Apuntes sobre las Teorías del Átomo

La idea de átomo como último constituyente indivisible de la materia fue atribuida a los filósofos griegos Leucipo y Demócrito en 450 a.c. pero fue redescubierto por Dalton en 1803

450 a.c. Leucipo y Demócrito
Dalton 1803,
Reintrodujo una teoría atómica sistemática basada en los elementos de Lavoisier.

- Los átomos son indivisibles y no se pueden crear ni destruir en una reacción química.
- Cada átomo de un elemento es exactamente igual a otro del mismo elemento y diferente de otros átomos de otros elementos.
- Cuando los átomos se combinan entre sí, lo hacen en proporciones de pequeños números enteros.

Thomson (1897)
El primer modelo atómico estático y sin núcleo fue el de Thomson (1897). Según este modelo los electrones estarían incrustados en una masa positiva, como las semillas en una sandía.
(El desarrollo de la Física a finales de del S. XIX puso de manifiesto que el átomo sí era divisible).

Rutherford (1911)
La idea del núcleo atómico como parte central del átomo, cargada positivamente y que contiene casi toda la masa fue introducida por Rutherford (1911).
El modelo de Rutherford describe el interior de un átomo como un sistema solar o planetario, siendo el núcleo cargado positivamente el sol y los planetas los electrones.
Rutherford descubrió que el átomo poseía un **núcleo central**. La totalidad de la carga positiva estaría concentrada en el núcleo y los electrones girarían alrededor para no precipitarse sobre él por la carga eléctrica. Como consecuencia del desvío que sufrían algunas partículas α , pensó que éstas deberían chocar con una gran masa de elevada carga eléctrica positiva; las cuales estarían concentradas en el núcleo.
Los datos experimentales indicaban que el radio del núcleo era unas 10.000 veces menor que el del átomo. El átomo estaría prácticamente hueco.
El núcleo estaría formado por protones – carga positiva -, neutrones – masa – y rodeando al núcleo estarían los electrones -carga negativa – orbitando a su alrededor.

Nucleones:
El núcleo atómico está constituido por protones y neutrones (Chadwick-1932-Los neutrones serían partículas con masa parecida a los protones pero sin carga)

Número atómico Z:
El número de protones, que es igual al de electrones -en el átomo neutro- Identifica a un elemento.

Número másico A:
Es el número de nucleones: **A = Z + N** $\Rightarrow$ ${}_{Z}^{A}X$ Siendo N = número de neutrones.

Isótopos:
Un elemento puede tener átomos de diferente número másico, es decir, puede contener átomos de distinta masa atómica.

Masa atómica:
Es la media de las masas atómicas de los distintos átomos que forman un elemento, ponderadas de acuerdo con su abundancia relativa. $A = \frac{\sum A_i \cdot X_i}{100}$
Siendo: A = Masa atómica del elemento natural. A_i = Masa atómica de cada isótopo. X_i= % de cada isótopo.

Consideraciones a esta teoría:
a) Los electrones al girar alrededor del núcleo tenían que emitir energía radiante, con lo cual, irían perdiendo energía y al final se precipitarían sobre el núcleo.
b) No se explican los espectros discontinuos observados, formados por rayos luminosos de frecuencias características.

Bohr (1913)
La diferencia esencial con el átomo de Rutherford es que aplica al átomo la idea de cuantificación. Las órbitas de los electrones en torno al núcleo son estacionarias y la energía del electrón en ellas varía con los números enteros.

$E_n = -E_0 \cdot \frac{1}{n^2}$ (con n = 1, 2, 3, …)

Los radios de las órbitas están también cuantizados: $r = r_0 \cdot n^2$ (con n = 1, 2, 3, …).
Con el modelo de Bohr se daba explicación a los espectros de emisión observados por Balmer en el átomo de Hidrógeno:

$\nu = R \cdot [\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}]$ con n = 1, 2, 3, … y a Rydberg $\nu = R \cdot [\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}]$ la cual para los distintos valores de n_1, se obtienen una serie distinta:

Para $n_1 = 1 \Rightarrow$ Serie de Lyman y n_2 = 2, 3, 4,… (UV)
" $n_1 = 2 \Rightarrow$ Serie de Balmer y n_2 = 3, 4, 5,… (Vis)
" $n_1 = 3 \Rightarrow$ Serie de Lyman y n_2 = 4, 5, 6,… (IR)
" $n_1 = 4 \Rightarrow$ Serie de Lyman y n_2 = 5, 6, 7,… (IR)
" $n_1 = 5 \Rightarrow$ Serie de Lyman y n_2 = 6, 7, 8,… (IR)

Postulados de Bohr (para el Hidrógeno 1913)

1. Los electrones en un átomo se mueven en órbitas circulares alrededor del núcleo sujetos por la atracción electrostática entre ambos, obedeciendo las leyes de la mecánica clásica.

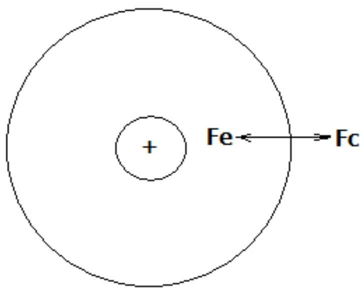
2. El electrón solo puede girar en una órbita, aquella cuyo momento angular **L** sea un múltiplo entero de $\frac{h}{2\pi}$. $\Rightarrow$ Estados estacionarios. $\Rightarrow$ $m \cdot r \cdot v = n\frac{h}{2\pi}$

3. El electrón no emite radiación electromagnética cuando se mueve en éstas órbitas. Por tanto, su energía total permanece constante.

4. Se absorbe radiación electromagnética si un electrón, inicialmente en una órbita de energía E_1, cambia a una órbita de mayor energía E_2, es decir que $E_2 > E_1$. La frecuencia de la radiación absorbida es : $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$

   Si el salto se produce de E_2 a E_1, la energía $\Delta E = \nu \cdot h$ será emitida.

Obtención del radio de Bohr (a_0):



Fc = Fe $\Rightarrow$ $m\frac{v^2}{R} = K\frac{Z \cdot e^2}{R^2}$, siendo K = $\frac{1}{4\pi\varepsilon}$, $\Rightarrow$ $m \cdot v^2 = K\frac{Z \cdot e^2}{R}$ (i)

Por el segundo postulado: L = n $\frac{h}{2\pi}$ $\Rightarrow$ L = n$\cdot\hbar$ con $\hbar = \frac{1}{2\pi}$

$R \wedge P = n\cdot\hbar$ $\Rightarrow$ $(mv)^2 = (n\cdot\frac{\hbar}{R})^2$ $\Rightarrow$ $m^2v^2 = n^2\frac{\hbar^2}{R^2}$ $\Rightarrow$ $m \cdot v^2 = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{R^2 \cdot m}$ (ii)

Igualando (i) y (ii) tendremos:

$$K\frac{Z \cdot e^2}{R} = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{R^2 \cdot m} \Rightarrow R = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{Z \cdot K \cdot e^2 \cdot m} \Rightarrow R = a_0 \cdot \frac{n^2}{Z} \Rightarrow a_0 = \frac{\cdot\hbar^2}{K \cdot e^2 \cdot m} \Rightarrow$$

$a_0 = 0{,}529$ $\mathring{A}$

Obtención de la energía:

Como la Ec = $\frac{1}{2}\cdot m\cdot v^2$ dividiendo por 2 los dos términos de la ecuación (i) tendremos:

Ec = $\frac{1}{2}\cdot m\cdot v^2$ = $K\frac{Z\cdot e^2}{2\cdot R}$; la Ep = -$K\frac{Z\cdot e^2}{R}$; como la Et = Ec + Ep $\Rightarrow$

Et = $K\frac{Z\cdot e^2}{2\cdot R}$ - $K\frac{Z\cdot e^2}{R}$ $\Rightarrow$ Et = - $K\frac{Z\cdot e^2}{2\cdot R}$; substituyendo R $\Rightarrow$ Et = $\frac{-Z\cdot K\cdot e^2}{2\cdot\frac{n^2\cdot\hbar^2}{K\cdot e^2\cdot m}}$ $\Rightarrow$

$\frac{-K^2\cdot e^4\cdot m\cdot Z}{2\cdot n^2\cdot\hbar^2}$ $\Rightarrow$ Et = -21,8 ·10^{-19} · $\frac{Z}{n^2}$ j

Et = - R_H · $\frac{1}{n^2}$ con R_H = 2,18·10^{-18}

Obtención de la ecuación de Rydberg:

ΔE =$E_f - E_0$ $\Rightarrow$ ΔE = $\frac{-K^2\cdot e^4\cdot m}{2\cdot\hbar^2}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$; como ΔE = $h\cdot\nu$ $\Rightarrow$

ν = $\frac{K^2\cdot e^4\cdot m}{2\cdot\hbar^2\cdot h}\left(\frac{1}{n_2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right)$ $\Rightarrow$ ν = $\frac{K^2\cdot e^4\cdot m\cdot 2\cdot\pi^2}{h^3}\left(\frac{1}{n_2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right)$; como $c=\frac{\lambda}{T}$ y $\nu=\frac{1}{T}$ $\Rightarrow$

$c=\lambda\cdot\nu$ $\Rightarrow$ $\nu=\frac{c}{\lambda}$ $\Rightarrow$ $\bar{\nu}$, El número de onda $\bar{\nu}$ = $\frac{1}{\lambda}$ $\Rightarrow$ ν = $c\cdot\bar{\nu}$ $\Rightarrow$

$\bar{\nu}$ = $\frac{K^2\cdot e^4\cdot m\cdot 2\cdot\pi^2}{c\cdot h^3}\left(\frac{1}{n_2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right)$; siendo R_H = $\frac{K^2\cdot e^4\cdot m\cdot 2\cdot\pi^2}{c\cdot h^3}$

Las unidades de la constante de Rydberg pueden aparecer con diferentes valores según:

ν $\Rightarrow$ $\frac{1}{\lambda}$ $\Rightarrow$ R = 10973731,568549 m^{-1}

ν $\Rightarrow$ R = 3,289841960368· 10^{15} s^{-1}

$E=h\cdot\nu$ $\Rightarrow$ R = 2,17987490 · 10^{-18} j

$E=h\cdot\nu$ $\Rightarrow$ R = 13,60569172 ev.

Modelo mecanocuántico:

Es un modelo de tipo matemático en el que desaparece la noción de órbita, que es substituida por la de orbital. La magnitud de los niveles energéticos pasan a depender de cuatro números cuánticos: n, l, m, s, que permiten explicar los espectros de átomos complejos. La magnitud que describe el estado del electrón es la función de onda Ψ cuyo cuadrado da idea de la probabilidad de encontrar al electrón en un punto dado.

Antecedentes:
Broglie -1924 –
Propone que una partícula -pe. un electrón- puede considerarse como una onda:
OM: $E = h \cdot \nu$; Fotón: $E = mc^2$; $\nu = \frac{c}{\lambda}$ $\Rightarrow$ $mc^2 = h \cdot \frac{c}{\lambda}$ $\Rightarrow$ $\lambda = \frac{h}{m \cdot c}$ $\Rightarrow$ $\lambda = \frac{h}{p}$

Heisemberg -1927-
"Cuanto mayor sea la precisión en la posición, menor será la precisión del momento en ese instante, y viceversa."
Es imposible conocer a la vez la posición y la velocidad de un objeto con precisión.
$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$; $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$
En un experimento dado materia y radiación presentan un comportamiento de onda o de partícula de una manera complementaria, pero nunca simultáneamente –como la paradoja de La Fontaine sobre el murciélago-
Para poder observar un electrón, sería necesario emplear fotones. Los fotones, como portadores de energía, al incidir sobre un electrón le producirían un cambio en el movimiento y la velocidad.

Schrödinger -1926-
Propuso una ecuación de onda para explicar el movimiento de partículas subatómicas ligadas. Es la combinación de una onda estacionaria con una partícula mediante la relación de Broglie.
En un átomo de Hidrógeno o ión con un solo electrón, el electrón se mueve en un campo esférico y centrado en el núcleo cuyo potencial es: $V = \frac{-Z \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ En donde Z = número atómico y r = radio de giro.

La ecuación de schrödinger quedaría:

1- Onda estacionaria para una dimensión:

Ψ = $Asen(wt + kx)$, con k $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, para t=0 –independiente del tiempo- quedaría: Ψ = $A \cdot sen \cdot \left(\frac{2\pi \cdot x}{\lambda}\right) \Rightarrow$ $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ = $A \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \cos \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot x}{\lambda}\right)$;

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -A \cdot \frac{2^2 \pi^2}{\lambda^2} \cdot sen \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot x}{\lambda}\right) \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = - \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \Psi$$

2- Energía de una partícula: E = E_c + V $\Rightarrow$ E = ½ m v^2 + V

3- Relación de Broglie: $\lambda = \dfrac{h}{mv} \quad \Rightarrow \quad v = \dfrac{h}{m \cdot \lambda}$

Combinando 2 y 3: E = ½ m $\dfrac{h^2}{m^2 \cdot \lambda^2}$ + V $\Rightarrow$ E – V = $\dfrac{h^2}{2m \cdot \lambda^2}$ $\Rightarrow$

$\lambda^2 = \dfrac{h^2}{2m \cdot (E-V)}$; como $\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ = - $\dfrac{4\pi^2}{\lambda^2}\Psi \Rightarrow \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ = $\dfrac{4\pi^2}{\dfrac{h^2}{2m \cdot (E-V)}}$ $\Psi \Rightarrow$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2 \cdot 2 \cdot m \cdot (E-V)}{h^2}\Psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\Psi \Rightarrow$$

$\dfrac{-h^2}{8\pi \cdot m}\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = E\Psi$ extrapolando a un espacio tridimensional la ecuación quedaría:

$$\frac{-h^2}{8\pi \cdot m}\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right) + V\Psi = E\Psi \Rightarrow \quad \frac{-h^2}{8\pi \cdot m}\nabla^2\Psi - \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi = E\Psi \quad \Rightarrow$$

$$H\Psi = E\Psi$$

En donde: $\nabla^2 = \left(\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right)$ y H = $\dfrac{-h^2}{8\pi \cdot m}\left(\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right) + V$

Condiciones frontera:

La solución de la ecuación de Schrödinger ha de cumplir

Ψ debe ser una función de valor único

Ψ en ningún punt puede ser igual a 1

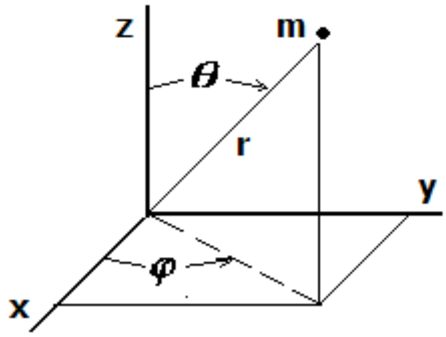
Ψ pera r = ∞ debe ser cero

Ψ debe estar normalizada; **Condición de Born** es decir el valor de Ψ^2 en un punto representa la densidad de probabilidad de encontrar al electrón en dicho punto y el producto $\Psi^2 \cdot dV$, la probabilidad de encontrar al electrón en un volumen dV.

La probabilidad de encontrarlo en en un volumen V sería: $\int_V \Psi^2 dV$ Y para todo el espacio:

$\int_{espacio} \Psi^2 dV$ = 1

Coordenadas polares esféricas para el átomo de Hidrógeno



$$\Psi(r,\varphi,\theta)$$

X = $r \cdot sen\theta \cdot \cos\phi$ r = $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

Y = $r \cdot sen\theta \cdot sen\phi$ $\tan g\phi = \frac{y}{x}$

Z= $r \cdot \cos\theta$ $\cos\theta = \frac{z}{r}$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{\partial\Psi}{\partial r}\cdot\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\cdot\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\cdot\frac{\partial\phi}{\partial x} \quad \text{(i)}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial y} = \frac{\partial\Psi}{\partial r}\cdot\frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\cdot\frac{\partial\theta}{\partial y} + \frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\cdot\frac{\partial\phi}{\partial y} \quad \text{(ii)}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial z} = \frac{\partial\Psi}{\partial r}\cdot\frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\cdot\frac{\partial\theta}{\partial z} + \frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\cdot\frac{\partial\phi}{\partial z} \quad \text{(iii)}$$

(i)

$\frac{\partial\Psi}{\partial r}\cdot\frac{\partial r}{\partial x}$:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{1\cdot 2x}{2\sqrt{x^2+y^2+z}} = \frac{x}{r} = \frac{r\cdot sen\theta\cdot\cos\theta}{r} \Rightarrow sen\theta\cdot\cos\theta \Rightarrow \frac{\partial\Psi}{\partial r}\cdot\frac{\partial r}{\partial x} = sen\theta\cdot\cos\theta\,\frac{\partial\Psi}{\partial r}$$

$\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\cdot\frac{\partial\theta}{\partial x}$:

$$\cos\theta = \frac{z}{r} \Rightarrow \frac{\partial\cos\theta}{\partial x} = -sen\theta\cdot\frac{\partial\theta}{\partial x}$$ y como $$\frac{\partial\, z/r}{\partial x} = \frac{-z\cdot\frac{x}{r}}{r^2} = \frac{-z\cdot x}{r^3} \Rightarrow \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{-z\cdot x}{r^3\cdot(-sen\theta)}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{-r\cdot\cos\theta\cdot r\cdot sen\theta\cdot\cos\phi}{r^3\cdot(-sen\theta)} = \frac{\cos\theta\cdot sen\phi}{r} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\cdot\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cdot\cos\phi}{r}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}$$

Apm1451@outlook.com

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x}:$$

$\tan g\phi = \frac{y}{x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \tan g\phi}{\partial x} = \frac{1}{\cos^2 \phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x}$ y como $\frac{\partial \, y/x}{\partial x} = \frac{-y}{x^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\cos^2 \phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-y}{x^2}$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-y}{x^2} \cdot \cos^2 \phi = \frac{-r \cdot sen\theta \cdot \cos\phi}{r^2 \cdot sen^2\theta \cdot \cos^2 \phi} \cdot \cos^2 \phi = \frac{-sen\phi}{r \cdot sen\theta} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-sen\phi}{r \cdot sen\theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}$$

(i) $$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = sen\theta \cdot \cos\theta \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cdot \cos\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} - \frac{sen\phi}{r \cdot sen\theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}$$

(ii)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial y}:$$

r = $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{1 \cdot 2 \cdot y}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{y}{r} = \frac{r \cdot sen\theta \cdot sen\phi}{r} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial y} = sen\theta \cdot sen\phi \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial y}:$$

$$\cos\theta = \frac{z}{r} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \cos\theta}{\partial y} = \frac{\partial \frac{z}{r}}{\partial y} \quad \Rightarrow$$

$\frac{\partial \frac{z}{r}}{\partial y} = \frac{\frac{-z \cdot 2 \cdot y}{2 \cdot r}}{r^2} = \frac{-z \cdot y}{r^3}$; $\frac{\partial \cos\theta}{\partial y} = -sen\theta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial y}$; como $\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{r \cdot \cos\theta \cdot r \cdot sen\theta \cdot sen\phi}{r^3}$

$\Rightarrow -sen\theta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta \cdot sen\theta \cdot sen\phi}{r}$ por tanto: $\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta \cdot sen\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y}:$$

$tag\phi = \frac{y}{z} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial tag\phi}{\partial y} = \frac{\partial \frac{y}{x}}{\partial y}$; $\frac{\partial tag\phi}{\partial y} = \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \phi}{\partial y}$; $\frac{\partial \frac{y}{x}}{\partial y} = \frac{x - 0 \cdot y}{x^2} = \frac{1}{r \cdot sen\theta \cdot \cos\phi} \Rightarrow$

$$\frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{r \cdot sen\theta \cdot \cos\phi} \Rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos^2 \phi}{r \cdot sen\theta \cdot \cos\phi} \Rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos \ \phi}{r \cdot sen\theta} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos \ \phi}{r \cdot sen\theta} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}$$

(ii) $$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = sen\theta \cdot sen\phi \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cdot sen\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \frac{\cos \ \phi}{r \cdot sen\theta} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}$$

(iii)

$\frac{\partial \Psi}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial z}$:

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{1 \cdot 2 \cdot z}{2 \cdot r} = \frac{r \cdot \cos\theta}{r} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial r} \cdot \frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r}$$

$\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z}$: $z = r \cdot \cos\theta \Rightarrow \frac{z}{r} = \cos\theta$; $\quad -sen\theta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z}$

$$\frac{z}{r} = \frac{r - z \cdot \frac{2z}{2r}}{r^2} = \frac{r - \frac{z^2}{r}}{r^2} = \frac{r^2 - z^2}{r^3} = \frac{r^2 - r^2 \cdot \cos^2\theta}{r^3} = \frac{r^2 \cdot \left(1 - \cos^2\theta\right)}{r^3} = \frac{sen^2\theta}{r}$$

$$\frac{sen^2\theta}{r} = -sen\theta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{-sen\theta}{r} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{-sen\theta}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}$$

(iii) $\quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \cos\theta \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{sen\theta}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}$

Elevando al cuadrado cada uno de los operadores anteriores y sumándolos obtendremos el operador ∇^2 en coordenadas polares esféricas:

$$\nabla^2 = \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) = \{(sen\theta \cdot \cos\theta \, \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cdot \cos\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} - \frac{sen\phi}{r \cdot sen\theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi})^2 +$$

$$+ \left(sen\theta \cdot sen\phi \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cdot sen\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \frac{\cos\ \phi}{r \cdot sen\theta} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right)^2 + \left(\cos\theta \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r} \cdot \frac{sen\theta}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right)^2 \}$$

Desarrollando los cuadrados:

$$\left(sen\theta \cdot \cos\theta \, \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cdot \cos\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} - \frac{sen\phi}{r \cdot sen\theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right)^2 = a^2 + b^2 + c^2 + 2ab - 2ac - 2bc \Rightarrow$$

$$sen^2\theta \cdot \cos^2\theta \, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{\cos^2\theta \cdot \cos^2\phi}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + \frac{sen^2\phi}{r^2 \cdot sen^2\theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} +$$

$$2\, sen\theta \cdot \cos\phi \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\cos\theta \cdot \cos\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} - 2\, sen\theta \cdot \cos\theta \, \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{sen\phi}{r \cdot sen\theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} -$$

$$2 \frac{\cos\theta \cdot \cos\phi}{r} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \frac{sen\phi}{r \cdot sen\theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}$$

$$\left(sen\theta\cdot sen\phi\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cdot sen\phi}{r}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}+\frac{\cos\ \phi}{r\cdot sen\theta}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\right)^2 = a^2+b^2+c^2+2ab+2ac+2bc \Rightarrow$$

$$sen^2\theta\cdot sen^2\phi\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}+\frac{\cos^2\theta\cdot sen^2\phi}{r^2}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}+\frac{\cos^2\phi}{r^2\cdot sen^2\theta}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}+$$

$$2\,sen\theta\cdot sen\phi\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial r}\,\frac{\cos\theta\cdot sen\phi}{r}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}+2\,sen\theta\cdot sen\phi\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial r}\,\frac{\cos\ \phi}{r\cdot sen\theta}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}+$$

$$2\,\frac{\cos\theta\cdot sen\phi}{r}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\,\frac{\cos\ \phi}{r\cdot sen\theta}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}$$

$$\left(\cos\theta\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial r}-\frac{sen\theta}{r}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)^2 = a^2+b^2-2ab \Rightarrow$$

$$\cos^2\theta\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}+\frac{sen^2\theta}{r^2}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}-2\cos\theta\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial r}\cdot\frac{sen\theta}{r}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}$$

Reagrupando términos quedaría:

$$\left(sen^2\theta\cdot\cos^2\theta+sen^2\theta\cdot sen^2\phi+\cos^2\theta\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}\Rightarrow\left(sen^2\theta\left(\cos^2\phi+sen^2\phi\right)+\cos^2\theta\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}$$

$$\Rightarrow\left(sen^2\theta+\cos^2\theta\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}\Rightarrow\left(sen^2\theta\cdot\cos^2\theta+sen^2\theta\cdot sen^2\phi+\cos^2\theta\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}=\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}$$

$$\left(\frac{\cos^2\theta\cdot\cos^2\phi}{r^2}+\frac{\cos^2\theta\cdot sen^2\phi}{r^2}+\frac{sen^2\theta}{r^2}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}\Rightarrow\frac{\cos^2\theta\left(\cos^2\phi+sen^2\phi\right)+sen^2\theta}{r^2}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}\Rightarrow$$

$$\frac{\cos^2\theta+sen^2\theta}{r^2}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}\Rightarrow\left(sen^2\theta\cdot\cos^2\theta+sen^2\theta\cdot sen^2\phi+\cos^2\theta\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}=\frac{1}{r^2}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2}$$

$$\left(\frac{sen^2\phi}{r^2\cdot sen^2\theta}+\frac{\cos^2\phi}{r^2\cdot sen^2\theta}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\Rightarrow\left(\frac{sen^2\phi+\cos^2\phi}{r^2 sen^2\theta}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\Rightarrow$$

$$\left(\frac{sen^2\phi}{r^2\cdot sen^2\theta}+\frac{\cos^2\phi}{r^2\cdot sen^2\theta}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}=\frac{1}{r^2 sen^2\theta}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}$$

$$\frac{-2\cdot\cos\theta\cdot\cos\phi}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\cdot\frac{sen\phi}{r\cdot sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}+\frac{2\cdot\cos\theta\cdot sen\phi}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\frac{\cos\phi}{r\cdot sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}=$$

$$\frac{-2\cdot\cos\theta\cdot\cos\phi\cdot sen\phi}{r^2\cdot sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}+\frac{2\cdot\cos\theta\cdot sen\phi\cdot\cos\phi}{r^2\cdot sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}=0$$

$$\frac{2\cdot sen\theta\cdot\cos\phi\cdot\cos\theta\cdot\cos\phi}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} - \frac{2\cdot sen\theta\cdot\cos\phi\cdot sen\phi}{r\cdot sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}$$

$$2\cdot sen\theta\cdot sen\phi\cdot\frac{\cos\theta\cdot sen\phi}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}+\frac{2\cdot sen\theta\cdot sen\phi\cdot\cos\phi}{r\cdot sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}$$

$$-\frac{2\cdot\cos\theta\cdot sen\theta}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\Rightarrow$$

$$\frac{2\cdot sen\theta\cdot\cos^2\phi\cdot\cos\theta}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}+2\cdot sen\theta\cdot\frac{\cos\theta\cdot sen^2\phi}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} - \frac{2\cdot\cos\theta\cdot sen\theta}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\Rightarrow$$

$$\frac{2sen\theta\cos\theta}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}((\cos^2\phi+sen^2\phi-1)=0$$

$$\left(\frac{-2sen\theta\cos\phi sen\phi}{r\cdot sen\theta}+\frac{2sen\theta sen\phi\cos\phi}{r\cdot sen\theta}\right)\frac{\partial\Psi}{\partial r}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} = 0$$

Por tanto

$$\nabla^2=\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) = \frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2sen^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\Rightarrow$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2sen^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}$$

Como $\frac{-h^2}{8\pi\cdot m}\nabla^2\Psi-\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi=E\Psi$ substituyendo tendremos la ecuación de Schrödinger en coordenadas polares:

$$\frac{-h^2}{8\pi\cdot m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2sen\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2sen^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right) - \frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi=E\Psi$$

La función de onda $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)$ = $R_{n,l}$ (r) · $\Theta_{l,m}(\theta)\cdot\Phi_m(\phi)$

Componente radial ↓ ↓ Componente angular

Soluciones:

Parte radial:

Las funciones radiales $R_{n,l}(r)$ dependen principalmente de:
Distancia al núcleo.
Números cuánticos n y l.
Probabilidad de encontrar al electrón para un r=entre 0 y ∞.

$R_{n,l}$ (r) = $\sqrt{\frac{4(n-l-1)!\cdot z^3}{[(n+1)!]^3\cdot n^4\cdot a_0^3}}\left(\frac{2\cdot z\cdot r}{n\cdot a_0}\right)^l\cdot e^{\frac{-z\cdot r}{n\cdot a_0}}\cdot L_{n+l}^{2n+l}\left[\frac{2\cdot z\cdot r}{n\cdot a_0}\right]$ Con n= 1,2,3,… y, l= 0,1,2,…,(n-1)

Parte angular:
Determinan la forma y orientación de los orbitales.

$\Phi_{\mathbf{m},}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{\pm i \cdot m \cdot \phi}$ Con l=0,1,2,... y $m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l$

$\Theta_{\mathbf{l,m,}}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} \cdot P_l^{|m|} \cdot (\cos\theta)$ Con l=0,1,2,... y $m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l$

Forma de los orbitales:
Las funciones de onda $\Psi_{n,l,m}$ expresada en coordenadas polares (r, θ, ϕ), se pueden descomponer en una parte radial, que no depende de **m,** –función del radio- y otra angular, que no depende de **n**, es decir:

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)\, A_{l,m}(\theta, \phi)$$

Ejemplos:
Para el orbital 1s tendremos: n=1, l=0, $R_{n,l}$ = Constante · Polinomio · Exponencial; en este caso
$R_{1,0} = 2 \cdot Z^{3/2} \cdot 1 \cdot e^{-Z.r}$ Siendo r = r/a_0

Para el 2s, $R_{2,1} = \frac{z^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2}} \cdot (2 - Z \cdot r) \cdot e^{-Zr/2}$

La parte angular: $A_{l,m}$ para los orbitales **s** es $\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$

Para el 2p: $R_{2,0} = \frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{6}} \cdot (Z \cdot r) \cdot e^{\frac{-Z \cdot r}{2}}$ y, la p_z sería: $A_{l,m} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$

Números cuánticos:
n= Número cuántico principal, n= 1, 2, 3, ...
Define la energía media del electrón situado en las capas K, L, N, ...
l = Número cuántico secundario, azimutal, l=0, 1, 2, ..., n-1
Caracteriza la forma de los orbitales atómicos.
l=0 $\Rightarrow$ s; l=1 $\Rightarrow$ p; l=2 $\Rightarrow$ d; l=3 $\Rightarrow$ f; l=4 $\Rightarrow$ g; ...
m= Número cuántico magnético,también m_l, m= $\pm$ 1, $\pm$ 2, $\pm$ 3, $\pm$ l
Caracteriza las diferentes opciones de orintación de los orbitales.
s = Número cuántico de spín, también m_s,
Nos indica los dos estados de orientación del electrón sobre sí mismo.

Orbitales:
La función de onda Ψ para una combinación de valores n, l, m se llama orbital.
Un orbital es una función de onda que nos da el 90% de probabilidad de encontrar a un electrón -con una determinada energía- en una región del espacio.

Apm1451@outlook.com