

## De **COPÈRNIC** a **BOHR**

### Òrbites planetàries *versus* orbitals atòmics

Miguel Angel Sanchis Lozano

Departament de Física Teòrica i Institut de Física Corpuscular CSIC-UV

Nicolás Sanchis Gual

Departament de Astronomia i Astrofísica · UV

**Nicolau Copèrnic** (1473-1543) és considerat el fundador de l'astronomia moderna en passar, després d'un llarg període de rebuig, de la concepció d'un univers geocèntric a un heliocèntric i capgirar de manera irreversible la visió del cosmos prevalent des de l'antiguitat. Per això, aquest canvi profund de mentalitat, que anà més enllà de l'àmbit científic, s'anomena Revolució Copernicana, i va desplaçar la Terra del seu suposat lloc privilegiat al centre del cosmos.

Ara bé, el primer astrònom que proposà el model heliocèntric del sistema solar, que col·locava el Sol, i no la Terra, en el centre de l'univers, fou el grec **Aristarc de Samos** (310 aC – 230 aC). El paradigma que dominava era la teoria geocèntrica d'**Aristòtil**, posteriorment desenvolupada per **Ptolemeu**; per tant, la representació heliocèntrica no va ser ben rebuda, i va ser criticada i rebutjada des de l'antiguitat fins a Copèrnic. Sense tindre clar el concepte d'inèrcia, la idea que la Terra es movia resultava inacceptable per tal com això semblava contradir el sentit comú i les observacions quotidianes (de fet, la Terra es pot considerar prou aproximadament com a un sistema inercial). A més, la hipòtesi es contraposava directament a les doctrines filosòfiques i les religions clàssiques, segons les quals la Terra havia de tindre un paper especial respecte als altres cossos celestes i el seu lloc natural seria el centre de l'univers.

Amb les observacions detallades de **Tycho Brahe** i la seua descripció matemàtica segons trajectòries el·líptiques deduïdes per un copernicà convençut com era **Johannes Kepler** (vegeu el número 23 de DAUALDEU), l'astronomia va tenir una influència fonamental en el posterior desenvolupament de la física gràcies a **Galileu** i a **Newton**, entre molts altres, amb la física aristotèlica definitivament desterrada de la descripció de la natura.

#### L'àtom de Bohr-Sommerfeld

El científic alemany **Joseph von Fraunhofer** (1787-1826), un expert en la fabricació de vidre i el pioner en l'ús astronòmic de l'espectròmetre, va estudiar amb detall l'anomenat espectre de la llum solar. Més d'un segle abans, Isaac Newton (1643-1727) havia descompost la llum solar en colors més elementals mitjançant un prisma i l'anomenà espectre (del llatí *spectrum*, imatge, fantasma). Al seu torn, Fraunhofer va examinar unes ratlles fosques (línies d'absorció) que es situaven a la mateixa posició que les corresponents ratlles lluminoses de l'espectre d'emissió (recordem que l'espectre d'emissió d'un element

químic consisteix en les radiacions que emet, en estat gasós, quan se li transmet energia, per exemple, calfant-lo).

Fraunhofer també va examinar l'espectre de la llum reflectida pels planetes del sistema solar i hi va trobar una estructura semblant. En canvi, quan dirigí el seu espectroscopi a la llum procedent de l'estrella Sirius, l'espectre fou diferent. Malgrat que no disposava de les eines tant teòriques com experimentals, estava convençut de que aquelles ratlles (que ara porten el seu nom) no eren causades pels efectes de l'atmosfera o del vidre de les lents. Uns anys més tard, **Kirchhoff** i **Bunsen** van comprovar amb dades més nombroses i precises que efectivament l'espectre d'absorció presentava línies fosques en el mateix lloc on hi havia línies brillants en el espectre d'emissió d'un determinat element químic.

En física atòmica les línies (o sèrie) de Balmer designen un conjunt de sis sèries anomenades de manera diferent que descriuen les emissions de línies espectrals de l'àtom d'hidrogen. Les línies de Balmer es poden calcular mitjançant una equació empírica descoberta per **Johann Balmer** el 1885. Poc després, la fórmula de **Rydberg** inspirada per l'equació de Balmer permeté trobar les sèries de línies anomenades de **Lyman**, **Paschen** i **Brackett**, fora de l'espectre visible.

L'observació dels espectres atòmics, molt abans que l'existència dels àtoms i la quantització de l'energia foren provades, esdevingué un dels fets empírics més transcendents en la física del segle XIX per a arribar a la revolució quàntica del segle XX. Abans d'això, nombrosos passos es donaren en el coneixement de l'estructura de la matèria, com ara, el descobriment de l'electró per **Joseph John Thomson** (1856-1940) investigant els raigs catòdics.

El 1911 **Ernest Rutherford** (1871-1937) va proposar un model atòmic que explicava els resultats aparentment sorprenents d'un experiment on partícules alfa (carregades positivament), provinents d'una font radioactiva, incidien sobre una fina làmina d'or. Algunes d'aquestes partícules podien ser desviades un gran angle, i fins i tot unes poques rebotaven, fets incomprendibles segons el model de *pudding* de Thomson, on la càrrega positiva es distribuïa uniformement al llarg del volum de l'àtom i on els electrons es movien. Per contra, el model de Rutherford proposava que la càrrega positiva i la major part de la massa estaven concentrades en un volum diminut en el centre de l'àtom (l'anomenat nucli atòmic, format, com sabem ara, per protons

i neutrons), mentre que els electrons es movien en òrbites al voltant d'aquest nucli sotmeses a la força elèctrica de Coulomb. Per tant, Rutherford visualitzava l'àtom com un espai buit amb un diàmetre d'uns  $10^{-10}$  m (1 Angstrom), mentre que el nucli ocupava una regió minúscula amb un diàmetre d'uns  $10^{-15}$  m (1 fermi).

Llavors, en el model de Rutherford de l'àtom els electrons giren al voltant del nucli com els planetes giren al voltant del Sol segons el model copernicà. **Niels Bohr** (1885-1962) va adoptar aquest model per al cas de l'hidrogen, suposant en particular òrbites circulars perfectes. Ara bé, segons la electrodinàmica clàssica, qualsevol càrrega accelerada (i l'electró en òrbita, pel fet de canviar la direcció del moviment, ho està) ha d'emetre radiació electromagnètica. Aleshores, el radi de l'òrbita hauria de decreixer produint un espectre d'emissió continu, fins que finalment l'àtom col·lapsa. Això voldria dir que no existirien àtoms estables a la natura en contra de la hipòtesi atòmica de **Dalton** i de nombroses proves.

Per solucionar aquest greu problema, Bohr va introduir dos postulats claus en el desenvolupament de la Mecànica Quàntica:

1. De totes les òrbites possibles, només són permeses aquelles tal que el moment angular de l'electró és un múltiple enter  $n$  de  $h/2\pi$ , és a dir

$$mvr = nh/2\pi$$

on  $m$  i  $v$  representen, respectivament, la massa i la velocitat de l'electró en una òrbita circular de radi  $r$ , i amb  $h$  la constant de Planck. Aquestes òrbites s'anomenen estacionàries i es corresponen amb un nombre enter de longituds d'ona associada a l'electró d'acord amb la naturalesa ondulatoria de la matèria (i no sols de la llum) proposada per **Louis de Broglie** (1892-1987).

2. L'energia emesa o absorbida per un àtom només pot ocórrer segons un nombre enter de quants (fotons). Per exemple, per a un fotó de freqüència  $\nu$  emès, les energies inicial i final de l'àtom estan relacionades segons l'equació:

$$E_i - E_f = h\nu$$

D'aquesta manera es podien explicar de manera qualitativa i quantitativa les sèries de ratlles observades en l'espectre de l'hidrogen. Aleshores, la sèrie de Balmer resulta de salts d'un electró entre un nivell d'energia proper al nucli ( $n=2$ ) i aquells nivells més distants. Els resultats observats i predits per la teoria eren prou bons.

L'èxit de l'àtom de Bohr va donar un ferm suport a la revolució quàntica iniciada per **Max Planck** (1858-1947), en interpretar l'espectre d'emissió tèrmica del cos negre, introduint-hi la hipòtesi (en un acte de desesperació, segons ell mateix va dir després) que l'emissió i l'absorció d'energia ha de tindre lloc, no de manera continua, sinó de manera discreta: en forma de quants, els fotons.

Ras i curt, el model atòmic de Bohr funcionava molt bé per a l'àtom d'hidrogen, però, en els espectres d'àtoms d'altres elements s'observava que els electrons d'un mateix nombre quàntic  $n$  tenien diferent energia, és a dir existien subnivells. El 1916, **Arnold Sommerfeld** (1868-1951) va perfeccionar notablement el model atòmic de Bohr amb dues modificacions bàsiques: òrbi-

**«L'observació dels espectres atòmics, molt abans de que l'existència dels àtoms i la quantització de l'energia foren provades, esdevingué un dels fets empírics més transcendents en la física del segle XIX per a arribar a la revolució quàntica del segle XX»**

tes el·líptiques i velocitats relativistes (velocitats properes a la velocitat de la llum) dels electrons. Sommerfeld no obtingué el premi Nobel malgrat que les seues aportacions a la física atòmica foren transcendents.

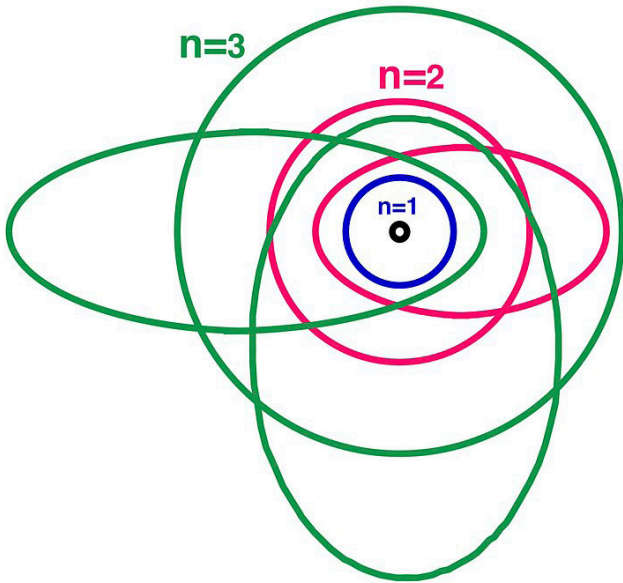
Aleshores, segons el nou model de Bohr-Sommerfeld dels àtoms, l'excentricitat de l'òrbita electrònica dóna lloc a un nou nombre quàntic (azimutal, després redefinit una mica i rebatejat com a *orbital*) que, junt al nombre quàntic principal  $n$ , determina la forma de les òrbites i podria explicar una certa estructura multicapa dels àtoms.

## Orbitals

Malgrat els èxits notables del model de Bohr-Sommerfeld, aquest patia de dificultats conceptuals i experimentals insuperables, entre altres l'esmentada emissió de radiació en girar l'electró en una òrbita circular o el·líptica al voltant del nucli. Calia, doncs, trobar una solució "radical" basada en el plantejament mateix de la incipient Mecànica Quàntica que estava desenvolupant-se en aquells anys.

Llavors el concepte d'orbital fou introduït cap a les acaballes dels anys vint: els orbitals no representen una posició concreta d'un electró en l'espai d'un àtom (o molècula), sinó que delimiten una regió de l'espai en què la probabilitat de trobar l'electró és elevada. I segons la interpretació habitual de la Mecànica Quàntica, a nivell subatòmic cal renunciar al concepte de trajectòria (clàssica) d'un electró, i només li podem donar una significació estadística o probabilística. Si l'electró no gira vertaderament (en sentit clàssic), no emetrà radiació: problema resolt! No obstant això, el preu a pagar fou elevat: la pèrdua de la visualització de les trajectòries de les partícules, la qual cosa no va agradar gens, al mateix **Albert Einstein** (1879-1955), que va introduir en la física el concepte de fotó quan va interpretar l'efecte fotoelèctric l'any 1905.

Els orbitals atòmics són definits mitjançant tres nombres quàntics: el nombre quàntic principal,  $n$ , que determina l'energia de l'orbital i pot prendre valors 1, 2, 3...; el nombre quàntic orbital,  $l$ , representa el moment angular de l'electró degut al seu moviment orbital com ja havia predit el model més primitiu de Bohr-Sommerfeld. Notem que  $l$  pren els valors 0, 1, 2... ( $n-1$ ), que originen, respectivament, els orbitals anomenats s, p, d, f... amb geometries més i més complexes (vegeu la figura). Si l'àtom està situat dins d'un camp magnètic extern, un desdoblament de nivells té



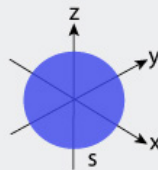
Model planetari de l'àtom Bohr-Sommerfeld: segons el nombre quàntic azimuthal les òrbites serien circulars (d'excentricitat nul·la) o el·líptiques (excentricitat no nul·la).

lloc (efecte Zeeman), necessitant per a la seua descripció d'un nou nombre quàntic anomenat magnètic, designat mitjançant la lletra  $m$ , que pren els valors  $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$ .

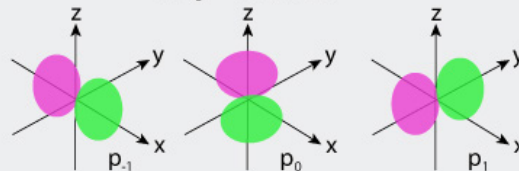
Finalment, si s'examinen les línies espectrals de l'hidrogen amb alta resolució, observem un desdoblament extra de nivells, designat com a estructura fina, la qual s'explica com a causada per l'espí (de l'anglès *spin*, que vol dir girar) de l'electró. S'introdueix doncs  $s$ , un nou nombre quàntic associat a un moment angular intrínsec que s'acobla al moment angular orbital. Malgrat que l'espí de l'electró es una propietat essencialment quàntica, es podria trobar una limitada analogia amb la rotació de la Terra al voltant d'el seu eix dins del model planetari de l'àtom.

Tanmateix, cal emfasitzar que no hem d'estendre massa l'analogia de l'espí com una autorotació a l'estil clàssic perquè, al contrari de la Terra, l'electró es considera com a una partícula puntual, sense extensió espacial, ja que difícilment podria girar al seu voltant. A més a més, el valor necessari de l'anomenada raó giromagnètica de l'electró requerit per a reproduir l'estructura fina observada resulta ser (molt aproximadament) el doble del valor clàssic esperat, és a dir, considerant l'electró com a una minúscula baldufa girant. Aquest exemple, a banda de la pèrdua del significat de trajectòria dels electrons en els orbitals atòmics (l'àtom no és, per tant, un sistema solar en miniatura), palesa que, per a la descripció del món a escales subatòmiques (regit per la Mecànica Quàntica), cal abandonar conceptes que ens resulten intuïtius i familiars al món clàssic.

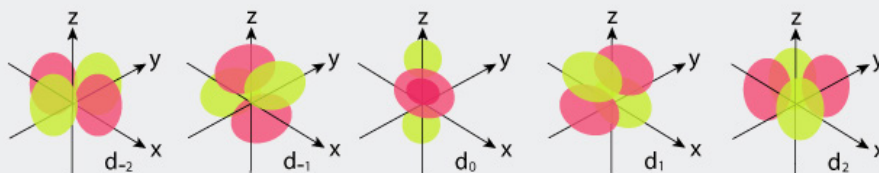
## 1. s-orbital



## 2. p-orbital



## 3. d-orbital



Model de l'àtom segons orbitals definint regions de l'espai on és molt probable (diguem-ne, 90%) trobar l'electró (si férem una mesura). Observem que per a  $n > 1$  hi ha "lòbuls" separats per punts on la probabilitat de trobar l'electró és zero. Però, aleshores, com pot l'electró passar d'un lòbul a un altre? (Resposta: pregunta mal plantejada, no hi ha trajectòries).