

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

Coulombico :

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

Como el potencial depende de la distancia, r , si se adopta como origen el núcleo, el potencial tiene "simetría esférica", es decir, cada esfera de distinto

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

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

Ecuación de Schrödinger para un átomo de hidrógeno

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

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

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

Factorizando la función de ondas

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

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Potencial centrífugo

Potencial coulombico

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, puede a la energía cinética

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

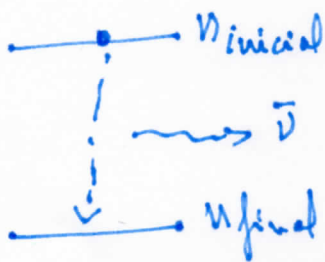
repulsivo, componente centrifuga. En la transparencia se muestra como el potencial total es un potencial efectivo que presenta un mínimo con la distancia, r , a un valor entre 0 e ∞ . ③

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

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

se mostró que simplemente era un cociente entre constantes

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, las distintas series de líneas, relacionadas por los índices de los cuadrados para distintos números finales enteros se explicaban por la anterior ecuación:

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

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 energía tienen cajas reducidas, es decir, están



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

... aum... es conseguir la penetración de la

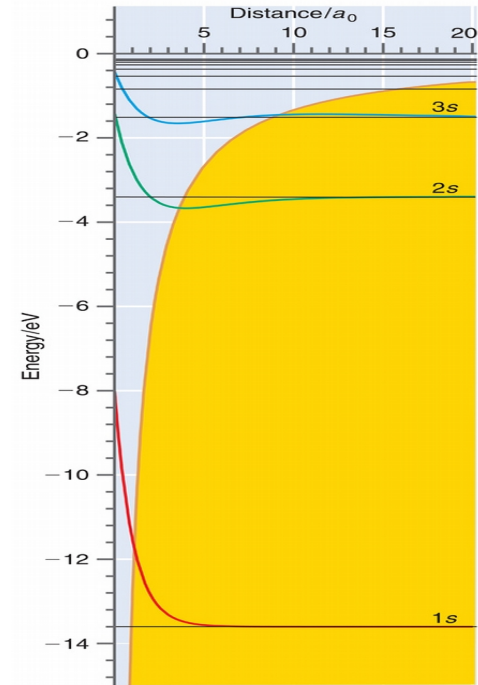
Energías de estados enlazados para átomos hidrogenoides

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

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.

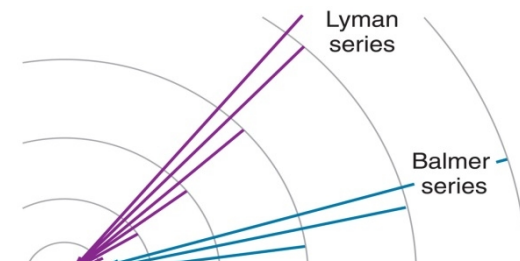


© 2010 Pearson Education, Inc.

Tránsitos entre estados

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

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

$A/c = 109.677.581 \text{ cm}^{-1} = R_{\infty}$ (Constante de Rydberg)

$n = 5$

Pfund series
© 2010 Pearson Education, Inc.

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

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:

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

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

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^l e^{-r/a_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^m$$

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:

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

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 depende solo de n .

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

" n = 2 $\Psi_{2lm}(r, \theta, \phi)$ } Ψ_{2s} degeneración
n = 3 $\Psi_{3lm}(r, \theta, \phi)$ } Ψ_{3s} 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: $e^{\pm i m_l \phi}$.

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 en órbitas precisas que se caracterizaban por números cuánticos.



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

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

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

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

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

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

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

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} .

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

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

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

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

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

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

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

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 áreas 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

... se indicó al comienzo del capítulo, el que el ... de las

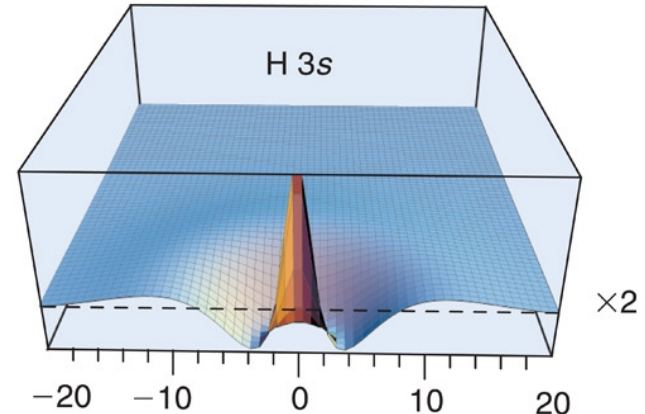
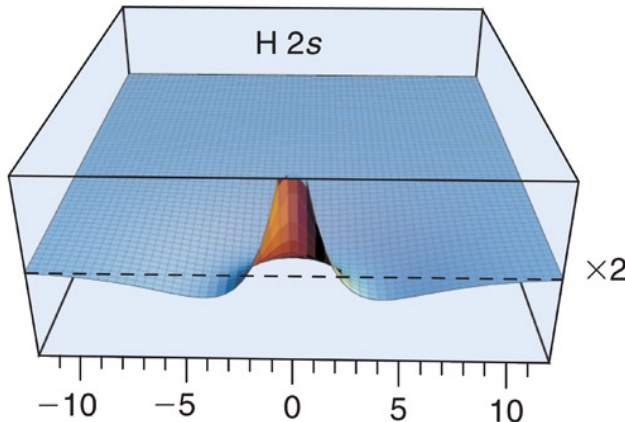
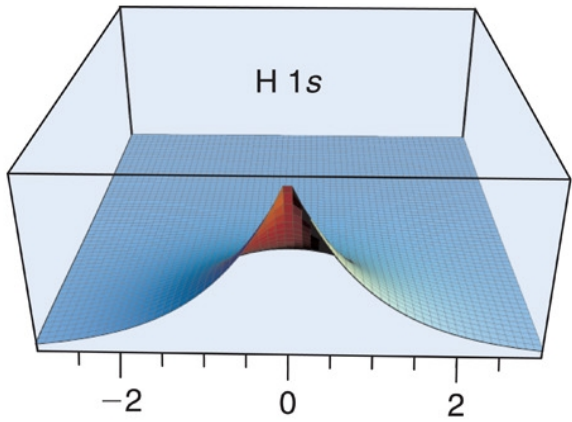
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

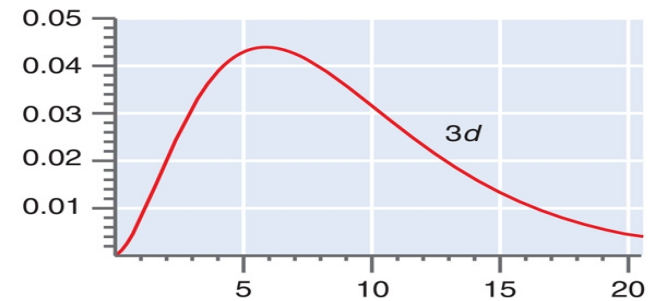
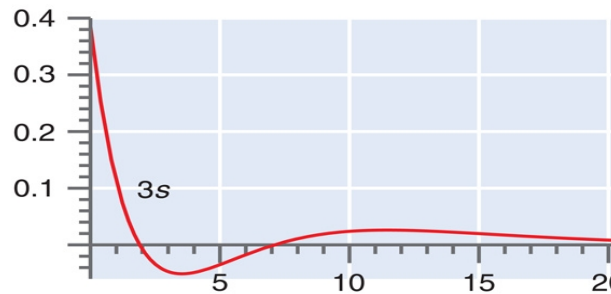
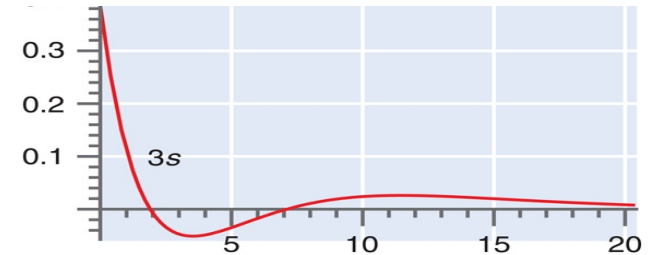
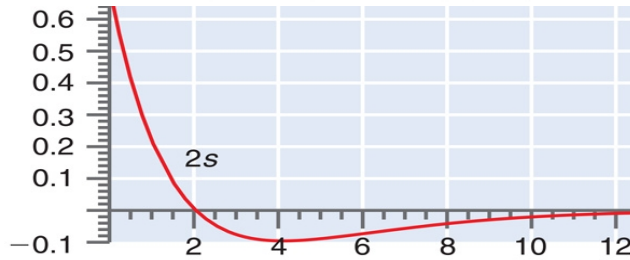
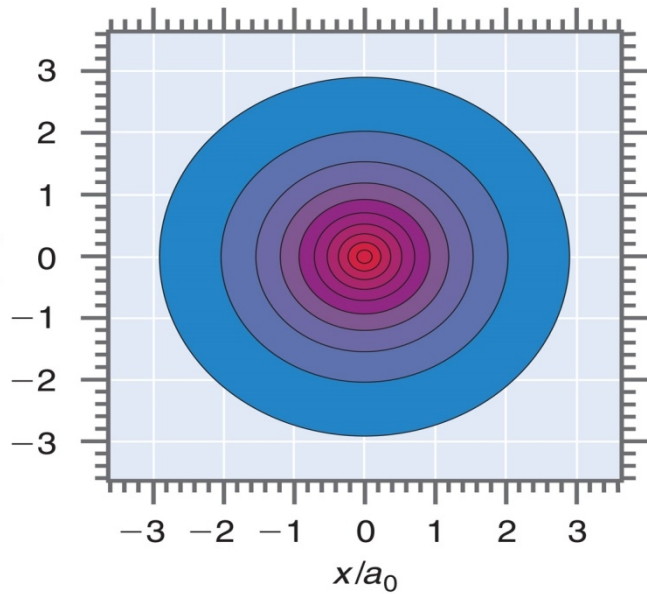
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

des del edificio atómico.

Funciones de ondas de estados enlazados para átomos hidrogenoides



© 2010 Pearson Education, Inc.



© 2010 Pearson Education, Inc.

© 2010 Pearson Education, Inc.

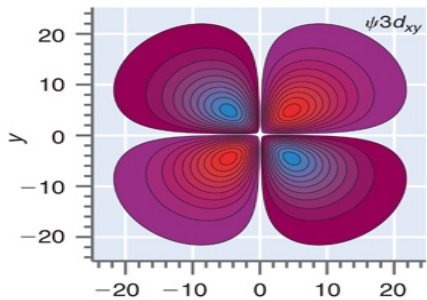
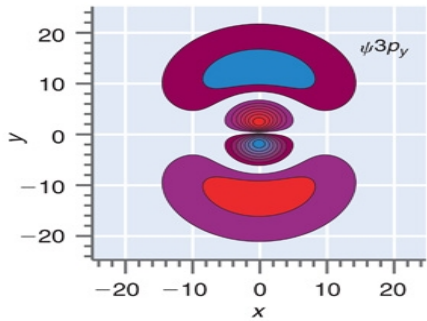
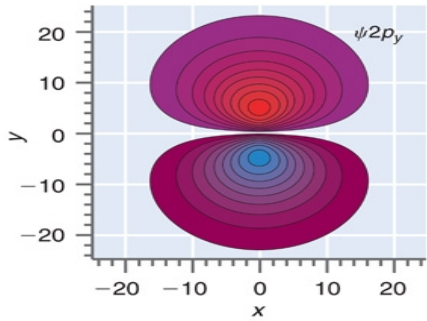
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

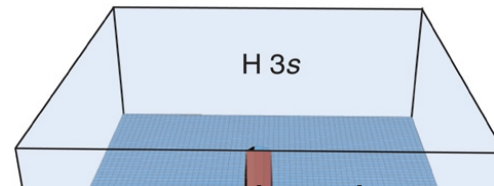
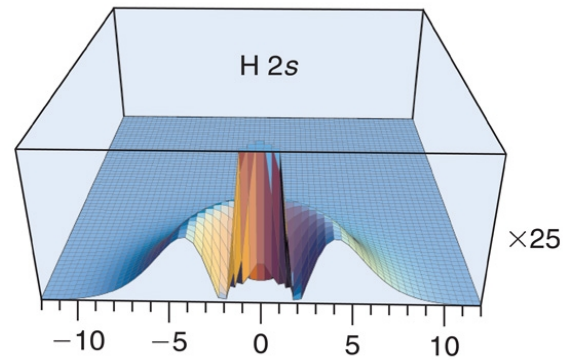
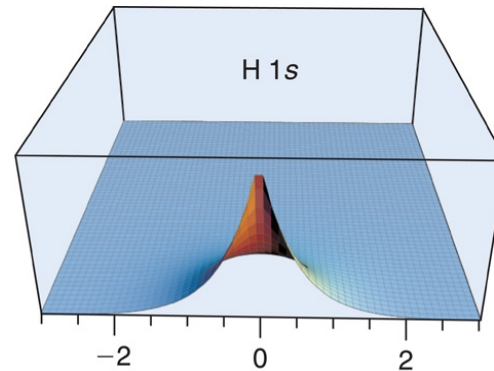
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



Representaciones 2D de orbitales Ψ



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



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

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 dada es: $n - l - 1$.

Cartagena99

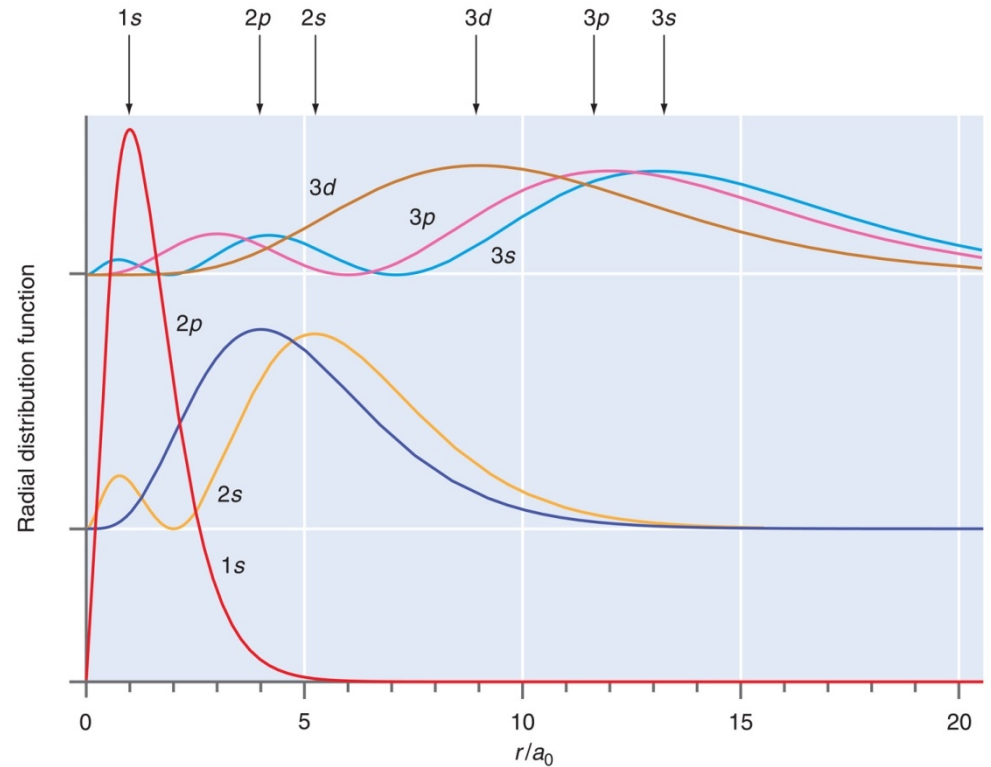
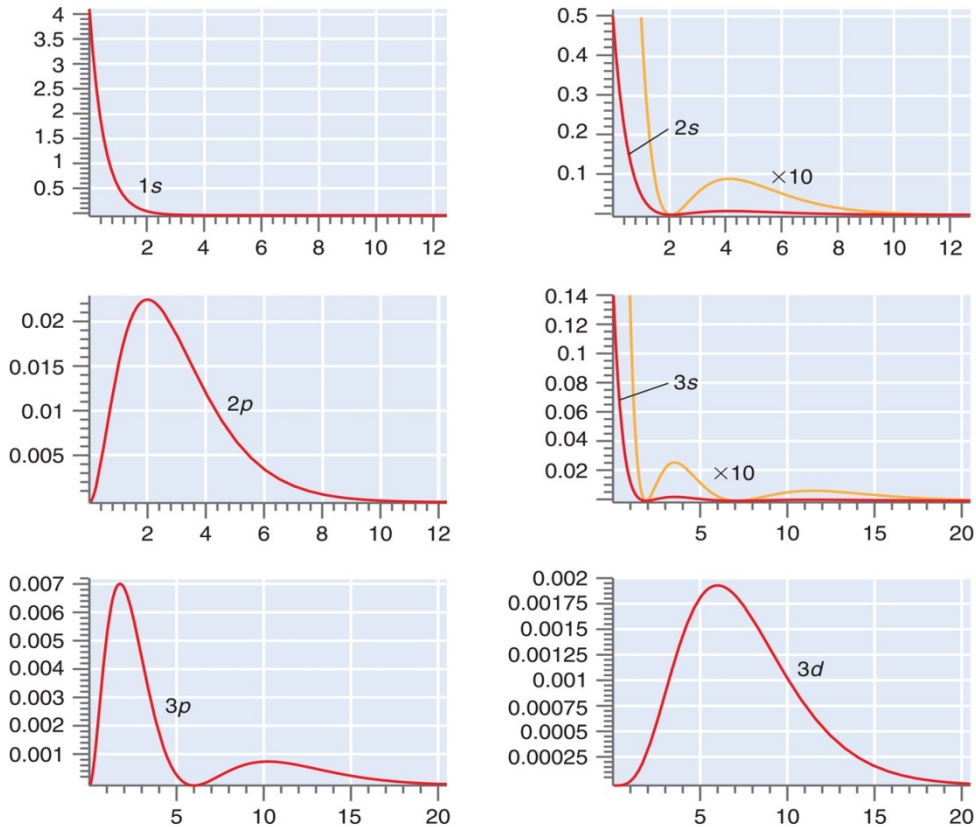
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Funciones de Distribución Radiales

$$R^2(r)$$

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



© 2010 Pearson Education, Inc.

Cartagena99

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70**