

9. EL ÁTOMO HIDROGENOIDE SEGÚN BOHR 2018

© Damián Guzmán
www.damianguzman.com.ar

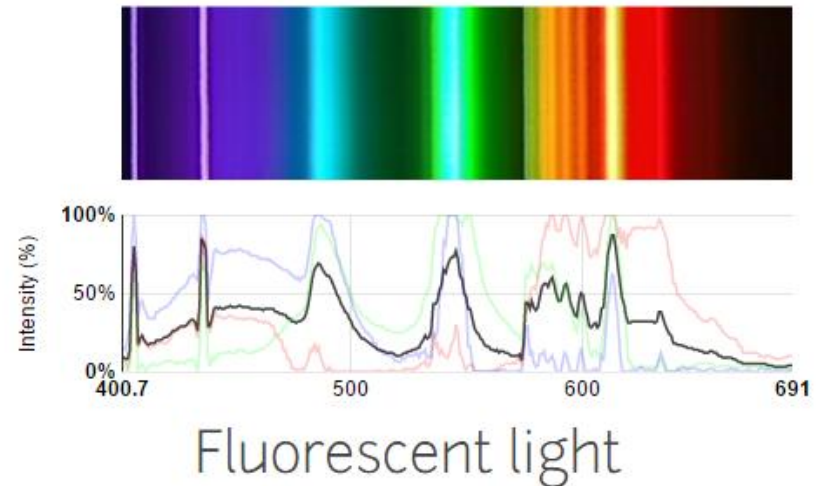
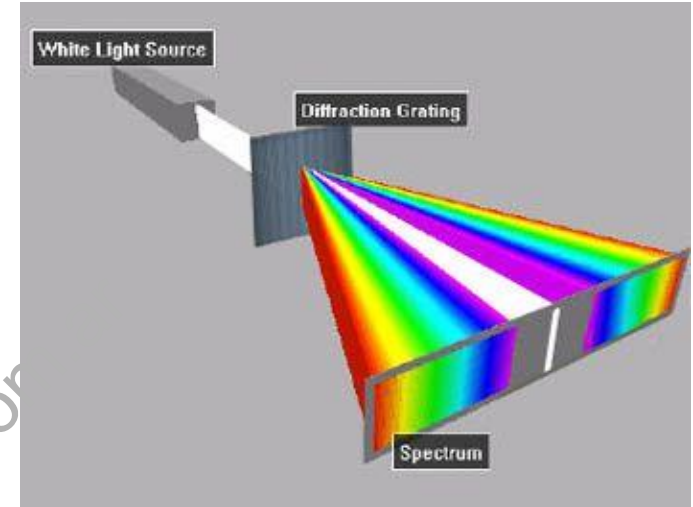
Espectro de gases

A partir de datos espectroscópicos experimentales y de las teorías de emisión de radiación y del fotón, nace el conocimiento de la estructura del átomo mas simple (el átomo de H).

Posteriormente también las estructuras de los átomos mas complejos.

Espectro de gases

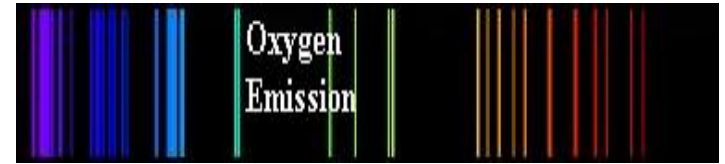
Espectrógrafos: son instrumentos que permiten estudiar la descomposición de la luz a través de una red de difracción o de un prisma.



<https://publiclab.org/wiki/foldable-spec>

Espectro de gases

Para los gases el espectro es un conjunto de líneas (espectro discreto) a diferencia de los sólidos y líquidos que es continuo.



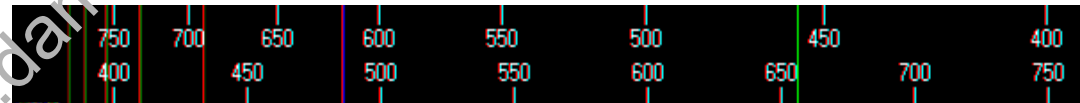
Espectro de emisión: estos espectros corresponden a la *emisión* de energía de un gas incandescente.

Espectro visible



Espectro de absorción: cuando luz blanca emitida por una fuente atraviesa un gas, éste absorbe las longitudes de onda que es capaz de emitir cuando está incandescente. Se obtiene un espectro continuo con rayas oscuras discretas, llamado *espectro de absorción*.

Espectro de emisión del átomo de hidrógeno en el visible

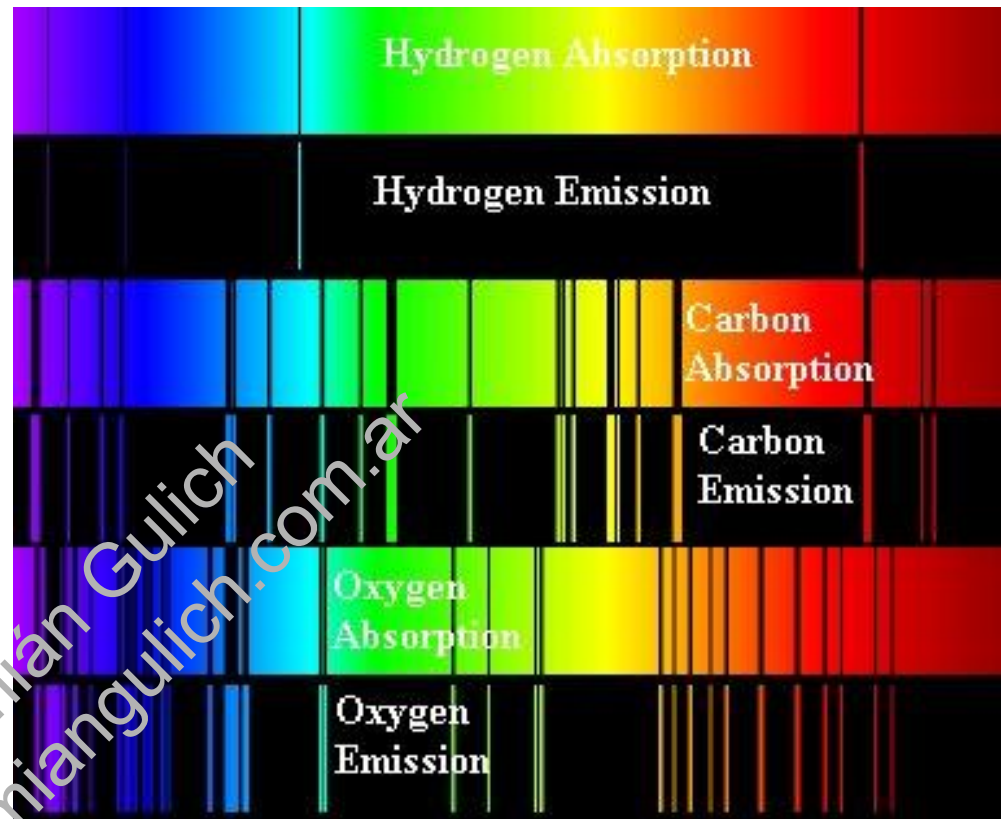


Espectro de absorción del átomo de hidrógeno en el visible



Lineas espectrales

Se observaron como los elementos químicos producen discretas longitudes de onda cuando se excitan o desexcitan en una descarga eléctrica.



Los espectros son diferentes para cada gas y caracterizan a cada uno de ellos (huella digital). El He se descubrió primero en el Sol que en los laboratorios terrestres.

Espectroscopía: Ciencia que estudia la composición química de materiales y sustancias desconocidas mediante el análisis de espectros (visible, IR, UV, rayos X, radiofrecuencia). Ej. Composición de planetas y estrellas.

El espectro visible del Sol



El espectro del átomo de hidrógeno

Hydrogen Absorption Spectrum



Hydrogen Emission Spectrum



Fórmula empírica de Balmer para las líneas del hidrógeno

Hacia 1884 se conocían muchos espectros de gases pero no se conocía su explicación ni las leyes que los describen.

Johann Jakob Balmer



En 1885, Johann Balmer encontró una fórmula empírica para la longitud de onda del espectro visible de hidrógeno en nm (esta fórmula predecía con una precisión de 1/1000 las 9 líneas conocidas para H en esa época):

$$\lambda = (364,56 \text{ nm}) \cdot \frac{k^2}{k^2 - 1} \quad (k = 3, 4, 5, \dots)$$

$$\lambda(k = 3) = 410,13 \text{ nm}$$

$$\lambda(k \rightarrow \infty) = 364,56 \text{ nm}$$



Born	May 1, 1825 Lausen, Switzerland
Died	March 12, 1898 (aged 72) Basel, Switzerland
Nationality	Switzerland
Fields	Mathematics
Alma mater	University of Basel

Fórmula de Rydberg para las líneas del hidrógeno

Johannes Rydberg



Johannes Rydberg

Born	November 8, 1854 Halmstad
Died	December 28, 1919 (aged 65) Lund
Nationality	Swedish
Fields	Physics
Institutions	Lund University
Known for	Rydberg formula
Notable awards	Fellow of the Royal Society (1919)

Rydberg (1890) generaliza la fórmula de Balmer para un mayor rango:

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

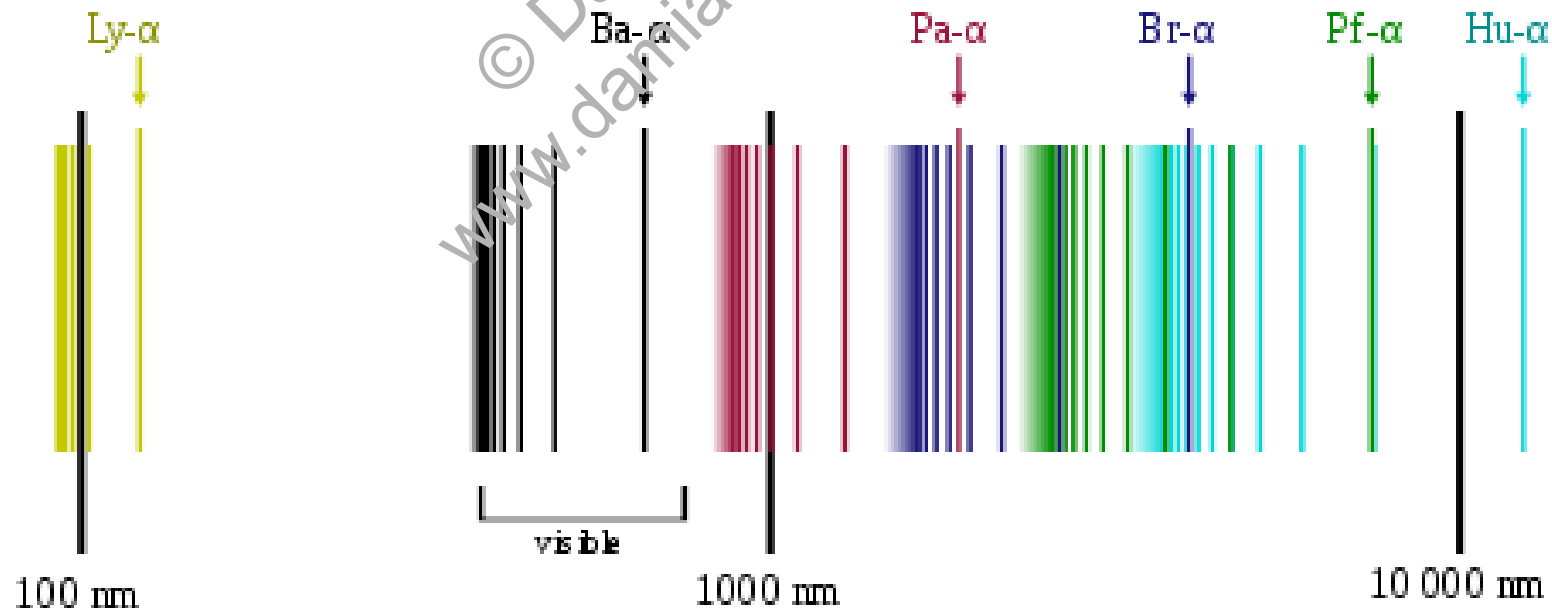
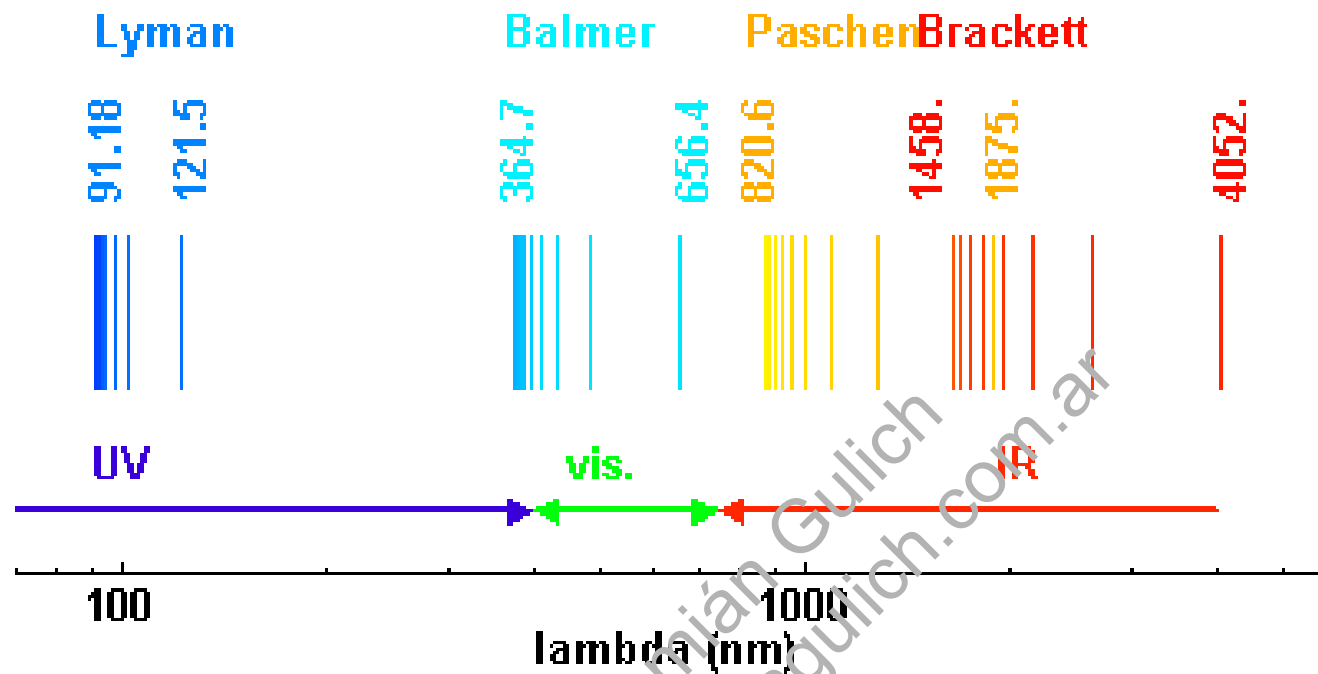
$$m = 2 \quad (\text{Balmer})$$

$$n = m + 1, m + 2, m + 3, \dots$$

$$R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad \text{Constante de Rydberg}$$

Hydrogen Series of Spectral Lines

Discoverer (year)	Wavelength	m	n
Lyman (1916)	Ultraviolet	1	>1
Balmer (1885)	Visible, ultraviolet	2	>2
Paschen (1908)	Infrared	3	>3
Brackett (1922)	Infrared	4	>4
Pfund (1924)	Infrared	5	>5



El modelo atómico

© Damián Gulich
www.damiangulich.com.ar

Modelo del átomo hacia 1900 (Thompson)

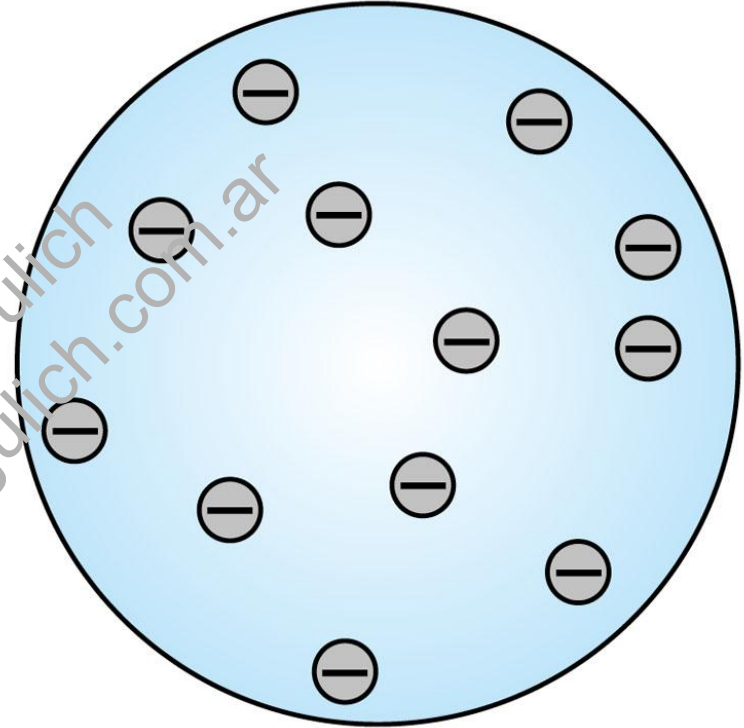
Para explicar los espectros se debían hacer *modelos* del átomo.

Algunos datos que se disponían:

- Diámetro, aprox. 10^{-10} m.
- Eléctricamente neutro.
- Contiene *electrones* (descubiertos en 1897) (carga negativa) livianos y *protones* (carga positiva) con masa mucho mayor. Los electrones son livianos en comparación con el átomo.

Protones aún no se había descubierto, pero es evidente carga positiva tenían que estar presentes para lograr la neutralidad de la carga.

- Teoría EM: las cargas eléctricas en movimiento irradian energía.



Thomson consideró que cuando el átomo se calienta, los electrones pueden vibrar alrededor de su posición de equilibrio, lo que produce la radiación electromagnética.

Este modelo no puede explicar los espectros.

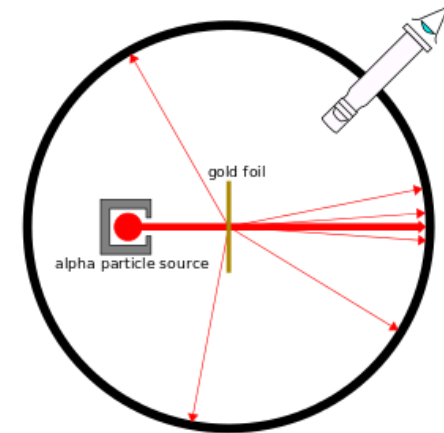
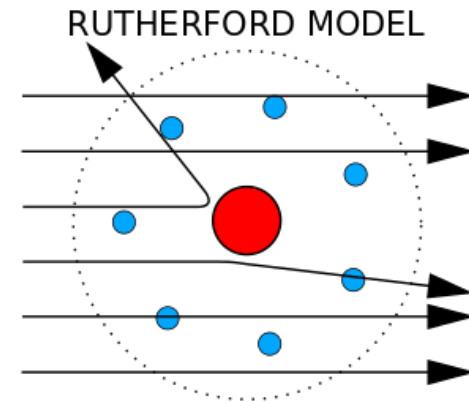
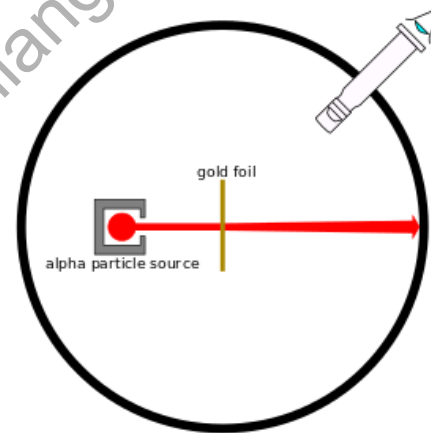
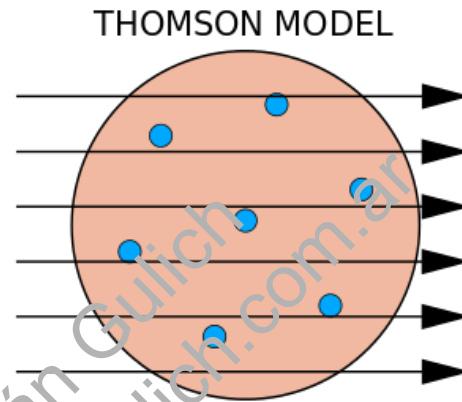
El experimento de Geiger y Marsden

Rutherford, Geiger, y Marsden concibieron en 1908 una nueva técnica para investigar la estructura de la materia por una dispersión de partículas α de los átomos. Un haz de partículas α (núcleo de He, 2 protones y 2 neutrones) sobre láminas muy delgadas de metal.

Detector: pantalla sulfuro de zinc.

La mayoría de las partículas α NO eran desviadas o apenas dispersadas un ángulo muy pequeño ($\approx 1^\circ$).

Sin embargo, algunas partículas α eran desviadas ángulos muy grandes ($\approx 90^\circ$ o mas) e incluso algunas rebotaban!!!. Esto es incompatible con el modelo de Thompson, que solo podía admitir desviaciones muy pequeñas.



OBSERVED RESULT

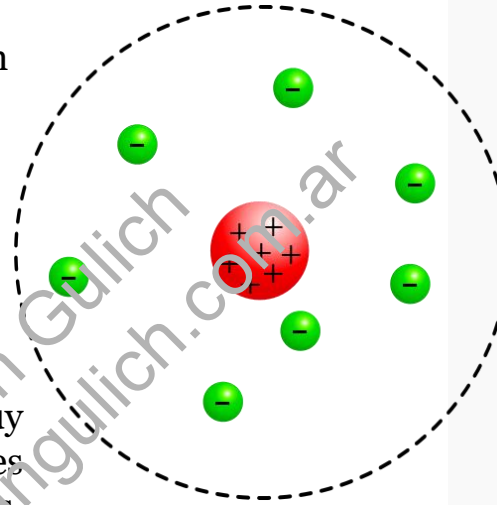
El modelo atómico de Rutherford

Los resultados experimentales no son compatibles con el modelo atómico de Thomson.

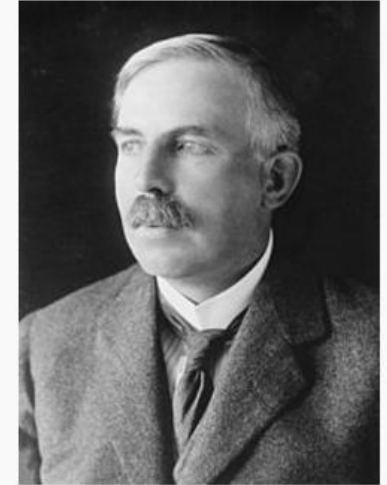
Rutherford propuso que un átomo tiene un núcleo con carga positiva rodeada por las cargas negativas (electrones). Geiger y Marsden lo confirmaron (1913). Las dispersiones de partículas α en áng. muy grandes sólo son posibles si chocan con una masa muy concentrada en un volumen reducido. Rutherford calculó el diám. en 10^{-14} m.

Los átomos están formados por un “núcleo” muy pequeño con carga positiva (protones) y los electrones girando alrededor de él en órbitas aprox. circulares, como los planetas alrededor del sol. La cantidad de protones y electrones debe ser la misma para que el átomo sea eléctricamente neutro. En el caso del átomo mas simple (Hidrógeno), sólo un protón y un electrón.

Dificultades: de acuerdo a la teoría EM de Maxwell, una carga en movimiento (electrones) radian ondas EM en forma continua, por lo tanto pierden energía. Como consecuencia, las órbitas tienen un diámetro cada vez menor, describen una espiral y el electrón colapsa sobre el núcleo. Esto NO SUCEDE ya que los átomos son estables.



The Right Honourable
The Lord Rutherford of Nelson
OM FRS



President of the Royal Society

In office
1925–1930

Preceded by Sir Charles Scott Sherrington

Succeeded by Sir Frederick Gowland Hopkins

Personal details

Born 30 August 1871
Brightwater, Tasman District, New Zealand

Died 19 October 1937 (aged 66)
Cambridge, England, UK

Citizenship British subject

Nationality New Zealander

Residence New Zealand, United Kingdom

Signature

Modelo atómico clásico (planetario)

Consideremos al átomo como un sistema planetario con una trayectoria circular.

Podemos igualar la fuerza de Coulomb entre el núcleo y el electrón e igualarlo a la 2^{da} Ley de Newton:

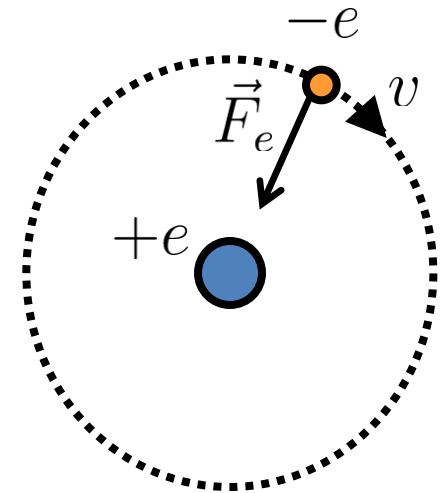
$$\|\vec{F}_e\| = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

donde v es la velocidad tangencial del electrón:

$$\Rightarrow v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r} \quad \star \quad \Rightarrow K = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

La energía total es:

$$E = K + U = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \boxed{-\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} < 0} \quad \text{El electrón está ligado}$$

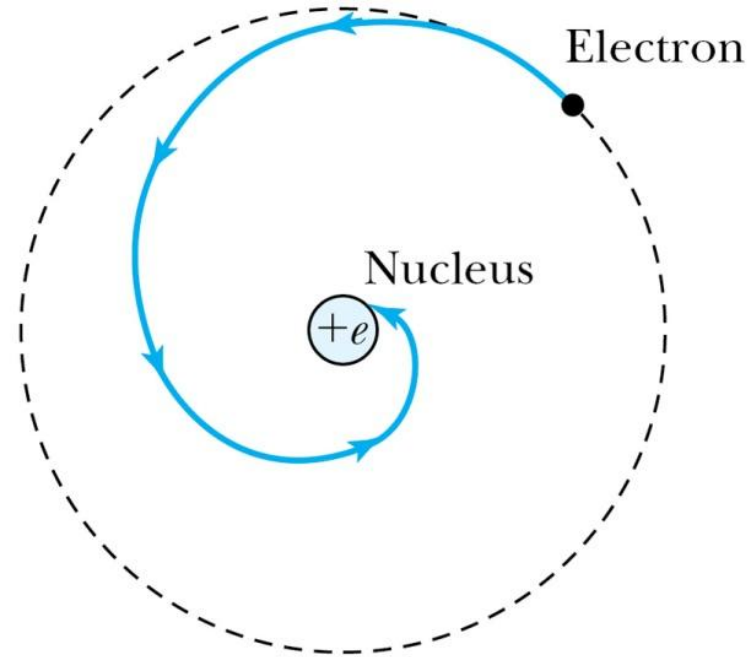


El modelo planetario falla

De la teoría electromagnética clásica, una carga eléctrica acelerada emite energía (radiación electromagnética), lo que significa que la energía total debe disminuir. Por lo tanto, el radio r debe disminuir rápidamente. Esta predicción fue llamada “la espiral de la muerte”.

La física llegó a un punto de inflexión en 1900 con la hipótesis de Planck del comportamiento cuántico de la radiación.

Serán estas nuevas ideas las que ajustarán con las evidencias empíricas.



Modelo atómico de Bohr

Bohr perfeccionó el modelo atómico de Rutherford utilizando los conceptos de la emisión de radiación de Planck y del fotón de Einstein.

Planck postuló que la emisión de radiación EM se produce en forma de "paquetes" o "cuantos" de energía (fotones). Esto significa que la radiación no es continua, es decir, los átomos no pueden absorber o emitir cualquier valor de energía, sino sólo unos valores discretos. La energía correspondiente a cada "cuanto" es $E = h \cdot \nu$ donde ν es la frecuencia [Hz] y $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

Para el caso del átomo de H, disponía de datos experimentales precisos dados por la fórmula de Rydberg.

El Átomo de Hidrógeno contiene un electrón y un núcleo que consiste de un sólo protón.

Conserva las ideas del **modelo planetario**, un núcleo central de protones con electrones orbitando circularmente alrededor de él, pero con ciertas restricciones respecto de la Física Clásica.

Niels Bohr



Bohr in 1922

Born	Niels Henrik David Bohr 7 October 1885 Copenhagen , Denmark
Died	18 November 1962 (aged 77) Copenhagen , Denmark
Nationality	Danish
Fields	Physics
Institutions	University of Copenhagen University of Cambridge Victoria University of Manchester

Postulados de Bohr

Primer Postulado:

El electrón se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb entre el electrón y el núcleo, sujeto a la mecánica clásica.

Segundo Postulado:

Las únicas órbitas posibles para el electrón son las que tienen un impulso angular (L) que es un múltiplo entero de $h/2\pi$.

$L = n\hbar$, $n = 1, 2, 3, \dots$ n es el número cuántico principal

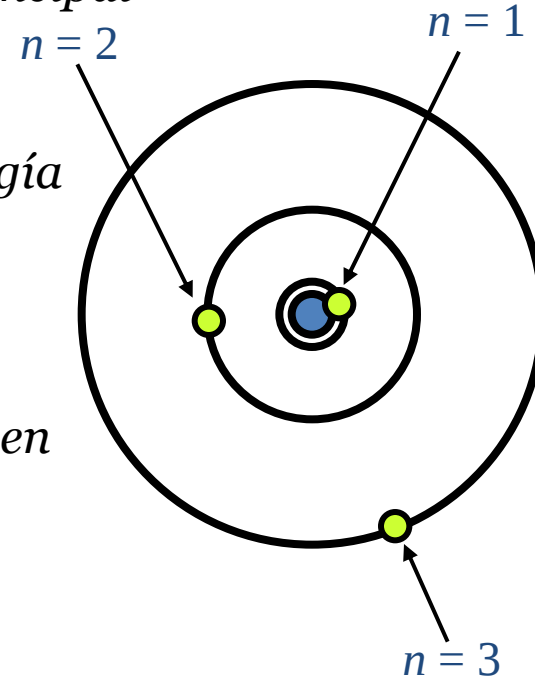
Tercer postulado:

A pesar de estar constantemente acelerado en estas órbitas, el electrón no radia energía electromagnética. Entonces, su energía E permanece constante.

Cuarto postulado:

Se emite radiación electromagnética si un electrón que estaba en una órbita de energía total E_i cambia su movimiento discontinuamente a otra órbita con energía total E_f . La frecuencia de la radiación emitida es

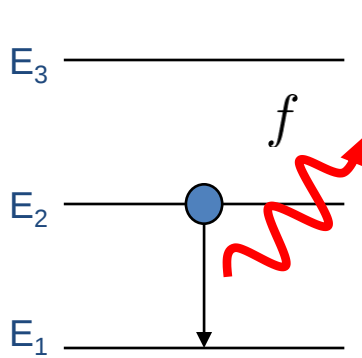
$$f = \frac{E_i - E_f}{h}$$



Emisión y absorción de energía

Mientras electrón se mueve en esas órbitas estacionarias no radia energía, sólo lo hace cuando cambia de órbita. Si pasa de una órbita externa (de mayor energía) a otra más interna (de menor energía) emite energía, y la absorbe cuando pasa de una órbita interna a otra más externa.

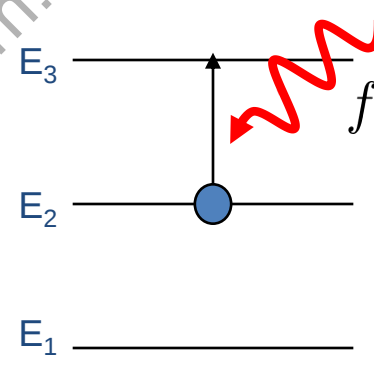
Emisión de energía



Cambio de energía en el átomo
 $\Delta E = E_f - E_i = E_1 - E_2 < 0$
El átomo pierde (irradia) energía

Energía del fotón emitido
 $E = |\Delta E| = hf$

Absorción de energía



Cambio de energía en el átomo
 $\Delta E = E_f - E_i = E_3 - E_2 > 0$
El átomo gana (absorbe) energía

Energía del fotón absorbido
 $E = |\Delta E| = hf$

Radio de Bohr

El momento angular cuantificado es:

$$L = mvr = n\hbar \quad \longrightarrow \quad v = \frac{n\hbar}{mr} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\Rightarrow v^2 \stackrel{\star}{=} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mr} = \left(\frac{n\hbar}{mr} \right)^2$$

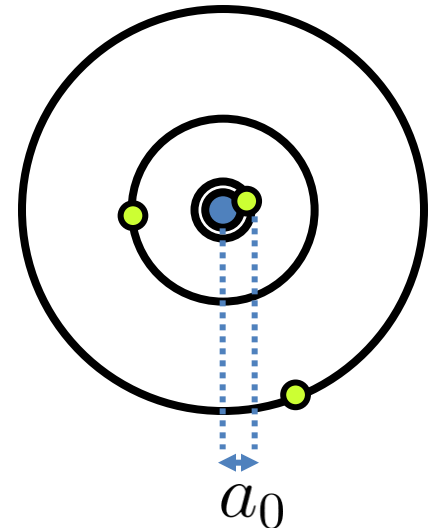
$$\longrightarrow r_n = n^2 a_0$$

Sólo las órbitas con
radios r_n son posibles

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

Radio de Bohr: radio del átomo
de hidrógeno (en su punto de más
baja energía).

$$a_0 \sim 0,5292 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$



El diámetro del átomo de hidrógeno es entonces:

$$d_H = 2r_1 = 2a_0 \sim 10^{-10} \text{ m}$$

Energía total del electrón en el átomo de hidrógeno

La energía potencial electrostática (Física II) del electrón ligado a una distancia r del núcleo es

$$U = - \int_r^\infty \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

La energía cinética del electrón puede evaluarse con el resultado del cuadrado de la velocidad

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2r} \quad \star$$

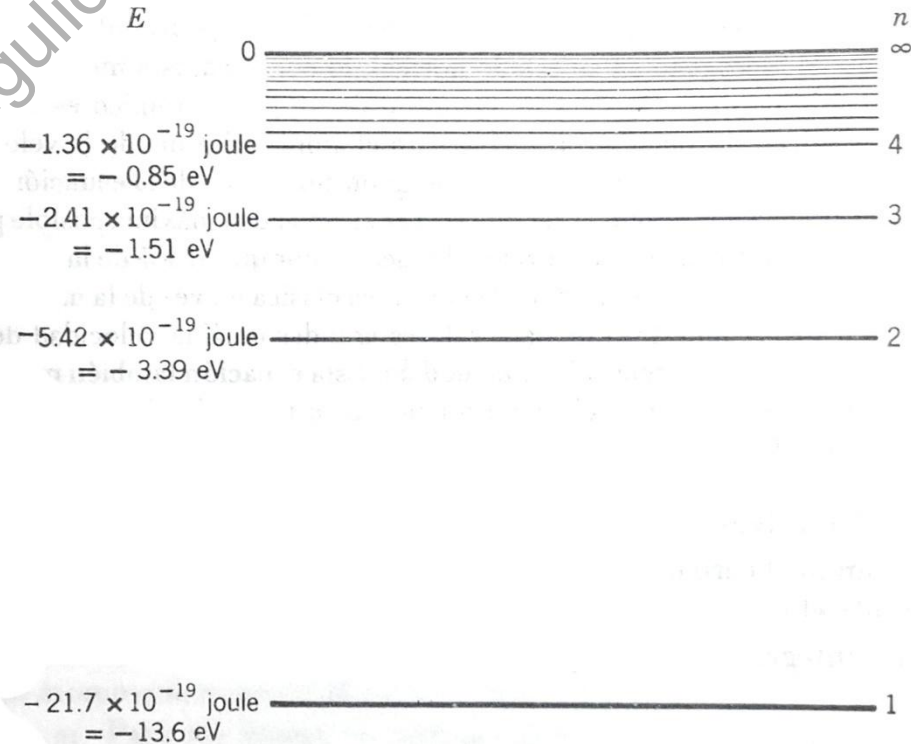
➔ $E = K + U = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2r}$

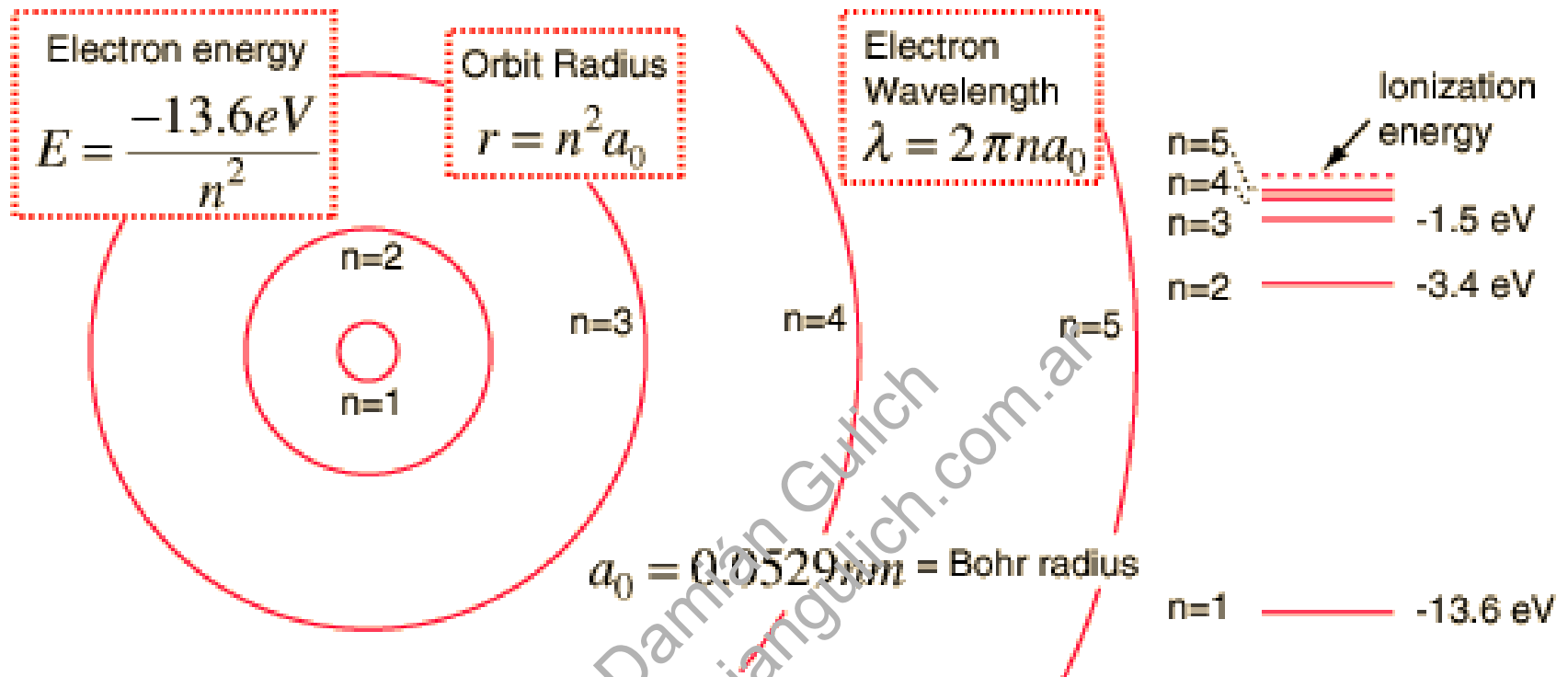
$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

$$E_n = - \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{E_0}{n^2}$$

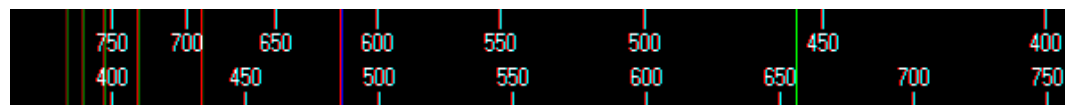
$$E_0 = 13,6 \text{ eV}$$

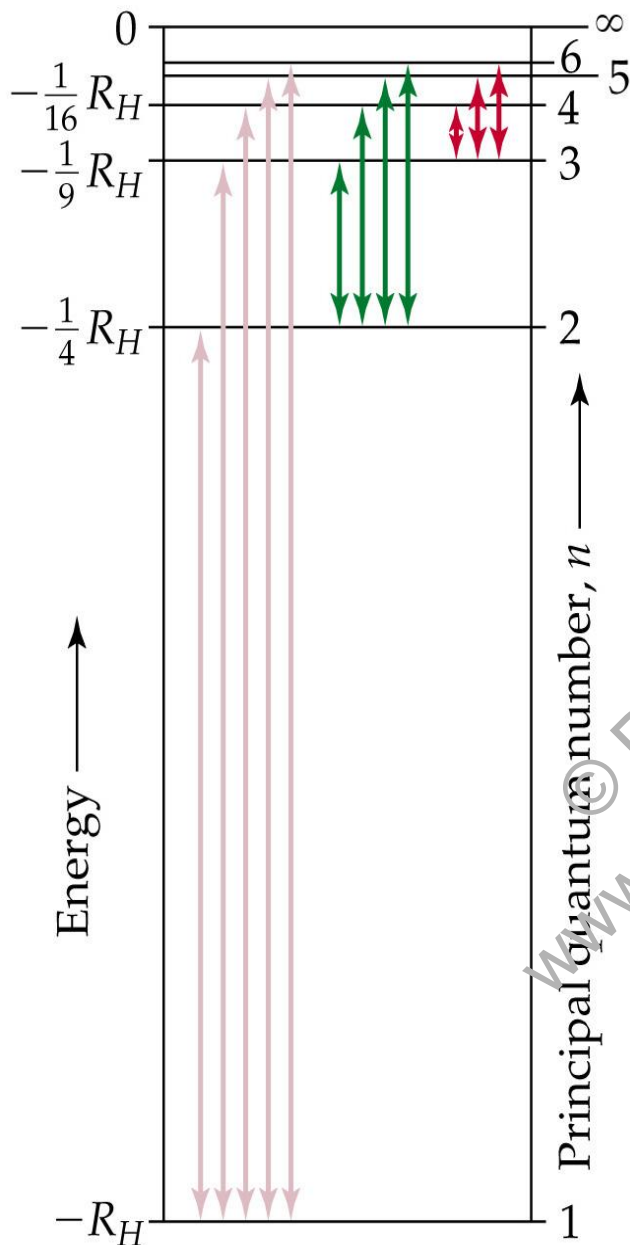
$$1 \text{ eV} \equiv 1,60218 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$





Como la energía está cuantizada, la luz emitida o absorbida por un átomo aparece en el espectro como una línea.





Normalmente el electrón en un át. hidrógeno se encuentra en la órbita más próxima al núcleo ($n=1$). Esta es la energía permitida más baja, o el **estado fundamental**.

Cuando el electrón adquiere un cuanto de energía pasa a un nivel más alto ($n=2, 3, \dots$) se dice entonces que el átomo se encuentra en un **estado excitado**.

En un estado excitado el átomo no es estable y cuando un electrón regresa a un nivel inferior emite una cantidad definida de energía en forma de un cuanto de luz (fotón) con una longitud de onda y una frecuencia características y produce una línea espectral característica.

Espectro de emisión del átomo de hidrógeno

La emisión de luz se produce cuando el átomo se encuentra en un estado excitado y se degrada a un estado inferior de energía ($n_i \rightarrow n_f$).

$$hf = E_i - E_f$$

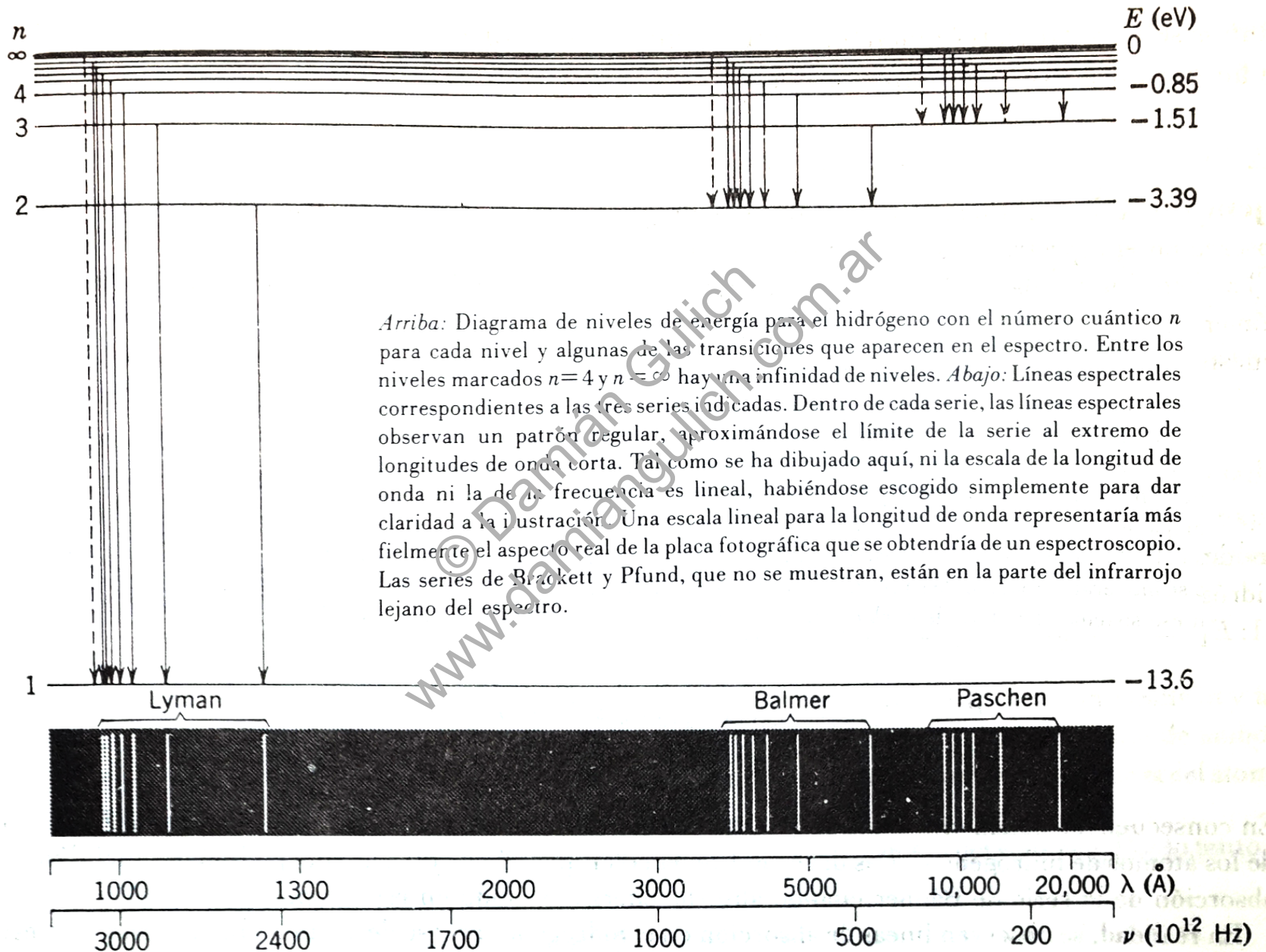

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{f}{c} = \frac{hf}{hc} = \frac{E_i - E_f}{hc} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$


$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$R_\infty = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c}$$

Constante de Rydberg

Espectro de emisión del átomo de hidrógeno



Limitaciones del modelo de Bohr

El modelo de Bohr fue un gran paso en la nueva teoría cuántica, pero tenía sus limitaciones.

Fallos

1. Sólo funciona para átomos con un solo electrón capaz de saltar entre niveles (átomos "hidrogenoides").
2. No se pudo representar las intensidades o la estructura fina de las líneas espectrales (por ejemplo, en los campos magnéticos).
3. No pudo explicar la unión de los átomos en las moléculas.

Correcciones al modelo de Bohr

Correcciones al modelo de Bohr: números cuánticos

En el modelo original de Bohr se precisa un único parámetro (el número cuántico principal, n), que se relaciona con el radio de la órbita circular que el electrón realiza alrededor del núcleo, y también con la energía total del electrón. Los valores que puede tomar este número cuántico son los enteros positivos: 1, 2, 3...

Sin embargo, pronto fue necesario modificar el modelo para adaptarlo a la masa nuclear finita y a los nuevos datos experimentales, con lo que se introdujeron otros tres números cuánticos para caracterizar al electrón:

- Número cuántico secundario o azimutal (ℓ)
- Número cuántico magnético (m)
- Número cuántico del espín (s)

Principio de correspondencia (1923)

Las predicciones de la teoría cuántica para el comportamiento de cualquier sistema físico deberán corresponder a las predicciones de la física clásica en el límite en el cual los números cuánticos que especifican el estado del sistema se hacen muy grandes.

¡Gracias!

© Damián Gulich
www.damiangulich.com.ar