



## El origen de la Teoría Cuántica del átomo. Niels Bohr, 1913

**E**ste año 2013 es el centenario del átomo de Bohr, que inauguró la aplicación de la teoría cuántica al átomo. En esta exposición se recuerda la construcción de Bohr en su "Trilogía" (1913), se comentan diversos éxitos de la teoría cuántica antigua (1913-1925), así como algunas de sus dificultades, que llevaron al establecimiento de la Mecánica Cuántica moderna (Heisenberg, junio de 1925).

### HISTORIA DE LA HIPÓTESIS ATÓMICA

Que la divisibilidad posible de la materia pudiese terminar, que tuviese un límite, admitiendo por tanto los átomos con un cierto tamaño, fue ya imaginado por los griegos, desde los tiempos de Leucipo y Demócrito (s. V a. de C.); luego Lucrecio (este ya en Roma) abundó en el tema, influenciado por Epicuro; enfrente estaba la posición de Aristóteles y otros que defendían la posibilidad de división infinita de la

materia. La hipótesis atómica llegó como pura especulación hasta el siglo XIX pasando por un hilo conductor muy fino, del que entresacamos solo los nombres de P. Gassendi (francés, s. XVII) y G. Boskovitch (de Dalmacia, actual Croacia, s. XVIII), los dos sacerdotes católicos. También Newton era atomista: en particular defendió la teoría corpuscular de la luz.

La hipótesis atómica renace científicamente (como opuesta a su versión puramente filosófica) con los químicos ingleses y franceses de principios del s. XIX, desde Lavoisier hasta Faraday, pero sobre todo con Prout, Dalton y Proust. Los primeros modelos moleculares son de esa época, hacia 1820. La teoría atómica se incorporó a la teoría cinética de la materia (ca. 1840) en cuanto se entendió que el calor era una consecuencia de la agitación "térmica" de las moléculas; los primeros nombres aquí son Mayer, Joule y Helmholtz... En la segunda mitad del siglo XIX se empiezan a utilizar

sistemáticamente los átomos y las moléculas en muchos capítulos de la Física y sobre todo de la Química; en particular, se desarrolló mucho la teoría cinética molecular de los gases.

Hacia fin de ese siglo XIX domina una filosofía científica en extremo positivista, que arranca con August Comte, ca. 1850. Uno de sus insignes seguidores es Ernest Mach (1838-1916), quien se opone abiertamente a la existencia de los átomos, porque ni son "visibles" ni parece que puedan serlo (en un futuro próximo). Ludwig Boltzmann (1844-1906) se erige en campeón de los atomistas; pero tiene tantos contradictores que esa oposición se cita como una de las concausas de su suicidio en 1906. El propio Planck fue al principio antiatomista, mientras que Einstein fue siempre un encendido partidario de los átomos y abogó por buscar las pruebas experimentales de su existencia.

A fines del s. XIX una serie de descubrimientos experimentales van a elevar la teoría atómica de hipótesis razonable a ser una verdad incontrovertible, aunque ahora los átomos serán divisibles; citemos en serie: los rayos X (Röntgen, 1895), la radiactividad (Becquerel, 1896, los Curie; en seguida, E. Rutherford), el electrón (J. J. Thomson, 1897) y el efecto Zeeman (Zeeman, 1896), predicho por H. A. Lorentz el año anterior; parecía indudable en consecuencia de todo esto hacia, digamos 1900, que:

- Existen los átomos que, eventualmente, darán lugar, por combinación, a las muy diversas moléculas.
- La electricidad forma parte de la estructura atómica (si solo por la presencia de los rayos catódicos (electrones) y los rayos canales (iones positivos), más las cargas  $+2|e|$  de las partículas alfa, y beta  $-|e|$  en radiactividad); como consecuencia,
- Los átomos existen, pero (anti-etimológicamente) son divisibles, y sus constituyentes están eléctricamente cargados.

**“Que la divisibilidad posible de la materia pudiese terminar, admitiendo los átomos con un cierto tamaño, fue ya imaginado por los griegos.”**

### EL ÁTOMO DE RUTHERFORD

En esta época, hacia 1900, nacen las primeras especulaciones sobre la constitución de los átomos: hay diversos modelos atómicos, debidos e.g. a Lenard (la "dinamida"), al japonés Nagaoka (el átomo "saturniano") y el modelo más duradero de J. J. Thomson (esfera cargada positiva "gruesa", con electrones merodeando y neutralizando), que hoy solo tienen interés histórico.

El neozelandés (de origen) Ernest Rutherford (1871-1937) emprendió una investigación sistemática del átomo basándose en el fenómeno de la radiactividad, que él fue el primero en identificar como diferenciada en rayos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , los tres de muy diferente constitución. En particular, experimentos de él mismo y sus colaboradores, haciendo incidir partículas alfa sobre diversos blancos y estudiando su dispersión, con sus auxiliares Geiger (el del contador) y Marsden, en 1908-1911, dejaron fuera de toda duda que los átomos estaban constituidos por un "núcleo" central, que abarca casi toda la masa del átomo, con carga positiva, en un volumen muy pequeño (radio del orden de  $10^{-12}$  cm), neutralizado por una nube de electrones, girando de algún modo alrededor del núcleo; se sabía ya entonces, por diversos argumentos físico-químicos, que el diámetro de los átomos era del orden del Angstrom ( $1 \text{ \AA} = 10^{-8}$  cm), de modo que el átomo resultaba estar esencialmente vacío.

Templo Erecteion en la  
Acrópolis de Atenas (Grecia).

<http://viaje-a-grecia.blogspot.com.es>



## El origen de la Teoría Cuántica del átomo. Niels Bohr, 1913

Aquí hay un hecho curioso, insuficientemente explicado en la literatura: fue una "casualidad" que la fórmula deducida por Rutherford, conocida como la "Rutherford scattering formula", que determinaba la sección eficaz angular de dispersión,  $d\sigma/d\Omega$ , de las partículas alfa por los núcleos, fuese válida también en la mecánica cuántica moderna (M. Born, 1926), pues evidentemente Rutherford solo pudo deducirla, en 1909, de la mecánica clásica. De esa fórmula se sigue que las partículas alfa son desviadas con la ley  $d\sigma/d\Omega \propto \text{cosec}^4(\theta/2)$ , bien verificada experimentalmente.

Resulta difícil hoy día darse cuenta de lo poco plausible que era ese modelo de Rutherford del átomo, a principios del pasado siglo veinte: si algo parecía cierto e inviolable en Física eran las ecuaciones de Maxwell (1865), pero estas decían que una carga acelerada radia: los electrones solo se pueden considerar moviéndose alrededor del núcleo en órbitas cerradas, por tanto con aceleración, y por ello el sistema es dinámicamente inestable en sentido clásico: la energía radiada haría que, eventualmente, el electrón se precipitase en el núcleo; Thomson y otros habían estudiado además cómo se deben estructurar los electrones, si hay más de uno, para que se formase un (precario) equilibrio electrostático, aun sin contar con la inestabilidad por radiación... así resulta que el átomo de Thomson era relativamente poco estable, pero el de Rutherford era altamente inestable: si los electrones peri-nucleares no se mueven, no hay equilibrio, y si se mueven deben radiar energía; si radian energía, la pierden, y acabarían estrellándose en el nú-

cleo: no es así como se observaban los átomos, cuya estabilidad, incluso durante siglos, estaba empíricamente fuera de toda duda.

Rutherford era un (excelente) experimentador, pero no se preocupó demasiado de los posibles defectos teóricos de su modelo atómico.

### EL ÁTOMO DE BOHR: ANTECEDENTES INMEDIATOS

Ahora entra en juego el gran físico danés Niels Bohr (Copenhague, 1885 y 1962). Fue a Cambridge, Inglaterra, con J. J. Thomson tras defender su Tesis de 1911 sobre la situación de los electrones en los metales (teoría iniciada poco antes por Lorentz y Drude); no hubo sintonía entre ellos, y Bohr aterrizó en Manchester con Rutherford, con el que hubo buena armonía desde el principio. Bohr se dio cuenta de que las dificultades del átomo de Rutherford no



Niels Bohr (1885-1962).

<http://3d-car-shows.com>



Copenhague (Dinamarca), ciudad donde nació y murió Niels Bohr.  
<http://hawaiianmusings.blogspot.com.es>

tenían solución en el dominio de la Física clásica, de cuya insuficiencia él ya se había percatado en su Tesis doctoral (en especial en el estudio de las propiedades magnéticas de los metales). Pero antes de describir las contribuciones concretas de Bohr a la teoría atómica revisemos algunos antecedentes próximos (una biografía muy completa de Bohr viene en el libro de Pais!).

Recordemos que ya en diciembre de 1900 Max Planck (1858-1947) había introducido la hipótesis cuántica, en particular la constante  $h$  (por *hilfsmittel*), para explicar el espectro de la radiación térmica: esa constante  $h$  reflejaba el cuanto de acción (*Wirkung quantum*), y del que Albert Einstein (Ulm, 1879 – Princeton, 1955) se sirvió en 1905 para explicar el efecto fotoeléctrico, mediante la hipótesis del cuanto de luz. La idea, por tanto, de recurrir a lo "cuántico" para explicar fenómenos difíciles para la Física clásica de la época flotaba en el ambiente ya para 1900/1910, y así podemos relatar, al menos, algunos antecedentes de la teoría de Bohr:

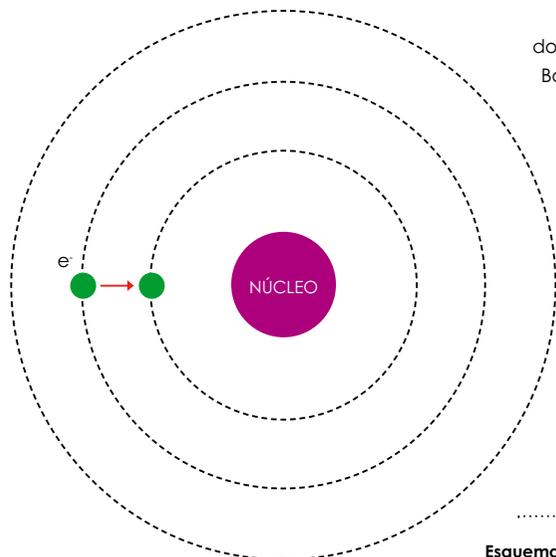
- En 1910, Arthur E. Haas (1884-1941) en Viena se dio cuenta que con la constante de Planck  $h$  (y otras conocidas, como  $m = m_e$ , la masa del electrón, y  $e$ , su carga eléctrica) se puede formar una longitud: de hecho, veremos que el radio del átomo de hidrógeno será  $\hbar^2/me^2 \approx \frac{1}{2} A$ ; ( $\hbar$  es la constante de Planck reducida,  $\hbar = h/2\pi$ ), con lo que se podría solucionar el problema de la ausencia de "escala" en el átomo de Rutherford (en el modelo previo de Thomson, el radio del átomo se da "a priori" y se ajusta al "experimental").

**“La persona que presentó una teoría consistente y coherente, y dio una explicación cuantitativa correcta de ciertos resultados espectrales fue Niels Bohr.”**

# El origen de la Teoría Cuántica del átomo. Niels Bohr, 1913

- b. Arnold Sommerfeld (1868-1951) en el primer Congreso Solvay (Bruselas, 1911) ya dijo (corrigiendo a J. Stark), que no es que la constante de Planck se justifique por la existencia de los átomos, si no al contrario: la justificación y la explicación de la estructura atómica debe buscarse por medio del cuanto de acción.
- c. El astrofísico y matemático inglés John W. Nicholson (1881-1955) fue el primero en utilizar la constante de Planck para explicar ciertos aspectos de los espectros estelares (1912), que en aquella época se relacionaban más con la Química y que constituían un misterio muy difícil...

Pero la persona que presentó una teoría consistente y coherente, y dio una explicación cuantitativa correcta de ciertos resultados espectrales, fue Niels Bohr, en la primera parte de su "Trilogía", publicada en la revista científica inglesa *Philosophical Magazine* en julio de 1913.<sup>2</sup>



Esquema atómico de Bohr.

## POSTULADOS DE BOHR

El primer capítulo de la Trilogía de Niels Bohr, y el más logrado, estudia un átomo con un solo electrón. Bohr prefiere siempre presentaciones "dogmáticas" y parte de dos enunciados axiomáticos: Los dos *postulados de Bohr* son los siguientes:

1. El átomo (modelo de Rutherford, con núcleo central y electrones girando alrededor en ciertas órbitas) se presenta solo en ciertos estados "i" con energía  $E_i$ , en los cuales, por definición, (y al contrario de lo esperado por la Física clásica), los electrones acelerados *no* radian.
2. Un electrón en el átomo puede "saltar" de un estado con energía inicial  $E_{ini}$  a otro final con  $E_{fin}$  (también se dice: de una órbita a otra), y entonces emite radiación homogénea en forma de un cuanto de radiación, un cuanto de energía, con energía  $\Delta E$  y frecuencia  $\nu$  dados por la ecuación de Planck:

$$\Delta E \equiv E_{ini} - E_{fin} = h \nu$$

donde  $h$  es la constante (original) de Planck. Bohr hace así uso tanto del postulado de Planck, con su constante  $h$ , como de la teoría de Einstein de 1905, aunque se guarda muy bien de hablar de "cuantos de luz", la expresión de Einstein, y habla solo, y pocas veces, de "cuantos de energía".

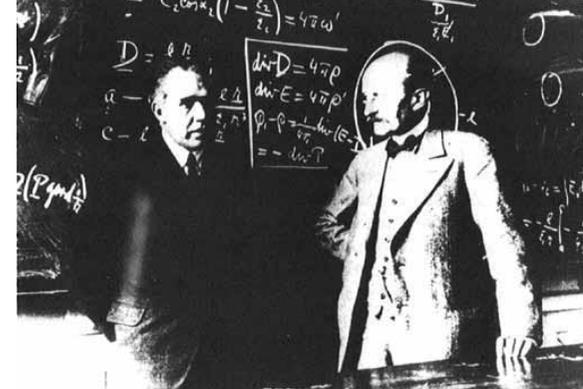
En particular, se sigue de los dos postulados que el estado de energía más bajo, llamémoslo  $E_0$ , es absolutamente estable en ausencia de perturbaciones externas.

¿Cuáles son las órbitas permitidas, y cómo se calcula su energía? Se mantiene la mecánica clásica para la caracterización de las órbitas permitidas, pero se altera la electrodinámica para que, a pesar de llevar los electrones un movimiento acelerado, no se radie luz más que en las condiciones del segundo postulado. Pensemos, en concreto, en el átomo de hidrógeno H, compuesto por un núcleo masivo y cargado positivo, y un electrón danzando alrededor. ¿Cómo se averiguan las órbitas? Para su cálculo, hace primero Bohr tres plausibles aproximaciones: a) las orbitas del electrón son circulares (y no circulares o *elípticas*, también permitidas clásicamente por el potencial de Coulomb). b) Se considera el núcleo con masa infinita, o sea: la masa del electrón  $m = m_e$  despreciable frente a la nuclear  $M = m_p$ . c) Se supone que el movimiento es no relativista, es decir, se supone que  $v_{el} \ll c$ .

Lo que Bohr hace equivale a aceptar como órbitas permitidas aquellas en que el momento angular (orbital) del electrón  $J$  es un múltiplo (digamos  $n$ ) de la constante de Planck reducida  $\hbar$ , o sea  $J = n \hbar$ . Esta es la condición de cuantización, que supone la ruptura más clara con la Física clásica. Bohr aceptó, via la hipótesis de Planck, una condición *idéntica* a la que había definido Nicholson (mentado antes); su plausibilidad depende de que las dimensiones coinciden:

$$\begin{aligned} \dim(J) &= \dim(m \cdot r \cdot v) = \dim(m \cdot v \cdot r) = \\ &= \dim(\text{momento lineal} \cdot \text{longitud}) = \\ &= \dim(\text{energía} \cdot \text{tiempo}) = \dim(\text{acción}) = \dim(h) \end{aligned}$$

Resulta difícil hoy día juzgar el atrevimiento de Bohr con los dos postulados de arriba. Cuando Bohr poco tiempo después, habló sobre su modelo atómico en la Conferencia de la British Association en Birmingham, invitado por Rutherford (1914), algunos escépticos se



Bohr con Max Planck (arriba).

Einstein caminando con Bohr por las calles de Bruselas durante uno de los Congresos Solvay, hacia 1930 (abajo).

Imágenes tomadas del libro "Niels Bohr, a Centenary Volume". French A. P. y Kennedy P. J.

# El origen de la Teoría Cuántica del átomo. Niels Bohr, 1913

creyeron que Bohr was *pulling our legs* (les estaba tomando el pelo...). Tampoco M. von Laue, en Alemania, dio crédito a Bohr, insistiendo en que las leyes de Maxwell rigen bajo cualquier circunstancia... y en particular, en que toda partícula acelerada debe radiar...

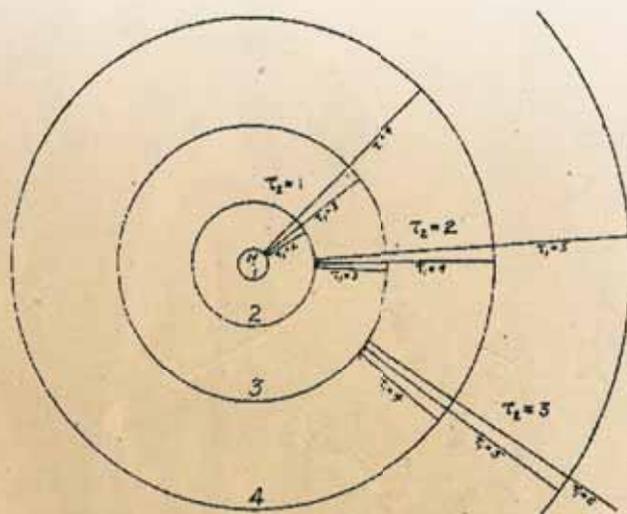
En el recuadro adjunto, se puede seguir un cálculo detallado del radio de Bohr (desarrollo 1).

Bohr observó, además, que, al aumentar el radio con  $n^2$  (n se llamará, con Sommerfeld, *número cuántico principal*), en el laboratorio sería difícil observar líneas con n muy grande, pues a las densidades accesibles experimentales un átomo tan voluminoso no sería muy estable; en esto también Bohr acertó plenamente, así como en su consecuencia: en las estrellas, con densidades mucho más bajas, podrían observarse líneas espectrales con n muy alto... y así era en efecto (hasta 33 líneas, frente a 12 solo, en el laboratorio).

La "unidad" de energía en el átomo, resulta del orden de unos pocos electron-volts, y era también de un orden de magnitud en acuerdo con las medidas de los potenciales de ionización ( $\times e$ ), también conocidos en la época.

Solo la serie de Balmer, en el visible, era conocida antes de 1913; pero inmediatamente se descubrieron la de Lyman (1914), en el UV, y la de Paschen, en el IR. Por ejemplo, la llamada línea  $H_{\beta}$ , o sea la segunda línea de la serie de Balmer, es la transición desde  $n=4$  a  $n=2$ , con radiación de longitud  $\lambda \approx 6100 \text{ \AA}$ , en la zona roja del espectro (desarrollo 2).

Ni qué decir tiene que la concordancia de la fórmula deducida por Bohr con la encontrada por Balmer fue el gran éxito de la teoría de Bohr, y ninguno de sus antecesores, ni Haas ni Nicholson, no llegaron (ni remotamente) tan lejos. Es de señalar, sin embargo, que Bohr no buscaba concordancia con la fórmula de Balmer



El modelo atómico de hidrógeno de Bohr. Probablemente, el primer dibujo de este tipo, trazado en un papel en el año 1915.

Imagen tomada del libro "Niels Bohr and the Quantum Atom". Kragh H.

## "Bohr originalmente no buscaba concordancia con la fórmula de Balmer, sino solo explicar la estructura y la posibilidad de radiación del átomo de Rutherford."

(ignoraba la fórmula, hasta que se la mostró el espectroscopista danés H. Hansen), sino solo "explicar" la estructura y la posibilidad de radiación del átomo de Rutherford, "estabilizado" por sus condiciones cuánticas.

Bohr se apuntó otro importante triunfo al año siguiente cuando en Inglaterra se descubrió al poco (A. Fowler) una pequeña discrepancia espectroscópica en el helio ionizado ( $Z=2$ ), que Niels Bohr atribuyó, correctamente, al movimiento del núcleo: sabido es que un sistema de dos cuerpos con fuerzas centrales equivale al sistema de un solo cuerpo en el mismo potencial, pero con la masa reducida  $\mu$ :

$$\mu^{-1} = m^{-1} + M^{-1}$$

con lo que las correspondientes constantes de Rydberg, para el hidrógeno y para el helio normal, valen:

$$R = R(M = \infty) = 2\pi^2 m e^4 / h^3 c = 109737 \text{ cm}^{-1}$$

$$R(H) = 2\pi^2 \mu(H) e^4 / h^3 c = 109677 \text{ cm}^{-1}$$

$$R(He) = 2\pi^2 \mu(He) e^4 / h^3 c = 109722 \text{ cm}^{-1}$$

Este argumento, de refinamiento de la fórmula de Balmer por efecto finito de la masa del núcleo, fue advertido a Einstein por el húngaro G. Hevesy, e inmediatamente aquél se "convirtió" al credo de Bohr, no sin señalar que a él mismo (Einstein) ya se la había ocurrido la idea de "cuantificar" las órbitas... pero que no lo publicó.

### DESARROLLO 1:

Veamos el cálculo cuantitativo (el presentado por Bohr es más indirecto). Así pues, sean  $m$ ,  $-e$ ,  $r$  y  $v$  la masa, carga eléctrica, radio y velocidad del electrón; y sea  $Z$  el número de cargas positivas del núcleo, de modo que  $+Z|e| = Ze$  es la carga de éste; el átomo en estado normal se supone neutro. Se acepta, con la teoría clásica, la igualdad entre la fuerza centrífuga del movimiento circular y la atracción electrostática, pero se supone el momento angular cuantizado "a lo Nicholson" (la condición que presenta Bohr es algo diferente, pero equivalente):

$$\text{Momento angular} = 2\pi mrv = nh \quad (\text{regla de cuantización}) \quad (\text{ec. 1})$$

$$mv^2/r = Ze^2/r^2 \quad (\text{fuerza centrífuga} = \text{atracción coulombiana}) \quad (\text{ec. 2})$$

Escribiendo la segunda ecuación como  $mrv^2 = Ze^2$ , se tiene en el acto, dividiendo las dos ecuaciones:

$$v = (Z/n) e^2/\hbar \quad (\text{ec. 3})$$

donde  $\hbar = h/2\pi$  es la llamada constante de Planck reducida, más fácil de usar y de recordar ( $\hbar \approx 10^{-27}$  en unidades cgs.). Ciertamente, el átomo (para  $Z$  pequeño) es muy poco relativista, pues, si  $c$  es la velocidad de la luz,

$$v/c = (Z/n)(e^2/\hbar c) = (Z\alpha/n), \quad \text{con } \alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137 \approx 7\% \quad (\text{ec. 4})$$

( $\alpha$  se llama la constante de estructura fina, y fue introducida por Sommerfeld en 1915), máxime teniendo en cuenta que, siendo  $x$  un vector, la velocidad  $v = dx/dt$  debe aparecer al cuadrado, como el escalar  $v \cdot v$ , y tenemos que  $(v/c)^2 \approx 5 \times 10^{-5}$  en el caso  $n=1$  y  $Z=1$ : salvo precisiones del orden de la millonésima, el átomo puede considerarse no-relativista.

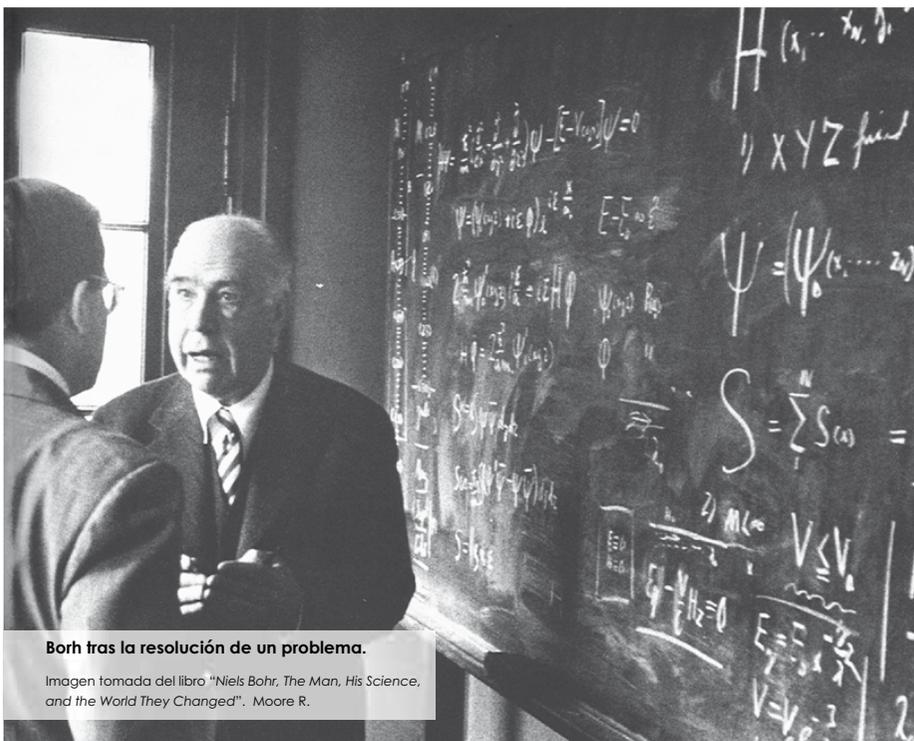
Despejando a continuación, el radio se tiene:

$$r = (n^2/Z) \hbar^2/me^2, \quad a_0 := \hbar^2/me^2 \approx .5 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\text{es el radio de Bohr} \quad (\text{ec. 5})$$

que, en efecto, es del orden de los radios atómicos, siendo su escala ya conocida en la época; Haas, v. *supra*, ya había llegado también a esta conclusión.

## El origen de la Teoría Cuántica del átomo. Niels Bohr, 1913



**Bohr tras la resolución de un problema.**

Imagen tomada del libro "Niels Bohr, The Man, His Science, and the World They Changed". Moore R.

Como creemos que esta construcción del átomo es la mayor contribución de Niels Bohr a la Física, destaquemos de nuevo brevemente sus éxitos:

- El átomo se hace estable por *fiat*, pues no rige indiscriminadamente la teoría clásica en el interior del átomo.
- Admitiendo los postulados de radiación, se obtiene cualitativamente un buen acuerdo con la fórmula empírica de Balmer; en particular se tienen valores plausibles para el tamaño y las energías del átomo.
- Se calcula teóricamente la constante de Rydberg ( $M \approx \infty$ ), y el acuerdo con las medidas experimentales se aproxima a la milésima en precisión.
- Se predicen muchas más líneas que se fueron descubriendo eventualmente, cuando  $n_{fin} \neq 2$ .

**“Esta construcción del átomo es la mayor contribución de Niels Bohr a la Física.”**

- La fórmula mejora introduciendo la masa reducida, es decir, tomando en consideración el movimiento del núcleo; la precisión aumenta en dos órdenes; así se explican las pequeñas diferencias en el espectro del Helio ionizado,  $He^+$  (el Litio  $Li^{++}$  no se observó hasta 1930);
- Se razona, de acuerdo con las mediciones, que en el laboratorio se observarán muchas menos líneas que en el espectro de las estrellas, debido a la menor densidad de estas. Un buen estudio de la física atómica de la época viene en el libro de Hermann.<sup>3</sup>

Sin embargo, hemos de añadir que las otras dos partes de la "Trilogía" de 1913, una dedicada a los átomos poli-electrónicos, la otra a las moléculas, en especial la dedicada a la estructura de la molécula de hidrógeno,  $H_2$  (el trabajo de Bohr se llamaba "On the constitution of atoms and molecules") no son ni remotamente tan exitosas, y más bien se han olvidado hoy día. A resaltar sin embargo, como ha puesto de relieve el biógrafo de Bohr, H. Kragh, el gran interés de Bohr por la estructura química de las moléculas.<sup>4</sup>

### El Principio de correspondencia

Todo avance especulativo en una teoría Física debe cumplir una condición obvia: cuando la nueva teoría se aplique en condiciones en que valga la teoría anterior, se deben reproducir los resultados de esta. Esta condición Einstein la tuvo muy en cuenta, tanto en la dinámica de la relatividad especial como en la teoría general de la gravitación. Pero Bohr, que posiblemente no conocía esa condición, cuando la descubrió por su cuenta, la elevó a un principio fundamental, el llamado *principio de correspondencia* e inmediatamente escribió a Rutherford (21-III-1913) entusiasmado y

### DESARROLLO 2:

Para deducir la fórmula de Balmer (de 1885; introducida empíricamente por J. Balmer, un maestro de escuela suizo, a partir del espectro óptico en el visible (cuatro rayas,  $H_{\alpha-\delta}$ ) del átomo de hidrógeno), calculemos el número de ondas  $\sigma$ , por definición el inverso de la longitud de onda  $\lambda = cT$ , con  $T = v^{-1}$ :

si la energía es  $E = T + V = P^2/2m - Ze^2/r$ ,

$$\begin{aligned} \sigma &= 1/\lambda = 1/cT = v/c = \Delta E/hc = (E_{n_i} - E_{n_f})/hc = \\ &= +(1/2) Z^2 me^4 / (2\pi\hbar^3 c) [1/n_{n_i}^2 - 1/n_{n_f}^2] := \\ &:= R [1/n_{n_i}^2 - 1/n_{n_f}^2] \end{aligned} \quad (\text{ec. 6})$$

donde  $R = 2\pi^2 me^4/h^3 c \approx 109\,737 \text{ cm}^{-1}$  es la llamada constante de Rydberg. (ec. 6) es precisamente la fórmula empírica propuesta por Balmer casi treinta años antes.

Se tienen ahora las siguientes series, dependiendo del estado final del electrón:

$n_{fin} = 1$ : serie de Lyman (1914); está en el ultravioleta (UV).

$n_{fin} = 2$ : serie de Balmer; es la original, en el visible.

$n_{fin} = 3, 4, 5, 6$ . Series de Paschen, Brackett, Pfund y Humphreys, todas en el IR.

### DESARROLLO 3:

El cálculo es muy fácil:

La frecuencia clásica de rotación  $\nu = \nu_{cl}$  es  $\nu/2\pi$  y vale, de (ec. 3) y (ec. 5).

$$\nu_{cl} = Z^2/2\pi n^3 \times me^4/\hbar \quad (\text{ec. 7})$$

mientras que de la fórmula de Balmer, en la aproximación de grandes números cuánticos  $n \approx n_i, n_f \gg 1$ ,  $n_i - n_f = \Delta n \approx 1$ , se obtiene:

$$\nu_{Balmer} = Z^2 \Delta n/n^3 \times me^4/2\pi\hbar^3 \quad (\text{ec. 8})$$

en coincidencia completa con la anterior, pues la frecuencia clásica va acompañada de sus armónicos, que es el factor  $\Delta n$ .

## El origen de la Teoría Cuántica del átomo. Niels Bohr, 1913

le contó su “descubrimiento”. (Sí que es cierto que mucho más tarde, dialogando Bohr con su discípulo, L. Rosenfeld, distingue el principio, como argumento heurístico, de la mera concordancia con resultados previos).<sup>5</sup>

Vamos a ver lo que encontró Bohr: para una transición entre números cuánticos muy altos,  $n_{\text{fin}}, n_{\text{in}} \gg 1$ , la frecuencia de la radiación emitida debe corresponder a la frecuencia clásica de rotación del electrón o a un múltiplo entero, como dice la teoría clásica: para esas transiciones la constante de Planck, que cuantiza las órbitas, puede despreciarse, pues  $nh \gg h$ , de modo que las acciones puestas en juego serán mucho mayor que el cuanto de acción de Planck (desarrollo 3).

Queremos insistir en que esto no es un descubrimiento, sino una prueba de la consistencia del postulado cuántico. Bohr sin embargo utilizó esa “coincidencia asintótica” con el resultado clásico como guía para poder deducir muchos otros resultados, por ejemplo relacionados con las intensidades de las rayas, para las que sus

dos postulados no decían nada, pero que son observables. El *principio de correspondencia*, uno de los varios principios que Bohr enunció a lo largo de su carrera, (el principio de complementariedad (1928) es el otro más conocido), fue tremendamente útil, pero requería nada menos que un Bohr para sacar sus consecuencias: por ejemplo, Sommerfeld, que dirigía en Munich la otra escuela importante en Física Atómica en la misma época, se quejaba de que el principio de correspondencia “era como una “varita mágica”, que solo funciona en Copenhague”.

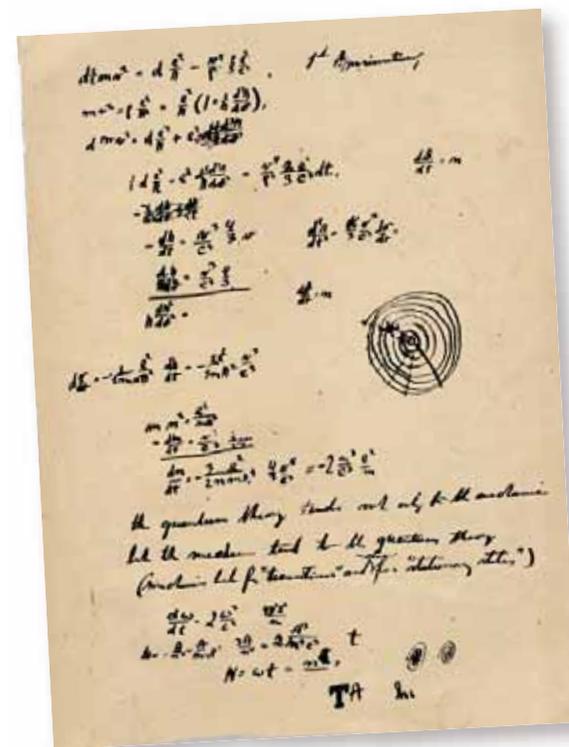
### LA ESCUELA DE COPENHAGUE, 1913-1925

Aquí no queremos tanto seguir todo el desarrollo de la Teoría Cuántica antigua, sino más bien mentar algunos de aquellos hallazgos que tuvieron lugar en Copenhague, donde Bohr organizó, tras volver definitivamente de Inglaterra (1916), un centro de Física Atómica muy bien dotado (inaugurado en 1921; sigue en la actualidad: Blejtdamsvej 17, Copenhague, con el nombre de Niels Bohr Institutet).

Estaba claro que esa Teoría Cuántica antigua era un *pastiche* entre mecánica clásica y postulados cuánticos, y por tanto necesitaba una larga cantidad de “adivinanzas” para ver dónde había que poner los parches “cuánticos”. A esos efectos, el principio de correspondencia de Bohr jugó un papel muy importante: en concreto, para averiguar la intensidad de las líneas espectrales, o más restrictivamente para deducir las llamadas reglas de selección, es decir, en qué casos no puede esperarse una determinada línea espectral.

Sin embargo, como decíamos, en el estudio de otros átomos salvo el hidrógeno no se avanzó gran cosa; cabe mencionar solo una mayor inteligibilidad de los átomos alcalinos (por ejemplo, sodio y potasio), con un electrón (el de valencia) separado de los otros, por la distinción entre órbitas “penetrantes” (*Tauchbahnen*) y “no penetrantes”, debida a Bohr y a Schrödinger, ca. 1922. Bohr también luchó denodadamente para entender el sistema periódico de los elementos químicos, con algún éxito notable (por ejemplo, el elemento hafnio no es un lantánido; *hafen* es “puerto”, por Copenhague, la patria chica de Bohr). Hay también algún éxito con el espectro del hidrógeno molecular,  $H_2$ , estudiado también por el químico danés N. Bjerrum (1879-1958).

A Niels Bohr no le gustaba escribir sus trabajos (tampoco era buen conferenciante), que eran redactados por sus personas próximas (incluyendo su madre, su hermano Harald y su esposa), antes de buscar colaboradores fieles; el primero fue el holandés Hans Kramers (1894-1952), un buen matemático, que ayudó a Bohr en muchos cálculos difíciles; Kramers estuvo de auxiliar con Bohr entre 1916 y 1926.



Apuntes originales de Bohr.

Imagen tomada del libro “Niels Bohr, Collected Works”, Rosenfeld L. (Volume 2).



Bohr (a la derecha) junto con Arnold Sommerfeld. Lund, Suecia (1919).

Imagen tomada del libro “Niels Bohr, a Centenary Volume”, French A. P. y Kennedy P. J.

## El origen de la Teoría Cuántica del átomo. Niels Bohr, 1913

rrieron las tres escuelas. Los descubrimientos de la escuela de Sommerfeld fueron muy notables, hasta el punto que se cita (con justicia) a menudo "La teoría cuántica antigua de Bohr-Sommerfeld", incluso por escritores daneses (e.g. Helge Kragh<sup>4</sup>). En Munich se describieron, por ejemplo, las correcciones relativistas al espectro del hidrógeno (fórmula de Sommerfeld de estructura fina, 1915), las alteraciones detalladas en los espectros por efectos de campos eléctricos y magnéticos (efecto Stark: Epstein y Schwarzschild, 1916; efecto Zeeman normal: Sommerfeld y Debye, 1915). Un curioso descubrimiento de la escuela de Sommerfeld, que no se entendería hasta el advenimiento de la moderna Mecánica Cuántica es la existencia de números cuánticos *semi-enteros*, para parametrizar el efecto Zeeman anómalo (Heisenberg; Landé, 1922), en contraste aparente con la filosofía de Bohr-Sommerfeld de cuantización con números enteros solamente.

Señalemos además dos experimentos que jugaron un papel importante: en 1914 Frank y Hertz realizaron un famoso experimento (con mercurio), que demostró, fuera de toda duda, la cuantización de las órbitas electrónicas (pero que fue, al principio, mal interpretado incluso por sus propios autores). Y en 1924, en el primer experimento con el "rayo atómico", Stern y Gerlach demostraron

la cuantificación de la dirección, que ya había sido predicha por Sommerfeld, pero cuyas implicaciones "filosóficas" no se entenderían hasta el período post-1925.<sup>6</sup>

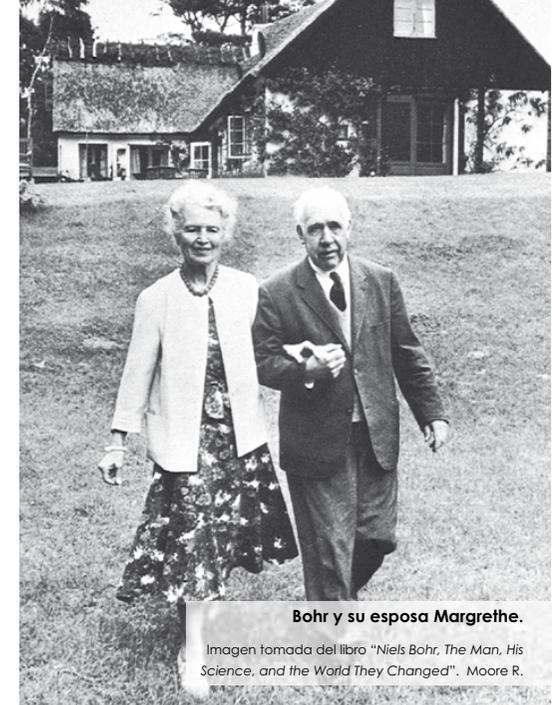
### DIFICULTADES: ESPECTRO DEL HELIO Y EFECTO ZEEMAN ANÓMALO

Las reglas de cuantización de Sommerfeld, tipo  $\int p_i dq_i = n_i h$  permitían, en principio, deducir las órbitas estables y por tanto las posibles líneas espectrales de átomos más complejos que el hidrógeno (cuyo hamiltoniano fuese *separable*). Si bien Bohr, con su primer discípulo H. A. Kramers, no llegó a resultados concretos para el helio, a pesar de trabajar mucho en ello, sí lo hicieron Born y Heisenberg en Göttingen (hacia 1923), el tercer centro importante donde se desarrolló la Teoría Cuántica antigua, como dijimos. Ellos concluyeron que el espectro del helio se predecía *incorrectamente*, y este fallo inapelable debilitó mucho la creencia en la teoría de Bohr. (Hoy sabemos que ello era inevitable: el espectro del helio está dividido en dos sectores muy diferenciados, cuyos términos se llaman

respectivamente orto helio y parahelio; ello es debido a estar paralelos o antiparalelos los spines de los dos electrones del helio neutro, pero el spin no se descubrió hasta 1925...).

El otro "fallo" manifiesto de la Teoría de Bohr también está relacionado con el spin: la escuela de Sommerfeld ya había encontrado una explicación razonable del "efecto Zeeman normal", es decir, la descomposición de una línea espectral en el famoso triplete de Lorentz, en presencia de un campo magnético. Pero el espectro Zeeman anómalo, muy frecuente (por ejemplo, ya en los alcalinos), era un misterio insoluble para la época (hoy sabemos, de nuevo, que era debido a la superposición  $J = l + s$  del momento angular  $s \hbar$  debido al spin con el momento angular orbital  $l \hbar$ , que es el único que se tiene en cuenta en el efecto Zeeman normal).

En el año de transición 1925 se completó la antigua Teoría Cuántica con aportaciones como el principio de exclusión (W. Pauli, Enero de 1925) y la estadística de Fermi, aunque realmente no se aplicaron hasta el advenimiento de la Mecánica Cuántica moderna. Hacia ese año de 1925 estaba muy claro que los axiomas de la Teoría Cuántica antigua eran incompletos, y más bien había que entender el porqué de sus éxitos más



Bohr y su esposa Margrethe.

Imagen tomada del libro "Niels Bohr, The Man, His Science, and the World They Changed". Moore R.

que sus fallos...Y, en el verano de ese 1925 llegó la solución, de manos de la mecánica de las matrices, de Werner Heisenberg.

Luis Joaquín Boya

Presidente de la Real Academia de Ciencias de Zaragoza

Miembro del Senatus Científico  
Dpto. de Física Teórica  
Facultad de Ciencias  
Universidad de Zaragoza



Heisenberg charlando con Bohr (1934).

Imagen tomada del libro "Niels Bohr, a Centenary Volume". French A. P. y Kennedy P. J.

**"El principio de correspondencia de Bohr jugó un papel muy importante para averiguar la intensidad de las líneas espectrales."**

1. Pais A., "Niels Bohr Times". Oxford U. P. 1995.
2. "Niels Bohr, a Centenary Volume" (A. French ed.). Harvard U.P. 1985.
3. Hermann A., "The Genesis of Quantum Theory".-M.I.T. 1971.
4. Para la biografía más reciente de Niels Bohr ver Helge Kragh (danés): "Niels Bohr and the Quantum Atom", Oxford U. P. 2012.
5. Véase la biografía de Leon Rosenfeld por Jacobsen A., World Scientific, 2012.
6. Algunos aspectos negativos de Bohr pueden verse en arXiv:physics\ 0212090.