

I. ATOMO DE HIDROGENO

Si la energía potencial no depende del tiempo, $V = V(x)$, el electrón se puede encontrar en un estado estacionario. La ecuación de Schrödinger estacionaria es:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\right)\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad (1)$$

En el caso particular de un átomo con un solo electrón, el átomo de H, el potencial V será el llamado Potencial Coulombiano, dado por :

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\mathbf{r}} = -\kappa\frac{e^2}{\mathbf{r}} \quad (2)$$

donde \mathbf{r} es el vector de posición del electrón, es decir es el punto con coordenadas (x,y,z) y de magnitud $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. La ecuación de Schrödinger para el electrón, en tres dimensiones queda pues:

$$\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \quad (3)$$

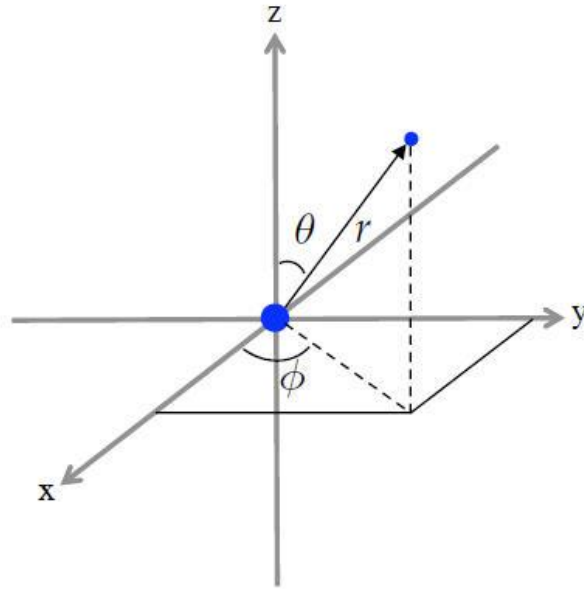
Si se usa la siguiente notación :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (4)$$

que se llama el *operador Laplaciano*, la ecuación (3) queda:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\nabla^2 - \kappa\frac{e^2}{r}\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (5)$$

ÁTOMO DE HIDRÓGENO



$$\Psi (r, \theta, \phi) = R (r) \Theta (\theta) \Phi (\phi) \quad (1)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{kZe^2}{r} \quad (2)$$

$$\hat{H}\Psi (r, \theta, \phi) = E\Psi (r, \theta, \phi) \quad (3)$$

SOLUCIONES DE ÁTOMO DE HIDRÓGENO

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \underbrace{R_{n,l}(r)}_{\text{radial}} \underbrace{\Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi)}_{\text{angular}} \quad (4)$$

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (5)$$

Números cuánticos

| | | | |
|-----|--|---|---|
| n | número cuántico principal (nivel de energía) | $n = 1, 2, 3, \dots$ | |
| l | número cuántico secundario (forma del orbital) | $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ | $l = 0 \rightarrow s$ $l = 1 \rightarrow p$ $l = 2 \rightarrow d$ $l = 3 \rightarrow f$... |
| m | número cuántico magnético (orientación del orbital) | $m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ | |

$$E_n = -\frac{R_y Z^2}{n^2} \quad R_y = 13.6 \text{ eV} \quad (6)$$

Recordar que para el hidrógeno

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 - \kappa \frac{e^2}{r}$$

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

R = parte radial de la función de onda

Y = armónicos esféricos (parte angular)

| n | l | m | Ψ | Ψ |
|---|---|----|-----------------|------------------|
| 1 | 0 | 0 | $\Psi_{1,0,0}$ | 1s |
| 2 | 0 | 0 | $\Psi_{2,0,0}$ | 2s |
| 2 | 1 | 0 | $\Psi_{2,1,0}$ | 2p ₀ |
| 2 | 1 | 1 | $\Psi_{2,1,1}$ | 2p ₁ |
| 2 | 1 | -1 | $\Psi_{2,1,-1}$ | 2p ₋₁ |
| 3 | 0 | 0 | $\Psi_{3,0,0}$ | 3s |
| 3 | 1 | 0 | $\Psi_{3,1,0}$ | 3p ₀ |
| 3 | 1 | 1 | $\Psi_{3,1,1}$ | 3p ₁ |
| 3 | 1 | -1 | $\Psi_{3,1,-1}$ | 3p ₋₁ |
| 3 | 2 | 0 | $\Psi_{3,2,0}$ | 3d ₀ |
| 3 | 2 | 1 | $\Psi_{3,2,1}$ | 3d ₁ |
| 3 | 2 | -1 | $\Psi_{3,2,-1}$ | 3d ₋₁ |
| 3 | 2 | 2 | $\Psi_{3,2,2}$ | 3d ₂ |
| 3 | 2 | -2 | $\Psi_{3,2,-2}$ | 3d ₋₂ |

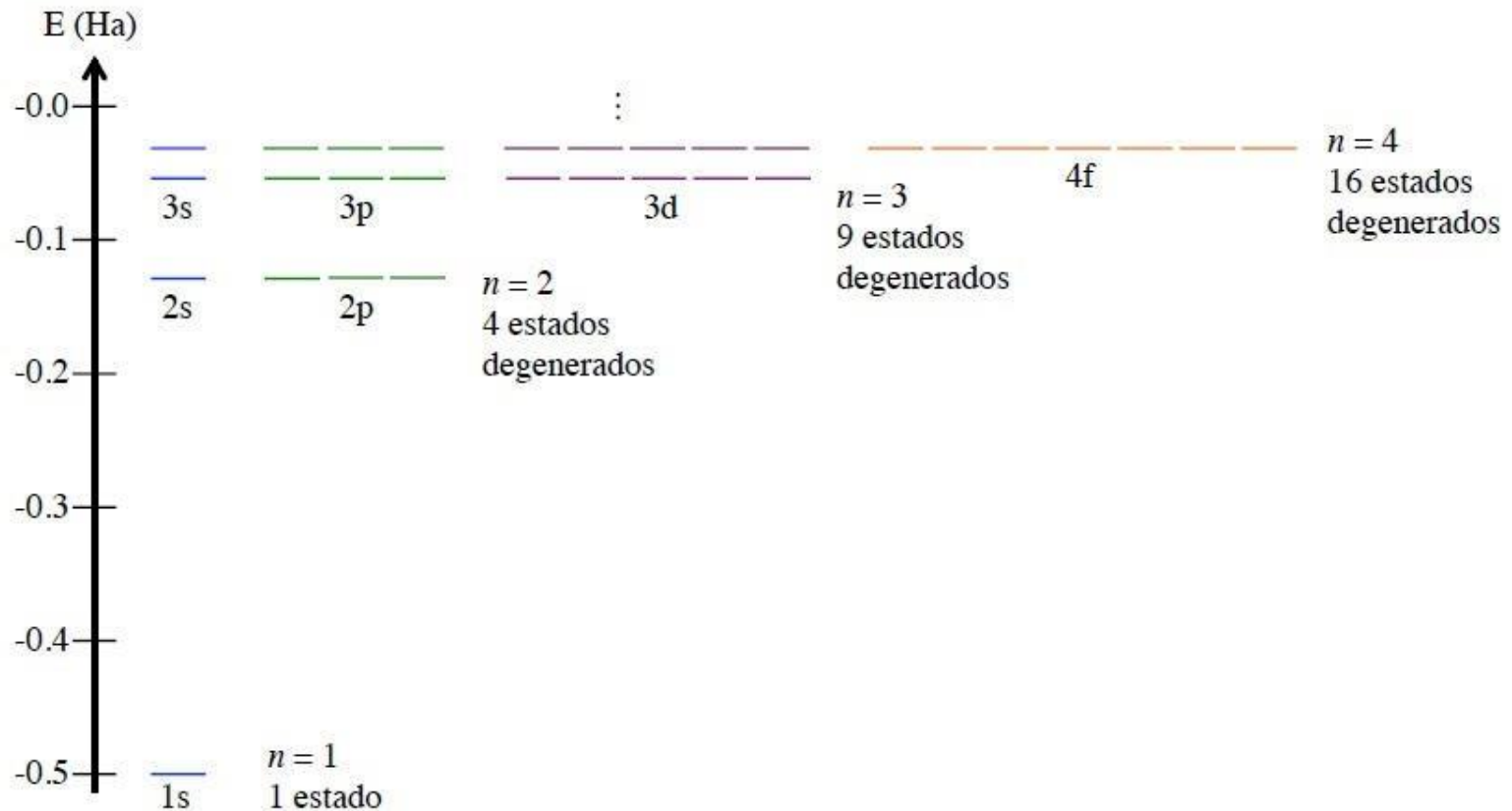
Funciones del hidrógeno

| n | l | m | $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$ | Orbital |
|-----|-----|-----|--|------------------|
| 1 | 0 | 0 | $\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi) = R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \phi)$ | Ψ_{1s} |
| 2 | 0 | 0 | $\Psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) = R_{2,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \phi)$ | Ψ_{2s} |
| 2 | 1 | 0 | $\Psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = R_{2,1}(r) Y_{1,0}(\theta, \phi)$ | Ψ_{2p_0} |
| 2 | 1 | 1 | $\Psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) = R_{2,1}(r) Y_{1,1}(\theta, \phi)$ | Ψ_{2p_1} |
| 2 | 1 | -1 | $\Psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi) = R_{2,1}(r) Y_{1,-1}(\theta, \phi)$ | $\Psi_{2p_{-1}}$ |
| 3 | 0 | 0 | $\Psi_{3,0,0}(r, \theta, \phi) = R_{3,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \phi)$ | Ψ_{3s} |
| 3 | 1 | 0 | $\Psi_{3,1,0}(r, \theta, \phi) = R_{3,1}(r) Y_{1,0}(\theta, \phi)$ | Ψ_{3p_0} |
| 3 | 1 | 1 | $\Psi_{3,1,1}(r, \theta, \phi) = R_{3,1}(r) Y_{1,1}(\theta, \phi)$ | Ψ_{3p_1} |
| 3 | 1 | -1 | $\Psi_{3,1,-1}(r, \theta, \phi) = R_{3,1}(r) Y_{1,-1}(\theta, \phi)$ | $\Psi_{3p_{-1}}$ |
| 3 | 2 | 0 | $\Psi_{3,2,0}(r, \theta, \phi) = R_{3,2}(r) Y_{2,0}(\theta, \phi)$ | Ψ_{3d_0} |
| 3 | 2 | 1 | $\Psi_{3,2,1}(r, \theta, \phi) = R_{3,2}(r) Y_{2,1}(\theta, \phi)$ | Ψ_{3d_1} |
| 3 | 2 | -1 | $\Psi_{3,2,-1}(r, \theta, \phi) = R_{3,2}(r) Y_{2,-1}(\theta, \phi)$ | $\Psi_{3d_{-1}}$ |
| 3 | 2 | 2 | $\Psi_{3,2,2}(r, \theta, \phi) = R_{3,2}(r) Y_{2,2}(\theta, \phi)$ | Ψ_{3d_2} |
| 3 | 2 | -2 | $\Psi_{3,2,-2}(r, \theta, \phi) = R_{3,2}(r) Y_{2,-2}(\theta, \phi)$ | $\Psi_{3d_{-2}}$ |

NIVELES DE ENERGÍA DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

$$E_n = -\frac{R_y Z^2}{n^2} \quad R_y = 13.6 \text{ eV}$$

$n \rightarrow$ número cuántico principal



ANÁLISIS DE LA PARTE ANGULAR

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \underbrace{\Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi)}_{\text{angular}} \quad (15)$$

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (16)$$

| n | l | m | $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$ | Orbital |
|-----|-----|-----|--|------------------|
| 1 | 0 | 0 | $\Psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi) = R_{1,0}(r) (1/4\pi)^{1/2}$ | Ψ_{1s} |
| 2 | 0 | 0 | $\Psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) = R_{2,0}(r) (1/4\pi)^{1/2}$ | Ψ_{2s} |
| 2 | 1 | 0 | $\Psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = R_{2,1}(r) (3/4\pi)^{1/2} \cos \theta$ | Ψ_{2p_0} |
| 2 | 1 | 1 | $\Psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) = R_{2,1}(r) (3/8\pi)^{1/2} \text{sen } \theta e^{i\phi}$ | Ψ_{2p_1} |
| 2 | 1 | -1 | $\Psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi) = R_{2,1}(r) (3/8\pi)^{1/2} \text{sen } \theta e^{-i\phi}$ | $\Psi_{2p_{-1}}$ |

- Las funciones son imaginarias excepto cuando $m \neq 0$
- Para eliminar la parte imaginaria hay que hacer combinaciones lineales

FUNCIONES DE ONDA HIDROGENOIDES.

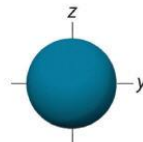
| n | l | m | R(r) | Y(θ,φ) | ψ |
|---|---|----|--|---|------------------|
| 1 | 0 | 0 | $2(Z/a)^{3/2} e^{-Zr/a}$ | $(1/4\pi)^{1/2}$ | 1s |
| 2 | 0 | 0 | $(Z/2a)^{3/2} (2 - Zr/a) e^{-Zr/2a}$ | $(1/4\pi)^{1/2}$ | 2s |
| 2 | 1 | 0 | $(1/\sqrt{3})(Z/2a)^{3/2} (Zr/a) e^{-Zr/2a}$ | $(3/4\pi)^{1/2} \cos \theta$ | 2p ₀ |
| 2 | 1 | 1 | $(1/\sqrt{3})(Z/2a)^{3/2} (Zr/a) e^{-Zr/2a}$ | $(3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{-i\phi}$ | 2p ₁ |
| 2 | 1 | -1 | $(1/\sqrt{3})(Z/2a)^{3/2} (Zr/a) e^{-Zr/2a}$ | $(3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{i\phi}$ | 2p ₋₁ |

FUNCIONES P REALES

| n | l | m | R(r) | χ(θ,φ) | ψ |
|---|---|----|--|---|-----------------|
| 2 | 1 | 0 | $(1/\sqrt{3})(Z/2a)^{3/2} (Zr/a) e^{-Zr/2a}$ | $(3/4\pi)^{1/2} \cos \theta$ | 2p _z |
| 2 | 1 | 1 | $(1/\sqrt{3})(Z/2a)^{3/2} (Zr/a) e^{-Zr/2a}$ | $(3/8\pi)^{1/2} \sin \theta \cos \varphi$ | 2p _x |
| 2 | 1 | -1 | $(1/\sqrt{3})(Z/2a)^{3/2} (Zr/a) e^{-Zr/2a}$ | $(3/8\pi)^{1/2} \sin \theta \sin \varphi$ | 2p _y |

Planos nodales:

- La función s ($l = 0$) no tiene planos nodales



- Las funciones p ($l = 1$) tienen 1 plano nodal

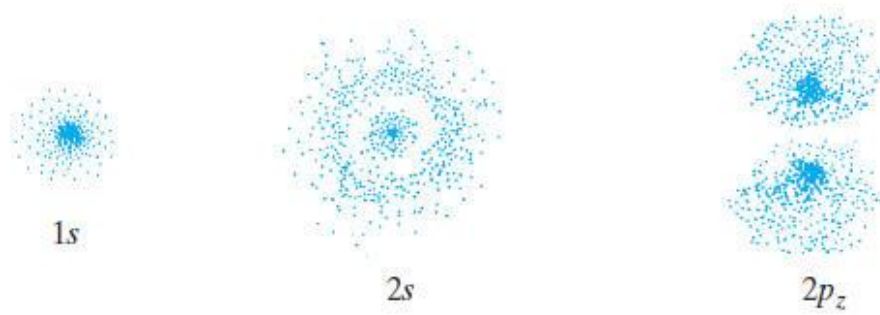
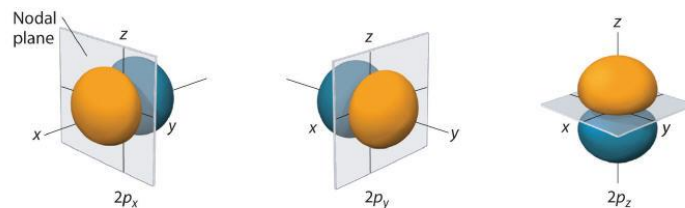
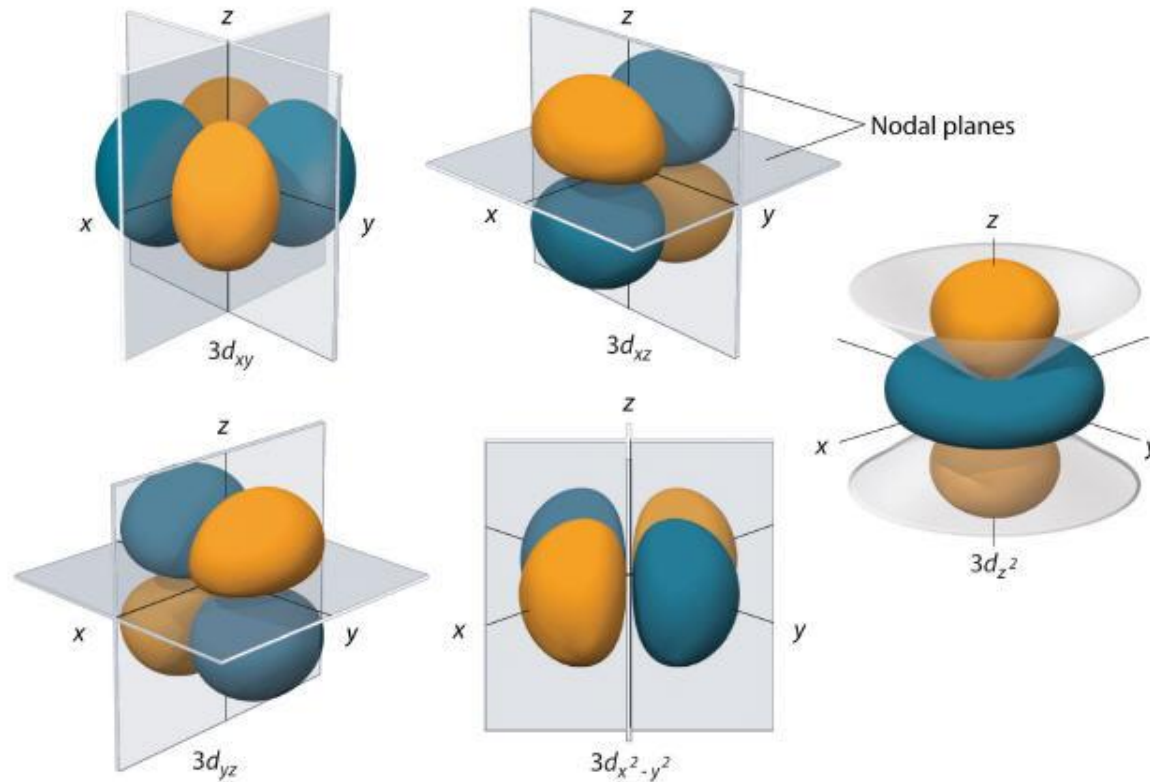


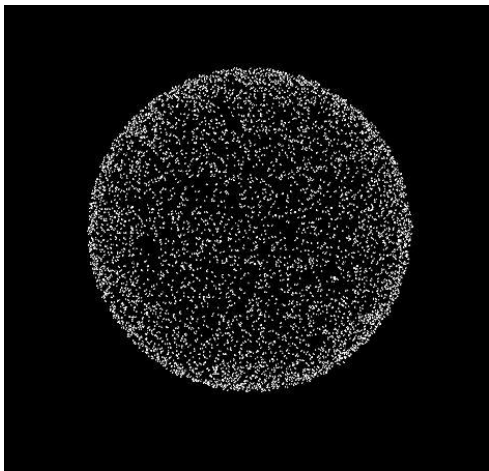
FIGURE 6.14 Probability densities for some hydrogen-atom states. [For accurate stereo plots, see D. T. Cromer, *J. Chem. Educ.*, **45**, 626 (1968).]

TABLE 4-2 ► Eigenfunctions for the Hydrogenlike Ion in Atomic Units

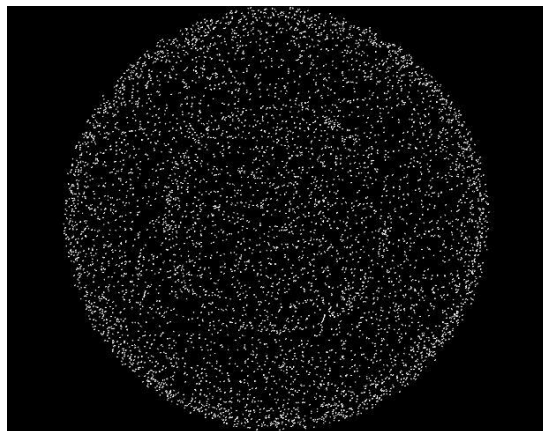
| Spectroscopic symbol | Formula |
|--|--|
| 1s | $(1/\sqrt{\pi})Z^{3/2}\exp(-Zr)$ |
| 2s | $(1/4\sqrt{2\pi})Z^{3/2}(2 - Zr)\exp(-Zr/2)$ |
| 2p _x | $(1/4\sqrt{2\pi})Z^{5/2}r\exp(-Zr/2)\sin\theta\cos\phi$ |
| 2p _y | $(1/4\sqrt{2\pi})Z^{5/2}r\exp(-Zr/2)\sin\theta\sin\phi$ |
| 2p _z | $(1/4\sqrt{2\pi})Z^{5/2}r\exp(-Zr/2)\cos\theta$ |
| 3s | $(1/81\sqrt{3\pi})Z^{3/2}(27 - 18Zr + 2Z^2r^2)\exp(-Zr/3)$ |
| 3p _x | $(\sqrt{2}/81\sqrt{\pi})Z^{5/2}r(6 - Zr)\exp(-Zr/3)\sin\theta\cos\phi$ |
| 3p _y | $(\sqrt{2}/81\sqrt{\pi})Z^{5/2}r(6 - Zr)\exp(-Zr/3)\sin\theta\sin\phi$ |
| 3p _z | $(\sqrt{2}/81\sqrt{\pi})Z^{5/2}r(6 - Zr)\exp(-Zr/3)\cos\theta$ |
| 3d _{z²} ($\equiv 3d_{3z^2-r^2}$) | $(1/81\sqrt{6\pi})Z^{7/2}r^2\exp(-Zr/3)(3\cos^2\theta - 1)$ |
| 3d _{x²-y²} | $(1/81\sqrt{2\pi})Z^{7/2}r^2\exp(-Zr/3)\sin^2\theta\cos 2\phi$ |
| 3d _{xy} | $(1/81\sqrt{2\pi})Z^{7/2}r^2\exp(-Zr/3)\sin^2\theta\sin 2\phi$ |
| 3d _{xz} | $(1/81\sqrt{2\pi})Z^{7/2}r^2\exp(-Zr/3)\sin 2\theta\cos\phi$ |
| 3d _{yz} | $(1/81\sqrt{2\pi})Z^{7/2}r^2\exp(-Zr/3)\sin 2\theta\sin\phi$ |

- Las funciones d ($l = 2$) tienen 2 planos nodales

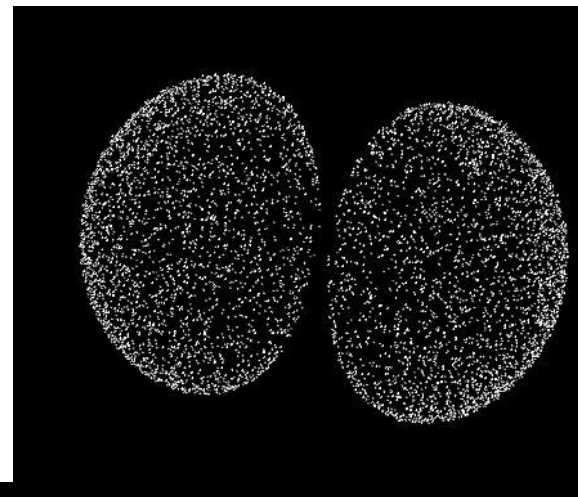




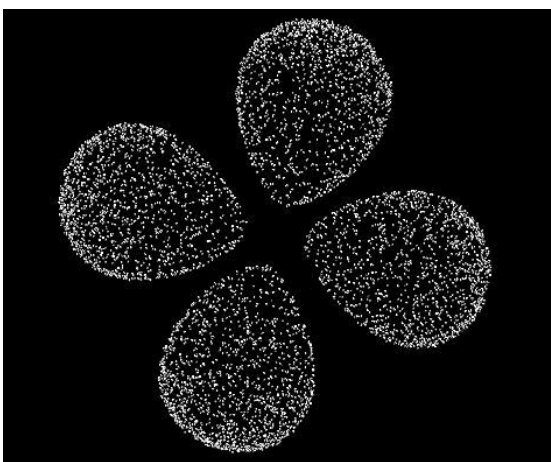
1s



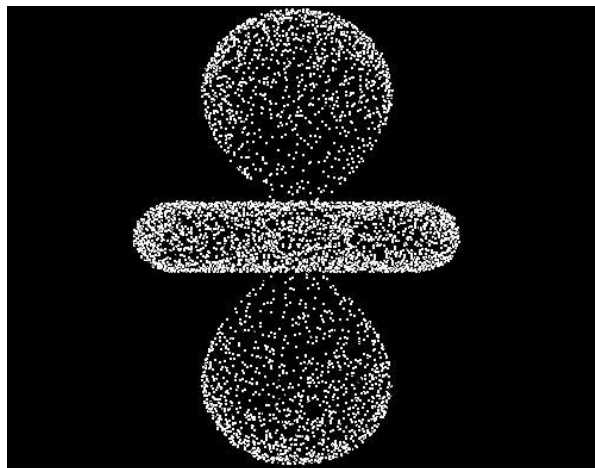
2s



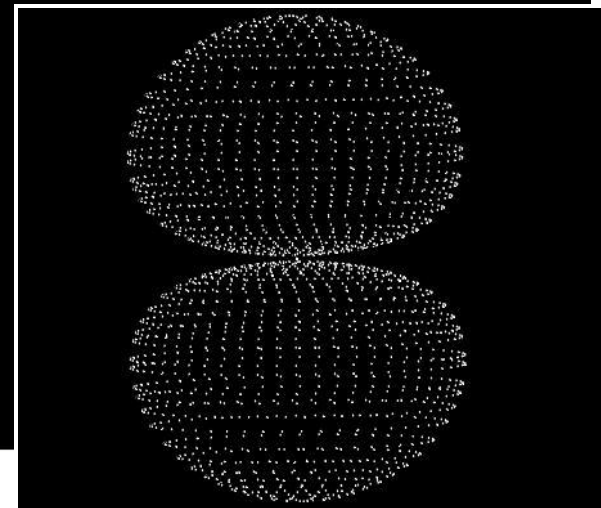
$2p_x$



$3d_{xy}$



$3d_{z^2}$



$2p_z$

Resumiendo:

Función 1s.

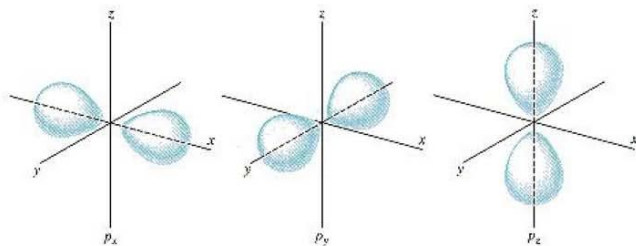
- No depende de los ángulos θ y φ sino solo de r : simetría esférica.
- La función se representa por una esfera.

Función 2s.

- También tiene simetría esférica pero se anula en $r = 2a$
- La probabilidad de encontrar al electrón a esa distancia del núcleo es cero (esfera nodal). La función cambia de signo al atravesar la esfera nodal.

Funciones 2p.

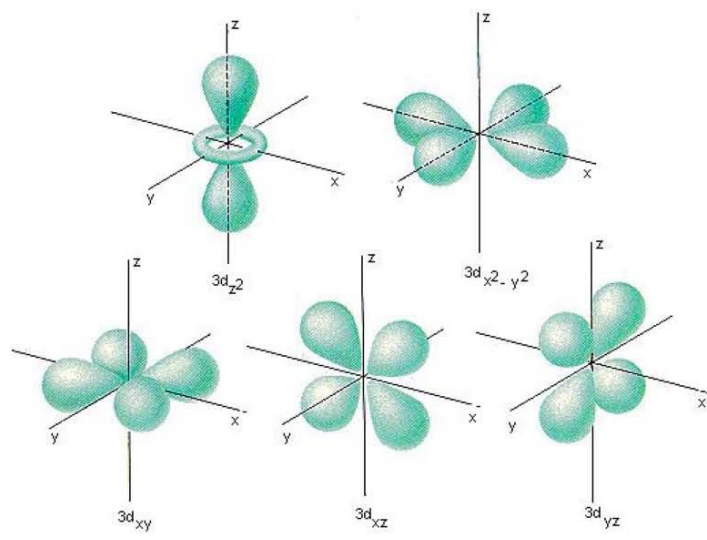
- Todas tienen la misma parte radial pero diferentes partes angulares.
- La función $2p_z$ tiene simetría cilíndrica alrededor del eje z . La función es nula en el plano xy (plano nodal).
- La función $2p_x$ tiene simetría cilíndrica alrededor del eje x . La función es nula en el plano yz (plano nodal).
- La función $2p_y$ tiene simetría cilíndrica alrededor del eje y . La función es nula en el plano xz (plano nodal).



Orbitales d.

Hay cinco orbitales d :

d_z , d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} , $d_{x^2 - y^2}$



Funciones de distribución radial:

3.3 Densidad de probabilidad radial.

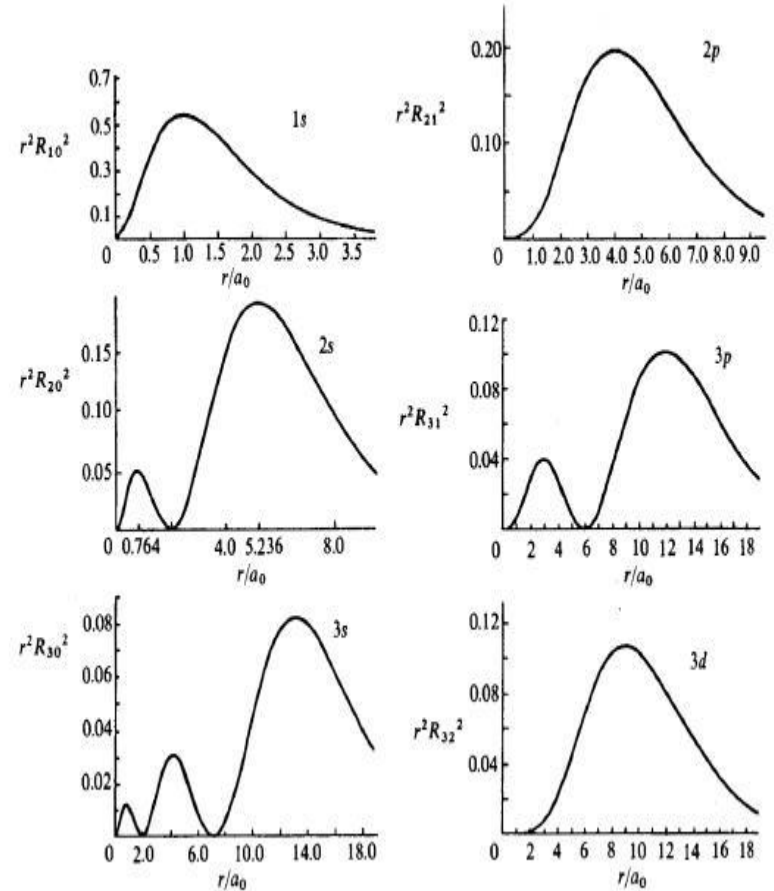
La probabilidad de encontrar al electrón a una distancia del núcleo comprendida entre r y $r+dr$, cualesquiera que sean los valores de los ángulos (θ, φ) está dada por:

$$dS = R_{nl}^2(r) r^2 dr \quad (3.12)$$

Se define entonces la densidad de probabilidad radial por la expresión:

$$\frac{dS}{dr} = R_{nl}^2(r) r^2 dr \quad (3.13)$$

41



3.4 Espín del electrón.

Los tres números cuánticos vistos hasta el momento, (n, l, m) , no son suficientes para dar una descripción completa del electrón. El electrón posee un momento magnético permanente μ que es de naturaleza cuántica, está cuantizado y solo puede tomar los valores siguientes

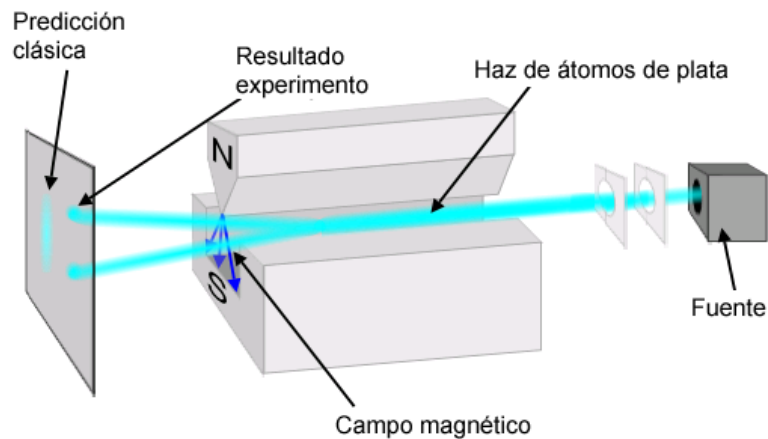
$$\mu = -2m_s \mu_B$$

donde μ_B es la unidad de medida del momento magnético (magnetón de Bohr) y

$$m_s = \pm 1/2$$

es el llamado número cuántico de espín.

Hacen falta pues cuatro números cuánticos (n, l, m, m_s) para caracterizar completamente el estado de un electrón.



$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 - \kappa \frac{e^2}{r}$$

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

| n | l | m | Ψ | Incluyendo espín |
|---|---|----|-----------------|----------------------|
| 1 | 0 | 0 | $\Psi_{1,0,0}$ | (1,0,0,1/2) |
| | | | | (1,0,0,-1/2) |
| 2 | 0 | 0 | $\Psi_{2,0,0}$ | (2,0,0,1/2) |
| | | | | (2,0,0,-1/2) |
| 2 | 1 | 0 | $\Psi_{2,1,0}$ | (2,1,0,1/2) |
| | | | | (2,1,0,-1/2) |
| 2 | 1 | 1 | $\Psi_{2,1,1}$ | |
| 2 | 1 | -1 | $\Psi_{2,1,-1}$ | |
| 3 | 0 | 0 | $\Psi_{3,0,0}$ | |
| 3 | 1 | 0 | $\Psi_{3,1,0}$ | |
| 3 | 1 | 1 | $\Psi_{3,1,1}$ | |
| 3 | 1 | -1 | $\Psi_{3,1,-1}$ | |
| 3 | 2 | 0 | $\Psi_{3,2,0}$ | |
| 3 | 2 | 1 | $\Psi_{3,2,1}$ | (3,2,1,1/2) |
| | | | | (3,2,1,-1/2) |
| 3 | 2 | -1 | $\Psi_{3,2,-1}$ | |
| 3 | 2 | 2 | $\Psi_{3,2,2}$ | |
| 3 | 2 | -2 | $\Psi_{3,2,-2}$ | (3,2,-2,1/2) |
| | | | | (3,2,-2,-1/2) |