

El Atomo de Hidrógeno

(1)

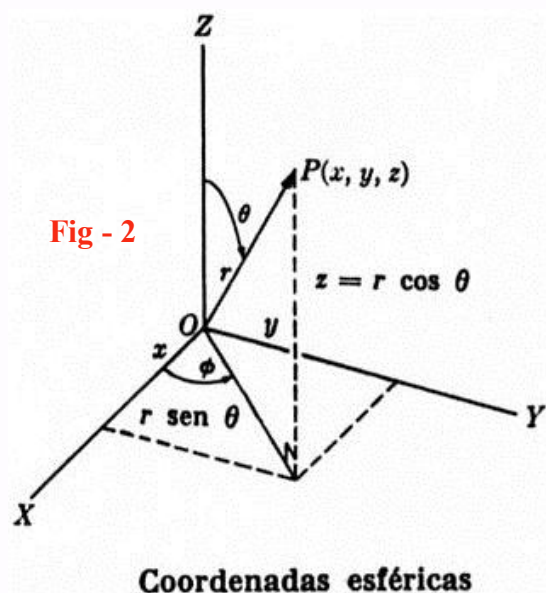


- * Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 2.**
- * Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 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.



$$\begin{aligned}x &= r \sin\theta \cos\phi \\y &= r \sin\theta \sin\phi \\z &= r \cos\theta \\x^2 + y^2 + z^2 &= r^2\end{aligned}$$

$$H \Psi = E \Psi$$

Es un problema matemático, con solución matemática.
Condiciones limitantes para hacer Ψ 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_l)

Coeficientes, parte de la solución matemática

Números Cuánticos obtenidos como parte de la solución matemática

(n, l, m_l) Función de valor propio (*eigenfunction*) Representa un **Orbital Atómico** en el átomo de hidrógeno

Los Orbitales Atómicos son solución de la ecuación de ondas

$\left(\begin{array}{l} \text{Soluciones matemáticamente correctas} \\ \text{Continuas} \\ \text{Uniformes} \end{array} \right) \left(\begin{array}{l} \text{Aceptables} \\ \text{Condiciones de contorno} \end{array} \right) \left(\begin{array}{l} \text{Válidas/útiles} \end{array} \right)$

* 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 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, ± 1	2p _x , 2p _y , 2p _z	nl ^x
3	0	0	3s	2p ⁵
	1	0, ± 1	3p _x , 3p _y , 3p _z	
	2	0, ± 1 , ± 2	3d _{xy} , 3d _{xz} , 3d _{yz} , 3d _{z²} , 3d _{x²-y²}	

* 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_l	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	$\psi_{2s} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
Fig - 3	1	0	2p _z	$\psi_{2p_z} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\cos \theta)$
		+1	2p _x	$\psi_{2p_x} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\sin \theta \cos \phi)$
		-1	2p _y	$\psi_{2p_y} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\sin \theta \sin \phi)$
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	0	3p _z	$\psi_{3p_z} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} (\cos \theta)$
		+1	3p _x	$\psi_{3p_x} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \cos \phi)$
		-1	3p _y	$\psi_{3p_y} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \sin \phi)$
	2	0	3d _{z²}	$\psi_{3d_{z^2}} = \left(\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\cos^2 \theta - 1)$
		+1	3d _{xz}	$\psi_{3d_{xz}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \cos \theta \cos \phi)$
		-1	3d _{yz}	$\psi_{3d_{yz}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \cos \theta \sin \phi)$
		+2	3d _{x²-y²}	$\psi_{3d_{x^2-y^2}} = \left(\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin^2 \theta \cos 2\phi)$
		-2	3d _{xy}	$\psi_{3d_{xy}} = \left(\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin^2 \theta \sin 2\phi)$

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,θ,φ).
- * 4ª para el propio valor de la función Ψ .

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

$R(r)$

Parte Radial de la Función

Función matemática carente de significado físico

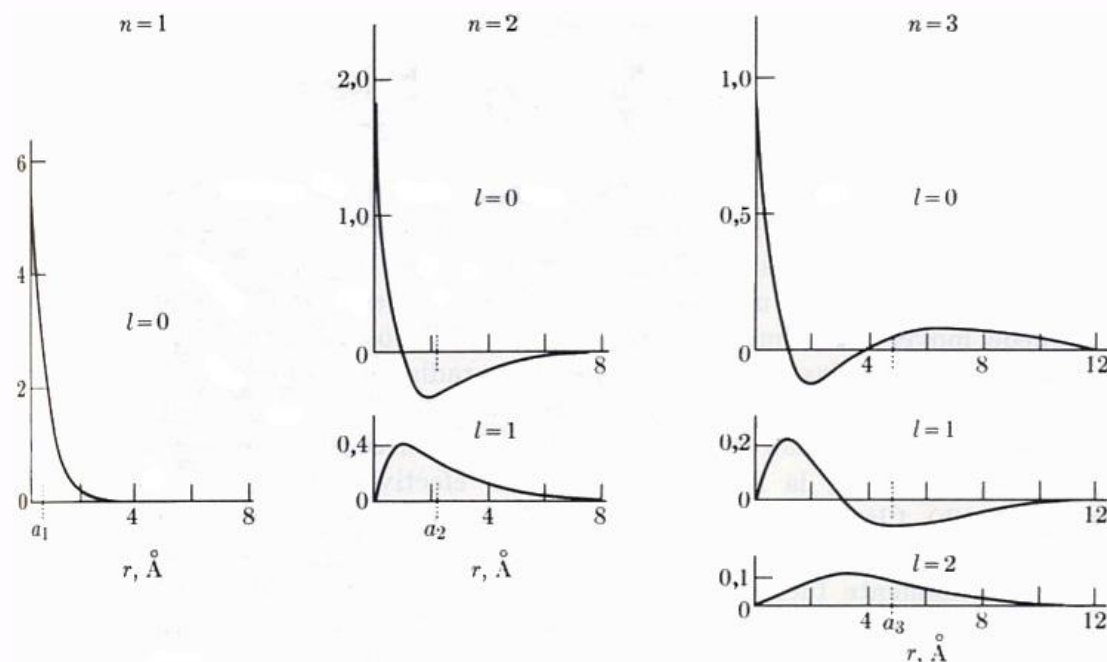


Fig. 3-12. Funciones radiales del hidrógeno para $n = 1, 2$ y 3 . En cada caso, la ordenada de la curva es $[R_{nl}(r) \text{ m}^{-3/2}] \times 10^{-8}$.

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

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

- * Exponencial negativa (decreciente)
- * Decrece más rápido que para $n = 2$
- * Radio aumenta con “n” $-Zr/\mathbf{n}a_o$

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

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

Destacar la presencia de un nodo “radial” en la función radial 2s

$$\begin{aligned}
 r &= \frac{2a_o}{Z} & R(r) &= 0 \\
 r &< \frac{2a_o}{Z} & R(r) &> 0 \\
 r &> \frac{2a_o}{Z} & R(r) &< 0
 \end{aligned}$$

En general:

s	n-1 nodos	} n-l-1 Nodos Radiales
p	n-2 nodos	
d	n-3 nodos	

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

* 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

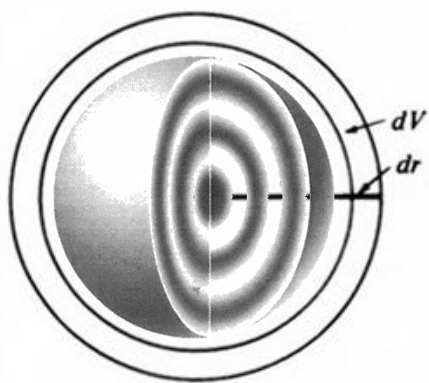
Z = Carga nuclear

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



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

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

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

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

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

* 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

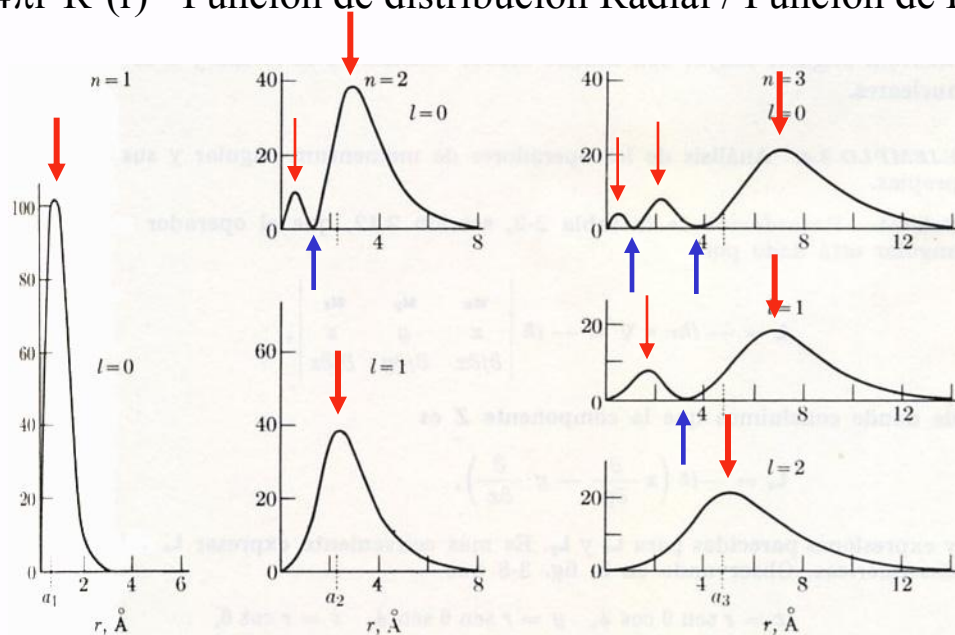


Fig. 3-13. Distribución radial de probabilidad en el hidrógeno para $n = 1, 2$ y 3 . En cada caso la ordenada es $[r^2 R_{nl}(r) \text{ m}^{-1}] \times 10^{-15}$.

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

$$\begin{aligned} 1s \quad r=0 \quad 4\pi r^2 R^2(r) &= 0 \\ r=\infty \quad R(r) &= 0 \\ 4\pi r^2 R^2(r) &= 0 \end{aligned}$$

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

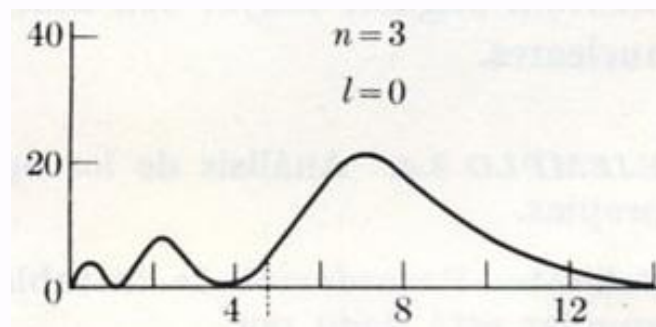
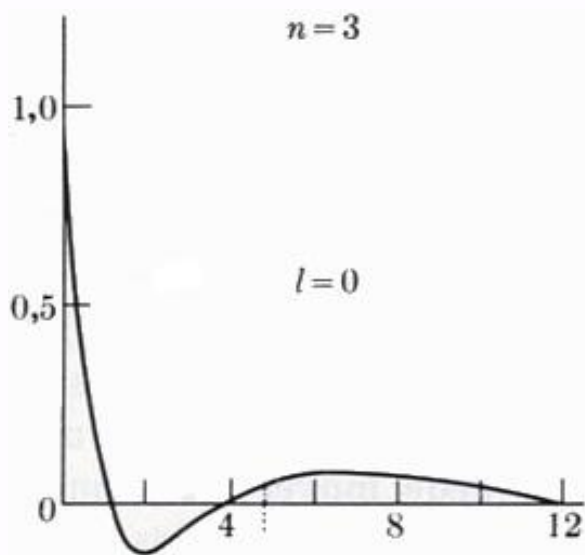
Z = Carga nuclear

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.

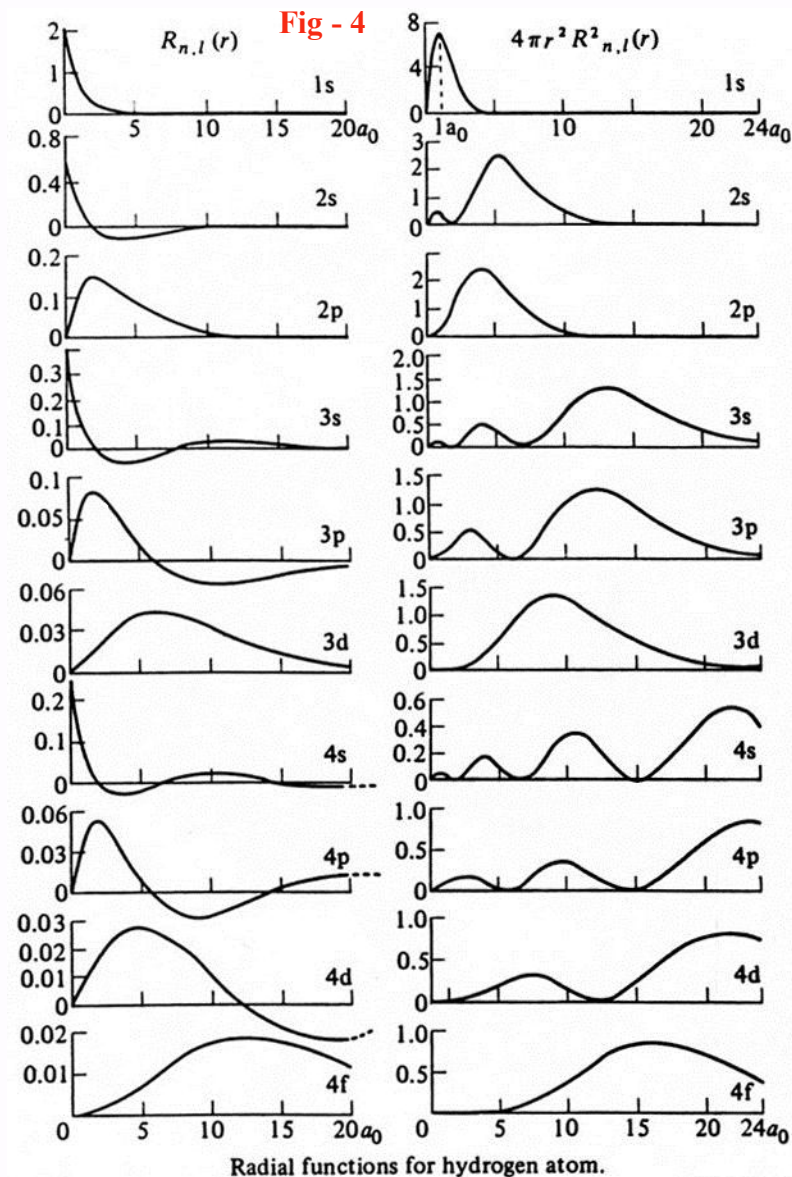
* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

* 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

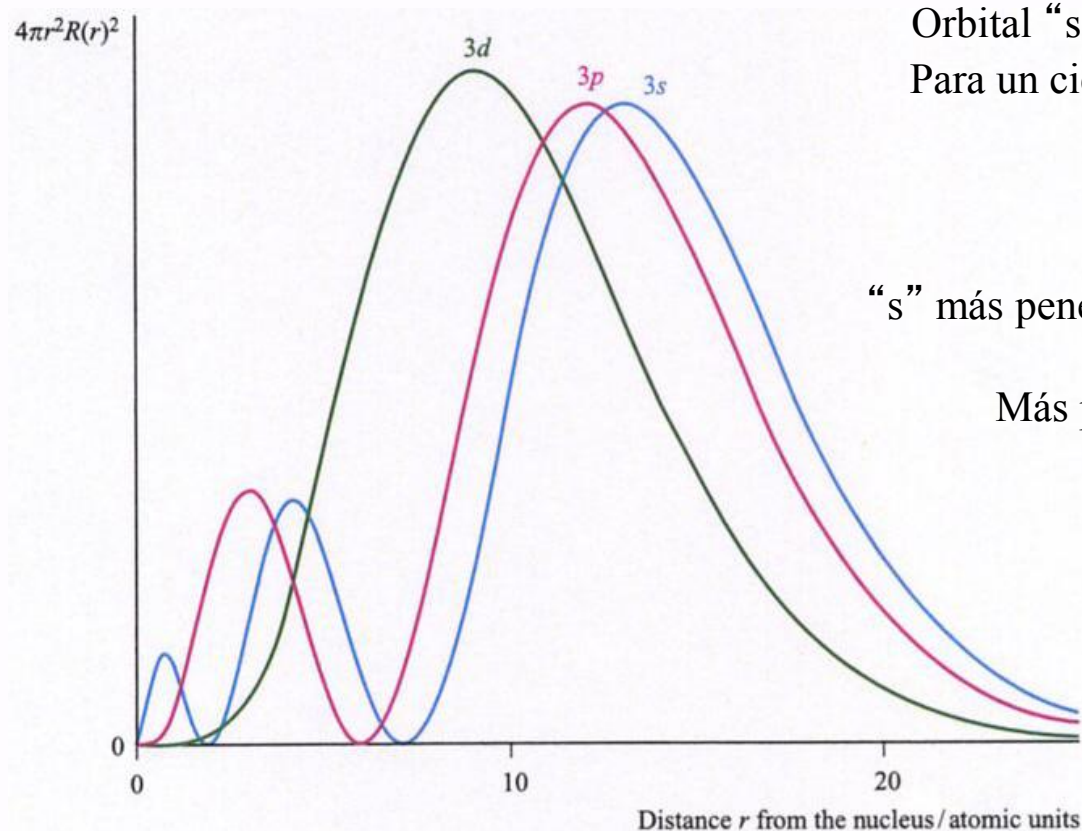


Solapamiento de lóbulos con igual signo
Situación enlazante
Fortalece el enlace

* 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⁻ “s” más elevado
que el de los e⁻ “p”.

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

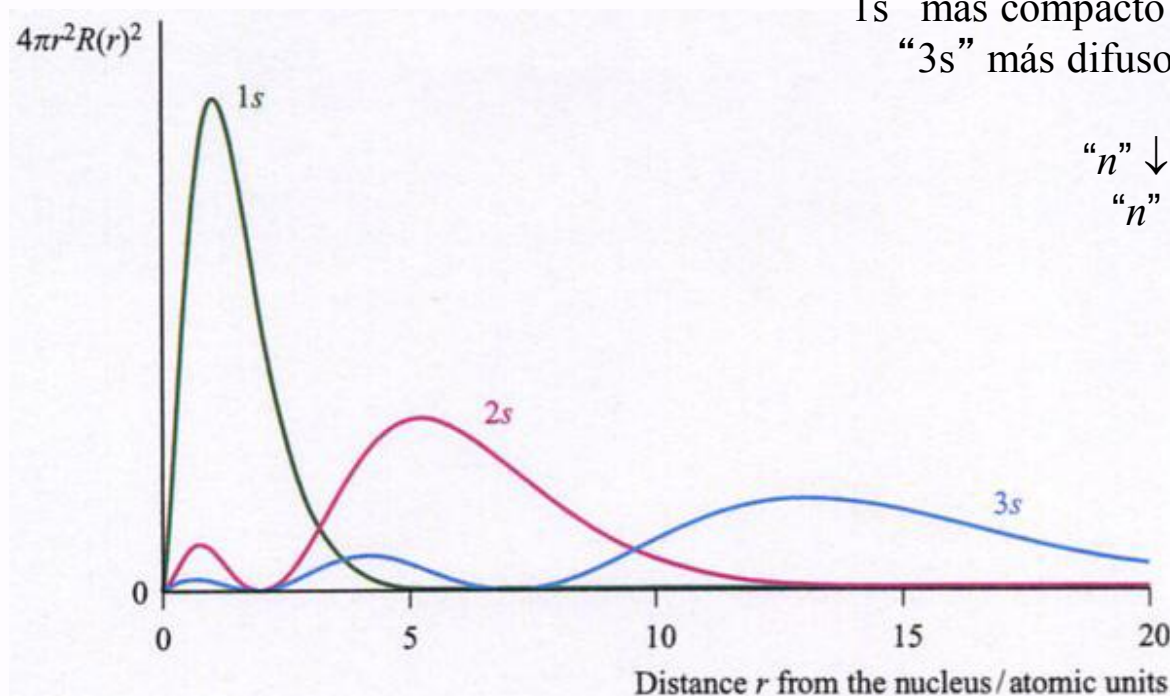
Más penetrante cuanto menor sea “ l ”
“ l ” ↓ penetración ↑

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 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



“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 “ θ ” ni de “ ϕ ”.
- Máximo relativo/absoluto.
- Nodos radiales.