

# Simulación: Visualización de orbitales en el átomo de hidrógeno.

Sergio Castrillón S.  
Joseph Ruiz.  
David Gutiérrez

Junio 05 2023

# 1 Introducción

Desde el curso de Laboratorio Avanzado III se adelanta el proceso de construcción de simulaciones interactivas para la divulgación científica. Dentro del proyecto ya se cuenta con varias actividades en áreas de la física como mecánica, electromagnetismo y termodinámica. Sin embargo, la componente de mecánica cuántica apenas cuenta con una actividad. Por tal motivo, este trabajo presenta una visualización espacial de las soluciones de la ecuación de Schrödinger aplicada al átomo de hidrógeno.

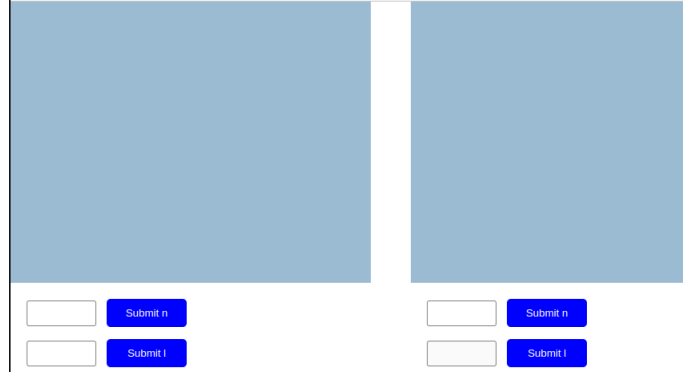


Figure 1: Interfaz inicial de la simulación del átomo de hidrógeno. Se dispone de dos campos para ingresar los valores de los números cuánticos  $n$  y  $l$ . En el canvas izquierdo se dibujan los orbitales. En el canvas derecho se dibuja la distribución de probabilidad radial.

## 2 Manual de usuario.

La simulación dispone de un número limitado de opciones. En particular el número  $n$  está limitado al rango de 1 a 4.

La pantalla de inicio de la simulación se muestra en la figura 1. Debajo del **canvas de la izquierda** encontrará dos campos de entrada y dos botones. Para empezar, use las flechas del campo  $n$  para asignar dicho valor. Una vez esté seguro presione el botón '*Submit n*'. Al hacer esto, el campo para  $l$  se habrá habilitado, repita la operación en este campo y presione '*Submit l*'. Una vez presione el botón la simulación iniciará.

Al lado derecho de los botones se desplegará una lista de  $2l + 1$  *checkboxes* (ver figura 2), cada uno correspondiente a una de las posibles combinaciones lineales de las soluciones a la ecuación de Schrödinger. Al activar (desactivar) un *checkbox* habilitará (deshabilitará) la visualización del respectivo orbital.

Dentro del canvas, puede utilizar el mouse para adaptar la vista. Si mantiene presionado el botón izquierdo del mouse y lo mueve, podrá hacer rotaciones de la cámara. Si mantiene presionado el botón derecho del mouse mientras lo mueve, podrá hacer traslaciones de la cámara. Con el 'scroll' del mouse puede hacer zoom in o zoom out. Para finalizar la simulación o reiniciarla refresque la pestaña.

En el **canvas de la derecha** también encontrará dos campos y dos botones. Su funcionamiento es igual al los componentes del canvas izquierdo. Al presionar el botón '*Submit l*' se dibujará un gráfico con la distribución de probabilidad radial  $\mathcal{P}(r) = r^2 R^2(r, \theta, \phi)$ . Aparecerán tres elementos adicionales. Debajo del gráfico y dentro del canvas se mostrarán dos deslizadores asociados a los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ . Al cambiar el valor de estos deslizadores podrá observar los cambios en la función  $\mathcal{P}(r)$ , pues en general esta depende de dichos ángulos. El tercer elemento es una lista desplegable con los  $2l + 1$  posibles orbitales. Al seleccionar una de

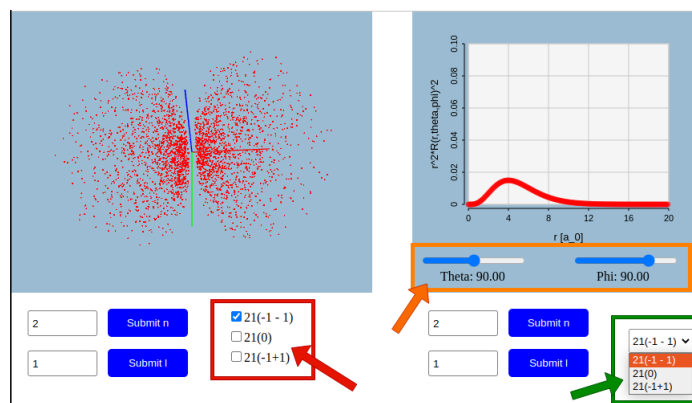


Figure 2: Interfaz de usuario al ingresar valores de  $n$  y  $l$ . Para el canvas de la izquierda aparece una lista de checkboxes para habilitar la visualización de un orbital particular. Para el canvas de la derecha aparecen dos deslizadores para controlar los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ . Además se añade una lista de opciones para cambiar la función graficada.

las opciones el gráfico se actualizará para mostrar la función de probabilidad asociada a esa opción.

## 2.1 Actividad

- Pruebe ingresando un valor de  $n$  y fijando  $l = 0$ . ¿Puede identificar la estructura del átomo?
- Para estos casos particulares, ¿Con qué identifica la distribución radial?
- Escoja un valor para  $n$  y  $l$ , pruebe a dejar fijo el orbital 0 y varíe los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ . ¿Qué propiedad puede asociar a la distribución radial? Puede ayudarse de la visualización espacial del orbital.
- Busque en internet gráficas de los orbitales atómicos para  $n = 2$  en la notación química, por ejemplo  $2p_x$ . ¿Encuentra una razón para que estos orbitales reciban estos nombres?
- Para las siguientes imágenes trate de hallar los números cuánticos en la simulación que los reproducen.

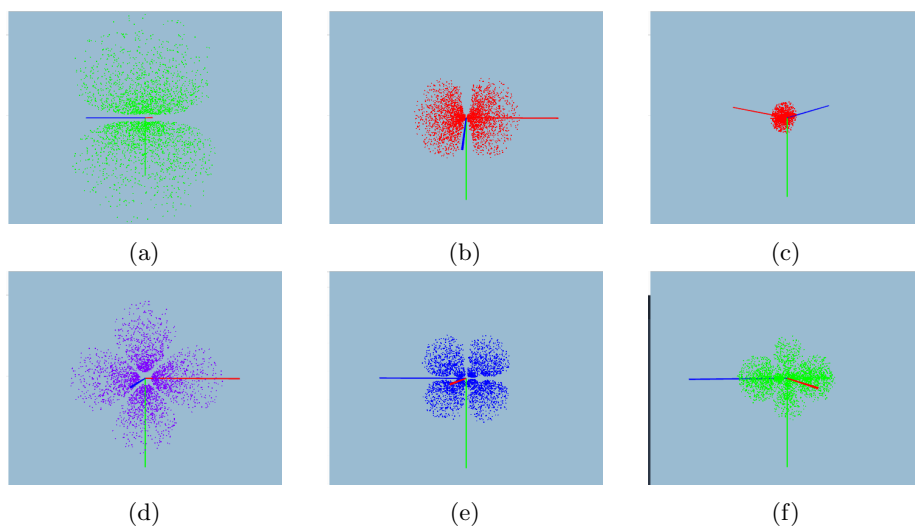


Figure 3: Visualización de algunos orbitales.