

## “MODELO ATÓMICO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA”

En 1927, Erwin Schrödinger, basándose en la teoría de Louis de Broglie desarrolla la mecánica ondulatoria a la cual posteriormente se une la mecánica de matrices de Warner Heisenberg y las contribuciones de grandes científicos como Born, Jordan, Dirac y otros, para crear la mecánica cuántica, la cual es esencialmente probabilística y permite establecer la distribución tridimensional de los electrones en los átomos.

### **Teoría de De Broglie**

La teoría de la mecánica ondulatoria fue postulada en 1924 por el físico francés Louis De Broglie, por ello se le llama también la teoría de De Broglie. Dicha teoría postulaba que, si la luz puede comportarse como una onda y como una partícula, entonces una partícula como el electrón también puede comportarse como una onda. Cuando De Broglie planteó que los electrones tenían propiedades ondulatorias, éstas aún no se habían observado experimentalmente. Poco tiempo después en 1928, C. J. Davison y L. H. Germer, en los laboratorios Bell en Estados Unidos y G. P. Thomson en Inglaterra, demostraron que los electrones sí tienen propiedades ondulatorias y que se pueden difractar como la luz (la difracción es una propiedad de las ondas).

De acuerdo con la teoría de De Broglie, cuando un electrón se encuentra en movimiento, se comporta como una onda y por lo tanto, tiene una longitud de onda asociada. De tal forma que, su energía se puede determinar con la ecuación de Planck ( $E_F = h \cdot f$ ); por otro lado, si el electrón se comporta como una partícula, su energía se determina con la ecuación de Einstein ( $E = m \cdot c^2$ ); sin embargo, ya sea que el electrón se comporte como onda o como partícula, su energía es siempre la misma; por lo tanto, se pueden igualar las expresiones y obtener:

$$h \cdot f = m \cdot c^2 \quad (20)$$

Dado que la frecuencia ( $f$ ) se puede expresar como:

$$f = \frac{c}{\lambda_e} \quad (21)$$

Donde  $\lambda_e$ , es la longitud de onda asociada al electrón. La longitud de onda del electrón en el átomo de hidrógeno es semejante a la de los rayos X. La longitud de onda asociada con objetos macroscópicos, por ejemplo como en un automóvil, es demasiado pequeña como para ser observada.

Sustituyendo la ec. (21) en la ec. (20) y simplificando, se obtiene:

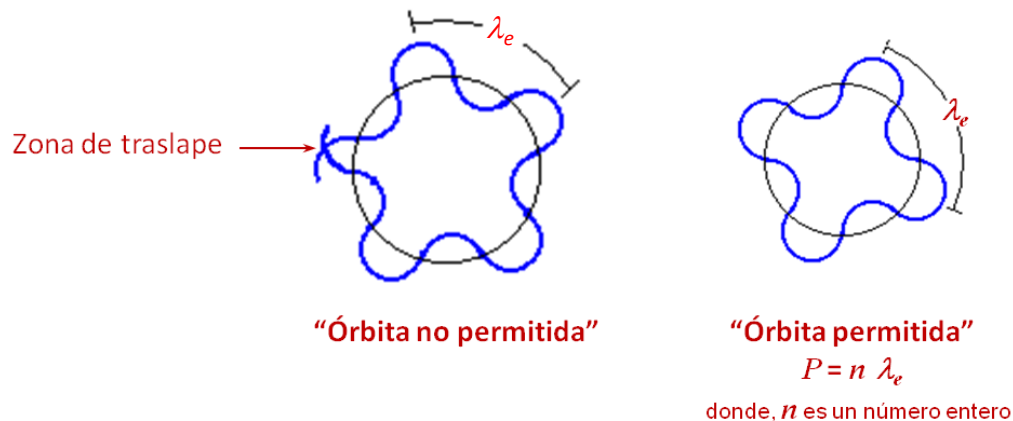
$$\frac{h}{\lambda_e} = m \cdot c$$

Sin embargo, el electrón se puede desplazar a una velocidad diferente a la velocidad de la luz, por lo que se realiza un cambio de variable y se reacomodan los términos, para obtener:

$$m \cdot v = \frac{h}{\lambda_e} \quad (22)$$

Con esta expresión se puede determinar la cantidad de movimiento ( $m \cdot v$ ) de un electrón comportándose como onda.

Adicionalmente a lo anterior, De Broglie, propuso que dentro de un átomo, un electrón, sólo puede estar en ciertas órbitas permitidas donde el perímetro,  $P$ , de la órbita sea un múltiplo entero de la  $\lambda_e$ , como se muestra a continuación:



En las órbitas no permitidas, existe una zona de traslape donde existe cancelación parcial de la onda y por lo tanto, pérdida de energía, lo que provocaría que el electrón se acercara más al núcleo. Por otro lado en las órbitas permitidas, no existe traslape ya que el electrón se comporta como una onda continua y por lo tanto su energía se mantiene constante. Así, se puede establecer la expresión siguiente:

$$2 \cdot \pi \cdot r = n \cdot \lambda_e \quad (23)$$

Donde el número entero  $n$  indica la órbita en la que se encuentra el electrón. Si de la ec. (23) se despeja  $\lambda_e$ , se sustituye en la ec. (22) y se reacomodan los términos, se obtiene la expresión siguiente:

$$m \cdot v \cdot r = \frac{n \cdot h}{2 \cdot \pi} \quad (24)$$

Como se puede observar, esta expresión es la misma que propuso Bohr para la cantidad de movimiento angular que poseen los electrones en órbitas permitidas; por ello, se puede afirmar que la teoría de De Broglie es acorde con la teoría atómica de Bohr.

## Principio de incertidumbre de Heisenberg

Los objetos son visibles porque notamos sus interacciones con la luz. El objeto debe ser por lo menos del mismo tamaño que la longitud de la onda luminosa. Se necesitaría radiación electromagnética de una longitud de onda extremadamente corta para localizar un objeto del tamaño de un electrón. Los fotones de radiación con longitudes de onda cortas y alta frecuencia tienen mucha energía. Cuando un fotón de alta energía incide sobre un electrón, cambia la dirección del movimiento y la velocidad del electrón; es decir, al tratar de ubicar al electrón, cambia su velocidad.

Los fotones con mayor longitud de onda poseen menos energía, y podrían tener menor efecto sobre la velocidad del electrón. Sin embargo, debido al tamaño de su longitud de onda, no indicarían la posición del electrón con mucha exactitud. Según Heisenberg, la incertidumbre en la posición de un objeto, multiplicada por la incertidumbre en la velocidad del objeto, es igual o mayor que  $\frac{h}{4 \cdot \pi \cdot m}$ :

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{4 \cdot \pi \cdot m}$$

En esta ecuación,  $\Delta x$  es la incertidumbre en la posición de la partícula,  $\Delta v$  la incertidumbre en su velocidad;  $h$  es la constante de Planck y  $m$  es la masa de la partícula.

La ecuación anterior expresa que mientras menor sea la masa de un objeto, el producto de la incertidumbre de su posición y velocidad será mayor. La incertidumbre en la medición de la posición y la velocidad es muy importante, cuando los objetos son del tamaño de un electrón, pero no se aprecia cuando los objetos son de tamaño ordinario.

La incertidumbre en la medición de la posición y la velocidad de una partícula submicroscópica, es distinta de la incertidumbre de las mediciones comunes. En este último caso, la incertidumbre se reduce usando instrumentos más precisos y más exactos; la incertidumbre en la medición de la posición y la velocidad de una partícula submicroscópica es inevitable. Es imposible tener una descripción exacta de la trayectoria de un electrón en un átomo.

## Ecuación de onda de Schrödinger

Con base en la idea de que los electrones tienen propiedades ondulatorias, el físico austriaco Erwin Schrödinger dedujo una ecuación, actualmente llamada **ecuación de Schrödinger**, para describir el comportamiento y las energías de los electrones en los átomos. La ecuación es demasiado complicada y queda fuera de los alcances de este curso; sin embargo, se pueden emplear las soluciones de la ecuación aun cuando no se desarrollen los cálculos, pues contienen toda la información acerca de un átomo que permite el principio de incertidumbre; por lo general, esta información está en forma de probabilidades.

Para átomos que tienen más de un electrón, los cálculos son muy complicados. La energía total del átomo depende de las posiciones de todos los electrones. Cada electrón repele y es repelido por los

demás. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger son funciones, no son números, y se llaman **funciones de onda**,  $\psi$ . La función de onda de un electrón puede tener un signo positivo o negativo. No tiene significado físico, pero el cuadrado de esta función,  $\psi^2$ , es una expresión matemática representativa de la forma en que varía de un lugar a otro la probabilidad de encontrar a un electrón en un pequeño espacio, a este espacio donde es probable encontrar un electrón con determinada energía se le llama **orbital**. La ecuación de Schrödinger tiene una familia infinita de soluciones. Cada solución se identifica con tres números cuánticos ya que se necesita un conjunto de tres números para ubicar a un electrón en un espacio tridimensional.