

# TEORIA ATOMICA – PARTE I

Carlos Corredor, Ph.D.

## I. GUIA GENERAL

Concepción primitiva de la composición de la materia. Kanada, Lisipo, Demócrito, Dalton.

El hallazgo del electrón y del núcleo. Los experimentos de Thomson y de Rutheford. Concepción del átomo como pequeño sistema planetario de núcleo protónico con electrones periféricos.

Cuantificación de la energía de emisión y de absorción. Planck.

Espectros de emisión de un gas incandescente. Posibles significados de las líneas espectrales. Niveles de energía posibles.

Ondas. Relación entre frecuencia y longitud de onda.

El átomo de Bohr. El átomo de Lewis. Moseley. La teoría de las capas concéntricas de Langmuir. Número de electrones por corona.

El principio de incertidumbre de Heisenberg. Probabilidad.

La dualidad onda-partícula: De Broglie. Schrödinger. Números cuánticos. Principio de exclusión de Pauli. Número de electrones posibles por orbital.

Un experimento mental: el átomo de hidrógeno en el espacio interestelar. El hidrógeno en condiciones medioambientales de la tierra: imposibilidad de su existencia libre. La molécula de hidrógeno.

El enlace entre dos núcleos homólogos. Neutralidad formal y polaridad práctica. Atracciones entre moléculas de hidrógeno. El estado gaseoso, líquido y sólido. El helio.

Concepción práctica de algunos átomos del primer período. Formación de enlaces. El enlace  $\sigma$  y el enlace  $\pi$ . Concepción del carbono, nitrógeno y oxígeno. Polaridad. Dipolos permanentes y dipolos oscilantes. Algunas consecuencias prácticas.

## II. DESARROLLO

El hombre siempre se preguntó sobre la constitución última de la materia que podía discernir y apreciar con sus sentidos. Podemos ponernos en el lugar del hombre primitivo. Si él cogía un trozo de madera y lo rompía en dos, obtenía dos pedazos de madera, cada uno de ellos con la misma constitución del primer trozo. Y podía seguir rompiendo cada trozo en dos, una y otra vez, hasta encontrarse con que los pedazos resultantes eran tan pequeños, que ya no podía físicamente romperlos más porque no tenía la manera de cogerlos entre sus dedos.

La diferencia entre el trozo de madera original y los que resultaban después de partírlas hasta donde le era posible era esencialmente de tamaño. De manera que hubiera podido llegar a la conclusión de que un trozo de madera estaba constituido de muchos trozos de madera más pequeños que de alguna manera estaban unidos para formar un trozo grande.

Sin embargo, el hombre primitivo estuvo siempre demasiado ocupado tratando de conseguir los elementos necesarios para su supervivencia y de protegerse de los peligros que lo acechaban por doquier. Por consiguiente, sus preocupaciones sobre la naturaleza de la materia posiblemente no pasaron de la simple observación de que una roca estaba constituida de pedazos más pequeños de la misma roca. o de que una fruta estaba constituida de varios tipos de pedazos, unos de un sabor o textura y otros de sabor y textura diferente.

## **PRIMERAS CONCEPCIONES SOBRE EL ATOMO**

Fue necesario que llegara la revolución agrícola y se constituyeran sociedades dentro de las cuales algunos miembros se especializaron en transmitir el conocimiento social y en tratar de dilucidar preguntas fundamentales acerca del hombre y el mundo que le servía temporalmente de albergue, para que alguien comenzara a pensar en serio acerca de la naturaleza de la materia de la que estaba compuesto el universo. El primero de quien tenemos noticia en proponer una hipótesis al respecto fue un filósofo hindú, Kanada, que vivió antes del siglo V A.C. Kanada concibió la materia como algo discontinuo, hecho de partículas eternas muy pequeñas que se encontraban en movimiento perpetuo.

Posiblemente en forma independiente, el filósofo jónico del siglo V A.C., Leucipo, llegó a una conclusión semejante. De sus escritos, tan sólo ha sobrevivido en la forma originalmente escrita por él una frase que dice: "Nada ocurre caprichosamente; hay una razón necesaria para todo". El establecimiento de este principio de causalidad lo llevó a responder a una famosa paradoja de Parménides. Lo real, decía Parménides, de ninguna manera puede crearse o destruirse; no puede haber movimiento, pues para que haya movimiento se necesita que haya espacio vacío, y el vacío es precisamente la negación de lo existente. Contra esto Leucipo argumentó que el movimiento es un hecho innegable, lo cual obliga a admitir que debe existir espacio vacío; sin embargo, esto no implica que la realidad tenga que cambiar, crearse o destruirse, siempre y cuando se conciba como si estuviera constituida por un sinnúmero de partículas indestructibles e indivisibles, es decir, átomos, (de  $\tau\omicron\mu\epsilon\iota\nu$ , dividir y  $\alpha$ , partícula privativa que indica que la acción es imposible), sujetas a innumerables cambios y rearrreglos en el espacio. A Leucipo, entonces, le debemos no sólo el principio de causalidad, sino también el de la conservación de la materia y la energía.

El principal discípulo de Leucipo fue Demócrito, quien a lo largo de su vida centenaria escribió más de setenta libros en los que recogió y amplió el pensamiento de su maestro, lo que lo hizo tan ampliamente conocido en el mundo antiguo que por mucho tiempo Leucipo y Demócrito se confundieron en un sólo personaje y aún hoy es frecuente que la paternidad de la teoría atómica se atribuya únicamente a Demócrito.

Demócrito viajó extensamente por el mundo entonces conocido, y se cree que llegó hasta la India, donde es posible que haya conocido las ideas de Kanada, coincidentes con las de Leucipo. En sus libros Demócrito sostiene que las sensaciones y el pensamiento son sólo apariencias y que la única realidad son los átomos, los cuales poseen cuatro características: posición, forma, tamaño e impenetrabilidad. Estas cuatro características permiten entender todas las cosas materiales como combinaciones de las diferentes formas y tamaños en determinadas posiciones.

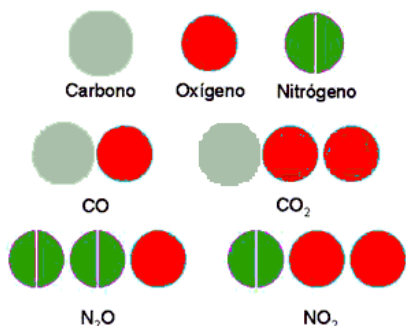
Aristóteles nunca aceptó la teoría de Demócrito, por lo que pasaron más de veinte siglos sin que se progresara en este campo, a pesar de que el conocimiento se mantuvo entre los filósofos y alquimistas árabes de la edad media y tanto Boyle como Newton asumieron

alguna forma de atomismo en sus trabajos sobre física. Sin embargo, sólo hasta principios del siglo XIX, Dalton formuló una nueva teoría atómica.

## EL ATOMO DE DALTON

Dalton era un pobre profesor cuáquero que se enamoró perdidamente del estudio del aire y de la meteorología y que durante años observó y meticulosamente apuntó en cuaderno tras cuaderno las condiciones atmosféricas de cualquier sitio en donde se encontrara. Los experimentos de Priestly, Rutherford, Cavendish y Lavoisier habían todos probados que el aire estaba compuesto de cuatro gases: oxígeno, nitrógeno, bióxido de carbono y vapor de agua. Para su sorpresa, la composición del aire en cualquier parte, aún en partes altas de la atmósfera, era igual, y no había capas en las que el más pesado, bióxido de carbono estuviera más cercano a la tierra, seguido de capas de los más livianos. Durante mucho tiempo Dalton trató de entender este fenómeno y llegó a la conclusión de que los gases estaban compuestos de partículas que podían difundir fácilmente unas entre otras, manteniendo en esta forma la misma composición del aire. Sin embargo, para entender la difusión era necesario tratar de imaginarse las partículas. Dalton había leído acerca de las ideas de Kanada, Leucipo y Demócrito y pensó en átomos. Comenzó a dibujar círculos que representaban átomos e hizo construir esferas de una pulgada de diámetro con las que fue construyendo y enseñando su teoría atómica. Para Dalton, los átomos eran esferas tan pequeñas que eran invisibles, pero que por naturaleza eran sólidos y dotados de movimiento. Su principal diferencia con los filósofos de la antigüedad consistió en uno de los principios fundamentales de la química moderna: todos los átomos de un mismo elemento son iguales entre sí y difieren de los átomos de cualquier otro elemento.

A partir de este principio poco a poco fue tratando de entender el cambio químico. La formación de agua se debía a la unión de un átomo de hidrógeno con un átomo de oxígeno. El óxido de mercurio era la unión de un átomo de mercurio con un átomo de oxígeno. Miles de millones de estas esferas unidas tenían, entonces, las propiedades que nuestros sentidos podían apreciar. Proust y Barthellet habían estado midiendo las proporciones en que ciertas sustancias se combinaban para formar otras. Se había demostrado que 11% de hidrógeno se unía a 89% de oxígeno para formar agua. Dalton propuso en 1803 que toda vez que todos los átomos de un mismo elemento son iguales. y por consiguiente tienen el mismo peso y son diferentes de los de los demás elementos, cada uno de los cuales, a su vez, tendrá su propio peso, entonces, cuando dos átomos se unen para formar un compuesto, todas las partículas de este compuesto tendrán el mismo peso. Esta se convirtió en la ley de las proporciones definidas que convirtió la química en una ciencia cuantitativa y que se puede expresar de la siguiente manera: En cualquier compuesto, la proporción por peso de los elementos constituyentes es una constante.



Otra ley fundamental que Dalton derivó de sus observaciones fue la ley de las proporciones múltiples que se puede expresar así: Si dos elementos se combinan en proporciones diferentes para formar compuestos diferentes, entonces, la razón de los pesos de uno de ellos en los dos compuestos diferentes será un número entero pequeño. Por ejemplo, la razón de los pesos del oxígeno en H<sub>2</sub>O y en H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> es de 1:2.

De pensar en pequeñas esferas que permitían entender el movimiento de los gases, Dalton pasó, entonces, a pensar que los átomos eran las unidades mínimas de combinación para formar compuestos. En su *New System of Chemical Philosophy* (1808-1810) establece el concepto de peso atómico, entendido como el peso de un elemento que se combina en una proporción determinada expresada por un número entero con otro elemento para formar un compuesto. Con este concepto construye un sistema de pesos atómicos basados en el hidrógeno como unidad y el de los otros elementos como múltiplos enteros del hidrógeno. El sistema era primitivo, lo cual es natural dado el conocimiento entonces existente, pero permitió que otros científicos trataran de agrupar los elementos de acuerdo con sus propiedades lo que finalmente culminó con la tabla periódica de Mendeleiev.

Las ideas de Dalton fueron muy útiles para entender la naturaleza de la materia. Aunque se tardó mucho tiempo para que fueran generalmente aceptadas, sirvieron de base para mucha controversia y experimentación. En este sentido, es particularmente importante el trabajo de Berzelius quien confirmó las leyes de Dalton y descubrió varios nuevos elementos.

## LA HIPÓTESIS DE AVOGADRO

Una importante consecuencia de las propuestas de Dalton tiene que ver con la relación que existe entre el peso de un átomo y el peso un número determinado de átomos del mismo elemento. En efecto, será de esperar que el peso medible de una cantidad determinada de átomos será simplemente el producto de su peso atómico por el número de átomos presentes en esa cantidad. Pero, ¿cómo encontrar una unidad medible contra la cual comparar cantidades medibles de otros elementos? En 1811 Avogadro, basado en las observaciones sobre reacciones de los gases que había hecho Gay-Lussac, propuso que volúmenes iguales de gases a la misma temperatura y presión, contenían igual número de moléculas, entendiendo por moléculas las unidades más pequeñas del gas que conservaban las características de dicho gas.

Si se combinan las ideas de Dalton y de Avogadro aparecerá claramente que el mismo volumen de dos gases diferentes deberá tener pesos diferentes que deberán ser proporcionales al peso atómico de sus componentes. Esto ha sido comprobado una y otra vez y, de acuerdo con posteriores determinaciones, se puede decir que un peso molecular en gramos de cualquier compuesto tiene el mismo número de moléculas que un peso molecular en gramos de cualquier otro compuesto. A un peso molecular en gramos se le ha llamado mol, y al número de moléculas en un mol, Número de Avogadro,  $N$ .

El valor absoluto del número de Avogadro ha sido determinado experimentalmente. Uno de los mejores métodos para hacerlo es el uso de datos de electrólisis. La cantidad de carga que debe ser transportada a través de una solución electrolítica para liberar el peso atómico en gramos de un elemento monovalente es una constante llamada Faraday, cuyo valor ha sido determinado muy cuidadosamente y equivale a 96.520,1 coulombios o 9.652,01 unidades electromagnéticas de carga (u.e.c) por peso atómico en gramos. Toda vez que un ion de un elemento monovalente lleva sólo una carga, la carga total en un Faraday será igual al número de átomos ionizados presentes en el peso atómico en gramos multiplicados por el valor de la carga del electrón que es de  $1,6021 \times 10^{-20}$  u.e.c.

De aquí que  $N=F/e$ , es decir,  $6,0247 \times 10^{23}$  átomos/peso atómico en gramos, que es el valor aceptado del número de Avogadro.

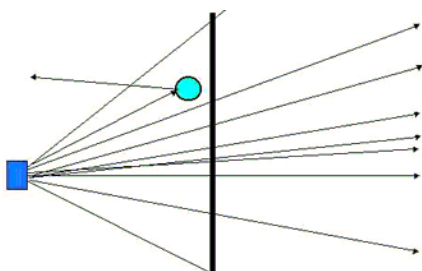
Podemos, pues, decir que un mol contiene un número de Avogadro, es decir,  $6,0247 \times 10^{23}$  de moléculas. Estos conceptos serán muy útiles posteriormente para entender la manera como interaccionan diferentes compuestos en reacciones químicas.

## EL ÁTOMO DE RUTHERFORD

Para los atomistas, incluyendo a Dalton, los átomos eran sólidos. No podían ser de otra manera puesto que eran la unidad más pequeña posible y, como su nombre lo indica, eran indivisibles. Sin embargo, una serie de hechos comenzaron a hacer poner en duda esta concepción.

En efecto, J.J. Thomson había estado estudiando las partículas provenientes del cátodo cuando se producía una descarga eléctrica en un tubo que contenía un gas a muy baja presión. En 1897 pudo demostrar que estos “rayos catódicos” eran electrones. Midió cuidadosamente la forma como campos eléctricos y magnéticos desviaban a los electrones de su trayectoria y encontró que independientemente de su procedencia, siempre tenían la misma relación carga/masa. Es decir, todos los electrones eran iguales. La década 1895-1905 fue particularmente pródiga en descubrimientos que hicieron posible nuestro entendimiento actual de la composición de la materia. En 1895 Roentgen descubrió los rayos X, en 1896 Henri Becquerel descubrió la radiactividad natural y al año siguiente Thomson demostró la existencia del electrón. Estos tres hallazgos claramente indicaban que el átomo era divisible y que de hecho estaba compuesto de partículas aún más pequeñas, una de las cuales era el electrón.

En 1904 Thomson publicó un modelo matemático de un átomo compuesto por un componente cargado positivamente y distribuido uniformemente en una esfera con un diámetro equivalente al del átomo, y en la cual en alguna forma estaban los electrones como cargas negativas puntuales. Aunque solamente en 1913 Moseley lo demostraría, en 1906 Thomson argumentaba que el número de los electrones de un átomo era pequeño y muy parecido a su número de masa, o número atómico. A pesar de que el modelo de Thomson era muy crudo, y posteriormente se pudo demostrar que era inexacto, de todas maneras permitió que se le concibiera como conformado por cargas positivas y negativas, las últimas de las cuales él identificó con los electrones.



A partir del descubrimiento de la radiactividad se hicieron una serie de experimentos con la radiación producida por los elementos radiactivos. Uno de ellos fue el de dirigir rayos  $\alpha$  contra placas metálicas delgadas. Se encontró que aunque unos pocos fueron reflejados a diferentes ángulos en relación con el eje del rayo incidente, sorprendentemente la casi totalidad de los rayos  $\alpha$  traspasó la película de metal. ¡Los átomos no podían ser sólidos! Si lo fueran, ¡todas las partículas  $\alpha$  deberían haber sido reflejadas! Esto sólo podía indicar que los átomos eran huecos y compuestos principalmente de espacio vacío.

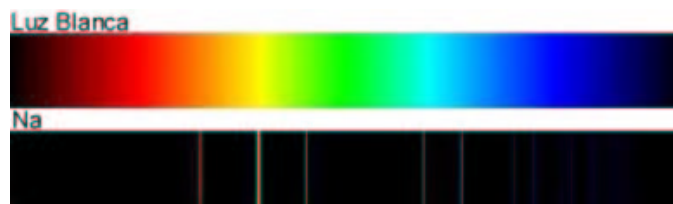
A partir de estos experimentos, Rutherford en 1911 se imaginó un átomo neutro con las siguientes características: 1) debía estar compuesto de una especie de núcleo central en el que se localizaba la casi totalidad de su masa; 2) La reflexión de las partículas, cargadas positivamente, indicaba que eran rechazadas por un fuerte campo positivo. Por consiguiente, el núcleo debía ser positivo; 3) La carga del núcleo debería ser  $Ze$ , en donde  $Z$  era el número atómico y  $e$  la carga; 4) Para mantener la neutralidad, tenía que haber  $Z$  electrones y éstos tenían que estar a una cierta distancia del núcleo; 5) Toda vez que los electrones y el núcleo se atraen, los electrones tendrían que caer hacia el núcleo a no ser que la fuerza centrípeta fuera exactamente balanceada por una fuerza centrífuga, la cual sería debida al movimiento de los electrones alrededor del núcleo.

Lo anterior implicaba, entonces, que el átomo era análogo al sistema planetario, con un núcleo positivo y unos electrones que se moverían en órbitas circulares alrededor de ese núcleo en la misma forma como se mueven los planetas alrededor del sol. Para comprobar esa teoría diseñó una cantidad de experimentos que fueron llevados a cabo por sus colaboradores, Geiger, Marsden y Chadwick. Los resultados de los experimentos confirmaron la hipótesis y permitieron demostrar la carga nuclear de los metales utilizados, así como los radios de los núcleos.

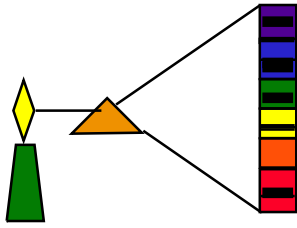
## EL ÁTOMO DE BOHR

La idea de un átomo constituido en la misma forma que un sistema planetario comenzó a presentar dificultades. En efecto, a principios de la última mitad del siglo XVII, Newton comenzó sus estudios sobre la naturaleza de la luz. Trabajando en un cuarto muy oscuro, abrió un pequeño hueco circular de un tercio de pulgada en un postigo de la ventana. En frente del hueco puso un prisma de vidrio y observó que sobre la pared opuesta se proyectaba “una imagen a color del sol” descompuesta en bandas de colores bastante bien definidas en el centro pero que se volvían difusas hacia los extremos. De este y otros experimentos, Newton dedujo que la luz solar estaba compuesta de “rayos refrangibles diferentes” y los agrupó en siete colores diferentes que llamó colores primarios.

A partir del experimento de Newton se fue desarrollando la disciplina de la espectroscopia, es decir, el estudio de la descomposición de la luz, y por extensión, de toda la radiación electromagnética, por prismas. A la imagen obtenida después de la descomposición por el prisma se le dio el nombre de espectro. En 1802, Wollaston encontró que el espectro solar mostraba siete líneas oscuras. En 1814, Fraunhofer demostró que realmente había muchas más e hizo un mapa de las mismas, por lo que las líneas del espectro se llaman líneas de Fraunhofer.



La naturaleza de estas líneas era intrigante. Los espectroscopistas comenzaron entonces a tratar de dilucidar su origen. Para hacerlo obtuvieron espectros de todo tipo de radiación disponible. Una posibilidad era la de obtener el espectro de sustancias incandescentes, que se conoce con el nombre de espectro de emisión.



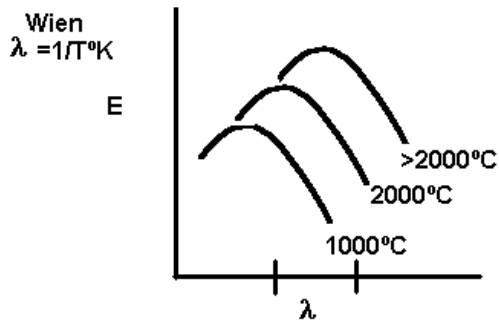
En este empeño, Bunsen diseñó el mechero de gas que lleva su nombre y el espectroscopio, con los que él y Kirchhoff hicieron una extensa serie de experimentos. Llamativamente, el espectro de la luz proveniente de fuentes distintas al sol no contenía todos los colores. Por el contrario, algunos espectros tales como el del sodio o del oxígeno consistían en una sola línea delgada muy brillante, perfectamente definida. Otros, tales como el del hidrógeno, el helio, el neón y el mercurio, tenían varias líneas brillantes, delgadas y definidas. Finalmente, otros espectros contenían bandas amplias de color y líneas brillantes, algunas de ellas enclavadas dentro de las bandas de color. La posición y el número de las líneas eran característicos de cada elemento, algo así como si fueran sus huellas digitales a partir de las cuales era posible identificarlo inequívocamente.

El experimento de la reversión de la línea D del sodio mostró una importantísima característica de los espectros. Si en el camino entre la fuente de luz y el prisma se deja pasar el humo producido por el calentamiento de sodio metálico en una cuchara, aparece una línea oscura en el espectro. Si ahora se pone un pequeño trozo de sodio en el arco eléctrico que produce la luz, entonces en el mismo sitio donde aparecía la línea oscura, aparece ahora una línea brillante. Esto implica que un elemento absorbe o emite una determinada longitud de onda, dependiendo de sus condiciones de temperatura. Esto permitió explicar las líneas de Fraunhofer en el espectro solar. En efecto, la cromosfera o atmósfera externa del sol compuesta de elementos gaseosos tremendamente calientes pero aún así, menos calientes que los de la fotosfera o núcleo solar, absorbe las longitudes de onda de tales elementos. De aquí surge otra consecuencia importante que es la base de los métodos espectroscópicos: es posible determinar la composición de elementos en una mezcla incandescente. Y también es posible identificar y cuantificar un elemento o compuesto en una mezcla si se conoce la longitud de onda en la que absorbe radiación.

Todo esto estaba muy bien, pero, ¿porqué más de una línea? Y ¿porqué había diferencias en cuanto a amplitud de las líneas y distancia entre ellas?

Aristóteles había sugerido que la luz se propagaba como una onda en un medio imaginario que recibió el nombre de “éter”. Newton, por el contrario, sostenía que toda vez que la luz no podía voltear esquinas como lo hacen las ondas sonoras o las ondas de la superficie del agua, no podía ser una onda sino que tenía la característica de corpúsculos que se propagaban linealmente. Huygens, holandés contemporáneo de Newton, fue el primero en proponer una teoría ondulatoria de la luz en 1690. Sin embargo, sólo siglo y medio después Young y Fresnel pudieron probarlo experimentalmente. Posteriormente, Maxwell demostraría que la luz era una onda electromagnética.

Hacia finales del siglo XIX varios científicos estaban empeñados en dar solución al problema del “cuerpo negro”. Un cuerpo negro es una concepción ideal consistente en un cuerpo que absorbe toda la radiación que incide sobre él, y por contra, es capaz de emitir todo tipo de radiación. En la práctica, un horno calentado a alta temperatura se aproxima a las características del cuerpo negro. Si se obtiene un espectro de la radiación emitida por el horno y se mueve un termómetro de tipo termocupla a lo largo del espectro, se puede determinar la energía asociada a cada región. A una temperatura cercana a los 1000° C, el horno se ve rojo y se demuestra que el máximo de la curva de energía contra longitud de onda se encuentra en el infrarrojo, y sólo una pequeña proporción de la



energía aparece en el rojo. A 2000° C, el horno emite luz blanca. La magnitud del máximo de la curva naturalmente se incrementa, pero se sigue encontrando en el infrarrojo aunque corrido en tal forma que ya aparece un espectro visible completo. A temperaturas mayores, aumenta aún más la magnitud del máximo que todavía se encuentra en el infrarrojo, pero se observa que la curva se mueve hacia el violeta y el ultravioleta.

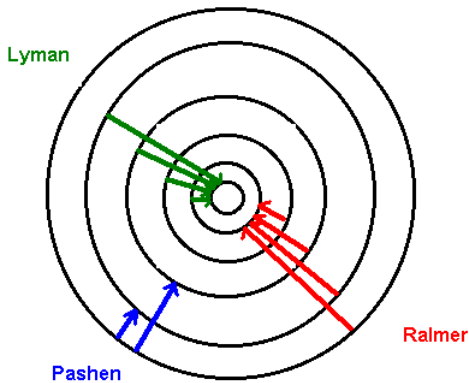
Tratando de explicar este *corrimiento* del espectro hacia el ultravioleta con la temperatura Wien propuso una ley que se conoce con su nombre y que dice que la longitud de onda del máximo es inversamente proporcional a la temperatura absoluta. Sin embargo, la teoría que trataba de explicar el fenómeno señalaba que la curva debía seguir subiendo en el ultravioleta, y no caer a cero como ocurre en la práctica.

En diciembre de 1900, Planck publicó una solución al problema que marcó el principio de nuestro entendimiento de la estructura atómica y de muchos otros fenómenos de la física moderna. Cabe notar aquí que si se aceptaba que la luz era una onda, por analogía con las ondas sonoras, su fuente debería vibrar con una cierta frecuencia. Planck supuso que el cuerpo negro estaba compuesto de *osciladores* microscópicos embebidos en paredes que reflejaban la energía en forma total. Estos *osciladores* se comportaban de acuerdo a las leyes de la vibración armónica simple. Y finalmente supuso que podían vibrar con diferentes energías proporcionales a la frecuencia de vibración, de manera que la energía se podía calcular mediante la relación  $e=hv$  en la que la constante de proporcionalidad, que finalmente llegó a llamarse la constante de Planck, tiene el valor de  $6.624 \times 10^{-27}$  erg-seg. Pero lo más importante en esta relación es que Planck propuso que la energía sólo podía tomar valores enteros de  $hv$ , tales como  $0, hv, 2hv, 3hv \dots nhv$ . En 1905, Einstein en un artículo titulado "Un punto de vista heurístico sobre la producción y transformación de la luz" escribió: "Una radiación monocromática de débil intensidad se comporta, por lo que atañe a la teoría del calor, como si estuviera formada por cuantos de energía mutuamente independientes, de valor  $k\beta v \dots$  Nos vemos llevados a preguntarnos por la posibilidad de que las leyes de la producción y transformación de la luz tengan la misma estructura que tendrían si la luz estuviera formada por cuantos de energía de esta clase". Nótese la relación formal entre las fórmulas de Planck y de Einstein. Como una anotación interesante, Planck no aceptó el concepto de la cuantificación de la energía radiante hasta 1914 y sostuvo la idea de la continuidad del espectro. A pesar de que la idea de los *cuantos* (del latín *quantum*), como paquetes discretos de un espectro discontinuo se atribuye a Planck, fue realmente Einstein quien los propuso y los definió como tales. Y fue aún más lejos, ya que propuso que la luz estaba compuesta de corpúsculos discretos o *fotones*, que poseían *cuantos* definidos de energía y que tenían al mismo tiempo la naturaleza de onda y de partícula.

## EL ATOMO DE BOHR

En 1913 Bohr aplicó estos principios al modelo de átomo planetario de Rutherford. Para hacerlo, comenzó a analizar el espectro de emisión del hidrógeno. Después de todo, era el más simple de los elementos, ya que sólo tenía un protón y un electrón. Se podría pensar, entonces, que las líneas espectrales eran debidas a los electrones que se

encontraban alrededor del núcleo y no al núcleo mismo. Por consiguiente, era de esperar que el hidrógeno no tuviera sino una sola línea espectral. Esto, sin embargo, no era cierto. El hidrógeno mostraba varias líneas espectrales y éstas se encontraban en localizaciones muy precisas y con unas distancias definidas entre línea y línea. Es más, si se analizaba el espectro del hidrógeno en porciones diferentes al visible, se encontraba que existían otras líneas. Balmer en 1885 y Rydberg en 1889 habían logrado establecer relaciones empíricas entre estas líneas, que para el caso de la que posteriormente se llamaría serie de Balmer se podía expresar en la siguiente forma:

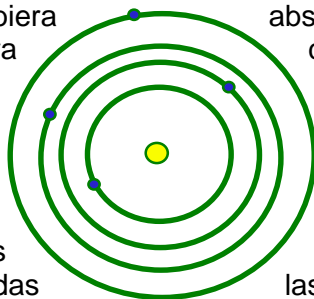


$$1/\lambda = R_H(1/2^2 - 1/n^2) \text{ en donde } n = 3, 4, 5, \dots$$

$R_H$  es la constante de Rydberg que equivale a  $109.677,76 \text{ cm}^{-1}$ .

Bohr supuso que lo que pasaba era que al entrar el hidrógeno en incandescencia la energía aplicada era suficiente para hacer que el único electrón del átomo de hidrógeno absorbiera una cierta cantidad de energía que lo haría girar a una distancia mayor del núcleo. De acuerdo con Einstein y Plank, sólo se podría absorber y emitir energía en forma de *cuantos*. Se podía, entonces, presumir que el electrón podía absorber un cuanto de una determinada energía y saltar a una órbita nueva. Al caer a la órbita original, el electrón emitiría el cuanto absorbido dando origen a la línea espectral. Como los *cuantos* pueden tener diferentes energías, era posible que el electrón saltara a diferentes órbitas posibles, de acuerdo con la energía absorbida. Por consiguiente, se podía decir que el electrón del hidrógeno sólo podía encontrarse en ciertas órbitas alrededor del núcleo, y no en cualquier lugar del espacio, y que cada una de estas órbitas estaba asociada a un nivel determinado de energía.

De lo anterior, era entonces posible proponer que el átomo era un sistema planetario con espacios permitidos u órbitas circulares concéntricas en las cuales se podía localizar un electrón siempre y cuando hubiera absorbido la cantidad de energía cuantificada suficiente para colocarse, así fuera temporalmente, en una de dichas órbitas. Había que tener en cuenta dos condiciones extremas: una, que el electrón estuviera en condiciones de mínima energía, lo que podríamos llamar su base, y otra, en la que el electrón se encontrara infinitamente lejos del protón, el protón sólo. Entre estas dos condiciones extremas estarían todas las órbitas posibles, cuya energía es decir, en la que encontraríamos correspondría a las líneas espectrales encontradas en las diferentes regiones del espectro, que para este caso se extendía en esa época desde el de los rayos X hasta el del infrarrojo.



Sin embargo, Bohr fue más lejos y postuló que no existía un número ilimitado de órbitas entre los dos extremos, sino que sólo eran permitidas aquellas para las que el momento angular del electrón,  $mvr$ , en donde  $v$  es la velocidad del electrón que se desplaza en un

círculo de radio,  $r$ , es un múltiplo entero de  $h/2\pi$  en donde  $h$  es la constante de Planck. Por consiguiente,

$$mvr = nh/2\pi \quad (1)$$

Postuló además que el electrón no irradia energía cuando se encuentra en una órbita permitida, pero pierde o gana energía cuando salta de una órbita permitida a otra permitida:

$$E_i - E_f = hv$$

Finalmente, es necesario que haya un equilibrio de fuerzas entre la centrípeta del electrón y la coulombica, o fuerza de atracción eléctrica, entre el protón y electrón.

En efecto, si presumimos que la ley de Coulomb aplica a la interacción del protón y del electrón, tendremos que

$$F = e^2/r^2 \quad (2)$$

en donde  $e$  es la carga del protón y del electrón y  $r$  es la distancia entre los dos. Pero  $F$  es también la fuerza centrífuga del electrón que sufre una aceleración hacia el protón de

$$a = v^2/r$$

de manera que la fuerza será

$$F = ma = mv^2/r \quad (3)$$

Si igualamos las ecuaciones (2) y (3) tendremos que

$$mv^2 = e^2 / r \quad (4)$$

y la energía cinética del electrón será, entonces,

$$\frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} e^2 / r \quad (5)$$

El radio de las órbitas permisibles se puede obtener teniendo en cuenta la energía cinética del electrón. Por tanto, si eliminamos la  $v$  de las ecuaciones (1) y (5) y rearreglamos, tendremos que

$$r = n^2 ( h^2 / 4\pi^2 me^2 )$$

Toda vez que  $h$ ,  $m$  y  $e$  son constantes físicas conocidas, podemos calcular el radio de cada órbita para los diferentes valores de  $n$ . Así, para la órbita estacionaria más pequeña,  $n=1$  y el radio es igual a  $0.529 \text{ \AA}$ .

Esta información es interesante, pues si se tiene en cuenta que se había calculado que el diámetro de un protón es del orden de  $2 \times 10^{-5} \text{ \AA}$ , se puede apreciar que el radio de la primera órbita es alrededor de 10.000 veces más grande que el radio del protón. Es decir, el átomo está constituido esencialmente de espacio vacío, como encontró Rutherford para su sorpresa.

La energía del electrón se puede deducir a partir del radio de la órbita donde se encuentra, simplemente sustituyendo el valor de  $r$  en la ecuación que describe su energía cinética. No vale la pena hacer esos cálculos aquí, pero son un ejercicio elemental para hacerlo en casa. De todas formas, si se hace, y se calcula la frecuencia de la radiación que debe ser emitida cuando un electrón pasa de una órbita con energía  $x$  a otra con energía  $y$ , teniendo en cuenta que  $\nu = (\epsilon_x - \epsilon_y) / h$ , entonces, podemos obtener que

$$\nu = (2\pi^2 m e^2 / h^3) (1/n_x^2 - 1/n_y^2)$$

Nótese que esta fórmula tiene la misma forma que la de Rydberg, y el cálculo de la primera parte de la expresión corresponde bastante bien a la constante de Rydberg, cuando en vez de frecuencia se usa el recíproco de la longitud de onda, ya que  $\bar{\nu} = 1/\lambda$ .

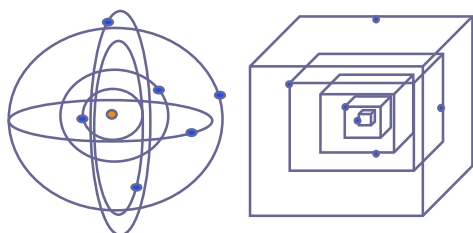
La gran contribución de Bohr fue, entonces, la de armonizar la propuesta de un átomo planetario, compuesto principalmente de espacio, con la evidencia espectral que él interpretó como la división del espacio alrededor del núcleo en espacios concéntricos, en algunos de los cuales podía encontrarse un electrón con suficiente energía para haberse localizado allí, y otros espacios intermedios en los que era imposible que se pudiera encontrar el electrón.

Bohr trató de aplicar su modelo a los espectros de elementos con más protones y electrones, pero se encontró con que ya no existía la correspondencia que había podido encontrar en el espectro del hidrógeno. En efecto, con espectrómetros más precisos se había encontrado que algunas de las líneas de elementos diferentes a hidrógeno eran dobles o aún más complejas. Esto obligó a que se buscara un modelo de átomo que se acercara más a la realidad.

## CONCEPCION MODERNA DEL ÁTOMO

El primer intento lo hizo Sommerfeld, quien introdujo la idea de que, además de órbitas circulares, podían existir órbitas elípticas, y dedujo unas ecuaciones para describirlas. Sin embargo, esto no explicaba cabalmente las observaciones espectroscópicas de átomos más grandes. Y luego se encontraba la complicación de los espectros no de átomos elementales sino de compuestos.

Los cimientos de la física moderna se establecieron en esos años en que se trató de comprender el átomo, y hay un número muy importante de personas que contribuyeron en las dos décadas siguientes a nuestra comprensión actual, tanto de la estructura atómica, como de la manera como los átomos se unen para formar moléculas.



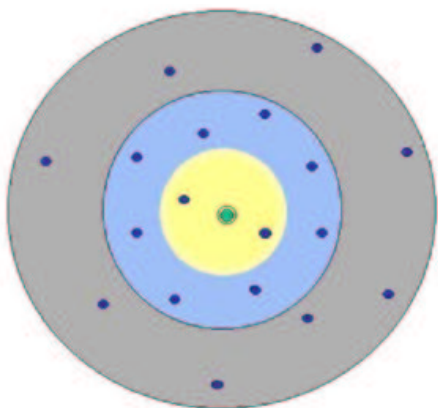
En 1916, G.N.Lewis publicó un artículo en el que proponía que todos los átomos estaban constituidos por un núcleo esencial inalterable y alrededor de ese núcleo existen unas capas *cúbicas* concéntricas, cada una de las cuales puede acomodar varios electrones.

## El átomo de Langmuir

Langmuir encontró que estas dos teorías, la de Bohr y la de Lewis, aparentemente contradictorias entre sí, eran de hecho, complementarias. Para demostrarlo se empeñó en buscar un modelo atómico que explicara las reacciones químicas. Partiendo del modelo de Dalton, Berzelio había propuesto que la afinidad química se debía a la “polaridad eléctrica” de los átomos.

En 1852, Frankland había introducido la idea de “valencia” como la tendencia de un elemento a combinarse con uno o más átomos de hidrógeno. Sin embargo, a qué se debía esa afinidad o valencia continuaba siendo un misterio.

En 1912, Moseley había encontrado que “ existe en el átomo una cantidad fundamental que aumenta en escalones regulares al pasar de un elemento al siguiente. Esta cantidad sólo puede ser la carga del núcleo positivo central”. Este descubrimiento fundamental le permitió asignar **números atómicos** a los elementos, que dependen únicamente del número de lo que posteriormente Rutherford llamaría protones, o núcleos de hidrógeno cargados positivamente. Langmuir observó que el Helio (número atómico=2) y el neón (número atómico=10) eran elementos estables que no se combinaban con otros elementos para formar compuestos. Esto sólo podía querer decir que una capa en la que se encontraban 2 electrones o una más grande en la que había diez estaba completa y no podía ceder ni aceptar electrones. Por el otro lado, el hidrógeno, con un sólo electrón tendía a completar la capa con otro electrón cedido por otro elemento. A su vez, el litio tendía a perder un electrón quedándose con su capa de dos, mientras que el flúor, con dos electrones en una capa interna y siete electrones en su capa más externa, activamente busca otro electrón para completar los diez. Los otros elementos que se encuentran en la tabla periódica entre estos dos tienden a ganar o perder más electrones, siempre hasta alcanzar los diez correspondientes a la estructura estable del neón. El siguiente elemento inerte en la tabla periódica es el argón, cuyo número atómico es 18. Es claro, entonces, que los 18 electrones deberán disponerse en tres capas concéntricas, la primera de las cuales se completa con dos electrones y las siguientes dos con ocho



electrones cada una. De acuerdo con Langmuir, cuando un elemento tiene pocos electrones en su capa más externa, tiende a cederlos, y por consiguiente se comporta como un *metal*. Por el contrario, cuando la capa más externa tiene muchos electrones sin completar los que corresponden a la capa, tiende a aceptarlos de un *metal* y se comporta como un *no-metal*. Estas son uniones polares. Sin embargo, cuando los átomos tienen un número intermedio de electrones, no los ceden ni aceptan de otros, sino que más bien forman uniones no-polares en las que dos electrones son compartidos entre los dos átomos que forman la unión.

La teoría de las **capas concéntricas** de Langmuir fue un paso muy importante para el entendimiento de la estructura atómica y comenzó a explicar fenómenos tales como la afinidad química y dio bases para entender el concepto de valencia que ahora se entendió como el número de electrones que puede ceder o aceptar un elemento. Además, permitió entender porqué los diferentes isótopos de un mismo elemento, es decir aquellos que tienen diferente peso atómico pero igual número atómico, poseen las mismas propiedades

químicas, toda vez que estas últimas solo dependen de los electrones externos y no de la constitución del núcleo.

Si bien el modelo atómico de Langmuir satisfacía las necesidades de la química, y en términos generales es el que aún se enseña en la mayoría de los cursos de esta materia, continuaban sin explicar algunas observaciones de física experimental. Para obtener un mejor modelo fue necesario el desarrollo de dos enfoques que Schrödinger demostró eventualmente que eran equivalentes: el de la mecánica ondulatoria y el de la mecánica cuántica. Aunque no nos adentraremos en estos tratamientos, vale la pena mirar algunas de sus condiciones y las conclusiones que se derivan de ellas.

### ***La dualidad onda-partícula del electrón***

La naturaleza ondulatoria de la luz había sido reconocida a partir de las propuestas y experimentos de Young en 1800. Einstein había propuesto en 1905 que el fotón era al mismo tiempo onda y partícula. En 1923 un joven estudiante doctoral, Louis de Broglie, publicó tres notas que el año siguiente defendería como su tesis doctoral. El había trabajado en espectroscopía siguiendo el modelo de Bohr y Sommerfeld para el átomo, pero se encontraba con el problema de que no existía una ley física que permitiera trabajar cuantitativamente las reglas de los cuantos. En esas tres notas y en su tesis, de Broglie propuso, para resolver el problema, que la idea de Einstein se debía extender a otras partículas, especialmente al electrón. De acuerdo con su propuesta, si una partícula de masa  $m$  tiene una velocidad  $v$ , entonces, la longitud de onda asociada con ella es

$$\lambda = h / mv$$

en donde  $h$  es la constante de Planck. La velocidad de la onda,  $w$ , se relaciona con la velocidad de la partícula por la ecuación

$$wv = c^2$$

en donde  $c$  es la velocidad de la luz.

### ***Concepción mecánico-cuántica del átomo***

En 1926, Schrödinger utilizó la hipótesis de de Broglie en un esfuerzo para explicar los fenómenos cuánticos y desarrolló lo que podríamos llamar la mecánica ondulatoria. Más o menos al tiempo, Heisenberg, Jordan y Born desarrollaban un tratamiento matricial del mismo fenómeno que se conoce como mecánica cuántica. En esencia, ambos tratamientos permiten escribir una ecuación a través de la cual podemos, como el mismo Max Born propuso, encontrar la función de densidad de probabilidad de encontrar un electrón de ciertas características en una región determinada del espacio alrededor de un núcleo atómico.

A partir del tratamiento de Schrödinger se pueden asignar a un electrón tres números, que se conocen como números cuánticos:  $n$ , conocido como número cuántico principal, que puede ser cualquier número entero mayor que 0.  $l$ , que representa el momento angular orbital del electrón y que puede tomar valores enteros entre 0 y  $n - 1$ . Finalmente,

$m$ , el número magnético orbital que puede tomar valores entre  $l$ ,  $0$  y  $-l$ . Con estos números se llega a una aproximación del estado de un electrón. Sin embargo, es necesario tomar en cuenta otro número cuántico, el *espín*, cuyo concepto fue introducido por Uhlenbeck y Goudsmit en 1925 para explicar la división de las líneas espectrales cuando la fuente se colocaba en un campo magnético.

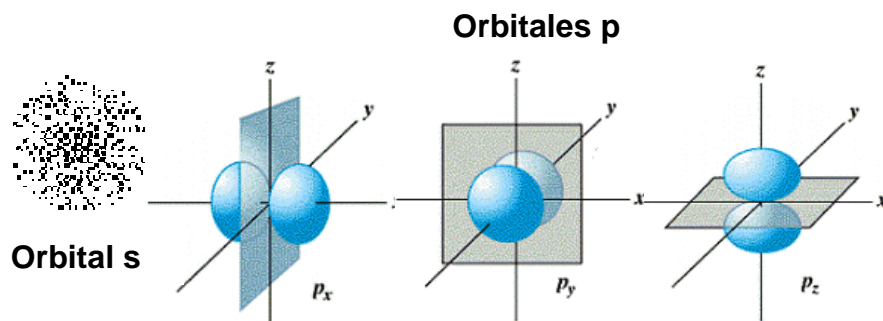
En ese mismo año de 1925, W. Pauli introdujo lo que se vino a conocer como el *principio de exclusión de Pauli* que dice que no pueden existir dos electrones en un átomo en el mismo estado. Esto quiere decir que ningún electrón en un átomo puede tener los mismos números cuánticos que otro. De este principio se deriva la siguiente tabla para los primeros 10 elementos. Esta tabla se puede extender para el resto.

| n | l | m  | s    | Nº electrones en subgrupo | Nº electrones en grupo completo |
|---|---|----|------|---------------------------|---------------------------------|
| 1 | 0 | 0  | +1/2 | 2                         | 2                               |
| 1 | 0 | 0  | -1/2 |                           |                                 |
| 2 | 0 | 0  | +1/2 | 2                         | 8                               |
| 2 | 0 | 0  | -1/2 |                           |                                 |
| 2 | 1 | -1 | +1/2 |                           |                                 |
| 2 | 1 | -1 | -1/2 |                           |                                 |
| 2 | 1 | 0  | +1/2 |                           |                                 |
| 2 | 1 | 0  | -1/2 |                           |                                 |
| 2 | 1 | 1  | +1/2 | 6                         |                                 |
| 2 | 1 | 1  | -1/2 |                           |                                 |

Esta tabla es generalmente aceptada en los textos de química. Tiene una implicación y es que en un átomo de número atómico 10, los electrones se distribuyen en tres capas concéntricas correspondientes a tres subgrupos, el primero de dos, el segundo también de dos y el tercero de seis electrones.

Esta, sin embargo, no corresponde a la observación de compuestos formados con elementos con  $n = 1$  y  $2$ . En efecto, estos elementos podrían dividirse, a su vez, en dos grupos: aquellos cuyo número atómico es de 3 y 4, que se comportan como si existieran dos capas: las correspondientes a los dos grupos que se completan con 2 electrones cada uno y los de número atómico superior a cinco que también se comportan como si también existieran sólo dos capas, en este caso de 2 y hasta de 8 electrones. Esto último ha determinado que para el segundo caso se introduzcan conceptos como la hibridación de orbitales atómicos.

## LA MOLECULA DE HIDROGENO



Las concepciones que hemos venido discutiendo nos revelan un átomo compuesto por un núcleo en el que se encuentra la casi totalidad de la masa y unos electrones

periféricos, colocados a gran distancia del núcleo, en espacios permitidos que llamamos orbitales atómicos, y con una cierta energía asociada al electrón que se encuentra en un determinado orbital. Para obtener esta imagen del átomo los físicos recurrieron al estudio de las manifestaciones de átomos que se encuentran a altísimas temperaturas, tales como las que se dan en las estrellas o en la materia en incandescencia.

A pesar de que hoy en día hay poca controversia en relación con la concepción cuantomecánica del átomo que hemos esbozado, no podemos decir que haya unanimidad en la comunidad científica en cuanto se refiere a aspectos tales como la cuantificación de la energía, por un lado, o en lo que tiene que ver con las reacciones entre átomos a temperaturas tales como las que se dan en la biosfera en la tierra. En efecto, Bohm ha desarrollado una teoría alterna a la cuántica para explicar con éxito el comportamiento de los electrones en un átomo, manteniendo la idea familiar de lo continuo, en contraposición a la cuantificación de la energía. Sin embargo, al final, su tratamiento matemático resulta en una función de onda en la que se incluye la probabilidad de encontrar al electrón en un espacio determinado. Este tratamiento no niega para nada el modelo atómico desarrollado a principios de siglo. Tan sólo niega que tengamos que aceptar la cuantificación de la energía como base para llegar a él.

Por el otro lado, para los químicos, los biólogos y los bioquímicos, el problema es tratar de entender la forma como los átomos pueden interaccionar entre sí, en una ventana de temperatura que se abre apenas entre alrededor de 273 K<sup>o</sup> y un poco más de 313 K<sup>o</sup>, para formar moléculas, algunas simples, otras altamente complejas, y que son las que hacen parte de los seres vivos. En esta ventana de temperatura, ventana en la que existe la vida como la conocemos en la tierra, podemos presumir que los electrones de cualquier átomo se encuentran en su estado de energía más bajo, y que se distribuirán alrededor del núcleo en ciertos espacios permitidos y de acuerdo a dos condiciones: 1) su energía intrínseca y 2) la presencia o ausencia de otros electrones con similar energía.

La búsqueda de una explicación a la existencia de compuestos de dos o más elementos llevó a la concepción del enlace químico, cuya teoría, en su forma moderna, fue particularmente desarrollada por Linus Pauling, partiendo de la concepción cuantomecánica del átomo. Para llegar a esta explicación fue, sin embargo, necesario que Shrödinger escribiera su ecuación.

En efecto, a finales del siglo XIX se entendía la unión entre elementos para dar compuestos como una propiedad de dichos elementos de ceder o aceptar electrones a otros o de otros elementos que se llamaba "**valencia**", lo que realmente no es sino una forma de expresar la ley de las proporciones múltiples de Dalton, y que se encuentra perfectamente incrustada en nuestros libros de texto. La valencia es, pues, una observación, y no una explicación. En 1819, Berzelius había tratado de unificar la ley de las proporciones múltiples con el reciente descubrimiento de las cargas eléctricas suponiendo que cuando un átomo se acercaba a otro se producían sobre cada uno unas cargas eléctricas que los atraían y los mantenían juntos. Sin embargo, la existencia de moléculas diatómicas tales como H<sub>2</sub> o N<sub>2</sub> hacían imposible la propuesta de que fueran las cargas eléctricas las que mantenían juntos a los elementos de un compuesto. Pero, con la demostración de la existencia del electrón y luego del protón se retomó esta idea para explicar la formación de compuestos y se postuló que podían existir varias circunstancias: había casos en los que la atracción eléctrica era compartida igualmente por los átomos dando, entonces, un enlace "**covalente**" mientras que en otros, la electricidad de un átomo se desliza una gran distancia hasta acercarse a otro átomo, dando así un enlace

**“iónico”**. De allí a hablar de **“enlaces coordinados-covalentes”** no había sino un paso. Esta concepción de valencia y de enlaces iónicos, covalentes y coordinados-covalentes es útil y se encuentra en nuestros textos.

Sin embargo, una explicación del enlace químico finalmente se obtuvo al aplicar la ecuación de Shrodinger a la molécula de hidrógeno. La primera solución, no exacta, de la ecuación fue propuesta en 1927 por Heitler y London y en 1933 James y Coolidge ofrecieron la primera solución exacta. Esta diferencia de tiempo entre la primera aproximación y la solución, explican según Villaveces, las interpretaciones fantasiosas del enlace químico que aparecen en los textos actuales de química, incluyendo el concepto de resonancia! Su excelente artículo, “El influjo de la obra de Shrodinger sobre la química del Siglo XX” aparece como anexo a este módulo. En síntesis, James y Coolidge establecieron un sistema de dos protones y dos electrones y utilizando la ecuación de Shrodinger trataron de calcular la energía cinética de los electrones, (despreciando la de los protones, ya que debido a su gran masa relativa a la de los electrones, tal energía será muy pequeña), y todas las posibles atracciones y repulsiones entre las partículas.

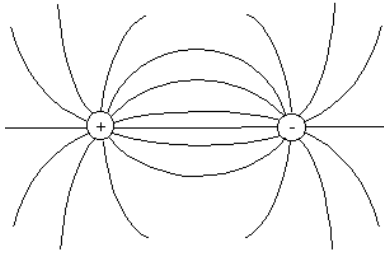
A partir de este tratamiento lograron demostrar teóricamente que la molécula de hidrógeno a temperatura de la tierra es estable, que se requiere una enorme cantidad de energía, 4.75 e.v., para separar los dos átomos y que la distancia entre los núcleos es de  $0.74 \text{ \AA}$ . Estas cantidades fueron comprobadas experimentalmente más tarde. Heitler y London, por su parte, habían logrado una primera aproximación, que aunque en términos generales era correcta, se apartaba de los valores experimentales. Esto permitió que rápidamente se publicaran explicaciones basadas en esta aproximación tales como la teoría de la resonancia, que no tienen asidero en la realidad o la extensión de la idea del orbital atómico a un orbital molecular, concebido como un espacio entre dos átomos en el cual la función de probabilidad de encontrar un par de electrones es más alta. Todas estas concepciones han sido muy útiles, pero, desafortunadamente, tomadas como realidades físicas, en vez de como modelos matemáticos, nos han llevado a mantener ciertas creencias que confunden, más que explican ciertos hechos, particularmente en el campo de las ciencias biológicas.

Por esta razón, y a pesar de que el modelo que surgió del tratamiento matemático cuantomecánico del átomo ha resistido el paso del tiempo, pienso que es útil en este momento, sin olvidarnos de él, el hacer un tratamiento más mecanicista que nos explique los fenómenos biológicos. Las concepciones que expondré a continuación son fenomenológicas y no cuentan con un respaldo teórico-matemático. Sin embargo, tienen la única virtud de simplificar los fenómenos y permitirnos hacer ciertas predicciones acerca del comportamiento de moléculas grandes que permitirán entender a un nivel muy familiar, sus funciones.

### *Un experimento mental*

Es perfectamente legítimo que cuando sea imposible hacerlo en un laboratorio, el científico imagine lo que le podrá ocurrir a un sistema específico en determinadas circunstancias si se varían las condiciones. Esto es lo que llamamos un experimento mental.

Hagamos un experimento mental con un átomo de hidrógeno. Coloquemos un átomo de hidrógeno específico en el espacio interestelar, donde no sienta ni ejerza ningún tipo de



fuerza, es decir, donde no pueda tener ningún tipo de interacción ni intercambio con el medio. Consideremos unas condiciones iniciales en las que el protón y el electrón se encuentren a la distancia correcta, es decir, el electrón a unos 10.000 diámetros protónicos del protón, pero ambos en reposo. Será fácil visualizar que en estas condiciones el sistema protón-electrón se comportará en una forma similar a una barra con dos polos eléctricos, uno positivo y

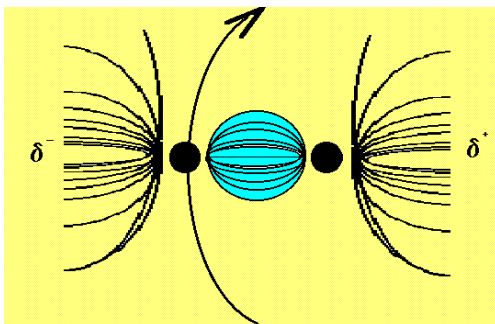
otro negativo. Análogamente a lo que vemos en el caso de un imán, habrá líneas de fuerza que partiendo de los núcleos de carga los unen. Pero naturalmente, habrá unas líneas de fuerza que se pierden en el espacio a partir de los dos extremos o polos de la barra. Consideremos, además, que las líneas de fuerza existen en un espacio tridimensional, y por tanto, podríamos imaginarnos esas líneas de fuerza como dos esferas sin límites precisos, cuyos centros serían el protón y el electrón, que debido a la diferente naturaleza de su carga, positiva o negativa, establecerían una fuerza de atracción que trataría de hacer que las cargas se acerquen una a otra. En la visión tridimensional, las líneas de fuerza que existen entre las cargas formarán una especie de huso, mientras que las líneas que se pierden en el espacio irradian en todas las direcciones.

Para algunos físicos, la fuerza de atracción en un campo eléctrico es debida simplemente a un intercambio de fotones. Por consiguiente, lo que tendríamos sería un intercambio de fotones entre el protón y el electrón a lo largo de las líneas de fuerza entre las dos cargas. Pero también tendríamos unos fotones que se pierden en el espacio a partir de los centros de carga.

Cambiamos un poquito las condiciones. Acerquemos una carga de prueba, digamos, otro electrón, a unos 20.000 diámetros protónicos y en dirección al protón. En este caso, por lo menos parte de los fotones que emanan del protón y que antes se perdían en el espacio comenzarán a intercambiarse con esta carga de prueba. Es decir, se establecerá una fuerza de atracción entre el protón y la carga de prueba, cuya magnitud, naturalmente, se podrá cuantificar de acuerdo a la ley de Coulomb:

$$F = e^+ \cdot e^- / r^2$$

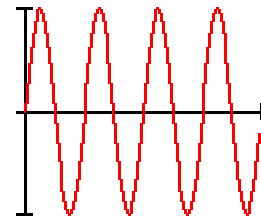
A una distancia que es el doble de la distancia entre el protón y el electrón la fuerza será muchísimo menor, pero lo importante es ¡que existirá! En otras palabras, podemos afirmar que en las condiciones interestelares propuestas, y con el electrón y el protón en reposo, habrá un “exceso” de carga por encima del que los mantiene unidos, que podrá ser “sentido” por una partícula de prueba que se acerque lo suficientemente a cualquiera de los dos polos del sistema.



Volvamos ahora a las condiciones iniciales, y retiremos la partícula de prueba. Echemos ahora a andar el electrón. Como habíamos discutido más arriba, el electrón deberá ahora moverse a una velocidad tal que se contrarreste la fuerza de atracción, pero no lo suficiente como para hacer que el electrón se aleje infinita y linealmente del protón. Esto obligará a que el electrón adquiera ahora una moción alrededor del protón. La

moción descrita en una primera revolución necesariamente tendrá que ser un círculo. ¿Tendrá el electrón que mantenerse en este mismo círculo en sucesivas revoluciones, o podrá haber una precesión del círculo manteniendo el protón como centro en forma tal que después de un número suficiente de revoluciones podamos decir que la moción del electrón es mejor descrita por la superficie de una esfera? El modelo cuantomecánico nos dice precisamente que la mayor probabilidad de uno encontrar el electrón, si esto fuera posible, sería en un espacio equivalente a la superficie de tal esfera. Pero, de todas formas, si nosotros paramos el movimiento en nuestro experimento, encontraríamos que el electrón en una determinada revolución describe un círculo.

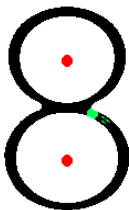
Hagamos ahora otra cosa: en vez de dejar que el electrón se mueva a la velocidad necesaria para contrarrestar la fuerza centrípeta de atracción, hagamos que se mueva lentamente describiendo el círculo que corresponde a cada revolución. Podremos, entonces, observar que mientras el electrón está describiendo el círculo, tanto el “exceso” de carga positiva como el de la negativa que antes se perdían en el espacio cambian de posición a lo largo del círculo descrito, es decir, tendríamos que si ahora ponemos la carga de prueba en el mismo sitio en el que la habíamos puesto antes, la carga de prueba sentirá una fuerza atractiva oscilante que irá haciéndose máxima a medida que el electrón se aproxima al punto más alejado de la carga de prueba dejando al protón entre los dos, y disminuirá más y más hasta convertirse en una fuerza repulsiva máxima en el momento en que la carga de prueba y el electrón estén en las posiciones de mayor cercanía. La forma como cambian estas fuerzas podría, entonces, ser descrita por una onda sinusoidal.



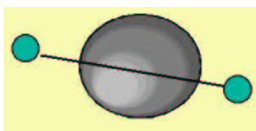
Nuevamente, lo importante de esta concepción sería que aún en el caso de que el electrón se esté moviendo alrededor del protón, una carga de prueba sentiría atracción o repulsión. Esto quiere decir que, aunque **formalmente** neutro desde el punto de vista eléctrico, en condiciones especiales podríamos hablar de un átomo con una cierta polarización de cargas! Esta polarización, debido a la rapidez del movimiento alrededor del núcleo, generalmente no tendría efectos. Sin embargo, se podrían tener circunstancias en que esta polarización tiene consecuencias. Volveremos sobre este punto posteriormente.

### *La molécula de hidrógeno*

Si en vez de una carga de prueba acercamos a nuestro átomo de hidrógeno un segundo átomo de hidrógeno, observaremos que algo muy interesante pasa. En efecto, al acercarse el electrón de uno de los átomos al electrón del otro y confundir sus órbitas,



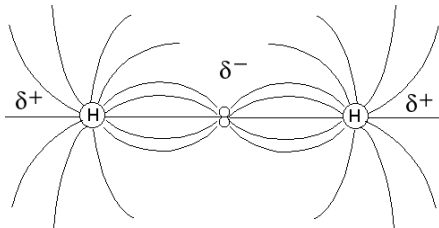
lejos de sufrir una repulsión tan grande, como la que esperaríamos de dos campos negativos puestos en contacto, ahora comparten el mismo espacio. Pero, ¿en qué forma? ¿Será que ahora la moción de uno de los dos electrones podría ser descrita por un 8? Es decir, ¿que primero describe un círculo alrededor de uno de los protones y luego otro alrededor del otro protón? Esta en cierta forma fue la interpretación que surgió de la solución aproximada de Heitler y London a la ecuación de Schrödinger y que permitió la formulación de la teoría de resonancia.



Sin embargo, la solución exacta de la ecuación para un sistema de dos protones y dos electrones nos da una respuesta diferente. En efecto, nos dice que la probabilidad máxima de encontrar los **dos** electrones es en un espacio alrededor del centro del eje que une a

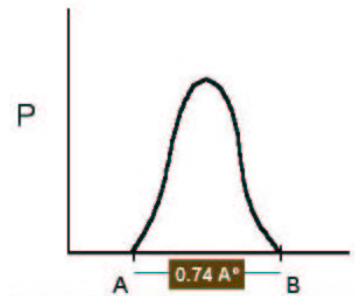
los dos protones!

En nuestro experimento mental veamos cómo podría ser esto. Imaginemos los dos protones que realmente no se mueven el uno en relación con el otro, es decir, que tienen una energía cinética prácticamente nula y que se encuentran a una distancia de  $0.74 \text{ \AA}$  el uno del otro. Si recordamos que el diámetro de un protón es de  $2 \times 10^{-5} \text{ \AA}$ , un cálculo rápido nos muestra que la distancia entre los dos es equivalente a 37.000 diámetros! Es decir, existirá un espacio formidable en el cual se puedan encontrar los dos electrones. Si partiendo de una condición de reposo en la que ni protones ni electrones se mueven, pero con los electrones en el centro entre los protones, ponemos ahora a moverse a los electrones, podríamos suponer que, para un electrón en particular, la atracción de uno de los protones lo hará mover en esa dirección. Sin embargo, a medida que se aproxima a ese núcleo, la atracción del otro núcleo lo frenará hasta que le imprime un movimiento contrario hacia el otro. Y lo mismo sucederá con el otro electrón. En una primera aproximación podría uno suponer un movimiento armónico del electrón entre los dos núcleos. Pero esto tiene, entre otros, un gran inconveniente: en efecto, nos encontraríamos con que la velocidad del electrón es cero en el momento en que llega al extremo de su trayectoria y se devuelve. Para evitar este inconveniente podemos,



entonces, postular que el electrón describe una órbita, pero ahora no alrededor de un núcleo, sino en el espacio entre los núcleos. Esta órbita podría concebirse como una esfera, pero siguiendo la ecuación de onda, posiblemente se aproxime más a una especie de huso bastante abombado en su parte central.

La descripción de esta órbita no tendría problema especial para un sólo electrón. Pero cuando ponemos dos electrones con la misma energía en un mismo espacio surge la pregunta: ¿Cómo es que dos campos negativos fuertes que comparten el mismo espacio no se repelen? Arriba vimos que uno de los números cuánticos es el espín, cuyo valor puede ser  $0 \frac{1}{2}$  o  $-1/2$ , y que explica la división de una línea cuando se hace el espectro en un campo magnético. Vimos también que esto permite que dos electrones y sólo dos electrones puedan tener la misma energía y compartir un mismo espacio. Podríamos decir, entonces, que quizá este espín represente la componente magnética del campo ejercido por el electrón. De ser esto correcto, podríamos proponer que un electrón ejerce un campo magnético con dos polos: norte y sur. Lo que es más, este campo se



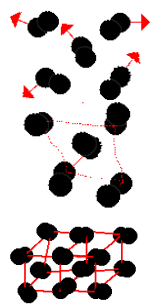
neutralizaría sólo si ese electrón comparte el mismo espacio con otro de igual energía, pero que ejerza un campo magnético contrario. La atracción de los dos campos magnéticos contrarrestaría la repulsión de los campos eléctricos. Podríamos, entonces, concebir al electrón como la mitad de una dobleta que sólo será estable en las condiciones de la tierra si se encuentra junta con su otra mitad en un espacio determinado que para el caso del hidrógeno que hemos venido comentando será el existente entre los dos núcleos.

De la discusión anterior surgen varias consecuencias para las condiciones existentes en la biosfera terrestre: a) los dos electrones de igual energía del hidrógeno tenderán a aparearse; b) el par de electrones estará en rápido movimiento en una órbita elíptica entre los dos protones; c) la carga negativa de los electrones es neutralizada por los protones,

creando entre ellos un vínculo de suficiente fuerza como para que se establezca una molécula estable y d) como consecuencia de lo anterior, no será posible que se encuentre un átomo de hidrógeno libre e independiente.

Continuemos con nuestro experimento mental todavía un poco más. La molécula puede ser concebida como una especie de cuerpo alargado en forma de huso con un protón en cada uno de sus extremos y dos electrones en el medio de ellos. Si ahora colocamos líneas de fuerza que irradian de cada uno de los centros de carga, encontraríamos una especie de hemiesfera de naturaleza positiva con un centro en cada uno de los protones; una esfera de carga negativa en el centro y una líneas de fuerza entre los protones y los electrones. Si ahora ponemos una carga de prueba negativa cerca de cualquiera de los protones, encontraremos que siente una fuerza debida al exceso de carga positiva que irradia de los extremos de la molécula; si la carga se coloca cerca del medio de la molécula, sentirá una repulsión. De hecho, entonces, ¡la molécula de hidrógeno no es realmente neutra! ¡Es una molécula polar!

Los resultados de nuestro experimento mental nos permiten explicar ciertos fenómenos comunes. Podemos postular que las moléculas neutras no ejercerán atracción alguna sobre otras moléculas similares. Por consiguiente, si ellas chocan entre sí, las colisiones serán perfectamente elásticas y después del choque se cambiará la dirección del movimiento, pero no su cantidad. Estas son las condiciones que determinan que una colección de moléculas neutras se presente en condiciones terrestres como un gas. Y si las moléculas son en realidad neutras, el gas se mantendrá como tal a cualquier temperatura por debajo de las que existen en la tierra. De hecho, el gas será gas aún a 0° K.



Esto, sin embargo, no ocurre. El hidrógeno que hemos venido considerando se licúa a 20.3° K y ¡se solidifica a 13.8° K! Es decir, si la energía cinética de las moléculas disminuye lo suficiente como para permitir que las moléculas se acerquen e interactúen, entonces hay una fuerza de atracción entre ellas que sólo podemos explicar como atracción de campos entre moléculas polares. Si la energía cinética de las moléculas es aún lo suficientemente grande como para permitir que una vez establecidas las atracciones, éstas se rompan para establecer otras nuevas en forma muy rápida, entonces tendremos un líquido. Si la energía cinética es menor, las atracciones se establecerán fuertemente y las moléculas se ordenarán en el espacio para asegurar el máximo de interacción atractiva. En ese caso, tendremos un sólido.

La posibilidad de que nuestro experimento mental tenga verisimilitud se desprende, precisamente, de que la molécula neutra más simple, la del hidrógeno, en efecto se licúa y se solidifique. Pero no solamente la molécula más simple muestra polaridad en la práctica. El helio, compuesto por dos protones, dos neutrones y dos electrones, es lo más neutro que puede darse, y por tanto, debería ser un gas aún a 0° K. Sin embargo, se licúa a 4.1° K y ¡llega a solidificarse a 1° K! En estos estados presenta propiedades muy interesantes, pero de todas formas ya no es un gas, demostrando que en alguna forma el átomo de helio se encuentra polarizado.

De lo anterior se deduce que el estado de un compuesto depende esencialmente de las atracciones que se puedan establecer entre sus moléculas y de la estabilidad que se logre en esas atracciones.