

Átomo Cuántico

PROFESOR: QBA MIGUEL ANGEL CASTRO RAMÍREZ

MODELOS CUANTICOS

- Niels Böhr (1885 - 1962)

- El modelo atómico de Rutherford llevaba a conclusiones que se contradecían claramente con los datos experimentales. Para evitar esto, Böhr planteó algunos postulados que no estaban demostrados en principio, pero que llevaban a conclusiones que sí eran coherentes con los datos experimentales; es decir, la justificación experimental de este modelo no existía, pero se suponía que se podría realizar posteriormente.

Postulados de Böhr

- **Primer Postulado:**

El electrón gira alrededor del núcleo en órbitas circulares sin emitir energía radiante.

- Este postulado implica que por alguna razón desconocida hasta ese momento, el electrón estaba incumpliendo las leyes del electromagnetismo y no emite energía radiante, pese a que se trata de una carga eléctrica en movimiento, que debería emitirla continuamente.

Postulados de Böhr

- **Segundo Postulado**

Indica que el electrón no puede estar a cualquier distancia del núcleo, sino que sólo hay unas pocas órbitas posibles, las cuales vienen definidas por los valores permitidos para un parámetro que se denomina número cuántico principal (n).

Postulados de Böhr

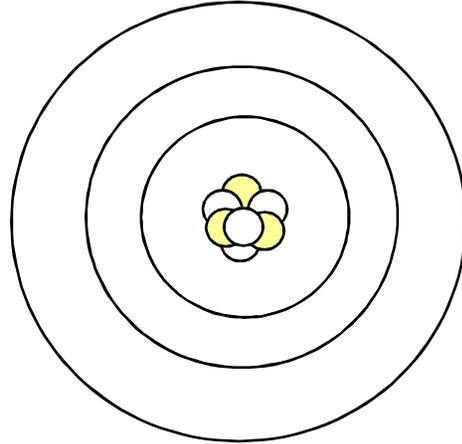
- **Tercer Postulado**

La energía liberada al caer el electrón desde una órbita a otra de menor energía se emite en forma de fotón, cuya frecuencia viene dada por la ecuación de Planck:

- $$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda}$$

- Así, cuando el átomo absorbe (o emite) una radiación, el electrón pasa a una órbita de mayor (o menor) energía, y la diferencia entre ambas órbitas se corresponderá con una línea del espectro de absorción (o de emisión).

Primer Modelo de Böhr

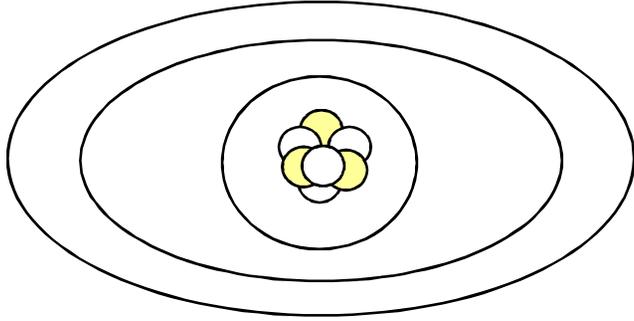


1er Número Cuántico

Numero Cuántico Principal “ n ”

- En el modelo original de Böhr, se precisa un único parámetro (el número cuántico principal, n), que se relaciona con el radio de la órbita circular que el electrón realiza alrededor del núcleo, y también con la energía total del electrón.
- Los valores que puede tomar este número cuántico son los enteros positivos:
 - $n = 1, 2, 3, 4, 5...$

Modelo de Böhr- Sommerfeld



2do Número Cuántico

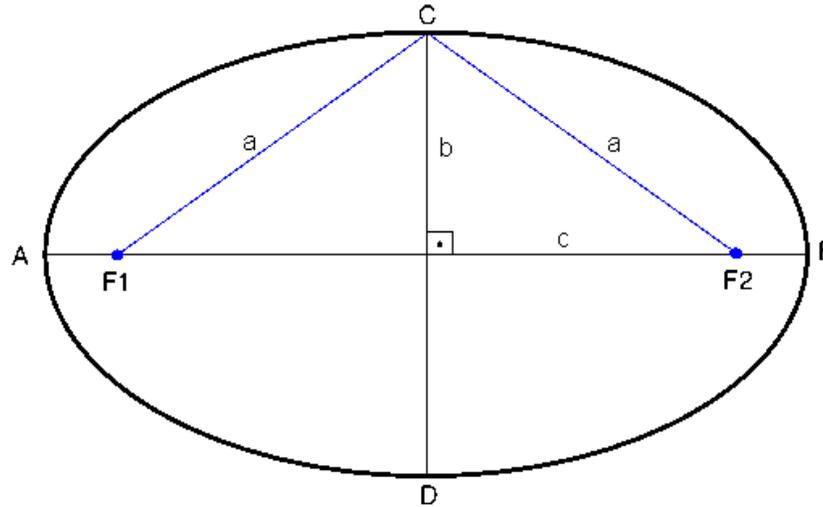
Numero Cuántico Azimutal “ ℓ ”

- En 1916, Sommerfeld modificó el modelo de Böhr considerando que las órbitas del electrón no eran necesariamente circulares, sino que también eran posibles órbitas elípticas; esta modificación exige disponer de dos parámetros para caracterizar al electrón.

Así, se introdujo el número cuántico secundario o azimutal (ℓ), cuyos valores permitidos son números enteros que van de cero hasta una unidad menor al valor de n : $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$

Por ejemplo, si $n = 3$, los valores que puede tomar ℓ serán: 0, 1, 2

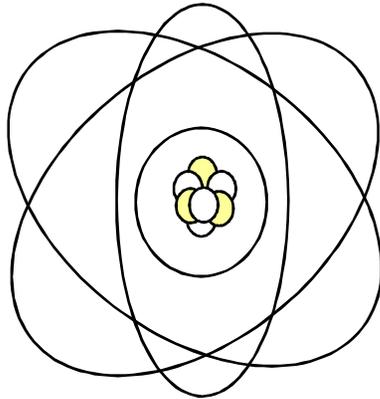
Modelo de Böhr- Sommerfeld



$$a^2 = b^2 + c^2$$

Una elipse viene definida por dos parámetros, que son los valores de sus semiejes mayor y menor. En el caso de que ambos semiejes sean iguales, la elipse se convierte en una circunferencia.

Modelo de Böhr- Sommerfeld- Zeemann



3er Número Cuántico

Numero Cuántico Magnético “ m_ℓ ”

- Gracias al descubrimiento del efecto Zeemann se comprobó que cualquier carga eléctrica en movimiento crea un campo magnético; por lo tanto, también el electrón lo crea, así que deberá sufrir la influencia de cualquier campo magnético externo que se le aplique.
- El tercer número cuántico indica las posibles orientaciones en el espacio que puede adoptar la órbita del electrón cuando éste es sometido a un campo magnético externo.

Sus valores permitidos van de: $-\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$

- Así, si el número cuántico secundario vale $\ell = 2$, los valores permitidos para m_ℓ serán: $-2, -1, 0, 1, 2$

Cuarto Número Cuántico (Espín)

4to Número Cuántico

Numero Cuántico Magnético “ m_s ”

- El cuarto número cuántico indica el sentido de giro del electrón en torno a su propio eje.
- Para el electrón, el espín solo puede tomar dos valores: + 1/2 si posee un giro en un sentido y
- 1/2 si su giro es en sentido contrario.

Fallos del Modelo de Böhr

- El modelo de Böhr permitió explicar adecuadamente el espectro del átomo de hidrógeno, pero fallaba al intentar aplicarlo a átomos polielectrónicos (de más de un electrón) y al intentar justificar el enlace químico.

Además, los postulados de Böhr suponían una mezcla un tanto confusa de mecánica clásica y mecánica cuántica.

Dualidad Onda-Partícula del Electrón

La teoría corpuscular	La teoría ondulatoria
<p>La luz está compuesta por partículas luminosas, de distinto tamaño según el color, que son emitidas por los cuerpos luminosos y que producen la visión al llegar a nuestros ojos.</p> <p>Se apoyaba en los siguientes hechos:</p> <ul style="list-style-type: none">• La trayectoria rectilínea de los rayos catódicos.• Los corpúsculos producen sombra.• La reflexión se debe al rebote de los corpúsculos sobre la superficie reflectora.	<p>Propone que la luz es una onda basándose en las observaciones como las siguientes:</p> <ul style="list-style-type: none">• La masa de los cuerpos que emiten luz no cambia.• La reflexión y refracción de los rayos catódicos• Interferencia y difracción

Dualidad Onda-Partícula del Electrón

- **Louis de Broglie** propuso (1923) que un haz de partículas y una onda son esencialmente el mismo fenómeno; simplemente, dependiendo del experimento que realicemos, observaremos un haz de partículas u observaremos una onda.
- Así, el electrón posee una longitud de onda (que es un parámetro totalmente característico de las ondas) y a su vez producen sombra y se mueven en línea recta como las partículas (que siguen las leyes de Newton)

Esta idea, fue confirmada experimentalmente en 1927, cuando se consiguió que haces de electrones experimentasen un fenómeno muy característico de las ondas: la distorsión de la onda al atravesar una rendija muy estrecha (difracción).

Principio de Incertidumbre

- Fue formulado por **Werner Karl Heisenberg** en 1927
- Establece que es imposible conocer simultáneamente la posición y la velocidad del electrón, y por tanto es imposible determinar su trayectoria.
- Cuanto mayor sea la exactitud con que se conozca la posición, mayor será el error en la velocidad, y viceversa. Solamente es posible determinar la probabilidad de que el electrón se encuentre en una región determinada.

A partir de aquí se estableció el modelo cuántico probabilístico del átomo, en donde el electrón circula en **ORBITALES** en torno al núcleo y no en **ORBITAS**.

ORBITAL ATÓMICO

- Es la región de espacio energético de manifestación probabilística del electrón.

Es decir:

- La región del espacio en la que hay una máxima probabilidad de encontrar, como máximo, dos electrones que se mueven en forma paralela y en sentidos contrarios, con la misma cantidad de energía

Modelo Cuántico Probabilístico

- El modelo gráfico del átomo se cambió por una representación matemática de probabilidades, basada inicialmente en la resolución de la ecuación de onda planteada por **Erwin Schrödinger** en 1925:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} d\mathbf{x}$$

- Que equivalía en física cuántica a la segunda ley de Newton en física clásica

Modelo Cuántico Probabilístico

- Posteriormente, en 1928, la ecuación de Schrödinger fue sustituida por la ecuación de **Paul Dirac**, que incorpora la teoría de la relatividad especial y el efecto del espín en otras partículas elementales diferentes al electrón.

$$\left(\alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j c \right) \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t)$$

$$\hat{H} |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} |\Psi(t)\rangle + V(\hat{\mathbf{r}}, t) |\Psi(t)\rangle$$

En el Modelo Atómico Actual:

1. Existe la presencia de un núcleo atómico con las partículas conocidas.
2. La casi totalidad de la masa atómica se encuentra en un volumen muy pequeño (el núcleo).
3. Los electrones se distribuyen alrededor del núcleo de acuerdo a su contenido energético en estados estacionarios o niveles de energía.
4. La materia posee una dualidad de carácter onda-partícula, lo cual se manifiesta evidentemente en masas muy pequeñas como la del electrón.
5. La longitud de onda de un electrón tiene un valor comparable a las dimensiones del átomo.
6. No se puede calcular con certeza la posición, energía y movimiento del electrón, debido a la imprecisión de los estudios por el uso de la luz de baja frecuencia, por lo que la certeza se sustituye por factores de probabilidad.

Otro Hecho Actual:

- Ahora sabemos que no toda la materia está constituida de átomos, pues existen cosas como estrellas de neutrones y otros tipos de materia conformados por partículas elementales que no forman átomos.

