Átomo de Bohr 1 (Modelo de Bohr)

✓ Basándose en los espectros ópticos explicados anteriormente, Niels Bohr (1885 - 1963) hizo cuatro postulados que regían o determinaban la dinámica del movimiento del electrón alrededor de un átomo de hidrógeno o de átomos tipo hidrogenoide, es decir, los que tienen un solo electrón alrededor del núcleo.

✓ A partir de los postulados, Bohr pudo predecir con increíble exactitud no solo la serie de Balmer, conocida en ese entonces, sino también la existencia de las otras series del átomo de hidrógeno (mencionadas en documentos anteriores) desconocidas en ese entonces.

✓ El rápido avance de la mecánica cuántica para explicar sistemáticamente el mundo microscópico, empezó en 1913 con los postulados de Bohr para el átomo de hidrógeno.

Postulados de Bohr

1. Un electrón en un átomo se mueve en una orbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb entre el electrón y el núcleo, sujetándose a las leyes de la mecánica clásica.

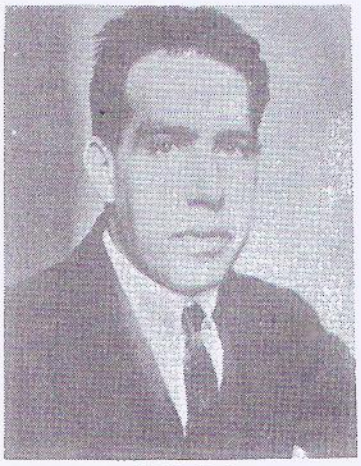
2. En lugar de una infinidad de órbitas que serian posibles en la mecánica clásica, para un electrón solo es posible moverse en una órbita para la cual su momento angular L es un múltiplo entero de $\hbar$.

3. A pesar de que el electrón está constantemente acelerado en cada una de estas órbitas "permitidas", no irradia ondas electromagnéticas como predice la electrodinámica clásica. Es decir, al no haber pérdida de energía, la energía total E es constante. Mediante este postulado se soluciona la dificultad señalada en relación a la estabilidad del átomo.

4) La radiación electromagnética emitida (o absorbida) por un átomo se produce cuando un electrón, que inicialmente se mueve en una orbita de energía total E_i, cambia su movimiento en forma discontinua para moverse en una órbita de energía total E_f. La frecuencia de la radiación emitida (o absorbida) ν es igual a $E_i - E_f = h\nu$ si $E_i > E_f$ (emisión de radiación) o $E_f - E_i = h\nu$ si $E_f > E_i$ (absorción de radiación.

Se dice tambien que el electrón "salta" de una orbita i (inicial) a una órbita f (final).

23.12. ATOMO DE BOHR



Nielhs Bohr

En base a las evidencias arrojadas por los espectros ópticos que hemos tratado en la sección anterior, el físico danés Niels Bohr (1885-1963) postuló algunas reglas muy novedosas que regían la dinámica del movimiento del electrón alrededor del núcleo de un átomo de hidrogeno o de átomos de tipo hidrogenoide, es decir, los que tienen un solo electrón alrededor del núcleo.

A partir de estos postulados, fundamentados sobre las evidencias experimentales de los espectros, Bohr pudo predecir con increíble exactitud no solo la serie de Balmer, conocida en ese entonces, sino también la existencia de las otras series del átomo de hidrógeno mencionadas en la sección anterior y desconocidas en ese entonces.

El acuerdo perfecto entre los postulados de Bohr y los experimentos mostró una vez por todas que, en el mundo microscópico, la mecánica clásica dejaba de ser una guía confiable. En efecto, las nuevas ideas que surgieron y el rápido avance de la mecánica cuántica, para explicar sistemáticamente el mundo microscópico, empezaron en 1913 con los postulados de Bohr para el átomo de hidrógeno. Estos postulados son los siguientes:

Postulados de Bohr

1) *La fuerza entre el núcleo y el electrón es de origen Culombiano. El electrón se mueve alrededor del núcleo en órbitas circulares, tal como lo prevé, la mecánica clásica.*

2) *De todas las órbitas circulares posibles alrededor del núcleo, las únicas permitidas son las órbitas cuyo momento angular L es un número* entero de la constante de Planck h dividida por el factor 2π ($\frac{h}{2\pi}$ se escribirá como $\hbar$ y se lee h-barra):

$$L = n\hbar \qquad (23.12 - 1)$$

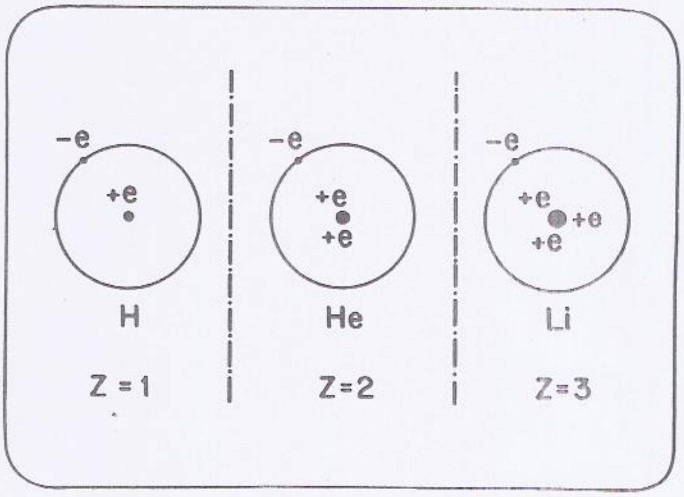
3) *A pesar que el electrón está constantemente acelerado, éste no irradia ondas electromagnéticas como predice la electrodinámica clásica. Es decir, al no haber pérdida de energía, la energía total* E *es constante en cada órbita permitida.* *

4) *La radiación electromagnética emitida (o absorbida) por un átomo se produce cuando un electrón salta de una órbita inicial permitida* i, *con energía* E_i, *a una órbita final permitida* f, *con energía* E_f. *La frecuencia de la radiación emitida (o absorbida)* ν *es igual a la cantidad* $E_i - E_f$ *dividida por la constante de Planck:*

$$E_i - E_f = h\nu \qquad (23.12 - 2)$$

A parte el postulado 1), que no se aparta del ámbito de la mecánica clásica, todos los demás tienen implícita la idea de *cuantizar* las diferentes cantidades físicas. El postulado tercero además hace desaparecer el problema de la estabilidad del electrón en su movimiento alrededor del núcleo.

Veamos como, a partir de estos postulados, se pueden explicar los espectros ópticos del átomo de hidrógeno. Además, para generalizar las consecuencias de los postulados de Bohr, consideraremos también átomos de tipo hidrogenoide (helio ionizado una vez, litio ionizado dos veces), tal como se indica en la figura siguiente.



Atomos hidrogenoides; Z es el número atómico

Durante el desarrollo que sigue supondremos que la masa nuclear sea tan grande que el núcleo se pueda considerar fijo en el origen de coordenadas y que esté constituido por una carga puntual $+Ze$, en donde Z es el número atómico. Alrededor de este núcleo orbita un electrón de carga $-e$ y masa m_e.

De acuerdo con el primer postulado de Bohr, el electrón se mueve en una órbita circular. Para esta órbita según la mecánica clásica debe

---

* Mediante este postulado se soluciona la dificultad señalada al final de la sección 23.10.

cumplirse que la fuerza de atracción culombiana resulte igual a la fuerza centrípeta (vea sección 11.2):

Carga del núcleo = Ze

Carga del electrón = -e

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m_e\frac{v^2}{r} \qquad (23.12 - 3)$$

en donde $\frac{v^2}{r}$ es la aceleración centrípeta del electrón, v su velocidad y m_e su masa; r es la distancia desde el origen de coordenadas (centro del núcleo) al electrón.

De acuerdo al postulado número 2 el momento angular resulta:

$$L = rm_e v = n\hbar \qquad n = 1,2,3,.... \qquad (23.12 - 4)$$

Cuantización del momento angular

$$v_n = \frac{n\hbar}{r_n m_e}$$

en donde n es un número entero que lleva el nombre de *número cuántico*.

Si sustituimos en la (23.12-3) el valor de la velocidad v dado por la ecuación (23.12-4), obtenemos para r:

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2 m_e} \qquad n = 1,2,3,... \qquad (23.12 - 5)$$

Hidrógeno

$$r_n = (0.53\ \text{Å})\, n^2$$

Otros átomos hidrogenoic[...]

$$r_n = \frac{(0.53\ \text{Å})\, n^2}{Z}$$

y para la velocidad v:

$$v_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{n\hbar} \qquad n = 1,2,3,... \qquad (23.12 - 6)$$

en donde r y v tienen un subíndice n ya que dependen del número cuántico n. A partir de la (23.12-6), se ve claramente porque hay que excluir el valor de n = 0.

Ejercicio:

a) *Explique por qué debemos excluir el valor de* n = 0, *en la fórmula* 23.12-6).

La relación (23.12-5) muestra que el radio de la órbita del electrón alrededor del núcleo está cuantizada (se puede ir de una a otra por saltos) y depende del cuadrado del número cuántico n. Para el átomo de hidrógeno, Z = 1, y para la primera órbita electrónica, el radio correspondiente será el dado por la ecuación (23.12-5) al poner n = 1 y Z = 1. Sustituyendo los valores de ϵ_0, $\hbar$, e y m_e, se obtiene para el radio el valor de $r_1 = a_0 = 0.53\ \text{Å}$.

Radio de Bohr para el átomo de hidrógeno

El radio r para n = 1 se denomina usualmente con la letra a_0 y se llama el radio de Bohr. El valor de a_0 está en muy buen acuerdo con el tamaño del átomo de hidrógeno.

Veamos a continuación cuál es la energía total que posee el electrón alrededor del núcleo.

Sabemos que la energía potencial E_p se escribe como (vea sección 11.8):

$$E_p(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

Por otro lado, la energía cinética E_c del electrón se escribe como:

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2$$

La energía total E del sistema, que en este caso coincide con la energía total del electrón por haber supuesto el núcleo en reposo, es igual a la energía potencial más la energía cinética del electrón:

$$v_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{n\hbar}$$

$$E = E_c + E_p$$

es decir:

$$r_n = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2 m_e}$$

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \qquad (23.12 - 7)$$

Sustituyendo el valor de v dado por la (23.12-6) y el valor de r dado por la (23.12-5) en la ecuación (23.12-7), se obtiene para la energía total E el valor:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad n = 1,2,3,... \qquad (23.12 - 8)$$

Cuantización de la energía

Hidrógeno

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2}(eV)$$

Otros átomos hidrogenoids

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} Z^2 (eV)$$

Como podemos ver, la energía total E_n es constante para cada órbita de radio r_n, como dice el postulado de Bohr; además está cuantizada y es inversamente proporcional al cuadrado del número cuántico n. El signo menos, en el valor de E_n, indica que el sistema es estable y que, para separar el electrón del núcleo, se necesita suministrarle energía.

La energía para n = 1 representa la energía más baja (recuerde que $E_n < 0 \forall n$) que puede poseer el electrón. Esta energía, la más negativa, representa el estado de base o estado **fundamental** del sistema y es además el estado más estable de éste.

Nuevamente, para el átomo de hidrógeno Z = 1, así que la energía del estado de base (n = 1) resulta:

$$E_1 = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2} = -13.59\, eV \qquad (23.12 - 9)$$

Estado fundamental del átomo de hidrógeno

que concuerda con el valor experimental de la energía de ionización del átomo de hidrógeno, es decir la energía necesaria para alejar el electrón hasta el infinito desde su órbita más cercana al núcleo, para que llegue allí con energía cinética cero.

La figura 23.12-1 representa los niveles de energía del electrón en las diferentes órbitas atómicas para el átomo de hidrógeno.

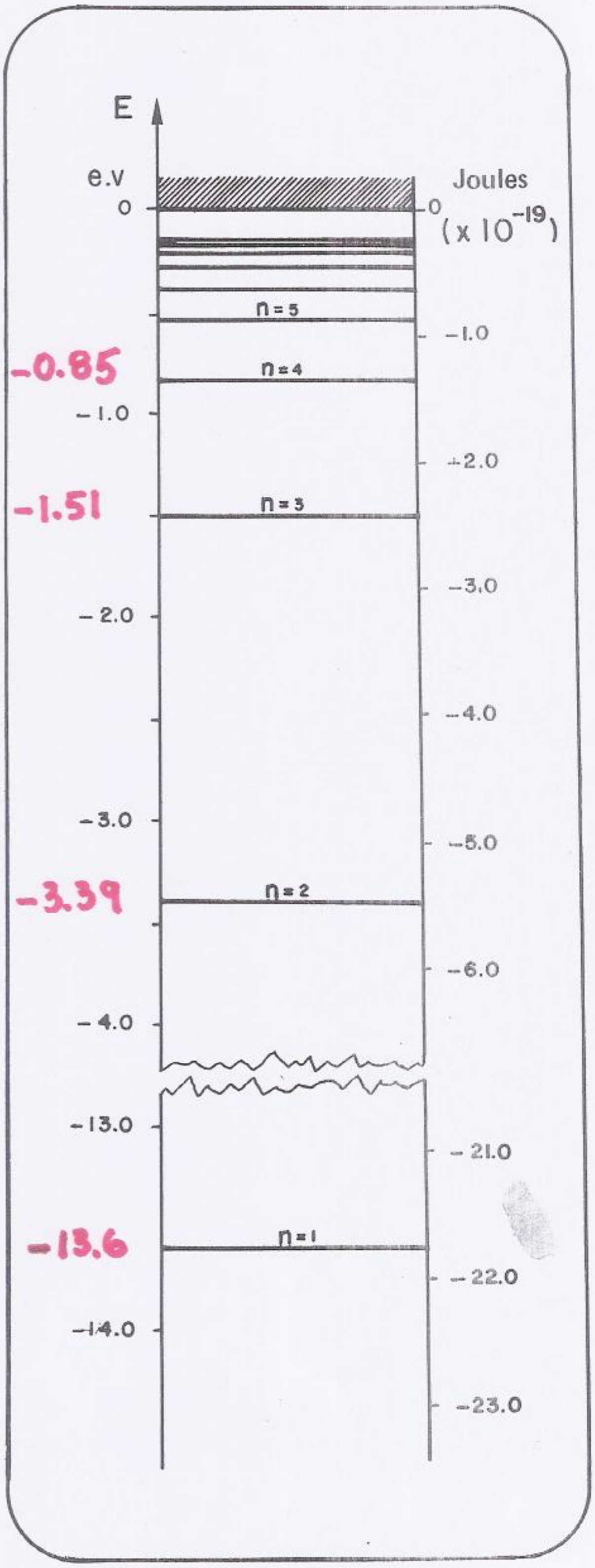


Fig. 23.12-1

En la figura 23.12-2 se ha representado el potencial culombiano, los niveles de energía y los radios de las diferentes órbitas del electrón alrededor del núcleo para el átomo de hidrógeno.

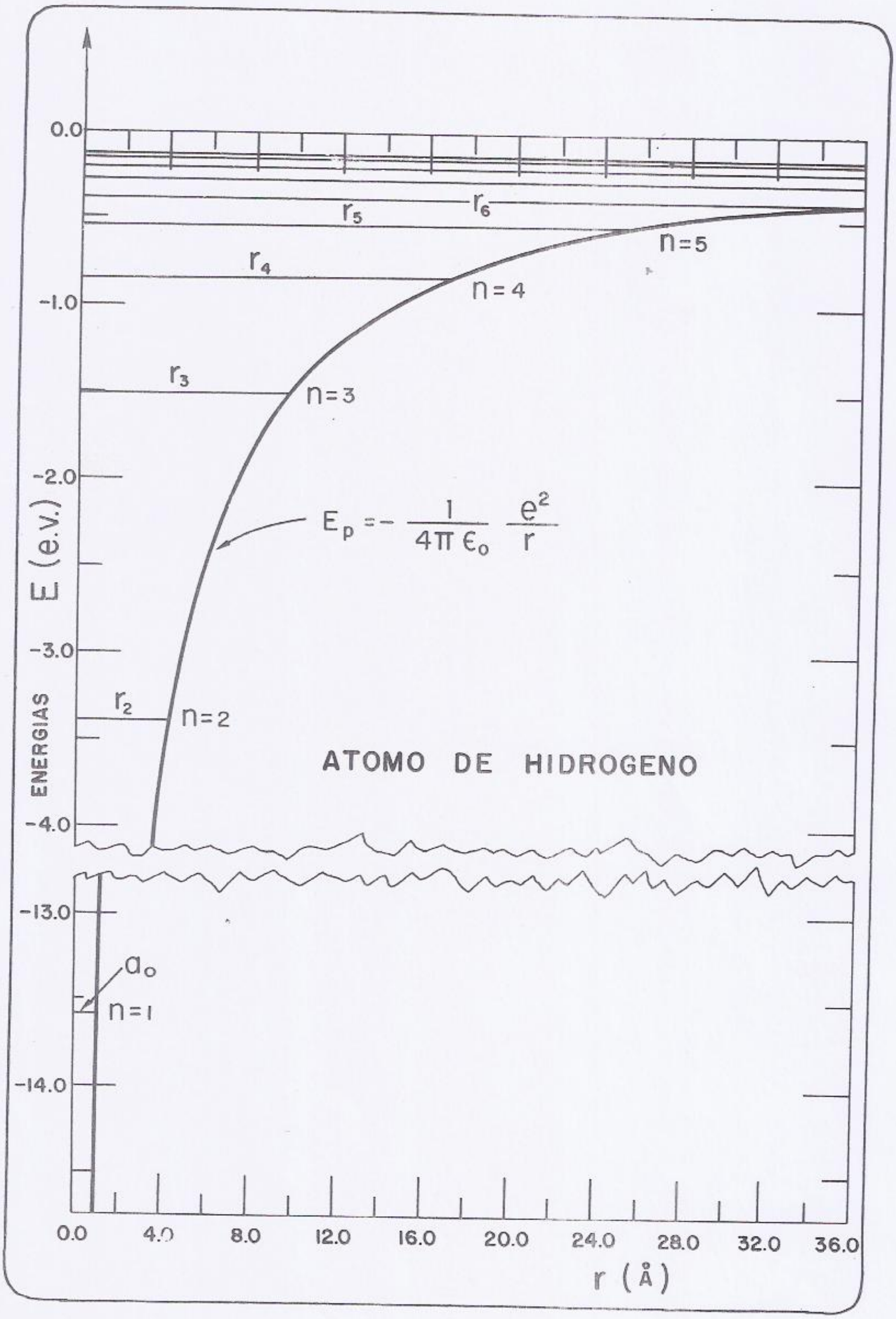


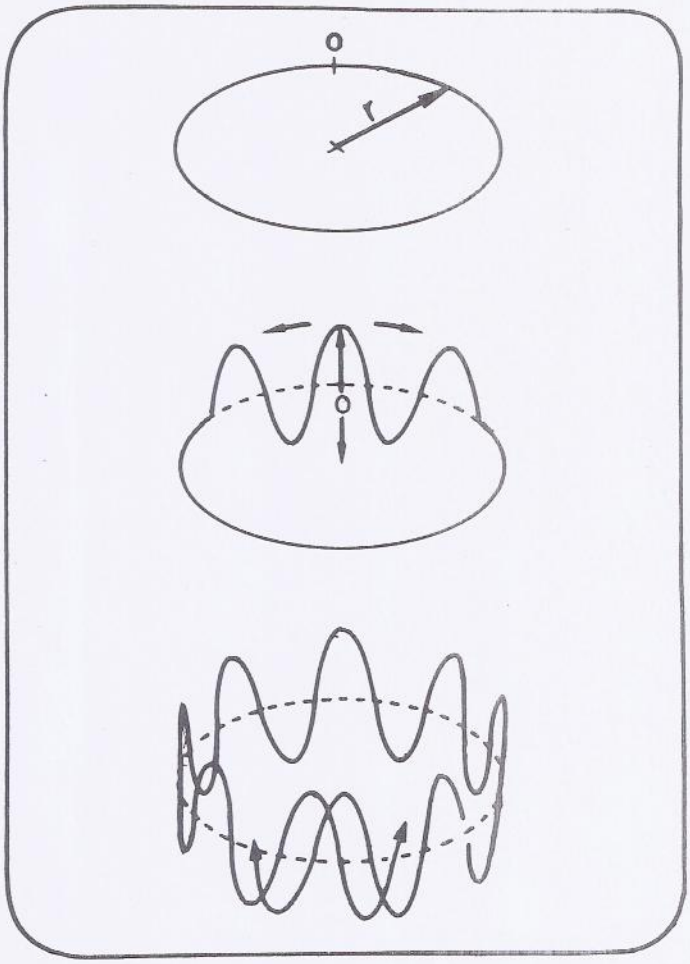
Fig. 23.12-2

Ejercicio:

b) *En el átomo de hidrógeno, según la teoría de Bohr, la energía potencial del electrón es negativa puesto que su magnitud es mayor que la magnitud de la energía cinética del electrón. ¿Qué puede concluir usted?*

Antes de explicar la radiación emitida por los átomos, hagamos una pausa para poder justificar el segundo postulado de Bohr acerca de la cuantización del momento angular. Para ello recordemos algunos conceptos sobre ondas estacionarias (vea FIS 010).

Supongamos que tenemos un hilo muy fino cerrado sobre si mismo formando una circunferencia de radio r y empezamos a hacer vibrar un punto O arbitrario, como muestra la figura siguiente.



Ver Beiser, Concepts of Modern Physics, 2003
(pag. 131
Fig. 14.12, 14.13, 14.14

(pag. 134
Fig. 4.15

Definición de:

✓ Ground State = Estado base
✓ Excited States = Estados excitados
✓ Free electron = Electrón libre
✓ Energía de Excitación

$E_x = E_n - E_1$

✓ Energía de ionización

$E_{ion} = |E_n|$

$E_{ion} = E_{(n\to\infty)} - E_n$

$E_{ion} = -E_n$

En O se iniciaran dos ondas que se propagan en sentido contrario a lo largo de la circunferencia. Despues de cierto tiempo, estas ondas empiezan a superponerse, la mayor parte interfieren destructivamente ya que, sus amplitudes en un punto cualquiera de la circunferencia tienen una relación de fase cambiante en el tiempo, y la amplitud promedio resultante en ese punto es nula.

E_x (1er estado excitado) $= -3.40\,eV - (-13.6\,eV) = 10.2\,eV$

E_x (2do estado excitado) $= -1.51\,eV - (-13.6\,eV) = 12.1\,eV$

E_{ion} (estado base) $= 13.6\,eV$ E_{ion} (1er edo. excitado) $= 3.40\,eV$

De todas las ondas posibles, las únicas que sobreviven son las que poseen una longitud de onda que resulte un múltiplo entero de la longitud de la circunferencia, o sea:

$$2\pi r = n\lambda$$

Cada vez que esta condición se cumple se dice que la onda resultante es una onda estacionaria.

Si aplicamos estas ideas al electrón del átomo de Bohr y consideramos el electrón como una onda de longitud de onda λ en el sentido expresado por de Broglie(vea sección 23.8), podemos argumentar que, de todas las órbitas posibles alrededor del núcleo, el electrón tendrá asociada una onda estacionaria siempre y cuando el largo de su órbita alrededor del núcleo sea un número entero de longitudes de onda; es decir cuando se cumpla la relación:

$$2\pi r = n\lambda$$

Puesto que según de Broglie resulta:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

combinando las dos expresiones anteriores, obtenemos:

$$2\pi r = n\,\frac{h}{p}$$

Ya que $L = rp$, obtenemos la cuantización del momento angular del postulado segundo de Bohr:

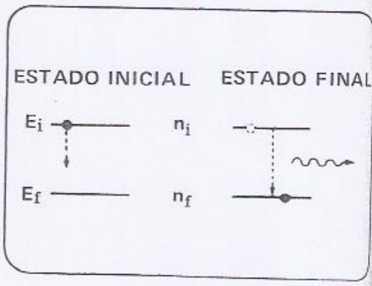
$$L = n\hbar$$

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

Hemos justificado así el postulado No. 2 de Bohr.

Volvamos ahora a la explicación de la radiación emitida por los átomos, según la teoría de Bohr.

El último postulado de Bohr se refiere a la radiación electromagnética emitida por el átomo. Allí se afirma que se emite radiación cuando el electrón salta de una órbita con un número cuántico inicial n_i y energía E_i a otra órbita con número cuántico final n_f y energía E_f. La frecuencia ν de la radiación emitida, si $n_i > n_f$, resulta:



$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \qquad (23.12 - 10)$$

Si sustituimos los valores de E_i y E_f por sus correspondientes expresiones (relación 23.12-8), la expresión (23.12-10) se escribe:

$$\nu = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2}\,\frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad (23.12 - 11)$$

Frecuencia de la radiación emitida

$$\nu\lambda = c$$

Si queremos comparar esta expresión con la relación empírica 23.11-3) que expresa la ley de Balmer, tenemos que caracterizar la adiación emitida por medio de su número de onda $\tilde{\nu}$:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

o sea, escribir la relación (23.12-11) como:

$$\frac{1}{\lambda} = \tilde{\nu} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c} Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Ahora, la constante que multiplica el factor $Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$ se denomina R_∞:

$$R_\infty = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c} \qquad (23.12 - 12)$$

Por tanto:

$$\tilde{\nu} = R_\infty Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad (23.12 - 13)$$

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

$$R_\infty = 1.09737 \times 10^7 \ m^{-1}$$

igual a la constante de Rydberg

Si sustituimos en la (23.12-12) los valores de las constantes que allí aparecen, obtenemos para R_∞ el valor:

$$R_\infty = 1.09737 \times 10^7 m^{-1}$$

o sea, ¡un valor increiblemente parecido al de la constante R_H de Rydberg de la relación empírica (23.11-3)!

Para el átomo de hidrógeno Z vale uno y vemos entonces que, si en la relación (23.12-13) $n_f = 2$ y n_i toma los valores 3,4,5,....., obtendremos la serie de Balmer dada en la relación (23.11-12) después de haber identificado R_H con R_∞.

La fórmula (23.12-13), además de proporcionar la serie de Balmer, explica satisfactoriamente todas las diferentes series espectrales mencionadas en la sección 23.11 para el átomo de hidrógeno. En efecto, para $Z = 1$, $n_f = 1$ y $n_i > n_f$ se obtiene la serie de Lyman; si $n_f = 2$ y $n_i > n_f$, acabamos de ver que corresponde a la conocida serie de Balmer en el visible; y si incrementamos ulteriormente el valor de n_f, obtenemos todas las otras series mencionadas.

En realidad, el mérito del modelo atómico propuesto por Bohr fue predecir las series de Lyman, Paschen y Brackett en ese entonces, cuando aún no se conocían experimentalmente, y que fueron observadas después con asombrosa precisión gracias al trabajo de Bohr.

Ver Fig 4.16, pag. 137, Beiser, 2003

Lineas espectrales que se originan por transiciones entre estados.