

# El Atomo de Hidrógeno

## (1)

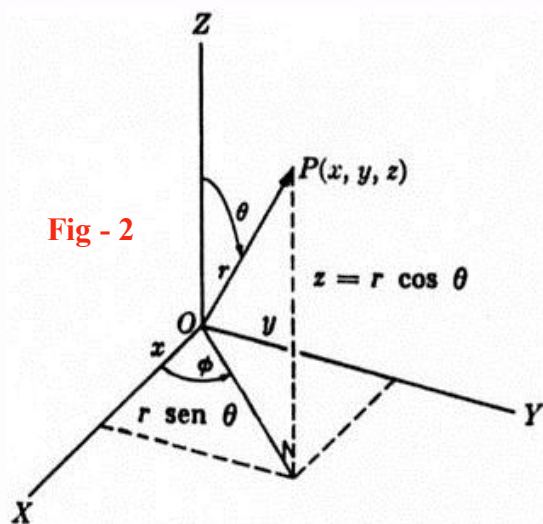


- \* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 2.**
- \* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté,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



### 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.

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

$(n, l, m_l)$

Coefficientes, parte de la solución matemática

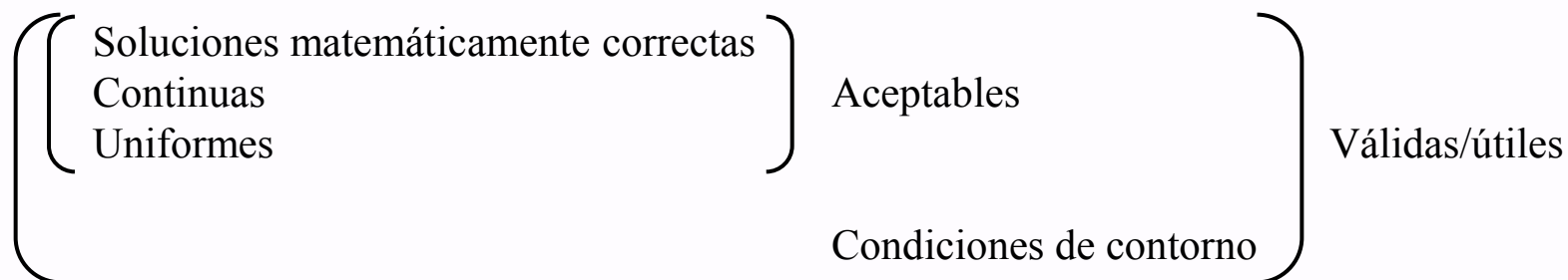
Números Cuánticos obtenidos como parte de la solución matemática

$(n, l, m_l)$

Función de valor propio  
(*eigenfunction*)

Representa un **Orbital Atómico** en el átomo de hidrógeno

Los Orbitales Atómicos son solución de la ecuación de ondas



\* 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.

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

$$l = 0 \quad \text{"s"} \qquad l = 1 \quad \text{"p"} \qquad l = 2 \quad \text{"d"} \qquad l = 3 \quad \text{"f"}$$

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

$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l \qquad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$n$	$l$	$m_l$	orbital	
1	0	0	1s	
2	0	0	2s	nl <sup>x</sup>
	1	0, ±1	2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub> , 2p <sub>z</sub>	
3	0	0	3s	2p <sup>5</sup>
	1	0, ±1	3p <sub>x</sub> , 3p <sub>y</sub> , 3p <sub>z</sub>	
	2	0, ±1, ±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

$n$	$l$	$m_l$	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	$\psi_{2s} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	
		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 Å

$R(r)$

Parte Radial de la Función

Función matemática carente de significado físico

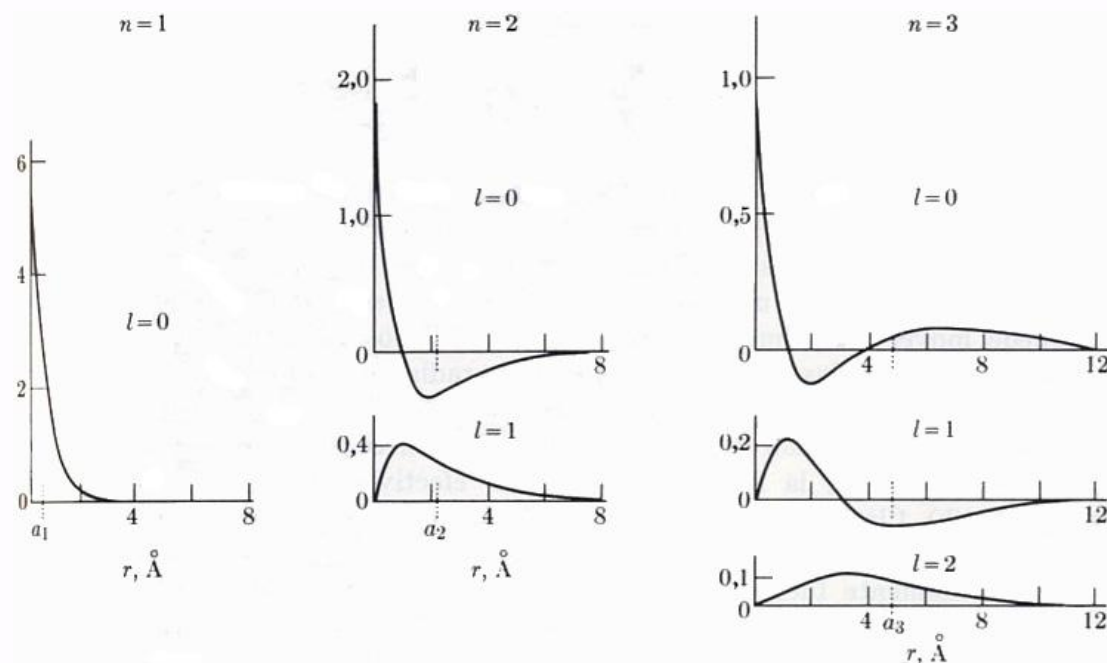


Fig. 3-12. Funciones radiales del hidrógeno para  $n = 1, 2$  y  $3$ . En cada caso, la ordenada de la curva es  $[R_{nl}(r) \text{ m}^{-3/2}] \times 10^{-8}$ .

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

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

- \* Exponencial negativa (decreciente)
- \* Decrece más rápido que para  $n = 2$
- \* Radio aumenta con “n”  $-Zr/na_0$

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

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

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

$$\begin{aligned}
 r &= \frac{2a_0}{Z} & R(r) &= 0 \\
 r &< \frac{2a_0}{Z} & R(r) &> 0 \\
 r &> \frac{2a_0}{Z} & R(r) &< 0
 \end{aligned}$$

En general:

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

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

\* 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

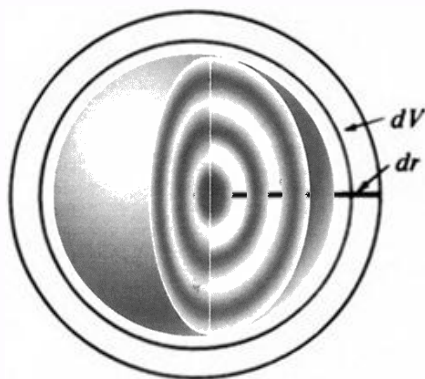
$Z$  = Carga nuclear

$e$  = 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

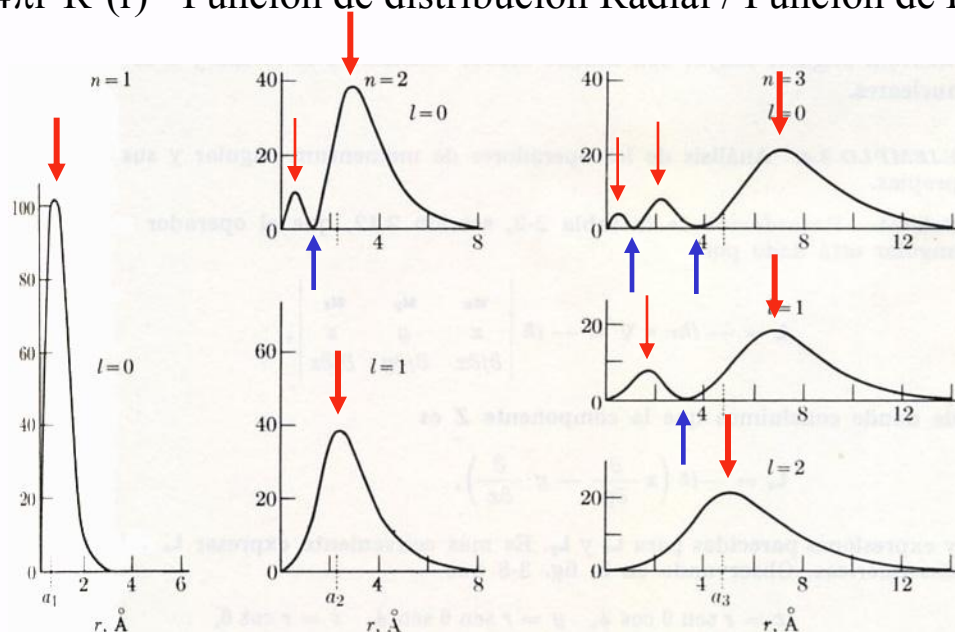


Fig. 3-13. Distribución radial de probabilidad en el hidrógeno para  $n = 1, 2$  y  $3$ . En cada caso la ordenada es  $[r^2 R_{nl}(r) \text{ m}^{-1}] \times 10^{-15}$ .

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

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

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

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

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

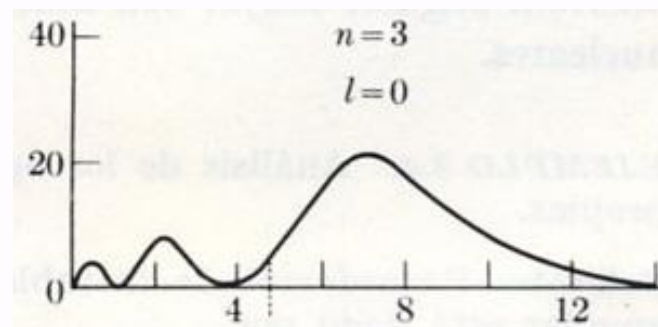
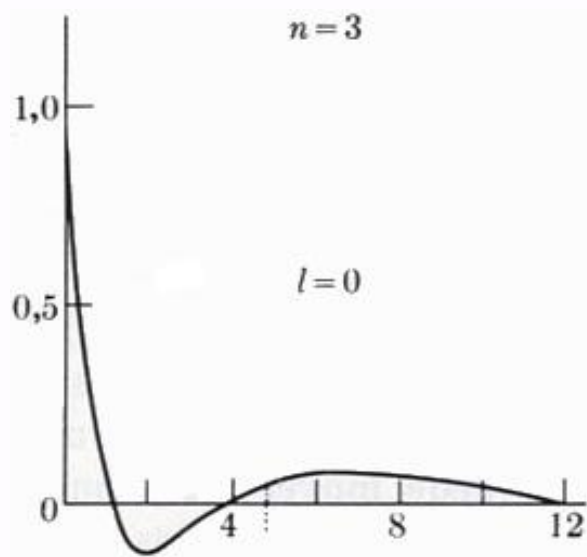
$Z$  = Carga nuclear

$e$  = 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

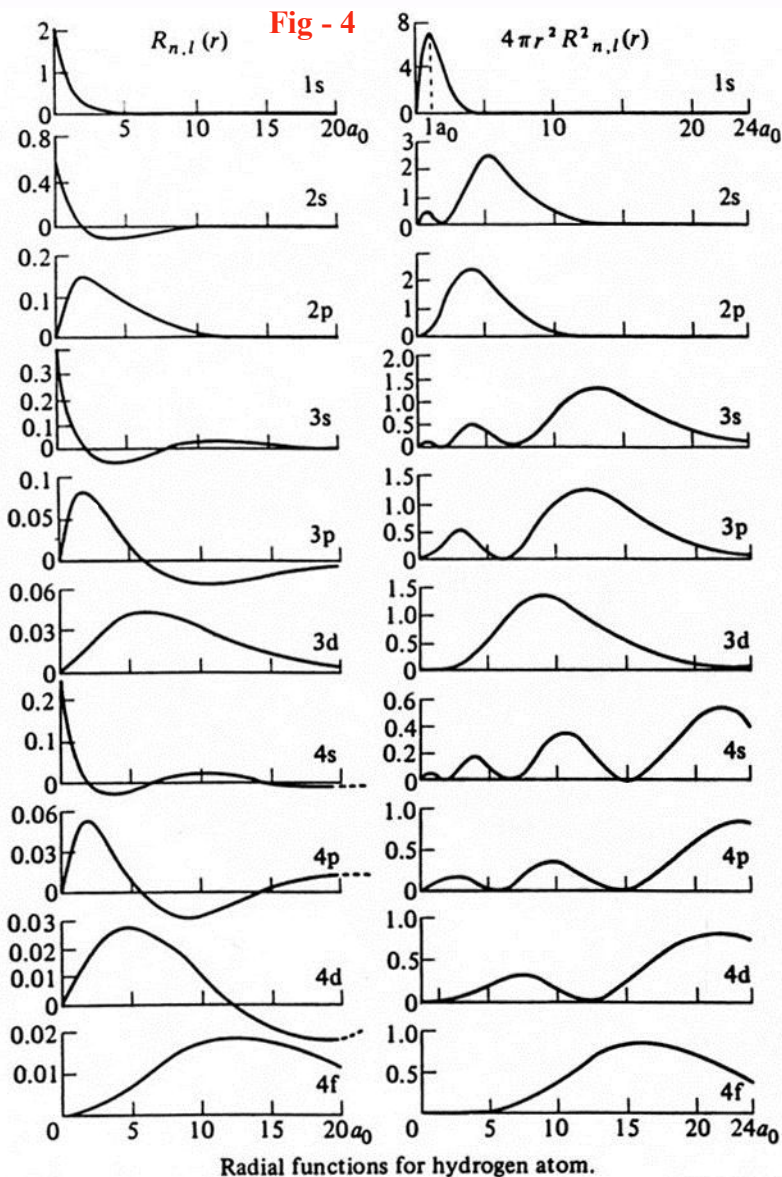


Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos",  
Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 131.

\* 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

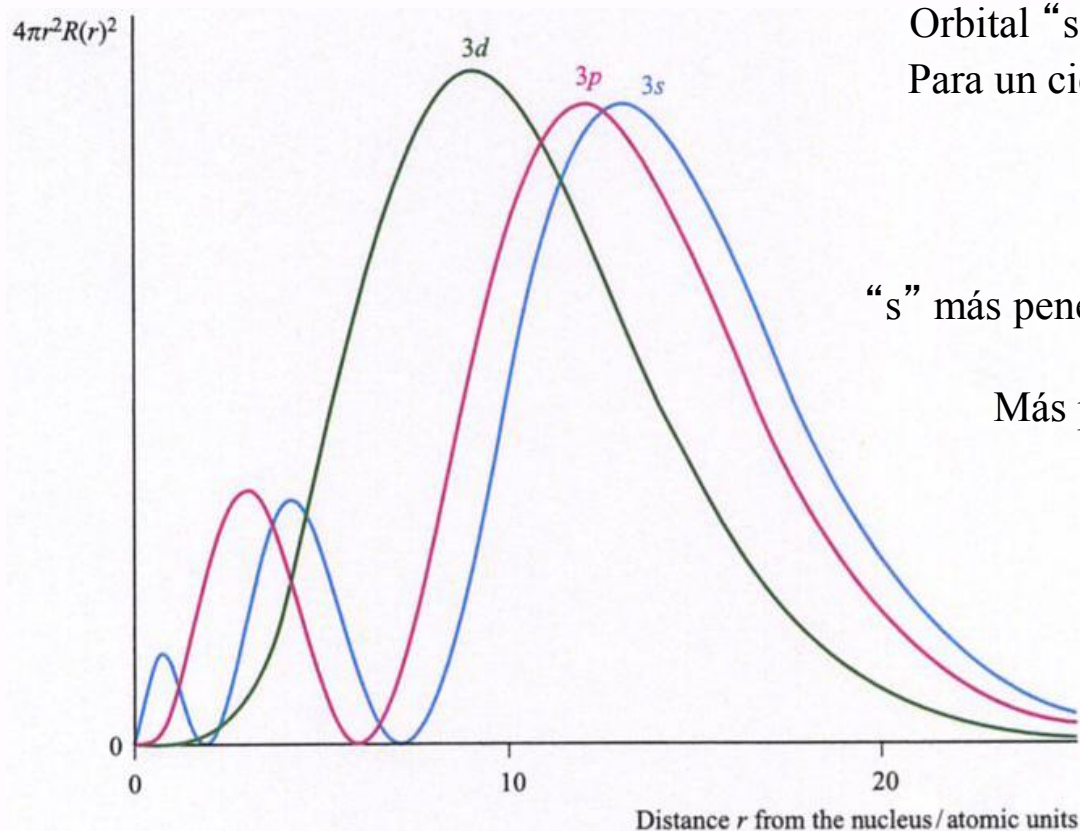


Solapamiento de lóbulos con igual signo  
Situación enlazante  
Fortalece en enlace

\* 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*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008.  
Traducción española de la 2ª Ed. “*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006, pp 13.

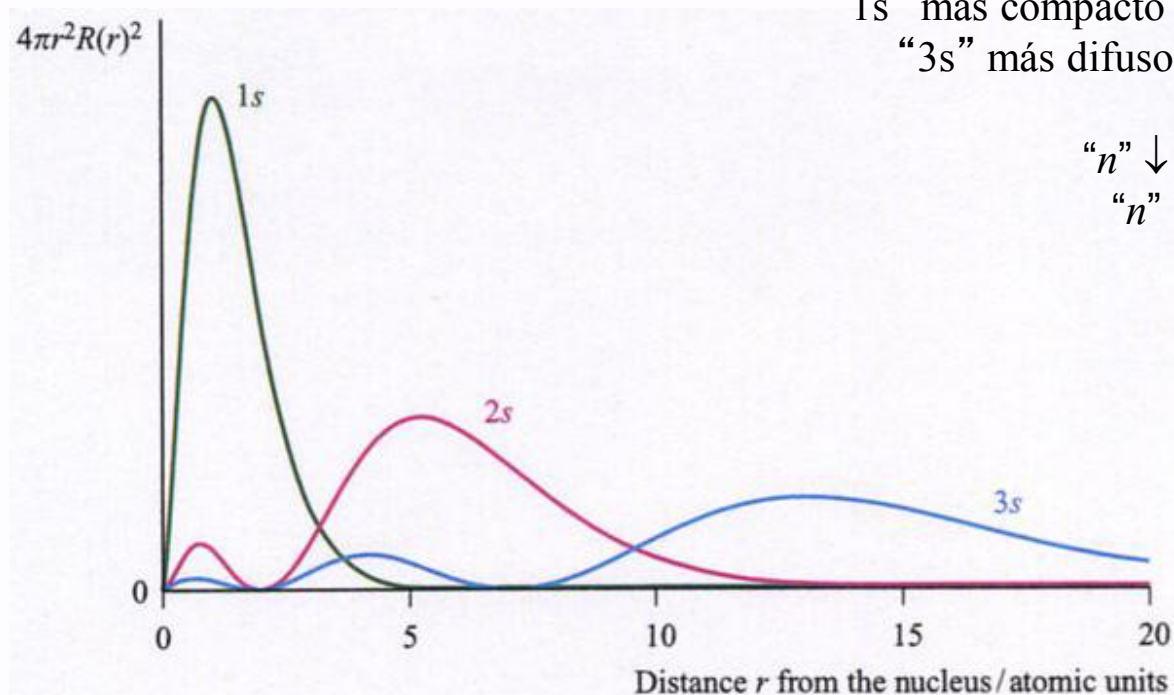
\* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993, pp 11.

\* 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 “ $\theta$ ” ni de “ $\phi$ ”.
- Máximo relativo/absoluto.
- Nodos radiales.