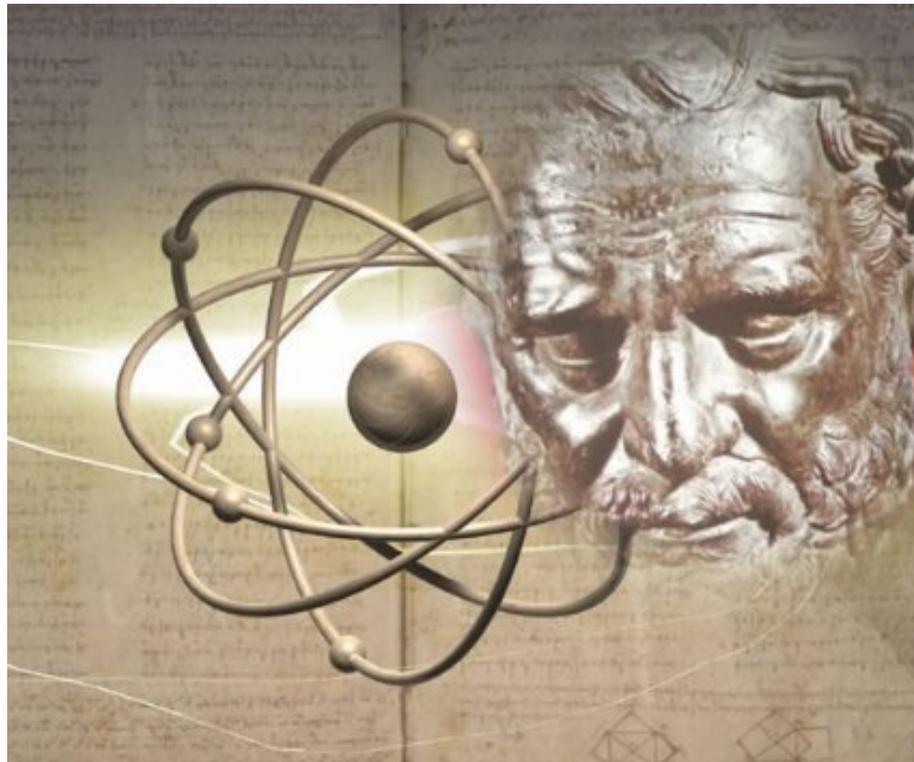


# Evolución Histórica Mecánica Ondulatoria



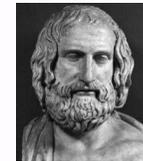
- \* Diaz Peña, M.; Roig Muntaner, A., "*Química Física*", Volumen 1, Alambra Universidad, 1985. **Capítulo 1 y 2.**
- \* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "*Chemical Structure and Bonding*", University Science Books, 1989. **Capítulo 1.**
- \* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*", 3ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 2. (En la 4ª ha sido suprimido)**
- \* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "*Cálculos básicos en estructura atómica y molecular*", Ed. Vicens-Vives, 1988. **Capítulo 3 y 4.**
- \* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "*Inorganic Chemistry*", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. **Capítulo 1.**  
Traducción española de la 2ª Ed. "*Química Inorgánica*", Pearson Prentice Hall, 2006. **Capítulo 1.**

- \* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 1.**
- \* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "*Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry*", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 1.**
- \* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "*Chemical Bonding and Molecular Geometry*", Oxford University Press, 2001. **Capítulo 3.**

## Revisión histórica

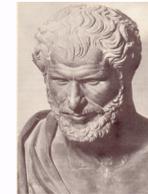
**Anaxágoras** (500-428 a.c.)

Existencia de partículas (“*gérmenes*”), tal que la materia se compone de gérmenes invisibles.  
*sin diferenciar germen de elemento / germen de compuesto*



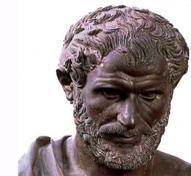
**Demócrito** (470-380 a.c.)

Naturaleza compuesta de “*átomos*”, que difieren sólo en tamaño y forma.  
*la parte más pequeña en que se puede dividir la materia y que ya no es divisible*



**Aristóteles**

Más filosofía que ciencia. La materia no tiene existencia real.

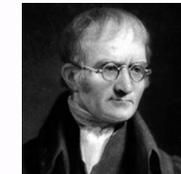


**Dalton** (1766-1844)

Tratamiento atómico de la química, ideas de Demócrito basadas en medidas (pesadas).

“*átomo*”, esférico e indivisible

*sin diferenciar partícula de elemento / partícula de compuesto*



\* Babor, A. B.; Ibarz, J., “*Química General Moderna*”, Editorial Marin S. A., 1983. **Capítulo 10 y 11.**

\* Lagowski, J. J., “*Modern Inorganic Chemistry*”, Marcel Dekker Inc, 1973.

Traducción española: “*Química Inorgánica Moderna*”, Reverté, 1978. **Capítulo 1.**

## Revisión histórica

Faraday (1830-1833)

Fenómenos de hidrólisis en disolución. Naturaleza eléctrica del átomo - *Divisibilidad*



Arrhenius

Teoría de la disociación electrolítica - iones (*rechazado en su época*)



Herz (1887)

Efecto fotoeléctrico



Mendelejew (1896) (*Dmitri Ivanovich Mendelejew*)

Ordenación de los elementos según un novedoso Sistema Periódico



J. J. Thompson (XIX-XX)

Identifica las partículas subatómicas: Electrón (-) y Protón (+)

Se les supone dispuestos homogéneamente en el átomo, compacto

(*Tubos de descarga*)

(*lectura*)



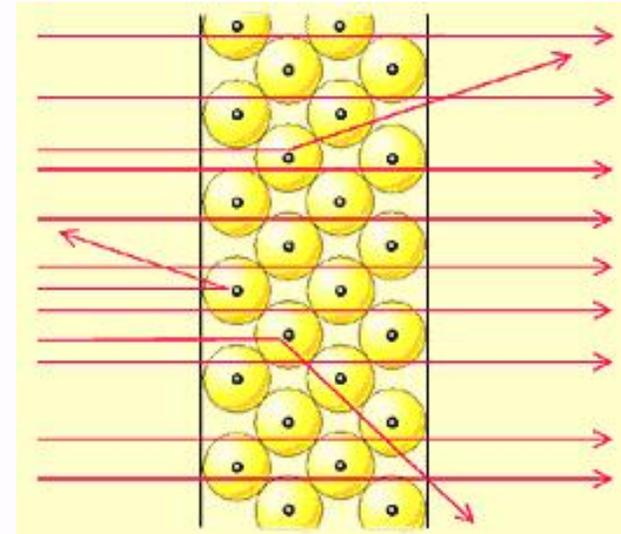
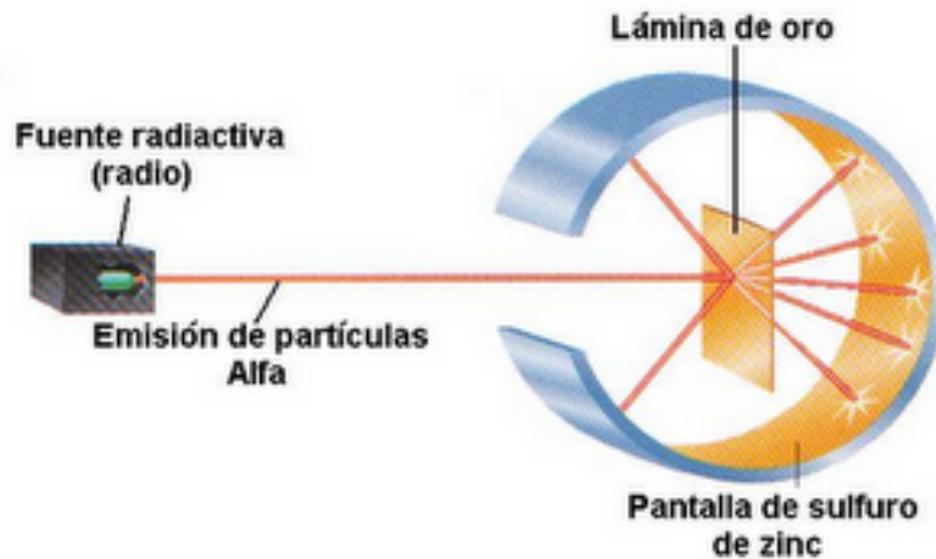
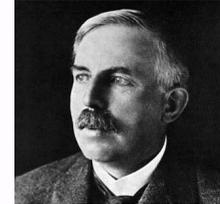
\* Babor, A. B.; Ibarz, J., "Química General Moderna", Editorial Marín S. A., 1983, pp 153.

\* Mahan, B. M.; Myers, R. J., "Química. Curso Universitario", 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, pp 398.

## Revisión histórica

Rutherford (1911) (lectura)

Bombardeo de láminas metálicas con partículas  $\alpha$  ( $\text{He}^{2+}$ )



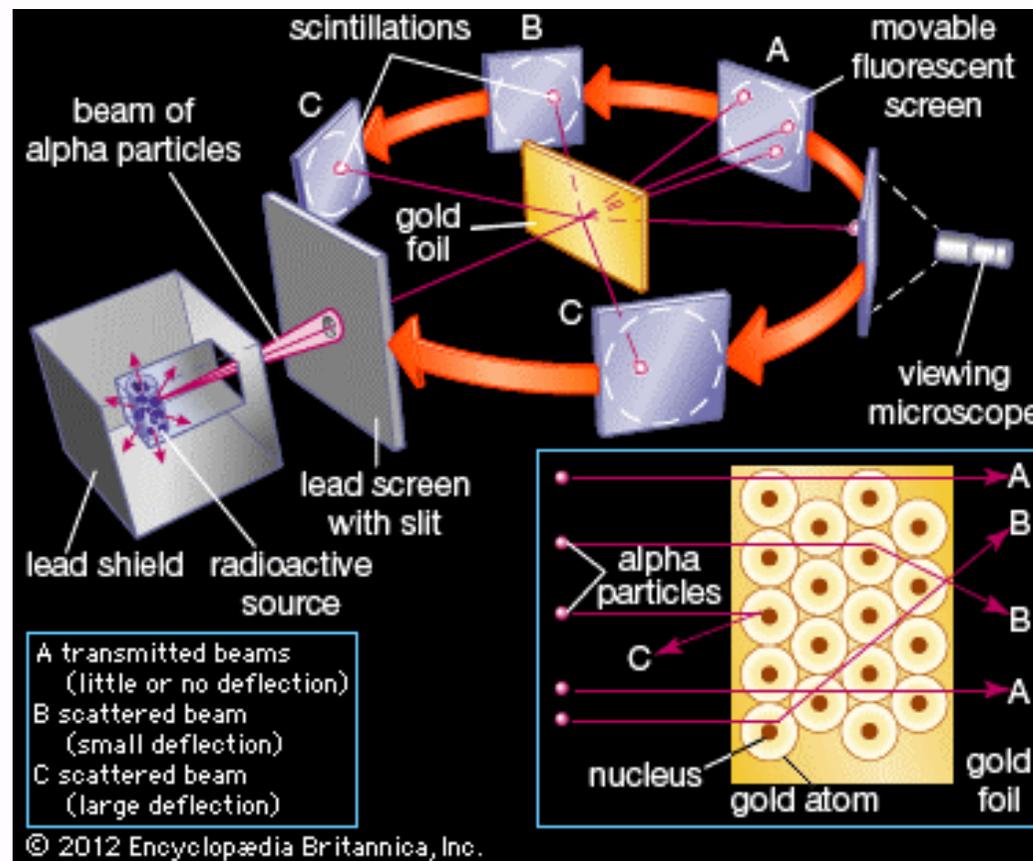
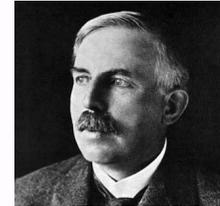
\* Diaz Peña, M.; Roig Muntaner, A., "Química Física", Volumen 1, Alambra Universidad, 1985, pp 7.

\* Mahan, B. M.; Myers, R. J., "Química. Curso Universitario", 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, pp 403.

## Revisión histórica

Rutherford (1911) (lectura)

Bombardeo de láminas metálicas con partículas  $\alpha$  ( $\text{He}^{2+}$ )



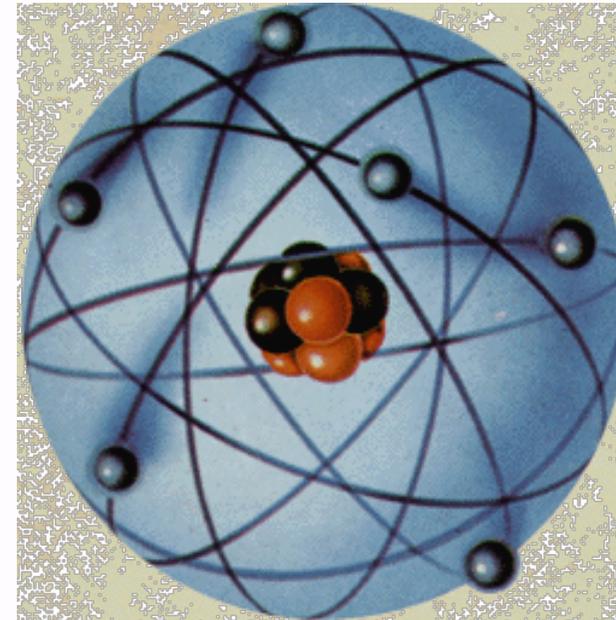
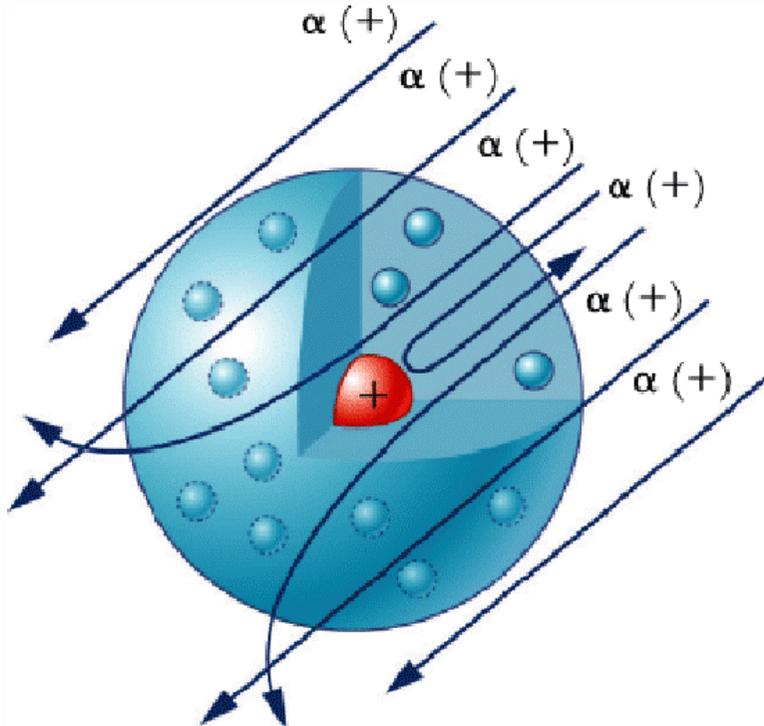
\* Diaz Peña, M.; Roig Muntaner, A., "Química Física", Volumen 1, Alambra Universidad, 1985, pp 7.

\* Mahan, B. M.; Myers, R. J., "Química. Curso Universitario", 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, pp 403.

## Revisión histórica

Rutherford (1911) (lectura)

Bombardeo de láminas metálicas con partículas  $\alpha$  ( $\text{He}^{2+}$ )

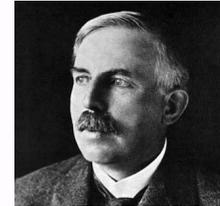


\* Diaz Peña, M.; Roig Muntaner, A., "Química Física", Volumen 1, Alambra Universidad, 1985, pp 7.

\* Mahan, B. M.; Myers, R. J., "Química. Curso Universitario", 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, pp 403.

## Revisión histórica

Rutherford (1911) (lectura)



Atomo “vacío”

Núcleo el grueso de la masa, con la carga positiva concentrada

Obvia las repulsiones intra-nucleares

Sistema “planetario” con la carga negativa (átomo de Bohr  $n, l, m, s$ )

Postula la existencia de “neutrones”, masa de protón pero sin carga.

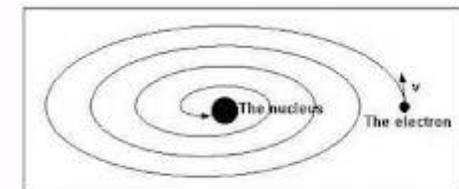
Neutrones descubiertos por Chadwick en 1932

### Fallo:

Electrostática: “una carga sometida a aceleración continuada irradia energía”

$E$  (total) ↓    $E$  (cinética) ↓   Velocidad ↓    $F$  (centrífuga) ↓

Electrón acabaría cayendo al núcleo



## Revisión histórica

Lagunas del modelo de Rutherford

Nuevos fenómenos:

Emisión del cuerpo negro

Efecto fotoeléctrico

Efecto Compton

**Mecánica Clásica**



**Mecánica Cuántica**

## Los Nuevos Fenómenos

### Radiación del Cuerpo Negro. Teoría Cuántica

- \* Mahan, B. M.; Myers, R. J., "Química. Curso Universitario", 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, pp 406
- \* Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos", Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 7, 543

$$\text{Radiación incidente} = \phi = \phi_{\text{Reflejada}} + \phi_{\text{Absorbida}} + \phi_{\text{Transmitida}}$$

$$\text{Coeficiente de absorción} = \alpha = \frac{\phi_{\text{Absorbida}}}{\phi} \quad \alpha = 1 \quad \text{Cuerpo Negro}$$

Planck: La *energía* absorbida o emitida no puede tomar cualquier valor sino únicamente aquellos que sean múltiplos enteros de una unidad mínima a la que denomina "*cuanto*"



$$E = h \nu$$

E = Energía de la radiación  
 $\nu$  = Frecuencia de la radiación  
h = Constante de Planck =  $6,6252 \cdot 10^{-34}$  J·seg

$$\nu = \frac{C}{\lambda}$$

## Los Nuevos Fenómenos

### *Radiación del Cuerpo Negro. Teoría Cuántica*

- \* Mahan, B. M.; Myers, R. J., "Química. Curso Universitario", 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, pp 406
- \* Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos", Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 7, 543

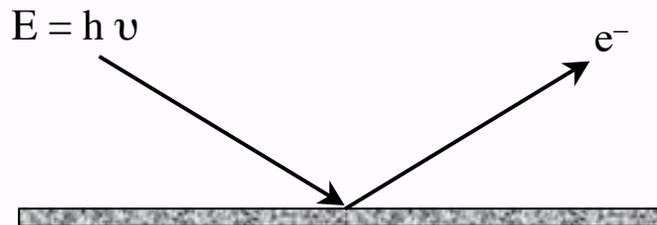
Física Clásica - La energía era una variable *continua*

Física Cuántica - La energía es una variable *discontinua*  
Se dice que la energía "*está cuantizada*",  
sólo puede tomar determinados valores

## Los Nuevos Fenómenos

### Efecto Fotoeléctrico

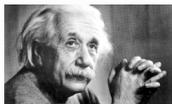
- \* Mahan, B. M.; Myers, R. J., "Química. Curso Universitario", 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, pp 408
- \* Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos", Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 12



$\nu_0$  = Frecuencia umbral  
 $e^-$  energía cinética

Células fotoeléctricas,  
sensores, alarmas

Einstein: La luz, además de sus propiedades ondulatorias, puede considerarse constituida por copúsculos "*fotones*", cada uno de los cuales tiene una energía  $E_{\text{fotón}} = h \nu$ .



**Dualidad Onda-Corpúsculo.**

Fenómenos de difracción }  
Fenómenos de interferencia } Naturaleza ondulatoria

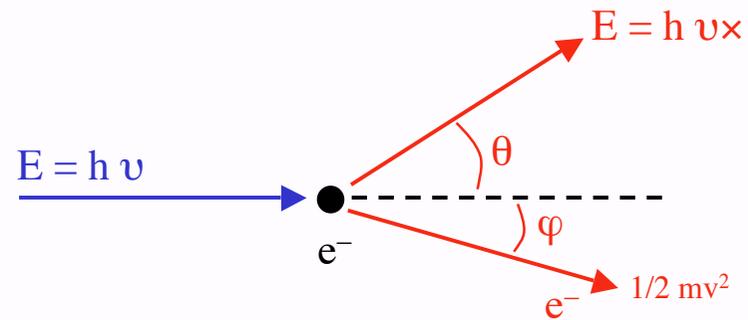
Efecto fotoeléctrico }  
Direccionalidad } Naturaleza cospuscular

Simultáneamente  
Onda / Corpúsculo

## Los Nuevos Fenómenos

### *Efecto Compton*

\* Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos", Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 14



Mecánica Ondulatoria

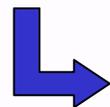
Hipótesis de DeBroglie



La luz es una radiación, una onda, que en ocasiones se comporta con naturaleza corpuscular

De su naturaleza corpuscular	$\left[ \begin{array}{ll} P = m c & \text{Momento lineal} \\ E = m c^2 & \text{Energía de la partícula} \end{array} \right]$	E = E
De su naturaleza ondulatoria		

$$E = m c^2 = h \nu \quad c = \nu = \lambda \nu \implies \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda}$$



$$m c = \frac{h \nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$



$$\lambda = \frac{h}{m \nu}$$

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{seg}$$

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{seg}$$

DeBroglie (1924): Esa dualidad Onda-corpúsculo no está limitada a la luz, sino que es válida para *toda partícula en movimiento*, que *lleva asociada una onda*.

## Mecánica Ondulatoria

### Hipótesis de DeBroglie



$$\lambda = \frac{h}{m v}$$

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{seg}$$

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{seg}$$

1 e<sup>-</sup>

$$m = 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$v = 10^7 \text{ m/s}$$

$$\lambda = 7,35 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,7 \text{ \AA}$$

importante

Locomotora

$$m = 700 \text{ toneladas}$$

$$v = 108 \text{ km/h}$$

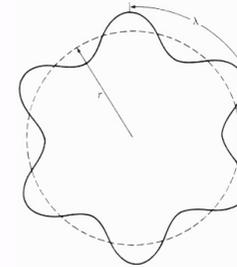
$$\lambda = 3,15 \cdot 10^{-41} \text{ m} = 3,15 \cdot 10^{-31} \text{ \AA}$$

despreciable

m aumenta

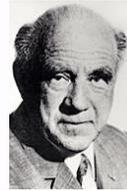
λ disminuye

Válido sólo para sistema subatómicos



## Mecánica Ondulatoria

### *Principio de Incertidumbre de Heisenberg*



Es imposible determinar simultáneamente en un instante dado la posición y el momento (velocidad) del electrón.

*Para una partícula dada, el producto de la incertidumbre del momento respecto a una coordenada dada ( $\Delta P_x$ ) y la incertidumbre en la posición respecto a esa misma coordenada ( $\Delta x$ ) debe ser igual o más grande que la constante de Planck.*

$$(\Delta P_x) \cdot (\Delta x) \geq h$$

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{seg}$$

$$h = 6,6252 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{seg}$$

h es muy pequeña,

lo que hace que sea válido para sistemas subatómicos en los que se aplicaría la *Mecánica Ondulatoria*,

pero carezca de sentido para sistemas macroscópicos en los que se aplicaría la *Mecánica Clásica*.

## Formulación de la Mecánica Cuántica

*Sistemas microscópicos*

*Mecánica Cuántica*

Cuanto

Cuantización de la energía



Bohr 1925

Schrödinger 1926



*Probabilística*

*Sistemas macroscópicos*

*Mecánica Clásica-Newtoniana*

*Determinista*, precisa

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### 1<sup>er</sup> Postulado

*El estado de un sistema viene dado por una función llamada de estado,  $\Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, t)$ , que debe ser aceptable.*

$\Psi$  es una función de estado, dependiente de las coordenadas de las partículas del sistema ( $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots$ ), y del tiempo.

Podemos renunciar a fijar la posición en cada instante concreto.

*Cuando  $\Psi$  no depende del tiempo, decimos que es una **Función de Onda de Estado Ordinario**, que debe ser aceptable.*

$\Psi$  es una función con ciertas propiedades definidas arbitrariamente

*... debe ser aceptable ...*

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### 1<sup>er</sup> Postulado

#### a) Normalidad

$\Psi^*$  es la conjugada de  $\Psi$ , que deber ser *normal*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \Psi^* d\tau = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \Psi^* dx dy dz = 1$$

$\Psi \Psi^*$  tiene sentido de probabilidad  $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \Psi^* d\tau$  probabilidad total = 1

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### *1er Postulado*

#### *b) Uniformidad*

$\Psi$  deber ser *uniforme*, es decir, que para cualquier valor de las coordenadas existe un valor de  $\Psi$ , sólo uno y nada más que uno

$\Psi$  : Función de Estado  
Función de Onda  
Función de Schrödinger

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### 2º Postulado

*Para cada observable del Sistema hay un Operador adecuado que produce la propiedad cuando se le aplica a la función de Onda.*

$$A \Psi = a \Psi$$

**Operador:** es un “símbolo” de una operación matemática que por si solo carece de significado, y que debe ir acompañado de la función sobre la que opera

$()^2$	2	$(2)^2 = 4$
$\text{sen}()$	$30^\circ$	$\text{sen}(30) = 1/2$
$d()$	$f(x) = x^3$	$d(x^3) = 3x^2 dx$

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### 2º Postulado

*Para cada observable del Sistema hay un Operador adecuado que produce la propiedad cuando se le aplica a la función de Onda.*

Operador Hamiltoniano  $\hat{H}$

$$\left\{ \begin{array}{l} H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + V \\ H\Psi = E\Psi \end{array} \right.$$

$$\left( -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right) \Psi = E\Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E-V) \Psi = 0$$

Ec. Ondas

Ec. Schrödinger (1927)

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### 2º Postulado

*Para cada observable del Sistema hay un Operador adecuado que produce la propiedad cuando se le aplica a la función de Onda.*

$A \Psi = a \Psi$  \* Sólo algunos valores de “ $a$ ” son posibles: “*valores propios*”

\* Funciones solución ( $\Psi$ ): “*funciones propias*”

\* Sistema se encuentra en un “*estado propio*”

$a_1 \rightarrow \Psi_1$		$a_i$	Energías permitidas
$a_2 \rightarrow \Psi_2$		$\Psi_i$	Funciones solución
...			
$a_n \rightarrow \Psi_n$			

$a_1 = a_2$  valores degenerados (P.j. Orbitales atómicos  $p_x, p_y, p_z$ )

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### 3<sup>er</sup> Postulado

*La medida de un observable cualquiera al que corresponde un operador  $A$  sólo puede dar como resultado uno de los valores propios de  $A$  dados por  $A\Psi = a\Psi$ . Si el sistema se encuentra en un estado propio de  $A$ , por ejemplo  $\Psi_i$ , el valor propio que se obtendrá en la medida será precisamente  $a_i$ , es decir, el correspondiente a  $\Psi_i$ .*

$$E_1 \longrightarrow \Psi_1 \text{ (únicamente)}$$

$$\Psi_1 \longrightarrow E_1 \text{ (únicamente)}$$

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

### 4º Postulado

*Si el sistema no se encuentra en un estado propio del operador A, la medida del correspondiente observable dará como antes, uno de los valores propios correspondientes, pero es imposible predecir cuál de ellos. Sin embargo, si se hacen repetidas medidas de dicho observable, la media  $\bar{a}$  de los resultados obtenidos valdrá:*

$$\bar{a} = \frac{\int \Psi^* A \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$$

### 5º Postulado

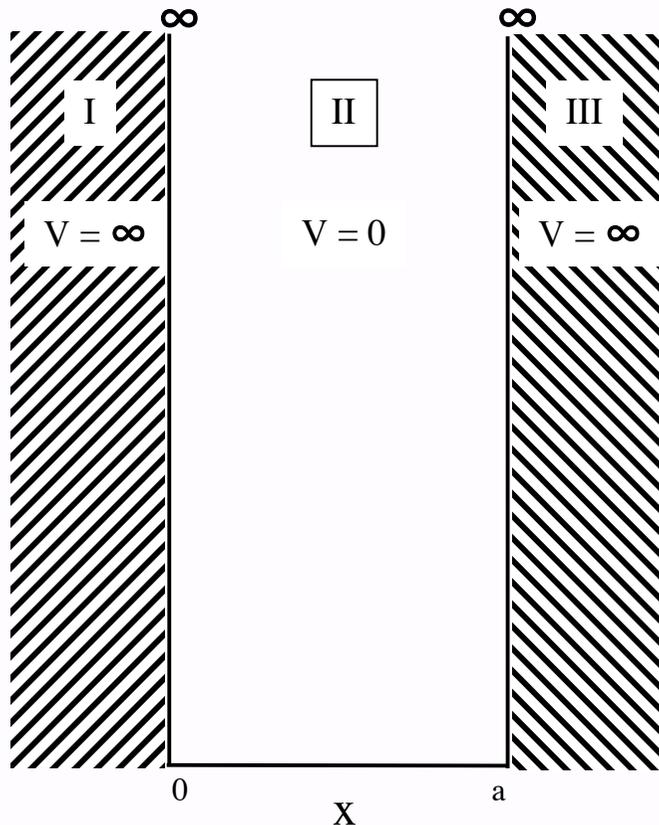
*Si conocemos  $\Psi$  en cualquier instante, su valor en otro tiempo cualquiera es solución de la ecuación diferencial:*

$$H \Psi = - \frac{h}{2 \pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

## Formulación de la Mecánica Cuántica (Postulados de la Mec. Cuant.)

- $\Psi$  Es la solución de la Ecuación de Ondas.  
Es una *solución matemática* a un problema matemático,  
carente de realidad física.  
Su cuadrado tiene significado de *probabilidad*.

Partícula en un foso de potencial monodimensional [http://en.wikipedia.org/wiki/Particle\\_in\\_a\\_box](http://en.wikipedia.org/wiki/Particle_in_a_box)



$$V(x) = 0 \quad 0 < x < a$$

$$V(x) = \infty \quad x \leq 0, \quad x \geq a$$

En Mecánica Clásica (Newtoniana) hay la misma probabilidad de encontrar la partícula en todos los puntos  $0 < x < a$

**Ahora veremos que no es así**

$$H \Psi = E \Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (E) \Psi = 0$$

$$\frac{d^2 \Psi}{d x^2} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (E) \Psi = 0$$

Ec. Diferencial de 2º grado  
 $\approx a x^2 + b x + c = 0$   
Matemáticamente rutinarias

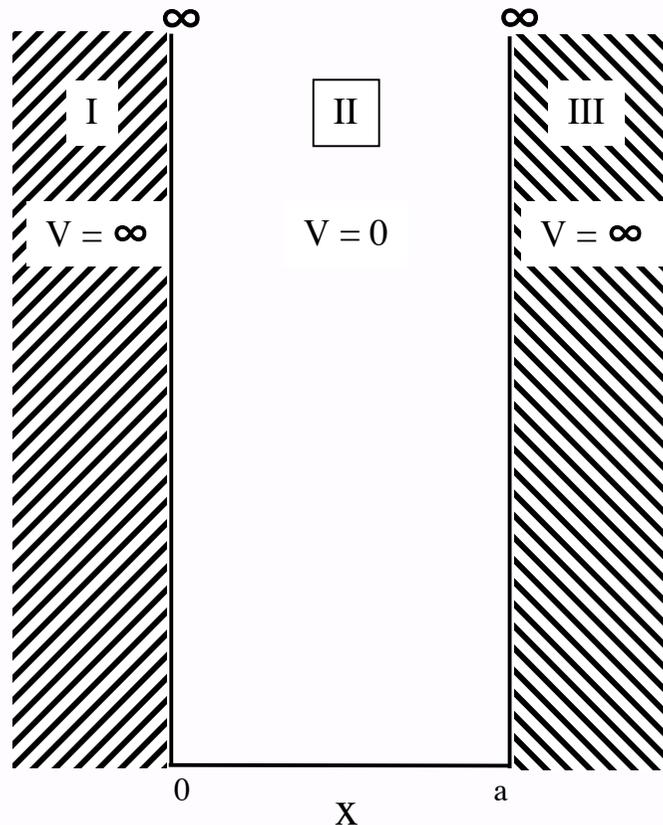
\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 26.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 12.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, pp 41.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 8.

### Partícula en un foso de potencial monodimensional



$\Psi$ , Función solución, debe cumplir unas condiciones para ser una solución aceptable

- 1)  $\Psi$  debe tener un único valor, que será finito.
- 2)  $\Psi$  debe ser normal,  $\Psi^2$  debe ser 1.
- 3)  $\Psi$  debe ser continua.

Solución matemática:

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} x \right)$$

Sólo será válida si cumple las condiciones planteadas en el problema, las *condiciones de contorno*.

$$\Psi (x = 0) = 0$$

$$\Psi (x = a) = 0$$

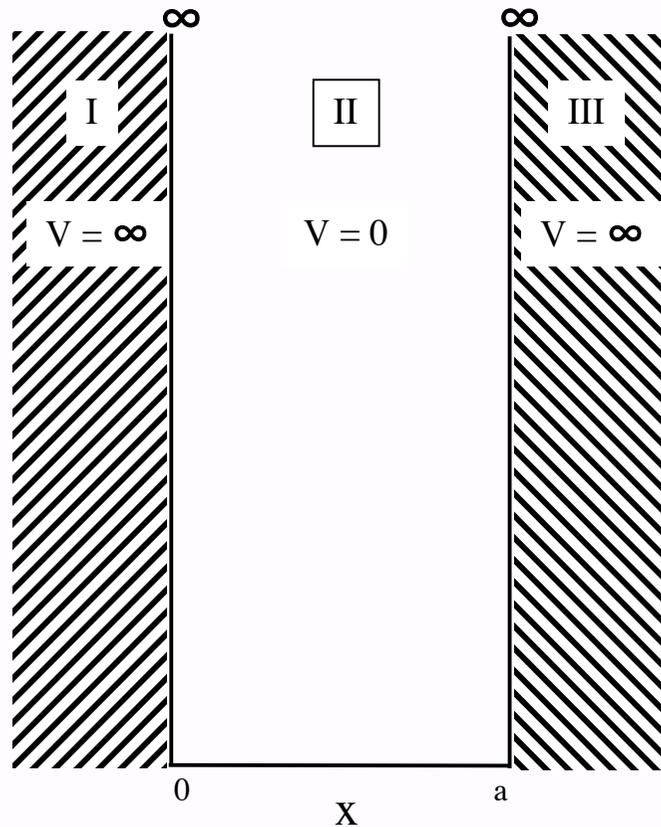
\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 26.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 12.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, pp 41.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 8.

### Partícula en un foso de potencial monodimensional



$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} x \right)$$

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} x \right)$$

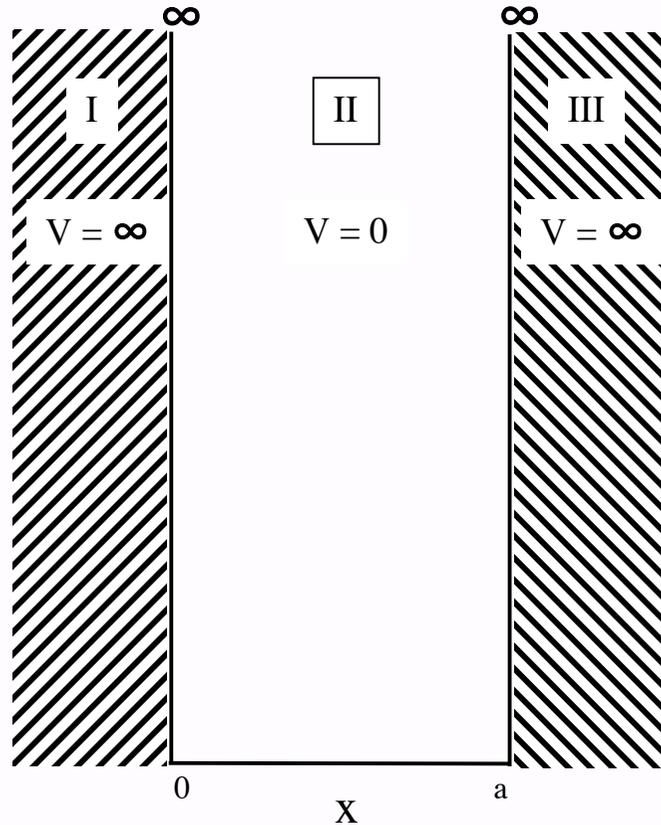
\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, **pp 26**.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 12**.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, **pp 41**.

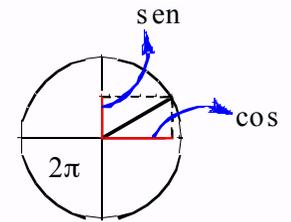
\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 8**.

Partícula en un foso de potencial monodimensional



$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}} x \right)$$

$$\Psi(x=0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}} 0 \right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}(0) = \sqrt{\frac{2}{a}} 0 = 0$$



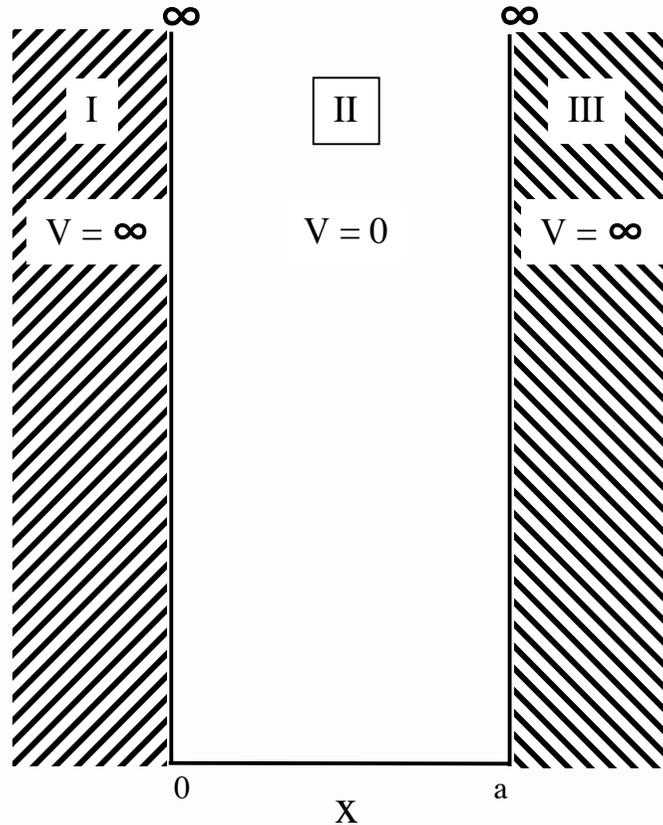
\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 26.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 12.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, pp 41.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 8.

Partícula en un foso de potencial monodimensional



$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} x \right)$$

$$\Psi(x = a) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} a \right) = 0$$

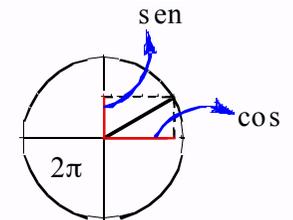
$$\text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} a \right) = 0 = \text{sen}(n\pi)$$

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} a = n\pi$$

$$\frac{8\pi^2 m E}{h^2} a^2 = n^2 \pi^2$$

$$E = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} = n^2 C = E$$

Energía cuantizada por  $n^2$



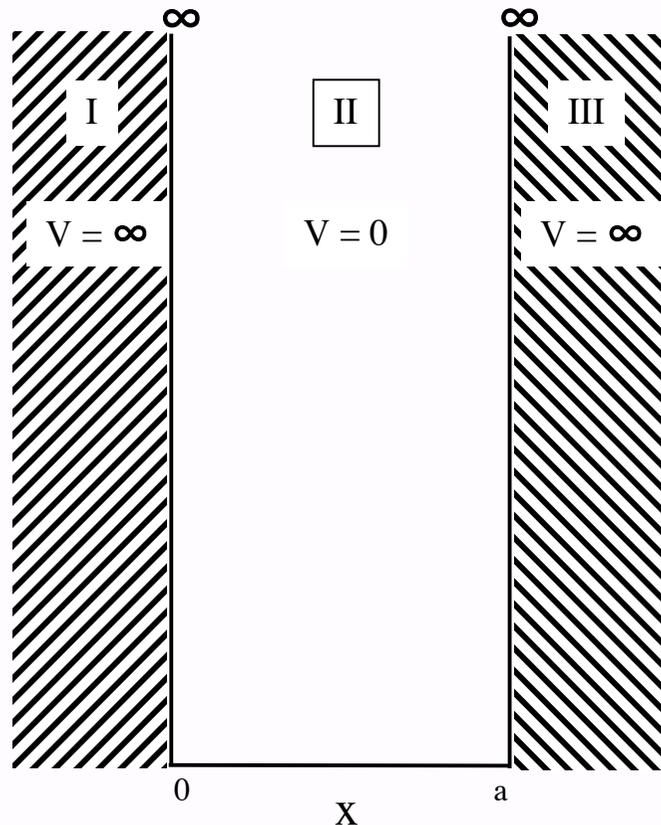
\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 26.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 12.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, pp 41.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 8.

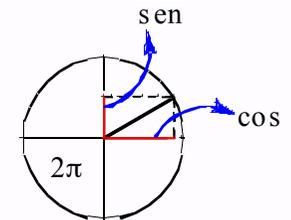
Partícula en un foso de potencial monodimensional



$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} x \right)$$

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{8\pi^2 m h^2 n^2}{h^2 8 m a^2}} x \right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{a^2}} x \right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{a} x \right)$$

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{a} x \right)$$



Esta Función es matemáticamente correcta,  
además es aceptable (normal, continua y uniforme)  
y es válida, cumple las condiciones de contorno,

**nuestra solución**

$$\Psi(x=0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{a} 0 \right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}(0) = \sqrt{\frac{2}{a}} 0 = 0$$

$$\Psi(x=a) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{a} a \right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}(n\pi) \sqrt{\frac{2}{a}} 0 = 0$$

\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 26.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 12.

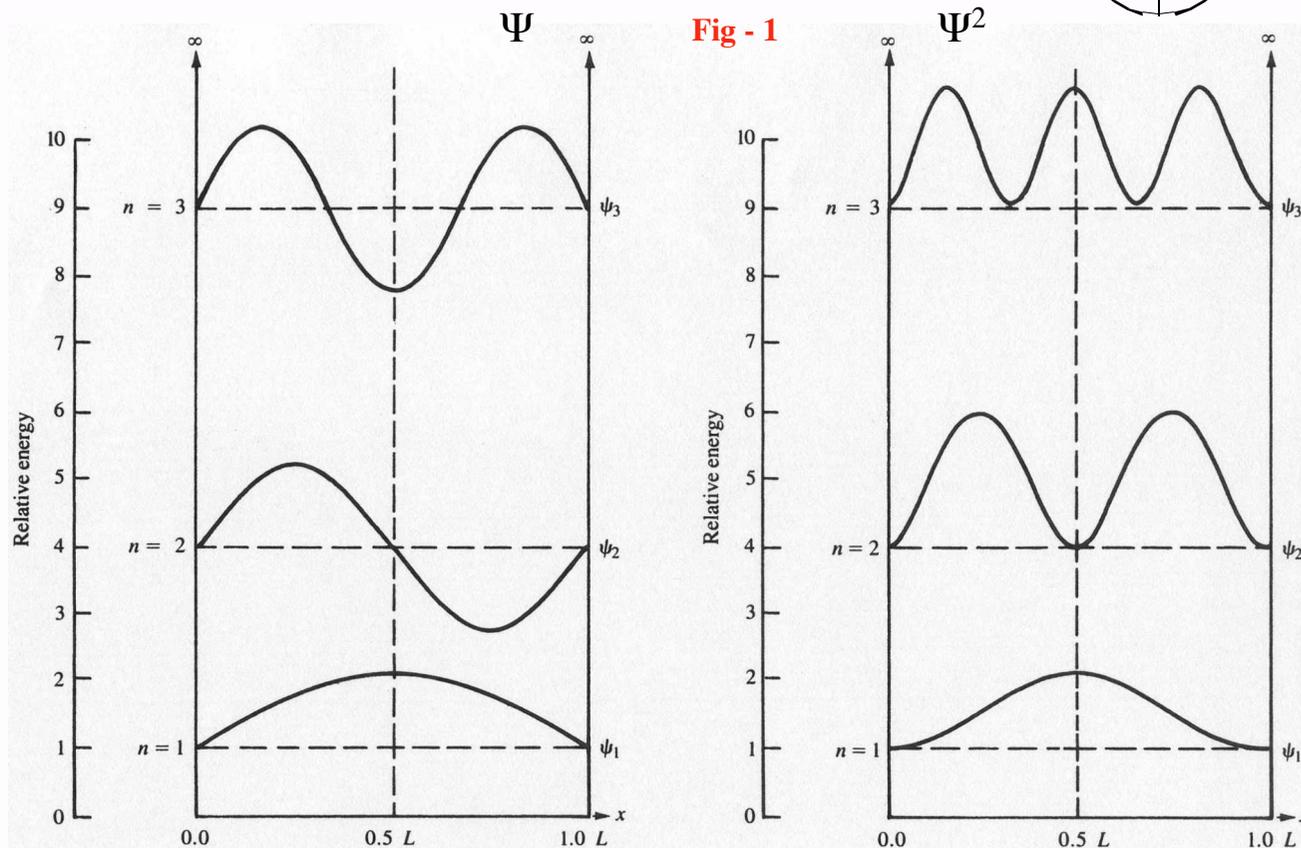
\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, pp 41.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 8.

Partícula en un foso de potencial monodimensional

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$$

n = 1	x = 0	$\Psi = 0$
	x = a/4	$\Psi = 1/\sqrt{a}$
	x = a/2	$\Psi = \sqrt{(2/a)}$
	x = 3a/4	$\Psi = 1/\sqrt{a}$
	x = a	$\Psi = 0$
n = 2	x = 0	$\Psi = 0$
	x = a/4	$\Psi = \sqrt{(2/a)}$
	x = a/2	$\Psi = 0$
	x = 3a/4	$\Psi = -\sqrt{(2/a)}$
	x = a	$\Psi = 0$



DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 30.

\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 26.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 12.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, pp 41.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 8.

### Partícula en un foso de potencial monodimensional

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$$

$$E = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} = \left(\frac{h^2}{8m}\right) \left(\frac{n^2}{a^2}\right)$$

$$E = \left(\frac{h^2}{8m}\right) \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right)$$

#### Mecánica Clásica

Todos los puntos tienen igual probabilidad de encontrar la partícula

#### Mecánica Cuántica

Hay puntos de máxima probabilidad y puntos de probabilidad nula, ambos en función del valor de “n”

Para valores de “n” lo suficientemente grandes, el número de máximos resulta muy elevado y el comportamiento es “*como si fuera*” un continuo, se correspondería con un estado clásico del sistema.

**Principio de correspondencia:** Ambas Mecánicas, en el límite de su campo de aplicación, conducen a resultados concordantes (que no iguales).

\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., “*Chemical Structure and Bonding*”, University Science Books, 1989, **pp 26**.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 3ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 12**.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., “*Cálculos básicos en estructura atómica y molecular*”, Ed. Vicens-Vives, 1988, **pp 41**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 8**.

## Partícula en un foso de potencial monodimensional

Para  $n = 2$ , hay un punto en el que  $\Psi^2 = 0$ , un nodo:

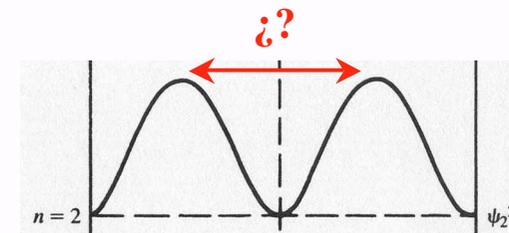
La función tiene probabilidad positiva a la derecha, hay un máximo.

La función tiene probabilidad positiva a la izquierda, hay un máximo.

La función tiene probabilidad nula en el punto medio, hay un nodo.

### Pregunta

¿Cómo puede pasar de una zona de probabilidad a otra, sin pasar por el nodo que está en medio?



**Pensadlo en casa, y ya me lo contareis**

\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, pp 26.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 12.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, pp 41.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 8.

### Partícula en un foso de potencial monodimensional

$$E = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} = n^2 C = E \quad E = 0, 1C, 4C, 9C, 16C, 25C, 36C, \dots$$

En **Mecánica Cuántica**, el nivel de energía **E = 0 No está permitido**

Se mueve en una región con  $V = 0$ .

La única energía que tiene es la energía cinética.

$E = 0$  implica que su velocidad fuera nula, y por lo tanto el error al determinar dicha velocidad muy pequeño.

Según el principio de incertidumbre,  $(\Delta P_x) \cdot (\Delta x) \geq h$   
implicaría  $\Delta x \approx \infty$ ,  $\Delta x > a$ , lo cual es IMPOSIBLE

\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, 1989, **pp 26**.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 3ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 12**.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "Cálculos básicos en estructura atómica y molecular", Ed. Vicens-Vives, 1988, **pp 41**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 8**.

## Partícula en un foso de potencial monodimensional

En **Mecánica Cuántica**, a diferencia de la Mecánica Clásica:

- La energía ya no es un continuo, sólo ciertos valores de energía están permitidos, valores relacionados con “n”.
- La energía crece con “n<sup>2</sup>”.
- El valor de energía  $E = 0$  no es un valor admitido.
- $\Psi = 0$  no es algo trivial, implica que la probabilidad de encontrar a la partícula es nula.

\* DeKock, R. L.; Gray, H. B., “*Chemical Structure and Bonding*”, University Science Books, 1989, **pp 26**.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 3ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 12**.

\* Paraira, M.; Pérez González, J. J., “*Cálculos básicos en estructura atómica y molecular*”, Ed. Vicens-Vives, 1988, **pp 41**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 8**.