

La **Física Cuántica** nos permite comprender las propiedades microscópicas del Universo. Las propiedades de la materia son asombrosas en las moléculas, los átomos o las partículas subatómicas, hasta el punto de que debemos modificar nuestro modo de razonar. Lo que se considera normal en nuestras dimensiones no lo es en el mundo de lo muy pequeño o de lo muy grande.

Los trabajos de Max Planck, Niels Bohr, Albert Einstein y otros científicos proporcionaron una nueva imagen de la Naturaleza. Fueron los pioneros de lo que hoy denominamos Física moderna. La Mecánica Cuántica, la Relatividad y la Física Nuclear son la base actual de nuestra comprensión del mundo.

La Física Cuántica ha producido una verdadera revolución científica, pero que los conceptos de la **Física Clásica** siguen siendo esencialmente correctos, siempre que los cuerpos en consideración sean mucho mayores que los átomos y moléculas, y que sus velocidades sean mucho menores que la de la luz.

Tres hechos fundamentales obligan a revisar las leyes de la Física Clásica, y dan lugar al nacimiento de la Física Cuántica:

La **radiación térmica**.

El **efecto fotoeléctrico**.

El carácter **discontinuo** de los **espectros** atómicos.

Radiación térmica. Hipótesis de Planck

La radiación térmica de un cuerpo es la energía electromagnética que emite debido a su temperatura. Cualquier cuerpo, cuando se calienta, irradia energía: a medida que aumenta su temperatura, la radiación emitida se hace visible, primero emite luz de color rojo, luego el rojo se hace más amarillo, y finalmente el color es rojo-blanco si la temperatura es suficientemente alta.

Para explicar este comportamiento, a finales del siglo XIX se propuso el modelo del **cuerpo negro**: aquel que es capaz de absorber todas las radiaciones que llegan a él, y por tanto, de emitir todas las longitudes de onda.

Este es un modelo ideal, pues ningún cuerpo se comporta como tal.

El color de este cuerpo no es en realidad negro, sino rojo, amarillo e incluso rojo-blanco si la temperatura es suficientemente elevada.

Estos resultados no se pueden explicar mediante la Física Clásica, por lo que se tuvo que buscar una nueva interpretación teórica de estos hechos. Fue Max Planck (1858-1947) quién sentó, en 1900, las bases de una nueva teoría, la Teoría Cuántica.

En esta los átomos se comportan como osciladores, emitiendo o absorbiendo energía en la forma:

$$E = n \cdot h \cdot f$$

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

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

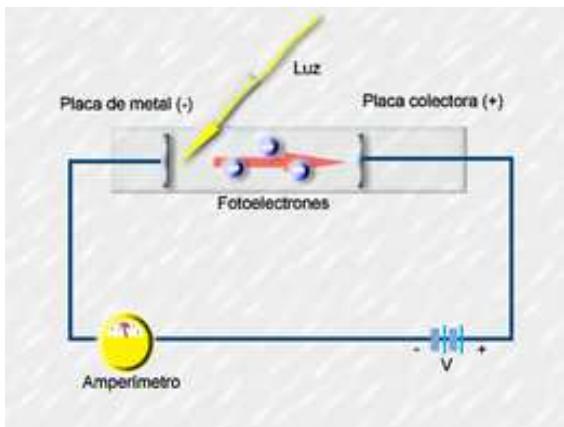
f es la frecuencia de la radiación

Al introducir n, **número cuántico**, tenemos que la energía está cuantizada.

Efecto fotoeléctrico

Hertz comprobó experimentalmente que cuando un metal era iluminado con una luz adecuada, este emitía electrones. Pero la explicación del fenómeno fue dada por Einstein (1905). La base de esta se encuentra en la hipótesis: “en las interacciones con la materia, una onda electromagnética de frecuencia f puede ser considerada como un conjunto de partículas (los fotones), cada uno con una energía $E = h \cdot f$ ”.

Veamos la interpretación total del fenómeno:



La energía electromagnética ($h \cdot f$) debe ser suficiente para romper los enlaces entre los restos positivos metálicos y los electrones, y además, acelerar a estos (los electrones adquieren una energía cinética determinada):

$$hf = W_{\text{ext}} + E_{c_{\text{máx}}}$$

$$W_{\text{ext}} = q \cdot V_{\text{ext}}$$

Se requiere una energía electromagnética mínima para romper los enlaces: $E = h \cdot f_0$. Siendo esta la llamada energía umbral (y f_0 es la frecuencia umbral). Esta toma el mismo valor que el trabajo de extracción, por lo que la ecuación que caracteriza el efecto fotoeléctrico toma la forma:

$$h \cdot f = h \cdot f_0 + E_{c_{\text{máx}}} \implies h \cdot f = h \cdot f_0 + \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2$$

Conclusiones:

1. La energía cinética máxima de los electrones se obtiene deteniendo estos antes de que alcancen el ánodo:

$$W_{\text{frenado}} = E_{c_{\text{máx}}} \implies q \cdot V_f = E_{c_{\text{máx}}}$$

2. Un aumento de la intensidad de la luz provoca que se arranque un mayor número de electrones.
3. A mayor energía del fotón incidente (sobre el metal), por encima de la energía umbral, mayor es la energía cinética máxima que adquieren los electrones.

Espectros atómicos. Modelos atómicos

Hemos visto la incapacidad que tenía la teoría atómica de Dalton para explicar la ley de los volúmenes de combinación de Gay-Lussac. Posteriormente veremos que el átomo es en realidad divisible, junto a la existencia de isótopos y la radiactividad.

Sin embargo, anteriormente a estos fenómenos fue el descubrimiento de nuevos elementos. Fraunhofer (XIX), fabricante de vidrio, descubrió que la luz producida al arder determinadas sustancias, al atravesar un prisma, daba lugar a unas líneas brillantes características:



Esto llevó a Kirchoff y Bunsen a estudiar el fenómeno: cada elemento químico da lugar a una serie de líneas, diferentes de la de otro. A dicho sistema de líneas se le llamó espectro de emisión del elemento, y al aparato, espectroscópio. Al analizar la luz que incide sobre una determinada sustancia gaseosa, se encuentra una serie de líneas oscuras sobre fondo brillante, es el llamado espectro de absorción:



Se observó que para un mismo elemento químico, sus rayas brillantes de su espectro de emisión coinciden con las oscuras de su espectro de absorción. En ambos casos deben estar implicados los mismos fenómenos (en sentidos contrarios), y sugiere la existencia de una estructura interna en el átomo.

De esta forma, se puede definir espectro como: "la descomposición de la luz (radiación) que emite o absorbe una determinada sustancia."

El estudio de los espectros permitió descubrir muchos elementos desconocidos hasta entonces. Además, se obtuvo expresiones matemáticas (1), y posteriormente se dieron explicaciones teóricas (2), modelos atómicos.

(1) Espectro de hidrógeno.

En 1885, Balmer, encontró una expresión que relaciona la longitud de onda (λ) de las rayas espectrales en el espectro de emisión del hidrógeno en la zona visible:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \begin{cases} R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \\ n = 3, 4, 5, \dots \end{cases}$$

Posteriormente, Lyman, Paschen y Brackett obtuvieron expresiones semejantes:

a) Lyman (ultravioleta).

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3, 4, 5, \dots$$

b) Paschen (infrarrojo).

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, 6, \dots$$

c) Brackett (infrarrojo).

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6, 7, \dots$$

En general:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \begin{cases} n_1 = 1, 2, 3, \dots \\ n_2 = (n_1 + 1), (n_1 + 2), \dots \end{cases}$$

Expresión puramente experimental, pero me dice que los espectros están íntimamente ligados a la estructura de la materia ==> átomo es divisible, pues los espectros me indican que el átomo debe poseer una estructura interna ordenada.

(2) Explicación de los espectros. Modelos atómicos.

Esta llegó una vez conocida la existencia de los electrones (-) y del núcleo atómico (+).

a) Modelo de Rutherford.

Este en 1913 descubrió al hacer incidir un haz de partículas α (núcleos de helio) sobre láminas metálicas muy delgadas, que la mayor parte atravesaban la lámina sin desviarse y sólo una pequeña porción se desviaba apreciablemente, es decir, rebotaban.

Rutherford supuso que el átomo estaba formado por un núcleo, que ocupaba una parte muy pequeña del volumen total del átomo, cargado positivamente, y donde se concentra la masa del átomo; y la corteza, que ocupa la mayor parte del volumen del átomo, en la que giran los electrones, alrededor del núcleo, como en un sistema planetario, y en un número suficiente para contrarrestar la carga positiva del núcleo.

b) Modelo atómico de Bohr.

Antes de introducirnos en este modelo, vamos a realizar una reflexión del modelo anterior (Rutherford): este nos sugiere la presencia de electrones (-) en la corteza y de protones (+) en el núcleo, sin embargo, las experiencias de Rutherford predice la existencia de otra partícula en el núcleo, de masa parecida al protón y de carga cero; experiencias posteriores demostraron su existencia, llamándose a dicha partícula, neutrón.

Además, apareció los conceptos de número atómico (Z) y número másico (A):

$Z \rightarrow$ número de e^- en un átomo neutro = n° de p^+ en el mismo.

$A \rightarrow$ n° de p^+ + n° de neutrones (N), en un átomo.

$$A = Z + N$$

En el modelo atómico de Rutherford los e^- giran alrededor del núcleo con m.r.u.a. ==> según la mecánica clásica, una carga eléctrica en movimiento va perdiendo energía, hecho que no se ha observado nunca en el caso del electrón.

El modelo atómico de Bohr se basa en el modelo de Rutherford, pero Bohr introduce dos postulados (verdades no demostradas):

- b.1)** "Los electrones sólo pueden girar alrededor del núcleo en determinadas órbitas (trayectoria exacta del electrón), órbitas en las que el momento angular (L) del electrón sea múltiplo entero de $h / 2\pi$ ":

$$L = n \cdot \frac{h}{2\pi} \quad \left\{ \begin{array}{l} n = \text{número entero} \quad (\text{número cuántico}) \end{array} \right.$$

Cuando los electrones se encuentran en dichas órbitas no radian energía, recibiendo éstas el nombre de órbitas estacionarias.

- b.2)** Se basa en la ley de Planck:

$$E = n \cdot h \cdot f \quad h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J.seg} \quad (\text{cte de Planck})$$

"La energía absorbida o emitida por un átomo equivale a un número entero de cuantos (n), siendo la energía de cada cuanto: $E = h \cdot f$ ".

La energía del electrón en cada órbita viene dada según Bohr por:

$$E = - A \frac{I}{n^2} \left\{ \begin{array}{l} n \equiv n^o \text{ entero} \\ A = 2,17 \cdot 10^{-18} \text{ J} \end{array} \right.$$

Supongamos el tránsito: órbita con energía $E_1 \rightarrow$ órbita con energía E_2

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h \nu \quad (\text{según Planck})$$

$$\Delta E = - A \frac{1}{n_2^2} - \left(- A \frac{1}{n_1^2} \right) ==> \Delta E = A \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = h \nu$$

Esta ecuación es parecida a la obtenida experimentalmente en los fenómenos espectrales.
Conclusiones que se deducen del modelo atómico de Bohr:

Mientras el 1^{er} postulado no contradice la mecánica clásica, el 2^{do} si lo hace, y me dice que no sólo la materia es discontinua, sino que también lo es la energía => la energía de los electrones está cuantizada (los electrones sólo pueden tomar determinados valores de la energía, pero no todos). Esto nos lleva al concepto de órbitas permitidas: aquellas órbitas en las que el electrón posee la energía adecuada para que el átomo se mantenga estable.

Por último, tenemos que decir, que este modelo sólo puede explicar al átomo de hidrógeno (H) y átomos hidrogenoides (con un sólo electrón), pero no es capaz de explicar los átomos con más de un electrón.

c) **Modelo mecánico-cuántico del átomo. Números cuánticos.**

Este modelo requiere el conocimiento de dos adelantos en la Física actual:

c.1) **La dualidad onda-corpúsculo de De Broglie.**

Supone este doble comportamiento de la materia, onda o corpúsculo, según las circunstancias. Es decir, las partículas microscópicas no pueden entenderse sin considerar en ellas un carácter de ondas.

Para ello relacionó ambas características en una ecuación:

$$\begin{array}{ccc} \text{La Luz} & & \text{Partículas} \\ E = m \cdot c^2 & \Rightarrow & E = m \cdot v^2 \\ \\ \left. \begin{array}{l} E = p \cdot v = h \cdot f \\ v = \lambda \cdot f \end{array} \right\} & m \cdot v^2 = h \frac{v}{\lambda} & \Rightarrow \\ \\ \lambda = \frac{h}{m \cdot v} & \left. \begin{array}{l} \lambda \rightarrow \text{característica de las ondas.} \\ m \rightarrow \text{característica de los cuerpos.} \end{array} \right. & \end{array}$$

La idea de De Broglie de que toda partícula en movimiento lleva asociada una onda, y de que a toda onda electromagnética se puede asociar unos cuantos de energía, tuvo plena confirmación en 1926, cuando Davisson y Germer consiguieron la difracción de un haz de electrones, observándose que la longitud de onda de estos coincidía con la predicha por De Broglie. Esto cierra la polémica en torno a la naturaleza de la luz.

c.2) **Principio de incertidumbre de Heisenberg.**

Los resultados obtenidos por De Broglie dieron un vuelco definitivo a la concepción física de la realidad. En 1926, **Schrödinger** desarrolló una teoría matemática de las propiedades atómicas, en la que la cuantización que corresponde a los niveles energéticos está relacionada con los valores permitidos que corresponden a las longitudes de onda del electrón (**Mecánica Ondulatoria**). De esta teoría se deduce una ecuación (de Schrödinger) que debería explicar el comportamiento de los electrones en átomos y moléculas. Sin embargo, esta ecuación sólo ha podido resolverse con exactitud en átomos de pocos electrones, debido a la dificultad que entraña cuando son muchos los electrones que orbitan en torno al núcleo.

La dificultad de esta teoría, junto a la de De Broglie, es compatibilizar el comportamiento corpuscular (de partícula) y ondulatorio del electrón.

Heisenberg en 1927 desarrolló una nueva teoría, **Mecánica de Matrices**, en donde se da una serie de reglas para calcular las frecuencias e intensidades de las líneas espectrales, utilizando sólo relaciones entre magnitudes observables. Esta llegaba a los mismos resultados que la mecánica de Schrödinger.

Posteriormente se vio que ambas teorías eran matemáticamente equivalentes: dos formas alternativas de una única teoría, la **MECÁNICA CUÁNTICA**.

En su teoría, Heisenberg postuló que ciertas propiedades de las partículas no pueden ser medidas simultáneamente con un elevado grado de exactitud. Así, cuanto mayor sea la precisión en la medida de una de las magnitudes, con menor precisión mediremos la otra, y viceversa.

Este hecho se conoce con el nombre de **PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG**: "es imposible medir con precisión simultáneamente la posición y la cantidad de movimiento de una partícula, ya que el producto de sus imprecisiones es siempre mayor que una constante, función de la constante de Planck." Matemáticamente se expresa:

$$\delta x \cdot \delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

Esta indeterminación está presente siempre en la realidad en que nos movemos (vivimos), es propia del mundo físico en el que nos encontramos, tanto a un nivel microscópico (electrones, átomos...) como macroscópico. Sin embargo, el valor tan pequeño de la constante de Planck explica que sólo deba ser tenida en cuenta en el mundo microscópico.

Este principio se aplica, también, a la energía y al tiempo:

$$\delta E \cdot \delta t \geq \frac{h}{2\pi}$$

Este principio hace de la física una ciencia mucho menos determinista de lo que cabría esperar, habituados a las precisiones (aparentemente) del mundo macroscópico.

Estas teorías, junto a la solución de la ecuación de onda de Schrödinger, son la base del modelo mecano-cuántico.

- Este modelo debe explicar lo que no es capaz de hacer el de Bohr:
- * Átomos polielectrónicos.
- * El "porque" se desdoblan las rayas espectrales obtenidas en los primeros espectros, cuando se utilizan espectroscópios de mayor poder resolutivo.
- * Efecto Zeeman: "un átomo sometido a un campo magnético da lugar a un espectro más complicado que el del átomo en ausencia de dicho campo."

Este modelo explica satisfactoriamente estos hechos. Para ello, basándose en las teorías anteriores, considera al electrón no sólo como una partícula, sino, también, como una onda. Es decir, considera la dualidad onda-corpúsculo del electrón.

La resolución de la ecuación de Schrödinger, además, desprecia el concepto de órbita, apareciendo un nuevo concepto en su lugar, el de Orbital:

"Probabilidad matemática de encontrar al electrón en una determinada región del espacio." Finalmente, con Bohr apareció sólo un número cuántico (n), en esta teoría aparecen otros:

* Número cuántico principal (n): n = 1, 2, 3...

Representa el nivel energético del electrón, dándonos una idea de la distancia promedio del electrón al núcleo.

* Número cuántico de momento angular (l): $l = 0, 1, 2, 3$, hasta $(n - 1)$.

Nos indica la forma del orbital en el que se encuentra el electrón:

$l = 0 \rightarrow$ orbital de tipo S (esférico).

$l = 1 \rightarrow$ orbital de tipo p.

$l = 2 \rightarrow$ orbital de tipo d.

$l = 3 \rightarrow$ orbital de tipo f.

Este número cuántico contribuye un tanto a la energía, junto al $n \Rightarrow$ energía orbitales $S \neq eg. orbitales p \neq eg. orbitales d \dots$

* Número cuántico magnético (m): $m = -l \dots 0 \dots +l$.

Nos indica la orientación de cada orbital.

* Número cuántico de spin: $s = \pm 1/2$.

Caracteriza un momento angular intrínseco del electrón.

Finalmente, hemos de tener en cuenta los siguientes principios:

- 1) **Principio de exclusión de Pauli.** En un átomo no pueden existir dos electrones con los 4 n^{os} cuánticos iguales. Es decir, en un orbital habrá como máximo dos electrones, con espines contrarios.
- 2) **Principio de Hund o de la máxima multiplicidad.** Los orbitales degenerados (aquellos orbitales con igual n° cuántico n e igual n° cuántico l) tienen que ser ocupados cada uno por un electrón antes de ser apareados en cualquiera de ellos. Los espines de estos, además, deben ser iguales.