

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ELEMENTOS

MODELO DE BOHR (Y SUS COMPLEMENTOS): 1913-1926

Números cuánticos y orbitas planas (círculos y elipses)

MODELO MODERNO

Números cuánticos y orbitales (nubes de probabilidad 3D)

Modelo de BOHR

Parte de lo conocido a la fecha.

Núcleo. Electrones. Varios modelos teóricos.

Ideas nuevas (fotones, ecuación de Planck $E = h\nu$)

Experimento a explicar: espectros de elementos, particularmente.

Problema inicial a analizar

Espectro del H ($Z=1$)

Estructura electrónica del H.

Conceptos del modelo de Bohr

Modelo planetario, de órbitas planas.

Órbitas estacionarias. Un hecho experimental. Un postulado de la teoría.

Equilibrio de fuerza centrífuga y fuerza electrostática

Electrón: carga e negativa y masa m.

Núcleo: carga e positiva

Variables: radio de la órbita y velocidad del electrón.

La energía total del electrón se escribe como la suma de la energía cinética y de la energía electrostática.

Geometría inicialmente supuesta: circular

Idea nueva: la cantidad de movimiento está cuantificada (cuantificación previamente conocida en otros casos). Aparece el número cuántico principal n.

Con las ecuaciones disponibles es posible calcular, para cada órbita posible:

La energía electrónica, la velocidad electrónica y el radio de la órbita, en función del número n.

Estas magnitudes no se pueden medir directamente.

Hay que aprovechar la evidencia experimental disponible: los espectros de emisión y de absorción. Series de Balmer, Pushen, etc.

Al estado fundamental, los electrones de un gas de hidrógeno atómico están en el mínimo de energía, orbital $n=1$.

Al excitar el gas, tales electrones suben a niveles superiores (absorción de energía) y decaen (emisión) en forma dinámica.

Fijémonos en la emisión.

Los electrones saltan entre niveles cuánticos. Por ejemplo, si el electrón subió a un nivel $n=3$ y decae a un nivel $n=1$, al decaer se debe liberar una energía $E(n=3) - E(n=1)$. Todos estos valores de energía $E(n)$ son característicos del elemento.

La diferencia de energía asociada a la transición 3-1 es liberada en forma de radiación electromagnética de frecuencia ν . Además, por la relación de Plank, debe cumplirse que la energía de la radiación es igual a $h\nu$, donde h es la constante de Plank.

De modo que $E(3)-E(1)= h \nu(\text{transición } 3-1)$. Esa frecuencia $\nu(\text{transición } 3-1)$ es un valor característico del elemento y medible experimentalmente.

Este modelo predijo bien los colores (frecuencias) del espectro del hidrógeno. (Se entiende que sin aplicación de campos magnéticos externos).

Complementando el modelo de Bohr

Ya tenemos el primer número cuántico, n .

Pero fue necesario explicar el desdoblamiento de ciertas frecuencias en los espectros experimentales, ante la aplicación de un campo magnético.

Aparecen entonces subniveles de energía, los que se explican con otros números cuánticos.

$$E_{\text{total}} = E(n) + E(l) + E(m) + E(s)$$

Los tres primeros números cuánticos son números enteros propios del orbital, en tanto que el número s es propio del electrón. Así, los tres números n , l y m caracterizan completamente un orbital.

El primer sumando del segundo miembro es el mayor de todos.

Aquí nos interesa más la multiplicidad de cada nuevo número cuántico que el valor de la energía asociada.

n	1, 2, 3, ...	Principal
l	0, 1... $+(n-1)$	Secundario.
m	-1, ..., 0, ..., +1	Magnético.
s	+1/2, -1/2	Spin (fermiones)

En el modelo de Bohr mejorado (Sommerfeld, etc.) las órbitas son elipses con diferente excentricidad. Al tenerse distintas geometrías de órbitas electrónicas, se tienen distintos dipolos magnéticos asociados a la órbita. A lo anterior se asocian distintos términos complementarios de energía magnética, al interactuar las órbitas con un campo magnético externo.

Además, la orientación de esos dipolos en el campo también es no clásico. Así aparece el tercer número cuántico, m , relacionado con la orientación relativa en el espacio de las órbitas de un mismo tipo (n , l). Puede haber más de una orientación posible, a diferencia de, por ejemplo, el caso clásico de una brújula en el campo magnético terrestre.

Cada orbital queda definido por los tres primeros números cuánticos n , l y m . El cuarto número cuántico, del spin, se asocia al electrón mismo. Dentro de un orbital dado, el spin puede adoptar dos valores.

Limitaciones del modelo de Bohr

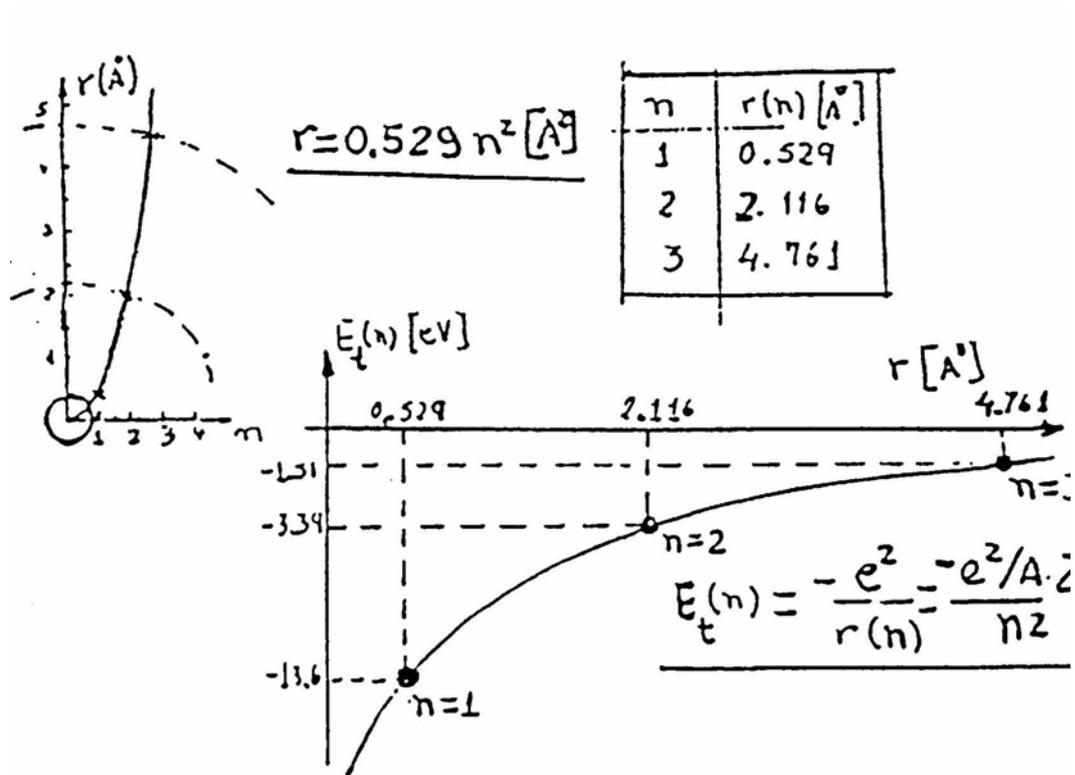
El modelo explica bien las frecuencias de las líneas espectrales del H, pero no las intensidades de las líneas espectrales. La intensidad de una línea se relaciona con la probabilidad de la transición electrónica correspondiente a esa línea, algo que el modelo no es capaz de abordar.

Cuando se pasa de $Z=1$ a Z superiores, el modelo falla.

Todo esto significó una gran preocupación para los físicos de la época.

Así es como pasamos al Modelo Moderno.

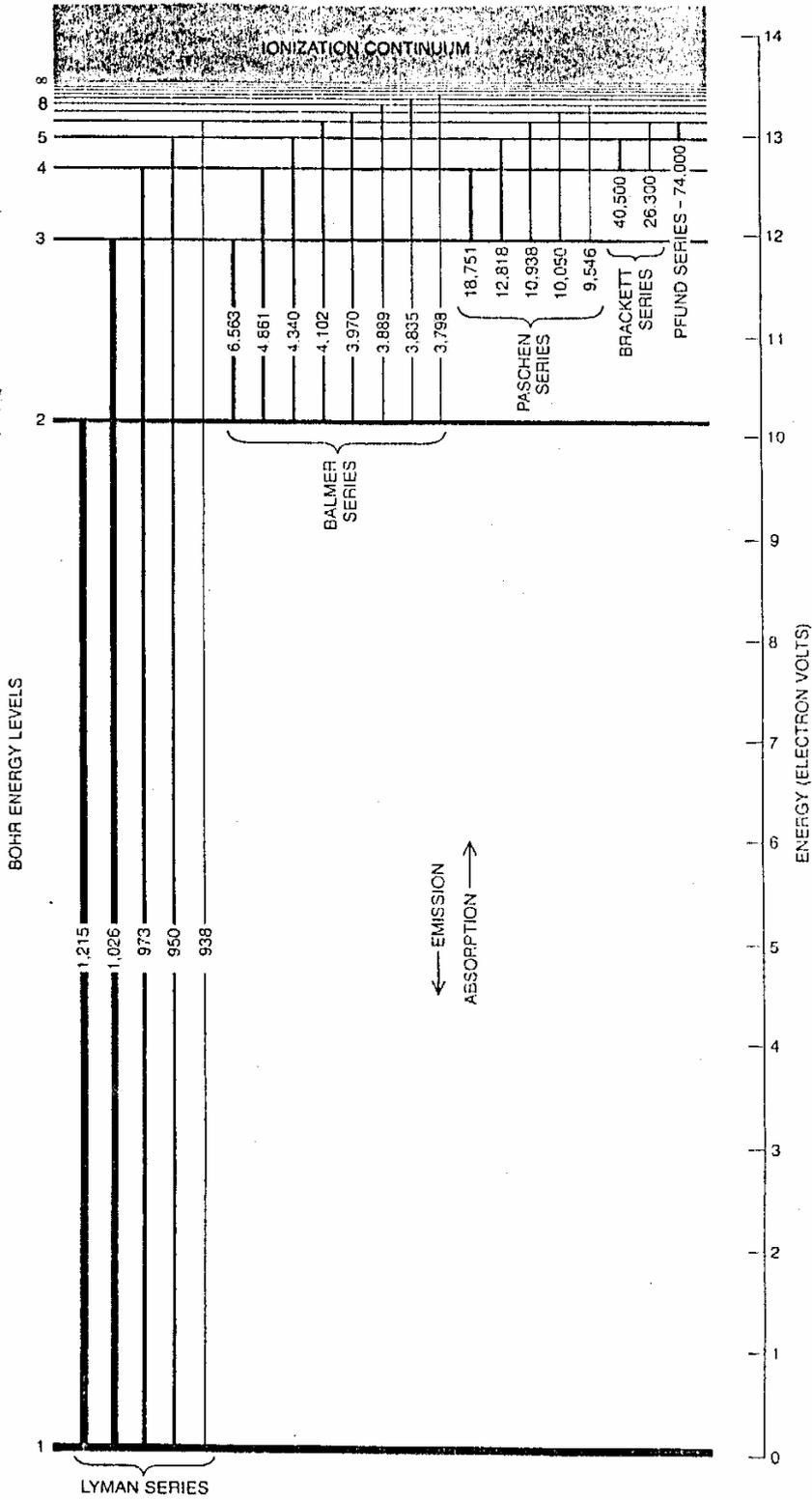
ALGUNOS RESULTADOS DEL MODELO DE BOHR



Resultados del modelo de Bohr para el Hidrógeno.

La energía total del electrón en una órbita y el radio de la órbita dependen del número cuántico principal, n .

Al aumentar n , se obtiene estados de mayor energía, a los cuales se asocian órbitas de mayor radio. Mientras menor es la energía, más estable es el estado; más ligado está el electrón al núcleo. Por convención, energías negativas significan atracción.



TRANSITIONS BETWEEN STATES of the hydrogen atom give rise to the line spectrum. Each state is designated by an integer, called the principal quantum number of the corresponding Bohr energy level. When an atom changes from one state to another, the difference in energy appears as a quantum of radiation. The energy of the quantum is directly proportional to the frequency of the radiation and inversely proportional to the wavelength. Absorption of radiation stimulates a transition to a state of higher energy; an atom falling to a state of lower energy emits radiation. The spectrum is organized into series of lines that share a lower level. Wavelengths are given in angstroms; the relative intensity of the lines is indicated by thickness.

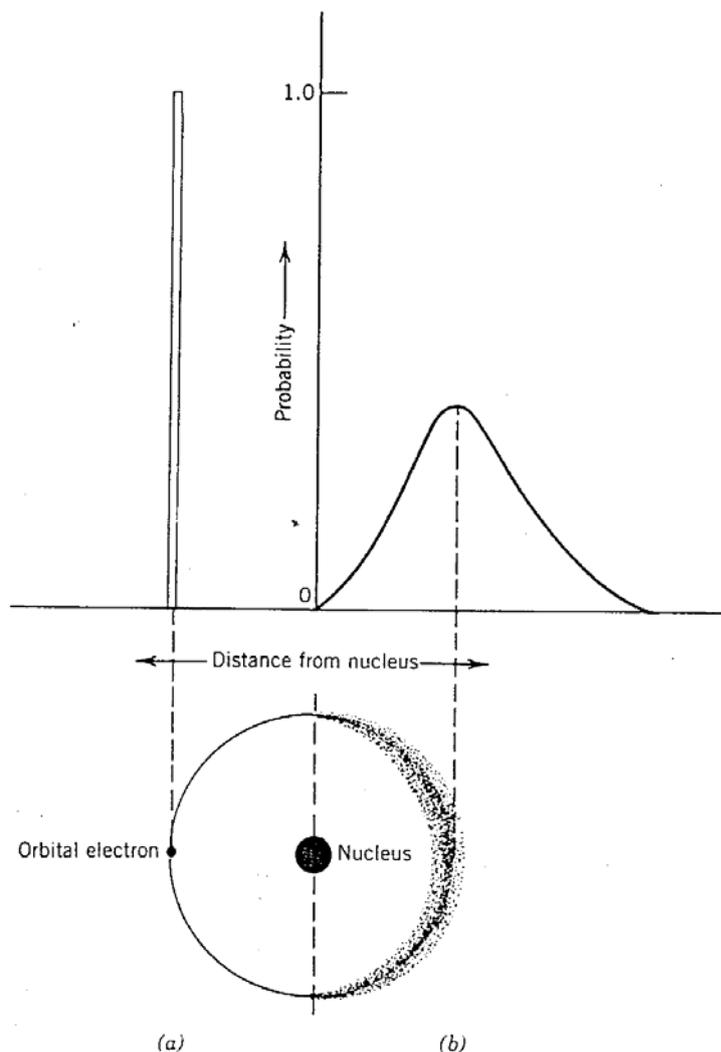


Figure 2.3 Comparison of the (a) Bohr and (b) wave-mechanical atom models in terms of electron distribution.

Representación de un orbital tipo s, según el modelo de Bohr (2D), a la izquierda, y según el modelo moderno (3D), a la derecha. En el modelo moderno aparece el concepto de nube de probabilidad. Para el caso de orbital s, la probabilidad de encontrar un electrón en un punto del espacio ($\psi^2 dV$) depende sólo de r (coordenada radial), es decir, el orbital tiene simetría esférica.

Un orbital s con uno o dos electrones (semilleno o lleno), presenta simetría electrónica esférica.