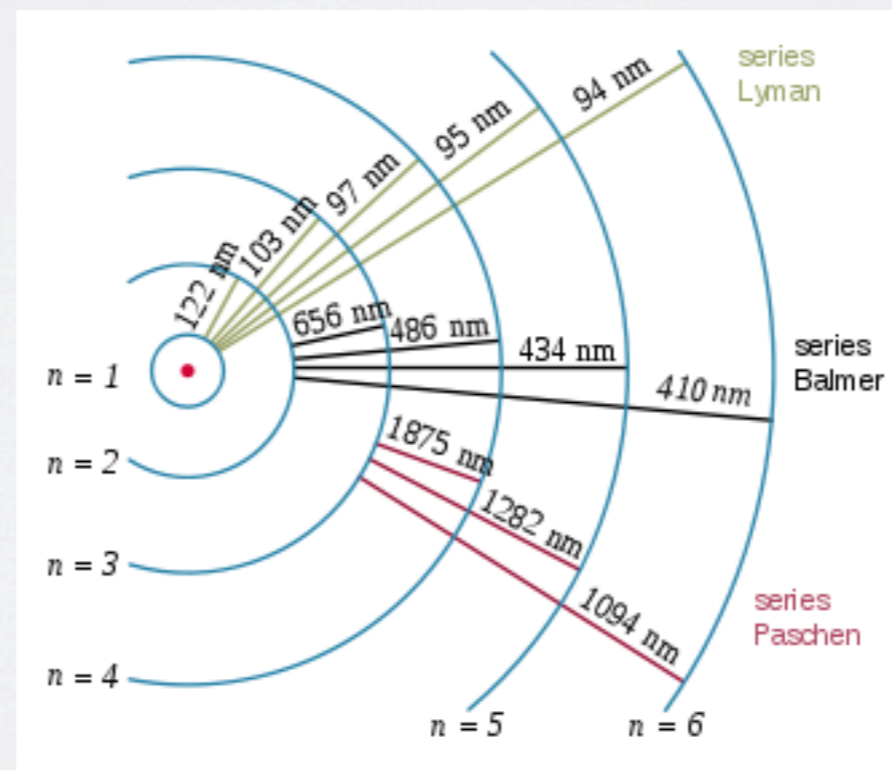


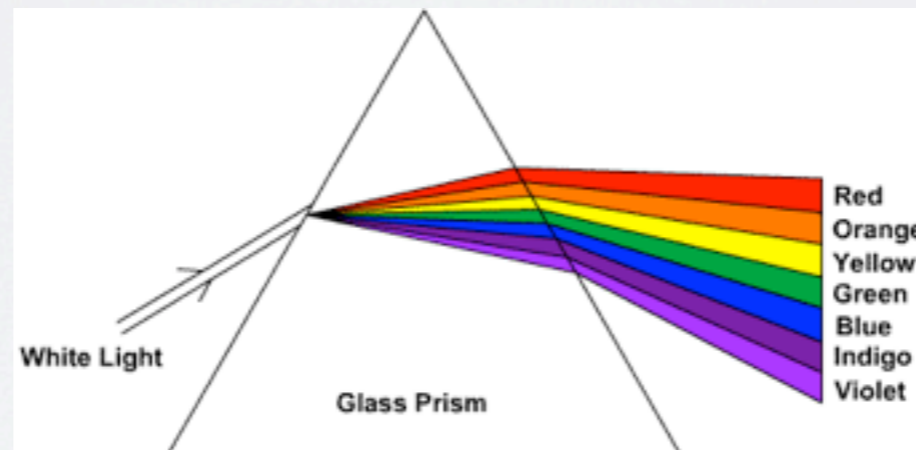
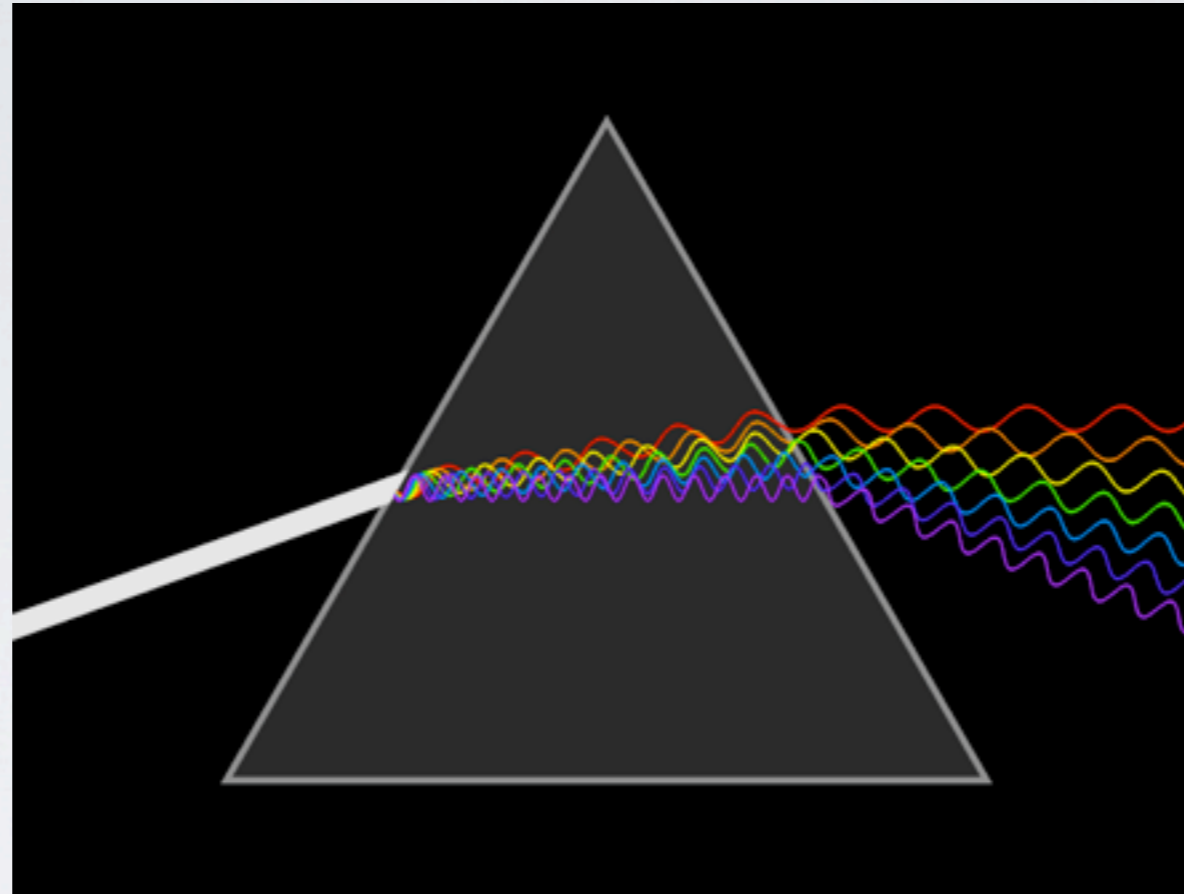


EL ÁTOMO DE BOHR

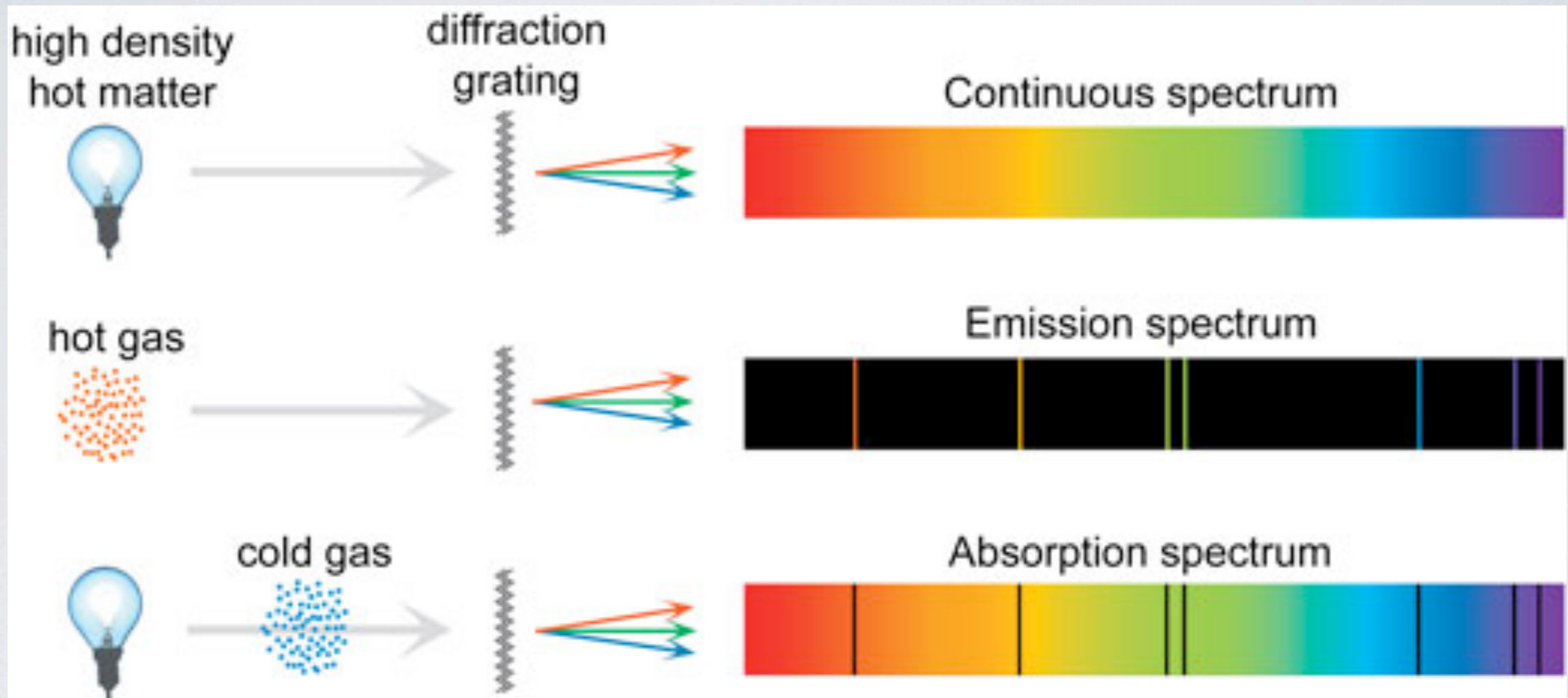
Prof. Carlos Ríos Morales



Dispersión de la luz

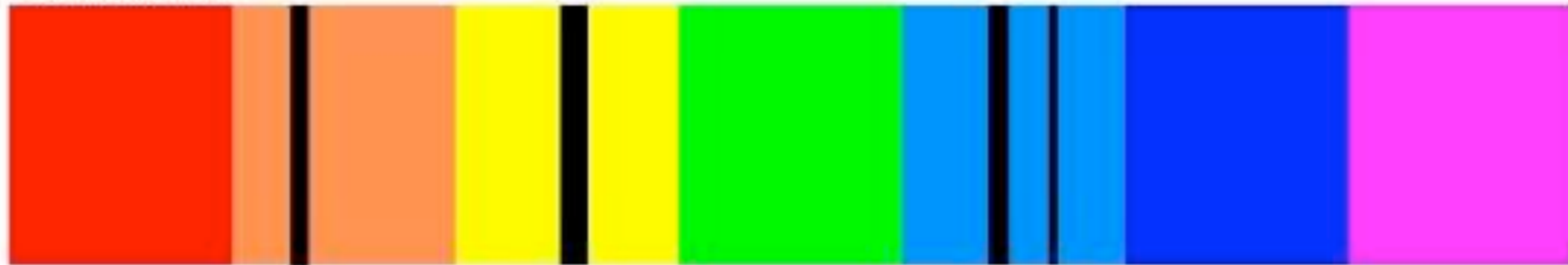


Espectros

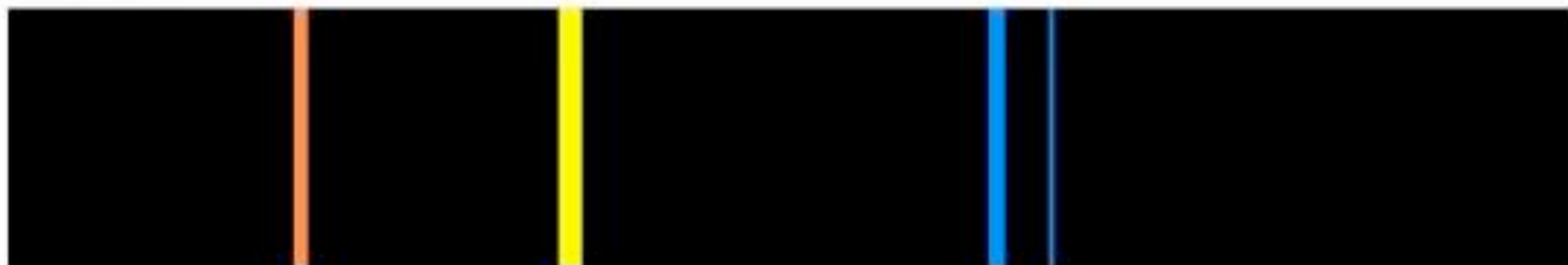


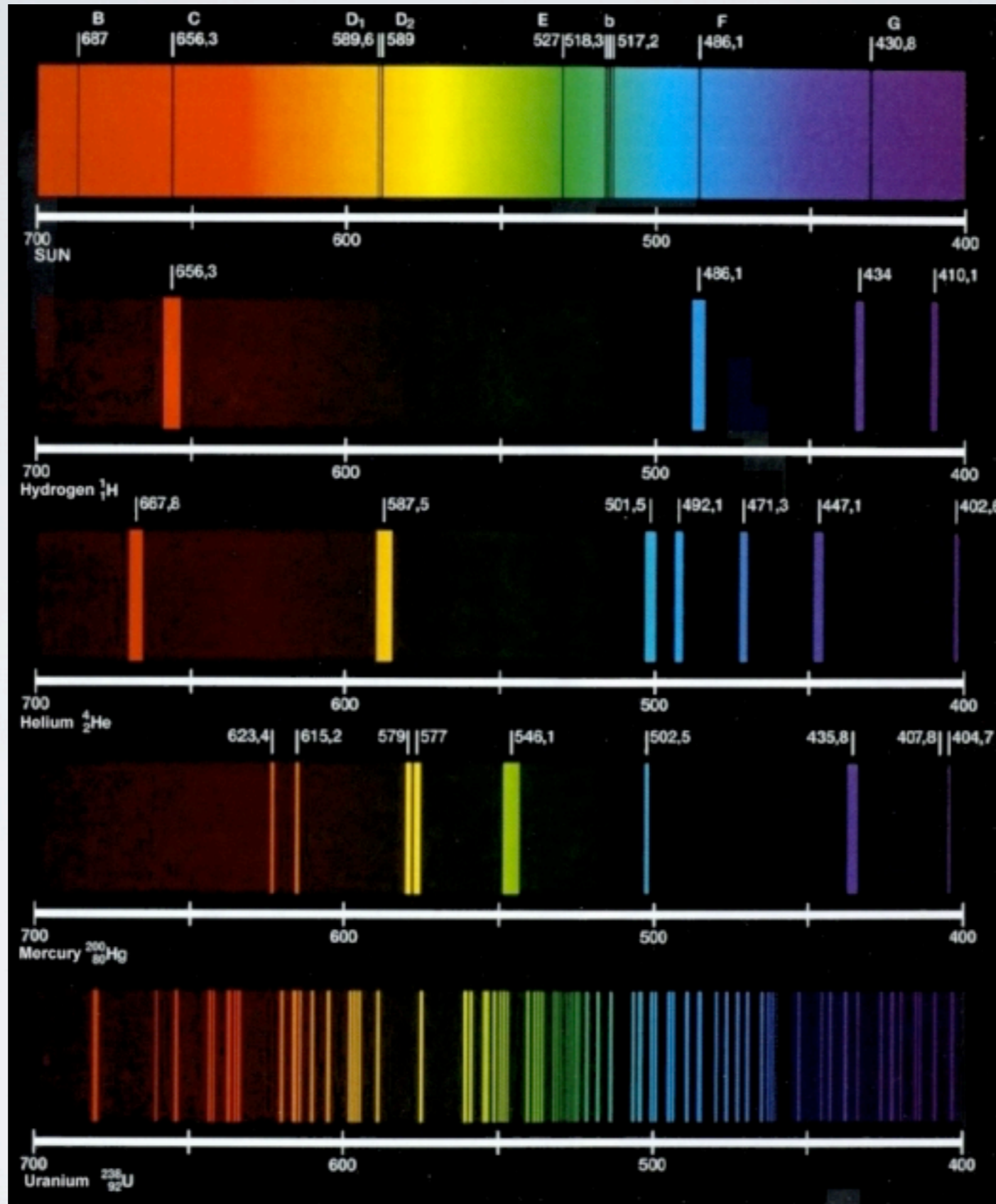
Espectro de emisión y de absorción de un mismo elemento

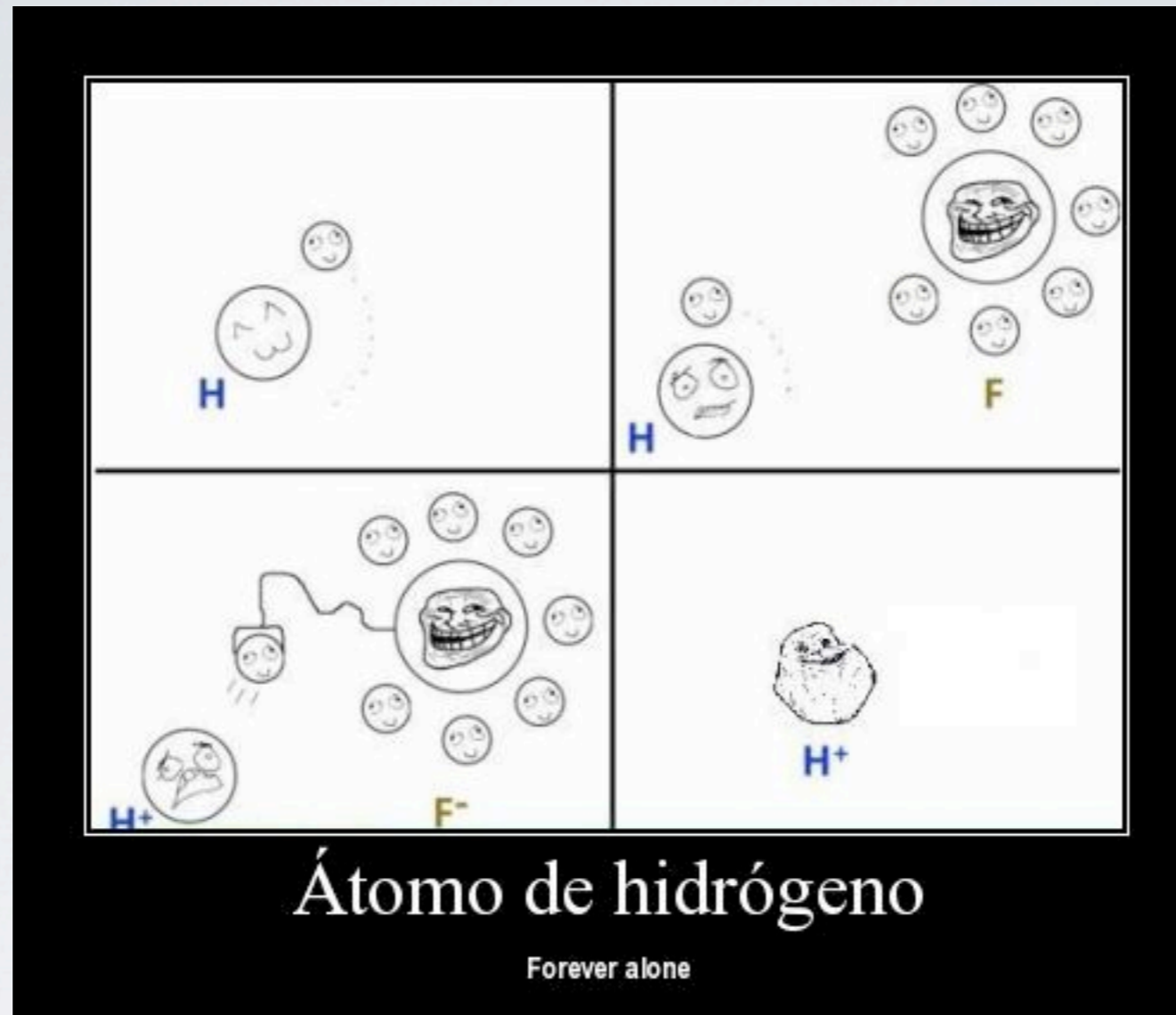
Absorción:



Emisión:



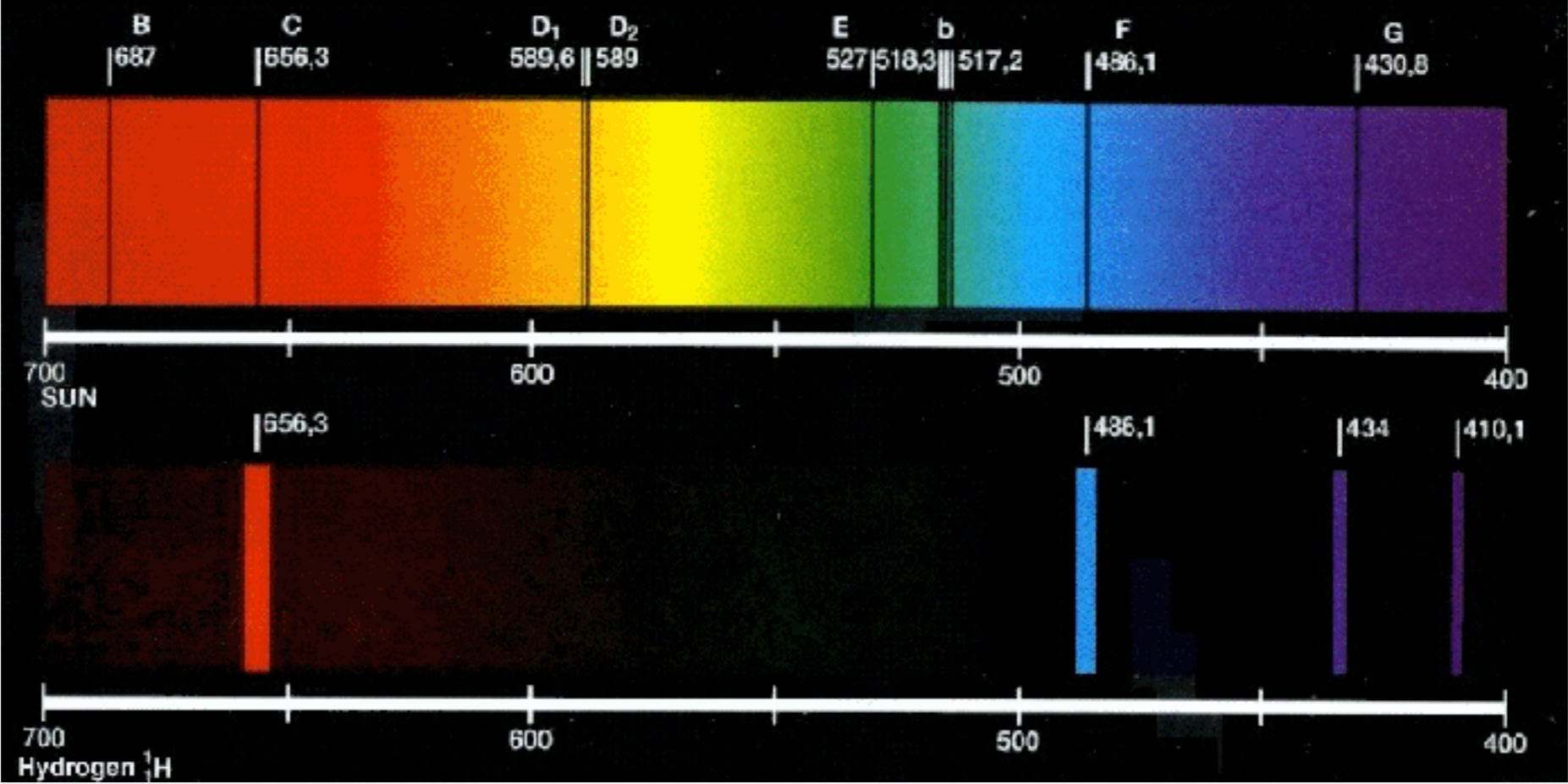




ELEMENTO MÁS ABUNDANTE

(y estudiado) en el Universo.

Espectro de hidrógeno



Formula de Rydberg-Ritz

Expresa las longitudes de onda para todas las líneas del espectro del hidrógeno

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

Constante de Rydberg $R = 1,096776 \cdot 10^7 [m^{-1}]$

Series:

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

$$n_i > n_f$$

$n_f = n_1 \rightarrow$ Serie de Lyman

$n_f = n_2 \rightarrow$ Serie de Balmer

$n_f = n_3 \rightarrow$ Serie de Paschen

$n_f = n_4 \rightarrow$ Serie de Brackett

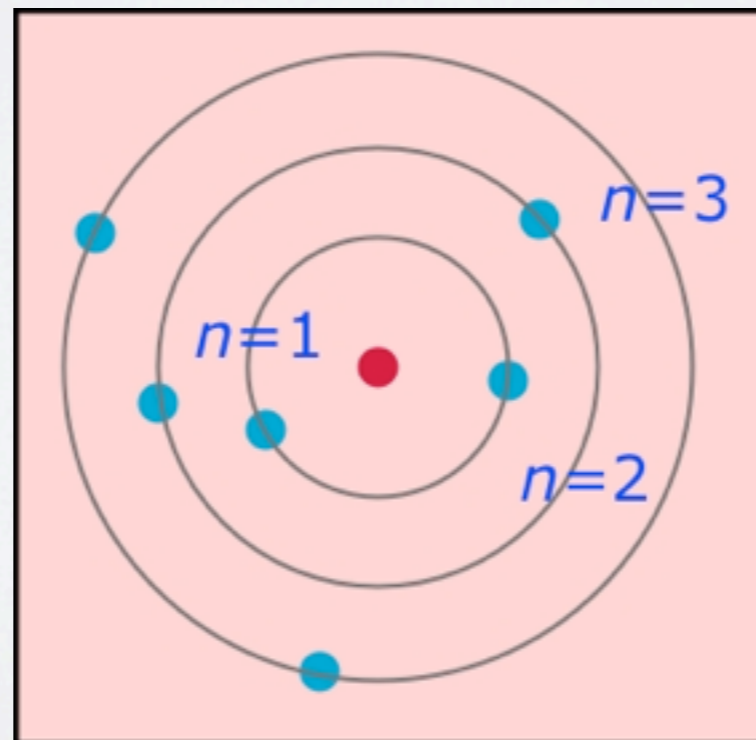
$n_f = n_5 \rightarrow$ Serie de Pfund

Problema:

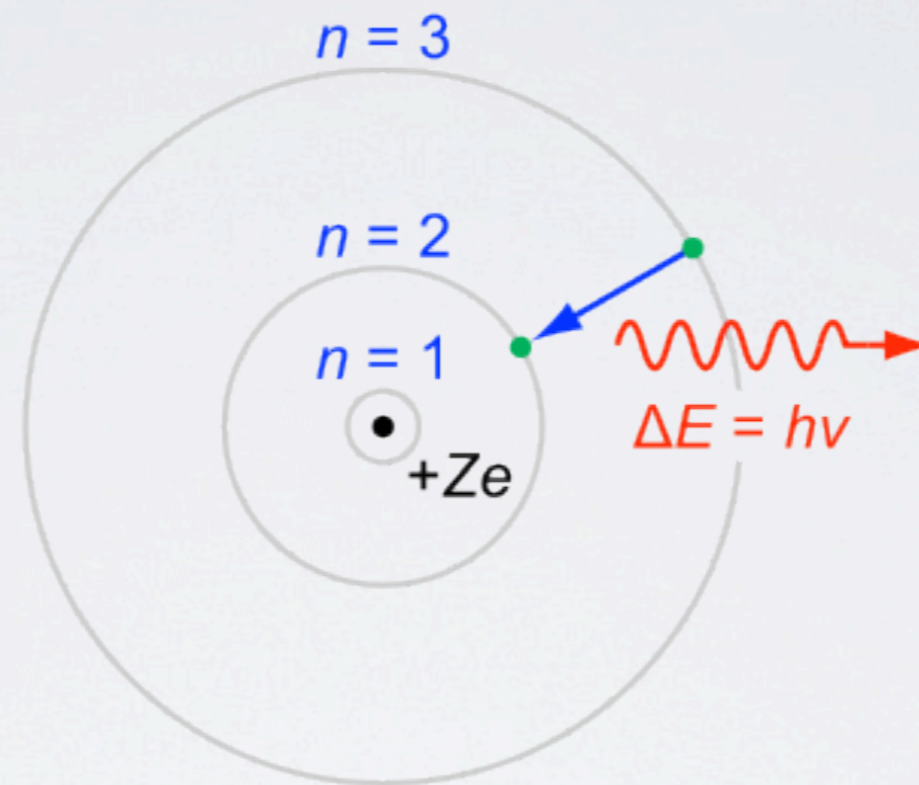
1.- Calcular la longitud de onda más larga y más corta de la Serie de Lyman del hidrógeno.

En 1913 Bohr encontró la explicación a la fórmula empírica de Rydberg.

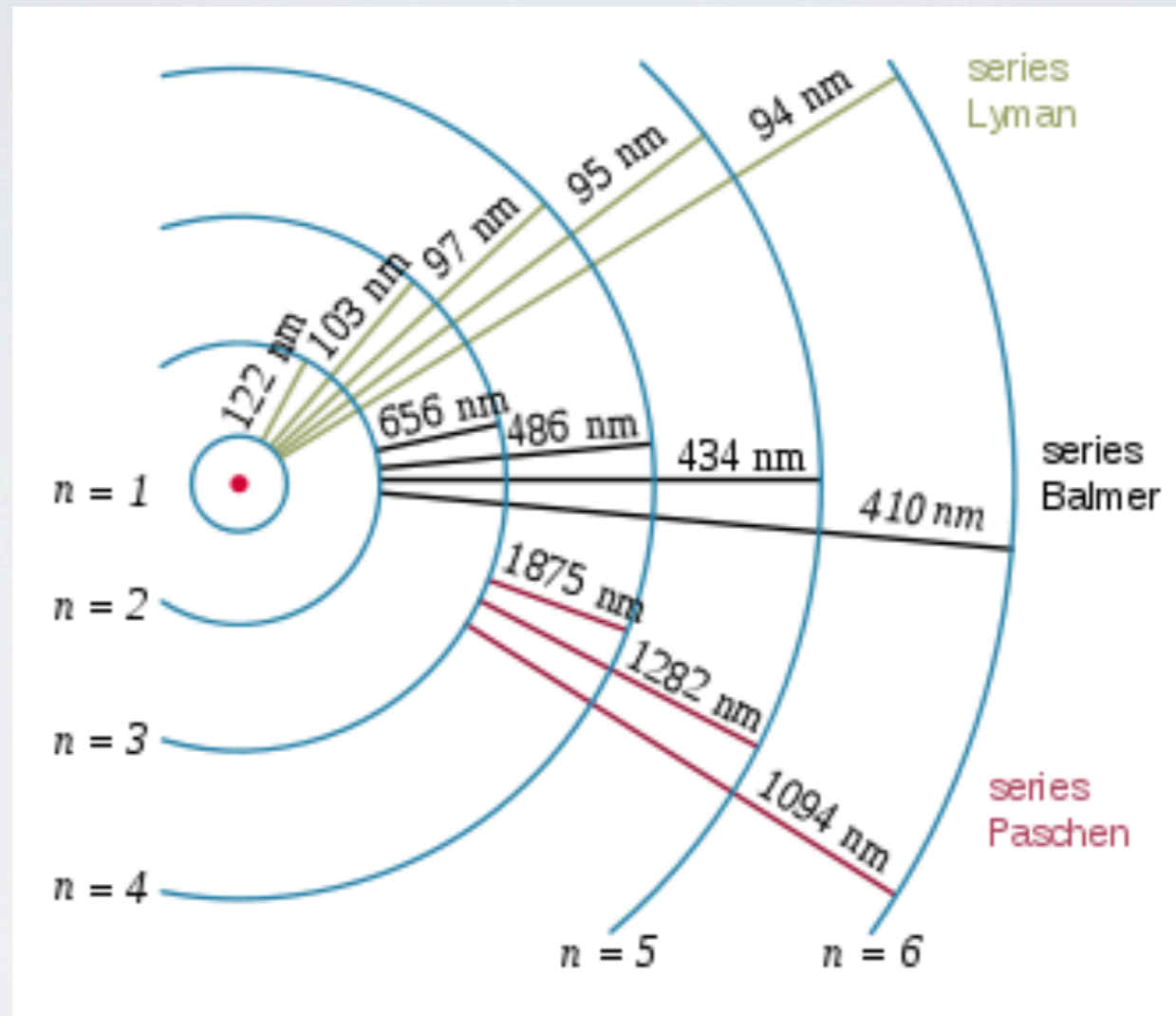
El modelo era de corte planerario, pero a diferencia del planteado por Rutherford, las distancias eran bien definidas. Dichas distancias (capas) fueron etiquetadas por $n=1,2,3\dots$, donde n es llamado **número cuántico principal**.



“Saltos” discretos del electrón



Explicación de Bohr a las Series



Energía en ua órbita circular de un átomo Hidrogenoide

$$U = \frac{K q_1 q_2}{r} = -\frac{K Z e^2}{r}$$

$$\text{pero: } \frac{K Z e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad (\text{estabilidad mecánica})$$

$$\Rightarrow E = -\frac{1}{2} \frac{K Z e^2}{r}$$

Postulados de Bohr

1.- El electrón en el átomo se mueve en orbitas dedinidas, no radiante, llamadas estados estacionarios.

2.- Relación entre frecuencia de radiación emitida y energía de los estados:

$$f = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (\text{conservación de la energía})$$

$$\Rightarrow f = \frac{E_i - E_f}{h} = \frac{1}{2} \frac{KZe^2}{h} \left(\frac{1}{r_f^2} - \frac{1}{r_i^2} \right)$$

3.- Momento angular cuantizado:


$$mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \quad n = 1, 2, 3\dots$$

$$\text{pero: } \frac{KZe^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r}$$

$$\Rightarrow v^2 = n^2 \frac{\hbar^2}{m^2 r^2} = \frac{KZe^2}{mr}$$

$$\Rightarrow r = n^2 \frac{\hbar^2}{mKZe^2} = n^2 \frac{a_0}{Z}$$

Primer radio de Bohr
 $a_0 = 0,0529nm$



$$\Rightarrow f = \frac{E_i - E_f}{h} = \frac{1}{2} \frac{KZe^2}{h} \left(\frac{1}{r_f^2} - \frac{1}{r_i^2} \right) = Z^2 \frac{mK^2e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Si $Z=1$

$$R = \frac{mK^2e^4}{4\pi c\hbar^3}$$

Recordemos que si un
átomo es
Hidrogenoide

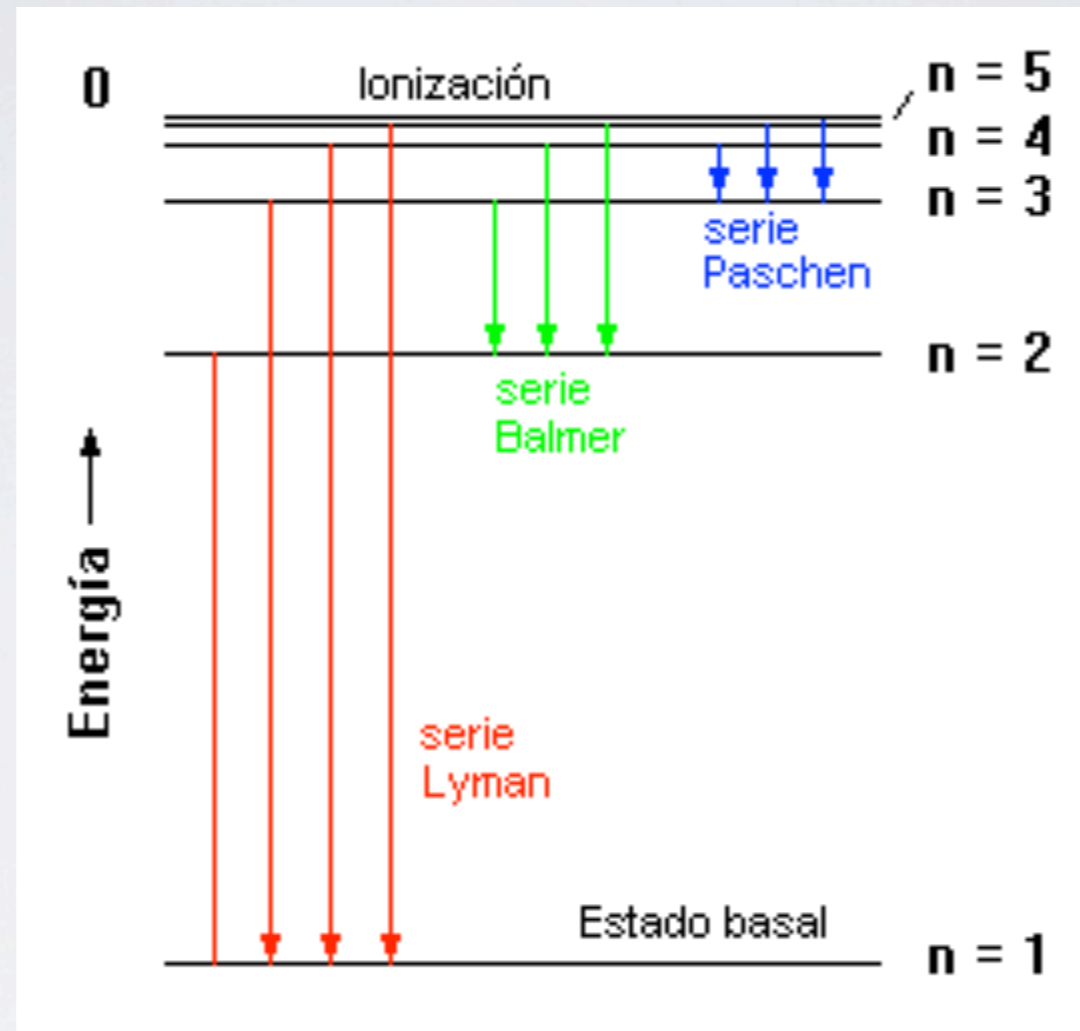
$$\Rightarrow E = -\frac{1}{2} \frac{KZe^2}{r^2}$$

$$\Rightarrow E_n = -Z^2 \frac{E_1}{n^2}$$

¿Cuáles son las energías permitidas del H?,
¿cuál es la energía de su estado fundamental?

$$E_1 = +13,6eV$$

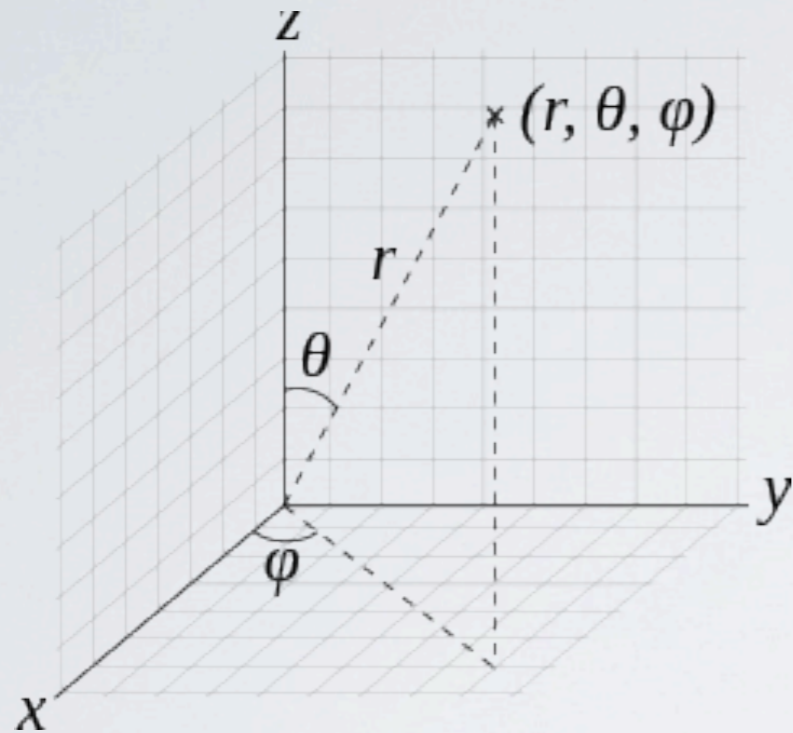
Se acostumbra a representar los niveles energéticos por:



Para ondas en una circunferencia, la condición de onda estacionaria es que quepan un número entero de longitudes de onda en la circunferencia. Esto es $n\lambda = 2\pi r$ con $n=1,2,3\dots$

Demostrar que esta condición para las ondas electrónica implica la cuantización de momento angular.

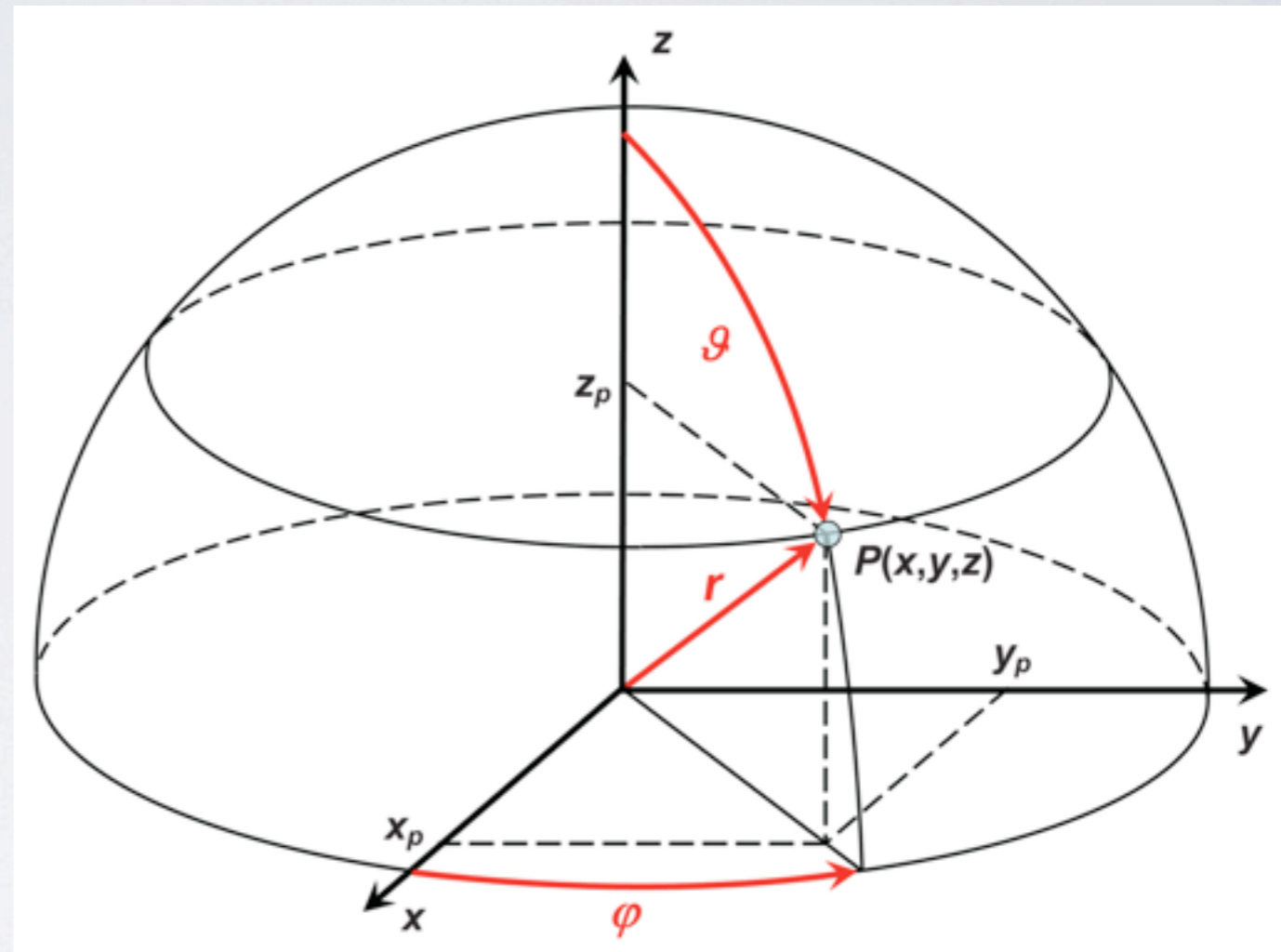
Ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas



$$z = r \cos \theta$$

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

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



Laplaciano en coordenadas esféricas

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

T: demostrar

Pero: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi = E \psi \Rightarrow ??$

Separación de variables: $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)F(\theta)G(\phi)$

Ecuación radial, en **U(r)**

Para que la función de onda sea continua y normalizable introduce 3 números cuánticos

Número cuántico asociado a:

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

r

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$$

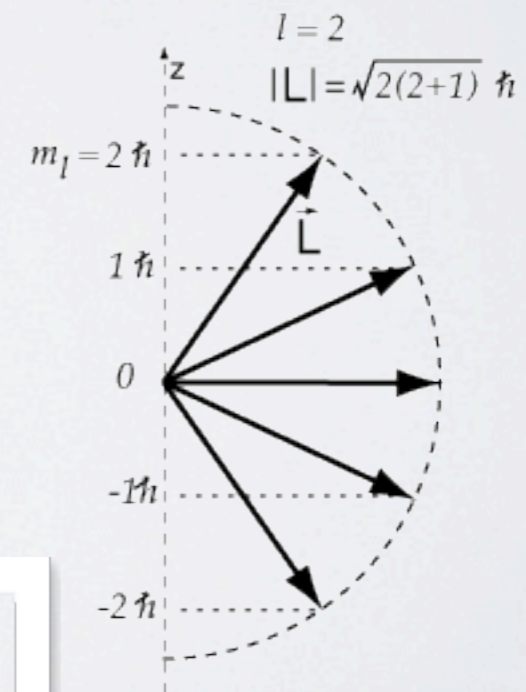
θ

$$m_l = -l, (-l + 1), \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, (l + 1), l$$

ϕ

Módulo de \mathbf{L} $L = \sqrt{l(l + 1)}\hbar$

Si la dirección del campo \mathbf{B} es z : $L_z = m_l \hbar$



¿De la figura qué se puede decir de las direcciones del espacio y cuál es el ángulo más pequeño entre \mathbf{L} y z ?

Funciones de onda y densidad de probabilidad

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas están caracterizadas por 3 números cuánticos y se expresan de la forma: ψ_{nlm}

Para el hidrógeno, la energía sólo depende de n y, por lo tanto pueden existir múltiples funciones de onda distintas que corresponden a la misma energía (excepto para $n=1$ por qué?). Estos niveles energéticos son, por lo tanto, degenerados.

El estado fundamental

Según Bohr ¿cuál es el valor de L para el estado base?

Desde el punto de vista de Schrödinger:

$$\psi_{1,0,0} = C_{1,0,0} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

Donde C es una constante de normalización que se determina por la condición de normalización:

$$\int_{R^3} |\psi|^2 dv = 1$$

Pero: $dv = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$

$$\Rightarrow \int_{R^3} |\psi|^2 dv = 4\pi C_{1,0,0}^2 \left(\int_0^\infty r^2 e^{-2zr/a_0} dr \right)$$

Pero: $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$

$$\Rightarrow C_{1,0,0} = ?$$

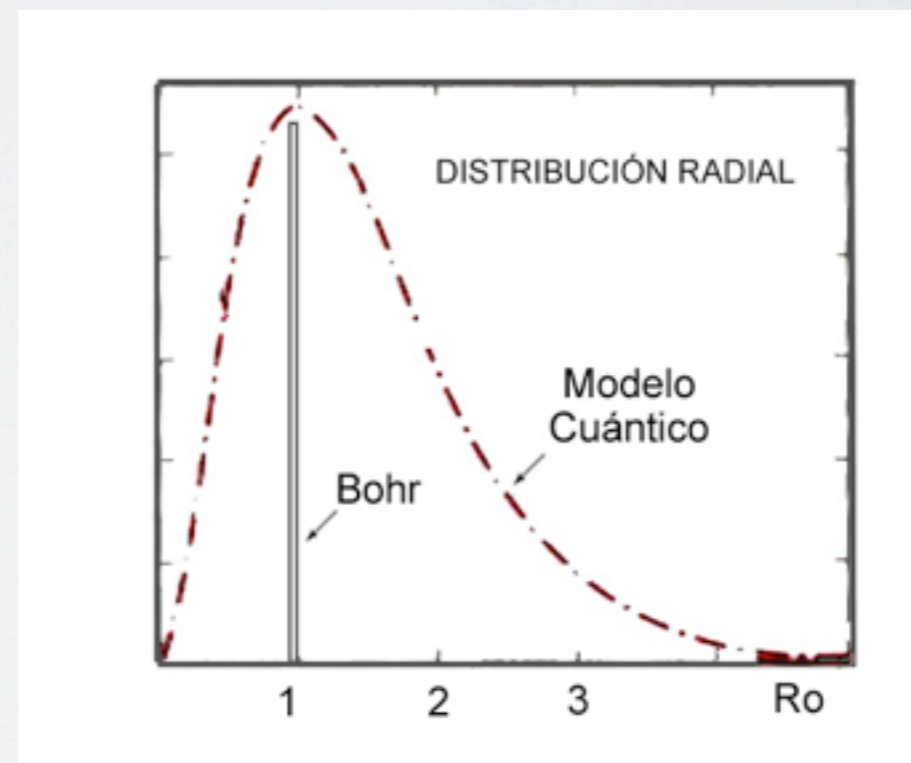
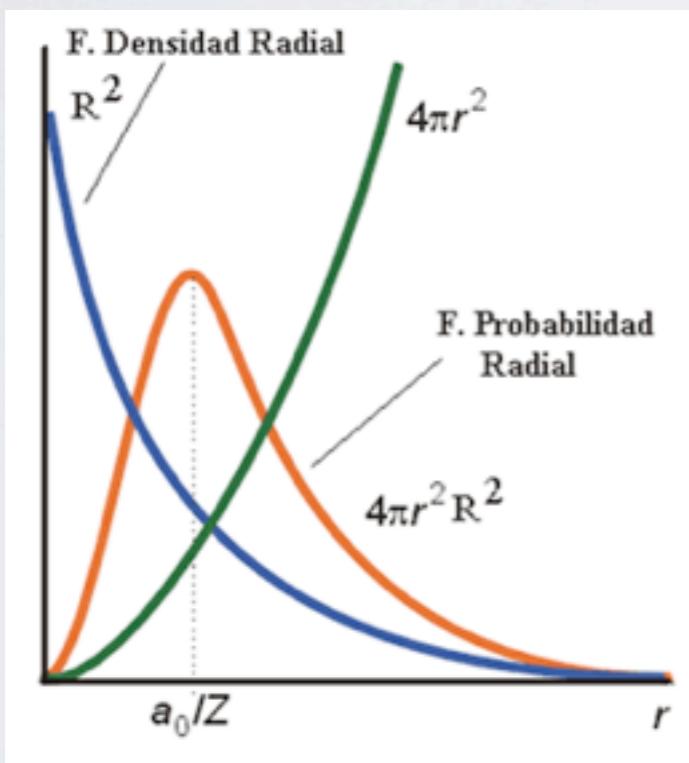
$$\Rightarrow \psi_{1,0,0} = ?$$

Densidad de probabilidad radial

La (densidad) de probabilidad (radial) de encontrar al electrón en un volumen dV es:

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2$$

¿Cuál es la densidad de probabilidad radial para el átomo de hidrógeno en el estado fundamental?



T: Calcular $P(r)$ para el primer estado excitado

Disertaciones

(30 minutos por grupo)

Temas a elegir:

Presentación+Informe
[deseable en LaTeX]

1.- Efecto Spín-Órbita y estructura fina.

2.- Tabla periódica de los elementos.

} 17 junio

3.- Enlace iónico y enlace covalente.

4.- Niveles energéticos y espectros de moléculas diatómicas.

} 19 junio

5.- Estructura de los sólidos e imagen microscópica de la conducción.

6.- Teoría de Banda de Sólidos, Uniones y dispositivos semiconductores.

} 21 junio

C2= Átomo de Bohr+Relatividad:26
de junio

