Part radial. Funció de distribució radial

Tal com ja es va explicar l'últim dia a classe, les solucions matemàtiques de l'equació de Schrödinger per l'àtom d'hidrogen es poden separa en la part

$$\Psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r) \cdot A_{l,m_l}(\theta,\varphi)$$

Comencem estudiant la forma de la part radial de les funcions. A la següent taula (1.7) les teniu llistades, pels diferents nombres quàntics. Fixeu-vos, que tal com vàrem dir, aquesta part només depèn de *n* i de *l*.

Taula 1.7 Part radial per a diferents orbitals atòmics $\rho = \dfrac{2Z}{n\,a_0} r$

N	*l*	Orbital	$R_{n,l}(r)$
1	0	1*s*	$2\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2}\rho}$
2	0	2*s*	$\dfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)e^{-\frac{1}{2}\rho}$
	1	2*p*	$\dfrac{1}{2\sqrt{6}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho\, e^{-\frac{1}{2}\rho}$
3	0	3*s*	$\dfrac{1}{9\sqrt{3}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (6-6\rho+\rho^2)e^{-\frac{1}{2}\rho}$
	1	3*p*	$\dfrac{1}{9\sqrt{6}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (4-\rho)\rho\, e^{-\frac{1}{2}\rho}$
	2	3*d*	$\dfrac{1}{9\sqrt{30}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\frac{1}{2}\rho}$

La representació de les diferents funcions (en aquest cas concret la part radial) la podeu tenir fent servir Wolfram :
(https://demonstrations.wolfram.com/HydrogenAtomRadialFunctions/) [1]

---

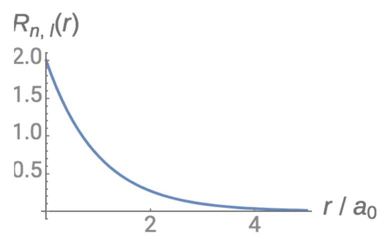
[1] Porscha McRobbie and Eitan Geva;
"Hydrogen Atom Radial Functions"
http://demonstrations.wolfram.com/HydrogenAtomRadialFunctions/
Wolfram Demonstrations Project Published: January 8, 2010

"Hydrogen Atom Radial Functions"
http://demonstrations.wolfram.com/HydrogenAtomRadialFunctions/
Wolfram Demonstrations Project Published: January 8, 2010

Es tracta de funcions exponencials, multiplicades per funcions polinòmiques que depenen del radi (r). Per tal de representar-les, i recordant el que vàrem fer amb la partícula en una caixa, comencem buscant els nodes de les funcions. Aquests nodes ens diran allà a on no es pot trobar l'electró.

En el següent fitxer hi trobareu els nodes de cadascuna de les funcions anteriors, i la seva representació.

Si ens fixem en la primera solució, veurem que la funció presenta el següent gràfic:

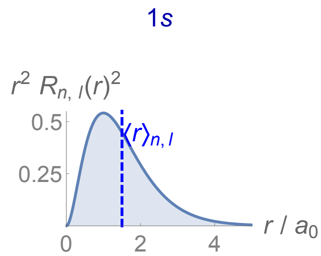


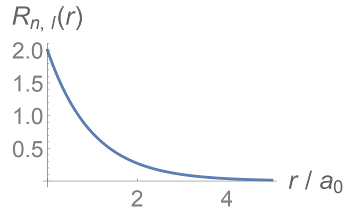
La funció al quadrat és molt semblant. En un primer moment ens fa pensar en que allà on és màxima la probabilitat de trobar l'electró és al centre del nucli. **Té sentit això?**

El que li falta a aquesta definició és tenir en compte tot l'espai (no només un sol punt, que és el que representa la variable r). Per tant s'ha de integrar per tots els punts que es troben en la mateixa distància (fixeu-vos que estem parlant de una esfera). Per tant, qui ens donarà la probabilitat de poder trobar l'electró no és la part radial de la funció d'ona al quadrat, si no la **Funció de Distribució Radial:**

$$D(r) = r^2 R^2(r) \tag{1.51}$$

i dóna la probabilitat de trobar l'electró a una distància determinada del nucli atòmic.





Fixeu-vos ara que la probabilitat de trobar l'electró r=0 és nul·la, tal com era d'esperar. En aquest cas, el màxim de probabilitat de trobar-lo correspon a a_0. **Us recorda alguna teoria clàssica aquest valor? Quina és la diferència principal entre les dues?**

Per la resta de funcions radials podeu anar jugant amb l'aplicació (Wolfram) que us he posat abans. Fixeu-vos que en tots els casos la probabilitat de trobar l'electró a r = 0 i r = ∞ és nul·la. A més, el nombre de nodes és el mateix que presenten les seves respectives funcions radials.

Si mireu els nodes, en el cas de l=0, és a dir, orbitals s, veureu que correspon a n-1. Però si mireu el cas dels orbitals p (l=1) és n-2, i el cas de orbitals d (l=2) els node són n-3. Per tant, podem dir que el nombre de nodes són **n-l-1!!**