

4.- Salto cuántico. _____

5.- Átomo excitado. _____

6.- Principio de exclusión de Pauli. _____

CAPÍTULO I.

TEORIAS ONDULATORIA, CUANTICA Y NUMEROS CUANTICOS.

INTRODUCCIÓN:

La teoría moderna sobre la naturaleza del átomo es una teoría matemática. Como la teoría está basada en un modelo matemático del átomo y no en uno físico, no es posible proporcionar un modelo físico del átomo que sea rigurosamente correcto. A pesar de ello, los químicos han encontrado que es muy útil emplear modelos físicos de los átomos, teniendo siempre en cuenta que estos modelos no son exactos en todos sus detalles. La teoría atómica moderna es uno de los más grandes triunfos de la mente humana, debemos considerarla una de las grandes conquistas de la cultura humana y como un gran principio unificador de la química.

1.1 MODELO ONDULATORIO DE LA LUZ.

Sir Isaac Newton, fué quien descubrió un fenómeno, hasta ahora muy conocido, el de la *refracción* de la luz solar. La luz se desvió de su dirección original cuando pasa del aire a otro medio, como por ejemplo un cristal. Los rayos solares se dispersan en una banda continua de colores, conocida con el nombre de *espectro*, al pasar a través de un prisma. (Ver figura 1.1).

Más tarde se logró el conocimiento de que la luz blanca podía descomponerse por otros medios. Cuando se hace pasar luz a través de un material transparente en el que previamente se han rayado miles de líneas paralelas muy cercanas entre sí, se observa el espectro visible. El fenómeno se conoce como *difracción* y el dispositivo causante se llama red o rejilla de difracción.

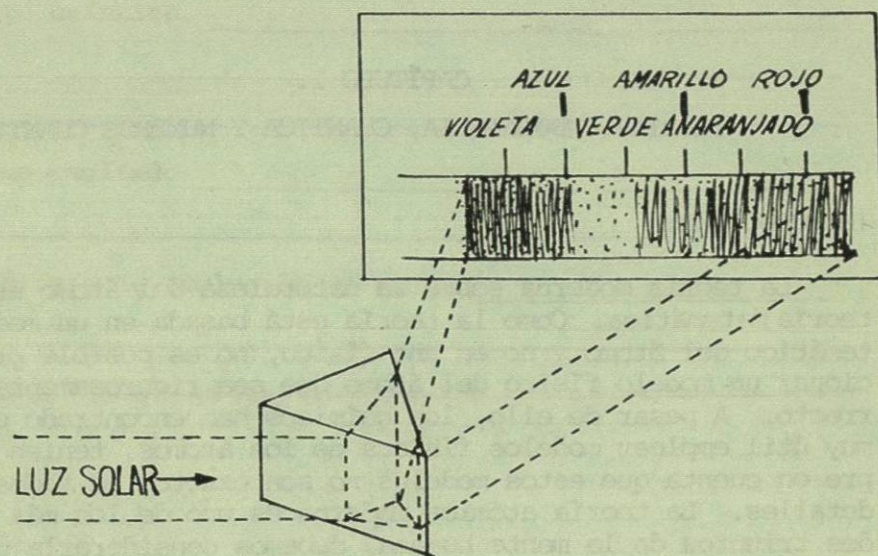


Fig. 1.1 Refracción de la Luz Solar.

La refracción, la difracción y otros muchos fenómenos ópticos requerían explicaciones teóricas. De tal manera que a fines del siglo XIX, los físicos utilizaron adecuadamente, como base de sus explicaciones una teoría ondulatoria de la luz. También se descubrió que la luz visible es tan sólo una pequeña parte de un vasto espectro continuo de una radiación similar.

Este espectro de radiaciones se extiende desde los rayos Gamma de alta energía y los rayos X, por un extremo, hasta las ondas de radio de baja energía por el otro. James Clerk Maxwell, físico escocés propuso una teoría, en 1873, considerando que electricidad, luz y magnetismo estaban relacionados. Este modelo clásico de la energía radiante sostiene que dicha energía es producida siempre que una carga eléctrica oscila o es acelerada. El movimiento aparente de la carga es una perturbación caracterizada por la presencia de ondas eléctricas y magnéticas. Esta perturbación se llama onda electro-

magnética. Veamos ahora las propiedades fundamentales del modelo de onda para la luz visible y para todas las radiaciones electromagnéticas.

La teoría ondulatoria representa la radiación electromagnética como una onda continua que está siendo generada por algún sistema en vibración (Ver figura 1.2). Dos propiedades de la onda en movimiento son su *velocidad* y *longitud de onda*. Experimentalmente, la *velocidad*, c , de todas radiaciones electromagnéticas es la misma: 3×10^8 metros por segundo en el vacío.

La longitud de onda se indica por la letra griega lambda λ . Se ha encontrado que depende de las propiedades vibratorias del sistema que la genera (Figura 1.3). Aplicando la teoría ondulatoria de la luz a las cuidadosas mediciones que implican la difracción de la luz de diferentes colores, es posible calcular la longitud de onda de estos colores.

Las longitudes de onda de las radiaciones visibles son muy cortas, siendo del orden de 10^{-5} cm. La luz que para el ojo es violeta tiene una longitud de onda de aproximadamente de 4×10^{-5} cm. La de la luz roja es aproximadamente 7×10^{-5} cm. En relación a esto, es conveniente definir la unidad de longitud llamada unidad angstrom. Una unidad angstrom, 1 \AA , es exactamente igual a 1×10^{-8} cm. Así la luz azul y roja tienen longitudes de onda alrededor de $4,000 \text{ \AA}$ y $7,000 \text{ \AA}$, respectivamente.

La observación detenida de la figura 1.3, nos lleva a otra propiedad fundamental de las ondas electromagnéticas. Si estuviéramos colocados en un punto equidistante de cada generador de ondas y contáramos el número de ondas que pasa por ese punto cada segundo, ¿qué observaríamos? como las dos ondas están viajando a la misma velocidad, c , pasarían más ondas por segundo de las de menor λ . El número de ondas que pasa por un punto determinado, por segundo, se llama *frecuencia* de la radiación electromagnética y su símbolo es la letra griega minúscula nu, ν , esta frecuencia depende de la frecuencia de oscilación del sistema vibratorio que genera la radiación.

Fig. 1.2 La teoría ondulatoria de la radiación electromagnética se deriva en base a propiedades de las ondas de agua.

Fig. 1.3 La longitud de onda de una radiación electromagnética depende del sistema electromagnético que lo genera.

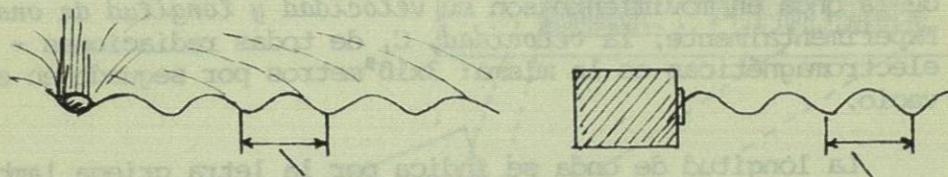


Fig. 1-2.

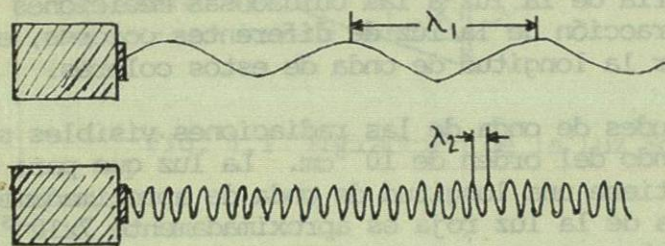


Fig. 1-3.

Observamos la relación que existe entre la longitud de onda λ y la frecuencia ν , de cualquier radiación electromagnética es que son inversamente proporcionales entre sí.

$$\lambda \propto \frac{1}{\nu} \quad \text{o} \quad \nu \propto \frac{1}{\lambda}$$

$$\text{o} \quad \lambda \nu = \text{Constante.}$$

Como λ tiene la unidad de cm/onda y ν tiene las unidades de onda/seg, la constante en esta última relación tendrá las unidades de velocidad:

$$\left(\frac{\text{cm}}{\text{onda}} \right) \cdot \left(\frac{\text{onda}}{\text{seg}} \right) = \frac{\text{cm}}{\text{seg}}$$

$\lambda \nu = \text{constante}$

Tratándose de radiaciones electromagnéticas, que se propagan con velocidad c , esta importante relación se expresa así:

$$\lambda \nu = c$$

La teoría ondulatoria clásica de la radiación electromagnética, todavía nos ayuda a comprender una multitud de fenómenos que implican radiación electromagnética. Sin embargo una segunda teoría inició una nueva era científica.

1-2 LA TEORÍA CUÁNTICA.

A fines del siglo XIX la física y la química experimentaron un rápido desarrollo como ciencia, de tal suerte que los antiguos conceptos y modelos teóricos necesitaban urgentemente, una revisión para poder explicar muchos de los nuevos conocimientos. Fue con esta época cuando se derrivó el sencillo modelo Daltoniano del átomo. También fue el período en que el modelo ondulatorio de la radiación electromagnética fue incapaz de explicar importantes hechos experimentales, y los físicos buscaron un nuevo modelo.

Probablemente se podrá explicar con mayor sencillez la necesidad de un nuevo modelo de la radiación si examinamos el efecto fotoeléctrico. Dicho fenómeno fue punto de estudio cuidadoso durante las tres décadas siguientes.

J.J. Thompson demostró que eran electrones lo que expulsaban ciertas superficies metálicas cuando la luz incidía sobre ellas. Otros investigadores estudiaron la clase de luz que se necesitaba para la expulsión de los fotoelectrones. Pronto se hizo evidente que, sólo luz de una determinada frecuencia mínima (o longitud de onda) originaba el efecto fotoeléctrico. El modelo ondulatorio de este hecho. Sólo luz de una determinada *energía mínima* podía expulsar electrones de una superficie particular. (De alguna manera, la energía de la radiación electromagnética debía relacionarse con las propiedades fundamentales de longitud de onda y frecuencia.

A no ser que la luz tenga una energía por lo menos equivalente a v_0 , no habrá expulsión de electrones. La luz que posee esta energía causa la emisión de electrones, cuya energía - aumenta según aumente la de la luz.

En el año 1901, un Físico Alemán llamado Max Planck propuso una teoría nueva que resolvería la de la radiación electromagnética. Planck rompió con la teoría ondulatoria clásica al suponer que la energía radiante generada por un sistema vibratorio no era de naturaleza continua, sino, más bien, *discontinua*. Así, la energía es absorbida en cantidades discretas o *cuantos*. Además, la cantidad de energía - acarreada por un cuanto es proporcional a la frecuencia de la vibración, ν , del sistema generador de energía:

$$E \propto \nu$$

Y así llegó a la relación básica.

$$E = h\nu$$

En donde h , es la constante de Planck, y tiene el valor de 1.5836×10^{-37} Kcal.seg, cuando E son kilocalorías.

La teoría cuántica de la radiación de Planck no tan sólo proporcionó un modelo teórico para las observaciones experimentales que originaron su desarrollo, sino que pronto llegó a ser el cimiento en el que desde entonces se han basado muchos de los avances teóricos de la química y de la física, por ejemplo en 1905, Einsein aplicó la teoría cuántica al efecto fotoeléctrico y así pudo dar una total y detallada explicación teórica de estas observaciones experimentales que se habían resistido a una interpretación con el modelo ondulatorio. Existen, entonces, dos modelos para la naturaleza de las radiaciones electromagnéticas: El modelo ondulatorio continuo de la física clásica y el Modelo atómico de Planck de la teoría cuántica. Estos modelos no son incompatibles: se complementan mutuamente. Volvamos ahora, al campo en el que su aplicación complementaria ha dado buenos resultados.

1-3 LÍNEAS ESPECTRALES.

Hoy en la actualidad existen instrumentos en el que se puede estudiar cuantitativamente la refracción o difracción de la luz. Dicho instrumento se le conoce con el nombre de *espectroscopio* y a ese campo de estudio se le ha denominado *espectroscopia*.

Por medio de la espectroscopia se ha llegado a muchos hechos importantes. Por ejemplo, el espectro de emisión de un elemento excitado no era una banda continua de luz desde el rojo al violeta, como la del sol, sino que consistía en una serie de rayos o líneas separadas. Además no podría haber dos elementos que tuvieran espectros idénticos, por lo que la línea espectrales podían ser consideradas como las huellas dactilares de los elementos.

Esta característica de los elementos se utiliza para descubrir y medir la naturaleza y cantidad de elementos que hay en una muestra. Se obtiene el espectro total de la muestra y, por las posiciones de las líneas observadas, los químicos pueden identificar fácilmente un determinado elemento. La medida de la intensidad de las líneas espectrales indica la cantidad existente de un elemento en especial.

1-4 IMPLICACIÓN DE LAS LÍNEAS ESPECTRALES.

Consideremos el hecho de que la luz emitida por un elemento rico en energía da una serie de líneas en el espectro del elemento y por lo tanto cada línea corresponde a una determinada longitud, de onda o frecuencia. De acuerdo con la teoría cuántica de la radiación, una longitud de onda o frecuencia fija corresponderá a una determinada energía. Por lo tanto, los espectros de línea de los elementos deben significar que los átomos están emitiendo cantidades fijas de energía. Así cuando los átomos son excitados o se les añade energía mediante el calentamiento a temperaturas elevadas, liberan esta energía adicional en forma de radiación lumínica. Los

átomos de elementos diferentes emiten ciertas *cantidades fijas de energía* que son características de estos elementos. Decimos que la energía irradiada por los átomos excitados está "*cuantizada*". Pero es muy importante darnos cuenta de que los espectros de líneas son prueba de que un átomo no emite paquetes de energía de cualquier tamaño.

1-5 DUALIDAD DE LA MATERIA.

Un físico francés Louis de Broglie sugirió que la dualidad de la luz no es única. Recordará que después del descubrimiento del efecto fotoeléctrico fué necesario explicar el comportamiento de la luz como si fuera de naturaleza ondulatoria a la vez que corpuscular (cuanto). De Broglie, en sus estudios teóricos sobre la estructura atómica concluyó que el dualismo puede ser un principio general, fué capaz de demostrar que cualquier partícula material se podría tratar como si fuera de naturaleza ondulatoria. Le fué difícil convencer a sus profesores que le permitieran publicar su idea tan revolucionaria.

La hipótesis de Broglie fué apoyada por hechos experimentales, al demostrarse que un haz de electrones podría ser difractado haciéndolo pasar a través de un sólido cristalino de la misma manera que un haz de luz es difractado por una celdilla. Recientemente el postulado de De Broglie sobre la naturaleza ondulatoria de la materia recibió una confirmación adicional cuando se difractaron haces de neutrones al atravesar cristales. El fenómeno de la difracción se explica mejor si nos valemos de un modelo ondulatorio y así, se dispuso de una teoría que explicará el comportamiento de las partículas.

Aunque aparentemente, la hipótesis de De Broglie sobre la naturaleza dual de la materia es válida para todo, no tiene importancia para objetos mucho mayores que átomos y moléculas. La hipótesis de De Broglie constituye uno de los tres pilares en que descansa la teoría atómica moderna. Ya nos hemos encontrado con otro de los conceptos fundamentales de la teoría atómica moderna: El concepto de los estados estacionarios de la energía electrónica, propuesto por Bohr. Es-

tudiaremos el tercer concepto fundamental que refuerza la teoría atómica moderna.

1-6 PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE.

Si queremos llevar a cabo una medición se necesitaría una vara para medir, comparable en tamaño con el objeto que se desea medir, puesto que los átomos tienen un tamaño aproximado de 10^{-8} centímetros, necesitaremos una vara del mismo tamaño; puede usarse ondas de radiación electromagnéticas pertenecientes a las regiones ultravioletas y rayos X del espectro, que corresponden a una radiación de alta frecuencia y alta energía. Cuando estas radiaciones de alta energía se usan en la medición de sistemas atómicos, interaccionan vigorosamente con estos sistemas. Cuando un fotón de alta energía choca con algún electrón en movimiento de un átomo, la energía del electrón se altera. Inevitablemente, un principio fundamental básico de la teoría atómica moderna refleja la inherente incertidumbre que hay en las mediciones de sistemas atómicos. Este principio fué enunciado en 1926 por el físico alemán Werner Heisenberg, que lo expresó así:

Es imposible conocer, simultáneamente, con exactitud perfecta los dos factores importantes que gobiernan el movimiento de un electrón; su posición y velocidad. Si determinamos experimentalmente su posición exacta en cierto momento, su movimiento es perturbado en tal grado, por el mismo experimento que no será posible encontrarlo. Inversamente al medir su velocidad con exactitud, la imagen de posición del electrón queda completamente borrosa.

El principio de incertidumbre de Heisenberg puede derivarse matemáticamente partiendo de la teoría cuántica, aunque su importancia, para nosotros, es cuantitativa, reconocemos, por ejemplo, que si no podemos medir exactamente el ancho de esta página con aproximación del orden de 10^{-8} cm, realmente es algo que no importa. Sin embargo, si la incertidumbre en la medición de la posición de un electrón en un átomo es 10^{-8} cm, entonces existe un problema serio, ya que un átomo tiene tan sólo una extensión de aproximadamente 10^{-8} cm. Con una -