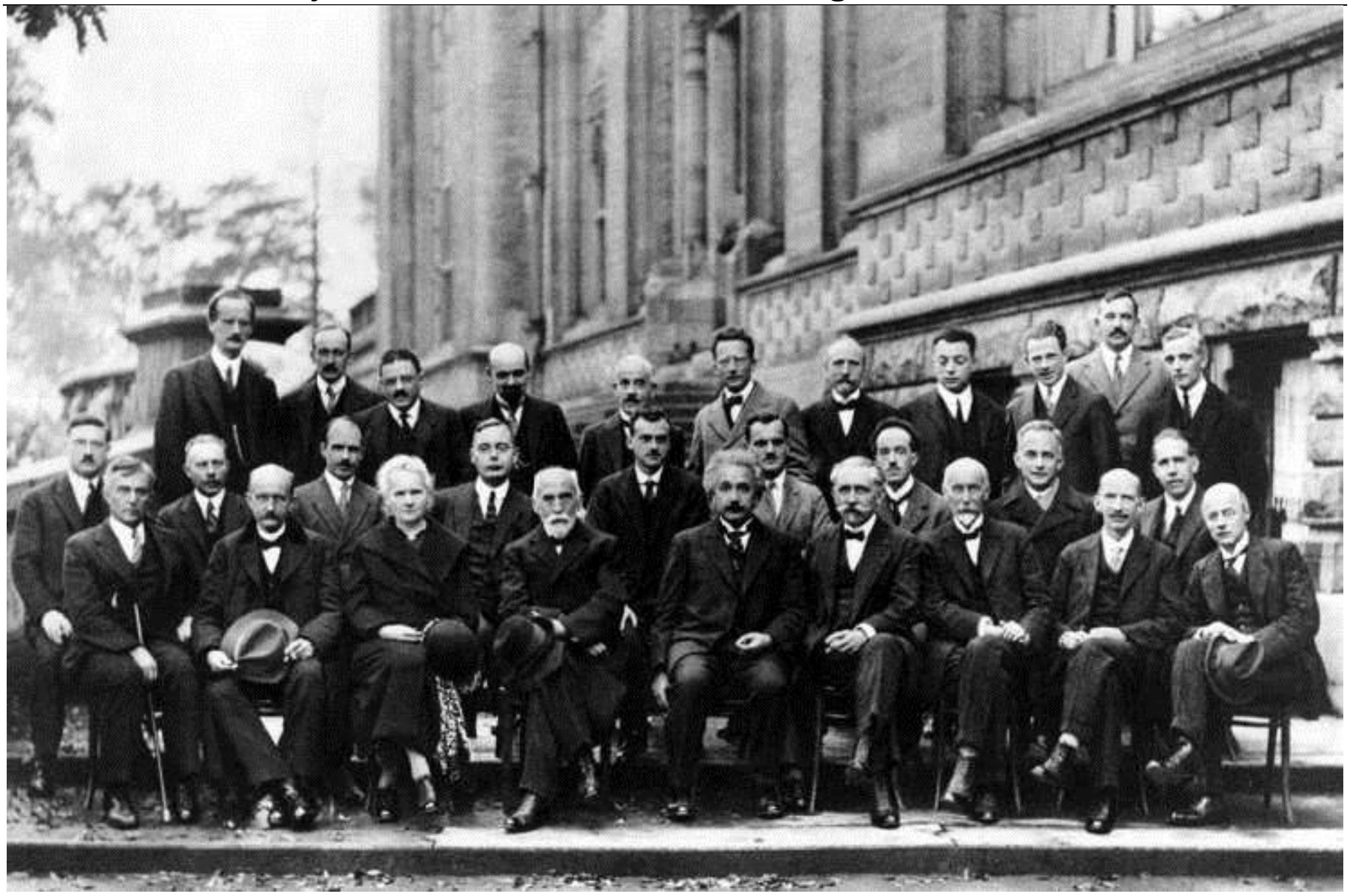
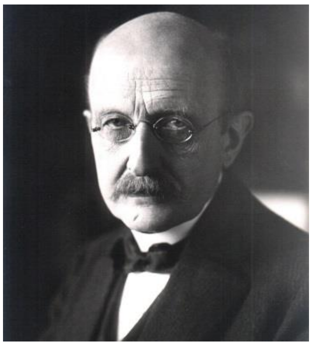
QUÍMICA: Anexo a la ficha 04
MECÁNICA CUÁNTICA
La función de onda y la ecuación de onda de Schrödinger



Congreso Solvay, 1927
(29 de los mejores cerebros de la historia de la Ciencia de los que más de la mitad (19) eran ya por aquella época, o llegarían a serlo, premios Nobel.)

La mecánica cuántica es la rama de la física que estudia la naturaleza a escalas espaciales pequeñas, los sistemas atómicos y subatómicos y sus interacciones con la radiación electromagnética. Se basa en la observación de que todas las formas de energía se liberan en unidades discretas o paquetes llamados **cuantos**.
En teorías anteriores de la física clásica, la energía era tratada únicamente como un fenómeno continuo, en tanto que la materia se supone que ocupa una región muy concreta del espacio y que se mueve de manera continua. Según la teoría cuántica, la energía se emite y se absorbe en cantidades discretas y minúsculas. Un paquete individual de energía, llamado cuanto.



Max Planck (Alemania, 1858-1947) está considerado como el fundador de la teoría cuántica y fue galardonado con el Premio Nobel de Física en 1918.
El modelo de **Bohr**, que se considera un modelo precuántico, corrigió la inestabilidad del modelo nuclear de **Rutherford**. De acuerdo con la teoría clásica un electrón orbitando alrededor de un núcleo cargado positivamente debería emitir energía electromagnética perdiendo así velocidad hasta caer sobre el núcleo. La evidencia empírica era que esto no sucedía, y sería la mecánica cuántica la que resolvería este hecho primero mediante postulados formulados por Bohr y más tarde mediante modelos como el modelo atómico de Schrödinger basados en supuestos más generales. Así, Bohr dio estabilidad a los átomos.

El formalismo de la mecánica cuántica se desarrolló durante la década de 1920.

La dualidad onda-corpúsculo o hipótesis de De Broglie

Louis de Broglie (Francia, 1892-1987) séptimo duque de Broglie, fue galardonado en 1929 con el Premio Nobel de Física, por su descubrimiento de la naturaleza ondulatoria del electrón, conocida como hipótesis de Broglie.
En 1924, Louis de Broglie propuso que, al igual que las ondas de luz presentan propiedades de partículas, como ocurre en el efecto fotoeléctrico, las partículas, a su vez, también presentan propiedades ondulatorias. La luz en algunas situaciones se comporta como una partícula de materia y las partículas exponen algunas propiedades ondulatorias cuando están en movimiento y ya no son vistas como localizadas en una región determinada, sino más bien extendidas en cierta medida
Así, en 1926, la mecánica ondulatoria de Erwin Schrödinger implica la utilización de una entidad matemática, la función de onda, dado el comportamiento ondulatorio de la materia.

El principio de incertidumbre de Heisenberg

Werner Heisenberg (Alemania, 1901-1976) fue un físico y filósofo alemán. Es conocido sobre todo por formular el principio de incertidumbre, una contribución fundamental al desarrollo de la teoría cuántica. Este principio afirma que es imposible medir simultáneamente de forma precisa la posición y el momento lineal (o velocidad) de una partícula. Heisenberg fue galardonado con el Premio Nobel de Física en 1932.
Un descubrimiento importante en 1927, que pone un límite teórico absoluto en la precisión de ciertas mediciones. En mecánica cuántica, la **relación de indeterminación de Heisenberg** o **principio de incertidumbre** establece la imposibilidad de que determinados pares de magnitudes físicas observables y complementarias sean conocidas con precisión arbitraria. Sucintamente, afirma que no se puede determinar, en términos de la física cuántica, simultáneamente y con precisión, ciertos pares de variables físicas, como son, la posición y el momento lineal (cantidad de movimiento, masa y velocidad) de un objeto dado. Cuanto mayor certeza se busca en determinar la posición de una partícula, menos se conoce su momento lineal y, por tanto, su masa y velocidad. Como resultado de ello, la asunción clásica de los científicos de que el estado físico de un sistema podría medirse exactamente y utilizarse para predecir los estados futuros tuvo que ser abandonada. Esto supuso una revolución filosófica y dio pie a numerosas discusiones entre los más grandes físicos de la época.
El principio de indeterminación no tiene un análogo clásico y define una de las diferencias fundamentales entre física clásica y física cuántica.

Así, se abren nuevas líneas de investigación del átomo.

En resumen, las suposiciones más importantes de la mecánica cuántica, son las siguientes:
Al ser imposible fijar a la vez la posición y el momento de una partícula, se renuncia al concepto de trayectoria, vital en mecánica clásica. En vez de eso, el movimiento de una partícula puede ser explicado por una función matemática que asigna, a cada punto del espacio y a cada instante, la probabilidad de que la partícula descrita se halle en tal posición en ese instante (al menos, en la interpretación de la Mecánica cuántica más usual, la probabilista o interpretación de Copenhague). A partir de esa función, o función de ondas, se extraen teóricamente todas las magnitudes del movimiento necesarias.
Existen dos tipos de evolución temporal, si no ocurre ninguna medida el estado del sistema o función de onda evolucionan de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, sin embargo, si se realiza una medida sobre el sistema, este sufre un «salto cuántico» hacia un estado compatible con los valores de la medida obtenida (formalmente el nuevo estado será una proyección ortogonal del estado original).
Sorprendentemente, la teoría cuántica solo permite normalmente cálculos probabilísticos o estadísticos de las características observadas de las partículas elementales, entendidos en términos de funciones de onda. La ecuación de Schrödinger desempeña el papel en la mecánica cuántica que las leyes de Newton y la conservación de la energía hacen en la mecánica clásica. Es decir, la predicción del comportamiento futuro de un sistema dinámico y es una ecuación de onda en términos de una función de onda la que predice analíticamente la probabilidad precisa de los eventos o resultados.

La función de onda

$$\Psi$$

La función de onda es una de las maneras en las que se puede saber el estado en el que se puede encontrar una partícula o sistema de ellas (aplicable al electrón en el átomo).

Desde el punto de vista histórico, la función de onda se puede interpretar como que las partículas (y los electrones) se pueden ver por medio de una onda física la cual es dispersada en el espacio.

La ecuación de Schrödinger

Erwin Schrödinger (Viena, 1887–1961) fue un físico y filósofo austríaco. Recibió el Premio Nobel de Física en 1933 por haber desarrollado la ecuación de Schrödinger, compartido con Paul Dirac.

Erwin Schrödinger en el año 1925, planteó una ecuación para conocer el estado de los electrones en el átomo. Se aplicó al átomo de H que sólo tiene 1 electrón. Es una complicada ecuación que al resolverla nos da información del estado del electrón. Más bien nos da la probabilidad de encontrar el electrón en un lugar determinado. Se basa en que al átomo se le puede considerar como un sistema de vibración continua.

En el año 1927, la Mecánica Cuántica u Ondulatoria propuesta por Schrödinger fue aceptada.

Desde el punto de vista de la física cuántica, se tienen partículas que tienen una superposición de estados (el gato de Schrödinger), dado es el caso que si se tiene un electrón y nuestra duda es saber en qué órbita atómica se encuentra, necesariamente debemos de interpretar que este electrón puede encontrarse en cualquier órbita a la vez, esto significa la superposición que deriva de la distribución de una probabilidad inmediata.

Una vez que se obtiene la solución de la ecuación, se conoce la función de la onda y podemos obtener su magnitud y el resultado de la densidad de probabilidad.

A TÍTULO DE CURIOSIDAD: Resolución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de H

$$H\Psi = E\Psi \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V_0\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

$$V=\frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad -\frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\nabla^2\psi-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi=E\psi \qquad \psi(r,\,\theta,\,\phi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$$x=r\ \text{sen}\ \theta\cos\phi, \qquad y=r\ \text{sen}\ \theta\ \text{sen}\ \phi, \qquad x=r\cos\theta$$

$$\frac{\partial}{\partial x}=\text{sen}\ \theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\text{sen}\ \phi}{r\ \text{sen}\ \theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\text{sen}\ \theta\ \text{sen}\ \phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\ \text{sen}\ \phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\phi}{r\ \text{sen}\ \theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\text{sen}\ \phi}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}=\left(\text{sen}\ \theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\text{sen}\ \phi}{r\ \text{sen}\ \theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^2+$$

$$+\left(\text{sen}\ \theta\ \text{sen}\ \phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\ \text{sen}\ \phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\phi}{r\ \text{sen}\ \theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^2+\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\text{sen}\ \theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)^2=$$

$$=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\cos\theta}{\text{sen}\ \theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2\ \text{sen}^2\ \theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\ \text{sen}\ \theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\ \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\ \text{sen}^2\ \theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right)+\frac{1}{r^2\ \text{sen}\ \theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\ \theta\frac{d\psi}{d\theta}\right)+\frac{1}{r^2\ \text{sen}^2\ \theta}\frac{d^2\psi}{d\phi^2}\right)-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi=E\psi$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\left(\frac{\Theta\Phi}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{R\Phi}{r^2\ \text{sen}\ \theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\ \theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{R\Theta}{r^2\ \text{sen}^2\ \theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right)-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R\Theta\Phi=$$

$$\frac{\text{sen}^2\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{\text{sen}\ \theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\ \theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\frac{r^2\ \text{sen}^2\theta\ 8\pi^2 m_e}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=0$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=constante=-m_l^2 \qquad \frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{1}{\Theta\ \text{sen}\ \theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\ \theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\frac{m_l^2}{\text{sen}^2\ \theta}+\frac{8\pi^2 m_e r^2}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=0$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{8\pi^2 m_e r^2}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)R=l(l+1)R$$

$$\frac{1}{\text{sen}\ \theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\ \theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\frac{m_l^2\Theta}{\text{sen}^2\ \theta}=-l(l+1)\Theta$$

$$\Phi=a\ \text{sen}(m_l\phi)$$

$$\int_0^{2\pi} a^2\mathrm{sen}^2\phi\, d\phi = a^2\int_0^{2\pi}\mathrm{sen}^2\phi\, d\phi = a^2\left(\frac{\phi}{2}-\frac{\mathrm{sen}\, 2\phi}{4}\right)\bigg|_0^{2\pi} = a^2\,\frac{2\pi}{2} = 1 \quad\Rightarrow\quad a = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\,\mathrm{sen}(m_l\phi)$$ que es la solución

Hay una solución completa de Ψ por cada trío de valores de *n*, *l* y *ml* donde *n* puede tomar cualquier valor entero igual o mayor de 1, *l* cualquier valor entero entre 0 y *n* –1, y *ml* cualquier valor entero desde +*l* hasta –*l*.

Esta es la solución más sencilla. Para ver la dificultad de los cálculos echadle una ojeada a los siguientes, sólo por curiosidad, aunque no entendáis nada:

$$\|Tf\|_{L^q(\Omega)} \le \|Tf\|^{1-\theta}_{L^{q_0}(\Omega)}\|Tf\|^{\theta}_{L^{q_1}(\Omega)} \le \|T\|^{1-\theta}_{p,q_0,\Omega}\|T\|^{\theta}_{p,q_1,\Omega}\|f\|_{L^p(\Omega)}.$$

$$\|Tg\|_{L^q(\Omega)} = \sup_{h\in\mathcal{F}}\left\{\frac{\left|\int_\Omega (Tg)(x)h(x)\,dx\right|}{\|h\|_{L^{q'}(\Omega)}}\right\} \qquad \left|\int_\Omega (Tg)(x)h(x)\,dx\right| \le M_0^{1-\theta}M_1^{\theta}\,\|g\|_{L^p(\Omega)}\|h\|_{L^{q'}(\Omega)}$$

$$\begin{aligned} |g_z(x)|^{p_0} &= \left|\exp\{p\mathrm{Re}(a(z))\log(|g(x)|)\}\right|^{p_0} \\ &\le \left|\exp\left\{\frac{p}{p_0}\log(|g(x)|)\right\}\right|^{p_0} = |g(x)|^p. \end{aligned}$$

$$|F(\theta)| \le \left\{\sup_{t\in\mathbb{R}}|F(it)|\right\}^{1-\theta}\left\{\sup_{t\in\mathbb{R}}|F(1+it)|\right\}^{\theta}. \qquad |F(it)| \le M_0\|g\|^{\frac{p}{p_0}}_{L^p(\Omega)}\|h\|^{\frac{q'}{q_0'}}_{L^{q'}(\Omega)}.$$

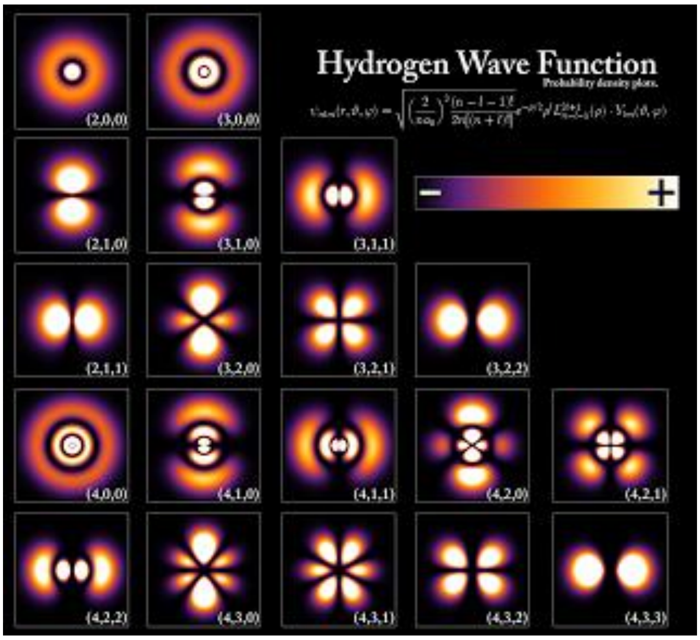
$$\begin{aligned} &\|G_n * \tilde{f} - \tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \\ &\le \|(G_n - \rho_k^n) * \tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} + \|\rho_k^n * \tilde{f} - \tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \\ &\le \|G_n - \rho_k^n\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\|\tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} + \|\rho_k^n * \tilde{f} - \tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \\ &< \eta\|\tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} + \|\rho_k^n * \tilde{f} - \tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|(G_n - \rho_k^n) * \tilde{f}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} &\le \|G_n - \rho_k^n\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\|\tilde{f}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \\ &< \eta\|\tilde{f}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \le \eta|\mathrm{sop}(\tilde{f})|\|\tilde{f}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|f - S_n^N\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} &\le \|f - \tilde{f}\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} + \|\tilde{f} - S_n^N\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \\ &< \frac{\varepsilon}{3} + \|\tilde{f} - S_n^N\|^{\frac{1}{p}}_{L^1(\mathbb{R}^d)}\|\tilde{f} - S_n^N\|^{\frac{1}{p'}}_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \\ &\le \frac{\varepsilon}{3} + \|\tilde{f} - S_n^N\| \\ &\le \frac{\varepsilon}{3} + \|G_n * \tilde{f} - \tilde{f}\| + \|G_n * \tilde{f} - S_n^N\| < \varepsilon, \end{aligned}$$

Bueno…. No sigo.

En definitiva se resolvió la ecuación de la función de onda Ψ y ahora se puede hallar la probabilidad de encontrar al electrón en un lugar determinado. ¡Ojo, sólo la probabilidad! Y esa probabilidad es una función que se puede representar gráficamente. La probabilidad, dada por Ψ, se sabe que depende de los valores que puedan tomar los llamados <u>números cuánticos</u>: n, l, m_l. Cada trío de valores (n, l, m_l) es una representación probabilística del estado de un electrón. A cada trío de estos valores se le llama ORBITAL, abandonando el concepto físico de "órbita" de Bohr.



La "órbita" es un movimiento definido, es una trayectoria concreta, concepto abandonado por la Mecánica Cuántica. Como los electrones no se encuentran en localizaciones fijas moviéndose en una trayectoria circular plana, sino que se habla de un espacio tridimensional y de la probabilidad de localizar al electrón en él, se habla de ORBITALES, zonas de máxima probabilidad de encontrar al electrón.