

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

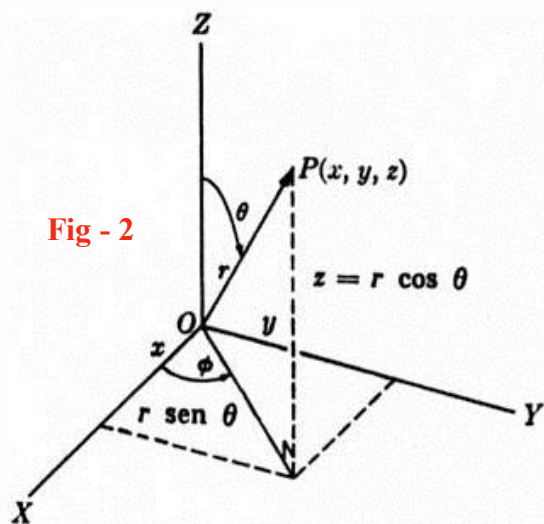


- \* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 2.**
- \* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté,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

$$x = r \sin\theta \cos\phi$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi$$

$$z = r \cos\theta$$

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

$$H\Psi = E\Psi$$

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

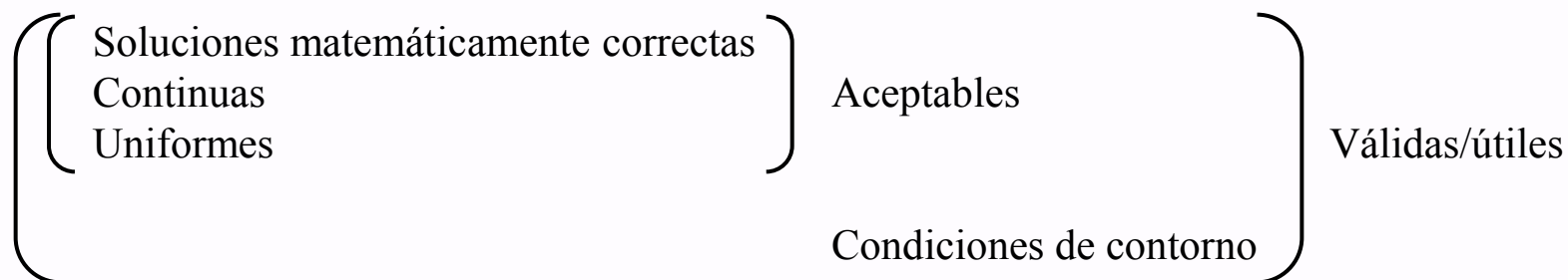
Números Cuánticos obtenidos como parte de la solución matemática

$(n, l, m_l)$

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.

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

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

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

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

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

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	$nl^x$
	1	0, $\pm 1$	$2p_x, 2p_y, 2p_z$	
3	0	0	3s	$2p^5$
	1	0, $\pm 1$	$3p_x, 3p_y, 3p_z$	
	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 <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	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

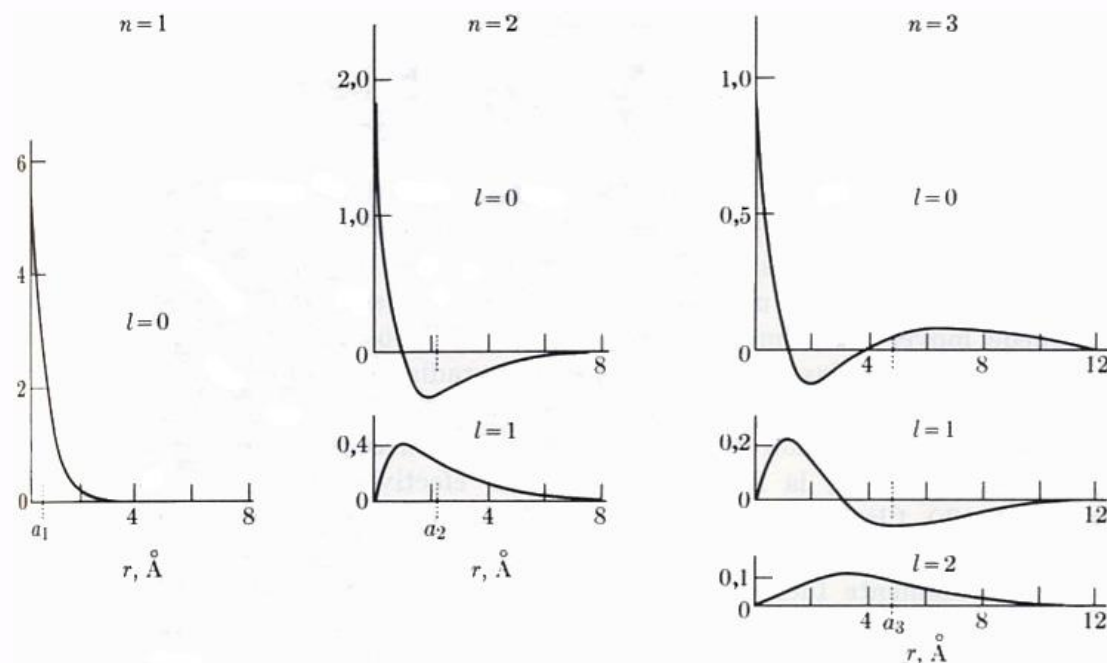


Fig. 3-12. Funciones radiales del hidrógeno para  $n = 1, 2$  y  $3$ . En cada caso, la ordenada de la curva es  $[R_{nl}(r) \text{ m}^{-3/2}] \times 10^{-8}$ .

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

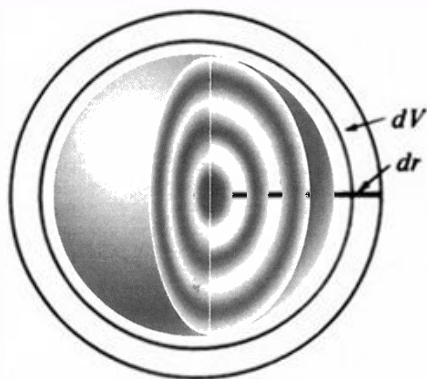
$Z$  = Carga nuclear

$e$  = 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

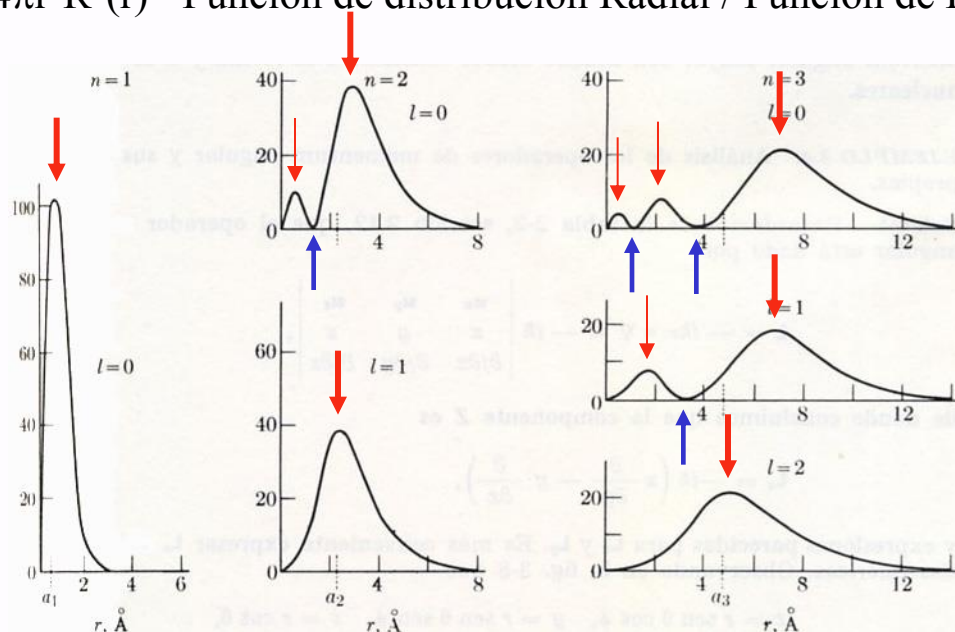


Fig. 3-13. Distribución radial de probabilidad en el hidrógeno para  $n = 1, 2$  y  $3$ . En cada caso la ordenada es  $[r^2 R_{nl}(r) \text{ m}^{-1}] \times 10^{-15}$ .

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

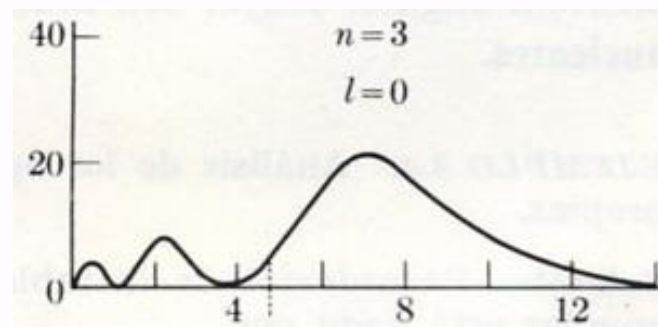
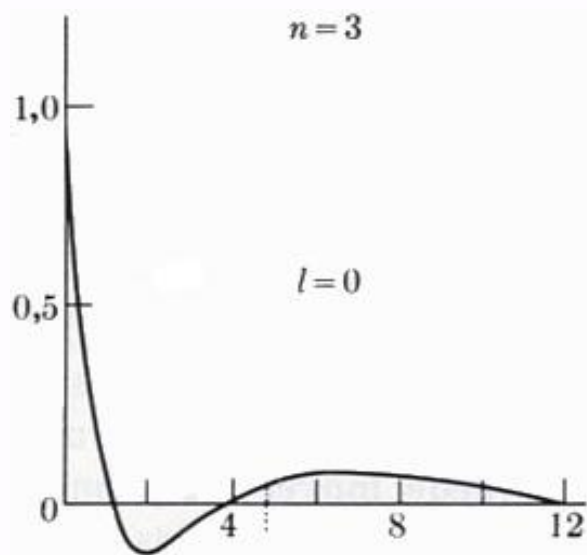
$Z$  = Carga nuclear

$e$  = 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

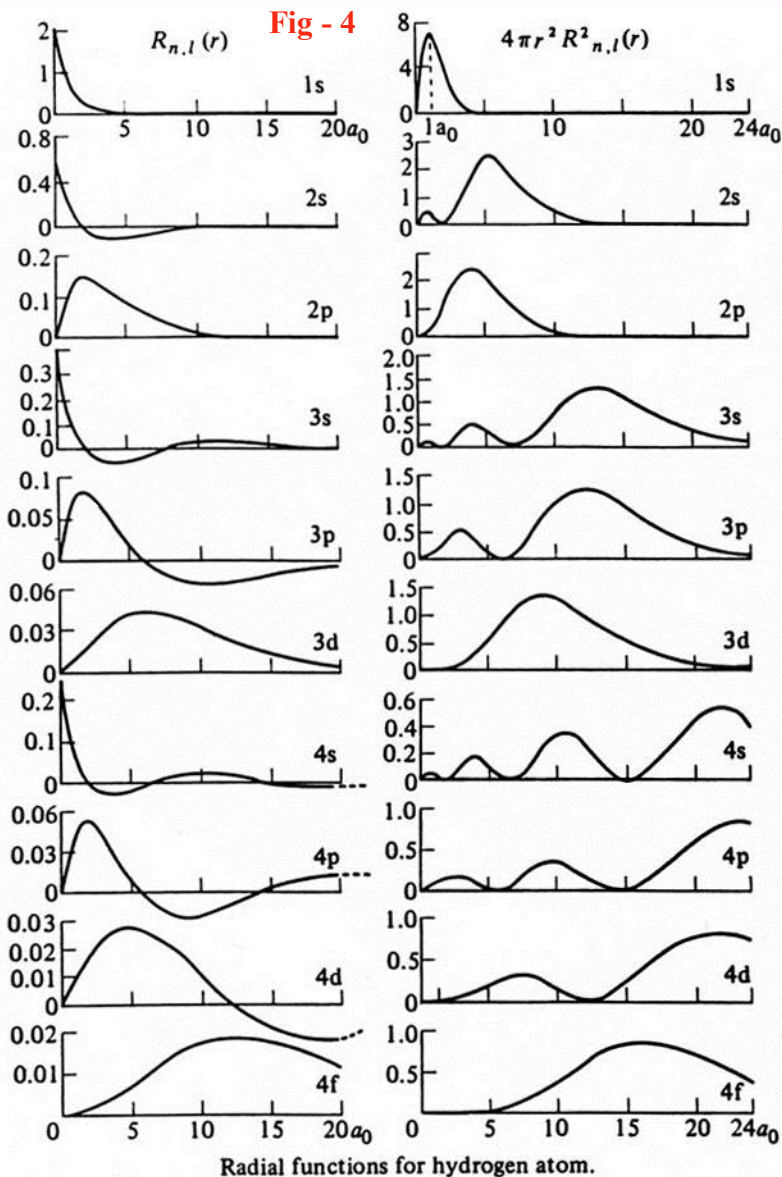


Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos",  
Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 131.

\* 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

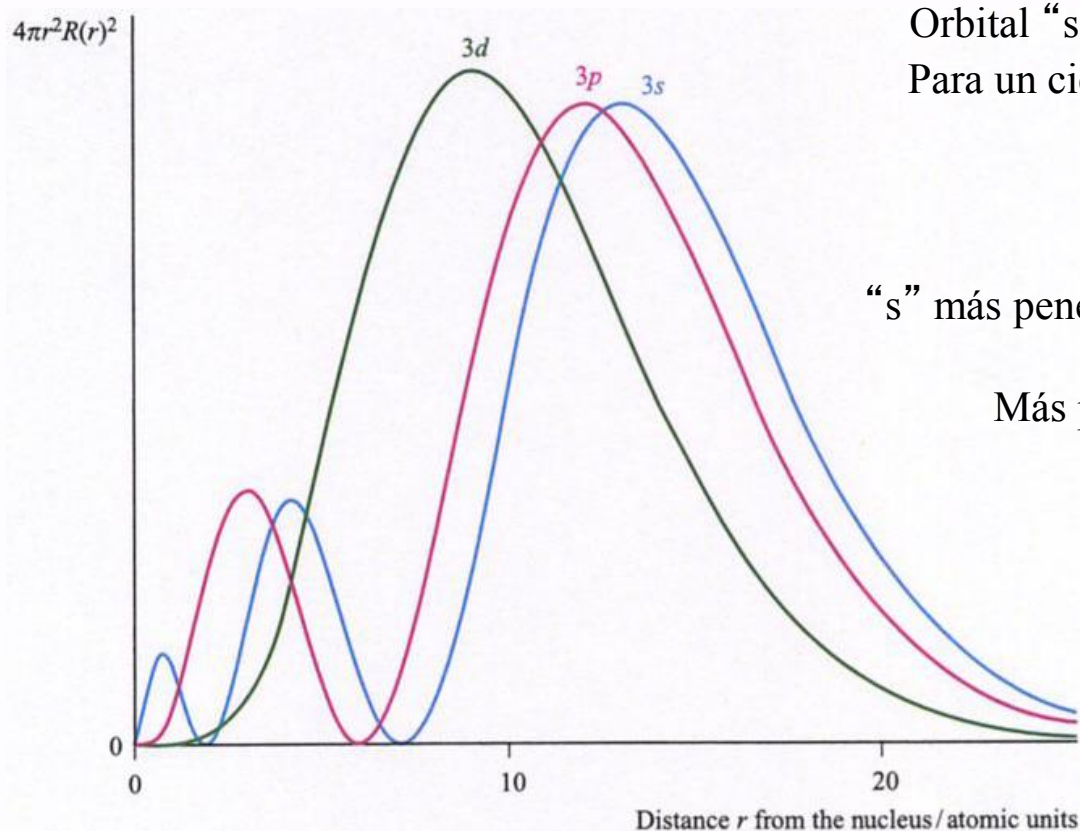


Solapamiento de lóbulos con igual signo  
Situación enlazante  
Fortalece en enlace

\* 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.

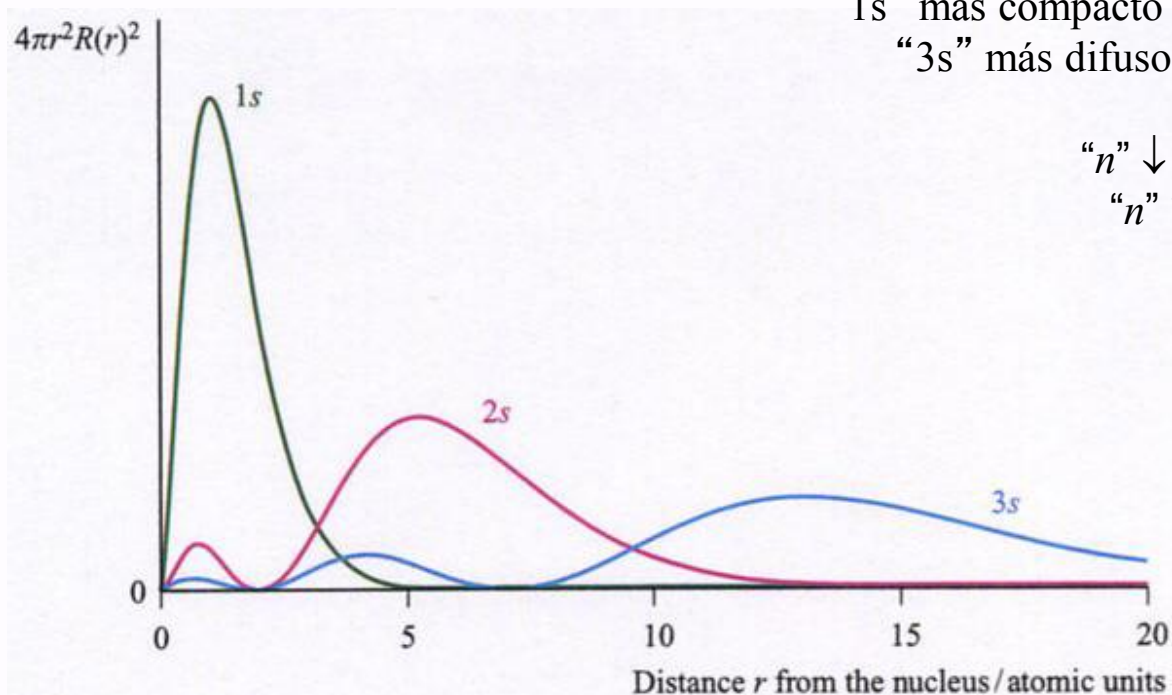
\* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994, pp 45.



## 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.

## 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

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

$$p_z = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (z/r)$$

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

$$Y_l^{real} = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_l^m + Y_l^{-m}]$$

$$p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (x/r)$$

$$Y_l^{real} = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_l^m - Y_l^{-m}]$$

$$p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (y/r)$$

\* 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.

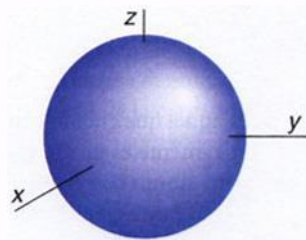
## Estudio de la Parte Angular

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

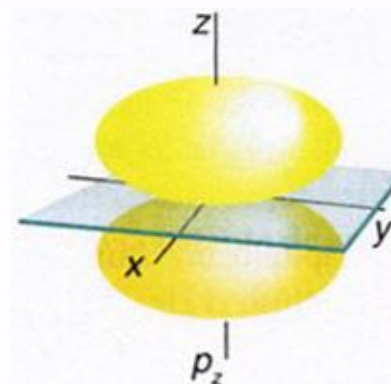
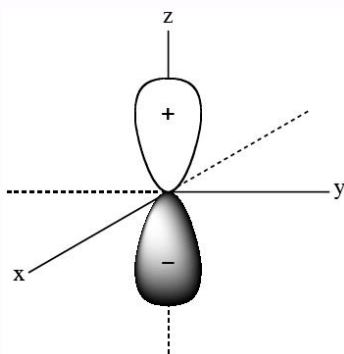
Orbital "p<sub>z</sub>"  $\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{z}{r}\right)$  Depende de "z/r"

$l = 1$  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 “ $p_x$ ”  $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{x}{r}\right)$  Depende de “ $x/r$ ”

Orbital “ $p_y$ ”  $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{y}{r}\right)$  Depende de “ $y/r$ ”

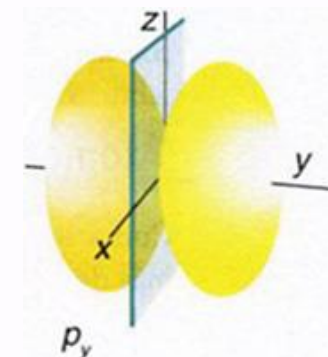
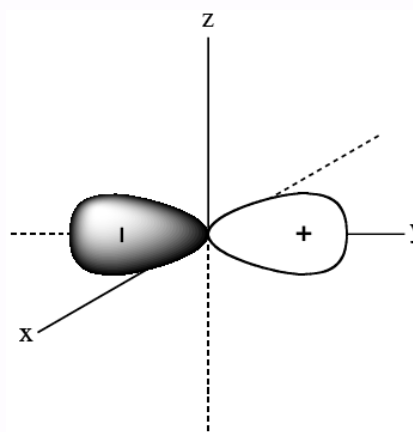
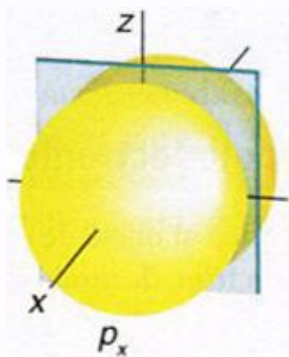
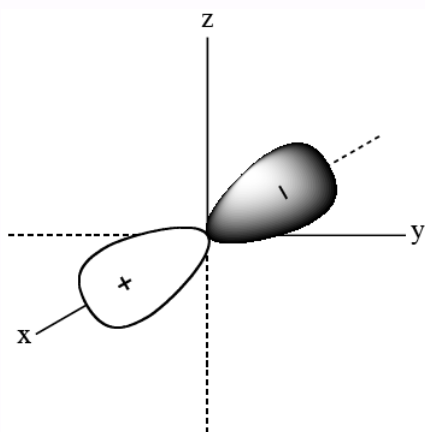
$l = 1$  1 nodo angular

$x > 0$   $\Psi > 0$  (+)  
 $x < 0$   $\Psi < 0$  (-)

$x = 0$   
Plano YZ

$y > 0$   $\Psi > 0$  (+)  
 $y < 0$   $\Psi < 0$  (-)

$y = 0$   
Plano XZ



\* 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 “ $d_{z^2}$ ”  $\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \{2z^2 - (x^2 + y^2)\} / r^2$

Depende de “ $2z^2 - (x^2 + y^2)$ ”

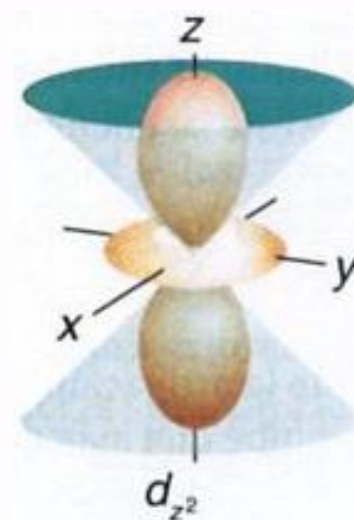
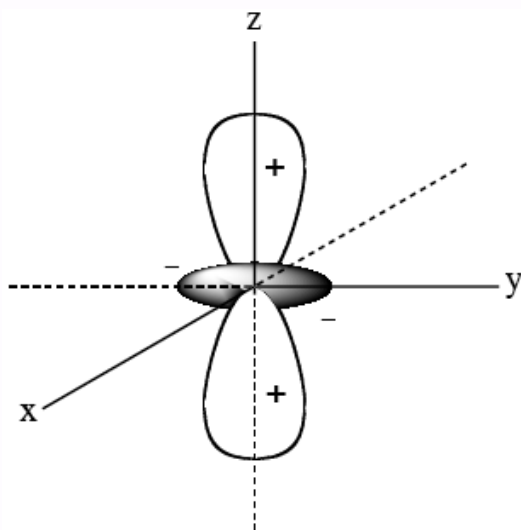
$$\begin{aligned} z > 0 & \quad \Psi > 0 \quad (+) \\ z < 0 & \quad \Psi > 0 \quad (+) \\ z = 0 & \quad \Psi < 0 \quad (-) \end{aligned}$$

$l = 2$     2 nodos angulares

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

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

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.



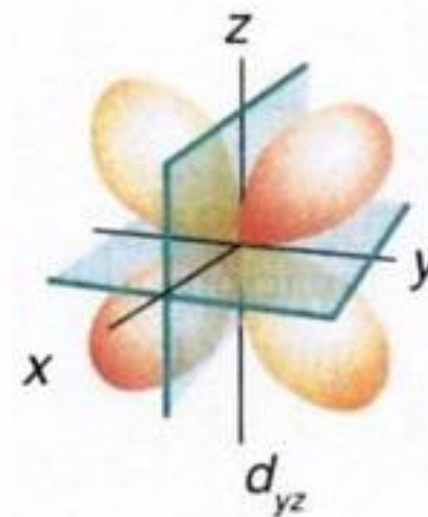
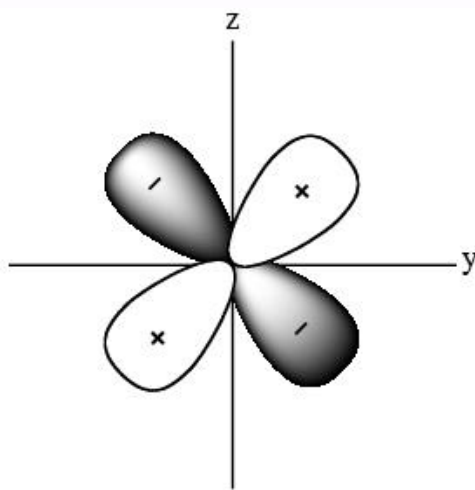
## Estudio de la Parte Angular

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

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

$l = 2$  2 nodos angulares

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



\* 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”

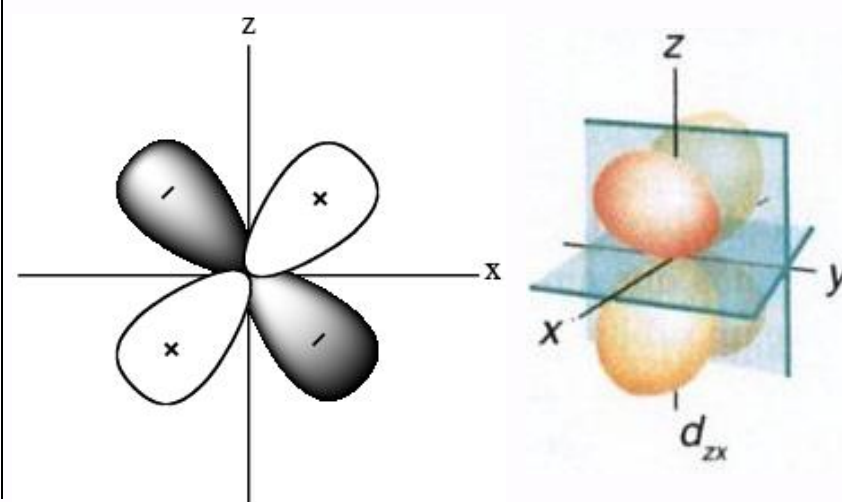
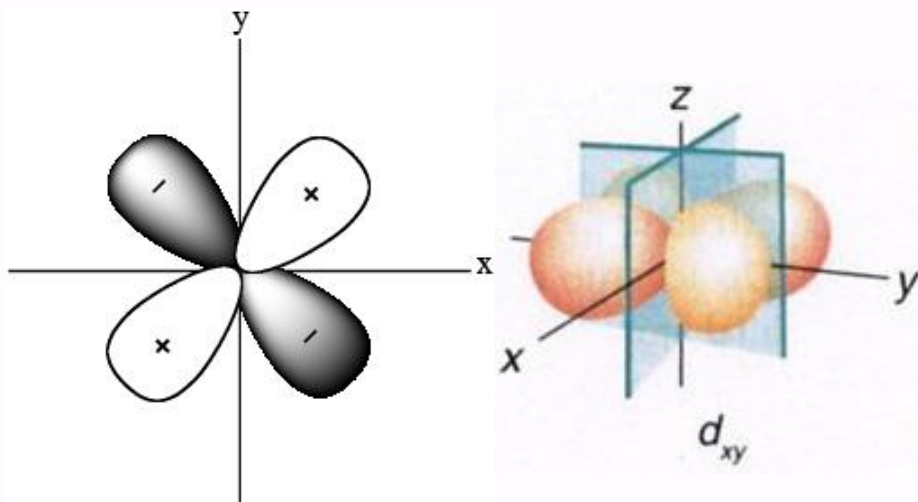
$l = 2$  2 nodos angulares

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

$xy = 0 \begin{cases} x = 0 \text{ plano YZ} \\ y = 0 \text{ plano XZ} \end{cases}$

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

$xz = 0 \begin{cases} x = 0 \text{ plano YZ} \\ z = 0 \text{ plano XY} \end{cases}$



\* 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**.

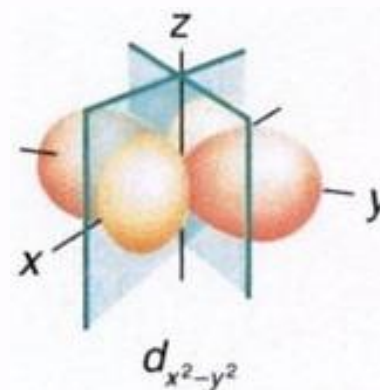
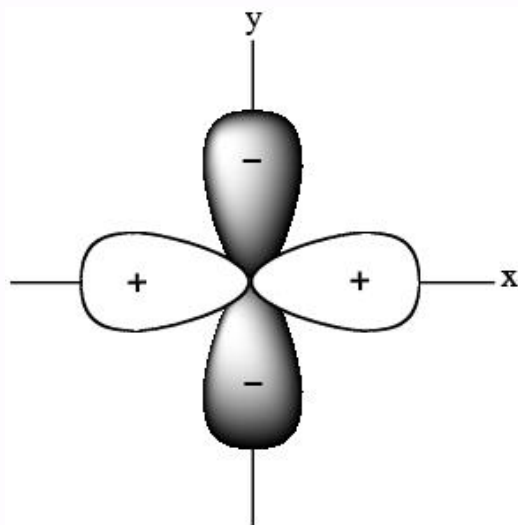
### Estudio de la Parte Angular

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

### Representación

Parte Radial de la función  
 $R(r)$

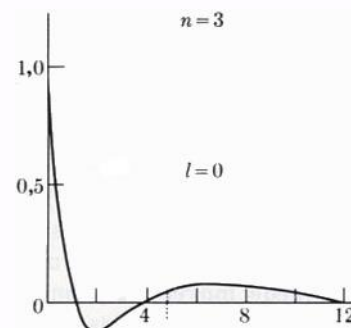
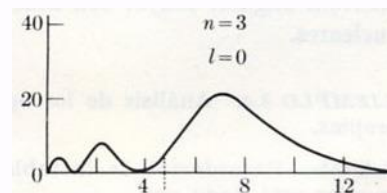


Fig - 4

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



**Estudio conjunto**

**Representación**

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

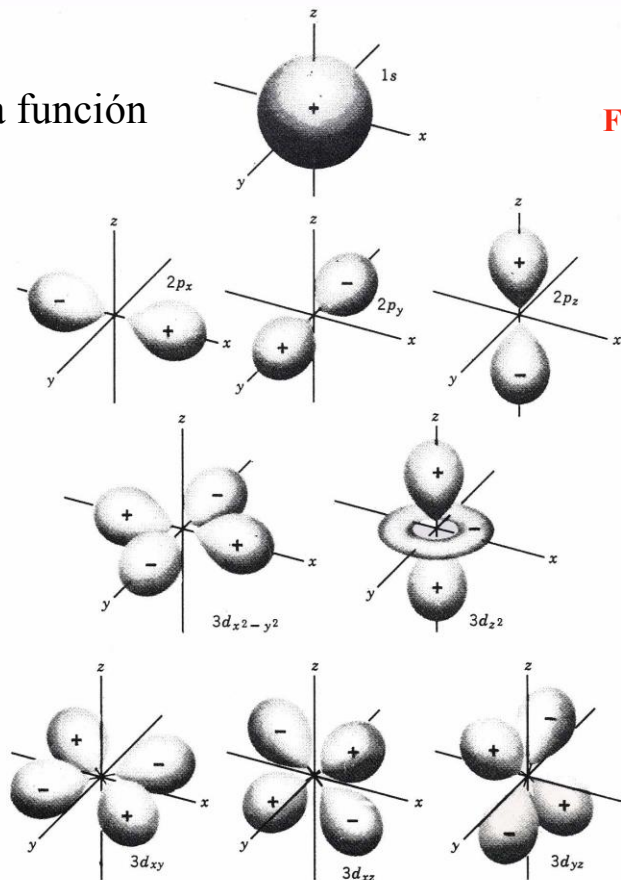


Figura 2-15 Representaciones tridimensionales que muestran la dependencia angular de los orbitales 1s, 2p y 3d para r fijo. [F. Daniels and R. A. Alberty, *Physical Chemistry*, 4.ª ed., pág. 416, John Wiley et Sons, Inc., New York (1975).]

Fig - 5

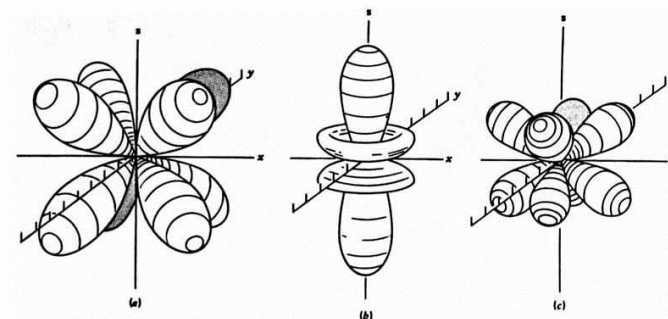


Figure 2-17 Representations of 4f orbitals. (a)  $f_{xyz}$ ; (b)  $f_{z(5z^2-3z^2)}$ ; (c)  $f_{z(x^2-y^2)}$  [J. T. Waber and J. E. Hockett, in *Proceedings of the Fourth Conference on Rare Earth Research*, L. Eyring (Ed.), Fig. 1, p. 285, Gordon and Breach, New York (1965).]

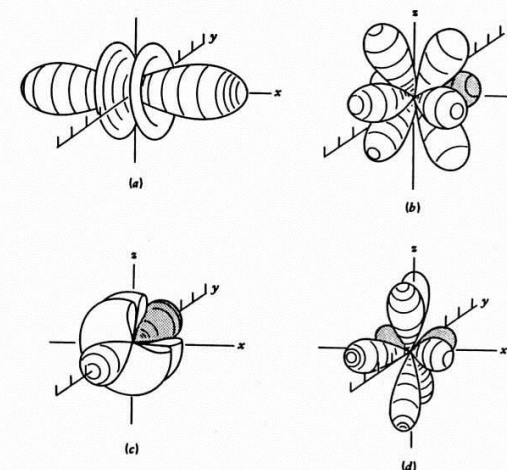


Figure 2-18 Representations of 4f orbitals. (a)  $f_x(5x^2-3x^2)$ ; (b)  $f_x(x^2-y^2)$ ; (c)  $f_y(5y^2-3y^2)$ ; (d)  $f_y(y^2-x^2)$ . [J. T. Waber and J. E. Hockett, in *Proceedings of the Fourth Conference on Rare Earth Research*, L. Eyring (Ed.), Fig. 3, p. 287, Gordon and Breach, New York (1965).]

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

## Estudio conjunto

### Representación

Mapas de densidad electrónica 3D

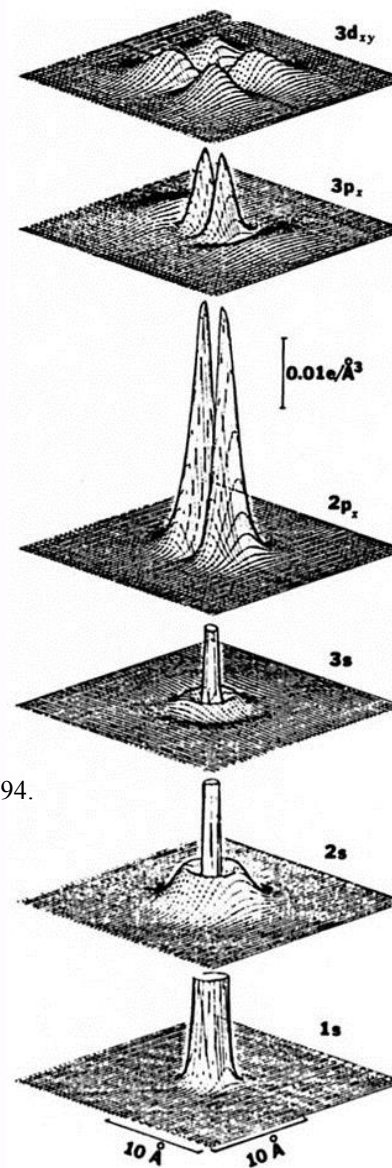


Fig - 6

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

## Estudio conjunto

### Representación

Diagrama de puntos

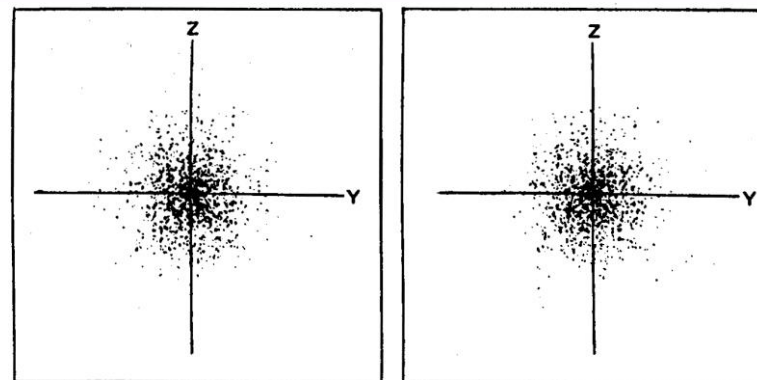


Figure 2-13 Electron-density map for hydrogenic 1s orbital. [D. T. Cromer, *J. Chem. Educ.*, 45, 626 (1968), Fig. 1.]

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

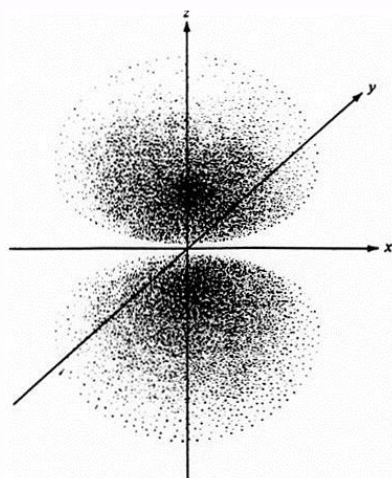


Fig - 7

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.

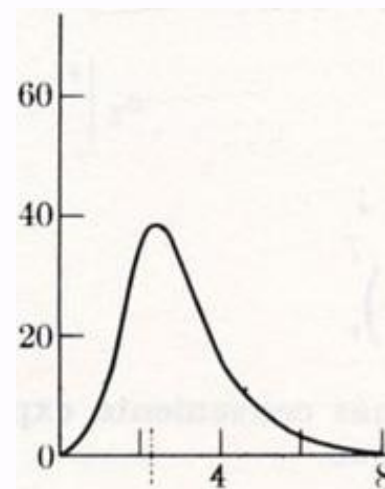
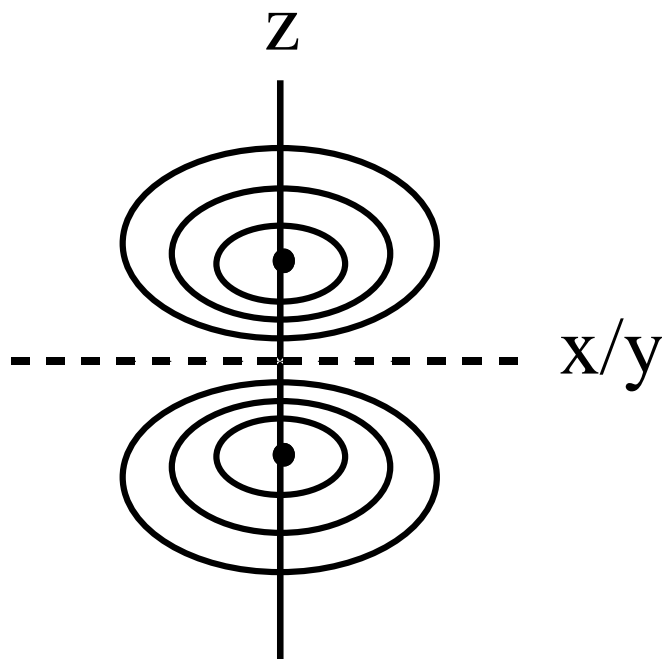
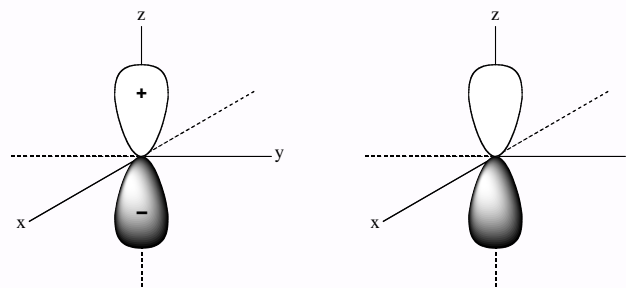
Fig. 2.8 Pictorial representation of electron density in a hydrogen-like 2p orbital.



## Estudio conjunto

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

$$\begin{aligned} 2 p_z & \quad \text{Nodos Radiales} = n - l - 1 = 2 - 1 - 1 = 0 \\ & \quad \text{Nodos Angulares} = l = 1 \\ & \quad \text{Nodos totales} = n - 1 = 2 - 1 = 1 \end{aligned}$$

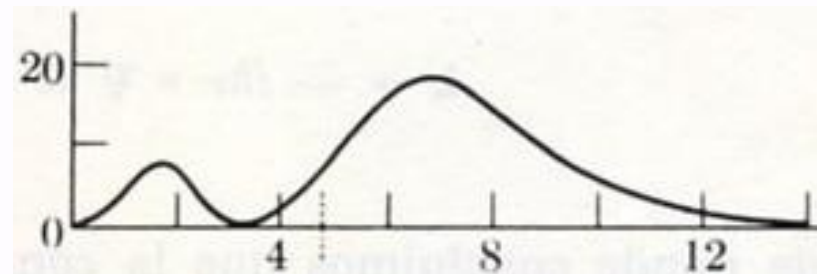
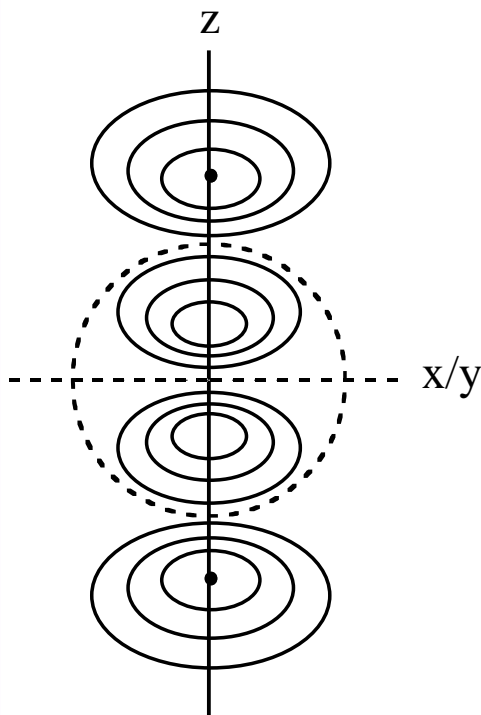
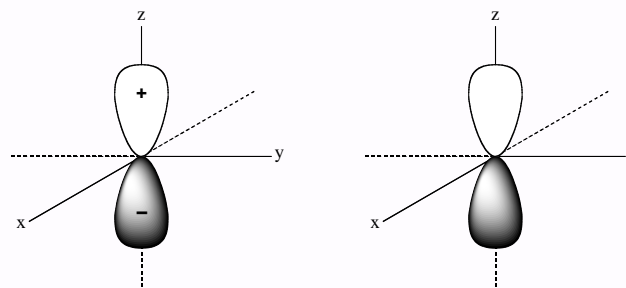


## Estudio conjunto

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

$3 p_z$

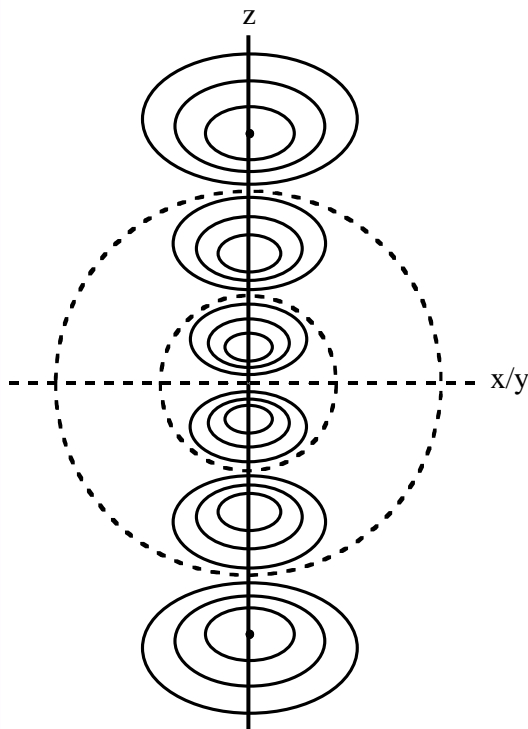
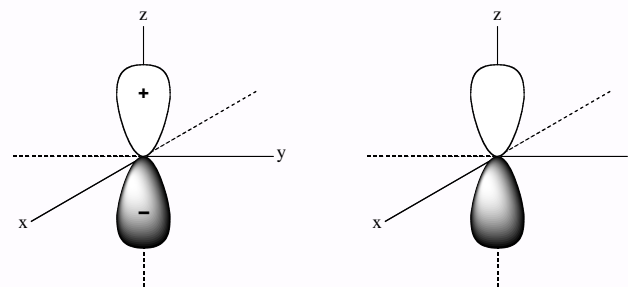
Nodos Radiales	$= n - l - 1 = 3 - 1 - 1 = 1$
Nodos Angulares	$= l = 1$
Nodos totales	$= n - 1 = 3 - 1 = 2$



**Estudio conjunto**

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

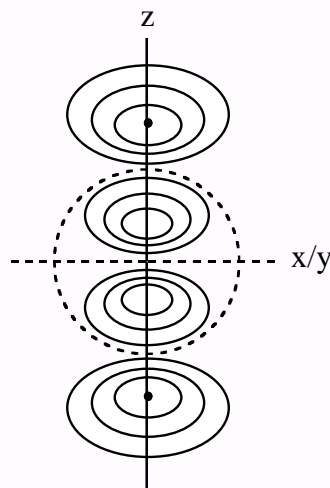
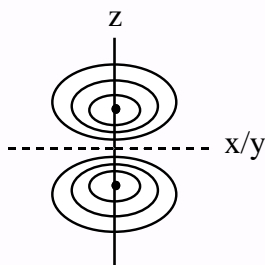
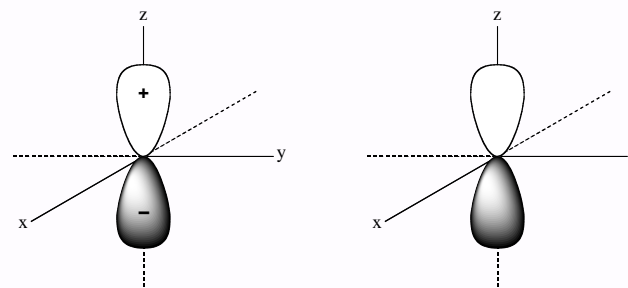
4 p<sub>z</sub>      Nodos Radiales =  $n - l - 1 = 4 - 1 - 1 = 2$   
               Nodos Angulares      =       $l = 1$   
               Nodos totales      =       $n - 1 = 4 - 1 = 3$



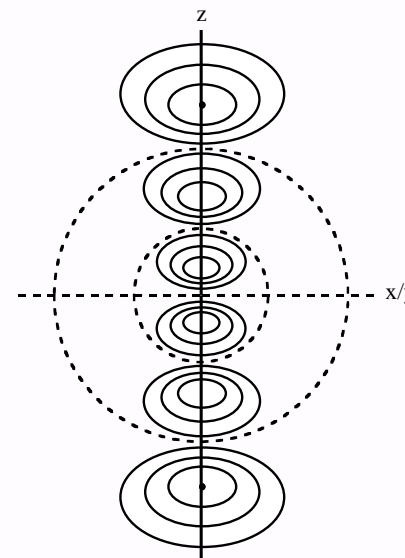
**Estudio conjunto**

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

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



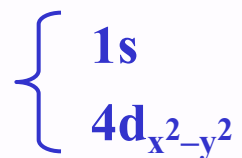
**Fig - 8**



## Estudio conjunto

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

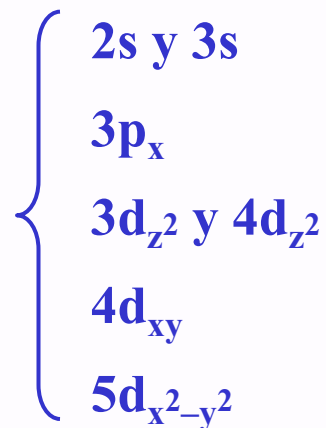
#### Para practicar



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  $n$ -esimo nivel de energía

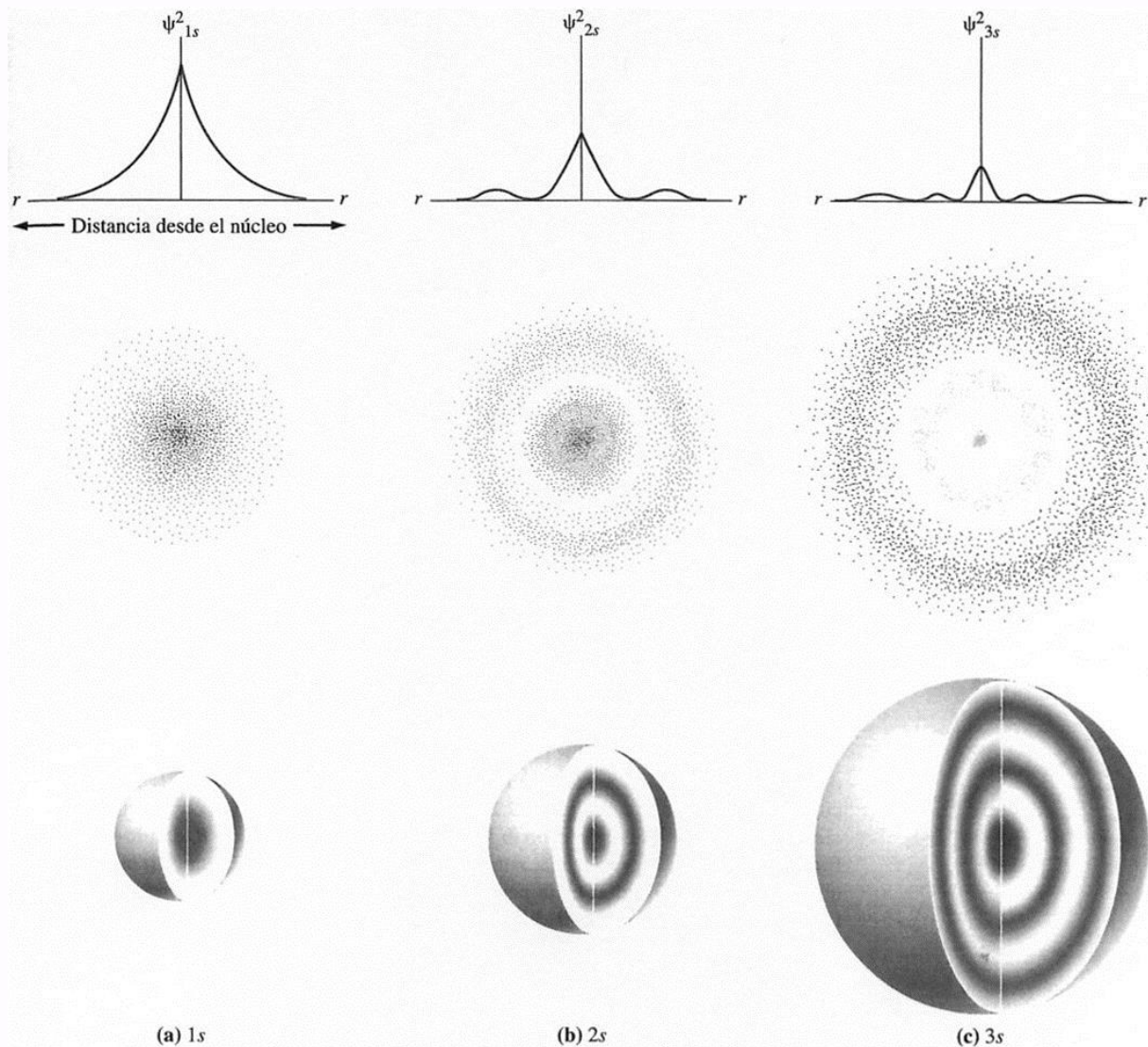
$n = 1$	s
$n = 2$	s, p
$n = 3$	s, p, d
$n = 4$	s, p, d, f

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

Parte Angular

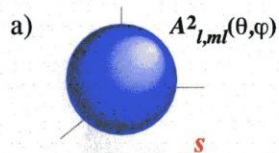


Figura 1.11. Representación de las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuando  $l = 0$  (orbitales  $s$ ).

- 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

