



LA ESTRUCTURA ATÓMICA

R. O. Barrachina

1. Dispersión por un átomo de Thomson

Con el descubrimiento del electrón, se comprendió que casi la totalidad de la masa del átomo debía estar asociada con la carga positiva. Este conocimiento fue la base de distintos modelos sobre la estructura atómica. El mismo J. J. Thomson fue uno de los primeros en diseñar uno de tales modelos, sobre el cual ya comentamos en el capítulo 4.

A falta del conocimiento exacto de la forma en la cual ocurre la electricidad positiva dentro del átomo, consideraremos un caso en el cual esta está distribuida en la forma más conveniente para el cálculo matemático, es decir, como una esfera de densidad uniforme donde están distribuidos los corpúsculos.

La electricidad positiva atrae los corpúsculos hacia el centro de la esfera, mientras que su repulsión mutua los aleja de él. En equilibrio, están distribuidos de manera tal que la atracción de la electricidad positiva está balanceada por la repulsión de los

otros corpúsculos.

Consideremos ahora el problema de cómo 1, 2, 3, ..., n corpúsculos se distribuyen dentro de una esfera con electricidad positiva de densidad uniforme, siendo la carga negativa total de los corpúsculos equivalente a la carga positiva de la esfera. Cuando existe solamente un corpúsculo la solución es muy simple: evidentemente el corpúsculo irá hacia el centro de la esfera... Cuando hay dos corpúsculos se situarán en dos puntos A y B en una recta por el centro O de la esfera y tal que $OA = OB = a/2$, donde a es el radio de la esfera... Tres corpúsculos dentro de una esfera estarán en equilibrio estable cuando estén en los vértices de un triángulo equilátero cuyo centro coincide con el de la esfera y cuyo lado es igual en longitud al radio de la esfera.

Investigando las configuraciones de equilibrio de un número creciente de electrones, Thomson encontró que ciertos patrones tendían a repetirse. Esto parecía señalar un posible camino hacia la explicación del sistema periódico



de los elementos descubierto tres décadas antes por Dmitri Mendeleev (8 de Febrero de 1834 en Tobolsk, Rusia 2 de Febrero de 1907 en San Petersburgo). Este modelo permitía además dar explicaciones cualitativas sobre la formación de moléculas y las reacciones químicas. Finalmente, Thomson encontró que las frecuencias de oscilación de los electrones alrededor de sus posiciones de equilibrio eran del orden de magnitud de las frecuencias de la luz visible. Evidentemente, este modelo era muy prometedor, y gozó de mucha aceptación hasta que Rutherford mostró en 1911 que era incompatible con la evidencia aportada por Geiger y Mardsen sobre la dispersión de partículas alfa.

En efecto, en 1910 Thomson había publicado un trabajo teórico donde estudiaba la dispersión de partículas α y β por láminas delgadas. En particular, había demostrado que si los átomos de la lámina tenían una estructura de “budín”, una partícula alfa sería desviada en un ángulo muy pequeño, resultado de dos efectos distintos. Por un lado, veremos más adelante que una distribución de carga positiva de radio R produce una dispersión en un ángulo θ menor que b/R , donde b es la distancia de máximo acercamiento en una colisión frontal $b = 2Z_P Z_B / mv_\infty^2$. Por ejemplo, para las condiciones particulares del experimento de Geiger y Marsden

“... asumiendo que la carga (de los átomos de oro) es de $100 e$, puede calcularse que el valor de b para una partícula α de velocidad 2.09×10^9 centímetros por segundo es aproximadamente 3.4×10^{-12} cm”¹

Esta longitud es muy pequeña comparada con el radio atómico $R \approx 10^{-8}$ cm y por lo tanto conduce a un ángulo límite del orden de la dos centésimas de grado.

El otro efecto que debe ser considerado es la dispersión de la partícula alfa por los electrones embebidos en el átomo. Tal como vimos cada colisión individual desvía a la partícula alfa en un ángulo menor que $\theta_2 = m_e/m_\alpha$. Debido a la gran diferencia de masas, este también es un ángulo muy pequeño, del orden de la centésima de grado. El efecto acumulado de las colisiones con los Z_P electrones del átomo del blanco, aún mantendría este ángulo en valores muy pequeños.

Bajo estas condiciones, y tal como había advertido Rutherford, la dispersión de partículas alfa en ángulos grandes sería un evento altamente improbable.

Puesto que la masa, el momento y la energía cinética de una partícula α rápida son muy grandes comparados con los valores correspondientes para un electrón en movimiento rápido, no parece posible a partir de consideraciones dinámicas que una partícula α pueda ser dispersada en un ángulo grande por una colisión próxima con un electrón, aún si este último se encuentra en movimiento rápido y restringido por fuerzas eléctricas.

Planteado el problema en estos términos, Rutherford advirtió que los resultados obtenidos por Geiger y Mardsen sólo podían explicarse suponiendo que la carga positiva estaba concentrada en un volumen muy pequeño, con un radio R menor que b , es decir diez mil veces menor que el radio atómico.

2. Niels Bohr

En 1911 Rutherford realizó una visita al laboratorio de Cambridge, dirigido por su antiguo profesor Joseph Thomson. Allí conoció a un joven de 26 años, llamado Niels Henrik David Bohr (1885-1962), cuyo hermano, Harold, había formado parte del equipo de fútbol danés que había sobresalido en las Olimpiadas de Londres de 1908. A Rutherford le gustaba mucho el fútbol, y según parece ello tuvo alguna importancia en la relación que se estableció entre ambos. Rutherford le dio la primicia de los primeros resultados obtenidos por Marsden. Y Bohr se transformó en un profeta del nuevo modelo atómico de Rutherford. Supongo que en Cambridge no era muy saludable andar por ahí despotricando contra el modelo atómico de Thomson. El hecho es que en Abril de 1912, Bohr abandonó Cambridge y fue aceptado por Rutherford en Manchester. Estando allí, Bohr comenzó a desarrollar las ideas que, basándose en la estructura atómica puesta de manifiesto por el experimento de Marsden, darían lugar poco después al primer modelo cuántico del átomo. El 19 de Junio de 1912 escribía a su hermano,



Querido Harold,

Creo que he descubierto algo sobre la estructura de los átomos. No hables de esto con nadie [...]. Entenderás que podría estar equivocado, porque todavía no tengo todo completamente desarrollado, pero no lo creo. Tampoco creo que Rutherford piense que mis ideas son completamente descabelladas. Créeme, estoy ansioso por terminar esto. Y para hacerlo me he tomado un par de días libres sin ir al laboratorio (Esto también es un secreto).

Tuyo, Niels.

Esta carta es muy ilustrativa, no sólo por mostrarnos el entusiasmo con que Niels Bohr estaba desarrollando su modelo atómico, sino por la incertidumbre de no saber como iban a ser recibidas sus ideas, a pesar de la confianza que tenía en el apoyo de Rutherford. Y esta confianza no fue defraudada. La teoría cuántica era algo excesivamente remoto para Rutherford, pero cuando Niels Bohr finalmente se atrevió a mostrarle el borrador de su trabajo, este -a pesar de tener grandes dificultades para entenderlo- quedó impresionado por la forma en que el modelo atómico de Bohr daba los resultados correctos, y ayudó a Bohr, no sólo para que su trabajo fuese aceptado en el *Philosophical Magazine*, sino durante varios días corrigiéndole el estilo y la ortografía. Y si le damos una mirada al manuscrito original de Bohr previo a las correcciones de Rutherford, en efecto necesitaba esas correcciones. En palabras del propio Bohr, “tanto el estilo como el lenguaje fueron esencialmente mejorados por la ayuda y el consejo de Rutherford, [junto con] sus objeciones a la presentación algo complicada y con muchas repeticiones de la versión inicial”. Este trabajo² apareció en 1913, junto con los otros dos³ que completan la llamada trilogía.

A fines de 1913 Harold le comentaba a su hermano el efecto que el modelo cuántico del átomo había despertado en el continente:

Querido Niels:

[...] La gente está todavía extraordinariamente entusiasmada por tus artículos, pero tengo la impresión de que la mayoría -excepto quizás por Hilbert- y en particular los jóvenes, Born, Madelung,

etc., no se atreven a creer que puedan ser objetivamente correctos. Ellos encuentran a las suposiciones demasiado atrevidas y fantásticas. [...] Runge [...] dice que las desviaciones que has calculado son demasiado grandes. [...] Nicholson [...] dice que el acuerdo es “fortuito”, o sea que números elegidos aleatoriamente podrían hacerse coincidir igualmente bien, pero tal vez se ha expresado muy duramente. [...].

3. La hipótesis cuántica

¿Cuáles eran estas suposiciones tan “atrevidas y fantásticas”? El experimento de Geiger y Mardsen había demostrado la validez del modelo nuclear para la estructura atómica. Pero el asunto no terminaba allí, ya que este modelo introducía muy serias dificultades conceptuales. Una de estas dificultades estaba asociada con la radiación electromagnética que necesariamente debía emitir un electrón girando alrededor del núcleo. En su artículo, Niels Bohr explicaba este inconveniente en los siguientes términos

“... el electrón se aproximará al núcleo, describiendo órbitas de dimensiones cada vez más pequeñas y, con una frecuencia cada vez mayor, en promedio el electrón gana energía cinética al mismo tiempo que el sistema pierde energía. El proceso continuará hasta que las dimensiones de la órbita sean del mismo orden de magnitud que las dimensiones del electrón o del núcleo. Un cálculo simple muestra que la energía radiada durante el proceso considerado será enormemente grande comparada con la radiada en procesos moleculares ordinarios.

Es obvio que el comportamiento de tal sistema (clásico) es muy diferente al de un sistema atómico real. En primer lugar los átomos reales en su estado estable parecen tener dimensiones y frecuencias absolutamente fijas. Además, si consideramos cualquier proceso molecular, los resultados siempre parecen indicar que después de cierta cantidad característica de energía es radiada,



los sistemas se ubican nuevamente en un estado de equilibrio estable...

Para la época de la publicación del artículo de Rutherford en 1912, y no sin resistencia, las ideas cuánticas de Planck y Einstein habían empezado a abrirse camino en la mente de algunos físicos, sobre todo de las nuevas camadas. Al llegar a Manchester, Niels Bohr advirtió que estas nuevas ideas podían representar un camino para resolver los inconvenientes del modelo nuclear de Rutherford. En su artículo de 1913, Bohr planteaba esta situación en los siguientes términos

El resultado de la discusión de estas cuestiones parece ser el reconocimiento general de la insuficiencia de la electrodinámica clásica para describir el comportamiento de sistemas de magnitud atómica. Cualesquiera que sean las alteraciones en las leyes de movimiento de los electrones, parece necesario introducir una cantidad extraña a la electrodinámica clásica, es decir, la constante de Planck

$$h = 6.6262 \times 10^{-27} \text{erg.seg}$$

ó, como a menudo se ha llamado, el *cuanto elemental de acción*. Debido a la introducción de esta cantidad, la cuestión de la configuración estable de los electrones en los átomos es cambiada esencialmente, debido a que esta constante es de tales dimensiones y magnitud que ella, junto con la masa y la carga de las partículas, puede determinar una longitud del orden de magnitud requerido.”

En efecto, combinando estas tres constantes fundamentales, obtenemos una cantidad con unidades de longitud y del orden de las dimensiones atómicas,

$$a_o = \frac{(h/2\pi)^2}{me^2} \approx 5,29177 \times 10^{-9} \text{cm}$$

En 1912, el astrofísico J. W. Nicholson del Trinity College de Cambridge, obviamente influido por estas ideas y por el modelo nuclear de Rutherford,

introdujo el primer modelo “cuántico” de la estructura atómica. Su propuesta era un anillo de electrones girando alrededor de un núcleo de carga positiva⁴. Al notar que para explicar ciertas líneas brillantes del espectro de la corona solar, el momento angular del átomo debía ser de aproximadamente 25 veces la constante de Planck, comentó lo siguiente:

Por lo tanto, si la constante h de Planck tiene, como Sommerfeld ha sugerido, un significado atómico, puede significar que el momento angular de un átomo sólo aumentará o disminuirá en cantidades discretas cuando los electrones salgan o regresen. Rápidamente se ve que este punto de vista presenta menos dificultad a la mente que la interpretación más común, la cual se cree que involucra una constitución atómica de la energía misma.

Vemos que Nicholson aceptaba que el momento angular variara en cantidades discretas, pero veía con cierta renuencia el concepto de Einstein sobre la cuantización de la energía. Bohr, en cambio, se aventuró a dar este paso. El modelo heurístico de Einstein para el efecto fotoeléctrico postulaba que un átomo emitía o absorbía luz de frecuencia ν por la transferencia de un electrón de una órbita de energía E_1 a otra de energía E_2 tales que

$$h\nu = |E_1 - E_2|$$

Ahora comparamos esta expresión con la ley de Balmer - Rydberg para el espectro de frecuencias en la emisión y absorción de luz por hidrógeno atómico⁵

$$\nu = \frac{Ry}{h} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

donde Ry es un factor de proporcionalidad con unidades de energía aproximadamente igual a $2 \times 10^{-11} \text{erg}$. n_1 y n_2 son números enteros mayores ó iguales que uno. Si unimos ambas ecuaciones, obtenemos que en el átomo de hidrógeno sólo ciertos valores discretos ó *niveles* de energía

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2}$$



Si siguiendo el análisis de Bohr, imaginamos que “un átomo de hidrógeno consiste simplemente de un sólo electrón girando alrededor de un núcleo positivo de carga e ” en órbitas circulares, la energía total para un dado radio r esta dada por $E = -e^2/2r$, con $e = 1.60219 \times 10^{-19}C$ la carga del electrón. Por lo tanto, el radio r sólo pueden tomar ciertos valores discretos $r_n = n^2 e^2/2Ry$. El estado estacionario con $n = 1$ corresponde al nivel “fundamental” de radio más pequeño y menor energía (más negativo). Por la absorción de radiación ó bajo el bombardeo de electrones en un tubo de descarga, el electrón puede ser transferido a una órbita exterior “excitada” con un mayor valor de n , desde el cual tendería a decaer a una órbita interior por la emisión de radiación. La menor frecuencia posible para esta radiación sería la correspondiente al decaimiento al nivel inmediato inferior,

$$\nu_{n,n-1} = \frac{1}{h}(E_n - E_{n-1}) = \frac{Ry}{h} \frac{2n-1}{(n-1)^2 n^2}$$

En este punto, Bohr propuso un “principio de correspondencia” según el cual la teoría cuántica debía dar los mismos resultados que la teoría clásica para grandes valores de n , es decir cuando el electrón se mueve en órbitas de dimensiones macroscópicas. En otras palabras, la frecuencia $\nu_{n,n-1}$ debe tender a la frecuencia ν_{cl} de revolución del electrón en la órbita clásica. La fuerza coulombiana e^2/r^2 imparte una aceleración centrípeta $r(2\pi\nu_{cl})^2$. Obtenemos entonces

$$\nu_{cl} = \frac{e}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{mr_n^3}}$$

que, comparando con la frecuencia $\nu_{n,n-1}$ en el límite $n \rightarrow \infty$

$$\nu_{n,n-1} \approx \frac{Ry}{h} \frac{2}{n^3}$$

nos conduce, después de un poco de álgebra, a la siguiente expresión para la energía Ry en términos de constantes universales

$$Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

con $\hbar = h/2\pi$ la constante reducida de Planck. Reemplazando las constantes e , m y \hbar por sus valores conocidos obtenemos

$$Ry \approx 2.1799 \times 10^{-11} \text{erg}$$

que coincide con el valor obtenido por métodos espectroscópicos. Reemplazando en la expresión para el radio r y el momento angular $L = 2\pi mr^2\nu$ de la órbita de “número cuántico” n obtenemos $r_n = n^2 a_o$, y $L_n = n\hbar$. O sea que a_o y \hbar son el radio y el momento angular del estado fundamental. Vemos que la cuantización de la energía conduce a la cuantización del momento angular postulada por Nicholson. De hecho, en sus primeros trabajos, Bohr presentó su teoría siguiendo un camino inverso al analizado aquí; es decir, deduciendo la fórmula de Balmer y Rydberg a partir de la cuantización del momento angular. Esta idea de cuantizar el momento angular, es la base de la denominada “antigua teoría cuántica”. Estos primeros pasos dados por Niels Bohr en el desarrollo de la mecánica Cuántica, condujeron, 13 años después, a la mecánica matricial de Heisemberg (1925) y a la mecánica ondulatoria de Schrodinger (1926). Estas nuevas teorías fueron inmediatamente utilizadas para el cálculo de los niveles de energía de estados estacionarios, donde la antigua mecánica cuántica de Bohr había logrado sus mayores triunfos.

4. Unidades Atómicas

Los resultados obtenidos en la sección anterior nos indican claramente que los sistemas de unidades utilizados en el electromagnetismo clásico no son adecuados para analizar fenómenos de escala atómica. En estos casos se suele utilizar un sistema que toma como unidades básicas la masa y carga del electrón y el radio y período orbital del estado fundamental del átomo de Hidrógeno.

masa	1 u.a. = m	masa del electrón
carga	1 u.a. = e	carga del electrón
longitud	1 u.a. = $a_o = \hbar^2/me^2$	radio de Bohr
tiempo	1 u.a. = $a_o/c\alpha$	



Las unidades derivadas más utilizadas son

$$\begin{array}{lcl} \text{velocidad} & 1 \text{ u.a.} & = \alpha c = e^2/\hbar \\ \text{energía} & 1 \text{ u.a.} & = 2 Ry = me^4/\hbar^2 \end{array}$$

donde $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137.036$ es la constante de estructura fina, y el Rydberg Ry es la energía de ligadura del estado fundamental del átomo de Hidrógeno, $1 Ry = 13.6058eV$.

En la siguiente tabla se indican algunas de las constantes más utilizadas en física atómica:

$\hbar = 1$	1.05459×10^{-27} erg.seg	
$h = 2\pi$	6.6262×10^{-27} erg.seg	
$m = 1$	9.1095×10^{-28} gr	
$e = 1$	1.60219×10^{-19} C	
$a_o = 1$	5.29177×10^{-9} cm	5.29177×10^{-1} Å
$Ry = 1/2$	2.1799×10^{-11} erg	13.6058eV
$M(\text{protón}) = 1836.152$	1.67261×10^{-24} gr	
$c = 137.036$	2.997925×10^{10} cm/seg	

Vemos que la unidad atómica de velocidad es igual a una fracción de la velocidad de la luz dada por la inversa de la constante de estructura fina c/α . Esto hace que estemos hablando de velocidades del orden de la centésima de la velocidad de la luz. Estas parecen ser velocidades muy grandes, pero no lo son en términos atómicos ya que, tal como veremos, se habla de bajas o altas velocidades dependiendo de que estas sean menores o mayores que la velocidad media del electrón en el átomo, o sea menores o mayores que una unidad atómica aproximadamente.

En general, la energía del proyectil se mide en términos de una unidad denominada “electron - voltio”, eV . Esta es la energía adquirida por un electrón acelerado en un campo electrostático de un voltio de intensidad. La transformación a velocidad en unidades atómicas es simple en el caso de electrones:

$$v \approx \sqrt{\frac{E}{13.6eV}}$$

Si el proyectil es un ion de “número de masa A ” (ver el siguiente capítulo), entonces

$$v \approx \sqrt{\frac{E/A}{25keV}}$$

Notas

¹E. Rutherford: *Phil. Mag.* **21**, 669 (1911).

²N. Bohr, *Phil.Mag.* **25** 10, (1913).

³N. Bohr, *Phil.Mag.* **25** 476, 857 (1913).

⁴J. W. Nicholson: *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **72**, 677 (1912).

⁵Evidentemente, esta no es la definición original de la constante de proporcionalidad. Adoptamos este leve *error histórico* a cambio de una mayor economía de símbolos

