Universitat de les Illes Balears
Departament de Química

El modelo está desarrollado para un átomo hidrogenoide, en el que la carga del núcleo vale +Ze y la carga del electrón es -e

Fuerza centrífuga del electrón de masa m_e que se mueve con una velocidad de módulo v en una órbita de radio r con movimiento circular uniforme:

$$F_c = \frac{m_e v^2}{r} \qquad [1]$$

Fuerza de atracción electrostática entre núcleo y electrón:

$$F_e = -\frac{(Ze)e}{4\varepsilon_0 \pi r^2} \qquad [2]$$

- 1er postulado:
  <u>Las fuerzas electrostáticas y centrífugas están equilibradas:</u>

$$F_c + F_e = 0 \qquad [3]$$

Lo cual significa que:

$$\frac{m_e v^2}{r} - \frac{Ze^2}{4\varepsilon_0 \pi r^2} = 0 \quad [4]$$

Es decir:

$$m_e v^2 = \frac{Ze^2}{4\varepsilon_0 \pi r} \quad [5]$$

✓ ¿Cuánto vale la energía cinética, T, del electrón?

Teniendo en cuenta que:

$$T = (1/2)\, mv^2 \quad [6]$$

y la expresión de $m_e v^2$ de la ecuación 5

$$T = \frac{1}{2}\frac{Ze^2}{4\varepsilon_0 \pi r} \quad [7]$$

que es la expresión de la energía cinética en función de los parámetros constantes del sistema y de la variable radial

✓ ¿Cuánto vale la energía potencial del sistema (potencial electrostática del electrón)?

La energía potencial electrostática correspondiente a la fuerza F_e es igual a

$$V = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad [8]$$

que es la expresión de la energía potencial en función de los parámetros constantes del sistema y de la variable radial

✓ ¿Cuánto vale la energía total del sistema (suma de potencial y electrostática)?

Para calcular la energía total E, se ha de sumar las ecuaciones 7 y 8 (E = T+ V). Por tanto

$$E = -\frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad [9]$$

que es la expresión de la energía total del átomo hidrogenoide en función de los parámetros constantes del sistema y de la variable radial

- 2º postulado:

El segundo postulado indica que no todas las órbitas están permitidas, si no sólo aquellas que cumplen que el módulo de su momento angular, L, sea un múltiplo entero de h/2π. Es decir

$$|L| = n\frac{h}{2\pi}; \qquad |L| = rm_e v \quad n = 1,2,3,\ldots\ldots \quad [10]$$

✓ ¿Cuánto vale el radio de las órbitas permitidas?
Se ha de tener en cuenta que para un movimiento circular como el que estamos tratando, $|L| = rm_e v$ y que, por tanto la condición de [10] se expresa como:

$$rm_e v = n\frac{h}{2\pi} \quad [11]$$

Lo que quiere decir que la velocidad también está cuantizada en la forma

$$v = n\frac{h}{2\pi r m_e} \quad [12]$$

Que cuando se sustituye en la ecuación 6 que es igual a 7, queda

$$\frac{1}{2}m_e\left(n\frac{h}{2\pi r m_e}\right)^2 = \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad [13]$$

Simplificando términos y despejando el valor de r, se obtiene [14]

$$r = \frac{h^2\varepsilon_0}{\pi m_e e^2}\frac{n^2}{Z} = a_0\frac{n^2}{Z}$$

Donde a_0 es el radio de la primera órbita de Bohr para el átomo de hidrógeno.

✓ ¿Cuánto vale la energía total de las órbitas permitidas?

Sustituyendo el valor de r, ecuación [14], en la ecuación [9] que da la energía total del sistema, se obtiene después de simplificar la ecuación siguiente [15]

$$E = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r} = -\frac{m_e e^4}{8h^2\varepsilon_0^2}\frac{Z^2}{n^2}$$

✓ ¿Cuánto vale la velocidad del electrón en las órbitas permitidas?

De acuerdo con [5] la velocidad de las órbitas:

$$v^2 = \frac{1}{m_e}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

Sustituyendo el valor de r de la ecuación [14] en la expresión anterior y despejando el valor de v, se obtiene,

$$v = \frac{Ze^2}{2\varepsilon_0 h}\frac{1}{n} \quad [16]$$

- 3er postulado

El tercer postulado asume que para que un electrón pueda cambiar de estado por interacción con la radiación electromagnética (fotón), la energía de esta radiación debe ser exactamente igual a la diferencia de energía de los estados entre los que se intercambia el electrón. Si E_1 es la energía del electrón en el estado n_1 y E_2 es la energía del electrón en el estado n_2, entonces, la energía del fotón, E_f, que provoca el tránsito entre estos dos estados es:

$$E_f = E_2 - E_1 \quad [17]$$

✓ ¿Cuánto vale la diferencia de energía entre dos niveles permitidos?

De acuerdo con [15] la diferencia de energía entre dos niveles permitidos cuyos números cuánticos valen n_1 y n_2 respectivamente es la ecuación [18]

$$E_2 - E_1 = \frac{m_e e^4 Z^2}{8h^2 \varepsilon_0^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

✓ ¿Cuánto vale la energía de la luz que pasa al electrón desde un nivel a otro de energía?

Exactamente la misma que la de la ecuación [17]

✓ ¿Cuánto vale la frecuencia de esa radiación electromagnética?

La energía del fotón, $E_f = h\nu$, siendo ν la frecuencia del fotón. Combinando esta igualdad con las ecuaciones 17 y 18 y despejando el valor de la fecuencia de la radiación se obtiene que la siguiente expresión 19,

$$\nu = \frac{m_e e^4 Z^2}{8h^3 \varepsilon_0^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$