico) do mundo cuántico.

As expresións en que toma parte a constante de Planck involucran enerxías, distancias, tempos... etc moi pequenos. Estamos nos dominios da física cuántica, onde as leis da física clásica non funcionan.

O pequenísimo valor de h explica o motivo polo que os cuantos de enerxía pasaran desapercibidos aos físicos. Os pequenos "paquetes" de enerxía que absorben ou emiten os átomos son tan sumamente pequenos que o proceso de absorción e/ou emisión parece continuo. A realidade é ben distinta: **a enerxía é absorbida e emitida en forma de cuantos**. A absorción e emisión de enerxía pola materia é realizada "a saltos".

O dato curioso é que Planck chegou á expresión correcta (ver máis arriba) usando métodos incorrectos, tal e como se demostrou posteriormente.



Max Planck (1858-1947)

Nobel de Física en 1918

● Interpretación do efecto fotoeléctrico.

O efecto fotoeléctrico foi descuberto por Hertz en 1887 e consiste na emisión de electróns por algúns metais cando son iluminados con luz (xeralmente de elevada frecuencia). **A interpretación da emisión dos chamados fotoelectróns tampouco podía ser explicada correctamente se se usaba a teoría dispoñíbel na época.**

En 1905 **A. Einstein** propuxo unha explicación convincente para os feitos expostos.

Einstein suxiriu que a luz está formada por pequenos cuantos de enerxía (bautizados por Lewis en 1926 co nome de fotóns). A enerxía dos cuantos luminosos está ligada coa súa frecuencia segundo a fórmula de Planck:

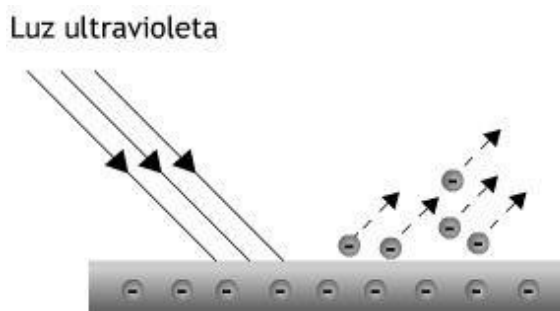
$$E = h f$$

O que fai Einstein é considerar que a luz non só intercambia enerxía cos átomos en forma de cuantos, senón que **a propia luz está formada por minúsculos gránulos de enerxía. A luz ten natureza corpuscular.**

Mentres Planck afirmaba que **o intercambio** de enerxía entre a luz e a materia se produce de forma descontinua, **Einstein suxire que é a propia luz a que está cuantizada.**

O propio Einstein acláranos a diferenza entre a súa proposta e a de Planck:

"Non é o mesmo dicir que a cervexa se vende en botellas de media pinta que dicir que consta de unidades indivisibles de media pinta."



● Explicación dos espectros de emisión dos gases.

Cando un gas é sometido a voltaxes elevadas, emite luz que tras ser analizada cun espectroscopio dá un espectro característico consistente en raias de diferentes cores sobre un fondo negro.

Co obxectivo de resolver os problemas acumulados sobre o modelo de átomo planetario (Rutherford), e para explicar o espectro do átomo de hidróxeno, Niels Bohr propón en 1913 o seu modelo atómico no que aparecen, por primeira vez, conceptos cuánticos.



Resumo

Os tres fenómenos que propiciaron a formulación da Física Cuántica foron:

O espectro de emisión do corpo negro.

O efecto fotoeléctrico.

Os espectros dos gases.

A explicación dos tres implicaba a aceptación de que a enerxía é absorbida e emitida non de forma continua, senón en forma de pequenos paquetes ou "cuantos" de enerxía. O valor do cuanto de enerxía é variábel, depende da frecuencia da radiación ($E = h f$).

Einstein propón na explicación do efecto fotoeléctrico que a natureza descontinua afecta non só ao proceso de emisión/absorción da radiación electromagnética pola materia, senón á propia radiación electromagnética. A luz ten natureza corpuscular, está formada por pequenos cuantos ou paquetes de enerxía que máis tarde recibirían o nome de **fotóns**. A natureza da luz é dual. É á vez onda e partícula. Ambas as concepcións non son excluíntes.

Dualidade onda - partícula

Louis De Broglie (entre os anos 1923-1925) **propuxo estender a dualidade onda-partícula a toda a materia**, desenvolvendo a teoría matemática que describe as chamada **ondas de materia**.

Toda partícula en movemento leva asociada unha onda, tal que a súa lonxitude de onda vén dada por:

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

A materia ten, xa que logo, natureza dual. Pódese comportar como onda ou coma partícula. O aspecto ondulatorio queda practicamente anulado cando consideramos obxectos macroscópicos, grandes, a escala humana, pero cando consideramos partículas de tamaño subatómico, como electróns, por exemplo, a dualidade entre onda e partícula é patente.

Os electróns compórtanse como unha partícula cando consideramos o seu movemento no seo dun campo magnético, por exemplo, pero se facemos incidir un feixe de electróns sobre un cristal, os espazos existentes entre os ións fan as veces de minúsculas fendas de tamaño comparábel á lonxitude de onda dos electróns e obtemos un diagrama de difracción análogo ao que se obtén ao difractor a luz mediante unha fenda estreita. Esta experiencia, proposta polo propio de Broglie como posíbel comprobación da súa hipótese, foi realizada por **Davisson e Germer** en 1927.



Louis De Broglie
(1892 -. 1987)
P. Nobel Física 1929

A ecuación de onda do electrón. Mecánica Ondulatoria

Schrödinger, desenvolvendo a teoría de De Broglie, **considera o electrón como unha onda e tenta obter a correspondente ecuación.**

En 1925 propón a chamada **ecuación de onda para un electrón** que describe o seu comportamento no átomo de hidróxeno.

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

Forma compacta: $H\Psi = E\Psi$



Erwin Schrödinger
(1887-1961)
P. Nobel Física 1933

A resolución da ecuación de onda permite obter a chamada **función de onda para el electrón, ψ , ou orbital atómico, ψ , e a súa enerxía, E .**

A función de onda leva asociados uns **números cuánticos n , l e m** que han ter determinados valores para que a solución obtida sexa válida. **A enerxía do electrón non pode tomar calquera valor**, só os aqueles valores permitidos polos números cuánticos. **A enerxía do electrón no átomo está cuantizada.**

A diferenza do tratamento efectuado por Schrödinger fronte ao efectuado por Bohr está en que este debe introducir os números cuánticos "ad hoc" para obter as raias que se observaban nos espectros. Porén, no tratamento de Schrödinger, os números cuánticos xorden de forma espontánea como consecuencia das condicións impostas a un electrón ligado ao núcleo. A cuantización da enerxía xorde da propia teoría, non é imposta. O desenvolvemento de Schrödinger deu lugar a unha das ramas da Física Cuántica, **la Mecánica Ondulatoria.**

Principio de Incerteza. Mecánica de Matrices

Werner Heisenberg desenvolveu a outra rama da Física Cuántica, coñecida como **Mecánica de Matrices**, xa que as matrices constitúen a parte esencial da linguaxe matemática utilizada.

A mecánica de matrices caracterízase por un formalismo matemático rigoroso, sen concesión ningunha a imaxes ou modelos:

"Todas as cualidades do átomo da física moderna son inferidas, só poden simbolizarse mediante unha ecuación en derivadas parciais nun espazo abstracto multidimensional. Non pode serlle atribuída directamente propiedad material ningunha. Daquela, calquera representación súa que poida crear a nosa imaxinación é intrinsecamente deficiente; a comprensión do mundo atómico dese modo primario e sensorial... é imposible"

W. Heisenberg



Werner Heisenberg
(1901-1976)
P Nobel Física 1932

As conclusións máis sorprendentes que se tiran da Mecánica de Matrices xorden cando é analizado o proceso de medida, segundo a teoría de Heisenberg:

- **Non é posíbel determinar, en xeral, con absoluta certeza o resultado dunha medida. Ou o que é o mesmo, só é posíbel determinar a probabilidade de que a medida dea un valor dado.**
- **O feito de medir orixina unha alteración drástica do propio sistema que se mide.**

En 1927 enuncia o chamado **Principio de Incerteza** ou **Principio de Indeterminación** xurdido como unha consecuencia do desenvolvemento da súa teoría.

"Existen certos pares de magnitudes físicas (aquelas cuxo produto teña as mesmas dimensións que a constante de Planck: J.s) que non poden ser medidas de forma simultánea con total exactitude, xa que se debe cumprir que o produto da indeterminación das medidas debe ser igual ou maior que $h/4\pi$ "

A posición e o momento lineal, ou a enerxía e o tempo, son exemplos destas magnitudes

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

Δx = Indeterminación en la posición

Δp = Indeterminación en el momento

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

ΔE = Indeterminación en la energía

Δt = Indeterminación en el tiempo

En moitas ocasións $\frac{h}{2\pi}$ nótase com o $\hbar$ (lese "hache cruzado"). $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

É importante saber que a imposibilidade de medir **de forma simultánea e con exactitude** as magnitudes consideradas non é debido á falta de precisión dos aparatos de medida, senón que **é algo intrínseco á propia natureza. Esta indeterminación, ao ser da orde da constante de Planck, soamente é apreciable no mundo do moi pequeno (partículas elementais), sendo inapreciable no mundo macroscópico.**

O Principio de Incerteza estraga a vella imaxe do átomo planetario. Non podemos imaxinar o electrón xirando arredor do núcleo seguindo unha traxectoria definida, xa que a observación desta traxectoria non é posíbel segundo o devandito principio.

Interpretación de Born. Orbitales atómicos

Max Born (1872-1970) propuxo unha interpretación que permite a conciliación da mecánica de Heisenberg e a teoría ondulatoria de Schrödinger.

Segundo Born ***o cadrado da función de onda de Schrödinger dá a probabilidade de atopar o electrón nun punto do espazo nun momento dado.***

Non é posíbel falarmos de órbitas definidas, pero se de rexións do espazo nas que existe unha gran probabilidade de encontrar o electrón.

A mecánica de matrices de Heisenberg e a mecánica ondulatoria de Schrödinger son dúas formas equivalentes da Mecánica Cuántica. A primeira, aínda que matematicamente complicada, utiliza conceptos máis familiares (ondas) do que a segunda, razón pola que o seu desenvolvemento é máis usado, sobre todo á hora de describir os átomos e o enlace químico..

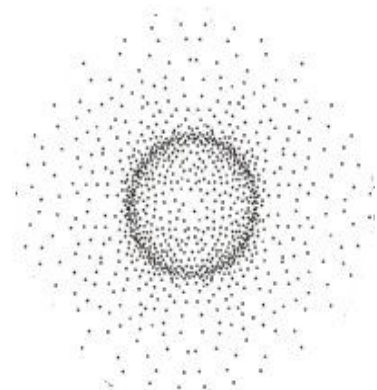
A ecuación de ondas de Schrödinger susténtase na hipótese de de Broglie (unha partícula pode ser tratada como unha onda) e describe o electrón sometido a certas restricións, impostas polo feito de estar sometido á atracción electrostática do núcleo. Das posíbeis solucións obtidas soamente son válidas aquelas que cumpran certas condicións (solucións aceptábeis): que sexan continuas, finitas, unívocas (un único valor) e normalizadas¹.

As funcións que son solucións aceptábeis reciben o nome de ***funcións propias***. Pois ben, ***as funcións propias obtéñense cando determinados parámetros adquiren valores que coinciden cos establecidos para os números cuánticos n , l , m_l e m_s .*** Podemos, polo tanto, afirmar que a función de onda para un electrón é función dos catro números cuánticos:

$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

A función de onda obtida é denominada orbital atómico, describe o comportamento do electrón e permite calcular a súa enerxía. Os orbitais con idénticos números cuánticos principal e secundario teñen idéntica enerxía.

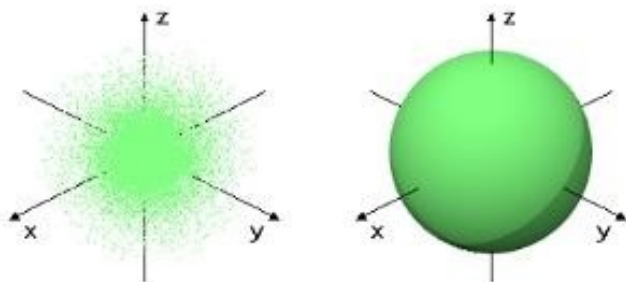
Unha maneira de dar sentido físico aos orbitais atómicos consiste en calcular a distribución de probabilidade de atopar o electrón arredor do núcleo e trazar unha superficie tal que no seu interior exista unha gran probabilidade de encontrar o electrón (poñamos un 90%). Obteremos deste xeito unha representación moi útil da "forma" dos orbitais.



Orbital atómico s

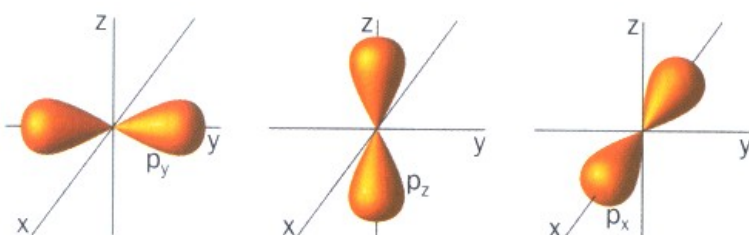
A máxima probabilidade de atopar o electrón (puntos) está localizada a unha distancia igual ao raio da primeira órbita do átomo de Bohr.

¹ A condición de normalización implica que teremos a certeza, é dicir, unha probabilidade igual á unidade de atopar o electrón nun volume que comprenda a totalidade do espazo. Matematicamente a condición de normalización é expresada mediante unha integral: .



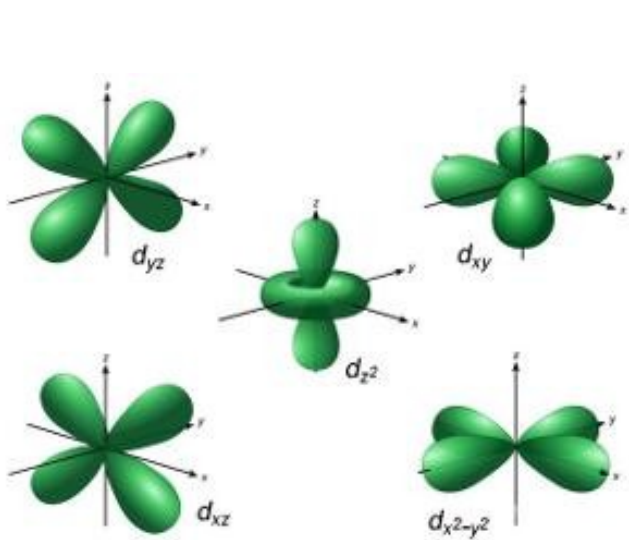
Orbitais s ($l=0$).

O electrón sitúase arredor do núcleo nunha zona con simetría esférica.



Orbitais p ($l=1$)

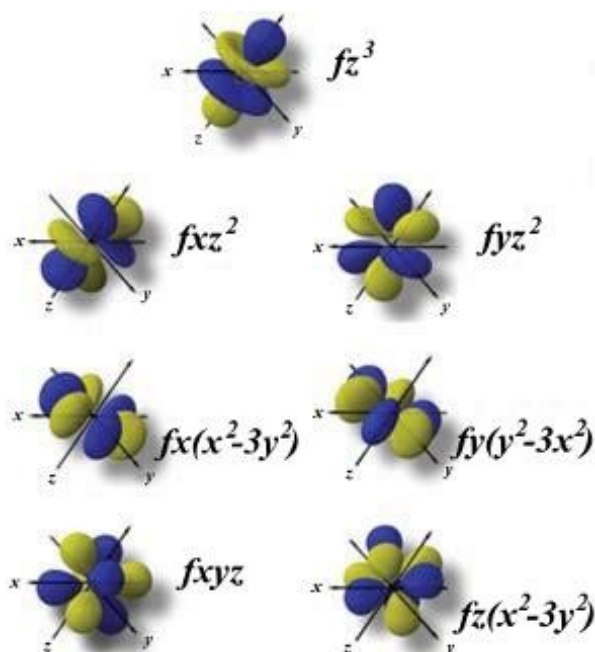
A máxima probabilidade de encontrar o electrón localízase ao longo dos eixos coordenados para cada un dos orbitais: p_x , p_y e p_z correspondentes aos posibles valores de $m_l = -1, 0, +1$



Orbitais d ($l=2$)

Existen cinco orbitais dexenerados, xa que para $l=2$ o número cuántico magnético pode tomar cinco valores distintos:

$$m_l = -2, -1, 0, +1, +2$$



Orbitais f ($l=3$)

Existen sete orbitais dexenerados, xa que para $l=3$ o número cuántico magnético pode tomar sete valores distintos:

$$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$$