T. Hartree

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi = E\psi \qquad (1)$$

Si $V(r)$ es el correcto

$$\psi_{n l m_l m_s} = R_{nl}(r)\,\Theta_{l m_l}(\theta)\,\Phi_{m_l}(\varphi)\,|m_s\rangle \qquad (2)$$

Definiciones

$P_{nl}(r) = r^2 R_{nl}^2(r)$ = densidad de probabilidad radial (probabilidad por unidad de longitud) para encontrar a un electrón en un estado cuántico caracterizado por los números n y l, a una distancia r del núcleo (3)

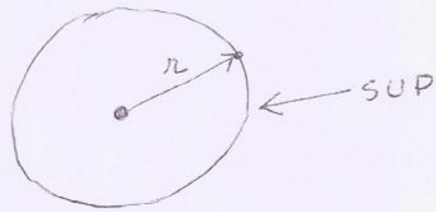
$2(2l+1)$ = Número de estados cuánticos asociados a un valor de n y un valor de l (4)

$2(2l+1)\,P_{nl}(r)$ = densidad de probabilidad radial para encontrar a un electrón en la subcapa definida por un valor de n y un valor de l, a una distancia r del núcleo (5)
(en la subcapa hay $2(2l+1)$ de "acomodar" a los electrones)

$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)\,P_{nl}(r)$ = densidad de probabilidad radial para encontrar a un electrón en la capa definidad por un valor de n, a una distancia r del núcleo (6)

$$P(r) = \sum_{n} \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) P_{n\ell}(r)$$ = densidad de probabilidad radial para encontrar a un electrón a una distancia r del núcleo (7

$-e P(r)$ = densidad de carga eléctrica electrónica que existe a una distancia r del núcleo $= \rho_{electrónica}$ (8)



$$\oint_{SUP} \vec{E} \cdot d\vec{A} = \frac{Q_{enc}}{\varepsilon_0} \qquad (9)$$

$$Q_{enc} = \int \left(\rho_{núcleo} + \rho_{electrónica} \right) dVol \qquad (10)$$

$$(9) \text{ y } (10) \Rightarrow \vec{E} \Rightarrow V = V(r) \qquad (11)$$

Si $V(r)$ es el correcto:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} Z(r) \qquad (12)$$

con $Z(r) \to Z$ cuando $r \to 0$ (13)

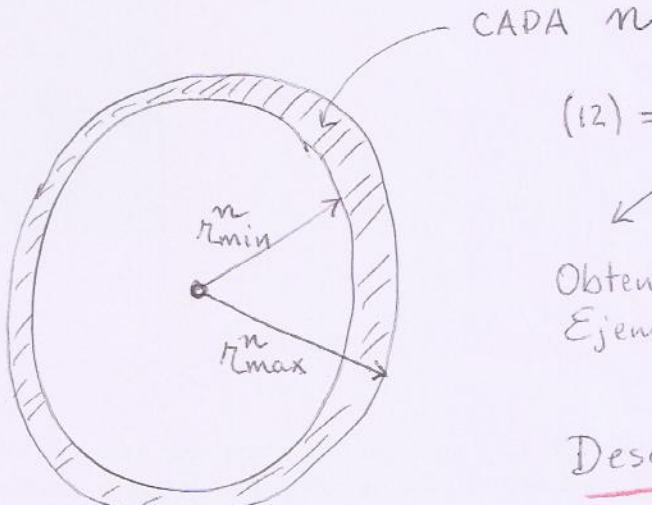
$Z(r) \to 1$ cuando $r \to \infty$ (14)

Ver Fig. 9.11 para el Argón

Radio de la capa caracterizada por n

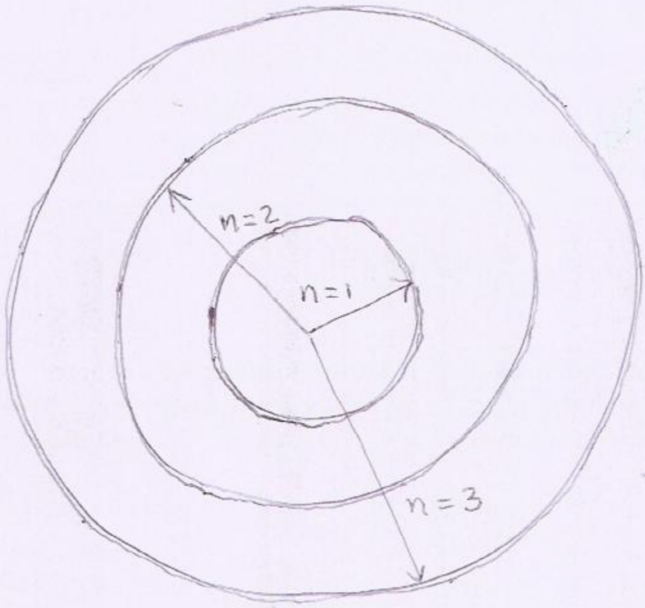
$$\bar{r}_n = \int_{r_{min}^{n}}^{r_{max}^{n}} r \underbrace{\left(\sum_{l=0}^{l_{max}} 2(2l+1)\, P_{nl}(r) \right)} dr \qquad (15)$$

Probabilidad por unidad de longitud (radial) para encontrar a un electrón en la capa caracterizada por el número n a una distancia r del núcleo



$(12) \Rightarrow V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} Z(r)$

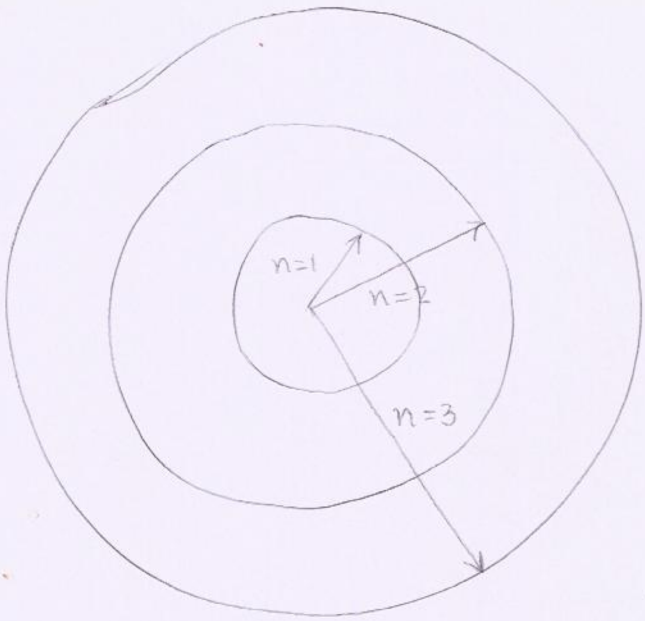
Obtenido de T. Hartree
Ejemplo Fig. 9.11



Descripción aproximada

Se supone que un e^- está en la capa n, esto quiere decir que esta situado a una distan del núcleo $\bar{r}_n$.

El potencial (o energ potencial) que siente el e^- cuando se encuentr en la capa n viene dado por



$$V(\bar{r}_n) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\bar{r}_n} Z(\bar{r}_n) \qquad (16)$$

$Z(\bar{r}_n) =$ Z efectivo que "siente" un electrón que se encuentra en la capa n (17)

$$Z(\bar{r}_n) = Z_n \qquad (18)$$

¿Cómo se obtiene Z_n?

Después de obtener $\bar{r}_n$ a partir de

$$\bar{r}_n = \int_{r^n_{min}}^{r^n_{max}} r \left(\sum_{l=0}^{l_{max}} 2(2l+1)\, P_{nl}(r) \right) dr \qquad (19)$$

se puede consultar el cálculo de Hartree, por ejemplo, usando la Fig. 9-11. Allí se determina visualmente (aproximadamente) el valor de $Z_n = Z(\bar{r}_n)$.

Para Ar $\Rightarrow$ $Z_1 = 16$ $\quad Z_2 = 8 \quad$ $Z_3 = 3$ (20)

donde Z_1, Z_2 y Z_3 son los Z's efectivos que "siente" un electrón que se encuentra en las capas $n=1$, $n=2$ y $n=3$ respectivamente.

CAPA K, CAPA L, CAPA M

Descripción Aproximada

¿Qué se puede determinar si tenemos los Z efectivos $Z_1, Z_2, Z_3, \ldots$?

a) Potencial (Energía potencial) que siente el electrón cuando está en la capa n

$$V(\bar{r}_n) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\bar{r}_n} Z(\bar{r}_n) \qquad (21)$$

$$V_n = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\bar{r}_n} Z_n \qquad (22)$$

$$V_1 = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\bar{r}_1} Z_1 \quad (\text{Capa } n=1) \qquad (23)$$

$$V_2 = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\bar{r}_2} Z_2 \quad (\text{Capa } n=2) \qquad (24)$$

$$\vdots$$

b) Energía total que siente un electrón cuando está en la capa n

A partir de la fórmula para un átomo hidrogenoide con número atómico Z

$$E_n = - Z^2 \frac{13.6\ eV}{n^2} \qquad (25)$$

Podemos usar el Z efectivo Z_n en lugar del Z de la ecuación (25)

$$\Rightarrow \quad E_n = - Z_n^2 \frac{13.6\ eV}{n^2} \qquad (26)$$

Entonces la Energía total (aproximada) de un electrón que se encuentre en la capa $n = 1$ de un átomo multielectrónico será

$$E_1 = - Z_1^2 \frac{13.6\ eV}{1^2} \qquad (27)$$

Si se encuentra en la capa $n = 2$

$$E_2 = - Z_2^2 \frac{13.6\ eV}{2^2} \qquad (28)$$

$\vdots$

c) Radio de la Capa

Se considera primero la fórmula del valor esperado de r de un átomo hidrogenoide

$$\bar{r}_{nl} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\} \qquad (29)$$

Se sustituye el Z efectivo Z_n en (29)