

Modelos atómicos clásicos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

Números cuánticos

Densidad de probabilidad electrónica

Bibliografía



Modelos atómicos clásicos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

Números cuánticos

Densidad de probabilidad electrónica

Bibliografía



Modelos Atómicos Clásicos



[Propiedades básicas de los átomos]

- ▶ Los átomos son muy pequeños. Su radio es de alrededor de 0.1 nm . Por lo tanto, imposibles de observar con luz visible.
- ▶ Los átomos son estables. Las fuerzas que los mantienen cohesivos deben estar en equilibrio.
- ▶ Los átomos son eléctricamente neutros. La carga eléctrica de su nube electrónica se cancela con la de su núcleo.
- ▶ Los átomos pueden emitir o absorber radiación electromagnética. Esta radiación puede venir en varias formas: rayos X, luz visible, infrarrojos o ultravioleta, entre otras.



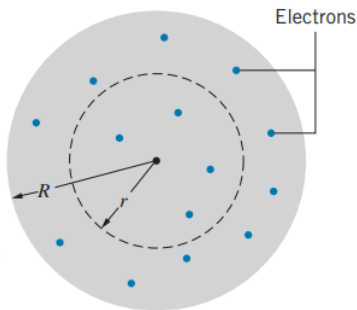


Figura: Representación gráfica del modelo atómico de J.J. Thomson

J.J. Thomson, conocido por descubrir el electrón y la relación de su carga y masa, propuso en 1904 un modelo atómico.

En el modelo de Thomson los electrones de carga negativa están incrustados en un cuerpo esférico de carga positiva uniformemente distribuida. La masa del átomo viene de la esfera misma sin los electrones contribuyendo significativamente. El radio R de la esfera es el radio del átomo.



[El experimento de Marsden y Geiger I]

Con la intención de poner a prueba el modelo de Thomson, Rutherford y sus asistentes Geiger y Marsden diseñaron un experimento de dispersión.

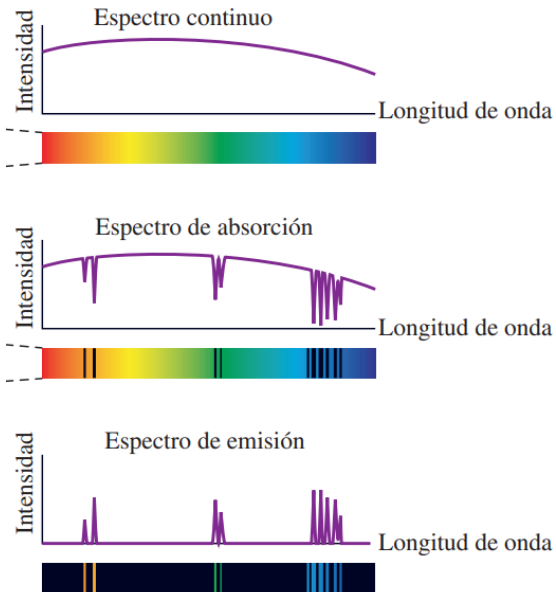
Usaron una fuente radiactiva para aprovechar sus **partículas alfa** como proyectiles. Estas partículas colisionaban con una lámina muy delgada de oro rodeada de detectores con **sulfuro de zinc** en los que se producían centelleos con cada interacción de las partículas dispersadas por los átomos de la lámina.



[Los espectros de línea]

Los átomos pueden emitir fotones después de ser expuestos a radiación. En consecuencia, podemos medir cuando una sustancia absorbe ciertas longitudes de onda de una fuente luminosa.

El modelo atómico de Rutherford no logra explicar las **líneas de absorción** de los átomos cuando eran expuestos a la radiación.



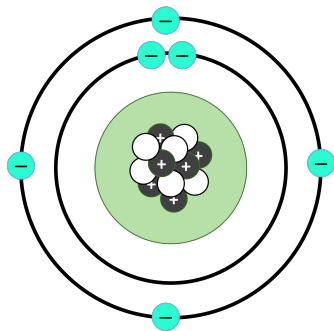


Figura: Representación gráfica del modelo atómico de N. Bohr

N. Bohr, partiendo de las ideas de Rutherford y Nagaoka, propuso un modelo atómico similar de un sistema planetario.

En el modelo de Bohr, los electrones de carga negativa residen en órbitas circulares alrededor del núcleo, como si fueran planetas en un sistema planetario en miniatura. Los electrones no colapsan en el núcleo porque la fuerza atractiva provee la aceleración centrípeta.



[Energía de excitación en el átomo de Bohr]

Cuando un átomo emite un fotón se debe a un electrón decayendo de una órbita superior a su órbita fundamental. En este proceso cede la energía que lo **excitó** al entorno.

Identificamos cada órbita con un **nivel de energía**, denotado por E_n un número natural. Para el átomo de hidrógeno, tenemos:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2} = \frac{-13.60 \text{ eV}}{n^2} \quad (1)$$



En la ecuación

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2} = \frac{-13.60 \text{ eV}}{n^2}$$

La energía de un electrón en la n -ésima órbita es negativa, sugiriendo que ese es el trabajo que debemos efectuar para expulsar al electrón totalmente de su átomo.

La energía requerida para hacer que un electrón pase de un nivel m a un nivel n está dada por:

$$\Delta E = E_m - E_n = -13.60 \text{ eV} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$



Modelos atómicos clásicos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

Números cuánticos

Densidad de probabilidad electrónica

Bibliografía



Ecuación de Schrödinger para el Átomo de Hidrógeno



[La ecuación de Schrödinger en 3 dimensiones]

En el contexto tridimensional, con la posición de la partícula dada como un vector de la forma $\vec{r} = (x, y, z)$ la energía cinética está dada por

$$K = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

Así, la **ecuación de Schrödinger tridimensional** es:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}} \quad (3)$$

Donde $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ es el operador laplaciano.



La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en 3 dimensiones es:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (4)$$

La interpretación probabilista de Born sigue siendo válida en este contexto. La condición de normalización es

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$$

El propagador tiene la misma forma que en una dimensión (recuerde que este no depende de la posición, sino del tiempo).



Hay situaciones en las que un cambio de coordenadas nos lleva a una formulación del problema más afín a la configuración física de un sistema.

Para analizar las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno se precisa hacer un cambio de coordenadas desde las rectangulares x , y y z a las esféricas r , θ y ϕ .

$$\begin{aligned}x &= r \sin(\theta) \cos(\phi) & y &= r \sin(\theta) \sin(\phi) & z &= r \cos(\theta) \\r^2 &= x^2 + y^2 + z^2 \\ \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \csc^2(\theta) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)\end{aligned}$$

Cuadro: Cambios de coordenadas



[Ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas]

Efectuando el cambio de coordenadas según las reglas del cuadro anterior, tenemos que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en coordenadas esféricas es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \cot \theta \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \csc^2 \theta \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + U(r)\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

Suponiendo que el potencial U es un potencial radialmente simétrico, es decir, que depende solo de r .



Para resolver la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \cot \theta \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \csc^2 \theta \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + U(r) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

Suponemos que la función de estado viene dada de la forma $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, es decir, que puede separarse.



Siguiendo las reglas de diferenciación multivariable y un poco de álgebra, tenemos que la ecuación de Schrödinger se reescribe como:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = - \sin^2 \theta \left\{ \frac{r^2}{R} \left[\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right] + \frac{1}{\Theta} \left[\frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right] + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - U(r)] \right\}$$

Como las coordenadas esféricas son independientes, ambos lados de la ecuación deben dar una constante. Denotamos a esta **constante de separación** como $-m_l^2$ donde m_l es el **número cuántico magnético**.



La separación por $-m_l^2$ da lugar a las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} &= -m_l^2\Phi(\phi) \\ \frac{r^2}{R} \left[\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right] + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - U(r)] &= -\frac{1}{\Theta} \left[\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \cot\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right] \\ &\quad + \frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\end{aligned}$$

La última ecuación tiene como variables independientes a r y a θ , por lo que es separable por un número $l(l+1)$ donde l es llamado **número cuántico orbital**.



De la separación por $l(l+1)$ tenemos:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \cot\theta \frac{d\Theta}{d\theta} - m_l^2 \csc^2\theta \cdot \Theta = -l(l+1)\Theta$$

Las funciones $\Theta(\theta)$ son polinomios en $\cos\theta$ llamados **polinomios de Legendre asociados**. Los productos de la forma $\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ dictan la dependencia angular de la función de onda de fuerza central y se llaman **armónicos esféricos** denotados por $Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$.



Por otro lado, para la parte radial tenemos:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right] + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} R(r) + U(r)R(r) = ER(r)$$

Esta ecuación describe el comportamiento radial de ψ y da las energías E permitidas de la partícula.

La solución del sistema viene en la forma:

$$\Psi(r, \theta, \phi, t) = R(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) e^{-i\omega t}$$



[Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno I]

Los niveles de energía y la parte radial de la función de onda dependerán del potencial $U(r)$ dado como

$$U(r) = -\frac{kZe^2}{r}$$

donde k es la constante de Coulomb, e es la carga fundamental y Z es el número atómico.



[Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno II]

Los estados energéticos están descritos por

$$E_n = -\frac{ke^2}{2a_0} \left\{ \frac{Z^2}{n^2} \right\} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

donde $a_0 = \hbar^2/(m_e ke^2)$ es el radio de Bohr, 0.529\AA , y $ke^2/2a_0$ es la energía de Rydberg, 13.6 eV . Al parámetro n lo llamamos el **número cuántico principal**.



[Función de estado del hidrógeno]

n	l	m_l	$R(r)$	$\Theta(\theta)$	$\Phi(\phi)$
1	0	0	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	0	0	$\frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\mp \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{2}{(3a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
3	1	0	$\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}} \left(\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{6a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
3	1	± 1	$\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}} \left(\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{6a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\mp \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\sqrt{\frac{5}{8}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
3	2	± 1	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\mp \sqrt{\frac{15}{4}} \sin \theta \cos \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$
3	2	± 2	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2 \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm 2i\phi}$

Figura: Funciones de estado del hidrógeno para diferentes valores de los números cuánticos.



Modelos atómicos clásicos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

Números cuánticos

Densidad de probabilidad electrónica

Bibliografía



Números Cuánticos



[Interpretación física de los números cuánticos]

Para átomos hidrogenoides, los números cuánticos son n , l y m_l asociados con las observables nítidas

$$E = E(n)$$

$$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$$

$$L_z = m_l \hbar$$



El número cuántico principal

Para cada valor de n podemos describir una **capa** como una región del espacio donde podemos encontrar un electrón. Estas capas se identifican con letras mayúsculas:

$n = 1$: capa K

$n = 2$: capa L

$n = 3$: capa M

$n = 4$: capa N

Para valores de n mayores que 4, se toman las letras del abecedario en orden alfabético desde la O .



El número cuántico orbital

Para cada valor de n podemos describir una colección de **estados** descritos por l y m_l . Los estados se identifican de acuerdo con la siguiente regla:

$$\begin{array}{ll} l = 0: \text{estados } s & l = 3: \text{estados } f \\ l = 1: \text{estados } p & l = 4: \text{estados } g \\ l = 2: \text{estados } d & l = 5: \text{estados } h \end{array}$$

Para valores de l mayores que 5, se toman las letras del abecedario en orden alfabético desde la i . Cada valor de l puede asociarse a una **subcapa** dentro de una capa n .



El número cuántico magnético

Debido a que el **momento magnético** del átomo, $\vec{\mu}$, está relacionado con el momento angular \vec{L} , la discretización de $\vec{\mu}$ implica que \vec{L} está cuantizado también.

En consecuencia, la componente en z del momento angular está cuantizada de acuerdo con

$$L_z = m_l \hbar$$



- ▶ **El número cuántico principal n :** caracteriza los niveles de energía y toma valores enteros positivos, 1, 2, 3, 4, \dots .
- ▶ **El número cuántico orbital l :** se asocia a la magnitud del momento angular orbital y se limita a valores menores que n , 0, 1, 2, 3, \dots , $n-1$.
- ▶ **El número cuántico magnético m_l :** sus valores van desde $-l$ hasta l para un nivel energético n dado. Este rango de valores garantiza que la componente en z del momento angular no excede a la magnitud del vector.



Para explicar una serie de fenómenos en espectroscopia, S. Goudsmit y G. Uhlenbeck propusieron el **número cuántico de espín**.

P. Dirac demostró que este número se origina en las propiedades relativistas del electrón; ya que no se deriva de la ecuación de Schrödinger.

Este número representa un **momento angular intrínseco** de las partículas.



[La cuantización del momento angular de espín]

La magnitud de \vec{S} está dada por:

$$S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar \quad (5)$$

Y su proyección sobre el eje z es:

$$S_z = m_s \hbar \quad (6)$$

Para un electrón m_s puede ser $+1/2$ o $-1/2$, llamados estados de *espín up* y *espín down*, respectivamente. Mientras que s es exactamente igual a $1/2$.

Los números s y m_s pueden ser distintos para otras partículas.



Modelos atómicos clásicos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

Números cuánticos

Densidad de probabilidad electrónica

Bibliografía



Densidad de Probabilidad Electrónica



La probabilidad de encontrar un electrón dentro de cierto radio r está dada por

$$P(r)dr = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr \quad (7)$$

Las regiones de probabilidad no nula donde podemos encontrar un electrón se definen como **orbitales**. Estas regiones tienen diferente forma según los valores de n , l y m_l asociados a la subcapa en cuestión.



[Cortes transversales de distribuciones de probabilidad]

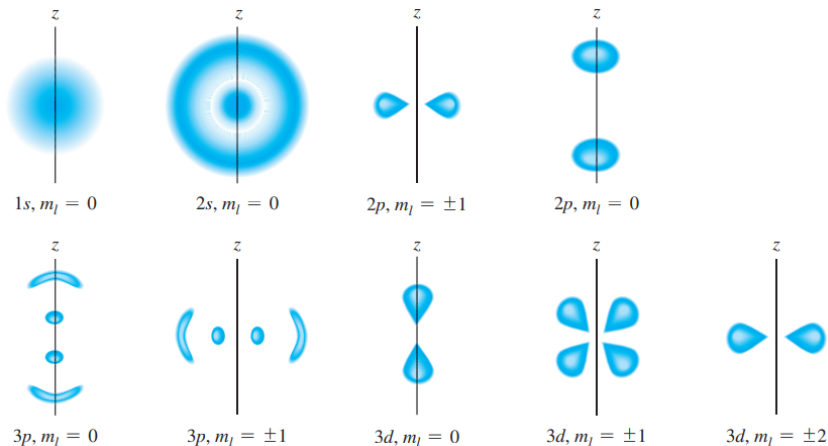


Figura: Representación gráfica de algunas regiones de probabilidad para el electrón en 3 dimensiones para diferentes valores de números cuánticos.



Modelos atómicos clásicos

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

Números cuánticos

Densidad de probabilidad electrónica

Bibliografía



Bibliografía





K. S. Krane, *Modern Physics*.

EEUU: John Wiley & Sons, Inc., 3era ed., 2012.



R. A. Serway, C. J. Moses, C. A. Moyer, and
M. Villavicencio, *Física Moderna*.

México: Cengage Learning, 3era ed., 2006.



R. A. Serway and J. W. Jewett Jr., *Physics for Scientists
and Engineers with Modern Physics*.

Boston, MA: Cengage Learning, 9na ed., 2014.



H. D. Young and R. A. Freedman, *Física Universitaria con
Física Moderna*.

México: Pearson Educación, 14va ed., 2018.

