

TEMA 8 : "El Átomo de Hidrógeno" (1)

8.1. Ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides

Uno de los primeros grandes triunfos de la Mecánica Cuántica fue la comprensión de la estructura atómica y su espectroscopia. En el caso de un átomo monoeléctrico la ecuación de Schrödinger puede resolverse exactamente. El prototipo de éstos es el átomo de hidrógeno, y ya en forma catiónica, He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , etc., a los cuales se etiqueta genéricamente como átomos hidrogenoides. Muchos de los resultados obtenidos para el átomo de hidrógeno pueden generalizarse para el caso polielectrico como una buena aproximación inicial.

El modelo del átomo de H se basa en la idea de un electrón moviéndose alrededor de un protón que se localiza en el origen del sistema de coordenadas. El potencial de interacción entre las dos partículas cargadas es uno de tipo

Colombiano :

$$V(\vec{r}) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Como el potencial depende de la distancia, r , si se adopta como origen el núcleo, el potencial tiene "simetría esférica", es decir, centrados en el origen, cada esfera de distinto radio, r , tendrá un valor de $V(r)$. Por tanto, tenemos un campo de fuerzas centrales. Esto conduce a que los coordenadas esféricas, en lugar de las coordenadas cartesianas, sean las más apropiadas para abordar la resolución de la ecuación de Schrödinger y describir la función

Ecuación de Schrödinger para átomos hidrogenoides

Potencial de interacción e—núcleo (Z=+e)

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}|} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Potencial de Fuerza Central

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Ecuación de Schrödinger para un átomo de hidrógeno

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(r, \theta, \phi)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(r, \theta, \phi)}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi(r, \theta, \phi)}{\partial \theta} \right) \right]$$

$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

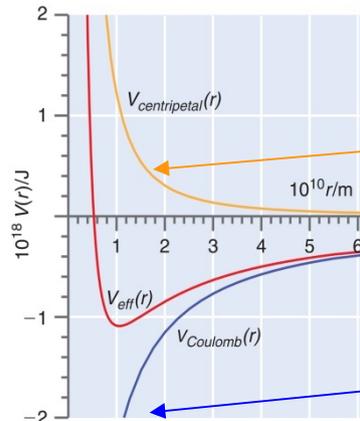
Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Factorizando la función de ondas

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right] + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = ER(r)$$



$$V_{eff}(r) = \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}}_{\text{Potencial centrífugo}} - \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{Potencial coulombico}}$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

de ondas en términos de estas coordenadas:

$$\hat{H}(x, y, z) \longrightarrow \hat{H}(r, \theta, \phi)$$

$$\Psi(x, y, z) \longrightarrow \Psi(r, \theta, \phi)$$

En la transparencia adjunta se muestra la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas. La gran ventaja de este cambio de coordenadas es que la función de ondas puede factorizarse en funciones que dependen de las distintas coordenadas:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

Así, la función de ondas es el producto de una función radial, $R(r)$ y otra angular, $Y_l^m(\theta, \phi)$, que juntamente es el armónico esférico, $Y_l^m(\theta, \phi)$ solución del rotar rígido ya visto al resolver el movimiento de la partícula sobre una esfera.

El cual ya se demostró que a su vez era el producto de dos funciones angulares: $Y_l^m(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi)$.

De este modo, la ecuación de Schrödinger, inicialmente un problema para tres dimensiones, se reduce a resolver la parte correspondiente a la dimensión radial, $R(r)$. Como se muestra en la transparencia la expresión es compleja, hay **un** término que corresponde a la energía cinética y otro término que corresponde a la energía potencial en el que aparecen dos contribuciones, una la debida al término de atracción coulombiano, y otro término, derivado de la parte angular y que formalmente corresponde a un potencial

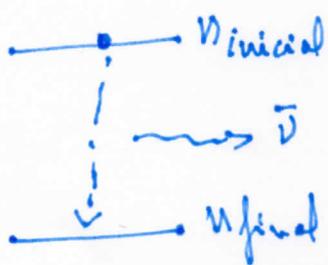
repulsivo, componente centrifuga. En la transparencia se muestra como el potencial total es un potencial efectivo que presenta un mínimo con la distancia, r , a un valor entre 0 e ∞ . ③

Las condiciones de cuantización para que la función $R(r)$ se comporte bien conducen a una solución de la ec. de Schrödinger donde los posibles valores de energía han de estar cuantizados; como se muestran en la transparencia.

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ (eV)} \text{ para } n=1, 2, 3, \dots$$

Esto quiere decir que el tránsito entre dos niveles está también cuantizado y corresponde a una frecuencia o número de onda muy preciso.

$$\Delta E_{ij} = -13.6 \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \text{ (eV)}$$



Por tanto, si imaginamos un proceso de emisión espontánea entre un estado $n_{inicial}$ y estado final de más baja energía, n_{final} , el número de ondas será

$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_{inicial}^2} - \frac{1}{n_{final}^2} \right) \quad n_{inicial} > n_{final}$$

R_H es la constante de Rydberg, valor que tras la resolución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno se mostró que simplemente era un cociente entre constantes universales, como se muestra en la transparencia.

④

Con estos resultados quedaba explicado el misterio del conjunto de líneas discretas que se producían cuando se observaban los líneas de emisión de los espectros atómicos, entre ellos, el del átomo de hidrógeno. Así, los distintos series de líneas, relacionadas por los índices de los cuadrados para distintos números finales enteros se explicaban por la anterior ecuación:

$\bar{\nu}_i$ ($n_{\text{final}} = 1$) Serie de Lyman ($n_{\text{inicial}} = 2, 3, 4, \dots$)
 $\bar{\nu}_i$ ($n_{\text{final}} = 2$) Serie de Balmer ($n_{\text{inicial}} = 3, 4, 5, \dots$)
 $\bar{\nu}_i$ ($n_{\text{final}} = 3$) Serie de Paschen ($n_{\text{inicial}} = 4, 5, 6, \dots$)

Ver figura en la transparencia.

Una última figura de interés en el análisis de los resultados de resolución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, es visualizar, la energía en función de la distancia y el potencial coulombiano, que delimita la región en amarillo. Este potencial genera una especie de "caja" unidimensional, es decir, dependiente de r , para el movimiento de la partícula de masa reducida que esencialmente es el electrón, en el problema del átomo de H. Por un lado se observa que los niveles de más baja energía tienen cajas reducidas, es decir, están muy próximos al núcleo la distribución electrónica. Por otro lado, cuando consideramos números cuánticos elevados, la separación entre niveles disminuye mucho, y la extensión de la densidad electrónica se extiende mucho más en el espacio. Otro resultado notable es comprobar la penetración de la

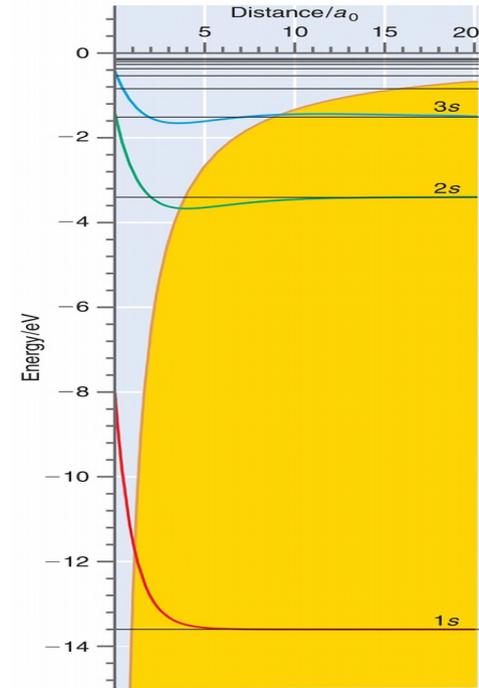
Energías de estados enlazados para átomos hidrogenoides

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2}, \text{ for } n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Definiendo el radio de Bohr $a_0 = \epsilon_0 h^2 / \pi m_e e^2$

$$E_n = -\frac{e^2}{8 \pi \epsilon_0 a_0 n^2} = -\frac{2.179 \times 10^{-18} \text{ J}}{n^2} = -\frac{13.60 \text{ eV}}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.



© 2010 Pearson Education, Inc.

Tránsitos entre estados

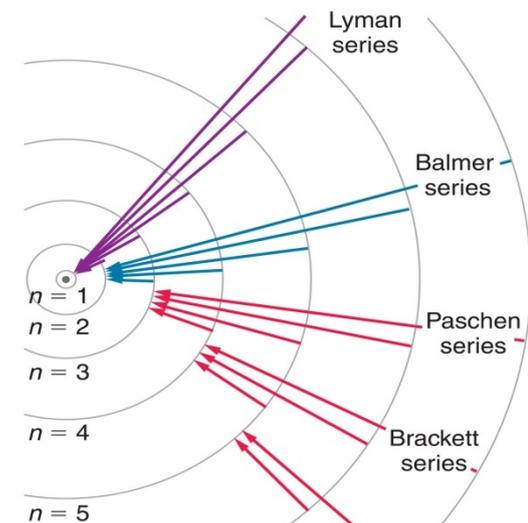
$$\nu = \left| \frac{1}{h} (E_{initial} - E_{final}) \right|$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

$$\nu = \left| \frac{\mu e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_{initial}^2} - \frac{1}{n_{final}^2} \right) \right|$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

$$A/c = 109.677,581 \text{ cm}^{-1} = R_H \text{ (Constante de Rydberg)}$$



Pfund series
© 2010 Pearson Education, Inc.

energía electrónica (funciones $1s, 2s$) en regiones débilmente prohibidas (zona ancha). Esto no debía ser sorprendente ya que lo vamos al estudiar la partícula en una caja con paredes finitas. (5)

8.2. Orbitales Hidrogenoides

Los orbitales del átomo de hidrógeno son las funciones de onda solución de la ecuación de Schrödinger. Estas funciones dependen de 3 números cuánticos n, l y m y de tres variables espaciales, (r, θ, ϕ) .

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

La parte radial depende de los números cuánticos n y l , mientras que los armónicos esféricos dependen de l y m . La constante de normalización de la función de onda se obtiene:

$$1 = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \Psi_{n,l,m}^*(r, \theta, \phi) \cdot \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) \cdot r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

de este modo se tienen por ejemplo:

$$\Psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$$\Psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/2a_0} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)$$

Cuando consideramos un átomo (catión) hidrogenoide de carga nuclear Z , las funciones propias se modifican del siguiente modo:

$$\Psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$\Psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/2a_0} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)$$

Dado que la función de ondas se factoriza, en ocasiones solo se necesita para obtener una propiedad del sistema la información contenida en la parte radial, es por ello que a veces es más conveniente trabajar con la parte radial de la función de ondas, $R(r)$. Su normalización se obtiene del siguiente modo:

$$1 = \int_0^{\infty} |R(r)|^2 \cdot r^2 \cdot dr$$

De este modo la f. radial normalizada tiene una constante de normalización diferente de la correspondiente función de ondas total. Así para el átomo de H:

$$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

Hay que hacer notar que las formas funcionales son las mismas que los correspondientes a $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$, lo que cambia es la constante por la que se multiplica a la función. En las transacciones siguientes se recogen las formas funcionales de $R_{nl}(r)$ y $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$ para los primeros estados del átomo de H.

Hay que señalar que cada función de ondas depende de 3 números cuánticos, n , l y m , pero sin embargo, la energía solamente de n por tanto hay degeneración para el átomo de H, y todos los átomos (cationes) hidrogenoides en general. La degeneración es n^2 . Así:

Nivel	$n=1$	$\Psi_{100}(r, \theta, \phi) = \Psi_{1s}$
"	$n=2$	$\Psi_{2lm}(r, \theta, \phi) \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{2s} \\ \Psi_{2p} \end{array} \right.$
"	$n=3$	$\Psi_{3lm}(r, \theta, \phi) \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{3s} \\ \Psi_{3p} \\ \Psi_{3d} \end{array} \right.$

degeneración: $1^2 = 1$

degeneración: $2^2 = 4$

degeneración: $3^2 = 9$

Otra cuestión importante sobre las funciones de ondas del átomo de hidrógeno es la naturaleza compleja de algunas de estas funciones. Ello es debido a la parte angular de las mismas, ya que para $m_l > 0$, las funciones dependientes de ϕ son de tipo imaginario: $e^{\pm i m_l \phi}$. (7)

Para facilitar el tratamiento gráfico y ciertos análisis de la función de ondas se empleó la estrategia de buscar combinaciones lineales de las f. de ondas que fueran reales. Es de este modo que surgen los orbitales $2p_x$ o $2p_y$:

$$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{2p_{-1}} + \Psi_{2p_{+1}})$$

$$\Psi_{2p_y} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (\Psi_{2p_{+1}} - \Psi_{2p_{-1}})$$

En la transparencia adjunta se representan de distintas formas los orbitales del átomo de hidrógeno, o funciones de ondas $\Psi_{n,m,l}(r,\theta,\phi)$ del hamiltoniano atómico. Lo primero que conviene destacar es el nombre utilizado para referirse a las distintas funciones de ondas, ORBITAL, el origen del nombre es el término usado por Niels Bohr en su propuesta del átomo de H donde imponía la necesidad de que el electrón orbitaba entorno al núcleo en unas órbitas precisas que se caracterizaban por la cuantización de su momento angular. Las soluciones de H confirman esta intuición de Bohr, pero también indica, de acuerdo al principio de incertidumbre de Heisenberg la imposibilidad de conocer la trayectoria (posición) exacta

$$n = 1, l = 0 \quad R_{10}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$$n = 2, l = 0 \quad R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

$$n = 2, l = 1 \quad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$n = 3, l = 0 \quad R_{30}(r) = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$$

$$n = 3, l = 1 \quad R_{31}(r) = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$$

$$n = 3, l = 2 \quad R_{32}(r) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$$

To form the hydrogen atom eigenfunctions, we combine $R_{nl}(r)$ with the spherical harmonics and list here the first few of the infinite set of normalized wave functions $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ for the hydrogen atom. Note that, in general, the eigenfunctions depend on r , θ , and ϕ , but are not functions of θ and ϕ for $l = 0$. The quantum numbers are associated with the wave functions using the notation ψ_{nlm} .

$$n = 1, l = 0, m_l = 0 \quad \psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$$n = 2, l = 0, m_l = 0 \quad \psi_{200}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

$$n = 2, l = 1, m_l = 0 \quad \psi_{210}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$$

$$n = 2, l = 1, m_l = \pm 1 \quad \psi_{21\pm 1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$n = 3, l = 0, m_l = 0 \quad \psi_{300}(r) = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$$

$$n = 3, l = 1, m_l = 0 \quad \psi_{310}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0} \cos \theta$$

$$n = 3, l = 1, m_l = \pm 1 \quad \psi_{31\pm 1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$n = 3, l = 2, m_l = 0 \quad \psi_{320}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} (3\cos^2 \theta - 1)$$

$$\psi_{2p_x}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta \cos \phi$$

$$\psi_{2p_y}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta \sin \phi$$

$$\psi_{2p_z}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$$

$$\psi_{3p_x}(r, \theta, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \phi$$

$$\psi_{3p_y}(r, \theta, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0} \sin \theta \sin \phi$$

$$\psi_{3p_z}(r, \theta, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0} \cos \theta$$

$$\psi_{3d_{z^2}}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$\psi_{3d_{xz}}(r, \theta, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$$

$$\psi_{3d_{yz}}(r, \theta, \phi) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$$

$$\psi_{3d_{x^2-y^2}}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin^2 \theta \cos 2\phi$$

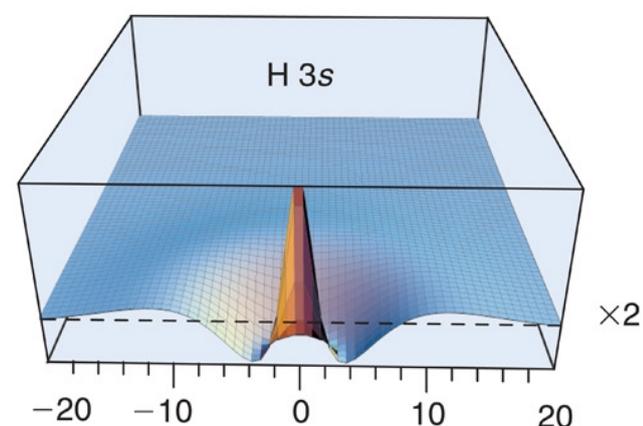
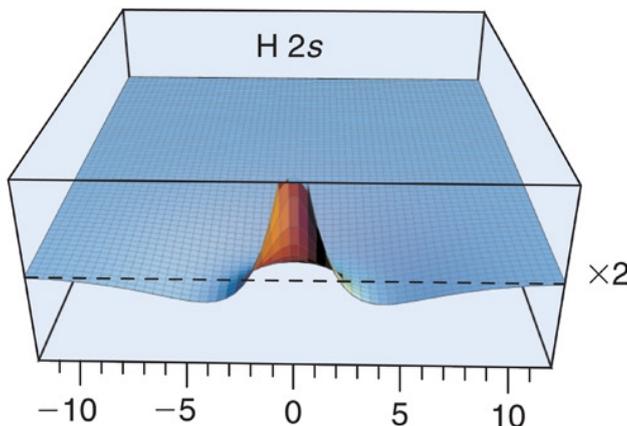
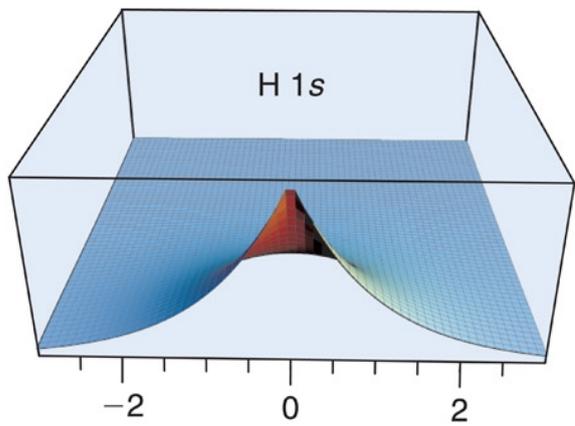
$$\psi_{3d_{xy}}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin^2 \theta \sin 2\phi$$

del electrón. Es por eso que cada solución posible, corresponde ⁽⁸⁾ a un estado distinto del sistema con una energía precisa, $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)$ se identifique con un ORBITAL que vendrá caracterizado por una forma, dada por el armónico esférico, $Y_{l,m}(\theta,\phi)$, y una distribución radial dada por $R(r)$. El término ORBITAL indica probabilidad y no certezas de una órbita exacta alrededor de un núcleo. En las siguientes transparencias se muestran distintas formas de representar la función de ondas. Dado que se trata de representar una función tridimensional, no es posible en el espacio 3D dar una imagen única, ya que necesitaríamos 4 ejes coordenados para hacerlo, la función $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)$ y las ~~cuatro~~ coordenadas. De ahí que se presentan representaciones 3D, donde el eje z incluye el valor de la función en un plano, donde variamos x, e y. O, un diagrama de armos de nivel de mismo valor de Ψ en una representación 2D, o simplemente el valor de la función radial dependiente de $R(r)$.

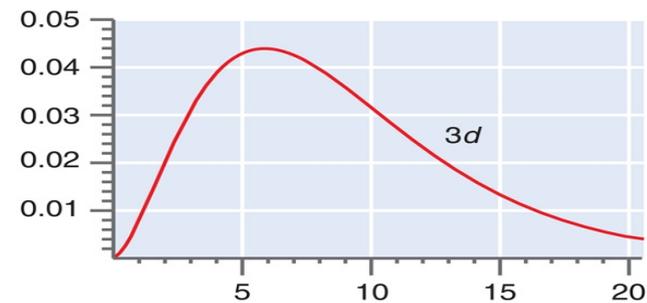
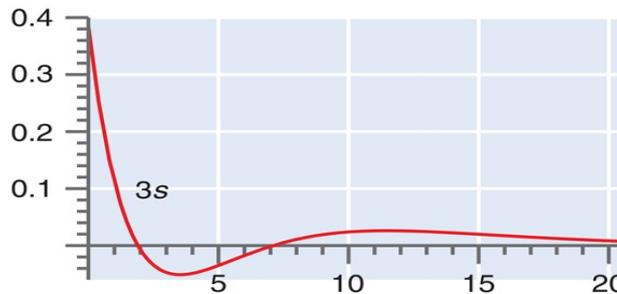
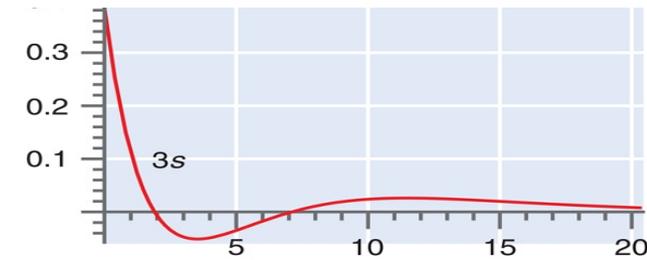
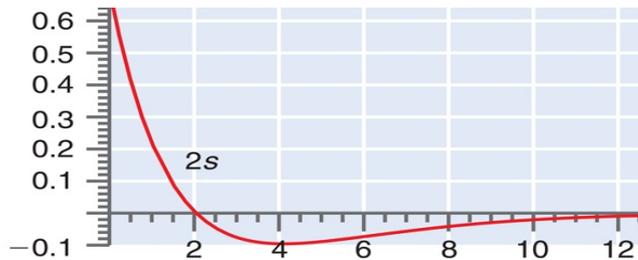
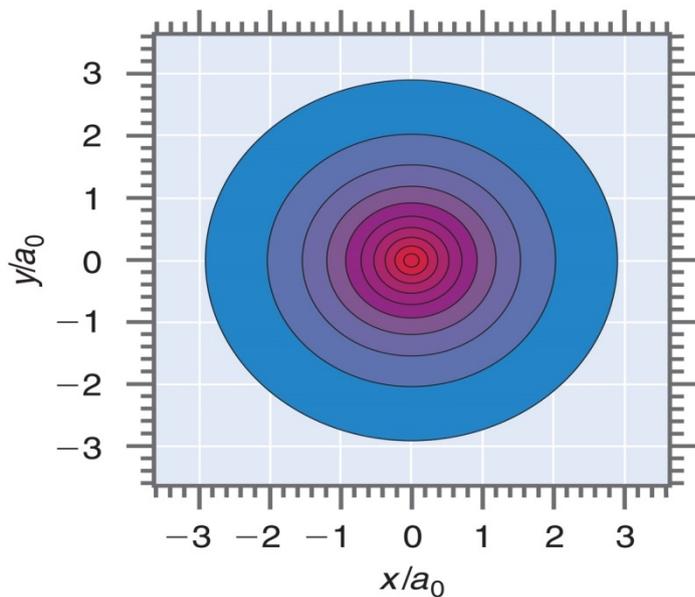
8.3. Funciones de Distribución Radial

Como ya se indicó al comienzo del capítulo, el que el átomo hidrogenoide sea un problema de campo de fuerzas centrales, confiere a sus soluciones una simetría esférica. Por ello es interesante examinar la dependencia radial, ya que es la propiedad dominante de parte de las propiedades del edificio atómico.

Funciones de ondas de estados enlazados para átomos hidrogenoides



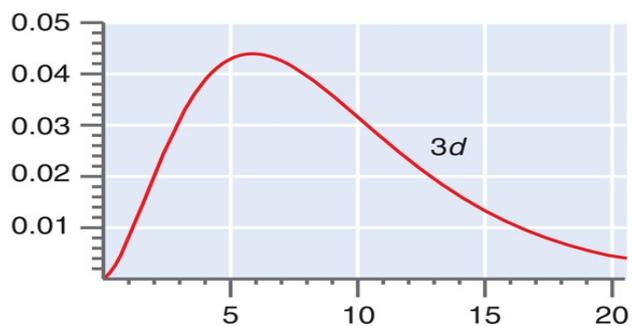
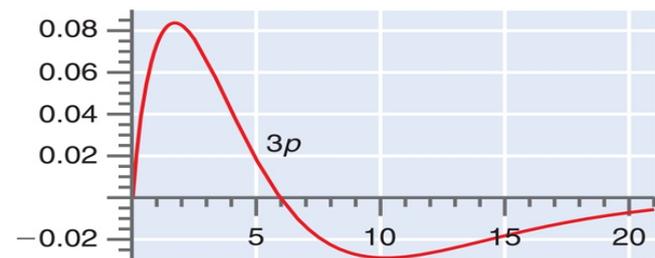
© 2010 Pearson Education, Inc.



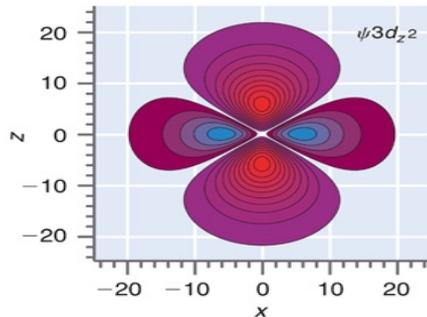
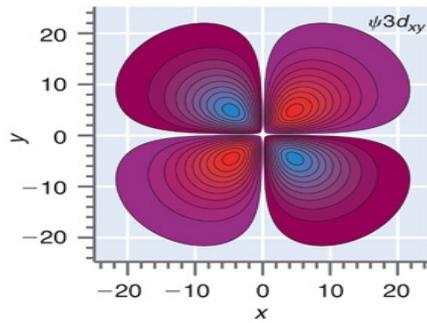
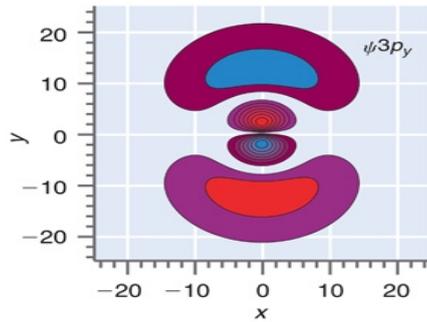
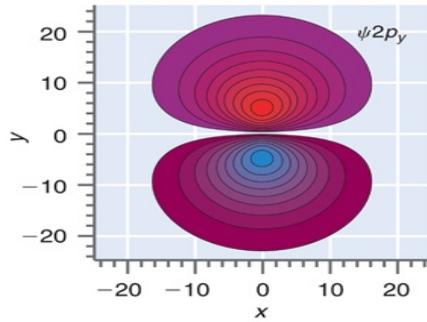
(b)

© 2010 Pearson Education, Inc.

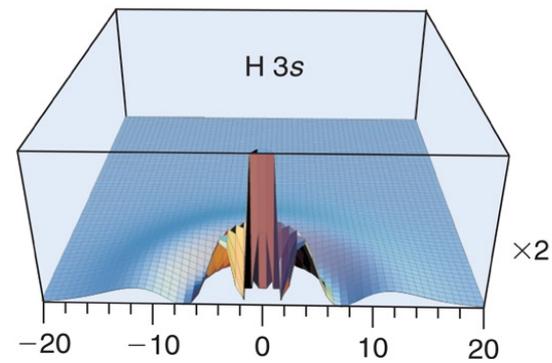
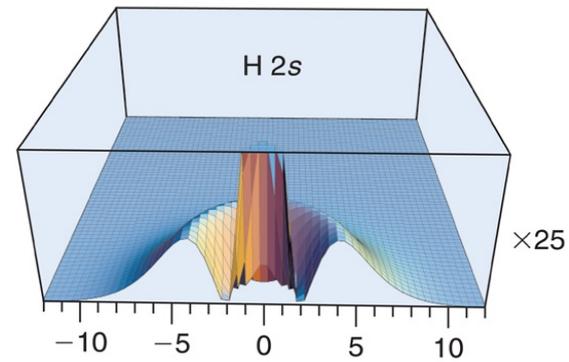
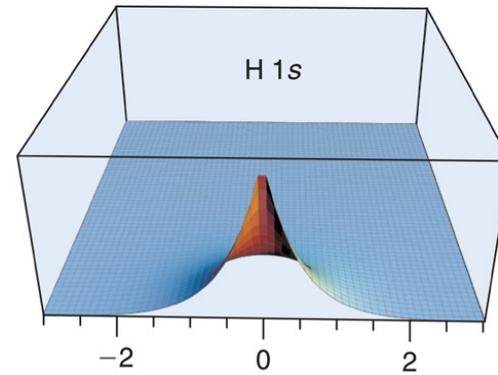
Education, Inc.



Representaciones 2D de orbitales Ψ



Representaciones 3D del cuadrado de la función de ondas ($|\Psi|^2$)



De este modo se define la probabilidad de encontrar el electrón a una distancia r_0 del núcleo como:

$$dP(r_0) = R^*(r_0) \cdot R(r_0) \cdot r_0^2 \cdot dr$$

Cuando este término diferencial se integra a todos los posibles valores de r , es decir, en el intervalo $(0, \infty)$, debe darnos la certeza:

$$1 = \int_0^{\infty} |R(r)|^2 \cdot r^2 \cdot dr$$

Se define la función de distribución radial por:

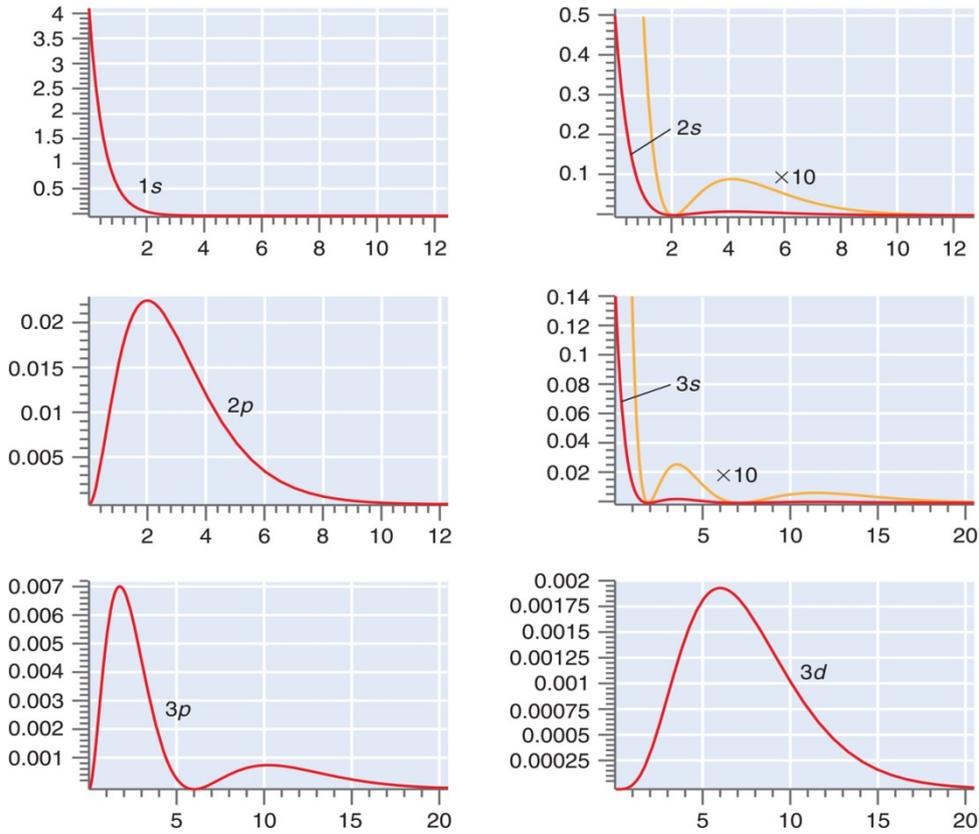
$$FDR = |R(r)|^2 \cdot r^2$$

Esta función es una densidad de probabilidad lineal y nos informa de la probabilidad de encontrar el electrón en una determinada distancia del núcleo. En la última transparencia se presentan varias de estas funciones de distribución radial para orbitales $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$. Al igual que hemos visto para otros problemas de sistemas cuánticos, aparecen valores de r para los que la $FDR = 0$, es decir, nodos, que en este caso se llaman "NODOS RADIALES", el número de éstos para una orbital dado es: $n - l - 1$.

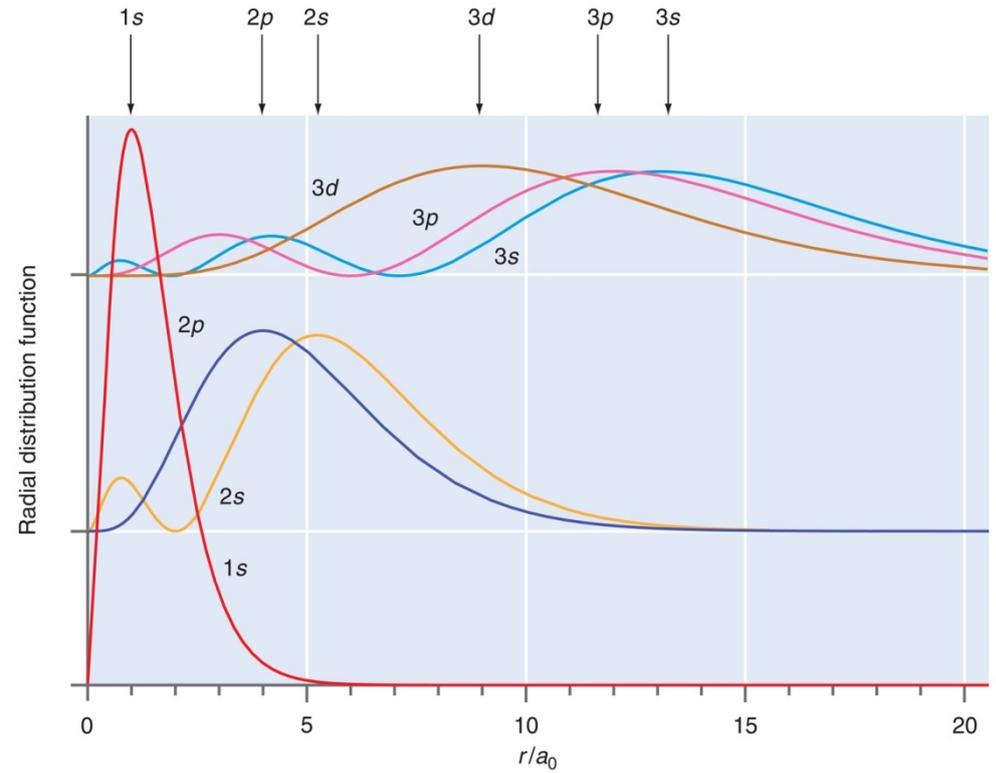
Funciones de Distribución Radiales

$$R^2(r)$$

$$r^2 \cdot R^2(r)$$



© 2010 Pearson Education, Inc.



© 2010 Pearson Education, Inc.