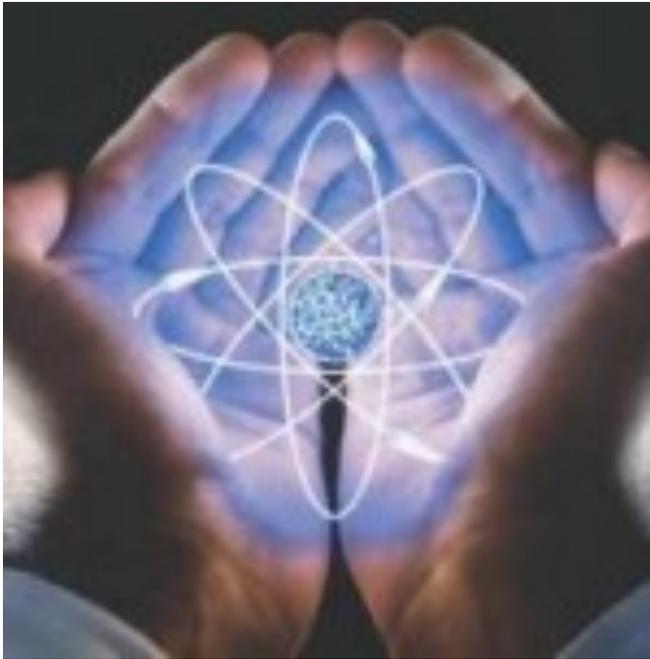


# El Atomo de Hidrógeno

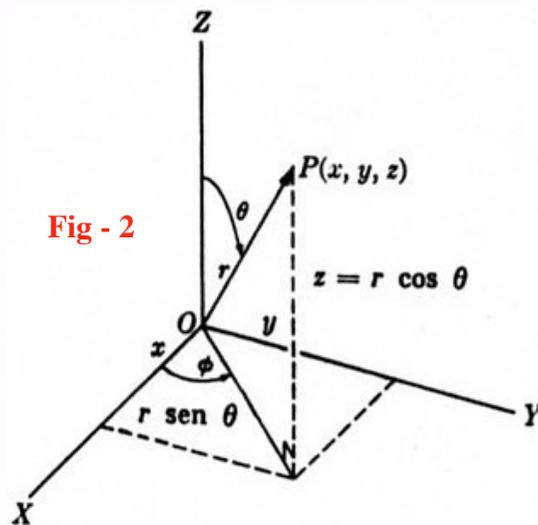


- \* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*", 4ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 2.**
- \* Moeller, T., "*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "*Química Inorgánica*", Reverté, 1994. **Capítulo 2.**
- \* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "*Inorganic Chemistry*", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. **Capítulo 1.** Traducción española de la 2ª Ed. "*Química Inorgánica*", Pearson Prentice Hall, 2006. **Capítulo 1.**
- \* Paraira, M.; Pérez González, J. J., "*Cálculos básicos en estructura atómica y molecular*", Ed. Vicens-Vives, 1988. **Capítulo 5.**

- \* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "*Chemical Bonding and Molecular Geometry*", Oxford University Press, 2001. **Capítulo 3.**
- \* Lagowski, J. J., "*Modern Inorganic Chemistry*", Marcel Dekker Inc, 1973. Traducción española: "*Química Inorgánica Moderna*", Reverté, 1978. **Capítulo 1.**

Apliquemos la Ecuación de Schrödinger al  $e^-$  del átomo de Hidrógeno.

Similar a un foso de potencial tridimensional, pero esférico en lugar de cúbico.  
Por comodidad de cálculo matemático se utilizan coordenadas polares.



Coordenadas esféricas

$$x = r \operatorname{sen} \theta \cos \phi$$

$$y = r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$

$$H \Psi = E \Psi$$

Es un problema matemático, con solución matemática.  
Condiciones limitantes para hacer  $\Psi$  aceptable.

- \* Deber ser normal, la probabilidad de encontrar al  $e^-$  en la totalidad del espacio es máxima ( $\int \Psi \Psi^* d\tau = 1$ ).
- \* Continua, existe aun cuando tome valores  $\Psi = 0$ .
- \* Toma un único valor.
- \* Tiende a cero en el infinito, ya que el átomo no es finito.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 39.

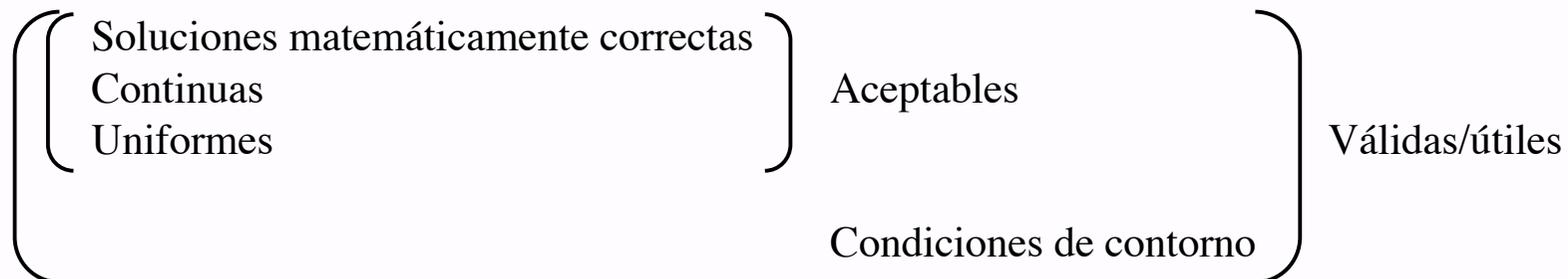
$$\Psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = \overbrace{R_{n l}(r)}^{\text{Parte Radial}} \cdot \overbrace{\Theta_{l m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)}^{\text{Parte Angular}}$$

(n,l,m<sub>l</sub>)

Coeficientes, parte de la solución matemática  
Números Cuánticos obtenidos como parte de la solución matemática

(n,l,m<sub>l</sub>)      Función de valor propio      Representa un *Orbital Atómico* en el átomo de hidrógeno  
(*eigenfunction*)

Los Orbitales Atómicos son solución de la ecuación de ondas



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 39.

El *número cuántico principal* ( $n$ ), es una medida de la distribución radial de la densidad de carga electrónica. Determina el valor de E en el átomo de hidrógeno.

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

El *número cuántico azimutal* ( $l$ ), o *número cuántico de momento angular*, es una medida del momento angular del electrón.

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

$$l = 0 \quad \text{"s"}$$

$$l = 1 \quad \text{"p"}$$

$$l = 2 \quad \text{"d"}$$

$$l = 3 \quad \text{"f"}$$

El *número cuántico magnético* ( $m_l$ ), es una medida de la degeneración (igual energía).

$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$n$	$l$	$m_l$	orbital	
1	0	0	1s	
2	0	0	2s	
	1	0, $\pm 1$	2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub> , 2p <sub>z</sub>	nl <sup>x</sup>
3	0	0	3s	2p <sup>5</sup>
	1	0, $\pm 1$	3p <sub>x</sub> , 3p <sub>y</sub> , 3p <sub>z</sub>	
	2	0, $\pm 1$ , $\pm 2$	3d <sub>xy</sub> , 3d <sub>xz</sub> , 3d <sub>yz</sub> , 3d <sub>z<sup>2</sup></sub> , 3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 39.

Tabla 2-12 Funciones de onda del hidrógeno

n	l	m <sub>l</sub>	Orbital	Función de onda	
1	0	0	1s	$\psi_{1s} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	
2	0	0	2s	$\psi_{2s} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	
		1	2p <sub>z</sub>	$\psi_{2p_z} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\cos \theta)$	
		+1	2p <sub>x</sub>	$\psi_{2p_x} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\sin \theta \cos \phi)$	
		-1	2p <sub>y</sub>	$\psi_{2p_y} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\sin \theta \sin \phi)$	
3	0	0	3s	$\psi_{3s} = \left(\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - \frac{18Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$	
		1	3p <sub>z</sub>	$\psi_{3p_z} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} (\cos \theta)$	
		+1	3p <sub>x</sub>	$\psi_{3p_x} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \cos \phi)$	
			-1	3p <sub>y</sub>	$\psi_{3p_y} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \sin \phi)$
	2	0	0	3d <sub>z<sup>2</sup></sub>	$\psi_{3d_{z^2}} = \left(\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\cos^2 \theta - 1)$
			+1	3d <sub>xz</sub>	$\psi_{3d_{xz}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \cos \theta \cos \phi)$
			-1	3d <sub>yz</sub>	$\psi_{3d_{yz}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \cos \theta \sin \phi)$
+2			3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	$\psi_{3d_{x^2-y^2}} = \left(\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin^2 \theta \cos 2\phi)$	
		-2	3d <sub>xy</sub>	$\psi_{3d_{xy}} = \left(\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin^2 \theta \sin 2\phi)$	

Fig - 3

## Estudio de la Función de Onda

$$\Psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = R_{n l}(r) \cdot \Theta_{l m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

### Parte Radial:

- \* Relacionado con la distancia de la distribución electrónica al núcleo (tamaño)
- \* Cuestiones energéticas, carga cerca o lejos del núcleo.
- \* Potenciales de Ionización, electronegatividades.

### Parte Angular:

- \* Forma de los Orbitales Atómicos.
- \* Simetría de los Orbitales Atómicos.

El estudio conjunto requiere cuatro dimensiones:

- \* 3 para las coordenadas cartesianas/polares  $(x, y, z)/(r, \theta, \phi)$ .
- \* 4ª para el propio valor de la función  $\Psi$ .

### Estudio de la Parte Radial

$\Psi(n,l,m_l)$  en coordenadas polares

$Z$  = Carga nuclear

$e$  = Base de logaritmos neperianos

$a_0$  = radio de la primera órbita de Bohr =  $0,529 \text{ \AA}$

$R(r)$  Parte Radial de la Función

Función matemática carente de significado físico

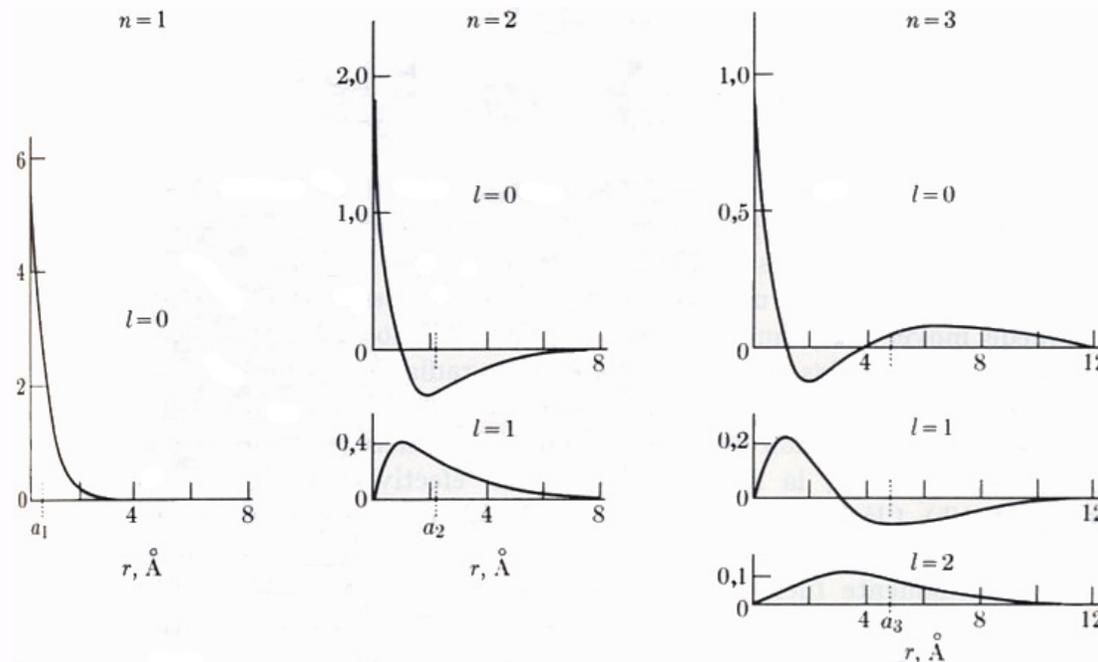


Fig. 3-12. Funciones radiales del hidrógeno para  $n = 1, 2$  y  $3$ . En cada caso, la ordenada de la curva es  $[R_{nl}(r) \text{ m}^{-3/2}] \times 10^{-8}$ .

Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos",  
Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 131.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

### Estudio de la Parte Radial

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad R(r)_{1s} = k_{1s} \cdot e^{-Zr/a_0} \quad \begin{array}{l} * \text{ Exponencial negativa (decreciente)} \\ * \text{ Decrece más rápido que para } n = 2 \\ * \text{ Radio aumenta con "n"} \end{array} \quad -Zr/na_0$$

$$n = 2 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad R(r)_{2s} = k_{2s} \cdot \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \cdot e^{-Zr/2a_0}$$

$$R(r)_{2s} = k_{2s} \cdot \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \cdot e^{-Zr/2a_0} \xrightarrow{r = \frac{2a_0}{Z}} k_{2s} \cdot \left(2 - \frac{Z \cdot 2a_0}{a_0 \cdot Z}\right) \cdot e^{\frac{-Z \cdot 2a_0}{2a_0 \cdot Z}} = 0$$

Destacar la presencia de un nodo "radial" en la función radial 2s

$$r = \frac{2a_0}{Z} \quad R(r) = 0$$

$$r < \frac{2a_0}{Z} \quad R(r) > 0$$

$$r > \frac{2a_0}{Z} \quad R(r) < 0$$

En general:

$$\left. \begin{array}{l} s \quad n-1 \text{ nodos} \\ p \quad n-2 \text{ nodos} \\ d \quad n-3 \text{ nodos} \end{array} \right\} n-l-1 \text{ Nodos Radiales}$$

$$n = 2 \quad l = 1 \quad m = 0 \quad R(r)_{2p} = k_{2p} \cdot r \cdot e^{-Zr/2a_0}$$

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

### Estudio de la Parte Radial

$$\Psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = R_{n l}(r) \cdot \Theta_{l m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

$R_{n l}(r) = 0$	$\Psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = 0$	Nodos Radiales	$n-l-1$
$\Theta_{l m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi) = 0$	$\Psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = 0$	Nodos Angulares	$l$
	$\Psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = 0$	Nodos Totales	$n-1$

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

### Estudio de la Parte Radial

$\Psi(n,l,m_l)$  en coordenadas polares

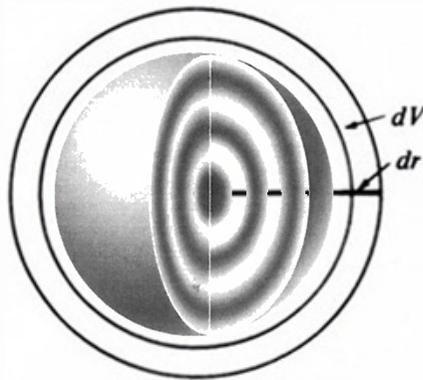
$R^2(r)$  Densidad de probabilidad

$4\pi r^2 R^2(r)$  Función de distribución Radial / Función de Probabilidad

$Z$  = Carga nuclear

$e$  = Base de logaritmos neperianos

$a_0$  = radio de la primera órbita de Bohr = 0,529 Å



$$v = \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$dv = \frac{4}{3} \cdot 3 \cdot \pi r^2 dr = 4\pi r^2 dr$$

$$\text{Superficie} = 4\pi r^2$$

$$\text{Volumen} = \text{superficie} \cdot dr = 4\pi r^2 dr$$

$$P(r) = \int R^2(r) dv = \int 4\pi r^2 R^2(r) dr$$

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

### Estudio de la Parte Radial

$\Psi(n,l,m_l)$  en coordenadas polares

Z = Carga nuclear

e = Base de logaritmos neperianos

$a_0$  = radio de la primera órbita de Bohr = 0,529 Å

$R^2(r)$  Densidad de probabilidad

$4\pi r^2 R^2(r)$  Función de distribución Radial / Función de Probabilidad

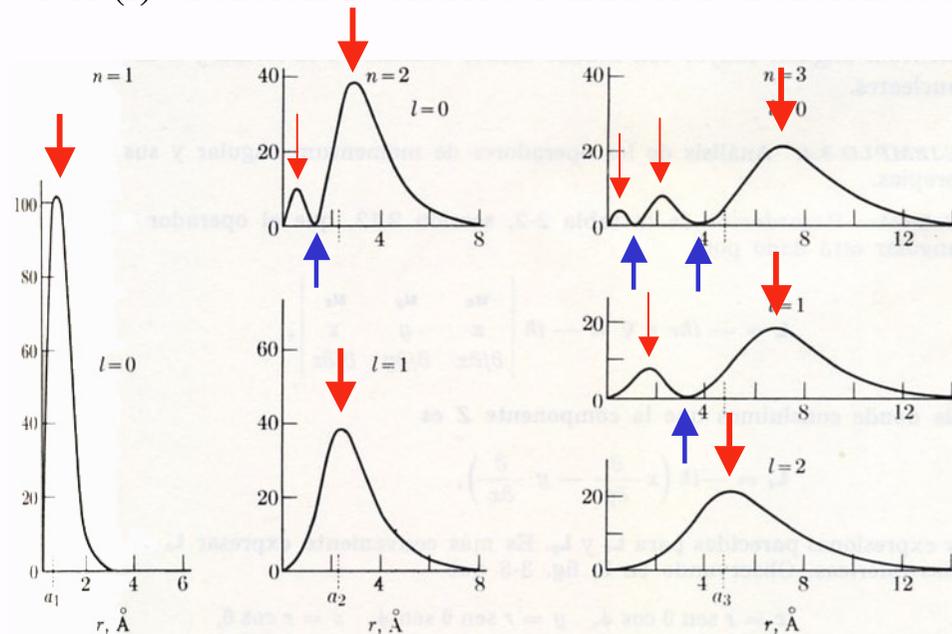


Fig. 3-13. Distribución radial de probabilidad en el hidrógeno para  $n = 1, 2$  y  $3$ . En cada caso la ordenada es  $[r^2 R_{nl}(r) \text{ m}^{-1}] \times 10^{-15}$ .

Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos",  
Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 131.

$$1s \quad r = 0 \quad 4\pi r^2 R^2(r) = 0$$

$$r = \infty \quad R(r) = 0$$

$$4\pi r^2 R^2(r) = 0$$

2s, 3s      varios máximos relativos  
un máximo absoluto

2s, 3s      varios nodos radiales

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

### Estudio de la Parte Radial

$\Psi(n,l,m_l)$  en coordenadas polares

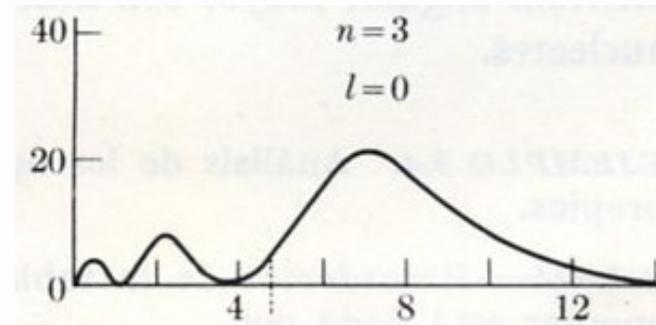
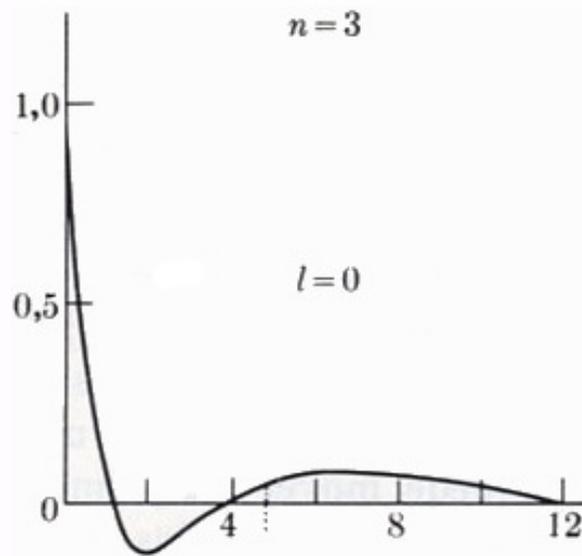
$Z$  = Carga nuclear

$e$  = Base de logaritmos neperianos

$a_0$  = radio de la primera órbita de Bohr = 0,529 Å

$R^2(r)$  Densidad de probabilidad

$4\pi r^2 R^2(r)$  Función de distribución Radial / Función de Probabilidad



Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos",  
Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 131.

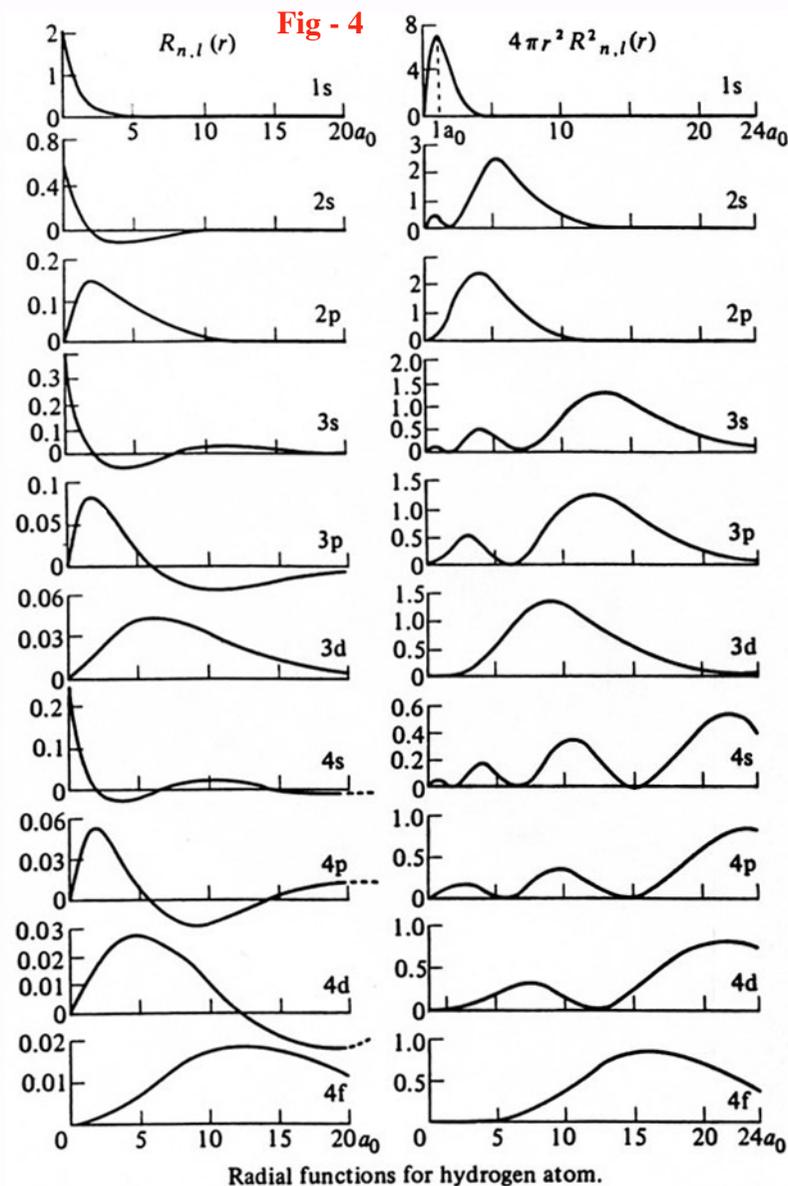
\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

Estudio de la Parte Radial

Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 50.

Greenwood, N. N.; Earnshaw, A., "Chemistry of the Elements" 1ª Ed. Butterworth-Heinemann: Oxford, 1984, pp 1489.



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

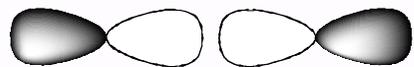
\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

## Estudio de la Parte Radial

### En enlace covalente



Solapamiento de lóbulos con distinto signo  
Situación antienlazante  
Debilita el enlace

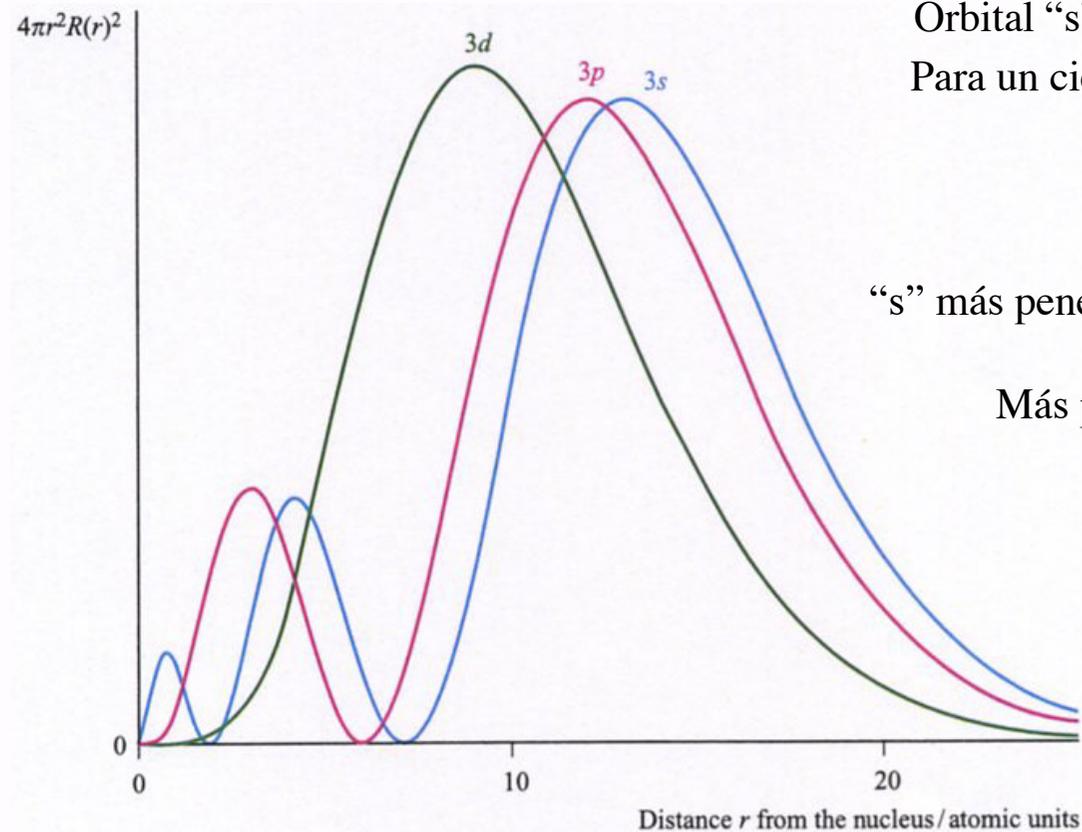


Solapamiento de lóbulos con igual signo  
Situación enlazante  
Fortalece en enlace

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

### Estudio de la Parte Radial



Orbital “s” más cerca del núcleo, más atraído.  
Para un cierto “n”, PI de los e<sup>-</sup> “s” más elevado  
que el de los e<sup>-</sup> “p”.

“s” más penetrante que “p”, más penetrante que “d”

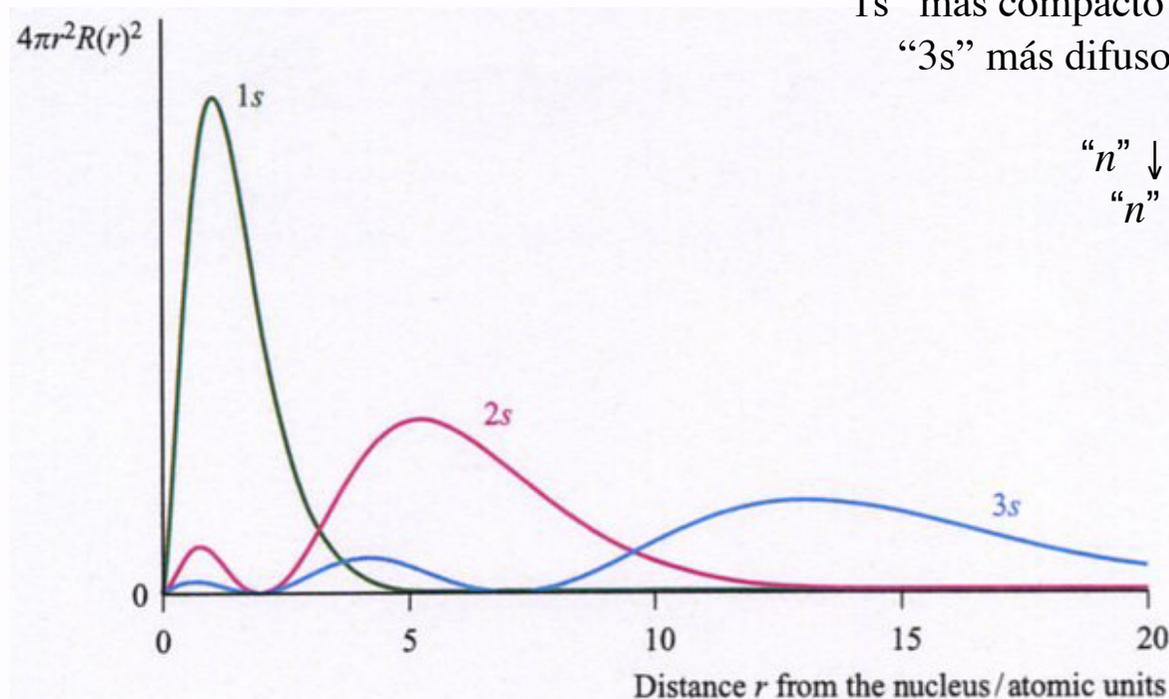
Más penetrante cuanto menor sea “l”  
“l” ↓ penetración ↑

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3<sup>a</sup> Ed., Pearson Prentice Hall, 2008.  
Traducción española de la 2<sup>a</sup> Ed. “*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006, pp 13.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4<sup>a</sup> Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 45.

### Estudio de la Parte Radial



“1s” más compacto que “2s”, más compacto que “3s”  
“3s” más difuso que “2s”, más difuso que “1s”

“ $n$ ” ↓    más compacto  
“ $n$ ” ↑    más difuso

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008.  
Traducción española de la 2ª Ed. “*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006, pp 13.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 45.

## Estudio de la Parte Radial

### *Parte Radial de la Función de Onda:*

- Orbitales más/menos difusos, más/menos compactos.
- Orbitales más/menos penetrantes, penetrabilidad de orbitales.
- Probabilidad varía con “r” y con “n”, y no depende para nada de “ $\theta$ ” ni de “ $\phi$ ”.
- Máximo relativo/absoluto.
- Nodos radiales.

### Estudio de la Parte Angular

$$\Psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = R_{n l}(r) \cdot \Theta_{l m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

$$\Theta_{l m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi) = Y_m = \text{Armónicos esféricos}$$

$m = 0$        $Y_m$  función real      Solución matemática = Orbital Atómico

$m \neq 0$        $Y_m$  función imaginaria ( $i = \sqrt{-1}$ )      Solución matemática =  $i$ ?

**Herramienta matemática:** Si dos o más funciones son solución de una determinada ecuación diferencial, cualquier combinación lineal de ellas será igualmente solución de la misma ecuación diferencial.

Solución *matemáticamente* válida

Pero de todas las posibles combinaciones lineales, sólo aquellas que sean normales, continuas, uniformes, ... será válidas físicamente, ***soluciones aceptables***.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 11**.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, **pp 45**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 13**.

### Estudio de la Parte Angular

$$n = 2 \quad l = 1 \quad m = 0 \quad Y_0 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (z/r) \quad p_z = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (z/r)$$

$$n = 2 \quad l = 1 \quad m = \pm 1 \quad Y_{\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} [(x \pm iy)/r]$$

$$Y_l^{real} = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_l^m + Y_l^{-m}] \quad p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (x/r)$$

$$Y_l^{real} = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_l^m - Y_l^{-m}] \quad p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (y/r)$$

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 11**.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, **pp 45**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 13**.

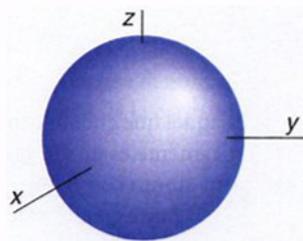
### Estudio de la Parte Angular

Orbital "s"  $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

Independiente de (x,y,z)  
Sólo depende de "r"

Para cualquier valor "r"  
 $\Theta\Phi$  permanece constante  
 $\Psi$  no varía

$l = 0$     0 nodos angulares    Simetría esférica



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 13.

### Estudio de la Parte Angular

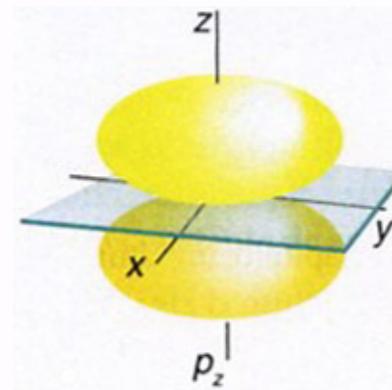
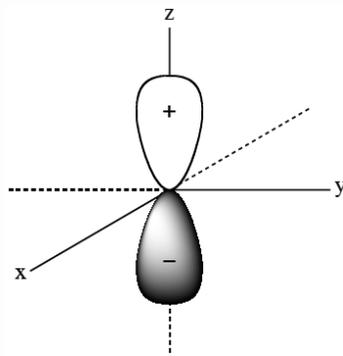
Orbital "p<sub>z</sub>"  $\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{z}{r}\right)$  Depende de "z/r"

$l = 1$  1 nodo angular

$z > 0 \quad \Psi > 0 \quad (+)$   
 $z < 0 \quad \Psi < 0 \quad (-)$

$$\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{z}{r}\right) = 0 \Rightarrow \left(\frac{z}{r}\right) = 0 \Rightarrow z = 0$$

Plano XY



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

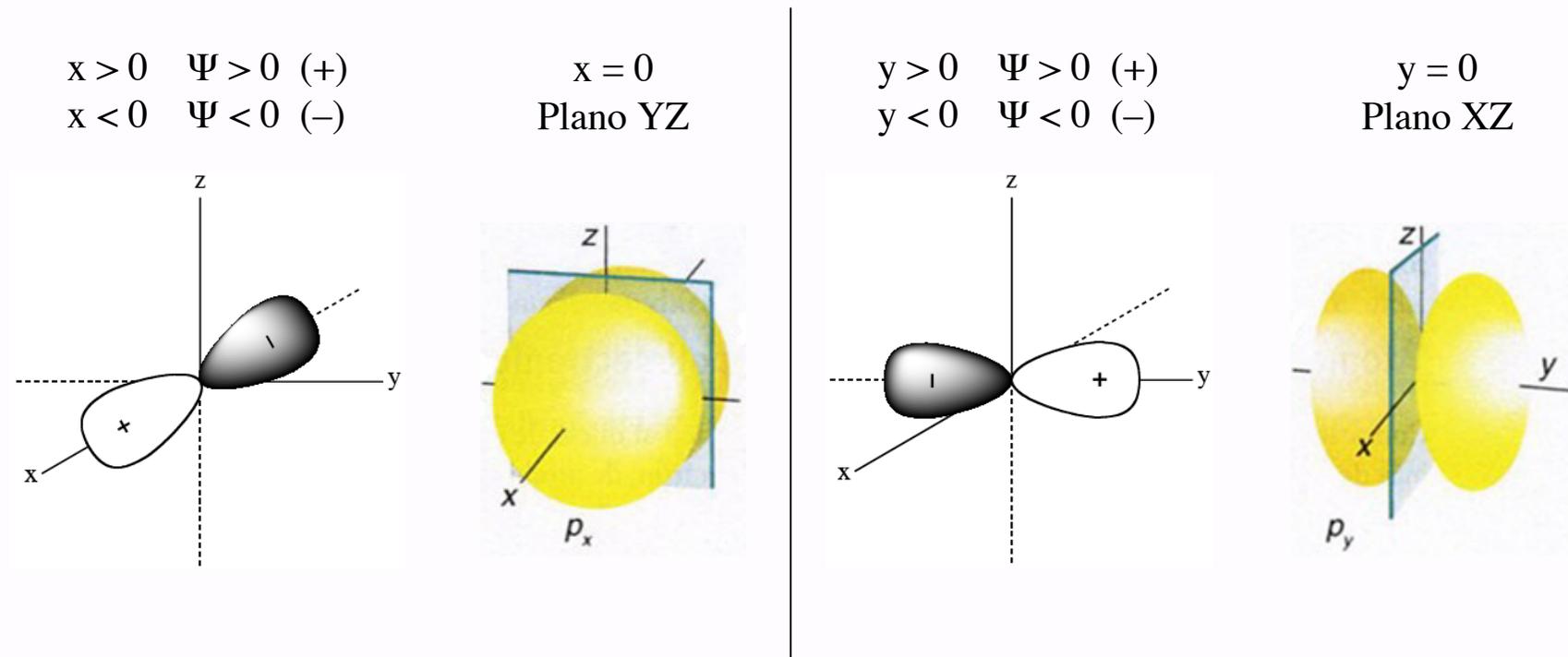
\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 13.

### Estudio de la Parte Angular

Orbital "p<sub>x</sub>"  $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{x}{r}\right)$  Depende de "x/r"      Orbital "p<sub>y</sub>"  $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{y}{r}\right)$  Depende de "y/r"

$l = 1$     1 nodo angular



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 45.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 13.

### Estudio de la Parte Angular

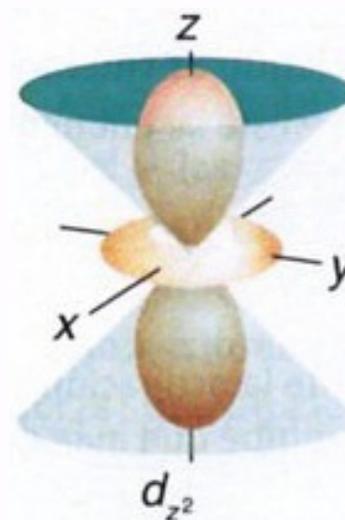
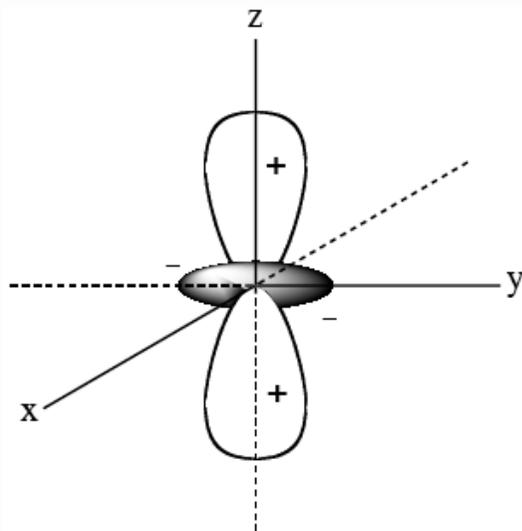
Orbital “ $d_{z^2}$ ”  $\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left\{ 2z^2 - (x^2 + y^2) \right\} / r^2$       Depende de “ $2z^2 - (x^2 + y^2)$ ”

$l = 2$     2 nodos angulares

$z > 0$      $\Psi > 0$  (+)  
 $z < 0$      $\Psi > 0$  (+)  
 $z = 0$      $\Psi < 0$  (-)

$\left\{ 2z^2 - (x^2 + y^2) \right\} / r^2 = 0 \Rightarrow 2z^2 - (x^2 + y^2) = 0$

$2z^2 = x^2 + y^2$       Circunferencia  
de radio  $\pm z\sqrt{2}$



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 11**.

\* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 45**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 13**.

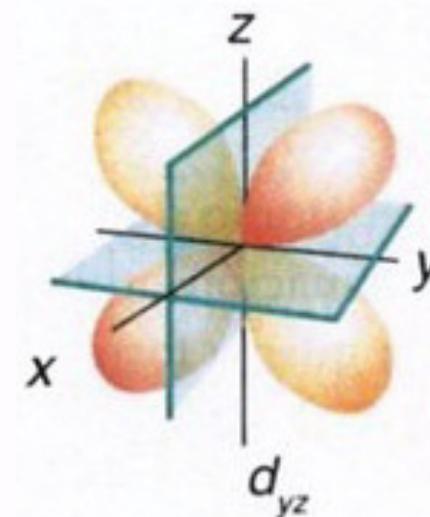
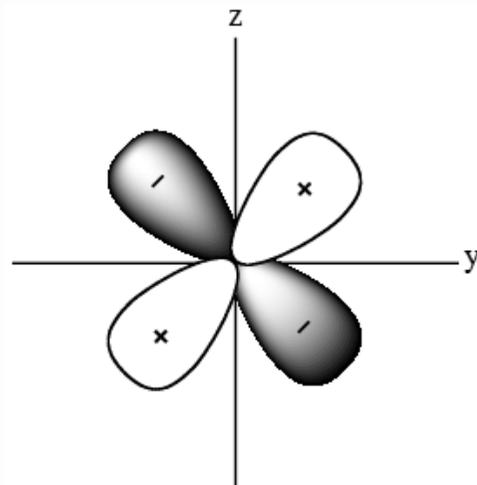
### Estudio de la Parte Angular

Orbital “ $d_{yz}$ ”  $\sqrt{\frac{60}{16\pi}} \frac{yz}{r^2}$  Depende de “ $yz$ ”

$$\begin{aligned} ++ / -- & \Psi > 0 (+) \\ +- / -+ & \Psi < 0 (-) \end{aligned}$$

$$l = 2 \quad 2 \text{ nodos angulares}$$

$$yz = 0 \quad \begin{cases} y = 0 \text{ plano XZ} \\ z = 0 \text{ plano XY} \end{cases}$$



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 11**.

\* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 45**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 13**.

### Estudio de la Parte Angular

Orbital “ $d_{xy}$ ”  $\sqrt{\frac{60}{16\pi}} \frac{xy}{r^2}$  Depende de “ $xy$ ”

Orbital “ $d_{xz}$ ”  $\sqrt{\frac{60}{16\pi}} \frac{xz}{r^2}$  Depende de “ $xz$ ”

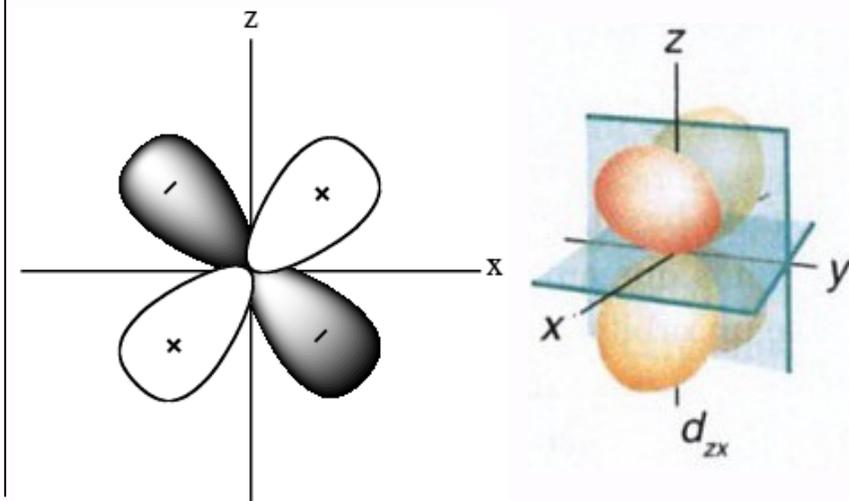
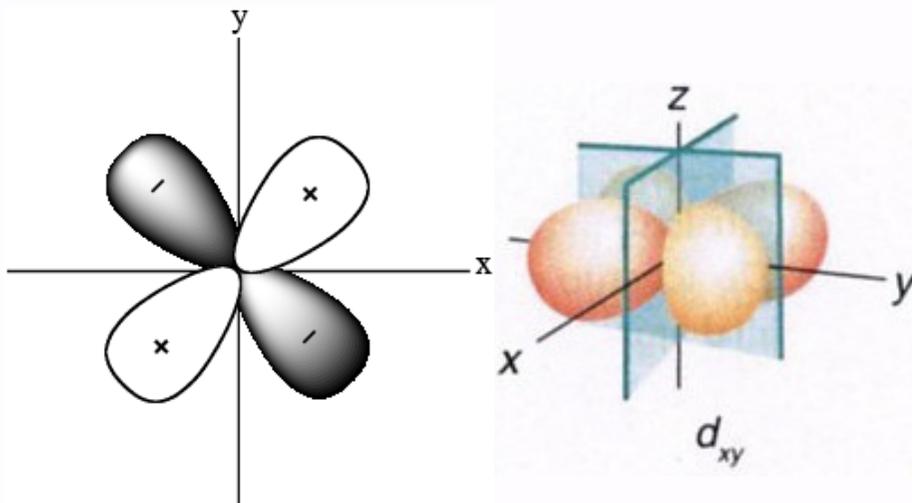
$l = 2$  2 nodos angulares

$++/-- \quad \Psi > 0 (+)$   
 $+--/-+ \quad \Psi < 0 (-)$

$xy = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} x = 0 \text{ plano YZ} \\ y = 0 \text{ plano XZ} \end{array} \right.$

$++/-- \quad \Psi > 0 (+)$   
 $+--/-+ \quad \Psi < 0 (-)$

$xz = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} x = 0 \text{ plano YZ} \\ z = 0 \text{ plano XY} \end{array} \right.$



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 11**.

\* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 45**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 13**.

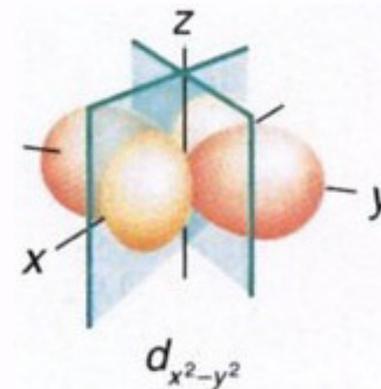
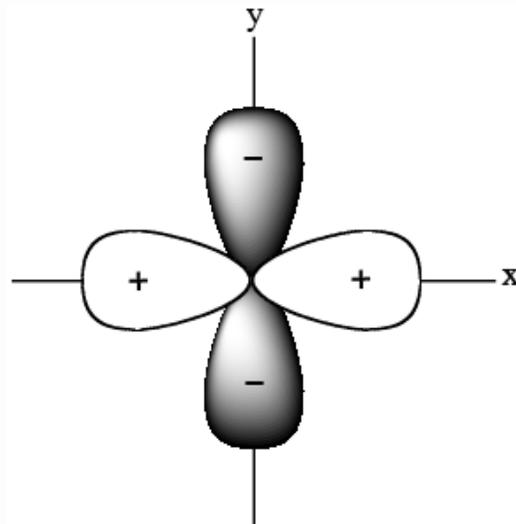
### Estudio de la Parte Angular

Orbital “ $d_{x^2-y^2}$ ”  $\sqrt{\frac{15}{16\pi}} \frac{x^2 - y^2}{r^2}$  Depende de “ $x^2 - y^2$ ”

$$\begin{aligned} y = 0 & \quad \Psi > 0 \quad (+) \\ x = 0 & \quad \Psi < 0 \quad (-) \end{aligned}$$

$$l = 2 \quad 2 \text{ nodos angulares}$$

$$x^2 - y^2 = 0 \quad \begin{cases} x = +y \text{ plano bisector} \\ x = -y \text{ plano bisector} \end{cases}$$



\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 11**.

\* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, **pp 45**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 13**.

## Estudio de la Parte Angular

El signo de  $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  no tiene nada que ver con la posible carga.

$\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  y  $\Theta^2(\theta)\Phi^2(\varphi)$  son únicamente funciones matemáticas, análogas a  $R(r)$  y  $4\pi r^2 R^2(r)$ . Son representaciones que ayudan a visualizar y obtener información sobre la probable distribución de los electrones.

Se puede definir orbital como:  $\Psi$ ,  $\Psi^2$ ,  $R(r)$ ,  $R^2(r)$ ,  $4\pi r^2 R^2(r)$ ,  $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  y  $\Theta^2(\theta)\Phi^2(\varphi)$  pero teniendo muy claro que cualquiera de ellas no es más que una función matemática, y que sus representaciones ayudan a visualizar la distribución electrónica, pero no representan al átomo.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, **pp 11**.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, **pp 45**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 13**.

## Estudio de la Parte Angular

### Representación

Parte Radial de la función  
 $R(r)$

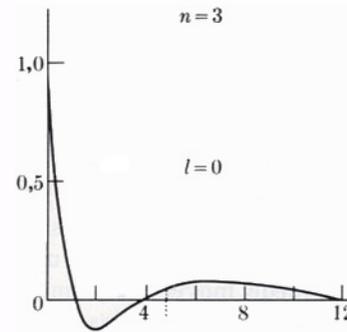
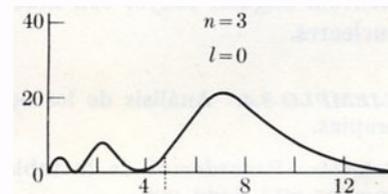


Fig - 4

Función de Distribución Radial  
 $4\pi r^2 R^2(r)$



## Estudio de la Parte Angular

### Representación

Parte Angular de la función  
 $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$

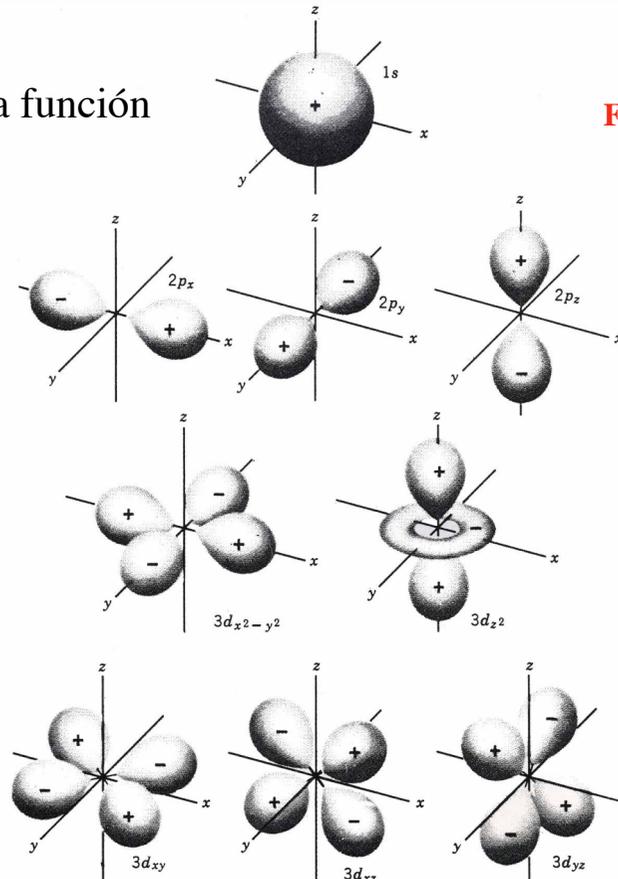


Figura 2-15 Representaciones tridimensionales que muestran la dependencia angular de los orbitales  $1s$ ,  $2p$  y  $3d$  para  $r$  fijo. [F. Daniels and R. A. Alberty, *Physical Chemistry*, 4.ª ed., pág. 416, John Wiley et Sons, Inc., New York (1975).]

Fig - 5

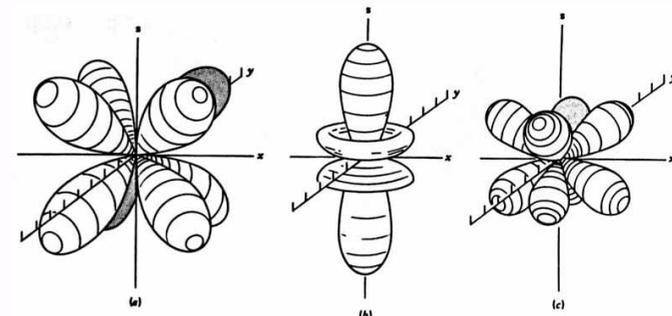


Figure 2-17 Representations of  $4f$  orbitals. (a)  $f_{x,y,z^2}$ ; (b)  $f_{z(5z^2-3r^2)}$ ; (c)  $f_{z(x^2-y^2)}$  [J. T. Waber and J. E. Hockett, in *Proceedings of the Fourth Conference on Rare Earth Research*, L. Eyring (Ed.), Fig. 1, p. 285, Gordon and Breach, New York (1965).]

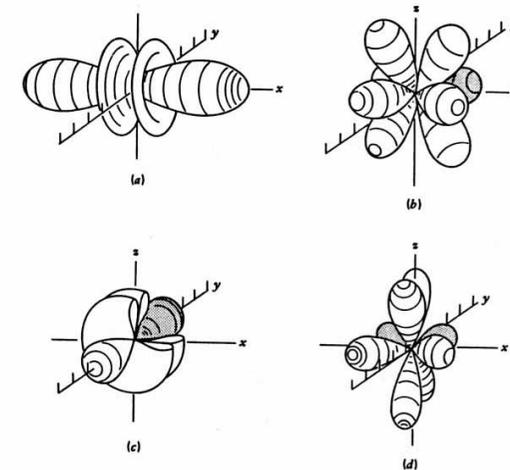


Figure 2-18 Representations of  $4f$  orbitals. (a)  $f_{x(5x^2-3r^2)}$ ; (b)  $f_{x(z^2-y^2)}$ ; (c)  $f_{y(5y^2-3r^2)}$ ; (d)  $f_{y(z^2-x^2)}$  [J. T. Waber and J. E. Hockett, in *Proceedings of the Fourth Conference on Rare Earth Research*, L. Eyring (Ed.), Fig. 3, p. 287, Gordon and Breach, New York (1965).]

Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994.  
Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 55 y 57.

### Estudio de la Parte Angular

#### Representación

Mapas de densidad electrónica 3D

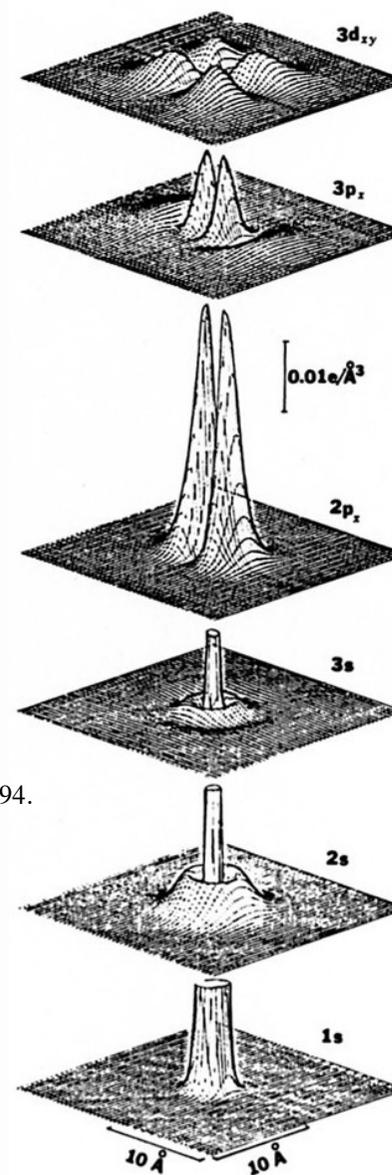


Fig - 6

Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994.  
Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 56

## Estudio de la Parte Angular

### Representación

Diagrama de puntos

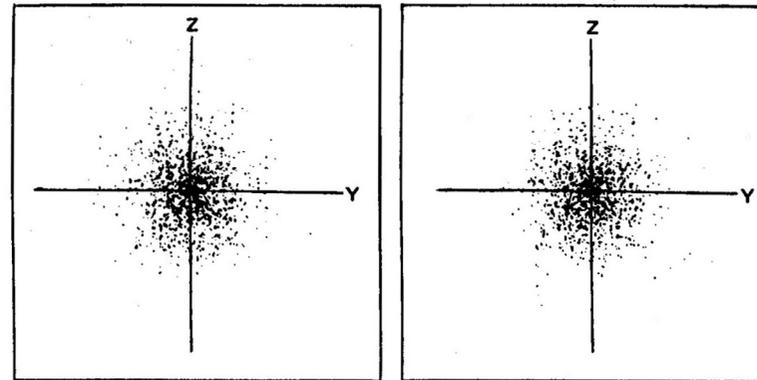


Figure 2-13 Electron-density map for hydrogenic 1s orbital. [D. T. Cromer, *J. Chem. Educ.*, 45, 626 (1968), Fig. 1.]

Moeller, T., "*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "*Química Inorgánica*", Reverté, 1994, pp 53.

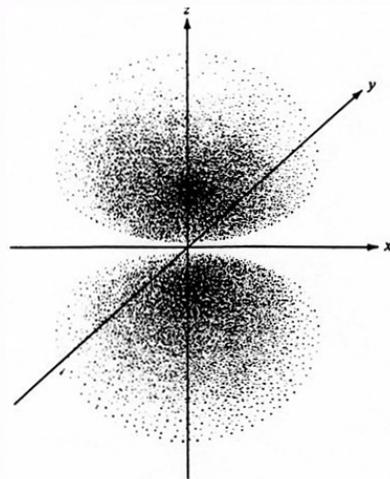


Fig. 2.8 Pictorial representation of electron density in a hydrogen-like 2p orbital.

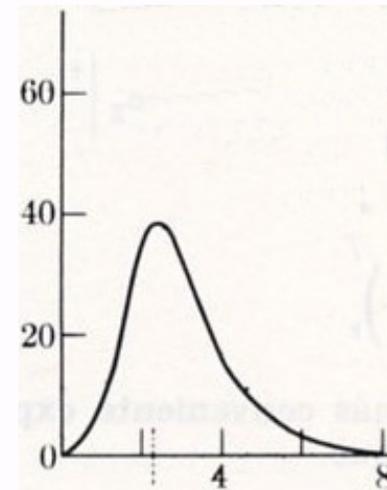
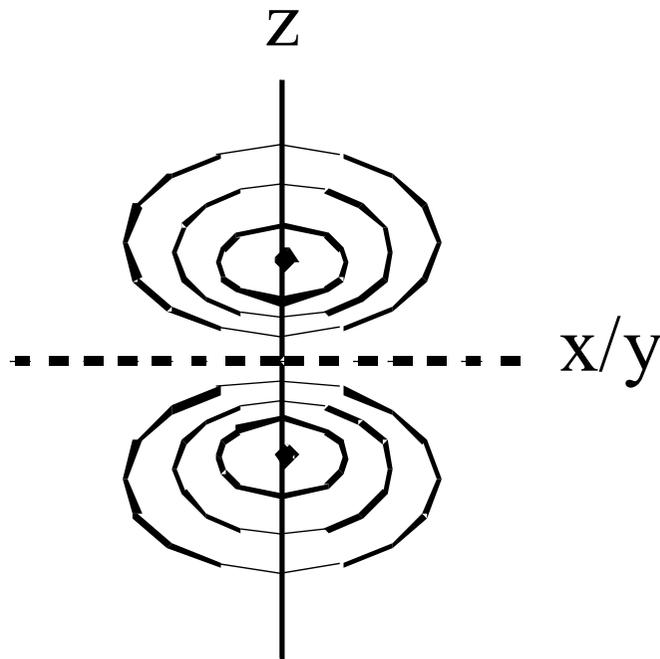
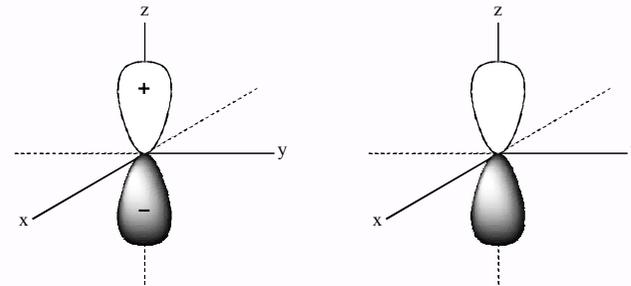
Fig - 7

Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*", 4<sup>a</sup> Ed., Harper Collins, 1993, pp 16.

### Estudio de la Parte Angular

#### Representación Mapas de densidad electrónica - Curvas de Nivel

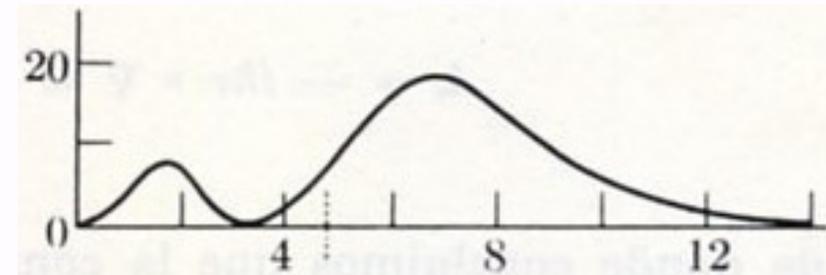
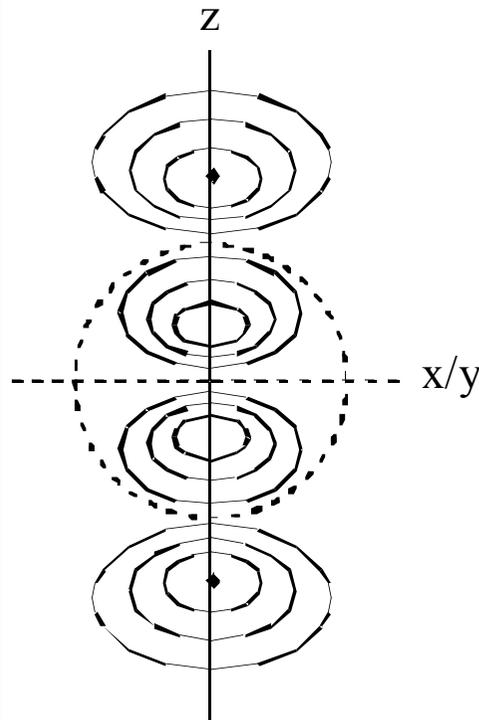
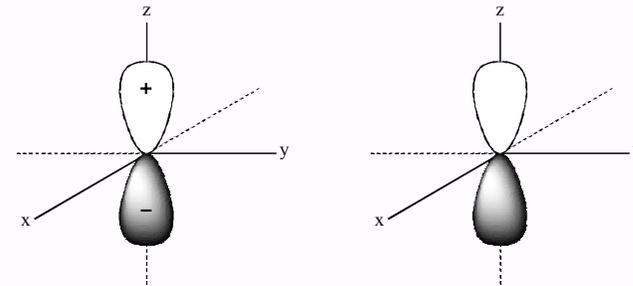
$2 p_z$       Nodos Radiales =  $n - l - 1 = 2 - 1 - 1 = 0$   
                  Nodos Angulares =  $l = 1$   
                  Nodos totales =  $n - 1 = 2 - 1 = 1$



### Estudio de la Parte Angular

#### Representación Mapas de densidad electrónica - Curvas de Nivel

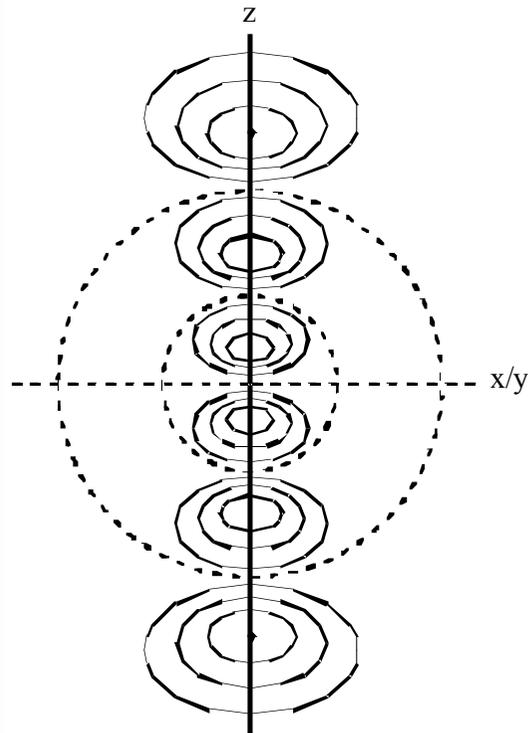
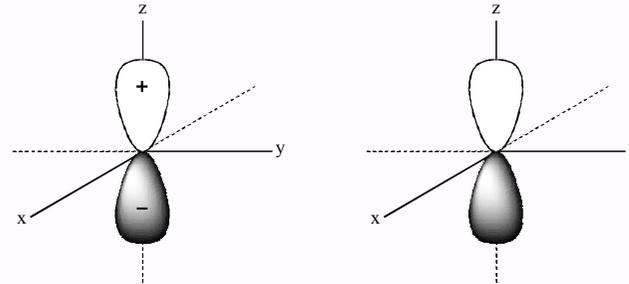
$3 p_z$       Nodos Radiales =  $n - l - 1 = 3 - 1 - 1 = 1$   
                  Nodos Angulares =  $l = 1$   
                  Nodos totales =  $n - 1 = 3 - 1 = 2$



### Estudio de la Parte Angular

#### Representación Mapas de densidad electrónica - Curvas de Nivel

$4 p_z$       Nodos Radiales =  $n - l - 1 = 4 - 1 - 1 = 2$   
                  Nodos Angulares =  $l = 1$   
                  Nodos totales =  $n - 1 = 4 - 1 = 3$



### Estudio de la Parte Angular

#### Representación Mapas de densidad electrónica - Curvas de Nivel

$n p_z$       Nodos Radiales =  $n - l - 1$   
                  Nodos Angulares =  $l$   
                  Nodos totales =  $n - 1$

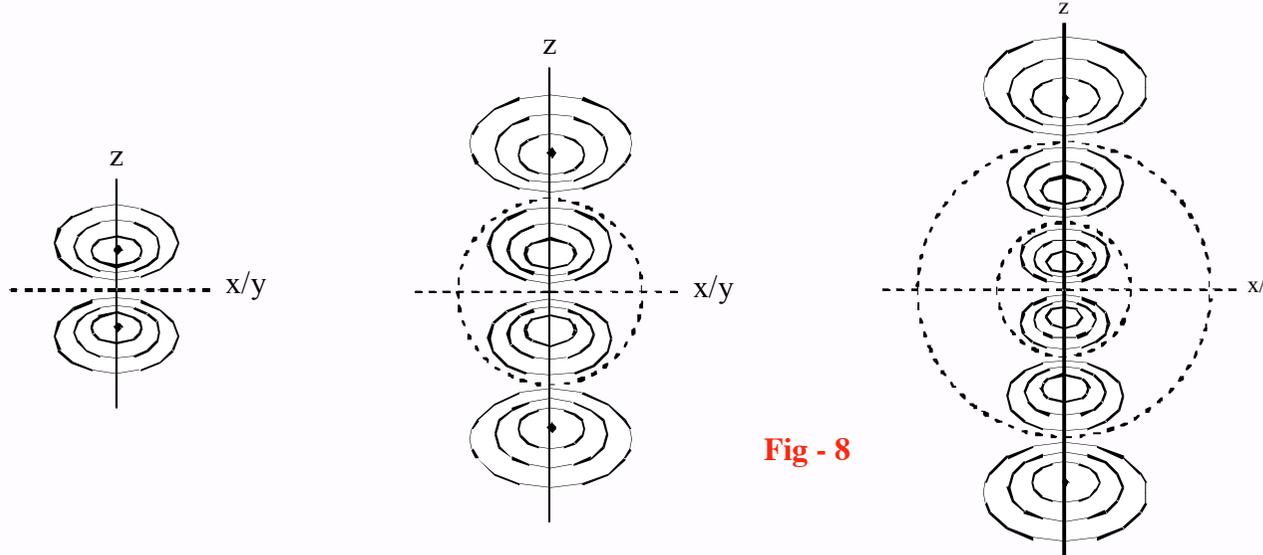
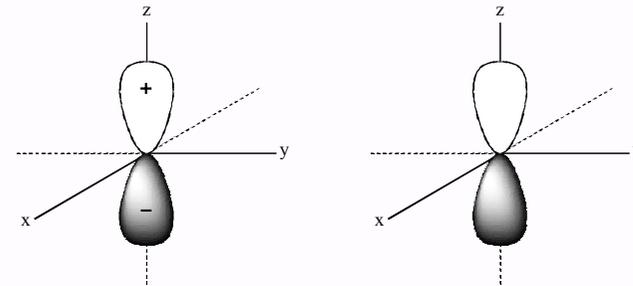
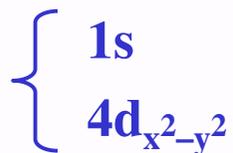


Fig - 8

## Estudio de la Parte Angular

### Representación Mapas de densidad electrónica - Curvas de Nivel

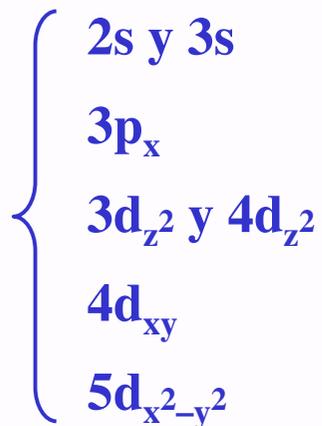
Para practicar



En cualquier plano

En los tres planos XY, XZ, YZ

Otros ejemplos



En cualquier plano

En el plano YZ

En el plano XZ

En los tres planos XY, XZ, YZ

En los tres planos XY, XZ, YZ

#### Posibles Ayudas

\* Figura 8

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 48.

\* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "Chemical Bonding and Molecular Geometry", Oxford University Press, 2001, pp 61.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., Traducción española de la 1ª Ed. "Conceptos y Modelos en Química Inorgánica", Reverté, 1977, pp 21.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 24.

\* Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 53.

\* Purcell, K. F.; Kotz, J. C., "Inorganic Chemistry", Saunders College, Philadelphia, 1977. Traducción española: "Química Inorgánica", Ed. Reverté, 1979, pp 36-37.

\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 16.

En un átomo dado, el valor más bajo de “ $n$ ”, el más estable (menor contenido energético) se denomina “*estado fundamental*”.

Hay “ $n$ ” tipos de orbitales en el  $n$ -ésimo nivel de energía

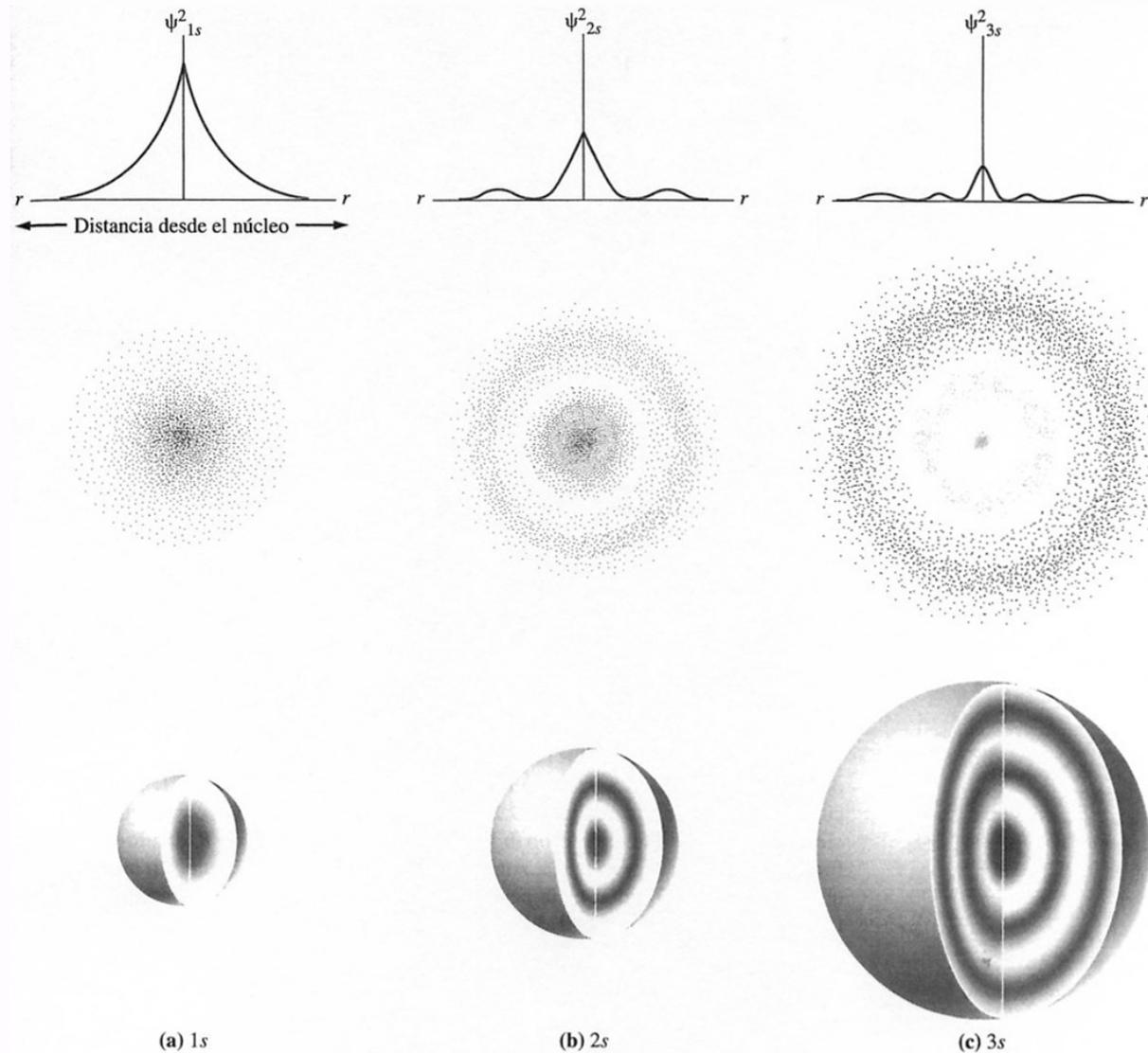
$n = 1$	s
$n = 2$	s, p
$n = 3$	s, p, d
$n = 4$	s, p, d, f

Para un “ $l$ ” existen  $2l+1$  posibles valores de  $m_l$ , es decir  $2l+1$  orbitales de ese tipo

$l = 0$	s	$2l+1 = 1$
$l = 1$	p	$2l+1 = 3$
$l = 2$	d	$2l+1 = 5$
$l = 3$	f	$2l+1 = 7$

Nodos Radiales      Superficies Esféricas

Nodos Angulares      Superficies: planos o cónicas de revolución



▲ FIGURA 9.23 Tres representaciones de la probabilidad y la densidad de carga del electrón para los orbitales 1s, 2s y 3s

Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., "Química general", 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 329.

Parte Angular

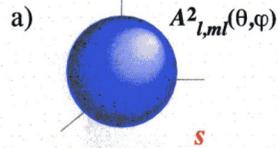


Figura 1.11. Representación de las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuando  $l = 0$  (orbitales  $s$ ).

- a) La parte angular de la función de onda y su cuadrado son constantes. Los orbitales  $s$  son esféricos, por lo que se dice que no son direccionales.  
 b) Gráfica de la parte radial en función de la distancia al núcleo. La función radial tiene  $n-1$  nodos (lugares donde se hace cero).  
 c) Gráfica de la densidad de probabilidad radial en función de la distancia al núcleo. Para los orbitales  $s$ , la densidad de probabilidad es máxima en el núcleo. Además de este máximo absoluto, cada orbital  $s$  tiene otros  $n-1$  máximos relativos y  $n-1$  nodos.  
 d) Representación de un corte ecuatorial de la nube de probabilidad electrónica. En el espacio en tridimensional, los nodos de la función radial son *superficies nodales esféricas*. Un orbital  $s$  tiene  $n-1$  *superficies nodales esféricas*.  
 e) Gráfica de la *densidad radial de probabilidad* (proporcional a la probabilidad de encontrar el electrón a una distancia dada del núcleo). Para un electrón en un orbital  $1s$ , el *radio más probable* coincide con el radio de Bohr ( $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ ).

Parte Radial

