



Universidad Autónoma de Baja California-FIAD



Física Moderna

Modelo de Bohr y números cuánticos

Profesor: Mata Ramírez Jorge Octavio

Grupo 751

11 de Diciembre de 2021

Modelo de Bohr

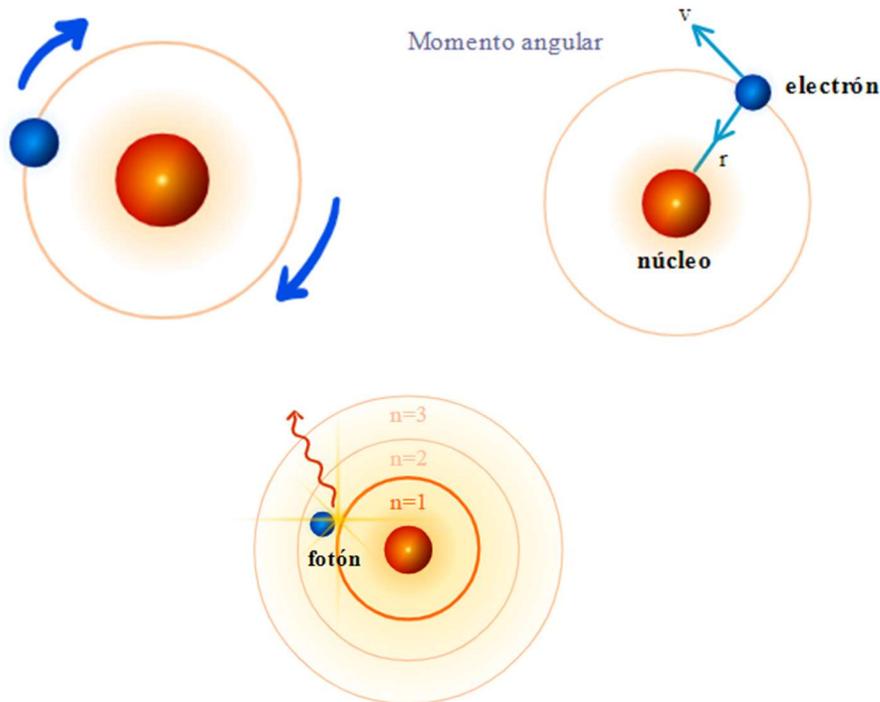
El físico danés Niels Bohr, propuso una explicación de por que los elementos presentan espectros de emisión y absorción, también el por que era diferentes entre sí, todo ese trabajo fue con ayuda de las aportaciones de Max Planck acerca de los cuantos o fotones y el de Gustav Kirchoff, el cual estudio el color que emitía una flama de mechero al quemar determinada sustancia.

Bohr dedujo que los electrones se encuentran en orbitas definidas y giran, también que cada orbita tiene una cantidad de energía por esto mismo, los llamo niveles de energía. Planteó que, en estado basal, los electrones se encuentran girando en torno a su nivel de energía (así como el sistema solar), pero estos pueden cambiar de nivel, para que esto ocurra necesitan absorber energía, si el electrón salta a un nivel de energía superior, adquiere un estado excitado, de manera que genera un espectro de absorción.

Cuando regresa a su estado basal, emite una energía que tiene forma de luz o fotones, produciendo un espectro de emisión. Todo esto lo comprobó y tuvo éxito, de manera que lo pudo predecir con precisión basándose con su modelo del espectro de hidrógeno.

En este modelo se tienen 3 postulados que sus principios aplican en el átomo de hidrógeno.

1. El electrón gira alrededor del núcleo, en una orbita la cual tiene energía fija y definida.
2. El electrón solo puede girar en orbitas cuantizadas (cuando tienen cierta cantidad de energía) cuyo radio cumpla con el momento angular.
3. Cuando el electrón cambia de una orbita externa a una más interna, la diferencia de energías que hay entre las orbitas se emiten como una radiación electromagnética.



Ahora bien, si queremos deducir las expresiones que nos permiten calcular la energía y el radio de las orbitas de Bohr, está basado en 3 postulados básicos:

- I. Los electrones solamente pueden encontrarse en órbitas discretas de energía E_n . El movimiento de los electrones de las orbitas, tiene lugar sin emisión de energía.

$$E = T + V = \frac{1}{2} m_e v^2 - k \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r}$$

- II. Solo se emite o se absorbe energía al pasar el electrón de una orbita a otra y esta se emite o absorbe en forma de radiación electromagnética. Es decir, de un fotón de energía $h\nu$ igual a la diferencia energética entre las orbitas, $E_n - E_n'$.

$$E_\gamma = h\nu = E_{n_f} - E_{n_i}$$

Donde n_i es la órbita inicial y n_f la final y ν la frecuencia

De esta manera las frecuencias de los fotones (emitidos y absorbidos) en la transición será:

$$\nu = \frac{k^2 m_e Z^2 e^4}{2h\hbar^2} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

Pero hay veces en que no se da frecuencia y nos proporcionan la inversa de la longitud de onda y este postulado nos ayuda a entender como se describen las líneas espectrales por Balmer, en la desexcitación del hidrogeno:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{k^2 m_e Z^2 e^4}{2hc\hbar^2} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad \therefore \quad \bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

- III. El momento angular del electrón en la órbita n ésima es:

$$\left| \vec{L} \right| = n \frac{h}{2\pi}$$

Donde h es la constante de Planck, n un numero entero positivo y L es también equivalente a mvr (multiplicación de masa, velocidad y radio) .

De igual forma se puede expresar como:

$$L = m_e v r = n\hbar$$

De manera que se pueda sustituir v :

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{k m_e Z e^2}$$

Y al sustituir los radios permitidos en la expresión para obtener la energía correspondiente a cada nivel quedaría:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{k^2 m_e Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2}$$

De esta manera se puede expresar el resto de energías para cualquier Z y n como:

$$E_n = \frac{Z^2}{n^2} E_0$$

Con base a la aportación anterior se supo que cada orbita corresponde con un nivel energético que tiene el nombre de número cuántico y se representa con la letra “n” los cuales tienen valores de 1 hasta 7 o son también identificables como letras del alfabeto desde la K a la Q.

Órbita o nivel de energía	Número de electrones
K	2
L	8
M	18
N	32
O	32
P	18
Q	8

Estos niveles de energía tienen relación con el principio de Aufbau el cual nos dice como representar las capas de un átomo y los electrones que lleva la misma en función de la orientación.

Nivel	Orbitales
1-K	s
2-L	s p
3-M	s p d
4-N	s p d f
5-O	s p d f g
6-P	s p d f g h
7-Q	s p d f g h i

Números cuánticos

¿Qué son los números cuánticos?, a simples palabras es un valor que es usado para describir niveles de energía disponibles para las moléculas y átomos, nos describe la probabilidad en la que se puede encontrar un electrón en determinada región. El electrón en un átomo puede tener cuatro números cuánticos de tal forma que describa su estado.

Estos cuatro números cuánticos describen el movimiento y las trayectorias de cada electrón dentro de un átomo por completo, la combinación de todos estos números de todos los electrones de un átomo esta descrita por una función de onda que cumple con la ecuación de Schrödinger.

Números cuánticos

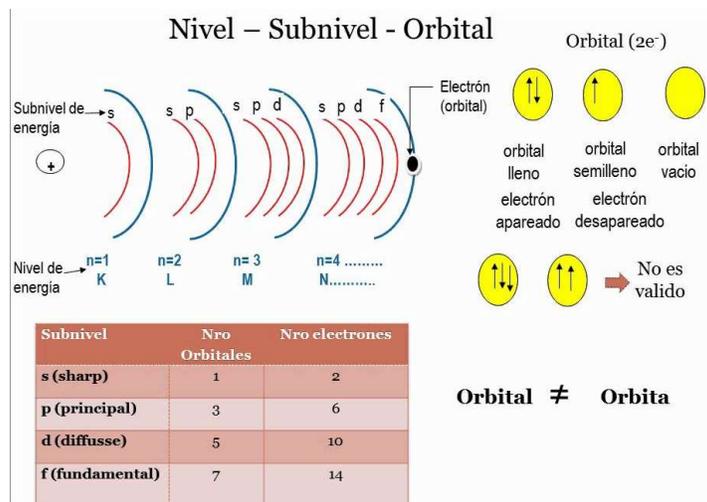
- El número cuántico principal “n” nos indica el tamaño
- El numero secundario o azimutal “ ℓ ” nos indicara la forma
- El número magnético “ m_ℓ ” nos indicara la orientación.
- El número de spin “ m_s ” nos indica como el electrón rota, si a favor o en contra de las manecillas del reloj.

Los números “n, ℓ , m_ℓ ” provienen de resolver la ecuación de probabilidad de Schrödinger. Y posteriormente m_s fue introducida la cual tiene valores de $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$ de manera que indica los espectros atómicos.

Un dato interesante de estos cuatro números cuánticos, es que es independiente para cada electrón, es decir, es distinto para cada electrón, ya que puede haber la posibilidad de que estén en distinta región o incluso en la misma, pero con una rotación distinta, por ende, no puede haber mas de un electrón con los mismos números cuánticos.

En la siguiente imagen se muestran los siguientes datos mencionados de manera visual.

Elemento	Z	Diagrama de orbitales				Configuración electrónica
		1s	2s	2p	3s	
H	1	↑				$1s^1$
He	2	↑↓				$1s^2$
Li	3	↑↓	↑			$1s^2 2s^1$
Be	4	↑↓	↑↓			$1s^2 2s^2$
B	5	↑↓	↑↓	↑		$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	↑↓	↑↓	↑	↑	$1s^2 2s^2 2p^2$



n (principal)	<ul style="list-style-type: none"> *Tamaño/energía [1-7] y cuanto mayor sea el número, mayor energía tendrá. *Define el nivel de energía principal donde puede estar el electrón *La distancia media de los electrones al núcleo *Volumen del orbital
ℓ (secundario/azimutal)	<ul style="list-style-type: none"> *Forma/nivel de energía [0-(n-1)]. s=0, p=1, d=2, f=3 *Define la energía de los subniveles en que se divide cada nivel principal. *Superficie de los orbitales.
m_ℓ (magnético)	<ul style="list-style-type: none"> *Orientación de orbitales [-ℓ...0...ℓ] *Nos dice como está la orientación en función al cuadrante, ya sea "x,y,z" *Representa la posible orientación de los subniveles en el campo magnético del átomo. *Define los orbitales
m_s (espín)	<ul style="list-style-type: none"> *Rotación del e^- sobre sí mismo. [+1/2 o -1/2] este puede ser a favor o en contra de las manecillas del electrón. *Indica el sentido de giro del electrón en su desplazamiento alrededor del núcleo

Los números cuánticos están basados en la teoría de Niels Bohr que anteriormente fue explicada, los cuales también fueron derivados de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, surgen a raíz de solucionar dicha ecuación, ya que hay restricciones o condiciones que se deben tomar en cuenta para que se adapte a una situación física.

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi)$$

n
 número
cuántico
principal

ℓ
 número
cuántico
orbital

m_ℓ
 número
cuántico
magnético

