

Unidades Atómicas

Edgar Eduardo Daza C.*

Segundo Semestre de 2005[†]

La escritura de los Hamiltonianos, funciones de onda, el cálculo de distintas cantidades físicas y químicas y, en general, de las diferentes expresiones que empleamos para el estudio cuántico de sistemas atómicos y moleculares se puede simplificar considerablemente si empleamos un sistema de unidades adimensional conocido como sistema de *unidades atómicas*. Este sistema también tiene como ventaja que la comparación de los resultados obtenidos por diferentes grupos de investigación puede hacerse directamente evitando las dificultades que implicaría el uso de diferentes unidades y al empleo de valores distintos (por unidades o fuentes) de las constantes físicas fundamentales. De hecho, si éstas últimas se revisasen en un momento dado, las cantidades calculadas no cambiarían si tuviese que modificarse el valor de alguna constante.

Para definir las nos referiremos a la ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides en unidades SI:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1)$$

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \mathcal{E}\Psi, \quad (2)$$

para la cual hemos supuesto que la masa del núcleo es prácticamente infinita; de suerte que el centro de masas coincide en muy buena aproximación con el núcleo atómico, o más rigurosamente si consideramos que estamos estudiando la ecuación correspondiente a las relaciones internas entre los dos componentes del átomo.

Masa: Como unidad de *masa*¹ se considera la masa del electrón:

$$m_e \mapsto 1 \text{ unidad atómica de masa} = 9,109534 \times 10^{-31} \text{ kg}. \quad (3)$$

Carga: La unidad de *carga* electrostática² es la carga del protón:

$$e \mapsto 1 \text{ unidad atómica de carga} = 1,6021892 \times 10^{-19} \text{ C}. \quad (4)$$

Longitud: La unidad atómica de *longitud* es el radio de Bohr.

$$a_o \mapsto 1 \text{ unidad atómica de longitud (Bohr)} = 5,2917706 \times 10^{-11} \text{ m}. \quad (5)$$

*Grupo de Química Teórica, Universidad Nacional de Colombia.

[†]eedazac@unal.edu.co

¹No debe confundirse la unidad atómica de masa con la que se conoce bajo la sigla u.m.a. que es un doceavo de la masa del átomo de carbono ¹²C

²Nótese que si se emplean las antiguas unidades de carga electrostática statcoulombs, en el denominador de la ecuación no aparece la permitividad eléctrica del vacío ϵ_o , ni el factor de proporcionalidad 4π . En el sistema adimensional que estamos definiendo toda esta constante se hace uno, $1/4\pi\epsilon_0 = 1$.

Esta unidad está relacionada con las constantes que aparecen al resolver el átomo de hidrógeno así:

$$a_0 = \frac{\hbar}{4\pi\epsilon_0 m_e e^2} \quad (6)$$

Energía: La unidad atómica de *energía* es dos veces la energía del estado basal del átomo de hidrógeno³ ($n=1$) calculada a partir de la ecuación (2) .

$$2 \frac{e^2}{8\pi\epsilon n^2 a_0} = 1 \text{ unidad atómica de energía (hartree)} = 4,3598144 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (7)$$

Momento Angular: La unidad de *momento angular* es precisamente \hbar .

$$\hbar \mapsto 1 \text{ unidad atómica de momento angular} = 1,0546 \times 10^{-24} \text{ Js} \quad (8)$$

De manera que en lugar de las unidades del sistema internacional SI, para la masa, la carga y el momento angular: kg, Columb y kgm^2/s respectivamente, tendremos: la masa del electrón m_e , la carga del protón e , y \hbar ($h/2\pi$)

Con estas unidades las constantes de la ecuación (2) se hacen todas iguales a uno: $e = m_e = \hbar = 1/4\pi\epsilon_0 = 1$, con lo que el hamiltoniano toma una forma más simple:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \quad (9)$$

y los valores propios pueden ser expresados por una ecuación muy simple:

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2n^2} \quad (10)$$

Como puede verse el uso de estas unidades simplifica notablemente la notación.

El hamiltoniano para un átomo polielectrónico en unidades atómicas será: La suma de los términos de energía cinética para cada uno de los electrones más los términos de atracción del núcleo por cada electrón y la suma de las repulsiones entre los electrones:

$$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{r_i} + \sum_{i>j}^N \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (11)$$

Algunas equivalencias con otras unidades son las siguientes:

$$1 \text{ Bohr} = 5,2917706 \times 10^{-11} \text{ m} = 0,52917706 \text{ \AA} \quad (12)$$

$$1 \text{ hartree} = 4,3598144 \times 10^{-18} \text{ J} = 27,2114 \text{ eV} = 627.510 \text{ kcal/mol} \quad (13)$$

³Debe tenerse cuidado cuando se revisan escritos de los primeros días de la Teoría Cuántica (antes de los 50) pues en muchos de ellos se toma como referencia para la energía la del átomo de hidrógeno, que se conoce como antiguo Hartree, en contraposición con el actual.