

TEMA 4

FUNDAMENTOS DE FÍSICA CUÁNTICA

- 1. Radiación y materia: dualidad onda-corpúsculo**
 - 1.1. Radiación del cuerpo negro.**
 - 1.2. Efecto fotoeléctrico.**
 - 1.3. Efecto Compton. Dualidad onda-partícula.**
 - 1.4. Principio de De Broglie: Ondas de materia.**
- 2. Principio de incertidumbre**
- 3. Mecánica ondulatoria. Ecuación de Schrödinger**
- 4. Estados de energía atómicos. Orbitales atómicos**

Fuentes bibliográficas:

- Alados, I, Liger, E., Peula, J.M., Vargas J.M.: Curso de Fundamentos físicos de la Informática (5^a ed.). Ed. SPICUM. Capítulo 4.
- Gettys, W.E, Keller, F.J., Skove, M.J.: “Física para Ciencias e Ingeniería”. Tomo 2. Ed. Mc Graw Hill (2^a ed.), 2005, Capítulos 39-41.
- Hewitt, Paul G.: “Física Conceptual”. Ed. Pearson, 2004. Capítulos 31 y 32.
- Montoto San Miguel, L.: “Fundamentos físicos de la Informática y las Comunicaciones”. Ed. Thomson, 2005. Capítulo 10.
- Moore, T.A.: “Física: Seis ideas fundamentales”. Tomo 2. Ed Mc Graw Hill, 2005. Capítulos Q3, Q4, Q6, Q10.
- Tipler, P.A., Mosca,G.: “Física para la Ciencia y la Tecnología”. Tomo 3. Ed. Reverté (6^a ed.), 2010. Capítulos 34-36.
- www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/default.htm

Física con ordenador. Curso de Física Interactivo.

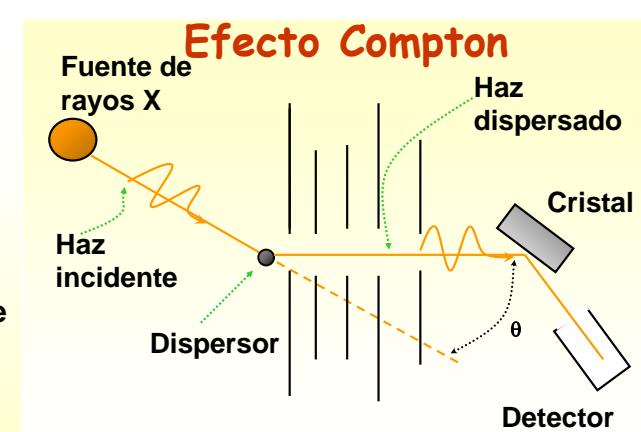
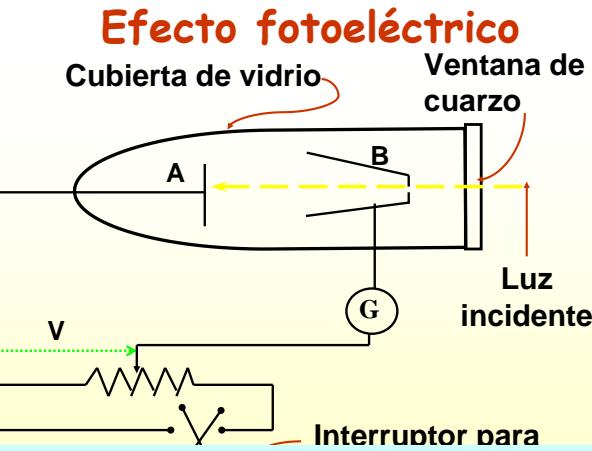
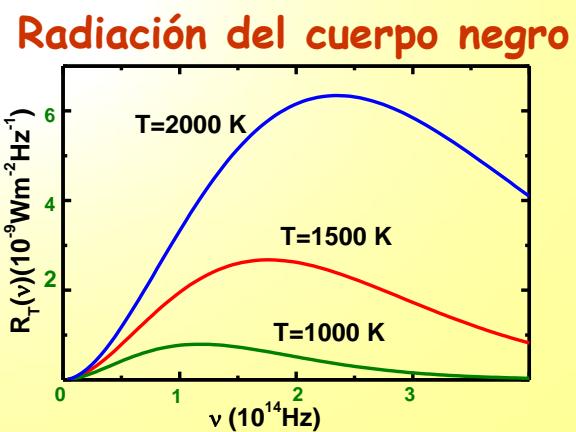
- www.colorado.edu/physics/2000/index.pl

Recursos interactivos de Física cuántica de la Universidad de Colorado.

1. RADIACIÓN Y MATERIA: DUALIDAD ONDA-CORPÚSCULO

Satisfacción en el mundo científico hasta finales del siglo XIX: los fenómenos físicos se podían explicar a partir de las leyes de Newton o a partir de las ecuaciones de Maxwell.

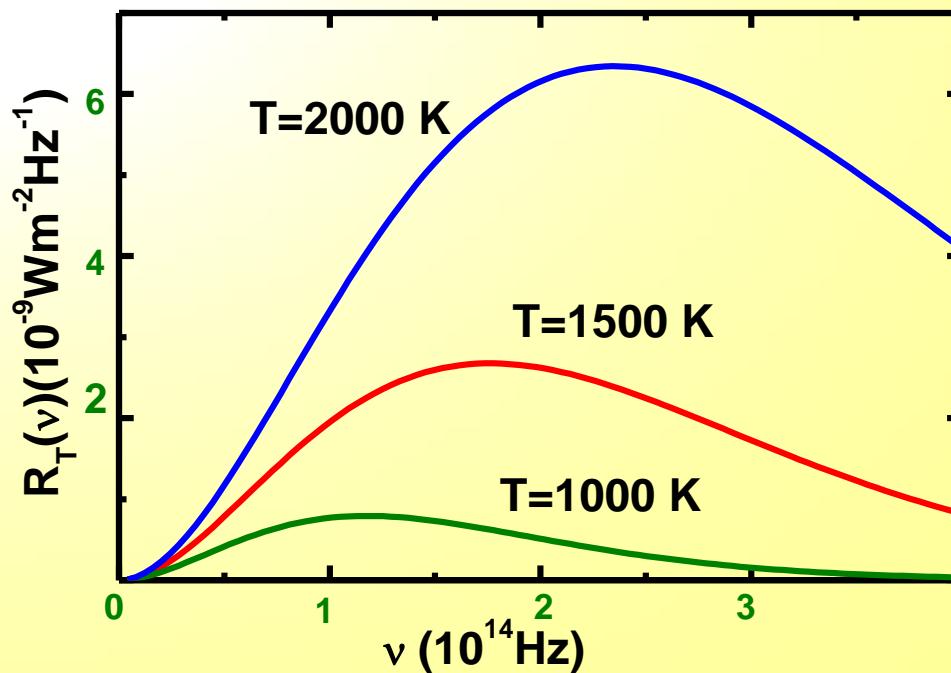
- Algunos fenómenos no explicables por la Física Clásica (emisión de radiación por la materia y interacción radiación materia):
 - Espectros discretos
 - Las características del espectro de emisión del cuerpo negro (1899)
 - Efecto fotoeléctrico: Emisión de electrones al iluminar un metal con una radiación (1905)
 - Efecto Compton: Dispersión de la luz por la materia (1923)



Dualidad onda-corpúsculo

1.2. Radiación del cuerpo negro

Radiancia espectral de un cuerpo negro a distintas temperaturas



Nota: Definición de R_T , Radiancia: energía total emitida por un cuerpo que se encuentra a la temperatura T , por unidad de superficie y de tiempo

Leyes sobre la emisión de radiación del un cuerpo negro

✓ Ley de Stefan:

$$R_T = \sigma T^4$$

$\sigma = 5.6703 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ constante de Stefan-Boltzman

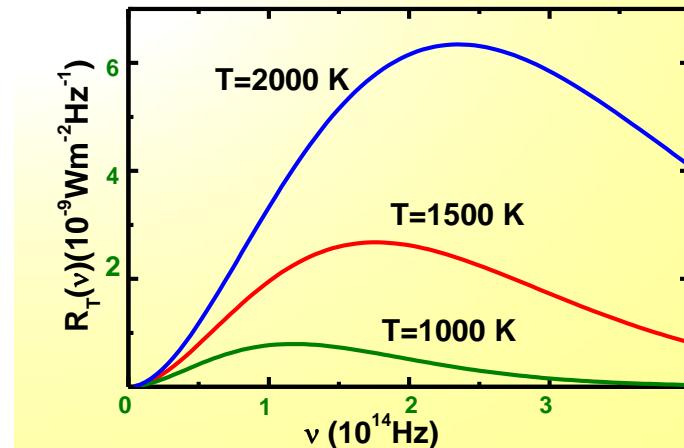
✓ Ley de desplazamiento de Wien:

$$\nu_{max} \propto T \quad \lambda_{max} \propto 1/T$$

ν_{max} frecuencia para la que $R_T(\nu)$ es máxima

También se puede escribir, si relacionamos ν_{max} con el valor correspondiente λ_{max} podemos escribir la ley de Wien

$$K_w = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ m K}$$
 constante de Wien



$$\lambda_{max} = \frac{K_w}{T}$$

$$\lambda_{max} T = K_w$$

El producto de la temperatura absoluta de un cuerpo negro por la longitud de onda para la cual la radiación emitida es máxima, es igual a una constante de Wien, K_w

Radiación de cuerpo negro: Teoría Clásica de Rayleigh-Jeans

- 1º La energía es una **variable continua**
- 2º El cálculo de la energía promedio se realiza a partir de la distribución de Boltzmann
- 3º Valor de la energía total promedio: $k_B T$

Radiación de cuerpo negro: Teoría Cuántica de Planck

- 1º La energía una **variable discreta**
- 2º Los valores de la energía responden a la expresión: $E_n = n \Delta E$ con $n = 0, 1, 2, \dots$
- 3º A partir de consideraciones estadísticas $\Delta E = E(v)$ y supuse la dependencia lineal:

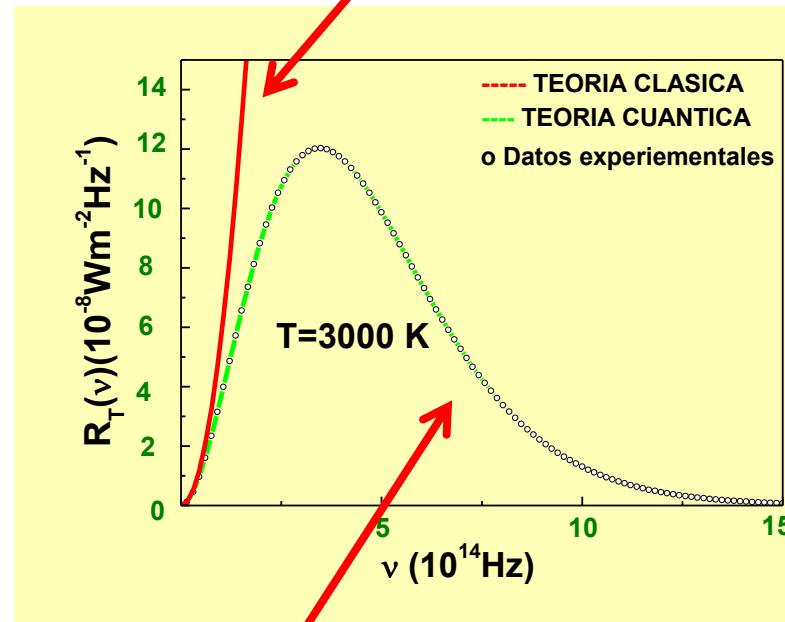
$$\Delta E = h\nu$$

constante de Planck

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

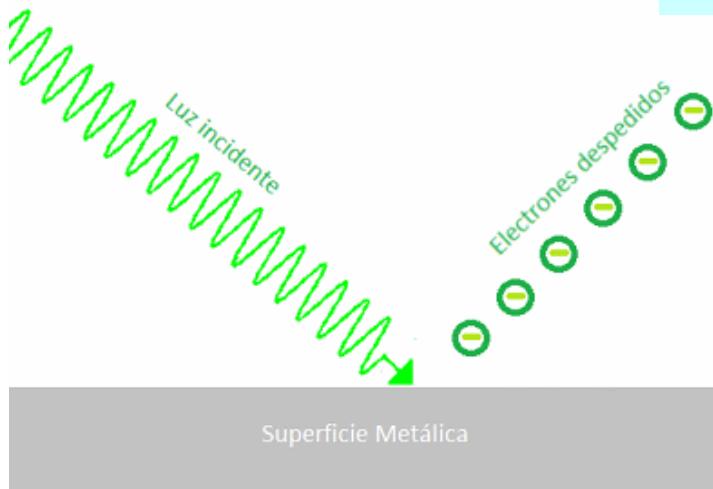
La energía promedio: $\bar{E} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$

$$R_T(v) = \frac{2\pi v^2 k_B T}{c^2}$$

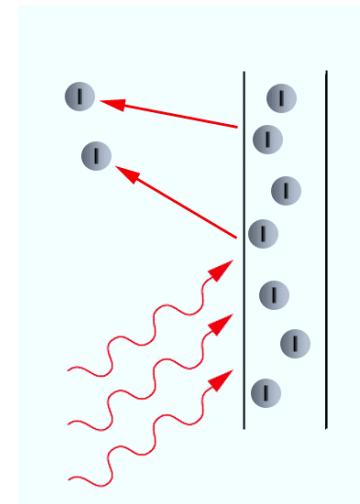
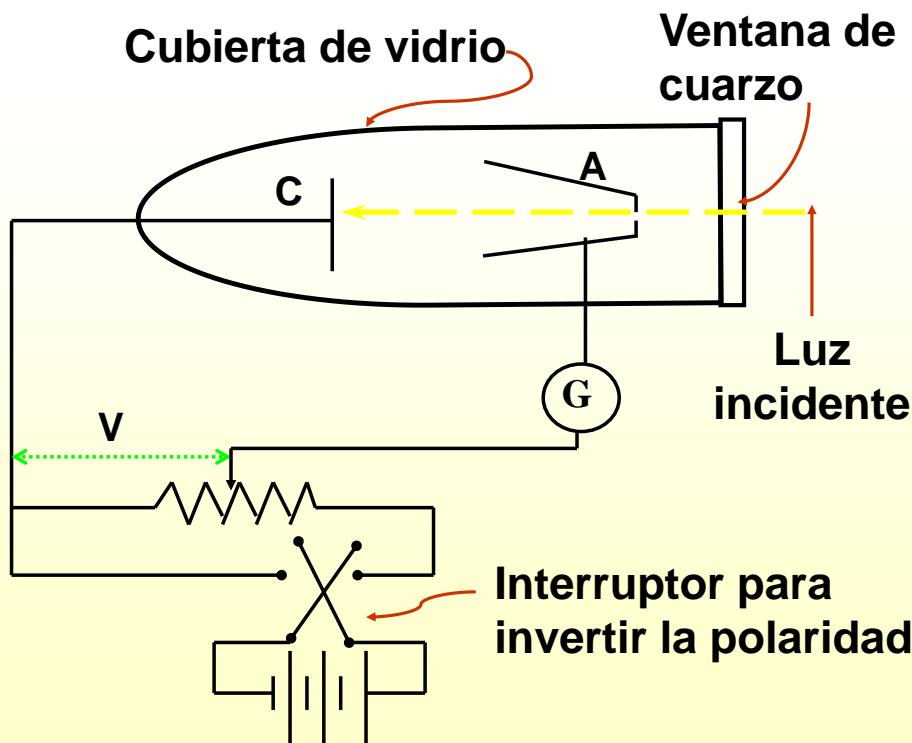


$$R_T(v) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2(e^{h\nu/k_B T} - 1)}$$

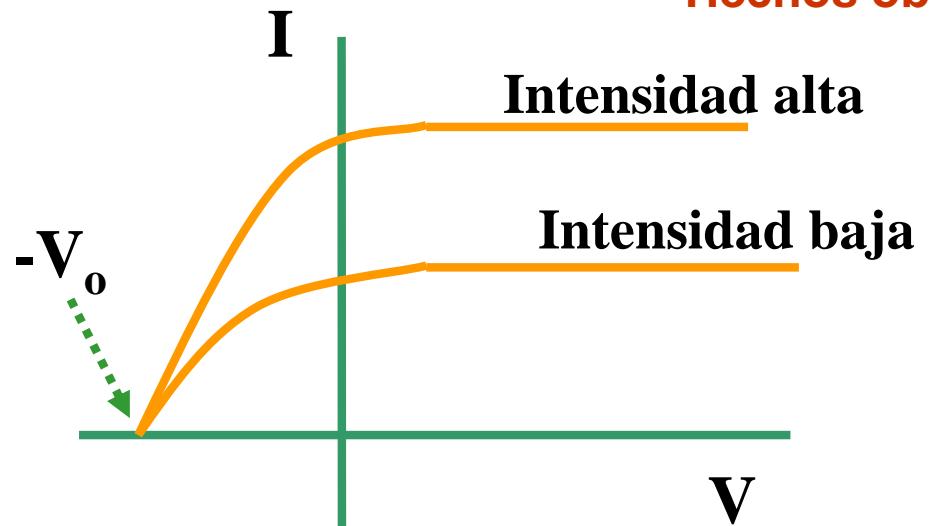
Efecto fotoeléctrico



El efecto fotoeléctrico consiste en la emisión de electrones por un material al incidir sobre él una radiación EM

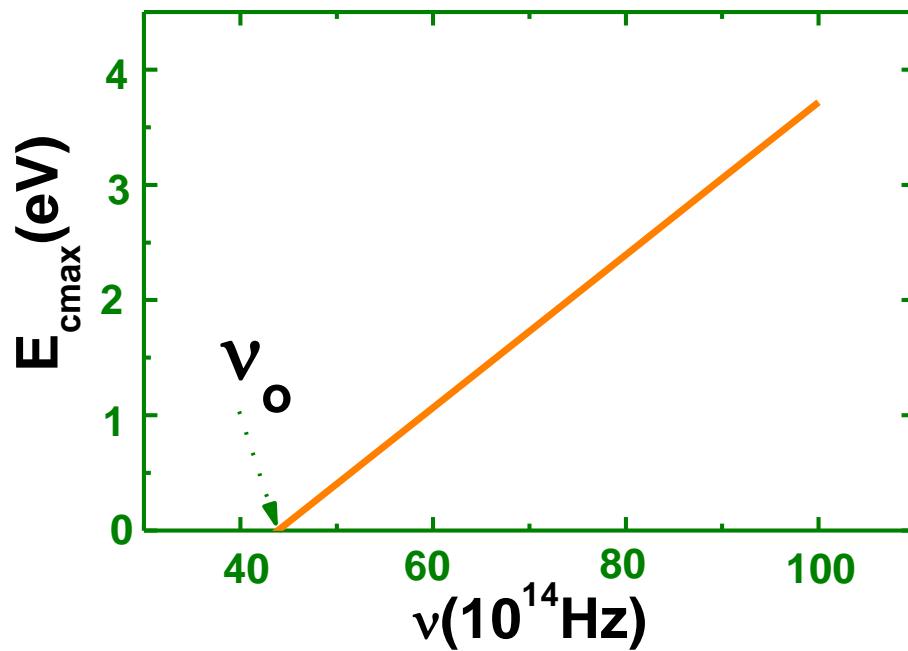


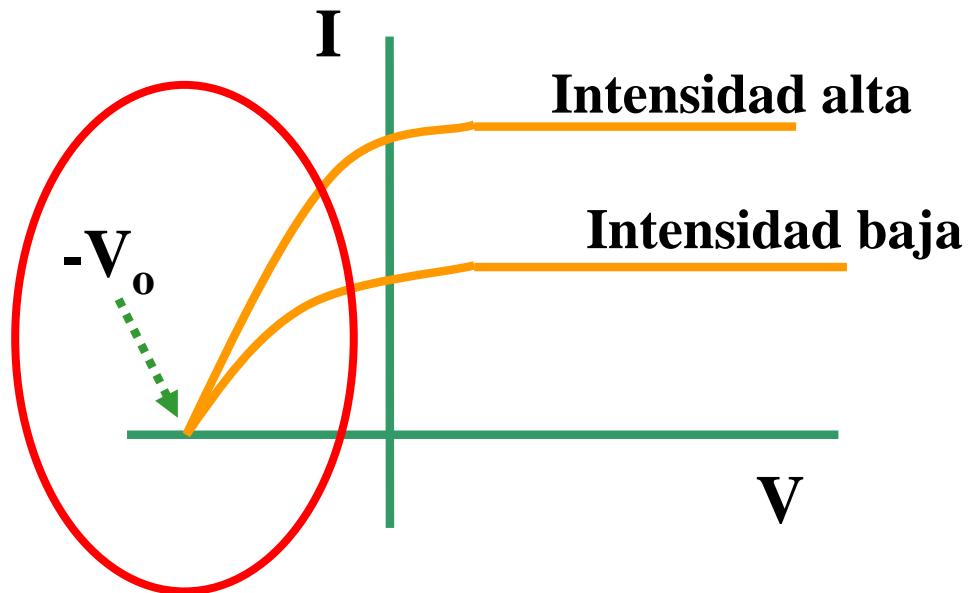
Hechos observados



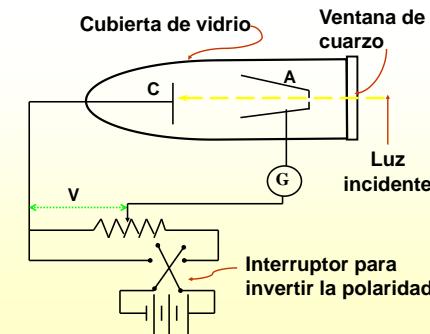
Corriente fotoeléctrica en función de la diferencia de potencial aplicada

Energía cinética máxima de los electrones en función de la frecuencia de la radiación incidente



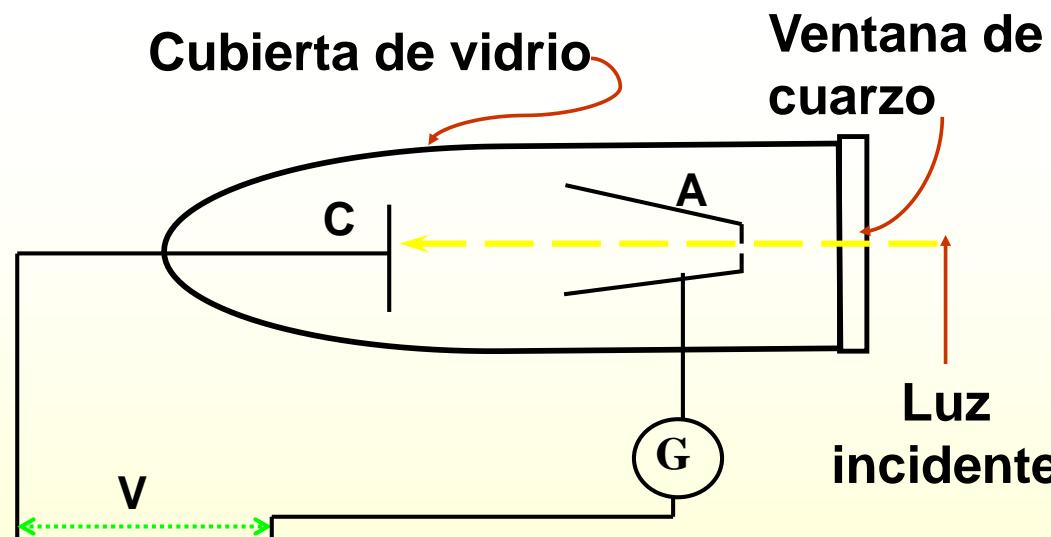


Corriente fotoeléctrica en función de la diferencia de potencial aplicada

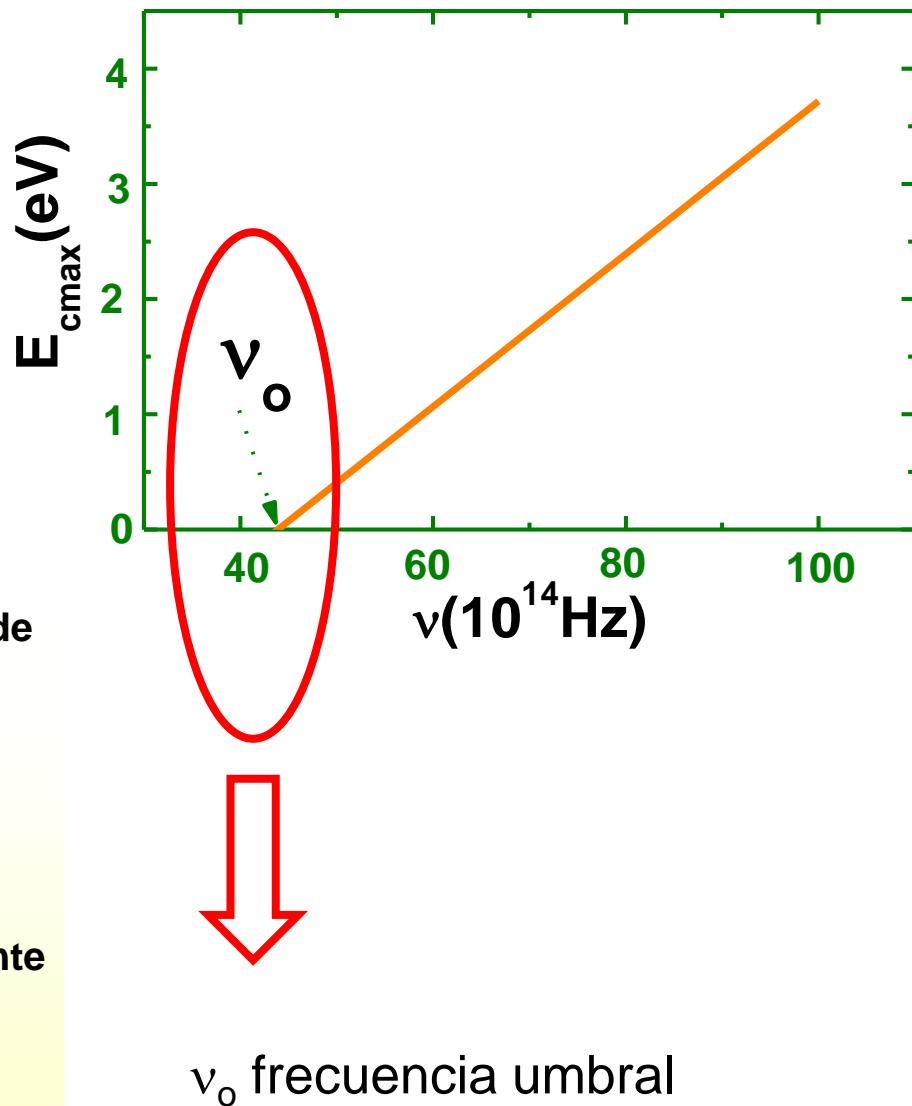
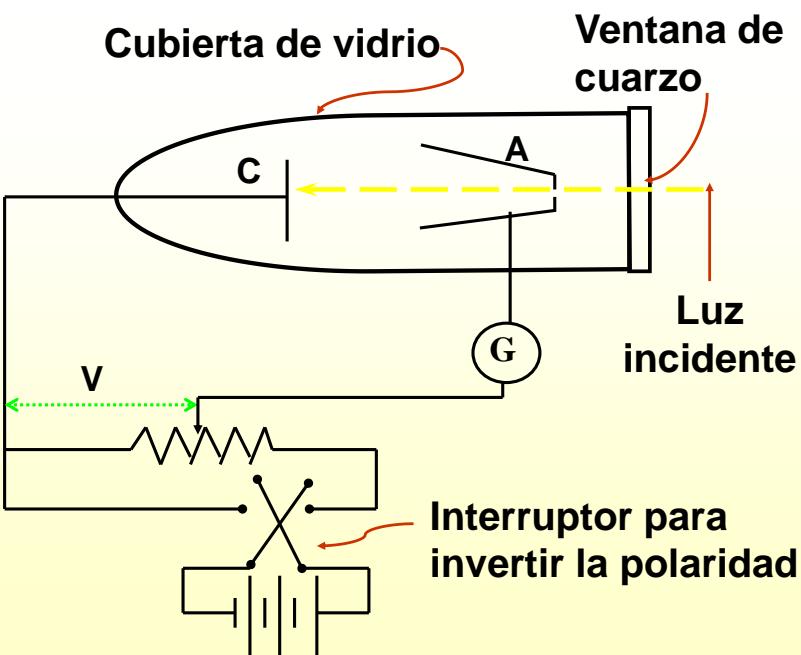


V_o potencial de frenado o potencial de corte

$$E_{c \max} = eV_o$$



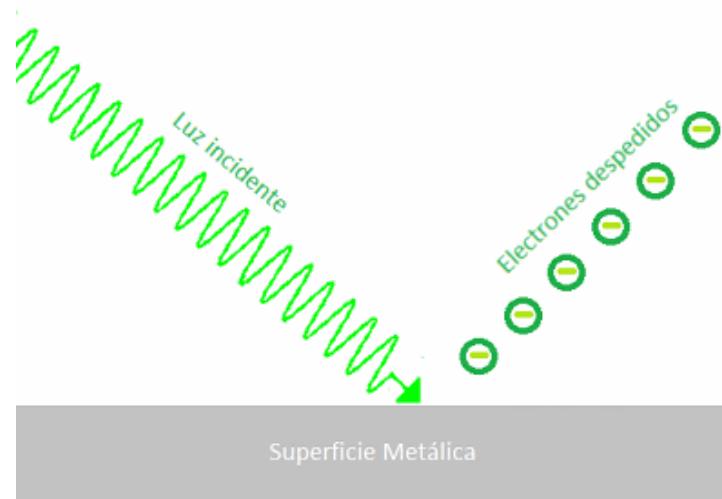
Energía cinética máxima de los electrones en función de la frecuencia de la radiación incidente



ν_0 frecuencia umbral

Hechos no explicables con la Teoría ondulatoria clásica

- 1º La energía cinética de los fotoelectrones es independiente de la intensidad de la luz incidente**
- 2º Existencia de una frecuencia umbral**
- 3º La no existencia de tiempo de retraso entre el instante en el que incide la radiación y en el que es emitido el fotoelectrón**



Efecto fotoeléctrico: Hipótesis de Einstein

1º La energía radiante está cuantizada en paquetes: fotones

2º La energía del fotón es $E = h\nu$

(relación desde el punto de vista cuántico entre la energía del fotón, E, y la intensidad de la radiación, I: $I = N_f h\nu$, donde N_f nº de fotones por unidad de tiempo y área)

3º En el proceso fotoeléctrico un fotón es completamente absorbido por un electrón del photocátodo

* Balance de energía del proceso: $h\nu = E_c + W$

W , es la energía necesaria para extraer el electrón del metal

* Energía cinética máxima del fotoelectrón: $h\nu = E_{cmax} + W_o$

W_o , es la **función trabajo** del metal o trabajo de extracción

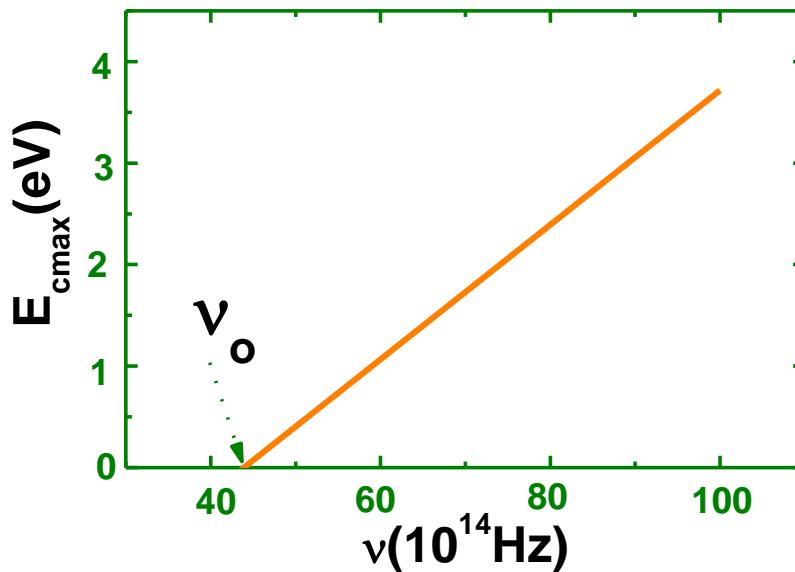
$$E_{cmax} = h\nu - W_o$$

$$E_{c\ max} = h\nu - W_o$$

- La teoría de Einstein predice una relación lineal entre la energía cinética máxima E_{cmax} y la frecuencia ν
- A partir de la pendiente experimental de la representación de E_{cmax} frente a ν , se puede determinar el valor de h

valor obtenido $h = 6.57 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

valor actual $h = 6.62662 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$



Hechos no explicables con la Teoría ondulatoria clásica

1. Dependencia de la energía cinética de los fotoelectrones con la intensidad de la luz incidente

Clásica

Los electrones absorben energía de forma continua. Una luz más intensa aumenta la energía cinética de los electrones.

Experimento

La energía cinética máxima de los electrones es independiente de la intensidad de la luz.

3. Existencia de una frecuencia umbral

Clásica

Se tendría que producir para cualquier frecuencia lo único que la radiación tendría que ser lo suficientemente intensa

Experimento

La frecuencia umbral es independiente de la intensidad de la luz usada

3. Tiempo transcurrido entre la incidencia de la luz y la emisión de electrones

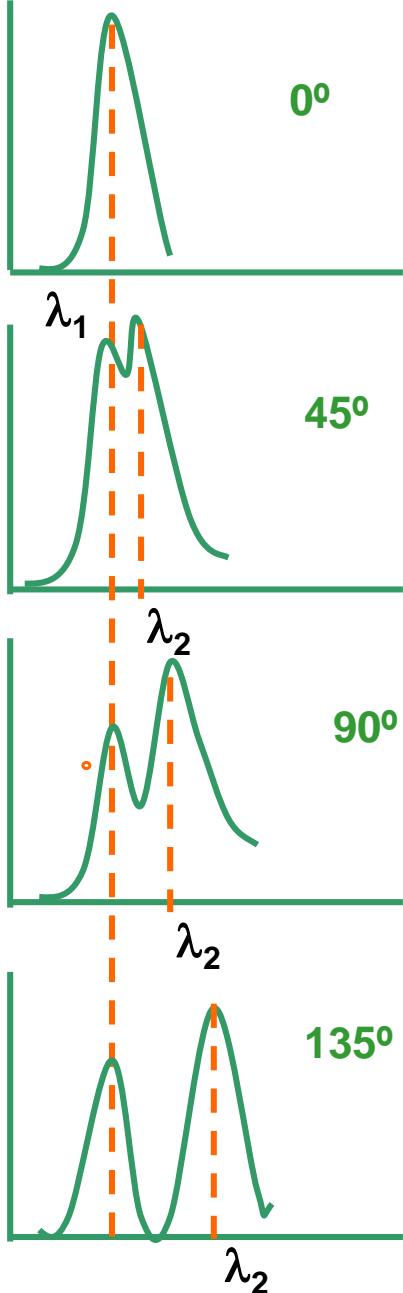
Clásica

Para una luz débil, debe transcurrir un **tiempo perceptible** entre incidencia y emisión, para que el electrón alcance la energía requerida.

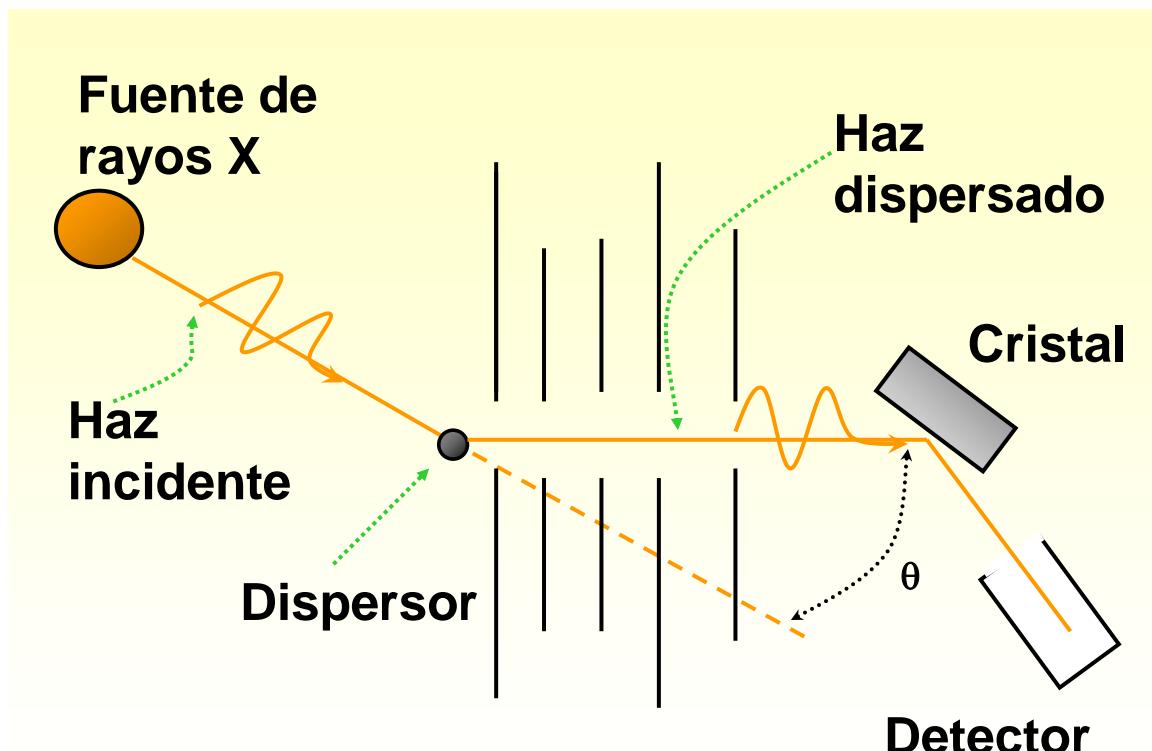
Experimento

Los electrones son emitidos de **manera casi instantánea**, incluso para intensidades bajas.

Efecto Compton



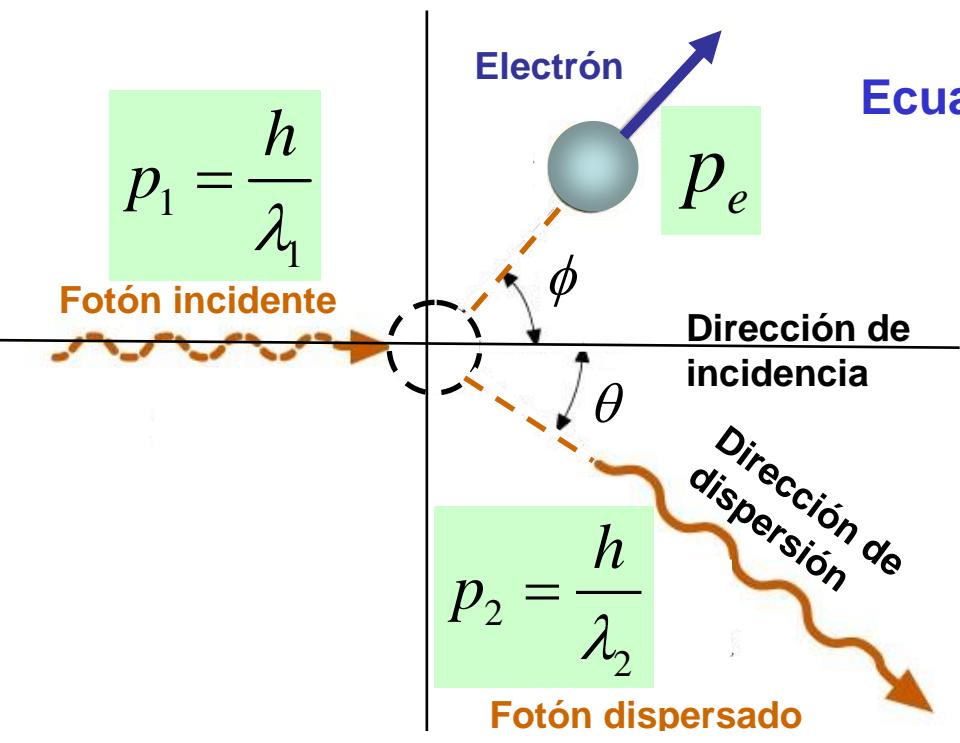
Esquema del dispositivo experimental



Resultados obtenidos a partir de los experimentos de A. H. Compton (1923). Las líneas verticales corresponden a los valores de λ . En el eje y se representa la intensidad.

Explicación del efecto Compton

- 1º La radiación se considera una colección de fotones con energía $E=h\nu$.
- 2º Los fotones colisionan con los electrones libres del blanco dispersor de forma similar a las colisiones que se producen entre bolas de billar.
- 3º En la colisión el fotón transfiere parte de su energía al electrón con el que choca.



Resultado
Ecuación del desplazamiento de Compton

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_o c} (1 - \cos \theta)$$



$$\Delta\lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta)$$

Longitud de onda Compton

$$\lambda_C = \frac{h}{m_o c} = 0.0243 \cdot 10^{-10} m$$

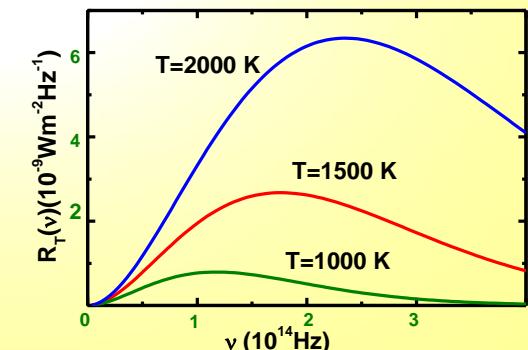
Leyes de la emisión de radiación del cuerpo negro

✓ Ley de Stefan: $R_T = \sigma T^4$

$\sigma = 5.6703 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ constante de Stefan-Boltzman

✓ Ley de desplazamiento de Wien: $\lambda_{max} T = K_w$

$K_w = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ m K}$ constante de Wien

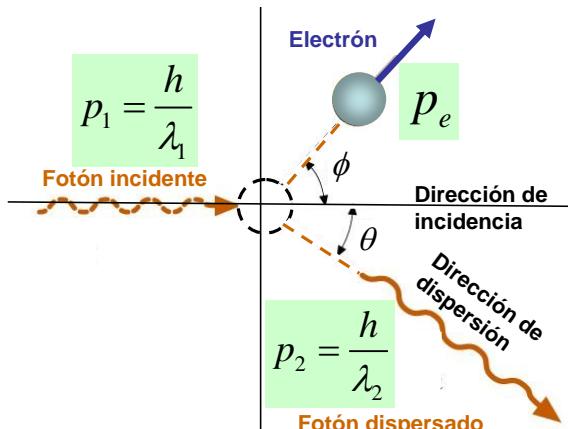
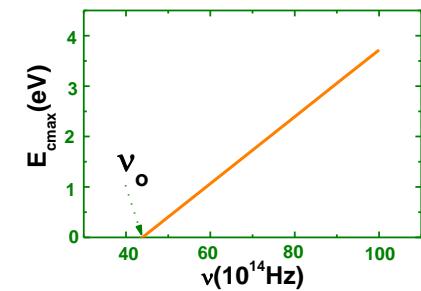


Efecto fotoeléctrico: Hipótesis de Einstein

* Balance de energía del proceso: $h\nu = E_c + W$

* Energía cinética máxima del fotoelectrón: $h\nu = E_{cmax} + W_o$

- Frecuencia umbral: $\nu_o = W_o/h$

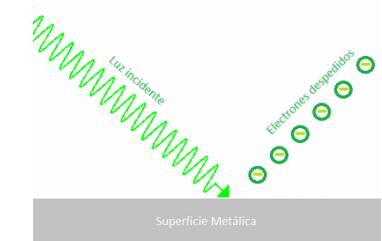


Efecto Compton

Ecuación del desplazamiento de Compton

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_o c} (1 - \cos \theta)$$

$$\text{Longitud de onda Compton} \quad \lambda_C = \frac{h}{m_o c} = 0.0243 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$



Naturaleza corpuscular de la radiación

Concepto ondulatorio
de la radiación



Concepto corpuscular
de la radiación

ONDA ELECTROMAGNÉTICA

- ✓ Reflexión
- ✓ Refracción
- ✓ Difracción
- ✓ Interferencias
- ✓ Polarización

$$c = \lambda \nu$$

c velocidad
de la luz

FOTÓN

- ✓ Partícula sin carga eléctrica
- ✓ Sin masa en reposo
- ✓ Se mueve a la velocidad c en el vacío
- ✓ El fotón en movimiento posee energía y cantidad de movimiento
- ✓ Explica la interacción radiación-materia

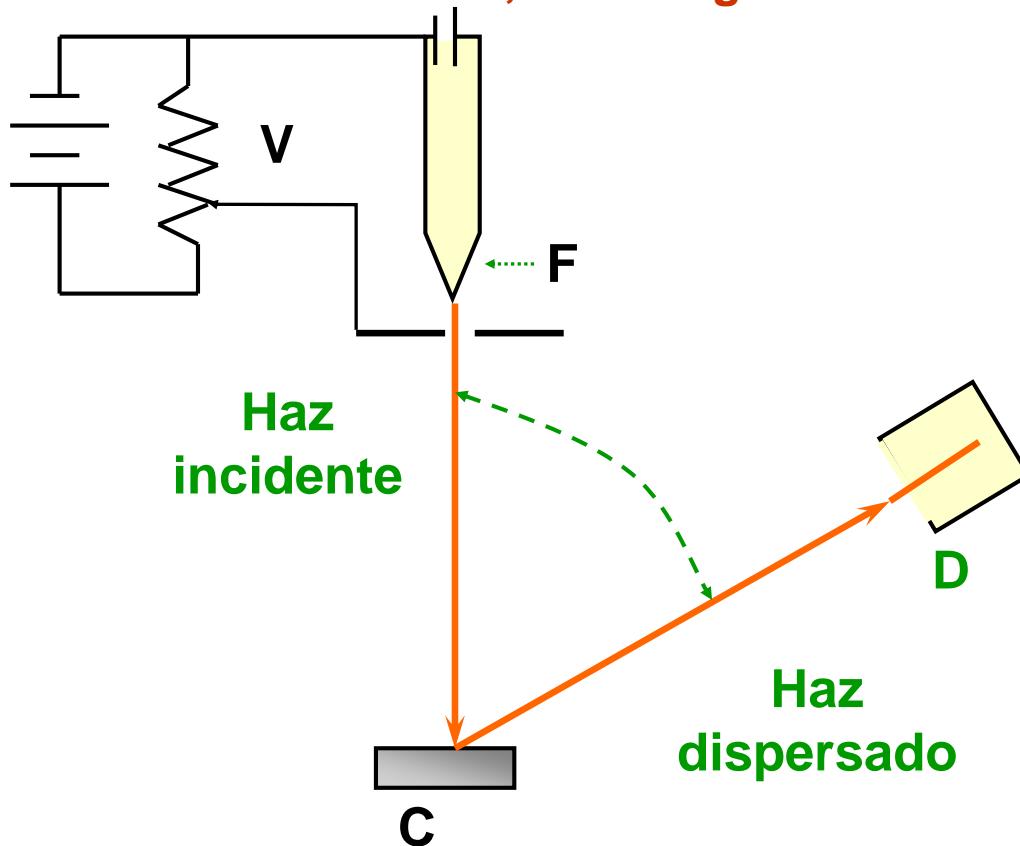
$$E = pc \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda}$$

$$E = h\nu$$

Principio de De Broglie: Ondas de materia

Principio de De Broglie: Cualquier partícula moviéndose con una cantidad de movimiento p lleva asociada una longitud de onda λ , definida de la forma: $\lambda = h / p$

No sólo la luz, sino en general toda la materia, tiene carácter dual.



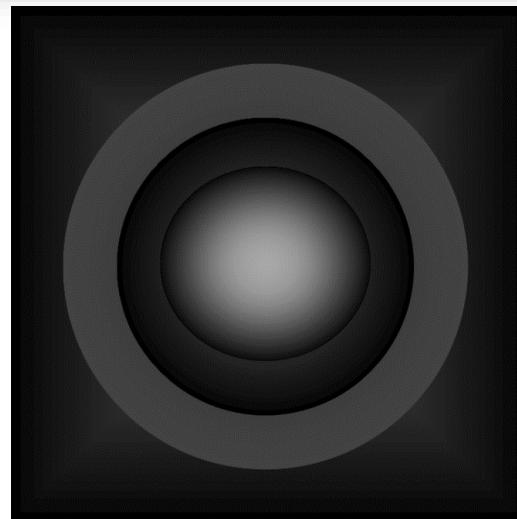
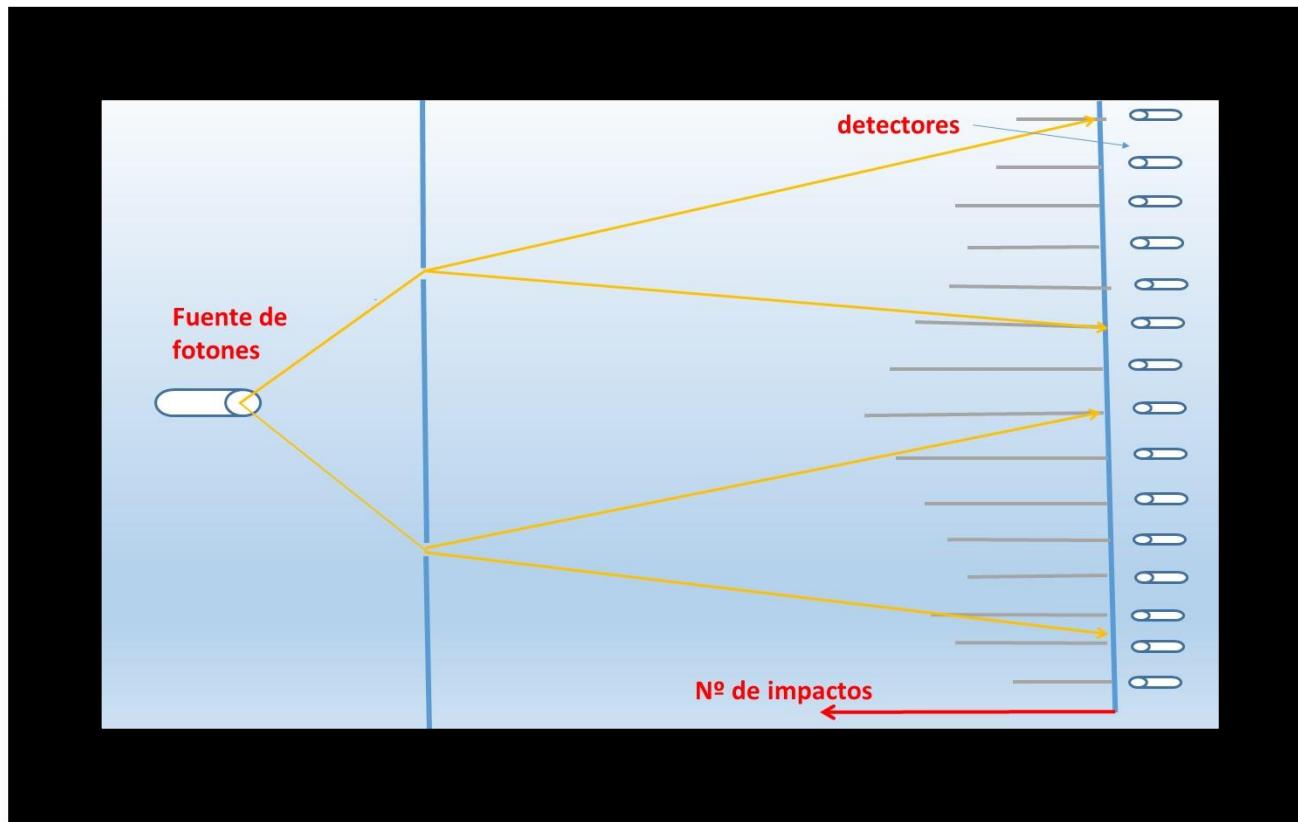
Elsasser (1926) propuso que la naturaleza ondulatoria de la materia se podría comprobar de la misma forma que se había demostrado la de los rayos X: estudiando la dispersión de los electrones cuando inciden sobre un sólido cristalino. Davisson y Germer realizaron esta comprobación.

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\nu = \frac{E}{h}$$

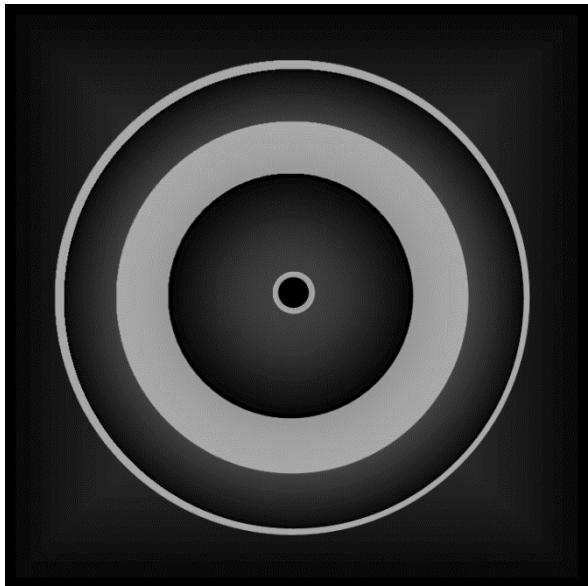
~~$$C = \lambda \nu$$~~

Esquema del dispositivo usado por Davisson y Germer



Diferentes espectros de difracción

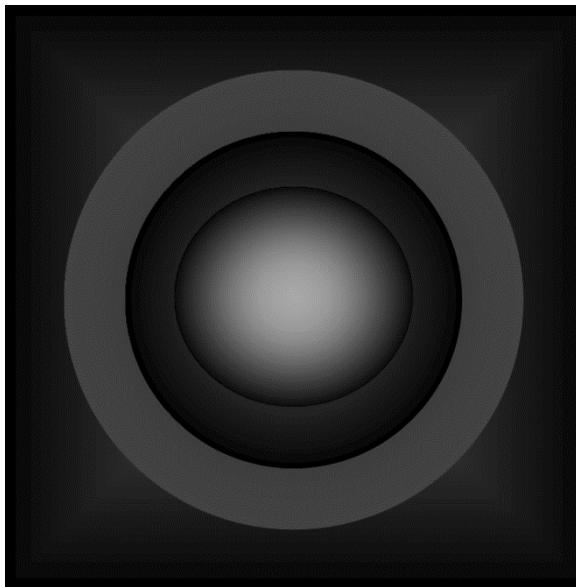
(a)



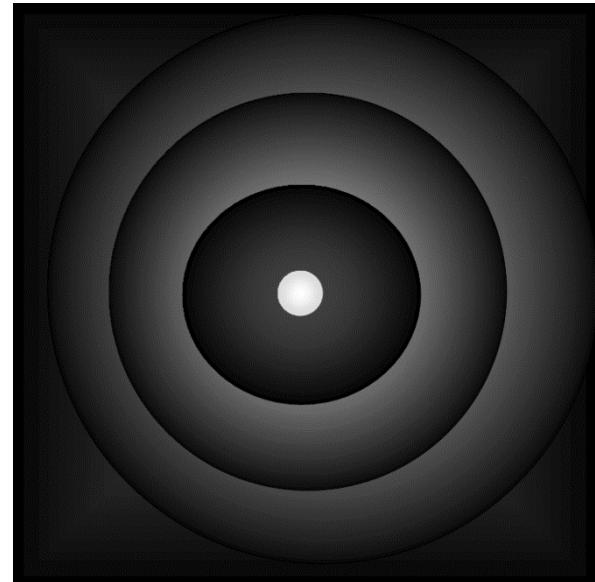
a) Espectro de difracción producido por **rayos X** de $\lambda = 0.071$ nm sobre blanco formado por una hoja de aluminio.

b) Espectro de difracción producido **por electrones** de energía de 600 eV de $\lambda=0.050$ nm sobre una hoja de aluminio.

(b)



(c)



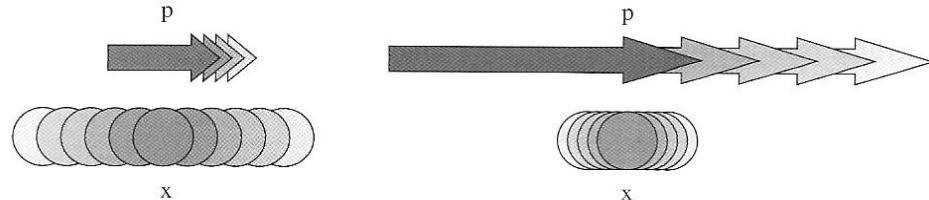
c) Espectro de difracción producido **por neutrones** de energía de 0.0568 eV de $\lambda = 0.12$ nm sobre una hoja de cobre.

Conclusión: La materia tiene una naturaleza dual.

2. PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

Enunciado 1 del Principio de incertidumbre de Heisenberg

No puede medirse *simultáneamente* con toda precisión la posición y el momento lineal de una partícula



$$\Delta x \cdot \Delta p_x > \frac{h}{4\pi}$$

Δx : error absoluto de la coordenada x (incertidumbre en la posición)
 Δp_x : error absoluto de la coordenada x del momento lineal (incertidumbre del momento lineal)

Enunciado 2 del Principio de incertidumbre de Heisenberg

No puede medirse *simultáneamente* con toda precisión la energía que absorbe o emite un átomo y en el instante en que lo hace

$$\Delta E \cdot \Delta t > \frac{h}{4\pi}$$

ΔE : error absoluto en la energía (incertidumbre de la energía)
 Δt : error absoluto en el tiempo (incertidumbre del tiempo)

- Sólo podemos hablar de la probabilidad de que una partícula se encuentre en una determinada posición con un determinado momento lineal. Esto conduce a la idea de que la onda que lleva asociada es una función de probabilidad
- La Física Cuántica aparece como una ciencia probabilística
- Principio de complementariedad de Neils Bohr y dualidad

Principio de complementariedad de Neils Bohr y dualidad

Bohr pretendía, con la noción de complementariedad, expresar el dualismo que veía entre descripciones de fenómenos cuánticos que consideraba necesarias y, a la vez, excluyentes. La aplicación más conocida de dicha noción es la dualidad del modelo de onda y de corpúsculo que presentan la luz y las partículas elementales. Según Bohr, dependiendo del dispositivo experimental que se utilice, se observa el comportamiento ondulatorio o el corpuscular; así, en un experimento de doble rendija aparece el primero y en un experimento que muestre el efecto fotoeléctrico aparece el segundo. Ambas descripciones son complementarias, según Bohr.

Naturaleza ondulatoria de las partículas

Concepto corpuscular
de la materia



La materia como partículas caracterizadas por:

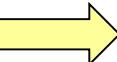
- ✓ su masa
- ✓ su momento lineal
- ✓ su energía



Las partículas macroscópicas tienen λ tan pequeñas que es imposible observar sus propiedades ondulatorias

$$\vec{p} = m\vec{v}$$

Hipótesis de Louis de Broglie



Todas las formas de la materia tienen un comportamiento dual partícula-onda



Partícula cuántica

Concepto ondulatorio
de la materia



La materia como onda caracterizada por:

- ✓ su longitud de onda
- ✓ su frecuencia

$$C = \lambda \nu$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\nu = \frac{E}{h}$$

Un haz de electrones se difracta



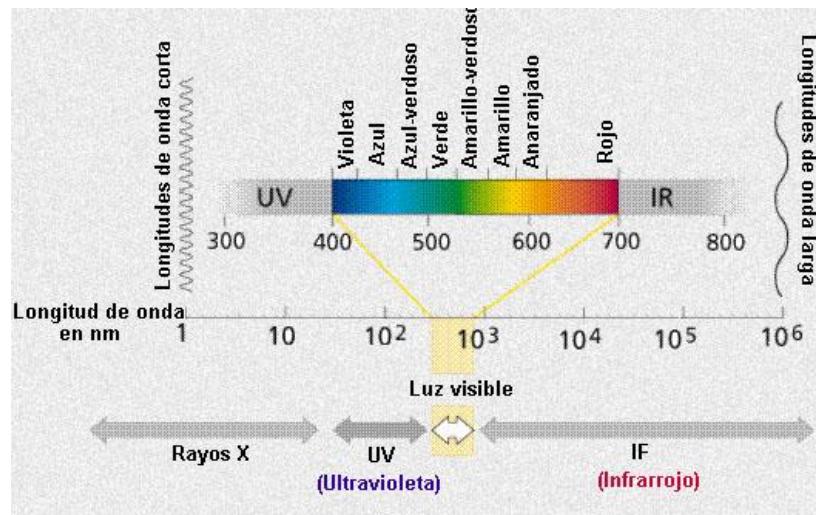
Microscopio electrónico

Para romper un enlace químico en las moléculas de piel humana (dando lugar a una quemadura), se requiere la energía de un fotón de, aproximadamente, 3,5 eV. ¿A qué longitud de onda corresponde? ¿Qué lugar ocupa en el espectro de las ondas electromagnéticas?

DATOS: $h = 6 \cdot 62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$; $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

$$E = 3,5 \text{ eV} = 3,5 \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} = 5,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

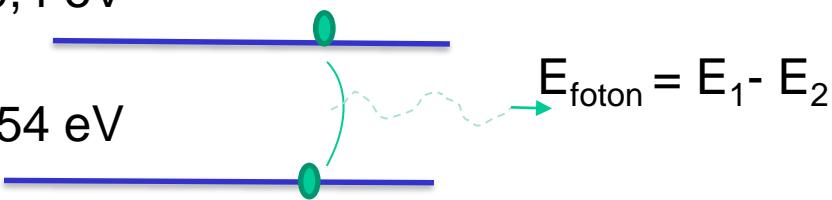
$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} \quad \xrightarrow{\text{ }} \quad \lambda = h\frac{c}{E} = 3,546 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$



La radiación emitida por electrones que caen de un estado energético de 30,4 eV a otro de 5,54 eV se utiliza para irradiar un metal y producir efecto fotoeléctrico. Determinar: (a) la longitud de onda y frecuencia de la radiación utilizada; (b) el trabajo de extracción del metal si el potencial de frenado medido es de 22,4 V; (c) la frecuencia umbral para la emisión fotoeléctrica del metal utilizado; (d) el radio de la circunferencia descrita por los electrones emitidos con la energía cinética máxima cuando éstos entran en el seno de un campo magnético uniforme de $2 \cdot 10^4$ G perpendicular al plano de su trayectoria.

$$E_1 = 30,4 \text{ eV}$$

$$E_2 = 5,54 \text{ eV}$$



(a)

$$E_{foton} = h\nu \Rightarrow \nu = \frac{E_{foton}}{h}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

(b) $h\nu = E_{cmax} + W_o = eV_o + W_o \Rightarrow W_o = h\nu - eV_o$

(c) $h\nu_o = W_o \Rightarrow \nu_o = \frac{W_o}{h}$

(d) $F_{ce} = F_{me} \Rightarrow R = \frac{m_e V_{emax}}{eB}$

$$V_{emex} = \sqrt{\frac{2E_{cmax}}{m_e}}$$

El cesio metálico se usa mucho en photocélulas y en cámaras de televisión ya que tiene la energía de ionización más pequeña de todos los elementos estables. (a) ¿Cuál es la energía cinética máxima de un fotoelectrón emitido por el cesio a causa de una luz de 500 nm? (Téngase en cuenta que no se emiten fotoelectrones si la longitud de onda de la luz utilizada para irradiar la superficie del cesio es mayor de 660 nm); (b) Usar la masa en reposo del electrón para calcular la velocidad del fotoelectrón del apartado (a).

(a) $\lambda_o = 500 \text{ nm}$ $h \frac{c}{\lambda_o} = W_o \Rightarrow E_{cmax} = h\nu - W_o$

(b) $E_{cmax} = \frac{1}{2} m_e V_e^2 \Rightarrow V_e = \sqrt{\frac{2E_{cmax}}{m_e}}$

Una radiación luminosa de 2000 Å e intensidad 3 mW/m² incide sobre un metal de cobre cuya función trabajo es 1 eV. Calcular (a) el número de fotones por unidad de tiempo y área que llegan al metal; (b) la energía cinética de los fotoelectrones emitidos.

(a) $N = n^o \text{ de fotones} \rightarrow n = N/tS$

$$I = \frac{W}{t S} \quad \Rightarrow I = \frac{NE_f}{t S} = nE_f \quad \Rightarrow n = \frac{I}{E_f}$$

(b) $h\nu = E_{cmax} + W_o \quad \Rightarrow E_{cmax} = h\nu - W_o$

Un fotón de 400 pm de longitud de onda choca contra un electrón en reposo y rebota en una dirección que forma un ángulo de 150° con la dirección incidente. Calcular la velocidad y la longitud de onda del fotón dispersado

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c}$$

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\varphi)$$

Velocidad no varia y es c

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_c(1 - \cos\varphi) \quad \Rightarrow \lambda_2 = \lambda_1 + \lambda_c(1 - \cos\varphi)$$

$$\lambda_2 = 4,045 \cdot 10^{-10} m$$

Un electrón, un neutrón y un fotón tienen una longitud de onda de 1 Å. Calcular la frecuencia y la energía asociada a cada uno de ellos. DATOS: $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg; $m_n = 1,68 \times 10^{-27}$ kg.

Fotón

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_f = \frac{c}{v_f} \Rightarrow v_f = \frac{c}{\lambda_f} \\ E_{foton} = h \frac{c}{\lambda_f} \end{array} \right.$$

Electrón

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_e = \frac{h}{p_e} = \frac{h}{m_e V_e} \Rightarrow V_e = \frac{h}{m_e \lambda_e} \\ E_e = \frac{p_e^2}{2m_e} \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow v_e = \frac{E_e}{h}$$

~~$C = \lambda \nu$~~

Neutrón

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_n = \frac{h}{p_n} = \frac{h}{m_n V_n} \Rightarrow V_n = \frac{h}{m_n \lambda_n} \\ E_n = \frac{p_n^2}{2m_n} \end{array} \right.$$

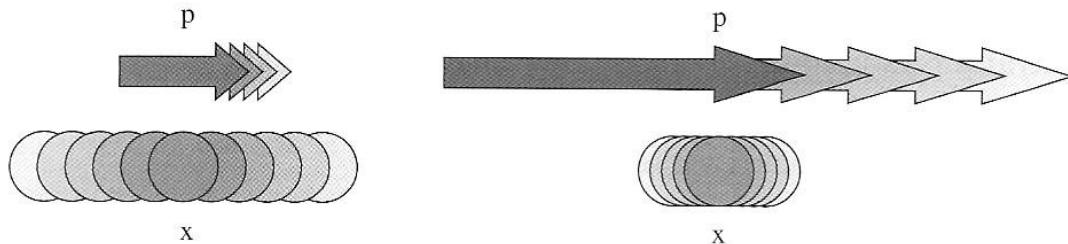
$$\Rightarrow v_n = \frac{E_n}{h}$$

Calcular la longitud de onda asociada a una partícula que se mueve con una velocidad de $2 \cdot 10^6$ m/s si dicha partícula es: (a) un electrón; (b) un protón; (c) una bola de 0'2 kg de masa. DATOS: $m_e = 9 \cdot 1 \cdot 10^{-31}$ kg; $m_p = 1 \cdot 65 \cdot 10^{-27}$ kg

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mV} \quad \lambda_e = \frac{h}{m_e V}$$
$$\lambda_p = \frac{h}{m_p V}$$

$$\lambda_b = \frac{h}{m_b V}$$

Los electrones de un haz tienen una velocidad de $(400\pm5)\cdot10^4$ m/s ¿Cuál es la mínima incertidumbre con que se puede conocer la posición?



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

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta x \Delta (mv_x) \geq \frac{h}{4\pi}$$

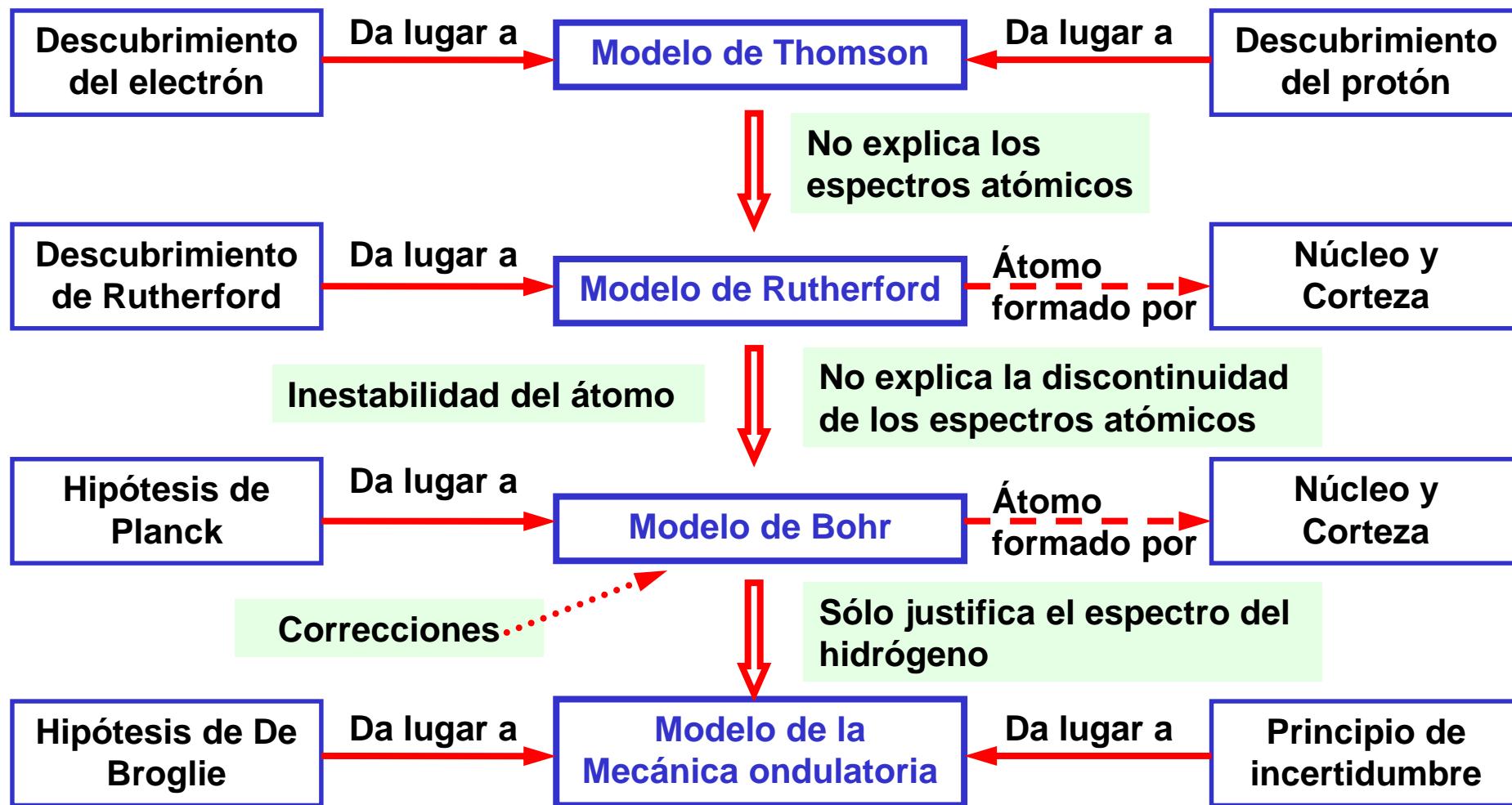
$$m \Delta x \Delta v_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$m \Delta x_{min} \Delta v_x = \frac{h}{4\pi} \Rightarrow \Delta x_{min} = \frac{h}{4\pi m \Delta v_x}$$

3. MECÁNICA ONDULATORIA: ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

MODELOS ATÓMICOS

Los modelos atómicos tratan de interpretar la realidad del átomo. A lo largo de la historia estos modelos han ido evolucionando gracias a distintas experiencias que han permitido conocer mejor la materia.

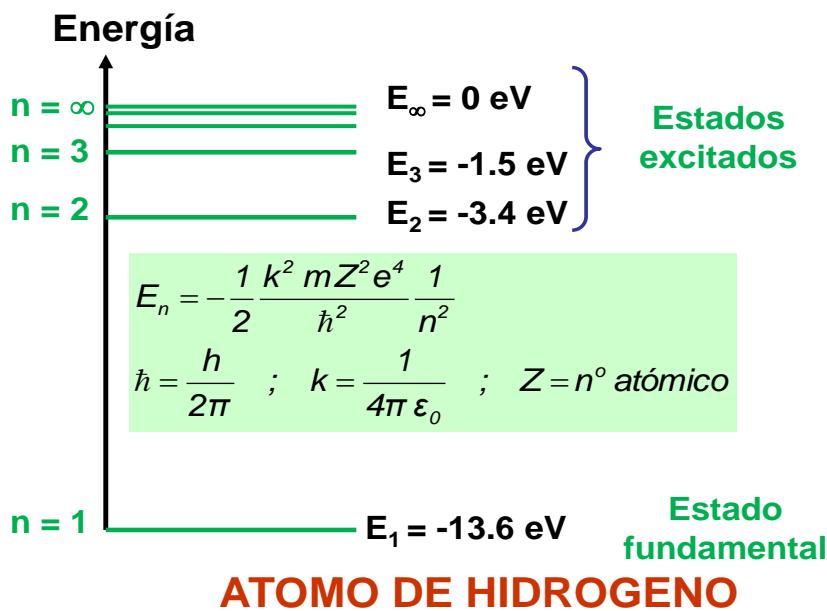


Explicación de los espectros atómicos:

Bohr sugirió que los electrones ocupaban niveles u órbitas con una determinada energía y absorbían o emitían energía al pasar de un nivel a otro. Se emite energía cuando caen de un nivel superior a otro inferior, **espectro de emisión**. El **espectro de absorción** se origina al promocionar electrones desde niveles inferiores a otros superiores.

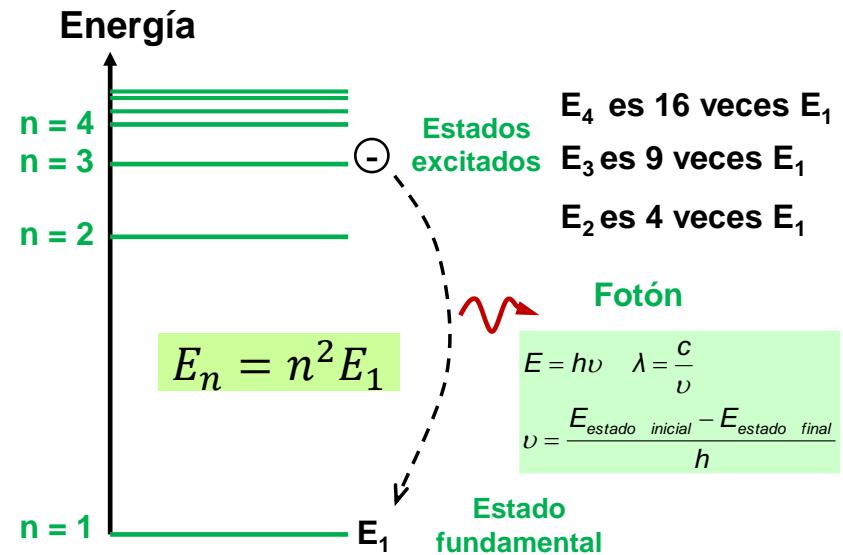
La energía del átomo está cuantizada

Diagrama de energías del átomo de hidrógeno. Cada línea horizontal representa la energía de un estado estable del átomo



Un electrón podrá intercambiar energía para sufrir transiciones entre estados permitidos

Proceso de emisión de un fotón al saltar el electrón de un estado excitado al fundamental



Mecánica ondulatoria

- La relación de De Broglie $\lambda = h / p$, proporciona la longitud de onda asociada a una partícula con su cantidad de movimiento.
- La Mecánica Cuántica introduce el carácter ondulatorio para describir el estado de las partículas. El estado de una partícula se describe por medio de una función de onda $\Psi(x,y,z,t)$.
- Esto conlleva un carácter probabilístico que describe el estado de las partículas. Si se considera un volumen elemental $dV = dx dy dz$ centrado en (x,y,z) , la probabilidad diferencial dP de que la partícula se encuentre dentro del volumen dV está dada por:

$$dP = |\Psi(x, y, z)|^2 dV$$

- $|\Psi(x, y, z)|^2$ representa la densidad de probabilidad, es decir, la probabilidad por unidad de volumen de que la partícula esté en el punto (x, y, z)
- La probabilidad P , de que la partícula se encuentre en una región finita de volumen V será:

$$P_V = \int_V |\Psi|^2 dV$$

- Si conocemos la función de onda Ψ podemos calcular la densidad de probabilidad $|\Psi|^2$ de que la partícula esté en un punto.

Mecánica ondulatoria

Principio de De Broglie: Ondas de materia

Longitud de onda de De Broglie:
 $\lambda = h/p$

Principio de incertidumbre de Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta p_x > \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t > \frac{h}{4\pi}$$

La hipótesis de De Broglie sobre la dualidad onda-corpúsculo fue el punto de partida de Schrödinger para establecer la llamada **mecánica cuántica o mecánica ondulatoria**, que reemplaza a la mecánica clásica de Newton cuando se quiere describir el movimiento de partículas microscópicas. Para ello, Schrödinger postuló una ecuación, **ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER**.

Función de onda $\Psi(x, y, z, t)$

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z, t) + U \Psi(x, y, z, t) = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

Función de onda $\Psi(x, y, z)$

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z) + (E - U(x, y, z)) \Psi(x, y, z) = 0$$

$|\Psi(x, y, z)|^2$ representa la **densidad de probabilidad**

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una dimensión

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U\Psi(x,t)=\frac{ih}{2\pi}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una dimensión

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}+(E-U(x))\Psi(x)=0$$

2^a Ley de Newton

$$\vec{F} = m\vec{a} \quad \frac{d^2}{dt^2}\vec{r} = \frac{\vec{F}}{m} \quad \frac{d^2}{dt^2}x = \frac{F}{m}$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, aplicada a una partícula de masa m limitada a moverse sobre el eje x e interactuando con el entorno mediante una función de energía potencial $U(x)$ y donde E es la energía total del sistema (partícula y entorno)

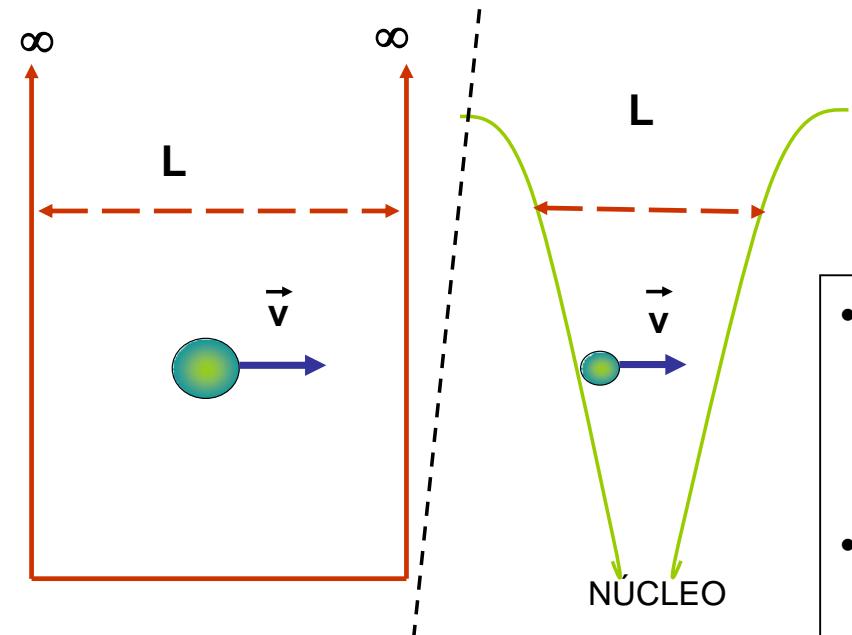
$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + (E - U(x))\Psi(x) = 0$$

\downarrow

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + (E - U(x))\Psi(x) = 0$$

PARTÍCULA EN UN POZO DE POTENCIAL



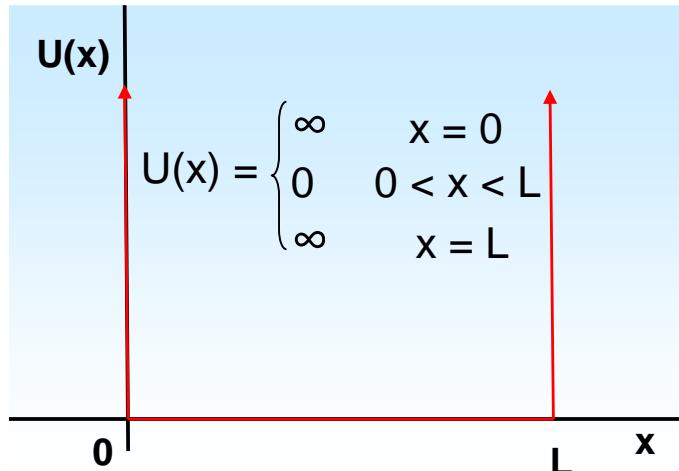
- El tratamiento de la ecuación de Schrödinger conduce a una energía cuantizada (igual resultado que en las ondas estacionarias)

- Una limitación al movimiento de las **partículas cuánticas** en un sistema son las **condiciones de contorno**, que producen una **cuantización de la energía** del sistema.
- Los **estados cuánticos** son aquellos en los que se cumplen las condiciones de contorno.

Resolución de la ecuación de Schrödinger para la partícula moviéndose en un pozo rectangular e infinito

Dentro del pozo, $U(x)=0$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -\frac{8\pi^2m}{h^2} [E - U(x)] \Psi(x) \implies -\frac{h^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E \Psi(x) \implies \Psi(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x + \alpha\right)$$



Condiciones de contorno: $\Psi(x)=0$ para $x=0$ y $x=L$

$$\Psi(0) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x + \alpha\right) = 0 \rightarrow \alpha = 0$$

$$\Psi(L) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}L\right) = 0 \rightarrow \frac{2\pi}{\lambda}L = n\pi \rightarrow \lambda = \frac{2L}{n}$$

$$\Psi(x) = A \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 \sin^2\left(n\pi \frac{x}{L}\right) dx = 1$$

$$\Psi(x) = 0 \text{ para } x \leq 0 \text{ y } x \geq L$$

Función de onda para la partícula

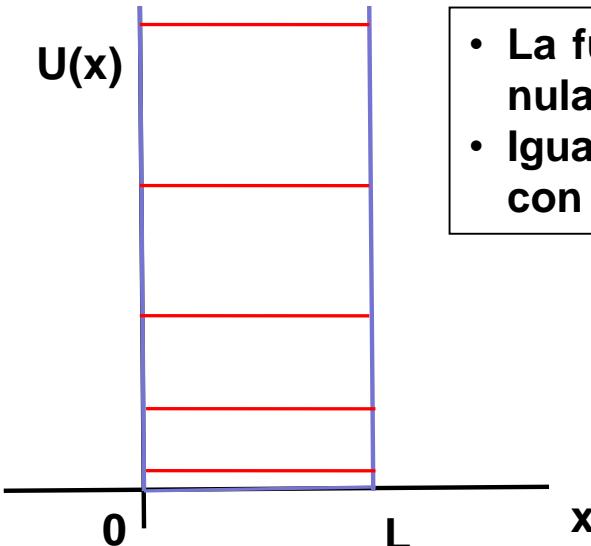
→ $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right); n = 1, 2, 3, \dots$

$$\int_0^L A^2 \sin^2\left(n\pi \frac{x}{L}\right) dx = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Función de onda estacionaria para la partícula dentro de una caja

➤ Partícula confinada en una caja unidimensional



- La función de onda $\Psi(x)$ debe de ser continua en el espacio y nula fuera de la caja y tambien en sus paredes
- Igual condiciones y resultado que en las ondas estacionarias con extremos fijos

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right); n = 1, 2, 3, \dots$$

Cuantización de la energía de la partícula

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \left(p = \frac{h}{\lambda}\right)$$



$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \rightarrow \left(\lambda = \frac{2L}{n}\right)$$

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2; n = 1, 2, 3, \dots$$

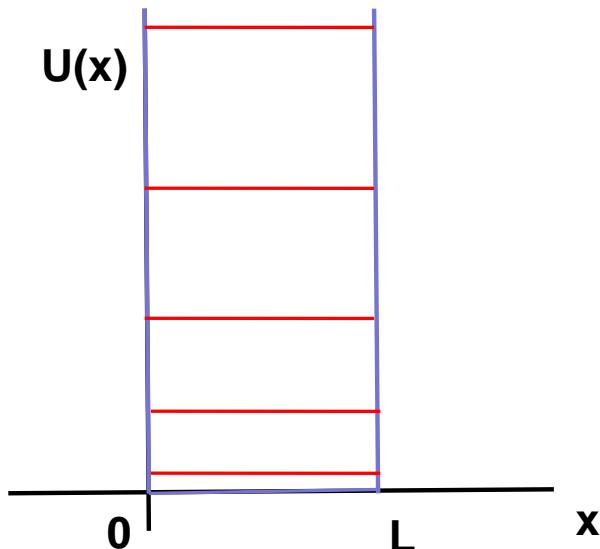
Energía del estado fundamental

$$n = 1 \rightarrow E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$$

La energía más pequeña (energía del punto cero, $n = 1$) no puede ser cero (en contradicción con la teoría clásica)

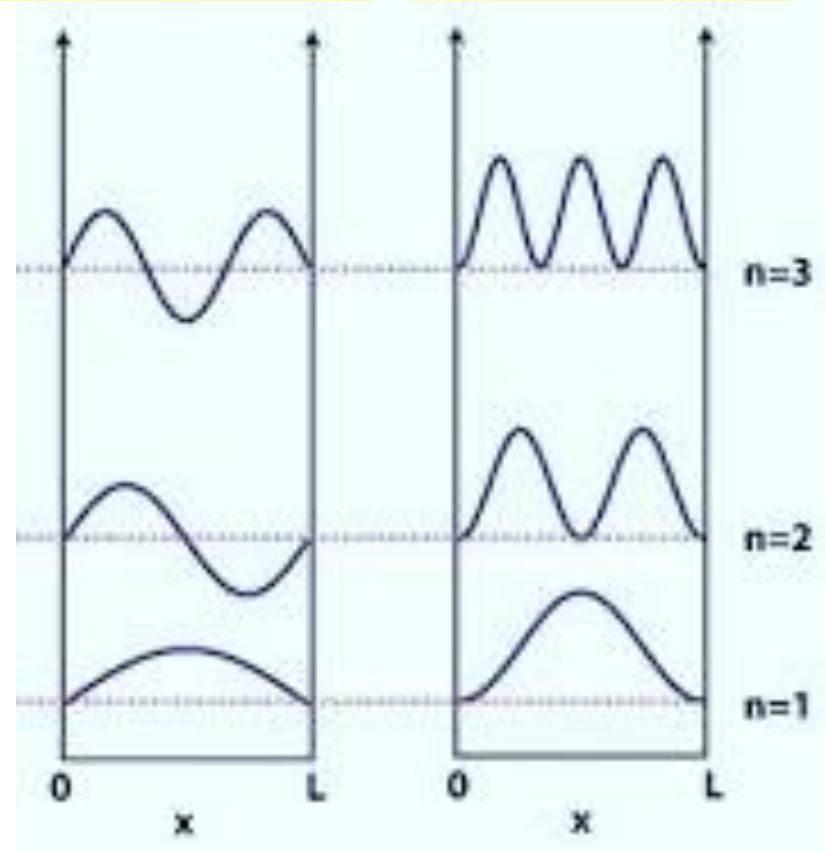
Función de onda estacionaria para la partícula dentro de una caja

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right); n = 1, 2, 3, \dots$$



Representación de
 Ψ para $n = 1, n = 2$
y $n = 3$

Representación de
 Ψ^2 para $n = 1, n = 2$
y $n = 3$



Función de onda estacionaria para la partícula dentro de una caja

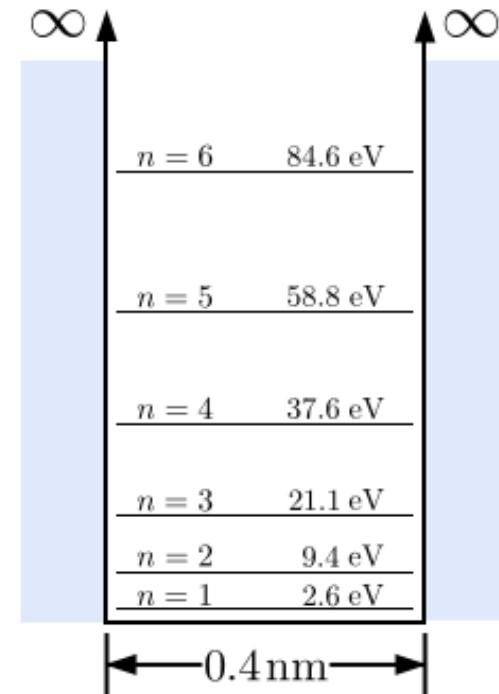
$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right); n = 1, 2, 3, \dots$$

Cuantización de la energía de la partícula

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2; n = 1, 2, 3, \dots$$

Energía del estado fundamental

$$n = 1 \rightarrow E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}$$



Una bola de masa $m = 30 \text{ g}$ la introducimos en un tubo de plástico de longitud $l = 30 \text{ cm}$ y se cierran sus extremos quedando confinado en él. Calcular: a) las energías permitidas y energía de su estado fundamental; b) si la bola adquiere una velocidad de 30 cm/s . El número cuántico del estado en el que se encuentra en esa situación

Cuantización de la energía de la partícula confinada

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2; n = 1, 2, 3, \dots$$

Energía del estado fundamental

$$n = 1 \rightarrow E_1 = \frac{\hbar^2}{8mL^2}$$

$$n = 1 \rightarrow E_1 = 2,03 \cdot 10^{-65} \text{ J} \quad E_1 = \frac{1}{2}mv_1^2 \rightarrow v_1 \approx 10^{-32} \text{ ms}^{-1}$$

$$v_n = 0.3 \text{ ms}^{-1} \rightarrow E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 \rightarrow E_n = E_1 \cdot n^2 \rightarrow n = 10^{29}$$

Principio de correspondencia de Bohr

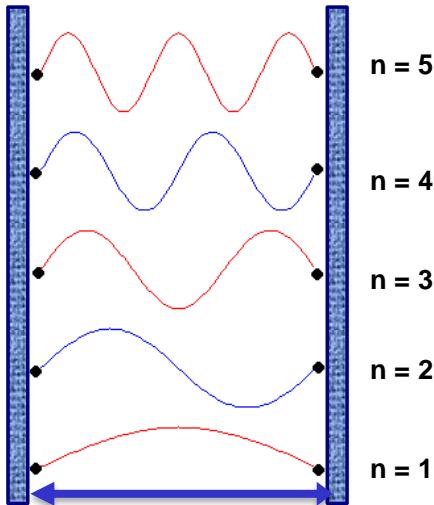
La Física Cuántica concuerda con la Física Clásica cuando los números cuánticos son muy grandes

➤ Problema de la partícula confinada en una caja unidimensional

- La función de onda $\Psi(x)$ debe de ser continua en el espacio y nula fuera de la caja y tambien en sus paredes
- Igual condiciones y resultado que en las ondas estacionarias con extremos fijos



➤ Ondas estacionarias creadas al hacer vibrar una cuerda de longitud L sujetada por los dos extremos



Condición de onda estacionaria



$$\left\{ \begin{array}{l} L = n \frac{\lambda}{2}; n = 1, 2, 3, \dots \\ \lambda = 2 \frac{L}{n} \end{array} \right. \quad \text{Longitud de onda cuantizada}$$

Cuantización de la energía de la partícula



$$\left\{ \begin{array}{l} P = \frac{h}{\lambda} \\ E = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} = \frac{1}{2} \frac{h^2}{ml^2} \\ E = \frac{h^2}{8mL^2} n^2; n = 1, 2, 3, \dots \\ n = 1 \rightarrow E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \end{array} \right.$$

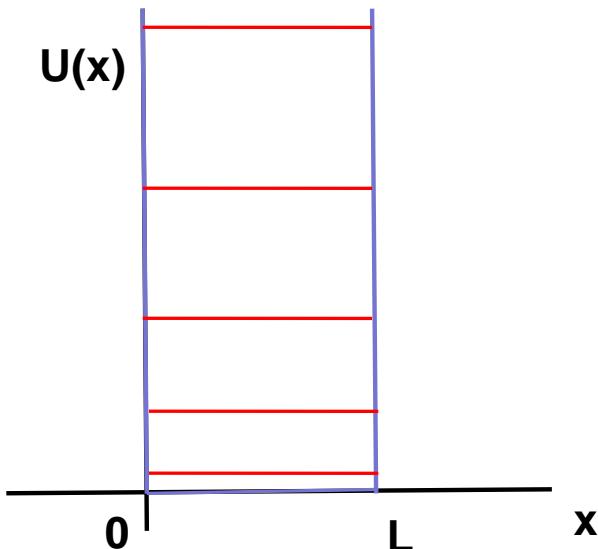
La energía más pequeña (energía del punto cero, $n = 1$) no puede ser cero (en contradicción con la teoría clásica)



Energía del estado fundamental

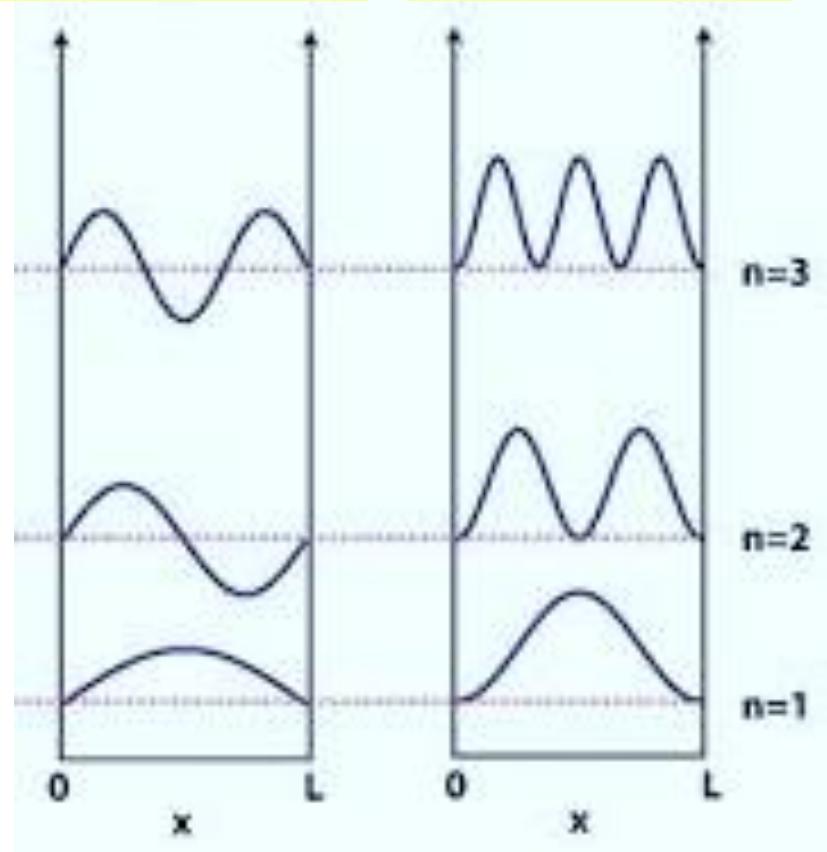
Función de onda estacionaria para la partícula dentro de una caja

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right); n = 1, 2, 3, \dots$$

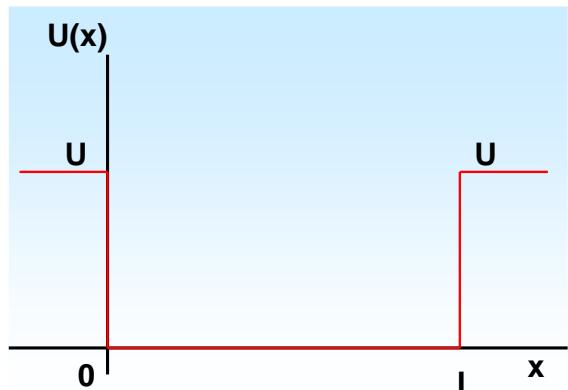


Representación de
 Ψ para $n = 1, n = 2$
y $n = 3$

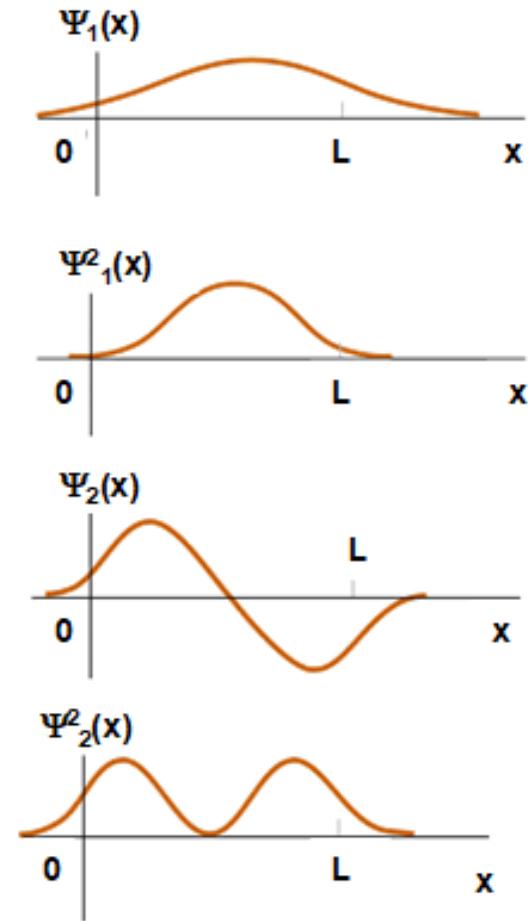
Representación de
 Ψ^2 para $n = 1, n = 2$
y $n = 3$



Partícula moviéndose en un pozo rectangular y finito



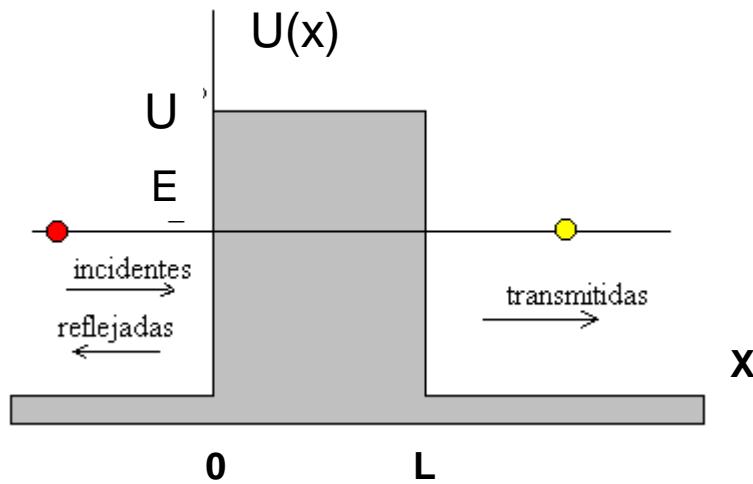
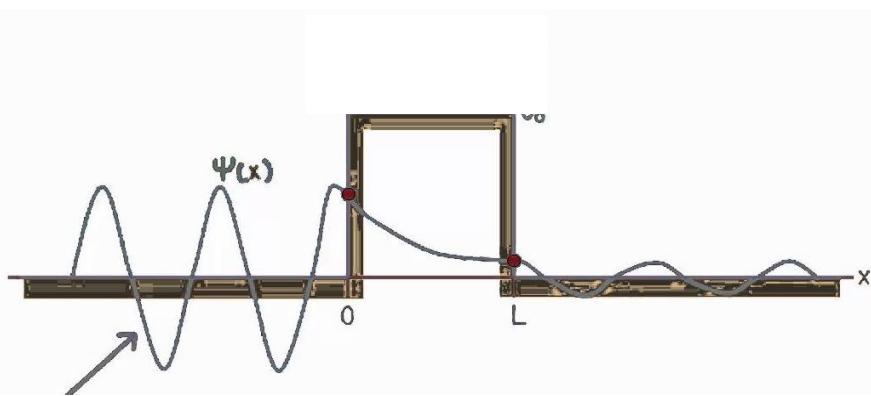
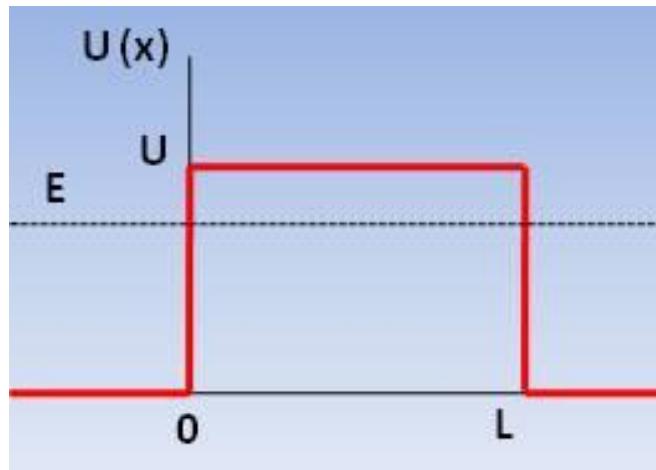
$$U(x) = \begin{cases} U & x \leq 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ U & x \geq L \end{cases}$$



- Según las Física clásica si las partículas tienen $E < U$ no pueden encontrarse fuera de la región del pozo.
- La partículas cuánticas (comportamiento ondulatorio) presentan una probabilidad medible encontrarse fuera del pozo.
- Existe cierta probabilidad de penetración de la partícula en las paredes

Efecto túnel

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ U & 0 < x < L \\ 0 & x \geq L \end{cases}$$



- La probabilidad no nula de encontrar la partícula al otro lado de la barrera se denomina efecto túnel
- Aplicaciones positivas y efectos negativos

Ecuación de Schrödinger en el sistema electrón-núcleo

La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial en derivadas parciales. Al integrar la ecuación sólo se obtienen soluciones matemáticamente aceptables cuando la energía total del sistema electrón-núcleo (es decir, del átomo) toma ciertos valores fijos.

La integración de la ecuación de Schrödinger proporciona la función de onda $\Psi(x)$ como solución de la ecuación y los posibles valores cuantizados de la energía del átomo.

A partir de la función de onda se puede calcular la probabilidad de encontrar la partícula

Modelo de la Mecánica Ondulatoria

Los **electrones** en los átomos deberían ser considerados como ondas y descritos por una **FUNCIÓN DE ONDA**

Condiciones de contorno
(atracción del núcleo)

Cuantización de
la energía

Ecuación de Schrödinger

Ecuación fundamental de la
mecánica cuántica

Ψ^2

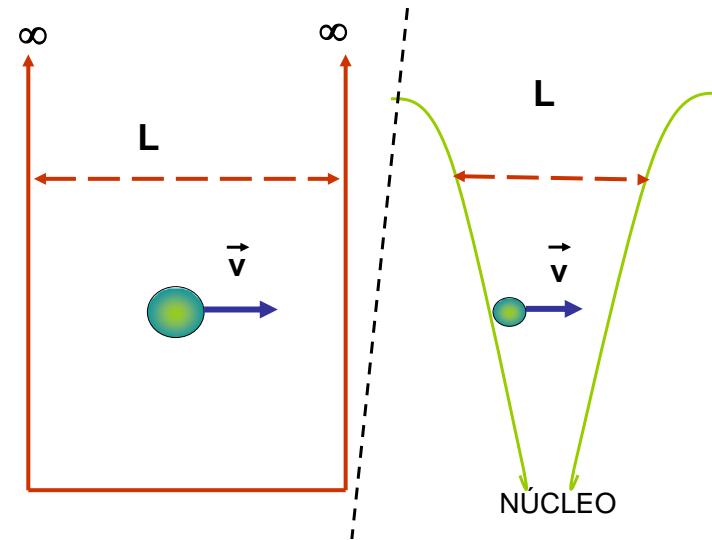
Densidad
electrónica

Probabilidad de
encontrar al electrón
en una región

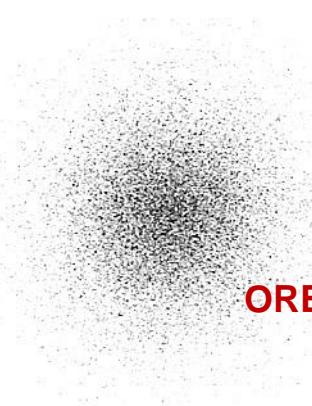
$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - U] \Psi = 0$$

Las soluciones matemáticas
aceptables indican que la
**energía total del sistema
electrón-núcleo** solo puede
tomar **ciertos valores fijos**

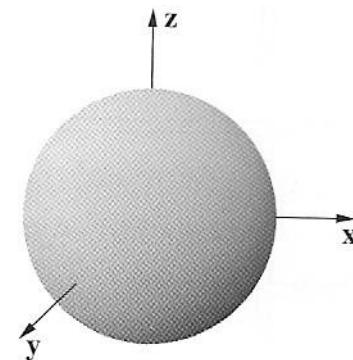
NUMEROS CUÁNTICOS



La mecánica ondulatoria no informa de la trayectoria del electrón sino la probabilidad de encontrarlo en una región



ORBITAL



ESTADOS DE ENERGÍA ATÓMICOS

Las ecuaciones de Schrödinger describen el comportamiento de la función de onda del electrón dentro del átomo

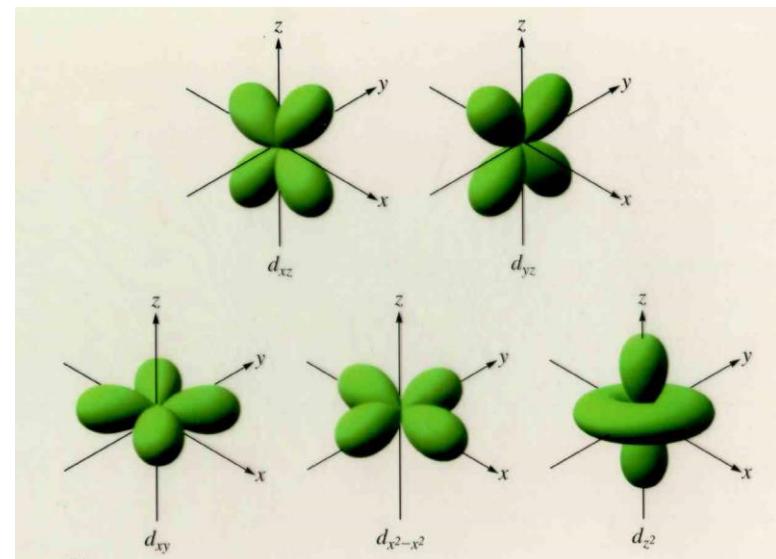
$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + (E - U) \Psi = 0$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, generalizada a tres dimensiones.

Las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger, conducen a funciones de onda y energías caracterizadas por tres números cuánticos originados por las condiciones de contorno de cada una de las coordenadas

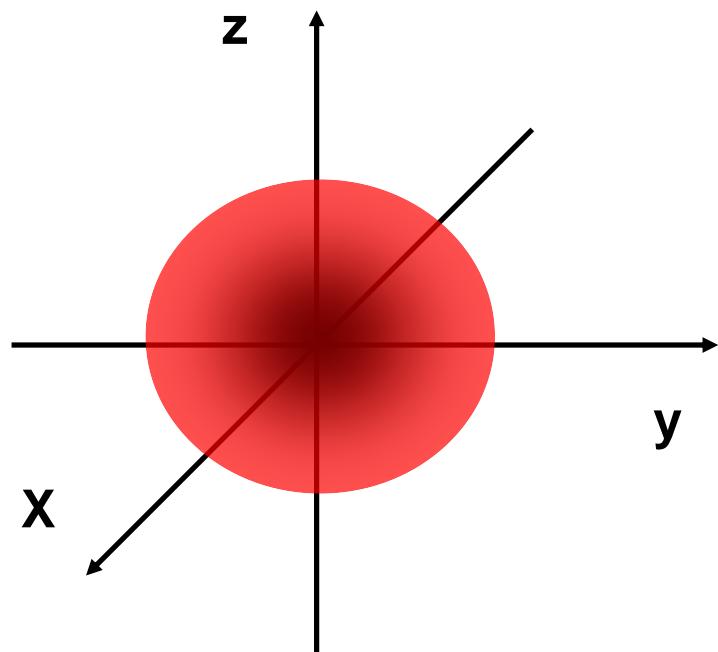
Orbital atómico

- Mientras que en el modelo de Bohr se hablaba de órbitas definidas en el modelo de Schrödinger sólo podemos hablar de las distribuciones probables para un electrón con cierto nivel de energía.
- Un electrón puede detectarse en cualquier punto de una nube de probabilidad como se refleja en las siguientes figuras.



- Los orbitales son las regiones del espacio donde la probabilidad de encontrar el electrón con una determinada energía es superior al 99%. Representan gráficamente las soluciones de la ecuación de Schrödinger.
- Los electrones tienen cuantizada la energía por lo que la energía del átomo lo está también.

Representa el orbital de mínima energía del átomo de hidrógeno con $-2.18 \cdot 10^{18}$ J



Números cuánticos

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependen de tres variables espaciales (x,y,z), cada una de ellas da lugar a un número cuántico. Además de estos tres números cuánticos, hay un cuarto que aparece al plantear el problema del electrón moviéndose en el pozo de potencial tridimensional (potencial generado por el núcleo atómico) con el tratamiento de la mecánica ondulatoria relativista (en esta situación el problema depende de 3 variables espaciales y una temporal).

Interpretación de los números cuánticos del átomo de Böhr

Número cuántico principal “n”: Introducido por Böhr, aparece en la cuantificación del momento angular y de la energía. Indica el nivel energético en que se encuentra el electrón. **Toma valores naturales: 1, 2, 3,..**

Número cuántico del momento angular o azimutal o secundario “ℓ”: Introducido por Sommerfeld en su corrección al átomo de Böhr. Relacionado con el momento angular del átomo. Indica la forma general de la región por la que se mueve el electrón. **Toma valores comprendidos desde 0 hasta n-1**

Número cuántico magnético “ m_e ”: Introducido por Zeeman al comprobar la influencia de los campos magnéticos externos sobre el espectro. Indica la orientación del orbital ante un campo magnético externo. **Toma valores comprendidos entre $-\ell$ y $+\ell$**

Número cuántico de espín electrónico “ m_s ” : Se asocia al momento angular intrínseco y momento magnético dipolar del electrón. **Puede tomar dos valores: $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$**

Números cuánticos

Nº cuántico	Nombre	Valores posibles	Descripción
n	Principal	1, 2, 3, 4, ..., ∞	Determina el tamaño y la energía del orbital
l	Azimutal o de momento angular	1, 2, 3, ..., $(n - 1)$	Determina la forma del orbital
m_l	Magnético	$-l, \dots, 0, \dots, +l$	Determina la orientación del orbital
m_s	De espín	+1/2, -1/2	Determina la orientación del espín

Interpretación de los números cuánticos

Número cuántico principal (n)

- Dependencia de la función de onda con la distancia.
- Probabilidad de encontrar al electrón a diferentes distancias del núcleo.
- Tamaño y energía del orbital

Número cuántico orbital (ℓ)

- Asociado al momento angular del electrón. Subnivel del electrón.
- Cuantización del momento angular.
- Forma del orbital.

Número cuántico magnético (m_ℓ)

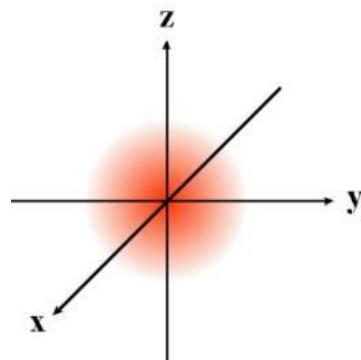
- Caracteriza la componente del momento angular del electrón en un campo magnético externo.
- Orientación del orbital.

Número cuántico de espín (m_s)

- Momento angular intrínseco. Corresponde a la rotación del electrón sobre sí mismo.

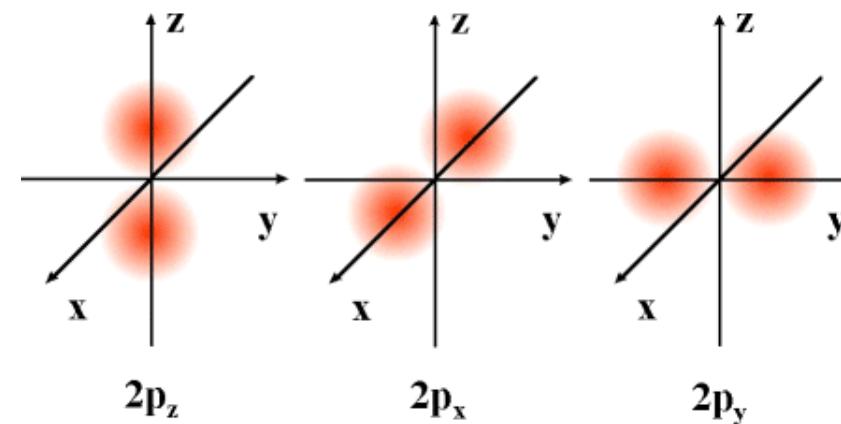
Orbitales s

$n = 1$ $\ell = 0$



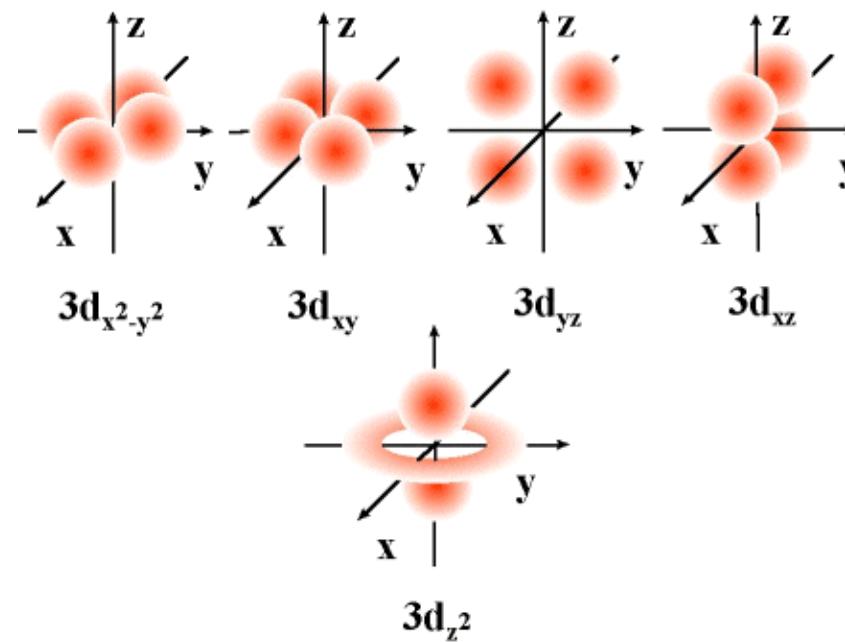
Orbitales p

$n = 2$ $\ell = 1$



Orbitales d

$n = 3$ $\ell = 2$



1. 5. Principio de exclusión de Pauli

Dos electrones en un átomo no pueden tener los mismos cuatro números cuánticos (n , ℓ , m_ℓ y m_s)

Como en un orbital atómico los valores de n , ℓ y m_ℓ están fijados sólo podrán contener electrones que difieran en el valor de m_s . Puesto que el número cuántico de espín sólo puede tomar dos valores ($+1/2$ y $-1/2$), **un orbital atómico podrá estar ocupado como mucho por dos electrones que tengan valores de m_s opuestos.**

1. 6. Configuración electrónica

La distribución de los electrones de un átomo entre los distintos orbitales atómicos se denomina **configuración electrónica**.

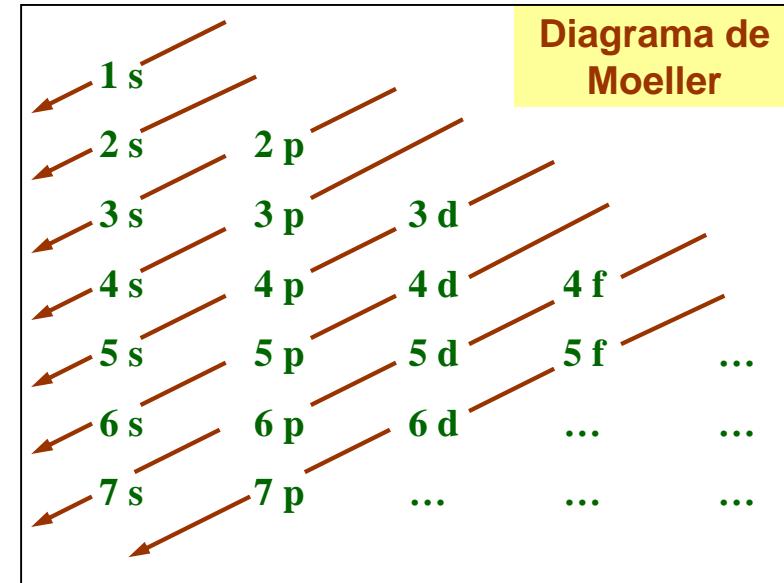
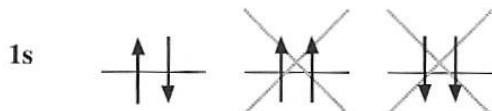
- ▶ Los orbitales (electrones) están distribuidos en el átomo en **capas y subcapas** electrónicas. La capa viene dada por el número cuántico principal. Las subcapas vienen señaladas por el número cuántico secundario

n	1	2	3	4	...	
Símbolo de la capa	K	L	M	N	...	
ℓ	0	1	2	3	4	...
Símbolo de la subcapa	s	p	d	f	g	..

Capa	K	L	M	N
n	1	2	3	4
Subcapa	s	s p	s p	d s p d f
ℓ	0	0 1	0 1	2 0 1 2 3
Nº electrones	2	2 6	2 6	10 2 6 10 14
Electrones	2	8	18	32

- ▶ Los orbitales se llenan en orden creciente de energía.
- ▶ No existe un orden prioritario de ocupación de orbitales de igual energía: si un electrón está en el subnivel p, puede estar en cualquiera de los orbitales de ese subnivel (p_x, p_y, p_z).
- ▶ La regla de Hund: un electrón no ocupa un orbital en el que ya hay un electrón si existe otro orbital de idéntica energía desocupado. Si en un subnivel p existen tres electrones, cada uno ocupa un orbital (p_x, p_y, p_z) y no hay dos en el mismo.

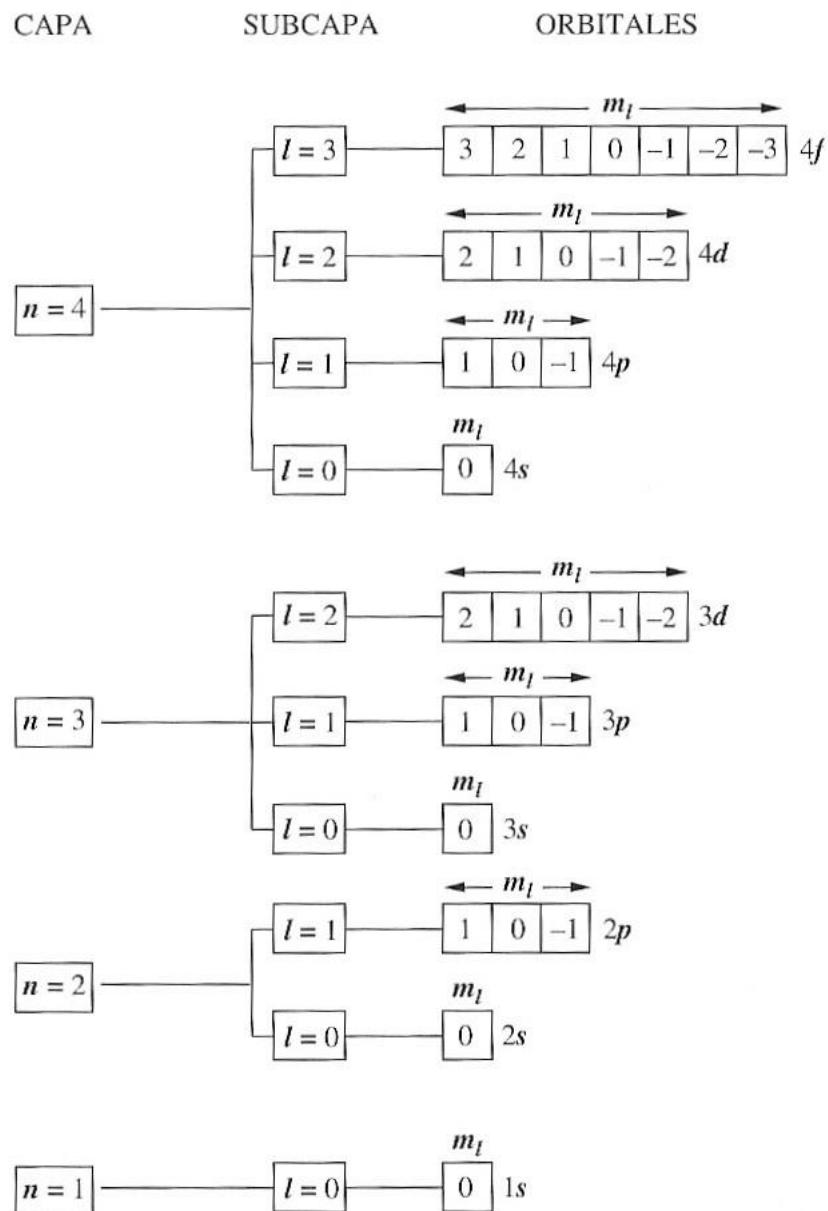
Electrones apareados



Notación de la configuración electrónica:

- * El nivel n se representa con un número
- * El subnivel, con letras (orbitales s, p, d, f, ...)
- * Cada letra lleva un superíndice numérico que indica el número de electrones en cada orbital

Estructura electrónica del átomo



- **Electrones de valencia:** Se encuentran a más alta energía, en las capas externas del átomo.
- **Electrones internos:** grupos de electrones en orbitales llenos, con bajos valores de n, y con un papel decisivo en el apantallamiento del efecto de la carga nuclear sobre los electrones de valencia.

Principio de correspondencia de Bohr

La Física Cuántica concuerda con la Física Clásica cuando los números cuánticos son muy grandes

Nº atómico

Elemento

Orbitales

1	H	1s ¹		
5	B	1s ² 2s ² p ¹		
6	C	1s ²	2s ² p ²	
13	Al	1s ²	2s ² p ⁶	3s ² p ¹
14	Si	1s ²	2s ² p ⁶	3s ² p ²
15	P	1s ²	2s ² p ⁶	3s ² p ³
31	Ga	1s ²	2s ² p ⁶	3s ² p ⁶ d ¹⁰ 4s ² p ¹
32	Ge	1s ²	2s ² p ⁶	3s ² p ⁶ d ¹⁰ 4s ² p ²
50	Sn	1s ²	2s ² p ⁶	3s ² p ⁶ d ¹⁰ 4s ² p ⁶ d ¹⁰ 5s ² p ²
82	Pb	1s ²	2s ² p ⁶	3s ² p ⁶ d ¹⁰ f ¹⁴ 5s ² p ⁶ d ¹⁰ 6s ² p ²

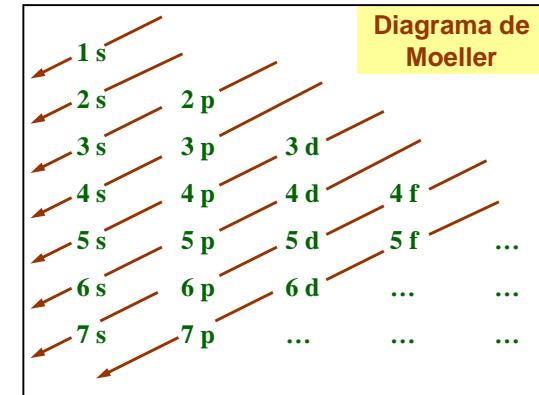


TABLA PERIÓDICA

- Distribución de los elementos en orden creciente de su número atómico (número de electrones).
 - Las filas se denominan **periodos** y las columnas **grupos**.
 - Las propiedades de los elementos de cada grupo están muy relacionadas porque todos tienen la **misma configuración electrónica externa (electrones de valencia)**

Ce ⁵⁸ Cerio	Pr ⁵⁹ Praseodimio	Nd ⁶⁰ Neodimio	Pm ⁶¹ Prometio	Sm ⁶² Samario	Eu ⁶³ Europio	Gd ⁶⁴ Gadolino	Tb ⁶⁵ Terbio	Dy ⁶⁶ Disprosio	Ho ⁶⁷ Holmio	Er ⁶⁸ Erbio	Tm ⁶⁹ Tulio	Yb ⁷⁰ Ittrbio	Lu ⁷¹ Lutecio
Th ⁹⁰ Torio	Pa ⁹¹ Protactino	U ⁹² Urano	Np ⁹³ Neptuno	Pu ⁹⁴ Plutonio	Am ⁹⁵ Americio	Cm ⁹⁶ Curio	Bk ⁹⁷ Berkelio	Cf ⁹⁸ Californio	Es ⁹⁹ Einstenio	Fm ¹⁰⁰ Fermi	Md ¹⁰¹ Mendelevio	No ¹⁰² Nobelo	Lr ¹⁰³ Lawrencio

Elementos de transición interna

Ce	Lantánidos				Lu
Th	Actínidos		bloque f		Lr
f^1				f^{14}	

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{k^2 m Z^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} ; \quad k = \frac{1}{4\pi \epsilon_0} ; \quad Z = n^o \text{ atómico}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2; n = 1, 2, 3, \dots$$

El electrón de un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado 6g.

- (a) ¿Cuál es su número cuántico principal?
- (b) ¿Y su número cuántico orbital?
- (c) ¿Cuál es la energía de ese estado?
- (d) ¿Cuáles son los posibles valores del número cuántico magnético?

- (a) ¿Cuántos estados orbitales posibles existen para el nivel $n=3$ de un átomo?
- (b) Cuando tenemos en un átomo un $n=4$, los valores diferentes que toma el número cuántico m_l son....
- (c) La configuración electrónica del Ge ($Z = 32$) es....

- (a) Escriba la configuración electrónica del estado fundamental del átomo de oxígeno ($Z=8$) y el conjunto de números cuánticos n , ℓ , m_ℓ y m_s de cada electrón del oxígeno.
- (b) Consultando una Tabla Periódica, obtener la configuración electrónica: átomo de argón; ión Fe^{+3} ;
- (c) ¿Qué elementos poseen las siguientes configuraciones electrónicas: (1) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^2$ (2) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^2$?

MATERIAL COMPLEMENTARIO

En una lámpara de incandescencia de 50 W, el filamento de wolframio está a una temperatura de 2150°C. Si la energía emitida en el campo visible es el 28% de la total correspondiente a un cuerpo negro a la misma temperatura, hallar la superficie del filamento de wolframio.

$$R_{Tn} = \sigma T^4$$

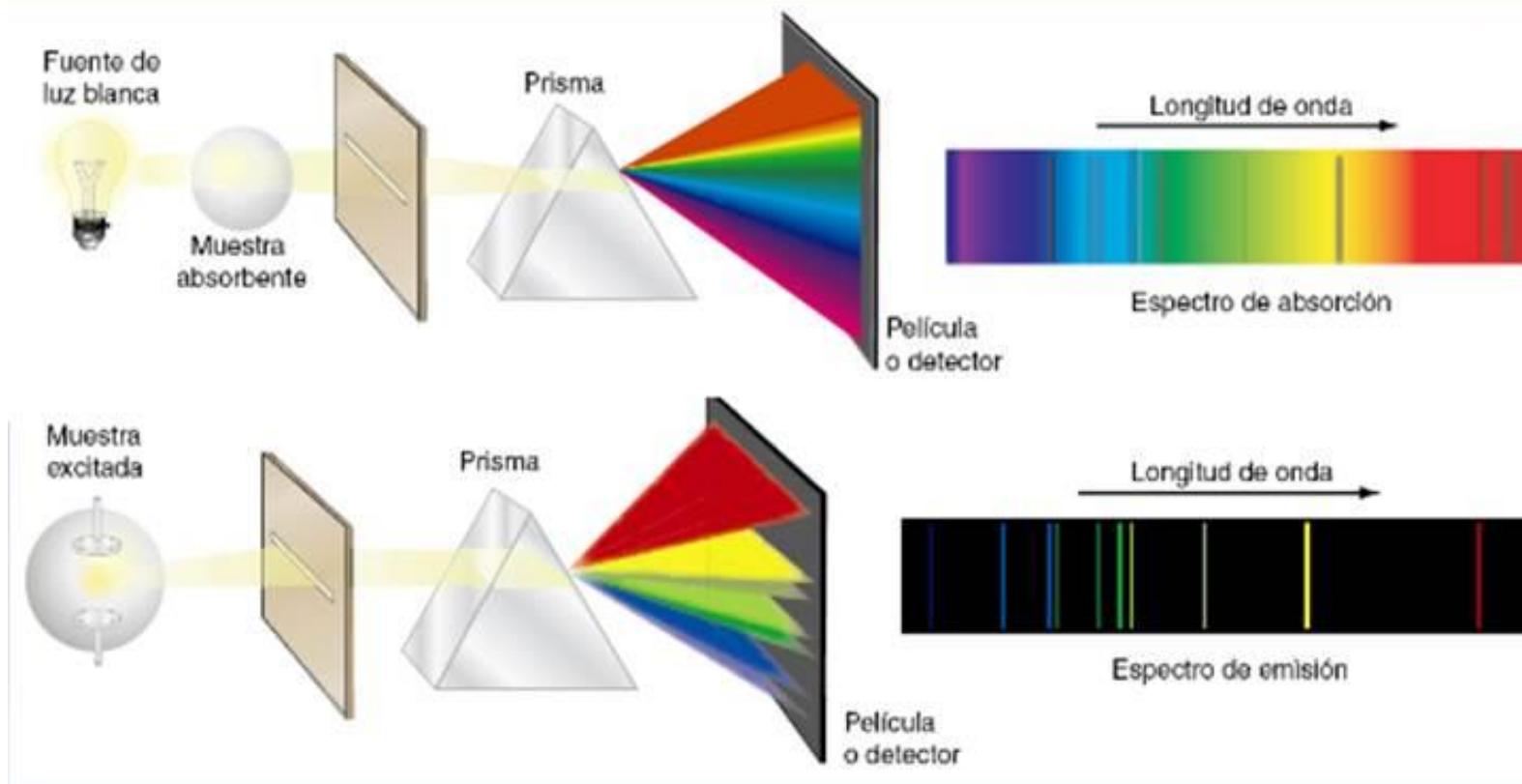
$$R_{Tl} = 28\% R_{Tn} = 28\% \sigma T^4$$

$$E_l = 28\% E_n$$

$$R_{Tl} = \frac{E_l}{tS} = \frac{P_l}{S} \quad \Rightarrow S = \frac{P_l}{R_{Tl}}$$

Espectros de emisión y de absorción de los gases

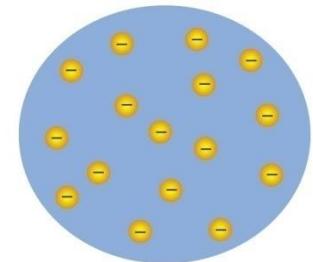
En cualquier elemento cuando sus átomos irradian energía, se emite un conjunto característico de longitudes de onda (frecuencias); el mismo conjunto se absorbe en los átomos cuando a través del gas pasa una radiación electromagnética de espectro continuo



Modelo de Thomson

Experimentos de Thomson y descubrimiento del electrón

Los experimentos de Thomson con descargas eléctricas en tubos de vacío mostraron que la materia tenía electrones. Como esta materia era neutra, los electrones están junto a cargas positivas. Las cargas positivas deberían de sustentar la mayoría de la masa del átomo, en una esfera de dimensiones atómicas. Esto constituye la **hipótesis de Thomson**.

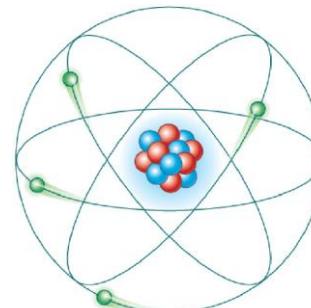


Modelo de Rutherford

Modelo

Rutherford (1911) sugirió que la masa y la carga positiva de un átomo son esencialmente una carga puntual y una masa puntual, llamadas núcleo. Los electrones, cargas negativas, rodean al núcleo. También sugirió que su hipótesis podría corroborarse disparando partículas de alta velocidad cargadas positivamente a través de una lámina metálica delgada.

Modelo atómico de
Rutherford

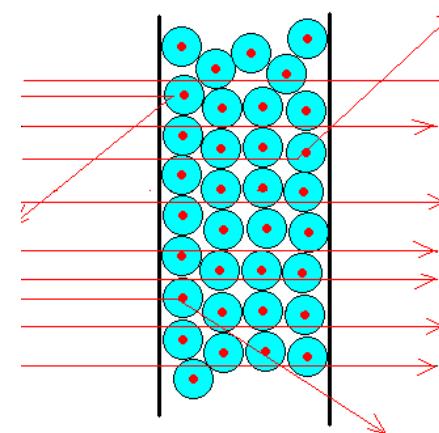
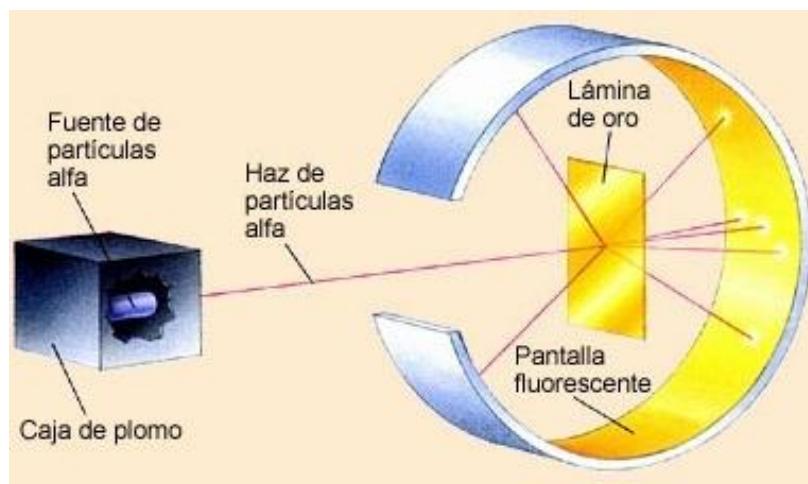


Modelo de Rutherford

Experimento

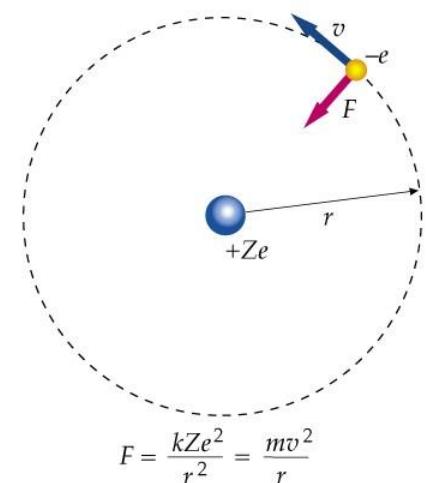
En 1909 Rutherford estableció que las partículas α (núcleos de helio, con dos protones y dos neutrones, ${}^4_2\text{He}^{2+}$) tenían carga positiva y surgían de núcleos de elementos radiactivos por desintegración espontánea.

Para confirmar la hipótesis de Rutherford sobre el modelo atómico, H.Geiger y E. Marsden en 1913 diseñaron y estudiaron un experimento en el que dispersaban partículas α en láminas delgadas de oro. Con este experimento se confirmó la hipótesis de Rutherford ya que la distribución medida de partículas α dispersadas concordaba con la distribución predicha bajo la suposición de que la dispersión era producida por una fuerza de coulomb debida a cargas puntuales (el núcleo de carga $+Ze$ y la partícula α de carga $+2e$).



Modelo de Böhr

Niels Bohr (1885-1962) desarrolló su modelo para explicar por qué las frecuencias del espectro de emisión del hidrógeno obedecían una ley tan simple. Según este modelo los electrones gravitan alrededor del núcleo como los planetas alrededor del Sol (*modelo planetario*).



Postulados:

- 1º El electrón en su movimiento describe ciertas órbitas circulares, no radiantes, correspondientes a estados estacionarios.
- 2º El electrón solo emite o absorbe energía en los saltos de una órbita permitida a otra. En dicho cambio emite o absorbe un fotón cuya energía es la diferencia de energía entre ambos niveles. (Energía del fotón: $h\nu$)
- 3º No todas las órbitas para electrón están permitidas, tan solo se puede encontrar en órbitas cuyo radio cumpla que el momento angular, L , del electrón sea un múltiplo entero de $h/2\pi$

$$\left. \begin{aligned} F &= \frac{k_o Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \\ L &= rmv = n \frac{\hbar}{2\pi} \end{aligned} \right\} E = E_c + U = -\frac{1}{2} \frac{k_o Ze^2}{r}$$

$$E = -\frac{2\pi^2 k_o^2 m Z e^4}{h^2} \frac{1}{n^2}$$

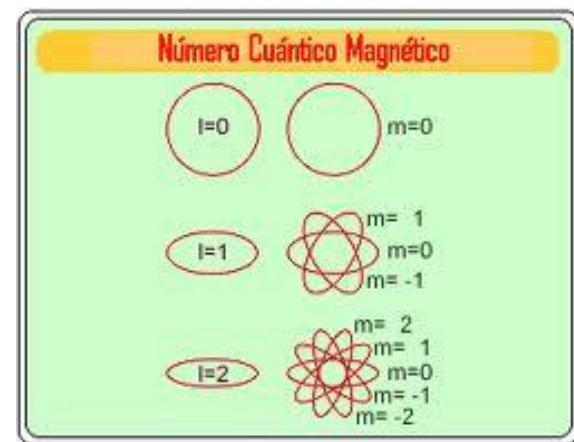
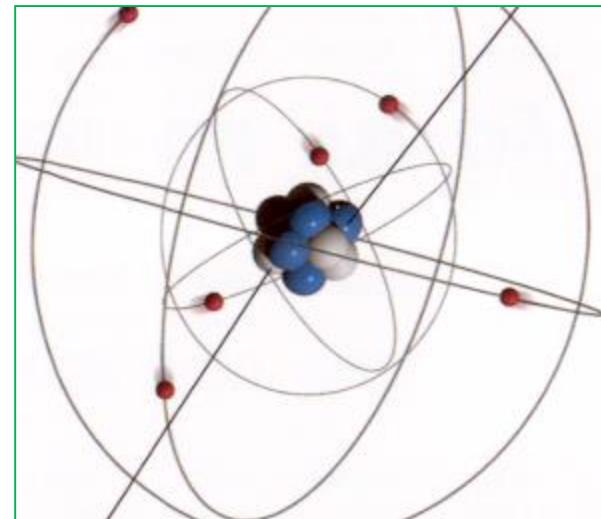
De acuerdo con los postulados de Planck la energía permitida en una órbita está cuantizada y no es continua.

Modelo de Böhr – Corrección de Sommerfeld

Las órbitas posibles para un electrón se denominan K, L, M, N, O... o bien, por los valores de n , 1, 2, 3, 4, ... A este número se le denomina número cuántico principal n .

Cuando un electrón se mueve de una órbita a otra origina una línea simple. Si el espectro del hidrógeno es observado con un espectrofotómetro con mayor resolución entonces algunas líneas muestran una estructura fina apareciendo desdobladas y próximas.

Sommerfeld supone que las órbitas del electrón pueden ser circulares y elípticas. Introduce el número cuántico secundario o azimutal, en la actualidad llamado l , que tiene los valores 0, 1, 2,...($n-1$)



Modelo de Böhr – Corrección de Zeeman

EFFECTO ZEEMAN: Experimentos realizados en campos magnéticos demostraron que se producían desviaciones magnéticas debidas a la orientación de las órbitas de giro de los electrones;

Se introduce un nuevo número cuántico, numero cuántica magnético, m_l , que define la orientación de las órbitas y que puede tomar los valores enteros comprendidos entre $-l$ y $+l$.

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x, y, z, t) + U\Psi(x, y, z, t) = \frac{ih}{2\pi} \frac{\partial\Psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una dimensión

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} + U\Psi(x, t) = \frac{ih}{2\pi} \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t}$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x, y, z) + (E - U(x))\Psi(x, y, z) = 0$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una dimensión

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + (E - U(x))\Psi(x) = 0$$

2^a Ley de Newton

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = \frac{\vec{F}}{m}$$

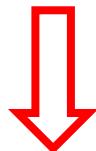
$$\frac{d^2}{dt} x = \frac{F}{m}$$

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una dimensión

La hipótesis de De Broglie sobre la dualidad onda-corpúsculo fue el punto de partida de Schrödinger para establecer la llamada **mecánica cuántica o mecánica ondulatoria**, que reemplaza a la mecánica clásica de Newton cuando se quiere describir el movimiento de partículas microscópicas. Para ello, E. Schrödinger postuló una ecuación, **ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER**.

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U\Psi(x,t) = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

U es la función energía potencial
 $\Psi(x,t)$ es la función de onda



Energía de la partícula

$$E = h \frac{\omega}{2\pi} = h\nu$$

La solución estacionaria

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-i\omega t}$$

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + (E - U(x))\Psi(x) = 0$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una dimensión

Números cuánticos

- ★ Como los orbitales representan gráficamente las soluciones de la ecuación de Schrödinger y como en general estas soluciones dependen de tres variables espaciales (x, y, z), cada una de ellas da lugar a un número cuántico.
- ★ Estos tres números cuánticos definen el estado de energía del orbital.
- ★ El **modelo de Bohr** utilizaba un número cuántico (**n**) para definir una órbita. El **modelo de Schrödinger** utiliza tres números cuánticos para describir un orbital: **n, ℓ y m_l** .
- ★ Se comprueba experimentalmente que **la teoría de Shrödinger está incompleta** y que era preciso corregir las soluciones de su ecuación. Los experimentos con los espectros de emisión de los átomos de sodio e hidrógeno indican que las líneas del espectro se pueden separar por la aplicación de un campo magnético externo obteniéndose para cada línea dos muy próximas. Este efecto duplica los niveles de energía que se le suponen al átomo. Esta corrección dio lugar a la introducción de un cuarto número cuántico, **m_s**

Resumiendo: Las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependen de tres variables espaciales (x, y, z), cada una de ellas da lugar a un número cuántico. Además de estos tres números cuánticos, hay un cuarto que aparece al plantear el problema del electrón moviéndose en el pozo de potencial tridimensional (potencial generado por el núcleo atómico) con el tratamiento de la mecánica ondulatoria relativista (en esta situación el problema depende de 3 variables espaciales y una temporal).

Interpretación física de los números cuánticos

Número cuántico principal (n)

- Dependencia de la función de onda con la distancia.
 - Probabilidad de encontrar al electrón a diferentes distancias del núcleo.
 - Tamaño y energía del orbital
- Este número interviene en la relación de la energía que aparece según la fórmula de Bohr $E_n = -E_1/n^2$, con valores permitidos $n = 1, 2, \dots$. A medida que aumenta n la energía aumenta aproximándose a 0 cuando $n \rightarrow \infty$. La función de ondas se extiende hacia valores cada vez mayores de r a medida que n aumenta, lo mismo que la órbita planetaria clásica aumenta de tamaño con la energía.

Número cuántico orbital (ℓ)

- Asociado al momento angular del electrón. Subnivel del electrón.
 - Cuantización del momento angular.
 - Forma del orbital.
- La magnitud del momento angular orbital del electrón en una órbita en torno al núcleo está dada desde el punto de vista clásico por $L = (\ell(\ell+1)\hbar)^{1/2}$. El número ℓ puede tomar valores enteros desde 0 hasta el valor $n - 1$. $\ell = 0$ supone función con simetría esférica y su momento orbital es 0. Si $\ell \neq 0$ las funciones de ondas no tienen simetría esférica sino que tienen dependencia angular. Las transiciones permitidas en los átomos son aquellas en las que las funciones de ondas cambian de tal forma que los valores de ℓ cambian en ± 1 .

Número cuántico magnético (m_ℓ)

- Caracteriza la componente del momento angular del electrón en un campo magnético externo.
- Orientación del orbital.

- Este número puede, para cada valor de l , tomar valores enteros positivos y negativos en el intervalo $+l$ a $-l$. De la misma forma que el número cuántico orbital ℓ determina la magnitud del momento angular orbital del electrón ($L = (l(l+1)\hbar)^{1/2}$), el número cuántico magnético m_ℓ determina la componente z del momento angular orbital: $L_z = m_\ell \hbar$. La dirección z puede quedar determinada por un campo magnético externo.

Número cuántico de espín (m_s)

- Momento angular intrínseco. Corresponde a la rotación del electrón sobre sí mismo.
- Este número toma dos valores $+1/2$ y $-1/2$. Está asociado al momento angular intrínseco del electrón. La magnitud del momento angular de espín (o intrínseco) del electrón es $L_s = (3/2)^{1/2} \hbar$, y el número cuántico de espín m_a determina su componente z del momento angular de espín: $L_{s,z} = m_s \hbar$. La dirección z puede quedar determinada por un campo magnético externo.

Nº cuántico	Nombre	Valores posibles	Descripción
n	Principal	$1, 2, 3, 4, \dots, \infty$	Determina el tamaño y la energía del orbital
l	Azimutal o de momento angular	$1, 2, 3, \dots, (n - 1)$	Determina la forma del orbital
m_l	Magnético	$-l, \dots, 0, \dots, +l$	Determina la orientación del orbital
m_s	De espín	$+1/2, -1/2$	Determina la orientación del espín

Transiciones entre niveles energéticos

- Las transiciones dan lugar a **líneas espectrales** que son características de cada átomo.
- No todas las transiciones son **radiativas**.
- Obedecen las **reglas de selección**.

$$v = \frac{E_i - E_f}{h}$$

