Química cuántica I: Funciones radiales hidrogenoides

Prof. Jesús Hernández Trujillo   Facultad de Química, UNAM

Tras la separación de variables en la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno en coordenadas esféricas, se obtiene la ecuación radial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\left[\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\ell(\ell+1)-\frac{Ze^2}{r}-E\right]R(r)=0$$

con solución

$$R_{nl}(r)=-\left\{\frac{(n-\ell-1)!}{2n\left[(n+\ell)!\right]^3}\right\}^{1/2}\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{\ell+3/2}r^\ell e^{-Zr/na_0}L_{n+l}^{2\ell+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right),\quad 0\le\ell\le n-1$$

donde

$$a_0=\frac{\hbar^2}{m_e e}=0.52918\,\text{Å}$$

es el radio de Bohr, y $L_n^k(x)$ son los polinomios asociados de Laguerre. Algunas relaciones que satisfacen estos polinomios:

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(x) = \sum_{k=0}^{n-\ell-1}(-1)^{k+1}\frac{\left[(n+\ell)!\right]^2}{(n-\ell-1-k)!(2\ell+1+k)!k!}x^k \tag{1}$$

$$xL_n^{k\,\prime\prime}(x) = (x-k-1)L_n^{k\,\prime}(x)-(n-k)L_n^k(x) \tag{2}$$

Algunos polinomios asociados de Laguerre:

$n=1$	$\ell=0$	$L_1^1(x)=-1$
$n=2$	$\ell=0$	$L_2^1(x)=-2!(2-x)$
	$\ell=1$	$L_3^3(x)=-3!$
$n=3$	$\ell=0$	$L_3^1(x)=-3!(3-3x+\frac{1}{2}x^2)$
	$\ell=1$	$L_4^3(x)=-4!(4-x)$
	$\ell=2$	$L_5^5(x)=-5!$

Ejercicio: Obtén $R_{31}(r)$.

Bibliografía.

1. D. A. McQuarrie, J. D. Simon. *Physical Chemistry. A Molecular Approach.* University Science Books 1997.

2. L. Pauling, E. B. Wilson. *Introductions to Quantum Mechanics. With Applications to Chemistry.* McGrau-Hill 1935.