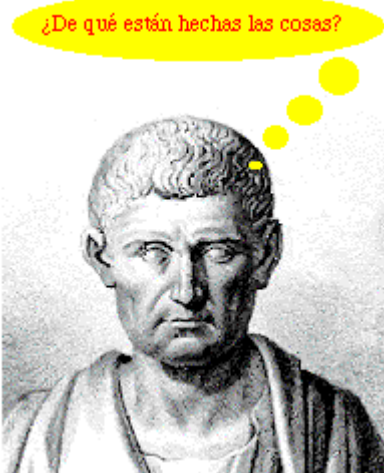


MODELOS ATÓMICOS

La Teoría Atómica se basa en la suposición (ratificada después por datos experimentales) de que la materia no es continua, sino que está formada por partículas distintas. Esta teoría describe una parte de nuestro mundo material a la que no es posible acceder por observación directa, y permite explicar las propiedades de las diversas sustancias.

El concepto de átomo ha ido pasando por diversas concepciones, cada una de las cuales explicó en su momento todos los datos experimentales de que se disponía, pero con el tiempo fue necesario modificar cada modelo para adaptarlo a los nuevos datos. Cada modelo se apoya en los anteriores, conservando determinados aspectos y modificando otros. La primera aparición conocida del concepto de átomo procede de una escuela filosófica griega (Demócrito, Leucipo), la cual consideraba que la sustancia esencial de cualquier objeto debía permanecer constante, y trató de conciliar esa idea con el hecho de que en la materia se puede observar un cambio constante.

Sin embargo, esta primera aproximación no puede considerarse una teoría científica, tal y como la entendemos hoy en día, ya que le faltaba el apoyarse en experimentos rigurosos (la idea moderna de que el conocimiento científico debe apoyarse siempre en experimentos que cualquiera pueda reproducir, procede del Renacimiento, con los trabajos de Copérnico, Galileo, Newton...). La primera teoría científica sobre el átomo fue propuesta por John Dalton a principios del siglo XIX, y a partir de ahí se fueron proponiendo diversos modelos:

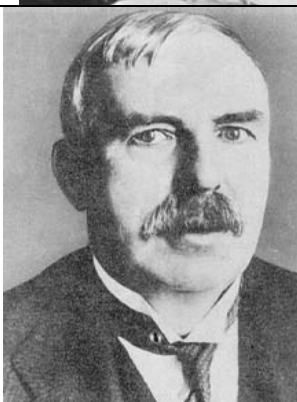
Ideas de atomo:	CONCEPTOS BÁSICOS
Demócrito Leucipo Aristóteles 	- Los filósofos griegos se preguntaron de qué están hechas las cosas. - La primera aparición conocida del concepto de átomo procede de una escuela filosófica griega (Demócrito, Leucipo), la cual consideraba que la sustancia esencial de cualquier objeto debía permanecer constante, y trató de conciliar esa idea con el hecho de que en la materia se puede observar un cambio constante.
MODELO ATÓMICO DE:	CONCEPTOS BÁSICOS
Dalton 	- Discontinuidad de la materia - Los átomos del mismo tipo tienen igual masa y propiedades (no se incluye el concepto de isótopos)

Thomson



- ✚ Divisibilidad del átomo
- ✚ El átomo se considera como una esfera de carga positiva, con los electrones repartidos como pequeños gránulos.

Rutherford



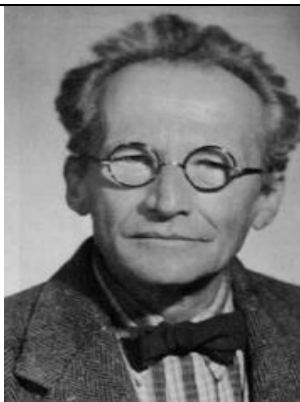
- ✚ Conceptos de núcleo y corteza
- ✚ Los electrones giran alrededor del núcleo como los planetas alrededor del Sol (modelo planetario)
- ✚ Fallos del modelo:
 - o No explica los espectros atómicos
 - o Se contradice con las leyes del electromagnetismo de Maxwell.

Böhr



- ✚ Conceptos previos:
- ✚ Espectros atómicos
- ✚ Teoría cuántica de Planck
- ✚ Postulados de Böhr
- ✚ Números cuánticos:
- ✚ Corrección de Sommerfeld
- ✚ Efecto Zeemann
- ✚ Espín del electrón
- ✚ Fallos del modelo: es un modelo semiempírico, en donde se han tenido que introducir unos postulados cuya justificación es a posteriori.

Schrödinger



- ✚ Conceptos previos:
- ✚ Dualidad corpúsculo-onda: hipótesis de Louis de Broglie
- ✚ Principio de incertidumbre de Heisenberg
- ✚ Ecuación de Schrödinger



MODELO ATÓMICO DE DALTON

Introduce la idea de la discontinuidad de la materia, es decir, esta es la primera teoría científica que considera que la materia está dividida en átomos (dejando aparte a precursores de la Antigüedad como Demócrito y Leucipo, cuyas afirmaciones no se apoyaban en ningún experimento riguroso).

Los postulados básicos de esta teoría atómica son:

1. La materia está dividida en unas partículas indivisibles e inalterables, que se denominan átomos. Actualmente, se sabe que los átomos sí pueden dividirse y alterarse.

2. Todos los átomos de un mismo elemento son idénticos entre sí (presentan igual masa e iguales propiedades).

Actualmente, es necesario introducir el concepto de isótopos: átomos de un mismo elemento, que tienen distinta masa, y esa es justamente la característica que los diferencia entre sí.

3. Los átomos de distintos elementos tienen distinta masa y distintas propiedades.

4. Los compuestos se forman cuando los átomos se unen entre sí, en una relación constante y sencilla.

Al suponer que la relación numérica entre los átomos era la más sencilla posible, Dalton asignó al agua la fórmula H_2O , al amoníaco la fórmula NH_3 , etc.

Tres descubrimientos en las postrimerías del siglo 19, tuvieron no sólo un efecto profundo sobre el progreso y pensamiento científicos en la primera mitad del siglo 20, sino que crearon asimismo, una nueva norma para el poder político internacional e incluso, posiblemente, para la vida misma.

Estos fueron :

- ✚ El descubrimiento de los Rayos X, por Röntgen, en 1895.
- ✚ El descubrimiento de la Radiactividad, por Becquerel, en 1896.
- ✚ El descubrimiento de la naturaleza corpuscular de los Rayos Catódicos, es decir, del electrón, por Thomson 1897.



RADIOACTIVIDAD NATURAL

El fenómeno de la radiactividad fue descubierto casualmente por *Henri Becquerel* en 1896. Estudiaba los fenómenos de fluorescencia y fosforescencia, para lo cual colocaba un cristal de Pechblenda, mineral que contiene uranio, encima de una placa fotográfica envuelta en papel negro y las exponía al sol. Cuando desenvolvía la placa la encontraba

velada, hecho que atribuía a la fosforescencia del cristal. Los días siguientes no hubo sol y dejó en un cajón la placa envuelta con papel negro y con la sal de Uranio encima. Cuando sacó la placa fotográfica estaba velada, y no podía deberse a la fosforescencia ya que no había sido expuesta al sol. La única explicación era que la sal de uranio emitía una radiación muy penetrante. Sin saberlo *Becquerel* había descubierto lo que *Marie Curie* llamaría más tarde radiactividad.



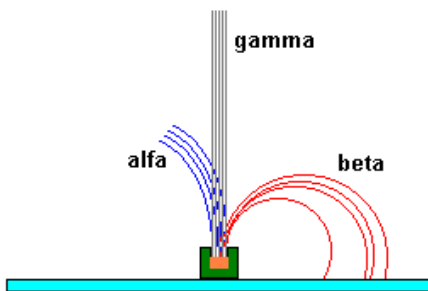
Mme. Curie junto a su esposo Pierre Curie, empezaron a estudiar el raro fenómeno que había descubierto Becquerel. Estudiaron diversos minerales y se dieron cuenta de que otra sustancia el torio, era "radiactiva", término de su invención. Demostraron que la radiactividad no era resultado



de una reacción química, sino una propiedad elemental del átomo. El fenómeno de la radiactividad era característico de los núcleos de los átomos. En 1898 descubren dos nuevas sustancias radiactivas: el radio y el polonio, mucho más activas que el uranio. Pierre estudiaba las propiedades de la radiación, y Marie intentaba obtener de los minerales las sustancias radiactivas con el mayor grado de pureza posible. Pierre probó el radio sobre su piel, y el resultado fue una quemadura y una herida, pronto el radio serviría para tratar tumores malignos. Era el comienzo de las aplicaciones médicas que Mme. Curie daría a la radiactividad.

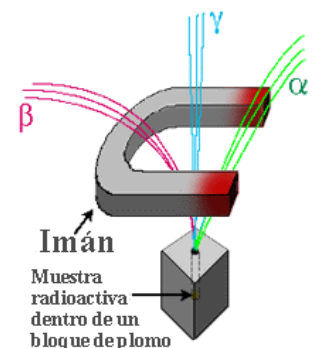
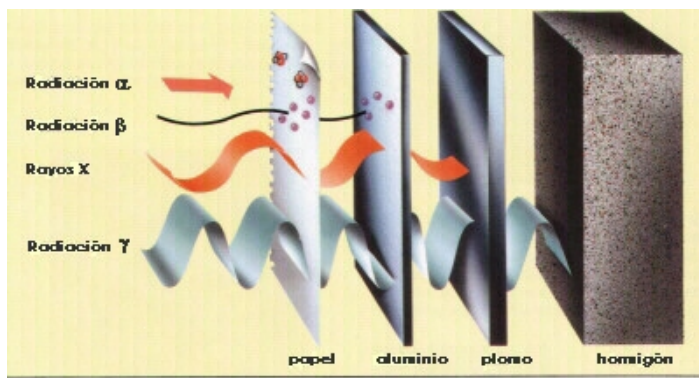
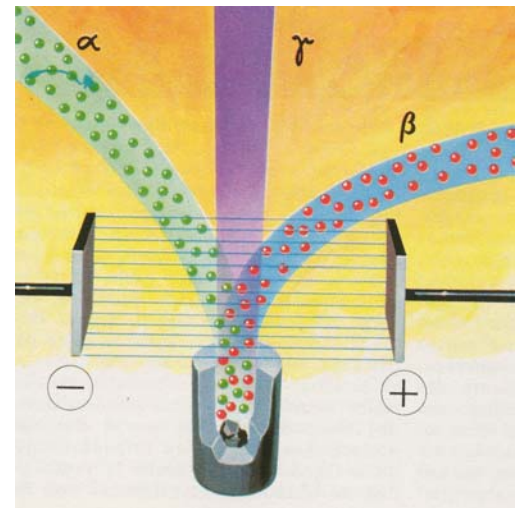
En 1903 recibieron el *premio* Nóbel de Física junto con Becquerel por el descubrimiento de la radiactividad natural. Al poco tiempo murió Pierre Curie en un accidente debilitado como estaba por el radio. *Mme. Curie* siguió trabajando y fue la primera mujer que ocupó un puesto en la Universidad de la Sorbona en París. En 1911 le fue otorgado el Premio Nóbel de Química a María Curie, por haber aislado el Radio.

Siguió investigando junto a **Ernest Rutherford**, quien encontró que la radiación que emitían las sustancias radiactivas, tenía tres componentes que denominó: alfa, beta y gamma. **En 1908 comprobó experimentalmente, que las partículas alfa eran núcleos de Helio.**



Mme. Curie siguió estudiando el fenómeno de la radiactividad durante toda su vida, prestando especial atención a las

aplicaciones médicas de la radiactividad junto con los rayos X, recién descubiertos. Agotada, casi ciega, los dedos quemados y marcados por su querido radio, *Mme Curie* murió a los 60 años de leucemia en 1934. Su hija *Irene* continuó su trabajo con la misma pasión junto a su marido, con el que descubrió la radiactividad artificial y por lo que recibieron el *premio Nobel*.

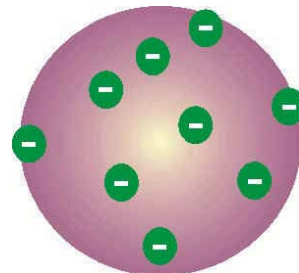


MODELO ATÓMICO DE THOMSON



Introduce la idea de que el átomo puede dividirse en las llamadas partículas fundamentales:

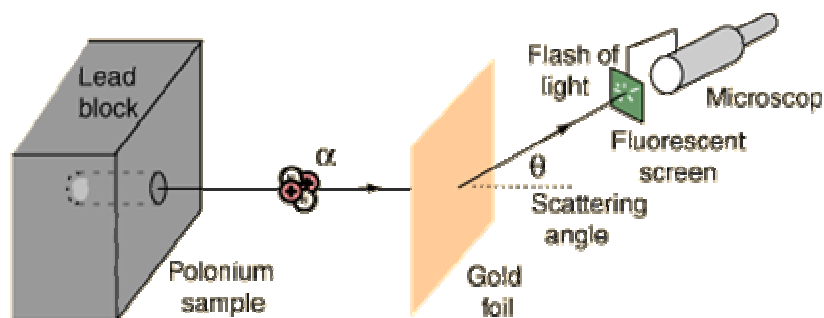
Thomson considera al átomo como una gran esfera con carga eléctrica positiva, en la cual se distribuyen los electrones como pequeños granitos (de forma similar a las pepitas de una sandía).



- Electrones, con carga eléctrica negativa
- Protones, con carga eléctrica positiva

Experimento de Rutherford 1907 (Geiger y Marsden)).

Consistió en bombardear una lámina muy fina de oro (10^{-3} cm de espesor) con un haz de partículas α . (Las partículas α son iones He^{++} ; son uno de los tipos de partículas que se producen cuando se descompone una sustancia radiactiva.).



Lamina de oro de espesor: 10^{-4} cm

Tamaño átomo: 10^8 cm

$N = N = 10^4$ átomos

$$\langle \theta^2 \rangle = N \langle \theta_j^2 \rangle \quad \theta_j \sim 10^{-4} \text{ radianes}$$

$$90^\circ < \theta < 180^\circ \Rightarrow \sqrt{\langle \theta^2 \rangle} \approx 1^\circ$$

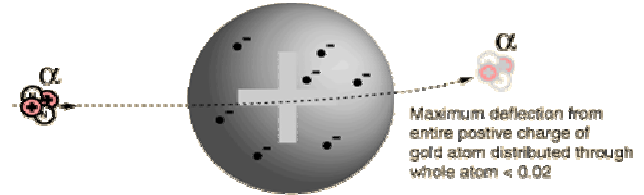
$$N(\theta)d\theta = \frac{2N\theta}{\langle \theta^2 \rangle} e^{-\theta^2 / \langle \theta^2 \rangle} d\theta$$

$$\frac{N(\theta > 90^\circ)}{N} = e^{-\theta^2 / \langle \theta^2 \rangle} = e^{-\theta^2} = \begin{cases} 10^{-3500} & \text{teoría} \\ 10^{-4} & \text{experimental} \end{cases}$$

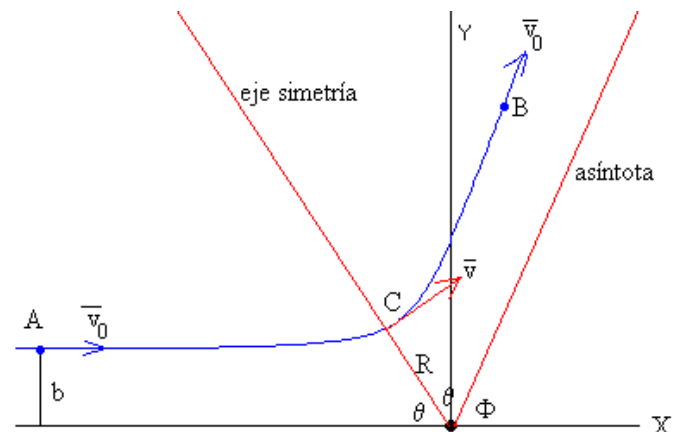
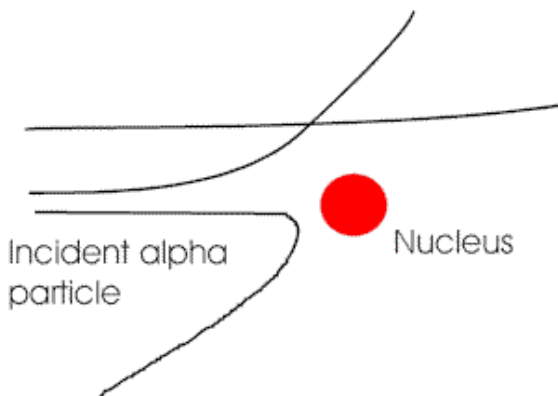
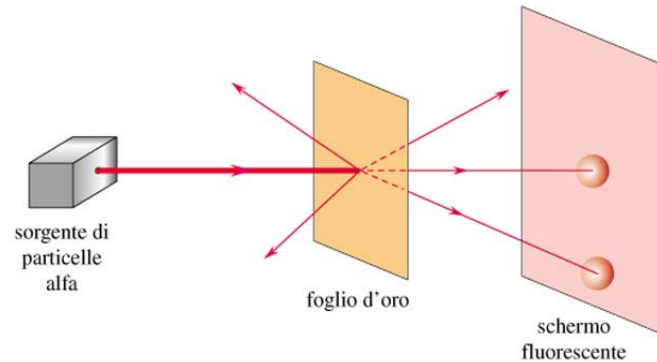
Según el modelo de Thomson, lo que cabía esperar es que el haz de partículas atravesase la lámina, separándose algo más unas partículas de otras. Sin embargo, Rutherford obtuvo unos resultados sorprendentes: algunas partículas sufrían desviaciones considerables y una mínima parte incluso rebotaba en la lámina y volvía hacia atrás. El mismo Rutherford describe su asombro ante tal resultado con estas palabras:

"...Esto era lo más increíble que me había ocurrido en mi vida. Tan increíble como si un proyectil de 15 pulgadas, disparado contra una hoja de papel de seda, se volviera y le golpeará a uno..."

Las grandes desviaciones de algunas partículas α sólo se podían explicar por choque contra una partícula de gran masa y elevada carga positiva. Esto hizo suponer a Rutherford que toda la carga



positiva del átomo estaba concentrada en un pequeño gránulo donde residía además la casi totalidad de su masa. Los datos experimentales indicaban que el radio del núcleo era más de diez mil veces menor que el del átomo.

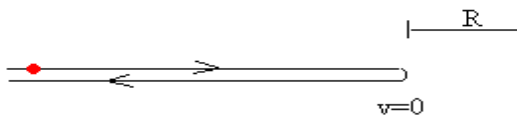


Scattering Coulombiano o de Rutherford

Una Partícula alfa, $q_\alpha = 2e$ y masa interactúa con un núcleo.

Ec. de dispersión de Rutherford

$$N(\theta)d\theta = N \frac{n t Z^2 e^4}{32 \pi \epsilon_0^2 T^2} \cdot \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^4(\theta/2)}$$



N : N° de partículas incidentes.

$N(\theta)d\theta$: “ “ dispersadas en $\theta \in [\theta, \theta + d\theta]$

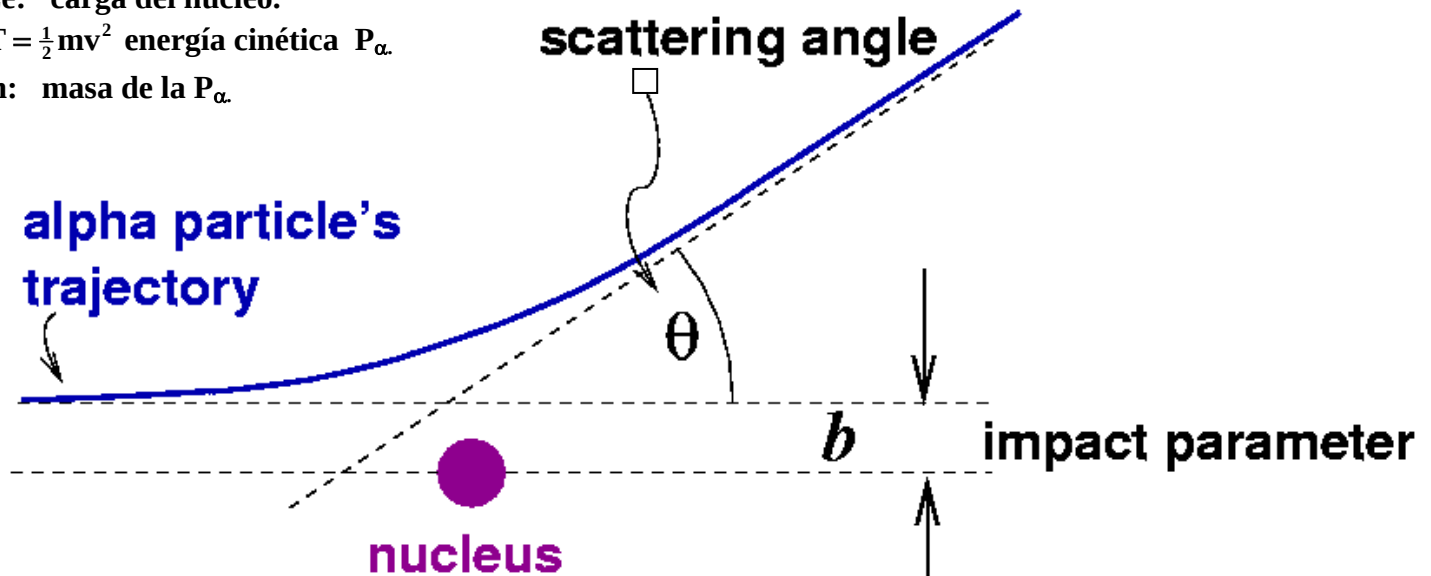
$n = \frac{N_0 \rho}{A}$: N° átomos por unidad de volumen

Z : N° atómico del núcleo.

Ze : carga del núcleo.

$T = \frac{1}{2}mv^2$ energía cinética P_α

m : masa de la P_α



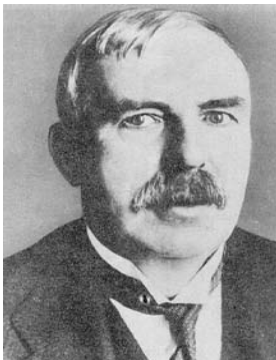
$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2e \cdot Ze}{r^2} = m \left(\frac{d^2r}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right)$$

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2eZem}{L^2}$$

$$\vec{L} = mr^2 \frac{d\theta}{dt}$$

$$\frac{1}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 Tb^2} (\cos \theta - 1) + \frac{\sin \theta}{b}$$

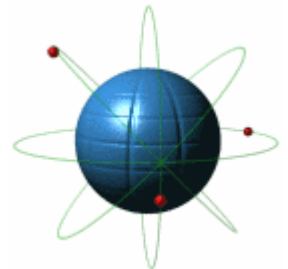
Ecuación de una hipérbola en coordenadas polares



MODELO ATÓMICO DE RUTHERFORD

En 1911, Rutherford introduce el modelo planetario, que es el más utilizado aún hoy en día. Considera que el átomo se divide en:

- ✚ un núcleo central, que contiene los protones y neutrones (y por tanto allí se concentra toda la carga positiva y casi toda la masa del átomo)
- ✚ una corteza, formada por los electrones, que giran alrededor del núcleo en órbitas circulares, de forma similar a como los planetas giran alrededor del Sol.



Los experimentos de Rutherford, Geiger y Marsden demostraron que el núcleo es muy pequeño comparado con el tamaño de todo el átomo: el átomo está prácticamente hueco.

Fallas del modelo de Rutherford.

- ✚ Se contradecía con las leyes del electromagnetismo de Maxwell, las cuales estaban ampliamente comprobadas mediante numerosos datos experimentales. Según las leyes de



Maxwell, una carga eléctrica en movimiento (como es el electrón) debería emitir energía continuamente en forma de radiación, con lo que llegaría un momento en que el electrón caería sobre el núcleo y la materia se destruiría; esto debería ocurrir en un tiempo muy breve.

✚ No explicaba los espectros atómicos.

Como el peso atómico de los elementos tenía un valor mucho mayor que el calculado a base de los protones del núcleo, Rutherford sugirió que en los núcleos de los átomos tenían que existir otras partículas de masa casi igual a la del protón, pero sin carga eléctrica, por lo que las llamó **neutrones**.

El neutrón fue descubierto experimentalmente en 1932 por **Chadwick**, quien, al bombardear el berilio con partículas α , observó que se producían unas partículas que identificó con los neutrones predichos por Rutherford.

Partícula	Carga eléctrica (Coulombs)	Masa (kg)
electrón	$- 1,6021 \cdot 10^{-19}$	$9,1091 \cdot 10^{-31}$
protón	$+ 1,6021 \cdot 10^{-19}$	$1,6725 \cdot 10^{-27}$
neutrón	—	$1,6748 \cdot 10^{-27}$

Ahora, existen dos problemas:

- ✚ La inestabilidad del átomo de Rutherford. (Datos observacionales mostraban que el átomo es una estructura estable)
- ✚ las Series espectrales

Series espectrales del hidrógeno.

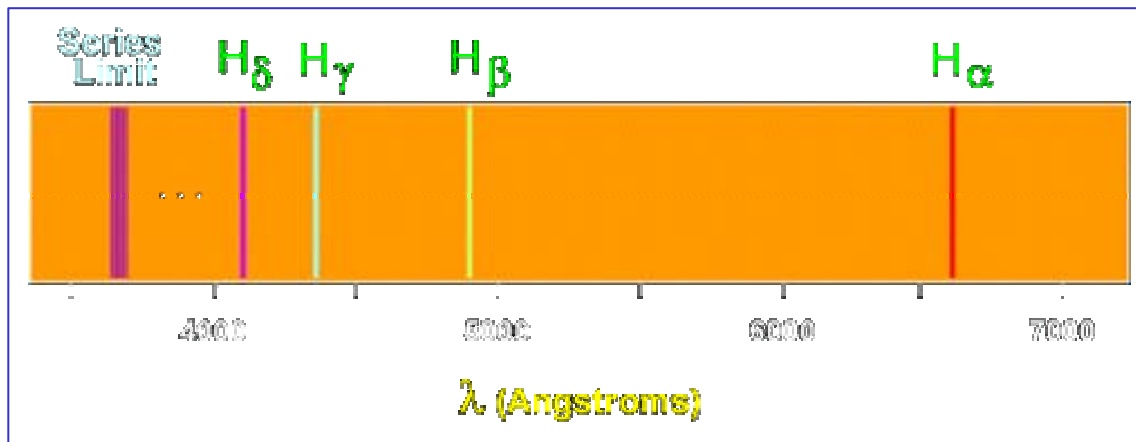
Con la “espectrometría” se estudio la radiación característica emitida por los átomos de un gas excitado (mediante corriente eléctrica) o por los átomos de una llama, se verificó con gran interés durante todo el siglo 19.

Esta radiación emitida, al ser observada con un espectroscopio, aparece como una “serie discreta de rayas”, cada una de ellas con un color o longitud de onda particular. Las posiciones e intensidades de las rayas son características.

En 1885, Johann Balmer, analizó el espectro emitido por el hidrógeno previamente excitado, midiendo con gran precisión cada raya (longitud de onda), observando que éstas caían en un arreglo matemática, llamado serie. **Para la parte visible del espectro encontró:**

Serie de Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ con } n = 3, 4, \dots$$



Posteriormente Paschen, Brackett analizaron el espectro del Hidrógeno en el rango infrarrojo, encontrado respectivamente:

Serie de Paschen

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ con } n = 4, 5, ..$$

Serie de Brackett

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ con } n = 5, 6..$$

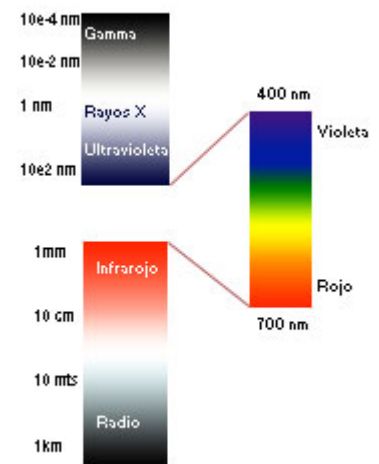
Rydberg, analizando el espectro de elementos alcalinos encontró que sus espectros satisfacían relaciones del tipo.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ con } n < m \text{ enteros}$$



Donde **R** era característica del elemento y se denomina constante de Rydberg.

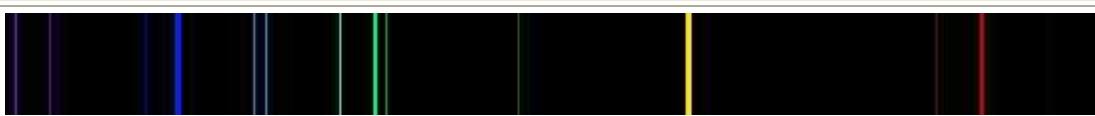
R: constante de Rydberg = $109677,7 \text{ cm}^{-1}$



Esta series espectrales y otras, eran evidencias observacionales, pero no tenían explicación teórica con la Física Clásica.

Se llama espectro atómico de un elemento químico al resultado de descomponer una radiación electromagnética compleja en todas las radiaciones sencillas que la componen, caracterizadas cada una por un valor de longitud de onda, λ . El espectro consiste en un conjunto de líneas paralelas, que corresponden cada una a una longitud de onda.

Podemos analizar la radiación que absorbe un elemento (espectro de absorción) o la radiación que emite (espectro de emisión). Cada elemento tiene un espectro característico; por tanto, un modelo atómico debería ser capaz de justificar el espectro de cada elemento.

	ESPECTROS DE ALGUNOS ELEMENTOS
REGLA $\text{\AA} = 10^{-10} \text{m}$	
H emisión	
H absorción	
He	
Li	
Be	
B	



MODELO ATÓMICO DE BOHR



En 1913, Niels Bohr (físico danés) propone un modelo de átomo del hidrógeno (o hidrogenoides), modelo que combina los trabajos de Plack, Einstein y Rutherford y que tuvo un notable éxito para predecir las series espectrales del hidrógeno.

Bohr que trabajaba en el Laboratorio de Rutherford durante el experimento de Geiger y Mariden (dispersión de partículas alfa sobre una lámina delgada de Oro, para probar el modelo propuesto por



Rutherford); postuló que el electrón del átomo de hidrógeno se movía en una órbita alrededor del núcleo positivo debido a la atracción coulombiana.

La Mecánica Clásica permite la existencia de órbitas circulares o elípticas del electrón en este sistema, igual que en el caso de los planetas moviéndose alrededor del Sol.. Por sencillez, Bohr prefirió considerar órbitas circulares.

Dicho modelo es mecánicamente estable, debido a que la interacción coulombiana atractiva, proporciona la fuerza centrípeta necesaria para que el electrón se mueva en una circunferencia; pero es eléctricamente inestable, porque el electrón está continuamente acelerando (aceleración centrípeta) y por lo tanto está continuamente radiando energía. Al perder energía la órbita se irá achicando hasta colapsar. Bohr soluciona este problema postulando la existencia de “órbitas permitidas” en la cual el electrón no radia energía.

POSTULADOS DE BOHR.

1º El electrón se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo, bajo la influencia de una atracción coulombiana, obedeciendo las Leyes de la Mecánica Clásica.

$$\vec{F} = m\vec{a} \quad \text{y} \quad \vec{F} = \frac{-\hat{r}}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (1)$$

2º De la infinidad de órbitas que permite la Mecánica Clásica, el electrón puede moverse sólo en aquellas, en donde su “momentum angular orbital”, L es un múltiplo entero de la constante de Planck, $\hbar$. Es decir, $L = n\hbar$ con $n = 1, 2, \dots$

$$L = n\hbar \quad (2)$$

3º Si el electrón se mueve en una órbita permitida, no radia energía. La energía del átomo se mantiene constante (el átomo está en estado estacionario).

4º Un átomo radia energía (un fotón), cuando el electrón cambia discontinuamente de una órbita permitida con energía total E_i , a otra órbita permitida con energía total E_f ; siendo la frecuencia del fotón, ν , tal que:

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (3)$$

$$\text{Ec.(1)} \Rightarrow mv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \Rightarrow 2T = |EP|$$

$$\text{Ec.(2)} \Rightarrow mvr = n\hbar \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{mr} \Rightarrow v^2 = \frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2}$$

$$\text{Reemplazando (2) en (1)} \Rightarrow m \frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \Rightarrow r = \frac{n^2\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{Ze^2} = \frac{n^2\hbar^2}{m4\pi^2} \frac{4\pi\epsilon_0}{Ze^2}$$



$$r_n = \frac{n^2 \epsilon_0 h^2}{Z m \pi e^2}$$

$$v = \frac{nh}{2\pi m} \cdot \frac{Z}{n^2} \cdot \frac{m\pi e^2}{\epsilon_0 h^2} \Rightarrow$$

$$v_n = \frac{Z}{n} \cdot \frac{e^2}{2\epsilon_0 h}$$

$$E = T + = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad E = T + = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{n^2} \frac{m\pi e^2}{\epsilon_0 h^2}$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \quad \text{Niveles de energía}$$

$$\text{Ec.(3)} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = z^2 \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{con} \quad R_\infty = \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \quad \text{donde } R_\infty \Rightarrow M \gg m$$

Donde $R_\infty \Rightarrow M \gg m$, esto significa que se ha considerado la masa del núcleo (M) infinitamente más grande que la masa del electrón orbital (m); de modo que tenemos un electrón moviéndose en torno a un núcleo en reposo.

$R_\infty = 1,0937317 \cdot 10^7 [1/m]$ Valor teórico calculado con la masa del electrón ($m \ll M$).

$R_H = 1,09720 \cdot 10^7 [1/m]$ Valor determinado experimentalmente por Rydberg. (1885).

$R_H = 1,09677576 \cdot 10^7 [1/m]$ Valor determinado con datos espectroscópicos, más recientes.

$$r_1 = \frac{\epsilon_0 h^2}{m\pi e^2} = a_0 \quad \text{Primer radio de Bohr}$$

$$a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

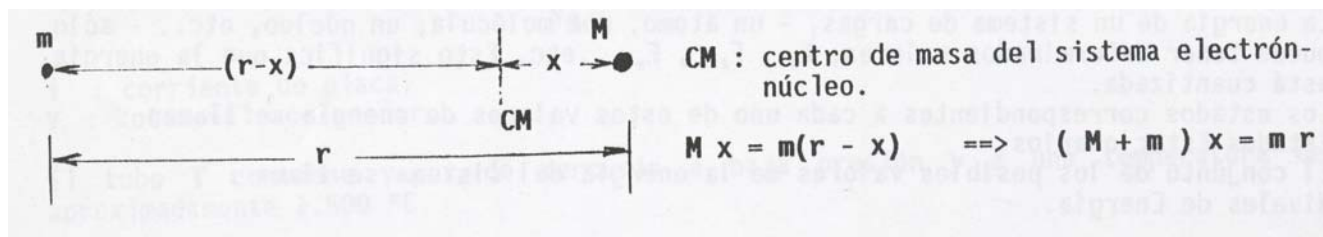
$$\text{Si } n = 1 \Rightarrow r_1 = a_0$$

$$\text{Si } n = 2 \Rightarrow r_2 = 4a_0$$

$$\text{Si } n = 3 \Rightarrow r_3 = 9a_0$$

CORRECCIÓN POR FINITUD DE MASA DEL NÚCLEO.

Para el hidrógeno, $M = 1836 m$, es decir $M \gg m$, debido a la interacción entre el núcleo y electrón, este último se mueve orbitando en torno del núcleo; pero el núcleo no permanece en reposo, se mueve (aunque sea un poquito).



$$x = \frac{mr}{m+M} \Rightarrow L_N = M\omega \frac{m^2 r^2}{(M+m)^2}$$

$$r-x = \frac{Mr}{m+M} \Rightarrow L_e = m\omega (r-x)^2 = m\omega \frac{M^2 r^2}{(M+m)^2}$$



$$L = L_N + L_e = Mm\omega r^2 \frac{m+M}{m+M} = \frac{Mm}{M+m} \omega r^2$$

$$\frac{Mm}{M+m} = \mu \text{ masa reducida del sistema}$$

$$L = \mu \omega r^2 = \mu v r$$

L : momentum angular del sistema.

El movimiento de las dos partículas se reduce al movimiento de una partícula de masa μ que se mueve respecto de un centro fijo (CM = Centro de Masa del sistema) en una órbita de radio r . Siendo r la distancia que hay entre el núcleo y el electrón.

Bohr modifica su segundo postulado, sumiendo ahora que:

“Las órbitas permitidas satisfacen la relación, $L_{\text{sist}} = n\hbar$ ”

Si reemplazamos esto en ec. (1) y Ec. (3) obtenemos:

$$r_n = \frac{n^2}{Z} \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m \pi e^2}$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} = \frac{Z^2}{n^2} \left(-\frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \right) = \frac{Z^2}{n^2} E_1(H)$$

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 \frac{e^4 \mu}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = Z^2 R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Donde $R = \frac{e^4 \mu}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c} = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{M}}$

NOTA: En R_∞ aparece la masa del electrón.

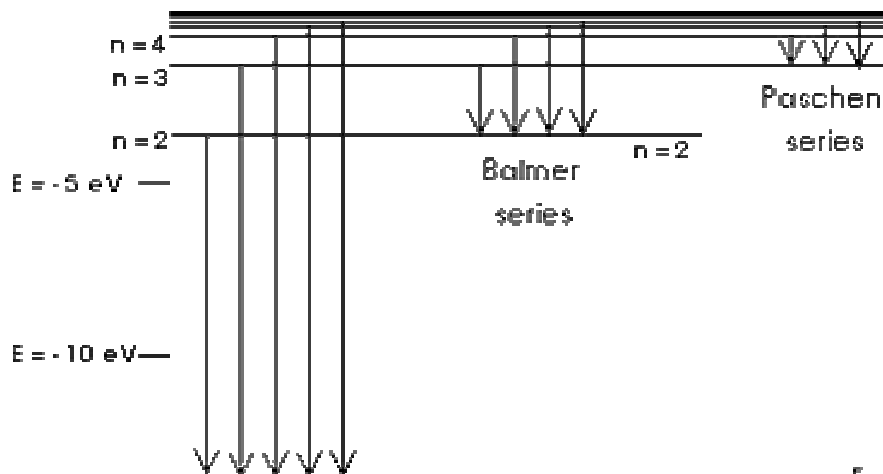
R es la constante de Rydberg característica de cada hidrogenoide.

Niveles de energía para el hidrogenoide:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} Z^2 \hbar c R = \frac{E_1}{n^2}$$

Series espectrales para el hidrogenoide:

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$





Serie de Lyman

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ con } n = 2, 3, 4, \dots$$

Se encontró después de la propuesta de Bohr

ESTADOS DE ENERGÍA ATÓMICA

La energía de un sistema de cargas, un átomo, una molécula, un núcleo, etc...sólo puede tener determinados valores, $E_1, E_2, E_3, \dots$ etc. Esto significa que la energía está cuantizada.

Los estados correspondientes a cada uno de estos valores de energía se llaman: **Est. Estacionarios**.

El conjunto de los posibles valores de la energía del sistema se llama: **Niveles de Energía**.

La absorción de REM, o de cualquier otro tipo de energía, da lugar a una transición del átomo (molécula o núcleo) de un Estado Estacionario a otro Estado Estacionario de mayor energía.

$$A + h\nu = A^*$$

La emisión de REM, da lugar a una transición del átomo (molécula o núcleo) de un Estado Estacionario a otro Estado Estacionario de menor energía.

$$A^* = A + h\nu$$

La existencia de los estados estacionarios es un hecho fundamental de la naturaleza.

“La hipótesis de Bohr sobre los “estados estacionarios” fue una hipótesis ad-hoc, sin una justificación teórica sólida. Sin embargo, su éxito estimuló a otros físicos a realizar experimentos para poner a prueba la idea. Rápidamente se acumuló una gran cantidad de información que dio lugar al descubrimiento de nuevas e insospechadas propiedades atómicas.

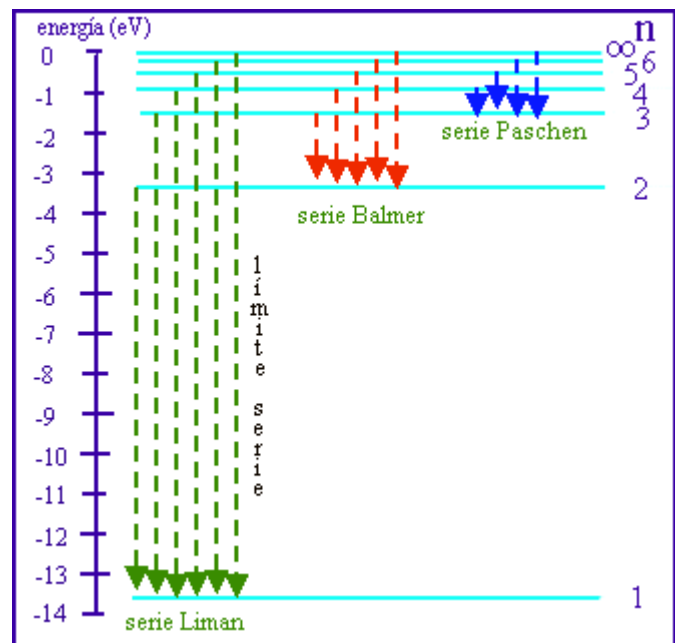
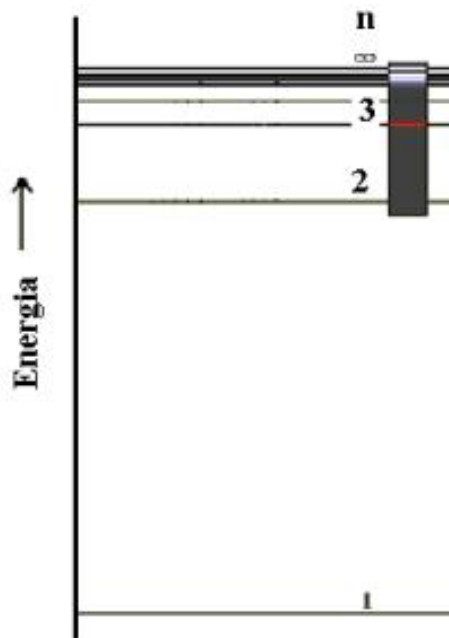
La Teoría de Bohr predice la existencia de los niveles de energía de un átomo hidrogenoide (átomo con un solo electrón), es decir;

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$$

$E_n \Rightarrow$ valores permitidos de la energía. $\{E_1, E_2, E_3, \dots\}$

Para un átomo con varios electrones, es claro que la energía de cada uno de los electrones estará cuantizada, lo que significará que el contenido energético total del átomo se debe restringir a ciertos valores posibles.

Por consiguiente, la teoría predice que “los estados de energía atómicos están cuantizados.



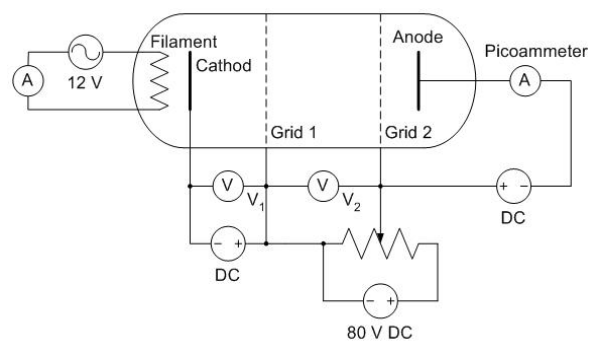
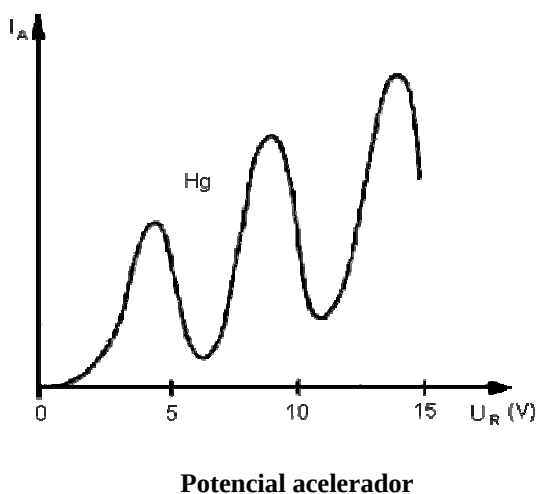
James Franck
1882-1964, alemán)



1887-1975, alemán



Experimento de FRANK y HERTZ.





RESULTADO:

Energía absorbida por el átomo en el proceso de excitación es igual a la energía del fotón emitido en el proceso de desexcitación.

Por lo tanto, los átomos en existen los estados estacionarios.

ORBITAS ELÍPTICAS

En general un electrón que se mueve en el Campo Colombiano de un núcleo, describe una órbita elíptica; en este caso la cuantización de Bohr ($\mathbf{L} = n\hbar$) es insuficiente para poder determinar de todas las elipses posibles dadas por la Mecánica Clásica, aquellas que corresponden a los Estados estacionarios del átomo.

La condiciones que deben satisfacer los estados estacionarios fueron formuladas en forma general por Sommerfeld.

CUANTIZACIÓN DE SOMMERFELD...

Si un sistema mecánico de i grados de libertad se describe por las coordenadas generalizadas $\mathbf{q}_i$, y los correspondientes momentos generalizados $\mathbf{p}_i$; únicamente serán estacionarios los estados de este sistema, si cumplen con las condiciones:

$$\oint \mathbf{p}_i d\mathbf{q}_i = n_i h \quad \mathbf{p}_i = \frac{dT}{d\dot{\mathbf{q}}_i} \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{d\mathbf{q}}{dt}$$

n_i : número cuántico, entero.

$\oint$: significa que se integra sobre todo un período de la variable q .

Los cálculos realizados basándose en esta cuantización, sólo dan resultados de acuerdo con el experimento, cuando se trata de sistemas armónicos muy simples.

Para trabajar con casos más complejos se debemos trabajar con **Mecánica Cuántica (MQ)**.

En el, caso de una órbita elíptica el núcleo se encuentra en uno de los focos de la elipse y el movimiento del electrón tiene dos grados de libertad. En coordenadas polares tenemos:

$$\oint \mathbf{p}_i d\mathbf{q}_i = n_i h \Rightarrow \int_0^{2\pi} L d\theta = n_\theta h \Rightarrow L \int_0^{2\pi} d\theta = n_\theta h \Rightarrow L = n\hbar \quad n_\theta : N^\circ \text{ cuant. azimuthal}$$

$\oint \mathbf{p}_i d\mathbf{q}_i = n_i h \Rightarrow \oint \mathbf{p}_r dr = n_r h \quad n_r : N^\circ \text{ cuántico radial.}$ Se debe integrar en todo el período de valores de r . Desde $r_{\min}$ en el perihelio, hasta $r_{\max}$ en el afelio y en sentido contrario hasta el perihelio.

$$n = n_\theta + n_r \quad n : N^\circ \text{ cuántico principal}$$

Aplicando cuantización de Sommerfeld al hidrogenoide tenemos:



$$L = n_{\theta} \hbar$$

$$L \left(\frac{a}{b} - 1 \right) = n_r \hbar$$

$$\frac{a}{b} = \frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2}} = \frac{n_r + n_{\theta}}{n_{\theta}} = \frac{n}{n_{\theta}}$$

Elipse

a: semi eje mayor

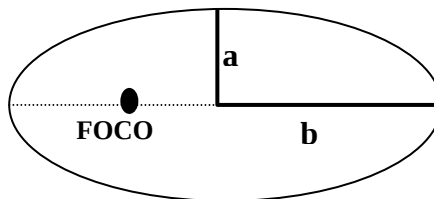
b: semi eje menor

ϵ : excentricidad

$$b = a\sqrt{1-\epsilon^2}$$

$$\epsilon = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}$$

$$A = \pi a b$$



Sommerfeld encontró: a, b y E para las órbitas permitidas; también que, los semieje mayores coinciden con los radios de las órbitas circulares correspondientes:

$$a_n = r_n = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\mu \pi e^2 Z} n^2$$

$$b_n = \frac{n_{\theta}}{n} a_n$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{v_{orb}}{c} = \frac{1}{137}$$

α : constante de estructura fina, característica de las interacciones electromagnéticas.

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

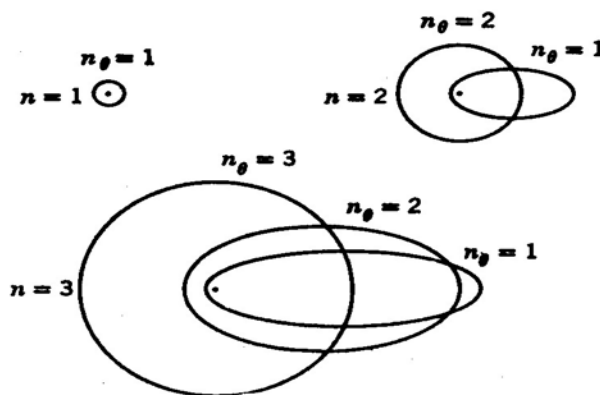
$$n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots, n$$

$$n_r = 0, 1, 2, \dots, (n - n_{\theta})$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Para un número cuántico principal n , pueden existir n órbitas geométricas distintas, todas ellas con la misma energía. Esto implica **estados degenerados**.

Esto significa que el electrón conserva la misma energía, al moverse por las distintas órbitas de igual número cuántico; mientras no exista UNA FUERZA PERTURBADORA.



PERTUBACIONES + ORBITAS ELIPTICAS $\Rightarrow$ EFECTOS DIFERENTES

Sea $n = 3$

$$n_{\theta} = 3$$

$$n_r = 0$$

$$a = b = \frac{1}{3} a_0$$

$$\epsilon = 0$$

órbita circular

$$n_{\theta} = 2$$

$$n_r = 1$$

$$a = \frac{2}{3} a_0$$

$$b = \frac{1}{3} a_0$$

$$\epsilon = \frac{\sqrt{5}}{3}$$

$$n_{\theta} = 1$$

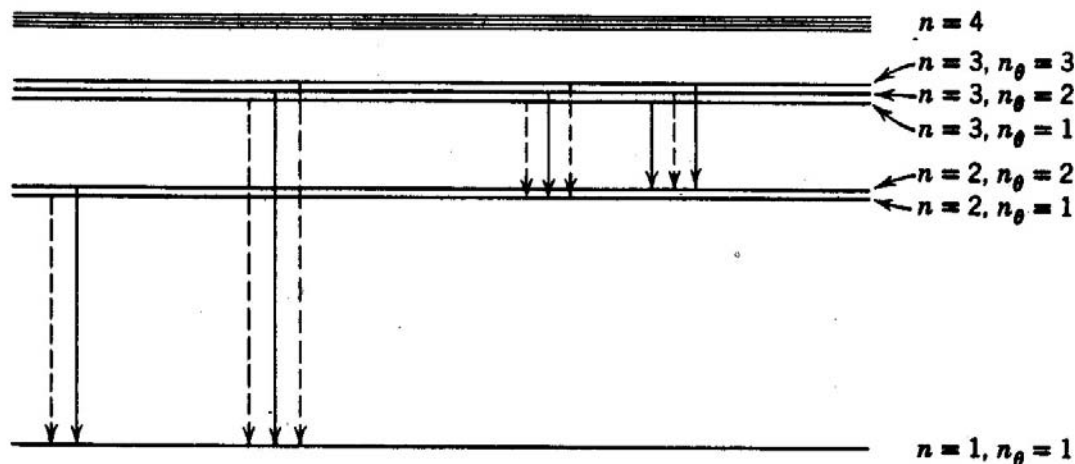
$$n_r = 2$$

$$a = \frac{3}{2} a_0$$

$$b = \frac{1}{2} a_0$$

$$\epsilon = \frac{2\sqrt{2}}{3}$$

Separación de estructura fina de los niveles del átomo de hidrógeno



$$E_{n,n_\theta} = -|E_n| \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right)$$

Regla de selección $n_{\theta i} - n_{\theta f} = \pm 1$ (En el ejemplo, sólo las líneas continuas)

PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA (1923) N. BOHR.

“Las predicciones que hace la teoría cuántica para el comportamiento de 1 sistema físico deben corresponder a las predicciones de la física clásica, para valores grandes de los números cuánticos que especifican el sistema”:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} MQ \rightarrow MC$$

Ejemplo: Hidrogenoide de Bohr

$$r_n = \frac{n^2}{Z} \frac{\epsilon_0 h^2}{\mu \pi e^2}$$

$$v_n = \frac{Z}{n} \cdot \frac{e^2}{2\epsilon_0 h}$$

$$V_n = \frac{2\pi r_n}{T}$$

$$T_n = n^3 \frac{4\epsilon_0^2 h^3}{\mu e^4 Z^2}$$

T: período de revolución.

$$v_{\text{rotación}} = \frac{1}{T} = \frac{2}{n^3} \frac{\mu e^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 h^3}$$

Frecuencia de rotación del **e** en torno al núcleo, cuando éste está en órbita permitida. Clásicamente debería radiar “REM” continuamente en esta v_{rot} .

Cuánticamente según Bohr: $v = \frac{\mu e^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$ (**) debería emitir un fotón cuando el “e” salta de la órbita $n_i \rightarrow$ órbita n_f .

$n_i = n$ número cuántico inicial

si $n = 2$

$\Rightarrow$ (*) y (**) difieren en un 300%



si $n = 10000 \Rightarrow (*)$ y $(**)$ difieren en un 0,01%

$n_f = n - p$ número cuántico final, con $p=1,2,\dots$

$$v = \frac{\mu e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{(n-p)^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{\mu e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^3} \frac{2np - p^2}{(n-p)^2 \cdot n^2} \sim \frac{\mu e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^3} \frac{2np}{n^4} \quad n \gg p \Rightarrow \begin{cases} 2np - p^2 \approx 2np \\ (n-p)^2 n^2 \approx n^4 \end{cases}$$

$$v = \frac{\mu e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{2p}{n^3} \right) \quad \text{si } p = 1 \quad v = \frac{\mu e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{2}{n^3} \right) \quad p=2,3,4,\dots \text{armónicos}$$

Por lo tanto, si n_i y n_f son muy grandes con $n \gg p \Rightarrow v_{\text{fotón}} = v_{\text{rotación}}$

- ✚ La antigua M.Q. nos enseña a tratar sistemas que se comportan periódicamente en el tiempo. Pero en sistemas físicos que no se comportan así $\Rightarrow$ ¿?
- ✚ La antigua M.Q. nos enseña a calcular la energía emitida entre estados estacionarios ¿Cómo determinamos la rapidez de transición entre estados estacionarios?.
- ✚ La antigua M.Q. es aplicable a átomos con un electrón y aproximadamente a elementos alcalinos (Li , Na , K , Rb , Cs , etc) ¿Cómo analizamos la estructura de los otros átomos?

$\therefore$ **ES NECESARIA UNA NUEVA TEORÍA**

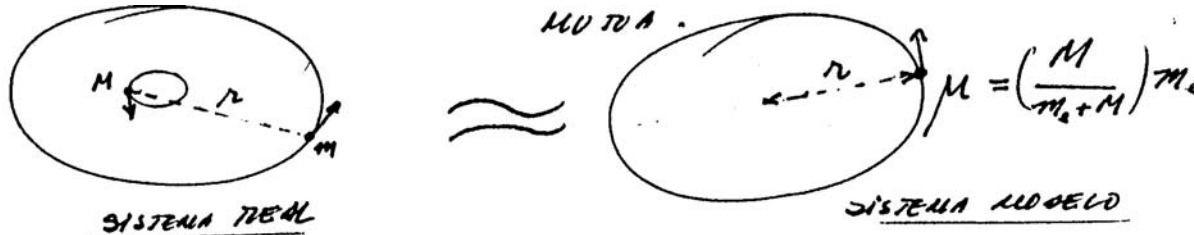
TEORÍA DE SCHRÖDINGER Y LOS HIDRÓGENOIDES

- ✚ El átomo con un solo electrón (hidrogenoide) fue el primer sistema físico del cual Schrödinger aplicó su teoría mecánico-cuántica.
- ✚ Los autovalores del hamiltoniano predichos por la teoría de Schrödinger concuerdan con los predichos por la teoría de Bohr y con los observados experimentalmente $\Rightarrow$ primera verificación de la teoría de Schrödinger.
- ✚ La teoría predice las autofunciones del Hamiltoniano y a partir de ellas se puede estudiar las siguientes propiedades.
 - 1ª Las funciones de densidad de probabilidad: Las que proporcionan una descripción detallada de la “estructura del átomo”, sin violar el principio de incertidumbre, como lo hacían las bien definidas órbitas de Bohr.
 - 2ª Los momentos angulares orbitales (MAO) del átomo, que no fueron predichos con exactitud por el modelo de Bohr.
 - 3ª El Spin electrónico y otros efectos relativistas que no fueron predichos correctamente por el modelo de Bohr.
 - 4ª La rapidez con que el átomo pasa de sus estados excitados a su estado base; cantidad mensurable que no es posible predecir con el modelo de Bohr.

La teoría de Schrödinger para los hidrogenoides es de gran importancia práctica, ya que constituye la base del tratamiento mecánico-cuántico de todos los átomos multielectrónicos, así como también de moléculas y núcleos.

El hidrogenoide es el sistema ligado más simple que existe en la naturaleza.

POTENCIALES CENTRALES (Energía Potencial) $\Rightarrow$ Problema de movimiento de dos partículas en interacción mutua.



POTENCIALES CENTRALES: ATRACCIÓN		SISTEMA FÍSICO: LIGADO
Coulomb	$V(r) = -\frac{\alpha}{r}$	ÁTOMO
Van der Waals : Combinaciones de potenciales coulombianos.		MOLÉCULA
Yukawa	$V = -V_0 \frac{e^{-\mu r}}{r}$	NÚCLEO
Líneal	$V(r) = -Kr$	PARTICULAS ELEMENTALES

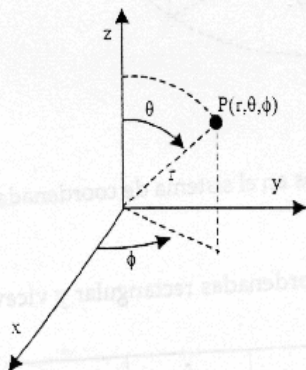
Sistema de coordenadas esférico

En coordenadas esféricas, las variables utilizadas son r , θ y ϕ , tal y como puede verse en la figura 4. La definición y los rangos de estas variables son los siguientes:

$r \geq 0$: distancia del punto P al origen de coordenadas O.

$0 \leq \theta \leq \pi$: ángulo formado por el vector $\overrightarrow{OP}$ y el eje Z.

$0 \leq \phi < 2\pi$: ángulo formado por el eje X y la proyección del vector $\overrightarrow{OP}$ sobre el plano XY.



$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\hat{r} = \hat{x} \sin \theta \cos \phi + \hat{y} \sin \theta \sin \phi + \hat{z} \cos \theta$$

$$\hat{\theta} = \hat{x} \cos \theta \cos \phi + \hat{y} \cos \theta \sin \phi - \hat{z} \sin \theta$$

$$\hat{\phi} = \hat{x} \sin \phi + \hat{y} \cos \phi$$

$$\vec{r} = (r, 0, 0)$$

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$



A toda cantidad física le está asociado un operador

Operador	En Representación .de coordenadas	En representación de momenta
Posición: $\vec{x}$	$\vec{x}$	$i\hbar \nabla_p$
Momentum lineal $\vec{p}$	$-i\hbar \nabla$	$\vec{p}$
Energía Cinética T	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$	$\frac{\vec{p}^2}{2m}$
Energía Potencial V	$V(\vec{x})$	$V = V(i\hbar \nabla_p)$
Energía E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
Momentum angular $\vec{L}$	$\vec{r} \times \vec{p}$	

$$L_x = -i\hbar \left[y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right] \quad L_y = -i\hbar \left[z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right] \quad L_z = -i\hbar \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \nabla_p = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right)$$

$$(*) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} + V(\vec{x}, t) \right] \Psi(\vec{x}, t)$$

Ec. de Schrödinger para una partícula sometida a un potencial

Si: $V(\vec{x}) \Rightarrow \Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})\Phi(t)$; potencial independiente del tiempo, se pueden separar variables
Desacoplando la ecuación (*)

$$\Phi(t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

$$(**) \quad H\psi(\vec{x}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Ecuación de valores propios del Hamiltoniano

ATOMO DE HIDRÓGENO:



$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad \text{Función de estado}$$

Función de estado

$$\psi(\vec{x}) \quad \text{Autofunción del hamiltoniano}$$

$$V = V(\mathbf{r}) \quad \text{Potencial coulombiano, tiene simetría esférica.. Debemos trabajar el hamiltoniano en coordenadas esféricas}$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad \text{Hamiltoniano}$$

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

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad \text{Operador (MAO)}^2$$

Ecuación de valores propios de L^2

$$L^2 \mathbf{Y}(\theta, \phi) = \hbar^2 \lambda^2 \mathbf{Y}(\theta, \phi) \quad \lambda : \text{constante por determinar}$$

$$\text{Sea: } \mathbf{Y}(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

$$-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Theta \Phi = \hbar^2 \lambda^2 \Theta \Phi$$

$$-\hbar^2 \Phi \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\Theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \right) = \hbar^2 \lambda^2 \Theta \Phi$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda^2 \sin^2 \theta \equiv m^2 \quad \text{constante}$$



$$\Phi''(\phi) + m^2 \Phi(\phi) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(\phi) \sim e^{im\phi}$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\sin\theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + (\lambda^2 \sin^2\theta - m^2) \Theta = 0$$

Cambio de variable: $\cos\theta = \xi$

$$\cos\theta = \xi \Rightarrow \frac{d}{d\theta} = \frac{d}{d\xi} \frac{d\xi}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d}{d\xi} \quad \sin\theta = \sqrt{1-\xi^2} \Rightarrow \frac{d}{d\theta} = -\sqrt{1-\xi^2} \frac{d}{d\xi}$$

$$(1-\xi^2)F''(\xi) - 2\xi F'(\xi) - \left(\frac{m^2}{1-\xi^2} - \lambda^2 \right) F(\xi) = 0$$

$$(1-\xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} P_\ell^m(\xi) - 2\xi \frac{d}{d\xi} P_\ell^m(\xi) + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2} \right) P_\ell^m(\xi) = 0$$

ℓ : entero no negativo; $\ell = 0, 1, 2, \dots$

$(F(\xi) = P_\ell^m(\xi))$ Polinomios asociados de Legendre

$$Y(\theta, \phi) = N_{\ell, m} P_\ell^m(\cos\theta) \Phi_m(\phi)$$

$N_{\ell, m}$: constante de normalización

$$\mathbf{L}^2 \mathbf{Y}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) \mathbf{Y}(\theta, \phi) \quad \text{Ecuación de valores propios de } \mathbf{L}^2$$

$$\mathbf{Y}(\theta, \phi) = \mathbf{Y}_\ell^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} e^{im\phi} P_\ell^m(\cos\theta)$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$ Número cuántico magnético

$$\mathbf{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\mathbf{L}_z \mathbf{Y}(\theta, \phi) = m\hbar \mathbf{Y}(\theta, \phi)$$

Ec. valores propios de $\mathbf{L}_z$



$$H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] + V(r)$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r)$$

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad \wedge \quad \psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

$$H\{R(r)Y(\theta, \phi)\} = ER(r)Y(\theta, \phi)$$

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r) \right\} R(r)Y(\theta, \phi) = E R(r)Y(\theta, \phi)$$

Dividimos la ec. Anterior por: $\frac{-\hbar^2}{2\mu}$ y operamos sobre R y Y

$$Y \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{R}{\hbar^2 r^2} L^2 Y + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) R Y = 0$$

$$Y \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{R}{\hbar^2 r^2} (\hbar^2 \ell(\ell + 1)) Y + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) R Y = 0$$

Dividimos la ec. Anterior por Y

$$(1) \quad \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{-\ell(\ell + 1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) \right\} R = 0$$

Ec. parte radial de la autofunción del hamiltoniano

Cambio de variables: $u(r) \doteq rR \Rightarrow R = \frac{u}{r}$ con $u(0) \equiv 0$ para que no diverja en el ∞



$$R = \frac{u}{r} \quad R' = \frac{u' - R}{r} \quad R'' = \frac{u'' - 2R'}{r}$$

$$R''(r) + \frac{2}{r}R'(r) + \left\{ \frac{-l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V) \right\} R(r) = 0$$

$$u''(r) + \left\{ \frac{-l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}E - \frac{2\mu}{\hbar^2}V \right\} u(r) = 0$$

$$E = -|E| \text{ ya que trabajaremos con estados ligados} \quad \Rightarrow \frac{2\mu}{\hbar^2}E = -\frac{2\mu}{\hbar^2}|E| \equiv -k^2 \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}|E|}$$

$$(2) \quad u''(r) + \left\{ \frac{-l(l+1)}{r^2} - k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}V \right\} u(r) = 0$$

Análisis asintótico de la Ec.(2)

$$a) \quad r \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad u'' - k^2 u = 0 \quad \Rightarrow \quad u_{r \rightarrow \infty} \sim e^{-kr}$$

$$b) \quad r \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad u'' - \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0 \quad \Rightarrow \quad u_{r \rightarrow 0} \sim r^{\ell+1}$$

Solución de Ec.(2) $u \sim e^{-kr} \cdot r^{\ell+1} \cdot g(r)$, donde $g(r)$ es un polinomio por determinar.

Reemplazamos en.(2)

$$u' = -ku + (\ell+1)\frac{u}{r} + \frac{u}{g}g' = \left(-k + \frac{(\ell+1)}{r} + \frac{g'}{g} \right) u$$

$$u'' = \left(-k + \frac{(\ell+1)}{r} + \frac{g'}{g} \right) \left(-k + \frac{(\ell+1)}{r} + \frac{g'}{g} \right) u + \left(-\frac{(\ell+1)}{r^2} + \frac{g''}{g} - \frac{(g')^2}{g^2} \right) u$$

$$u'' = \left\{ \left(k^2 + \frac{(\ell+1)^2}{r^2} + \frac{(g')^2}{g^2} - 2k\frac{(\ell+1)}{r} - 2k\frac{g'}{g} + 2\frac{(\ell+1)}{r}\frac{g'}{g} \right) + \left(-\frac{(\ell+1)}{r^2} + \frac{g''}{g} - \frac{(g')^2}{g^2} \right) \right\} u$$

$$u'' = \left[\frac{g''}{g} + \frac{g'}{g} \left(\frac{2(\ell+1)}{r} - 2k \right) + k^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - 2k\frac{\ell+1}{r} \right] u$$



$$\left[\frac{g''}{g} + \frac{g'}{g} \left(\frac{2(\ell+1)}{r} - 2k \right) + k^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - 2k \frac{\ell+1}{r} \right] u(r) + \left\{ \frac{-\ell(\ell+1)}{r^2} - k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V \right\} u(r) = 0$$

$$\left[\frac{1}{g} \left(g'' - 2kg' + \frac{2(\ell+1)}{r} g' \right) - 2k \frac{\ell+1}{r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V \right] u(r) = 0$$

$$\Rightarrow \left[\frac{1}{g} \left(g'' - 2kg' + \frac{2(\ell+1)}{r} g' \right) - 2k \frac{\ell+1}{r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V \right] = 0 \quad (3)$$

Recordemos que: $V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{-e^2}{r}$ y $r_1 = a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$ primer radio de Bohr $\frac{2\mu}{\hbar^2} V = -\frac{2}{ar}$

Multiplicando (3) por r y g

$$rg'' + (2(\ell+1) - 2kr)g' + \left(-2k(\ell+1) - \frac{2r\mu}{\hbar^2} V \right) g = 0$$

$$rg'' + (2(\ell+1) - 2kr)g' + 2k \left(-\frac{2r\mu}{\hbar^2 2k} V - (\ell+1) \right) g = 0$$

$$rg'' + (2(\ell+1) - 2kr)g' + 2k \left(-\frac{r}{2k} \left(-\frac{2}{ar} \right) - (\ell+1) \right) g = 0$$

$$rg'' + (2(\ell+1) - 2kr)g' + 2k \left(\frac{1}{ka} - (\ell+1) \right) g(r) = 0$$

Cambio de variable: $r \rightarrow \xi = 2kr \Rightarrow g(r) = g(\xi)$

$$\frac{d}{dr} = 2k \frac{d}{d\xi} \quad \frac{d^2}{dr^2} = (2k)^2 \frac{d^2}{d\xi^2}$$

$$2k2kr g'' + (2(\ell+1) - 2kr)2kg' + 2k \left(\frac{1}{ka} - (\ell+1) \right) g(r) = 0 / 2k$$

$$2kr g'' + (2(\ell+1) - 2kr)g' + \left(\frac{1}{ka} - (\ell+1) \right) g(\xi) = 0$$

$$\xi g''(\xi) + [(2\ell+1) + 1 - \xi]g'(\xi) + \left[\frac{1}{ka} - \ell - 1 \right] g(\xi)$$

$$(4) \quad \xi \frac{d^2}{d\xi^2} L_\eta^K(\xi) + [K + 1 - \xi] \frac{d}{d\xi} L_\eta^K(\xi) + \eta L_\eta^K(\xi) = 0$$

Ec. de los Polinomios Asociados de Laguerre

$$K = 2\ell + 1 \quad \eta \geq 0 \quad \eta = \frac{1}{ka} - \ell - 1 \quad n = \frac{1}{ka} \text{ entero positivo}$$



$$\xi = \frac{2r}{na}$$

Solución de Ec.(4): $g(r) \sim L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{na} \right) = L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} (2kr)$

Polinomios Asociados de Laguerre

Si $u \sim e^{-kr} \cdot r^{\ell+1} \cdot g(r) \Rightarrow u(r) = C_{nl} e^{-kr} r^{\ell+1} g(r)$

$u(r) = C_{nl} e^{-kr} r^{\ell+1} g(r) \quad \int_0^\infty R^* R r^2 dr \equiv \int_0^\infty u^* u r^2 dr = 1$ Cond. Normalización.

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{(2k)^3 (n-\ell-1)!}{2n [(n+\ell)!]^3}} e^{-kr} (2kr)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} (2kr)$$

Función radial normalizada

$$k \equiv \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} |E|} \Rightarrow k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} |E| \quad \text{pero} \quad E = -|E|$$

$$\frac{1}{ka} \equiv n \Rightarrow k^2 = \frac{1}{n^2 a^2} = -\frac{2\mu}{\hbar^2} E \Rightarrow E = \frac{-1}{n^2} \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}$$

pero,

$$a = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} \Rightarrow \frac{1}{a_0^2} = \frac{\mu^2 e^4}{4\pi 4\pi\epsilon_0^2 \hbar^4} \quad E = -\frac{1}{n^2} \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\mu^2 e^4}{4\pi 4\pi\epsilon_0^2 \hbar^4}$$

$$E = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Niveles de energía



POLINOMIOS DE LAGUERRE (ASOCIADOS)

$$L_n^\kappa(\xi) = \sum_{m=0}^n (-1)^m \frac{n! (\kappa)!}{(n-m)! (m)! (\kappa+m)!} \xi^m$$

$$\kappa > (-1)$$

$$\xi \frac{d^2}{d\xi^2} L_n^\kappa(\xi) + (\kappa + 1 - \xi) \frac{d}{d\xi} L_n^\kappa(\xi) + n L_n^\kappa(\xi) = 0$$

EC. POLINOMIOS ASOCIADOS DE LAGUERRE.

FORMULAS DE RECURRENCIA:

$$(n+1) L_{n+1}^\kappa(\xi) = (2n + \kappa + 1 - \xi) L_n^\kappa(\xi) - (n + \kappa) L_{n-1}^\kappa(\xi)$$

$$\xi [L_n^\kappa(\xi)]' = n L_{n-1}^\kappa(\xi) - (\kappa + \xi) L_n^\kappa(\xi)$$

$$L_n^\kappa(0) = \frac{(\kappa)!}{n!}$$

$$\int_0^\infty e^{-\xi} \xi^\kappa L_n^\kappa(\xi) L_m^\kappa(\xi) d\xi = \frac{[(\kappa)!]^2}{n!} \delta_{nm} \quad \text{ORTOGONALIDAD}$$

n : ENTERO NO NEGATIVO ; m : ENTERO NO NEGATIVO

$$L_0^\kappa(\xi) = 1$$

$$L_1^\kappa(\xi) = -\xi + \kappa + 1$$

$$L_2^\kappa(\xi) = \frac{1}{2} \xi^2 - (\kappa + 2) \xi + \frac{1}{2} (\kappa + 1)(\kappa)$$



PROBLEMAS

PROBLEMA N° 1

1. La capacidad de la Teoría atómica de Bohr para explicar el origen de las Líneas Espectrales, se encuentra como uno de los más espectaculares logros, ¿Cuáles son los postulados propuestos por Bohr.
2. A partir de los postulados de Bohr demuestre que:

✚ El radio de las órbitas permitidas.

$$r_n = \frac{n^2 \epsilon_0 h^2}{Z m \pi e^2}$$

✚ La velocidad orbital del electrón en dicha órbita.

$$v_n = \frac{Z e^2}{n 2 \epsilon_0 h}$$

✚ La energía del átomo. Están dados por:

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{n^2 8 \epsilon_0^2 h^2}$$

- 2.2 * Las LDO de los fotones emitidos espontáneamente por el átomo, al decaer hacia estados de menor energía satisfacen la relación:

$$\frac{1}{\lambda} = z^2 \frac{e^4 m}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = z^2 R_\infty \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

PROBLEMA N°2

Considerando una mezcla de “hidrógeno ordinario” y “deuterio” (isótopo de H); que ha sido previamente excitado; se observa que en el espectro emitido por la mezcla, en el rango visible, no coinciden exactamente las líneas del Hidrógeno con las del Deuterio.

Por ejemplo: $\lambda_\alpha(H) - \lambda_\alpha(D) \neq 0$ Lo que obviamente está en contradicción con la expresión del 2.2

Razón que obligó a Bohr a repostular uno de sus postulados (corrección por finitud de la masa del núcleo).

2.1 Bajo estas consideraciones demuestre que:

✚ $L = L_{\text{sist}} = \frac{mM}{m+M} \omega r^2$ donde $\frac{Mm}{M+m} = \frac{m}{1+\frac{m}{M}} = \mu$ es la masa reducida del sistema

✚ La energía del átomo hidrogenoide está dada por: $E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{n^2 8 \epsilon_0^2 h^2}$

✚ Las series espectrales vienen dadas por: $\frac{1}{\lambda} = z^2 \frac{e^4 \mu}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$

Donde $R = \frac{e^4 \mu}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} = \frac{R_\infty}{1+\frac{m}{M}}$

m : masa de la partícula orbital.

M: masa del núcleo.

μ : masa reducida del sistema.

2.2 Una mezcla de Hidrógeno y Tritio, se excita. Observándose luego el espectro de la REM que emite. ¿Qué separación tendrán las longitudes de onda de las líneas H_α de los dos tipos de hidrógeno?.

$(m_p = 1836,1051 m_e)$. $\lambda_\alpha(H) - \lambda_\alpha(tT) = 2,3834 \text{ \AA}$



PROBLEMA N°3

La vida promedio de un estado excitado (τ) es el orden de 10^{-8} [s].

- Demuestre que la expresión que le permite calcular el N° de revoluciones que da el electrón en un estado n cualquiera antes de decaer al estado fundamental es:

$$N = \frac{\tau}{n^3 T_1} \quad \text{con} \quad T_n = n^3 \frac{4\epsilon_0 h^3}{m e^4 Z^2} = n^3 T_1$$

T_1 : periodo de rotación del electrón en el estado fundamental.

- Estime el número de revoluciones si:

$$\begin{aligned} n = 2, & \quad \text{Resp. } N = 8,2 \cdot 10^6 [\text{rev}]; \\ n = 15 & \quad N = 1,95 \cdot 10^4 [\text{rev}] \end{aligned}$$

- Compare estos valores con el número de revoluciones que ha dado la Tierra en torno al Sol, en sus $2 \cdot 10^9$ [años]. Resp 2.000 millones [rev]

PROBLEMA N°4

Para las series espectrales del hidrógeno:

- En el rango visible, determine la LDO_{máx} y la LDO_{mín} de las líneas espectrales.
- En zona ultravioleta, determine la LDO_{máx} y la LDO_{mín} de las líneas espectrales.
- Determine el “Potencial de Excitación” para lograr la línea correspondiente a la LDO máxima, tanto en el rango visible como en el ultravioleta.

PROBLEMA N°5

- ¿En qué límites deberá estar comprendida la LDO de una LUZ monocromática para que al excitar átomos de hidrógeno, el radio de la órbita del electrón aumente, en aquellos átomos, 9 veces?

$$\text{Resp: } n = 1 \rightarrow n = 3 \Rightarrow 1.025, 73 [\text{Å}]; (\text{Trans. MAS PROBABLE}).$$

$$n = 2 \rightarrow n = 6 \Rightarrow 4.108, 14 [\text{Å}]$$

- La raya D del Sodio es emitida como resultado de una transición del electrón de una órbita del átomo a otra, durante dicha transición la energía del átomo disminuye en $3,37 \cdot 10^{-19}$ [J]

Determine la LDO de la raya D del Sodio. Resp. $5,9 \cdot 10^{-7}$ [m] amarilla.

PROBLEMA N°6

Considerando la interacción entre un PROTON Y UN ELECTRÓN en la configuración de Bohr:

- Muestre que la atracción gravitacional es despreciable frente a la atracción coulombiana.

$$K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \cdot 10^9 \left[\text{N} \frac{\text{m}^2}{\text{C}^2} \right] \quad 6,67 \cdot 10^{-11} \left[\text{N} \frac{\text{m}^2}{\text{kg}^2} \right] G=6,67 \quad F_E = 2,28 \cdot 10^{39} F_G$$

- Si en el modelo atómico de Bohr, sólo estuviesen involucradas interacciones gravitacionales

$$\text{a. Demuestre que el radio de las órbitas permitidas serían: } r = \frac{n^2 \hbar^2}{G M m^2} \quad \text{con} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\text{b. Evalué el radio de la 1ª órbita. Resp. } r_1 = 1,2 \cdot 10^{29} [\text{m}]$$

PROBLEMA N°7

- Determine el primer potencial de excitación para el Helio una vez ionozadado, He^+ .

- Determine la energía de ionización de Li^{++} .

$$\text{Resp. 1 : } 40,75 [\text{V}] \quad 2 : 122, 245 [\text{eV}]$$



PROBLEMA N°8

En el átomo de Li^{++} , el electrón experimenta una transición desde un estado cuya energía de excitación es **121,0869 [eV]** a otro estado cuya energía de excitación es **91, 7325 [eV]**.

Si el potencial de ionización del Li doblemente ionizado es de **122,31 [Volts]**.

1. ¿Con qué números cuánticos vienen rotulados estos estados?
2. ¿Cuál es la longitud de onda del fotón emitido en la transición?
3. ¿A qué rango del espectro electromagnético pertenece esta línea?

Resp. $n_i = 10$; $n_f = 2$. $\lambda = 422,96[\text{Å}]$ $\lambda \in$ ultravioleta.

PROBLEMA N°9

Cuando un mesón μ es capturado por un protón, se forma un átomo masónico (hidrógenoide) μ .

Se sabe que un mesón μ es una partícula que tiene: $m = 207 m_e$ y $q = -e$. El protón tiene: $M = 1.836 m_e$ y $q = e$.

DETERMINE:

1. La masa reducida del sistema.
2. La constante de Rydberg de este átomo.
3. El primer radio de Bohr de este átomo.
4. La energía de ionización

PROBLEMA N°10

Un electrón puede formar un sistema ligado con un positrón, (ATOMO POSITRONIO), es decir un hidrogenoide. DETERMINE:

1. Los niveles de energía del positronio.
2. Los radios de las órbitas permitidas del positronio.
3. Las series espectrales de este átomo.
4. El valor de la constante de Rydberg.
5. El valor del potencial de ionización.

PROBLEMA N°11

Un mesón π que tiene una masa en reposo de $273 m_e$, puede formar un átomo masónico con un protón (o sea un hidrogenoide). Se sabe que el potencial de ionización de este átomo es **3.234,00 [V]**.

Si en este átomo, el mesón π (partícula orbital) experimenta una transición desde el estado de energía **(-66) [eV]** a otro estado cuya energía de excitación es **(2.425,5) [eV]**

DETERMINE:

1. Los números cuánticos que rotulan a dichos estados.
2. La longitud de onda del fotón emitido en la transición.
3. La serie espectral en la cual caería esta línea.

PROBLEMA N°12

En un experimento tipo Frank–Hertz se bombardea HIDROGENO atómico co electrones (proyectiles) y se encuentra que los potenciales de excitación se presentan para **10, 20 [V]** y **12,10 [V]**.

1. Explique por qué, para esta excitaciones, se presentan tres líneas distintas en el espectro de emisión.
2. Calcule la frecuencia de los fotones de las transiciones permitidas.
3. Determine las LDO de las líneas espectrales observadas e indique a qué series pertenecen.

Resp. 2. : (4,55; 24,6; 29,2) $10^{14} [\text{Hz}]$. 3: (Balmer; Lyman; I Lyman):



PROBLEMA N°13

En un experimento tipo Franck-Hertz se bombardean iones de litio y se encuentra que los potenciales de excitación se presentan para $91,7325 [V]$ y $108,72 [V]$.

Se sabe que: $E_{ion}(Li^{**}) = 122,31 [eV]$.

1. Explique por qué aparecen tres líneas distintas en el espectro de emisión.
2. Determine las LDO de las líneas espectrales observadas.

Resp. 2: $120,87 [Å]$; $135,35 [Å]$; $730,87 [Å]$.

PROBLEMA N°14

1. Explique en qué consiste la regla de cuantización Sommerfeld.

i : número de grados de libertad.
 q_1 : coordenada generalizada.
 P_1 : momentum generalizado.

2. Demuestre que la cuantización de Bohr es un caso particular de la cuantización de Sommerfeld.
3. Demuestre que la cuantización de Planck es un caso particular de la Sommerfeld.

BIBLIOGRAFIA:

 FÍSICA VOL II
 FÍSICA CUÁNTICA IV
 FÍSICA VOL II Y VOL III
 FÍSICA TOMO I Y II
 FÍSICA MODERNA
 CURSO DE FÍSICA MODERNA
 FÍSICA MODERNA
 FÍSICA CUÁNTICA
 FÍSICA DE PARTÍCULAS

HALLIDAY RESNICK
BERKELEY
ALONSO Y FINN
TIPLER
TIPLER
V. ACOSTA
EISBERG.
EISBERG & RESNICK
IGOR SAAVEDRA