

ANÁLISIS RADIAL

El valor esperado o medio de la distancia entre el electrón y el núcleo es el elemento de matriz de la función de onda con el operador radial \hat{r} , que equivale a la integración de la densidad de distribución radial entre el núcleo y el infinito:

$$\bar{r} = \langle \Psi^* | \hat{r} | \Psi \rangle = \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

La función radial del estado 1s del hidrógeno es:

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

Si evaluamos esta integral en el caso del estado 1s ($n = 1$, $l = 0$) del átomo de hidrógeno:

$$\bar{r} = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr = \frac{3}{2} a_0 \approx 79.3 \text{ pm}$$

Por otra parte, la distancia más probable al núcleo para un electrón en ese estado se obtendría buscando el mínimo donde la derivada de la densidad de probabilidad se hace 0:

$$\frac{d|R_{nl}(r)|^2 r^2}{dr} = -\frac{2}{a_0} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 + 2e^{-\frac{2r}{a_0}} r = 0$$

$$r = a_0$$

que es el conocido radio de Bohr $a_0 \approx 52.9 \text{ pm}$

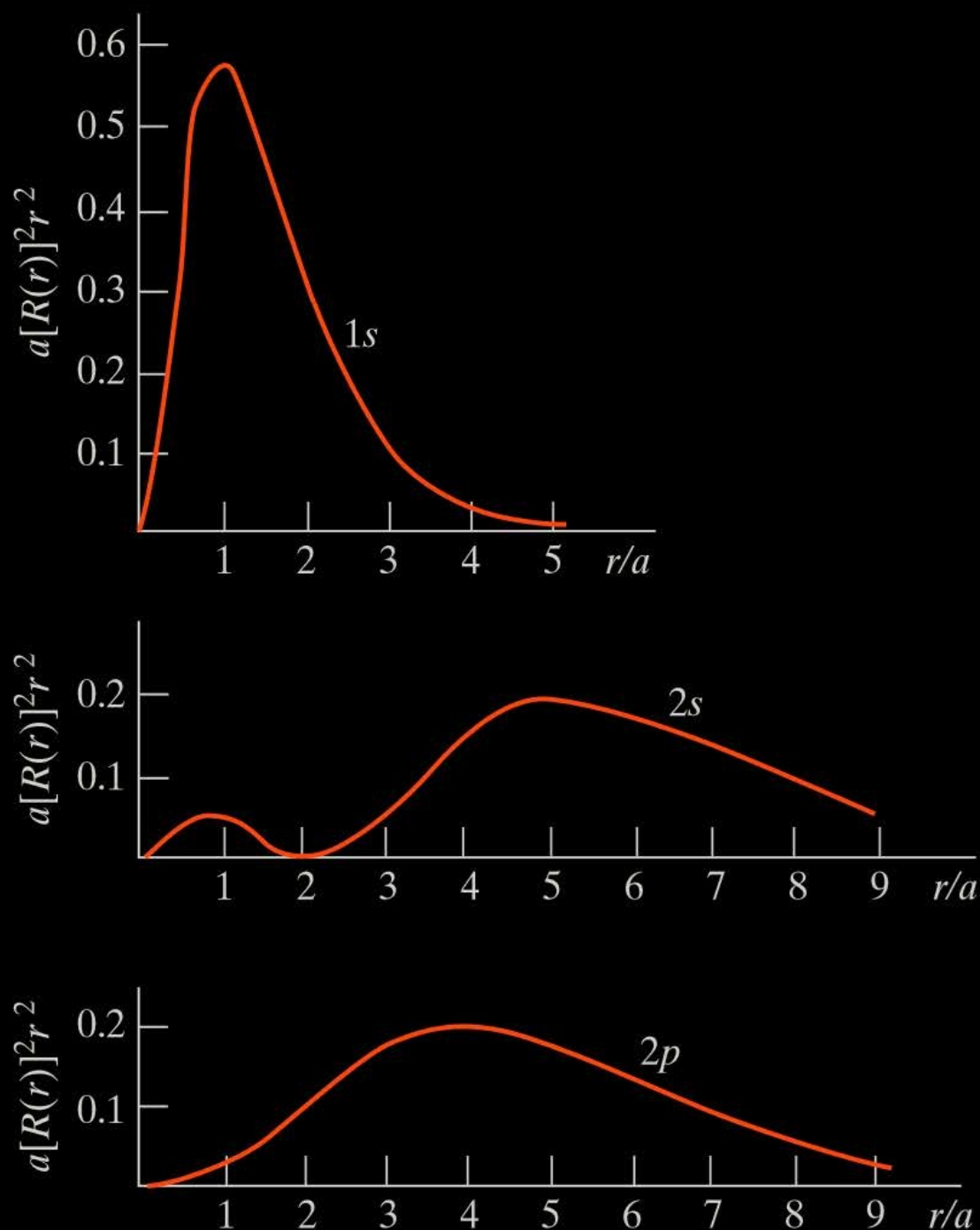


Figura: Gráficos de línea de la densidad de distribución radial de los estados $1s$, $2s$ y $2p$ de la solución cuántica del átomo de hidrógeno.

Con respecto a la figura debe remarcarse que:

- La función de densidad de probabilidad radial $|R_{nl}(r)|^2 r^2$ depende del valor del número cuántico l
- Los diversos valores de l para cada n dan una variedad de máximos aunque siempre hay uno predominante
- Solo se tiene un valor apreciable cerca del núcleo cuando $l = 0$.