

TEMA 3. ESTRUCTURA ATÓMICA Y ESPECTRO ATÓMICO

ACTIVIDAD EXTRA: GRÁFICO DE FUNCIONES DE ONDA RADIALES DE ORBITALES ATÓMICOS

El tercer tema de la asignatura tiene que ver con la aplicación de la ecuación de Schrödinger para conocer las funciones de onda de los orbitales atómicos y las energías asociadas a los mismos. En esta actividad se propone la utilización de una herramienta que permite calcular y graficar la parte radial de funciones de onda de orbitales atómicos y calcular la función de distribución radial de modo de obtener información respecto de la probabilidad de encontrar electrones en estos orbitales .

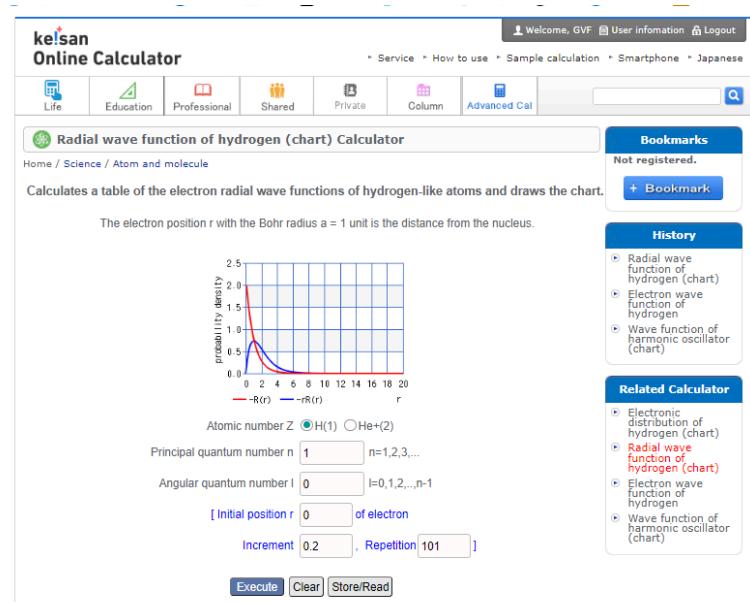
Objetivos:

- Visualizar los cambios en la forma de las funciones de onda radiales de Orbitales Atómicos al variar los números cuánticos n y l
- Identificar números de nodos y la variación de la densidad de probabilidad radial en función de r .

CONSIGNA

Para graficar las parte radial de las funciones de onda de los orbitales atómicos vamos a utilizar la [Calculadora Keisan](#). Las actividades a realizar con esta herramienta son:

1. Utilice el enlace para abrir la herramienta. Al hacerlo se encontrará con la siguiente pantalla:



2. Conservar los valores por defecto generará la función de onda radial para un orbital atómico con $n=1$ y $l=0$. Al presionar Execute obtendrá un gráfico de la función de onda radial y de esta multiplicada por r y una a tabla de valores de r , $R(r)$ y $rR(r)$. Para un mejor resultado gráfico le recomendamos que utilice los siguientes valores en los parámetros seleccionables:

- a. Initial position: 0
- b. Increment: 0.3
- c. Repetition: 150

Repita el procedimiento para los valores de $n= 1, 2$ y 3 y los correspondientes valores de l .

3. Copie los datos obtenidos a una hoja de excel, Origin o algún otro software similar. Grafique $R(r)$ para los distintos orbitales.
4. De acuerdo a la justificación 10.2 (Atkins, 2008) la función de distribución radial está dada por $r^2R(r)^2$. Calcule este parámetro para cada orbital atómico y grafique $r^2R(r)^2$ vs r para todos ellos.
5. ¿Qué conclusiones puede sacar de estas gráficas?
6. Prepare un informe incluyendo las gráficas que elaboró y todas las conclusiones que sacó. Súbalo en el aula virtual de la materia.