

Esta obra está licenciada bajo una Licencia Creative Commons



Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 3.0 España
Attribution-NonCommercial-NoDerivs 3.0 Unported
CC BY-NC-ND 3.0

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/es/>

El Atomo de Hidrógeno (1)

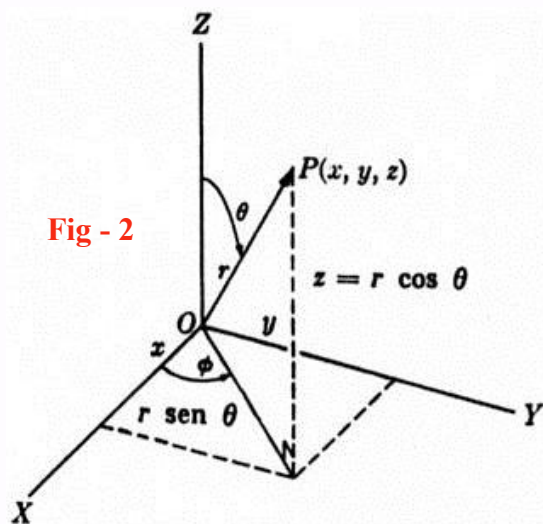


- * Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 2.**
- * Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté,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

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

$$H\Psi = E\Psi$$

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)

Coefficientes, parte de la solución matemática

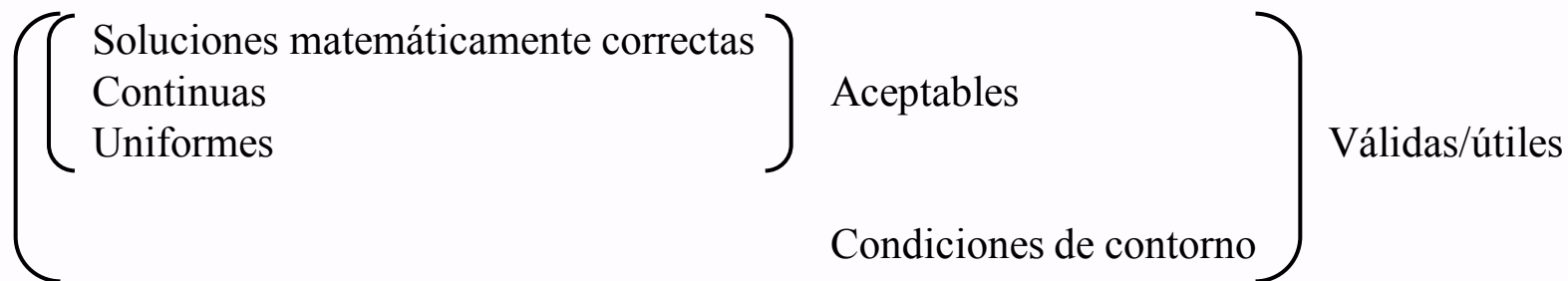
Números Cuánticos obtenidos como parte de la solución matemática

(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^x
	1	0, ± 1	$2p_x, 2p_y, 2p_z$	
3	0	0	2s	$2p^5$
	1	0, ± 1	$3p_x, 3p_y, 3p_z$	
	2	0, $\pm 1, \pm 2$	$3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{yz}, 3d_{z^2}, 3d_{x^2-y^2}$	

* 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 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 _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	0	2p _x	$\psi_{2p_x} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\sin \theta \cos \phi)$	
3	1	+1	2p _y	$\psi_{2p_y} = \left(\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} (\sin \theta \sin \phi)$	
		0	3s	$\psi_{3s} = \left(\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - \frac{18Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$	
		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	+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	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 _{xx}	$\psi_{3d_{xx}} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin \theta \cos \theta \cos \phi)$
-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}	$\psi_{3d_{xy}} = \left(\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\right)\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (\sin^2 \theta \sin 2\phi)$			

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,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

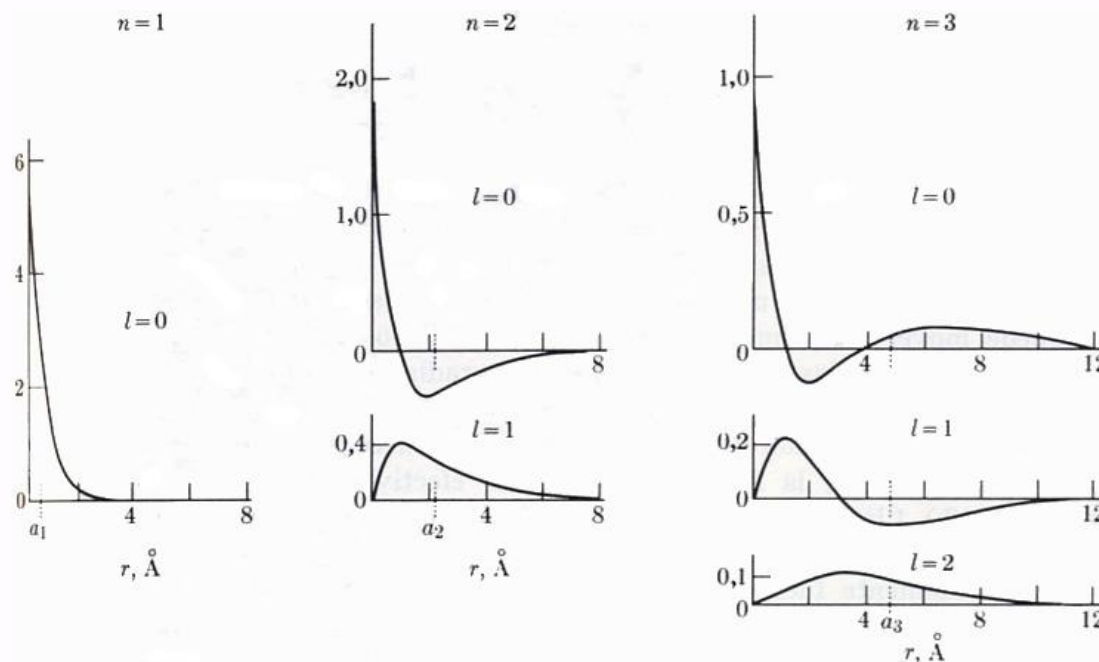


Fig. 3-12. Funciones radiales del hidrógeno para $n = 1, 2$ y 3 . En cada caso, la ordenada de la curva es $[R_{nl}(r) \text{ m}^{-3/2}] \times 10^{-8}$.

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

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

- * 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

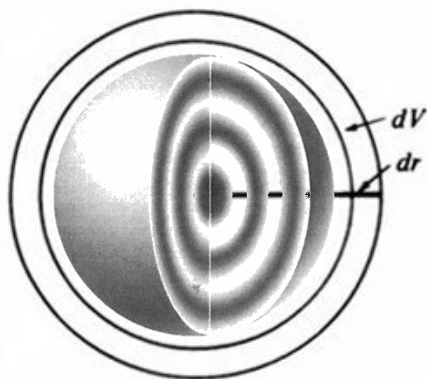
Z = Carga nuclear

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

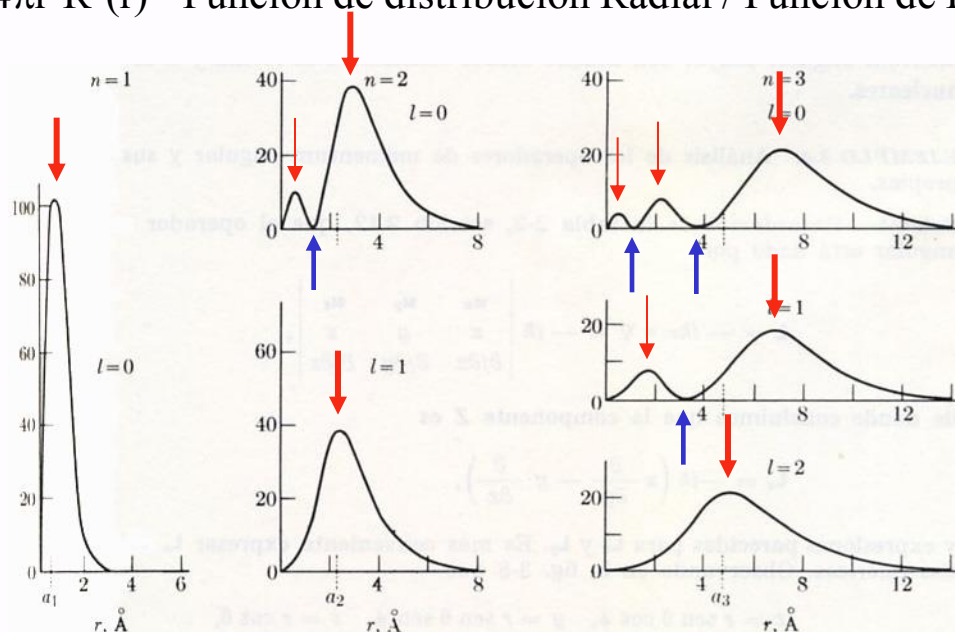


Fig. 3-13. Distribución radial de probabilidad en el hidrógeno para $n = 1, 2$ y 3 . En cada caso la ordenada es $[r^2 R_{nl}(r) \text{ m}^{-1}] \times 10^{-15}$.

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

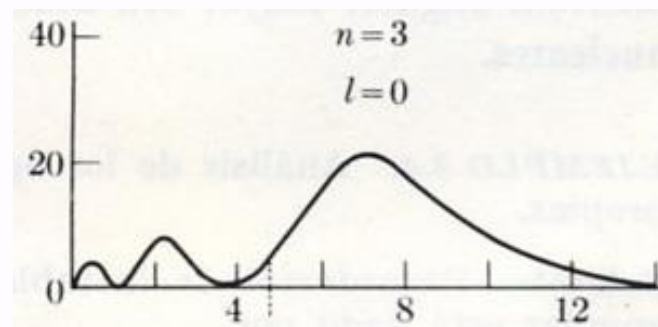
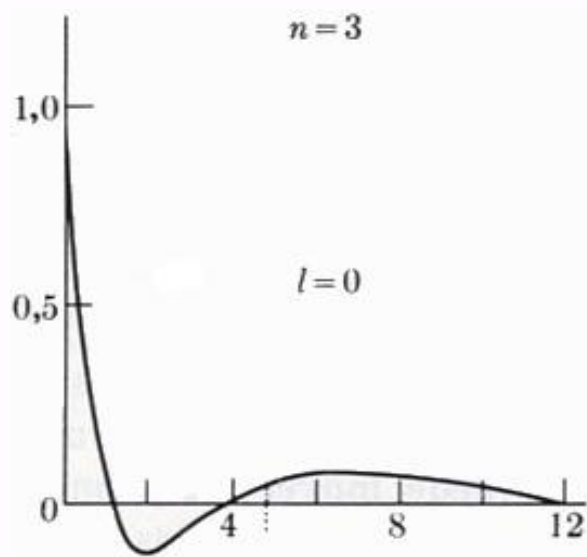
Z = Carga nuclear

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

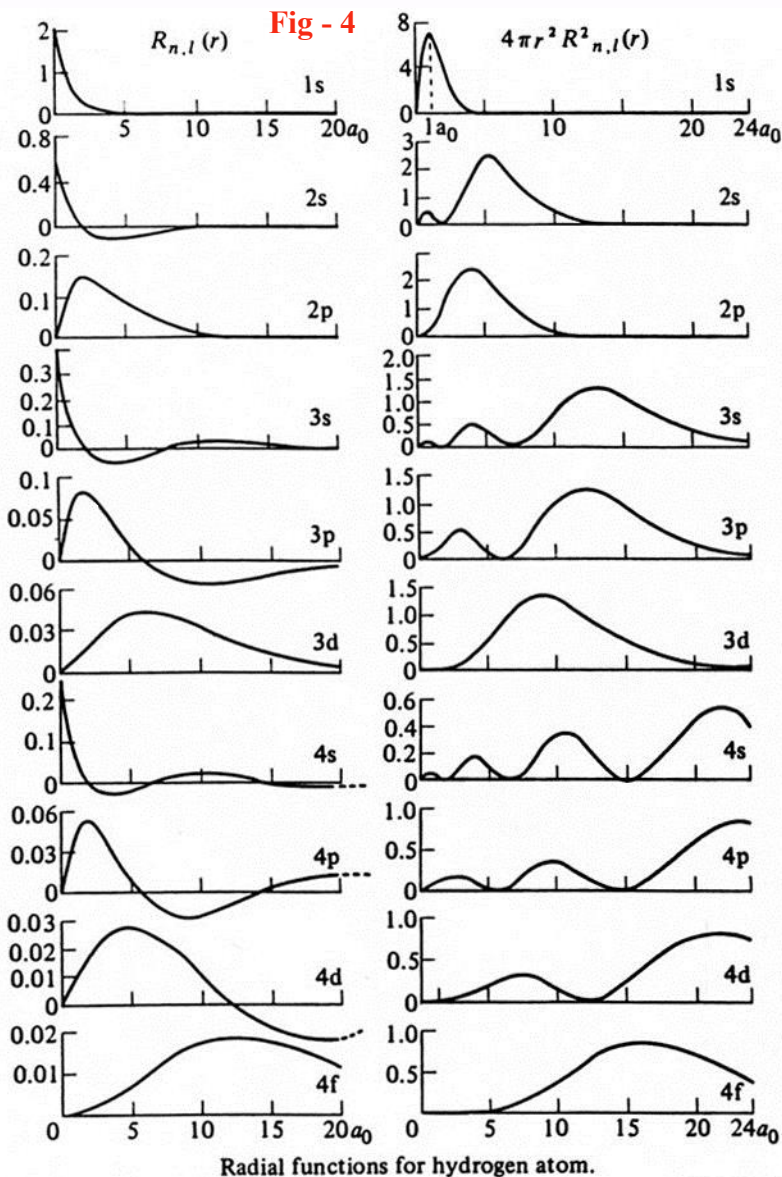


Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos",
Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 131.

* 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

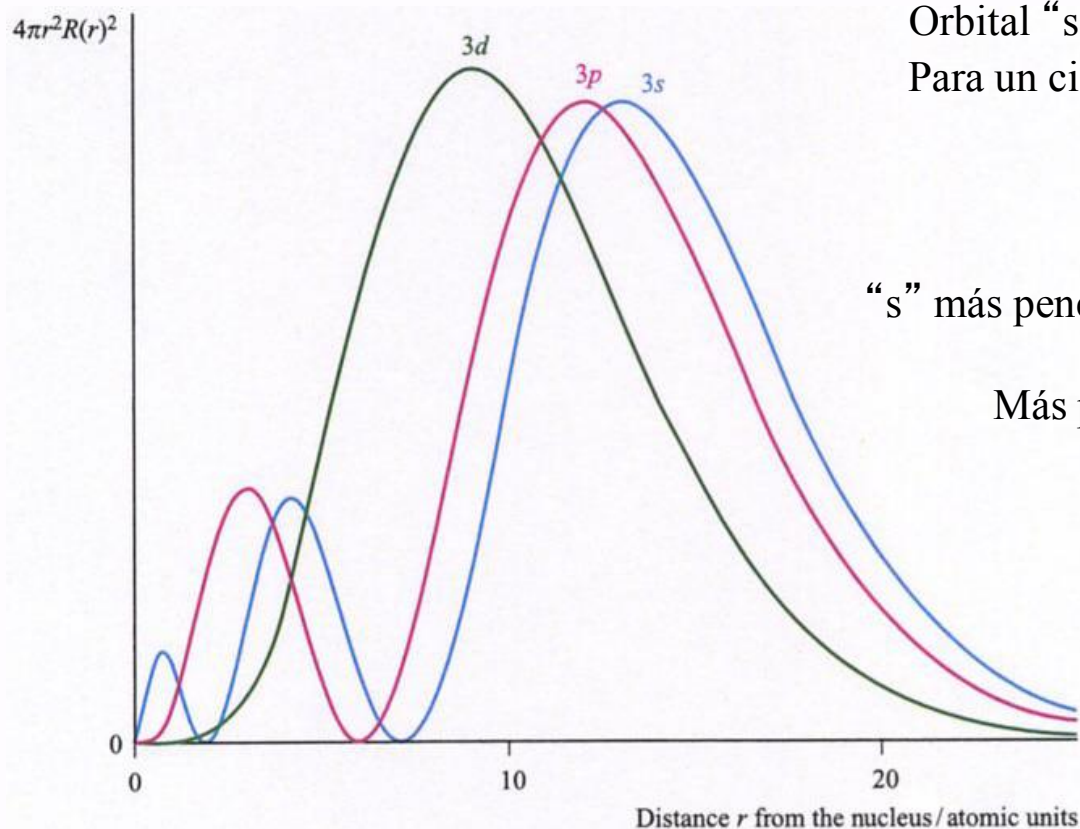


Solapamiento de lóbulos con igual signo
Situación enlazante
Fortalece en enlace

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

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

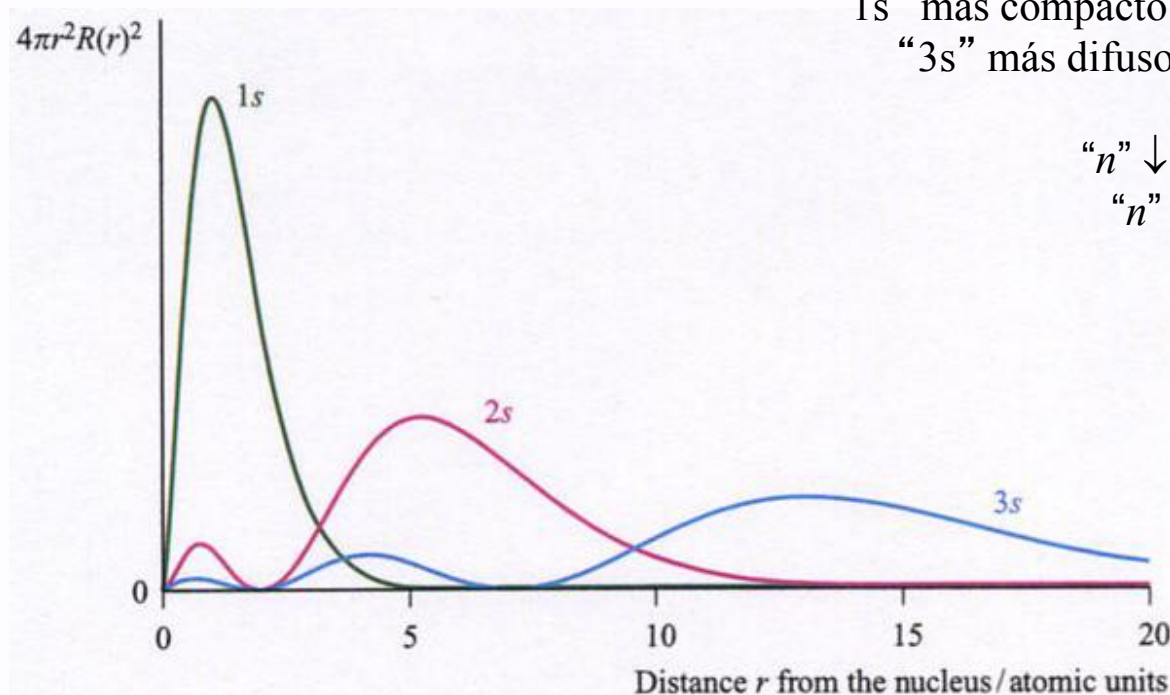
Más penetrante cuanto menor sea “*l*”
“*l*” ↓ penetración ↑

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.