

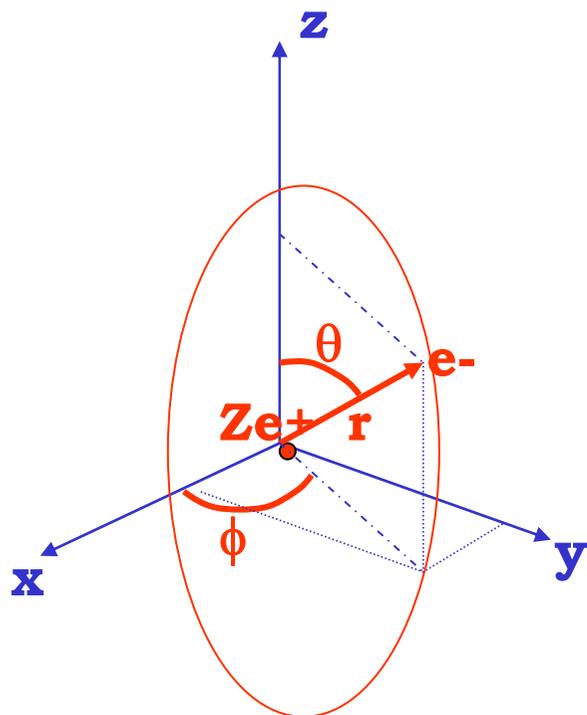
## Capítulo 3. Átomos Hidrogenoides.

### **Objetivos:**

- Introducción del concepto de orbital atómico
- Descripción de los números cuánticos en los orbitales atómicos
- Justificación cualitativa de la cuantización de los observables en los átomos hidrogenoides: energía, momento angular orbital, componentes del momento angular orbital
- Descripción de las características de los orbitales s,p y d: tamaño y forma de los orbitales
- Introducción del momento angular de espín: función espín-orbital electrónica

\*algunas de las figuras que se insertan en este documento corresponden al texto Atkins' Physical Chemistry (Oxford University Press, 2003) y a Química General de Petrucci et al. (Prentice Hall, 2002)

# Átomos Hidrogenoides: H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>, Be<sup>3+</sup>, ...



Coordenadas esféricas polares

La Ecuación de Schrödinger:  $\hat{H} \Psi = E \Psi$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \hat{T}$$

$$\hat{V} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

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

$$z = r \cos \theta$$

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

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

$$\Psi(x,y,z) \equiv \Psi(r,\theta,\phi)$$

Las soluciones de la Ecuación de Schrödinger, funciones propias, son los **ORBITALES ATÓMICOS**,  $\Psi(r,\theta,\phi)$

- **La función de onda: orbital atómico**

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) = \mathbf{R(r)} \mathbf{Y(\theta,\phi)}$$

**R(r); Función de onda Radial**  
(determina el tamaño del orbital)

$|\Psi|^2 d\tau =$   
 $|\Psi|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$   
Probabilidad de encontrar  
al electrón en un elemento  
diferencial de volumen

**Y(θ,φ) Función de onda Angular**  
o **Armónicos esféricos**  
(determina la forma del orbital)

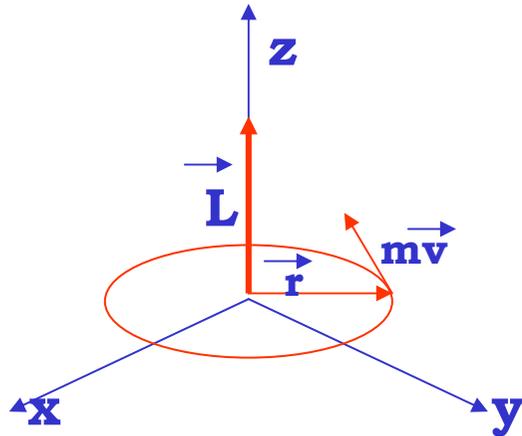
- **La Energía**

La solución de la Ecuación de Schrödinger, para cada función propia, valor propio, es la **ENERGIA del ORBITAL ATÓMICO**

$$E = -\frac{me^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \frac{Z^2}{n^2}$$

**$n = 1,2,3,\dots,\infty$ , Número cuántico principal**  
(idéntica a la obtenida en el modelo de Bohr)

● El Momento Angular Orbital,  $\vec{L}$



en mecánica clásica :  $\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$   
 (Puede tener cualquier valor)

en mecánica cuántica:  $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$   
 (el módulo está cuantizado)

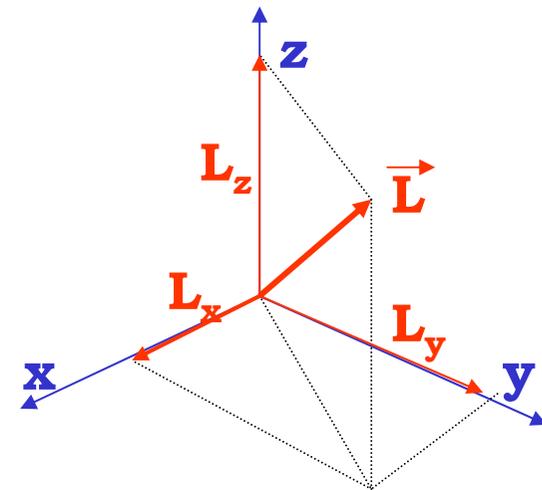
$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$   
Número cuántico azimutal

● Componentes del Momento Angular Orbital

$$\vec{L} = L_x \vec{i} + L_y \vec{j} + L_z \vec{k}$$

en mecánica cuántica :  $L_z = m\hbar$   
 (El valor de las componentes está cuantizado)

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$   
Número cuántico magnético



## Átomos hidrogenoides

La forma analítica de la función de onda del electrón en un átomo, orbital atómico, depende de los números cuánticos  $n, l, m$

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Nombre de los orbitales atómicos:					
$l$	0	1	2	3	4
nombre	s	p	d	f	g

Todos los OA que tienen el mismo número cuántico  $n$  forman una capa electrónica

Dentro de una capa electrónica, todos los OA que tienen el mismo número cuántico  $l$ , forman un subnivel o subcapa

Todos los OA que tienen el mismo número cuántico  $n$  tienen la misma energía y son degenerados

## Estados de energía, capas y subcapas electrónicas

<b>Números cuánticos</b>	<b>Orbital Atómico</b>			
	<b>n, Capa</b>	<b>l, subcapa</b>	<b>m</b>	<b>subcapa</b>
1 (K)	0	0	1s	
2 (L)	0	0	2s	Estados degenerados
	1	1	2p	
		0		
-1				
3 (M)	0	0	3s	Estados degenerados
	1	1	3p	
		0		
		-1		
	2	-2	3d	
		-1		
		0		
1				
2				

**ORBITALES ATOMICOS HIDROGENOIDES**

Continuación.....

## Estados de energía, capas y subcapas electrónicas

**ORBITALES ATOMICOS HIDROGENOIDES**

Números cuánticos			Orbital Atómico subcapa		
<b>n</b> , Capa	<b>l</b> , subcapa	<b>m</b>			
4 (N)	0	0	4s	Estados degenerados	
	1	1	1		4p
		0	0		
		-1	-1		
	2	2	-2		4d
			-1		
			0		
			1		
			2		
	3	3	-3		4f
			-2		
			-1		
			0		
1					
2					
3					

# Representación gráfica de los OA

- ¿Qué expresión analítica tienen los OA?
- ¿cómo representaremos gráficamente los OA?

## Orbitales de tipo s (simetría esférica)

$$R_{1,0} = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

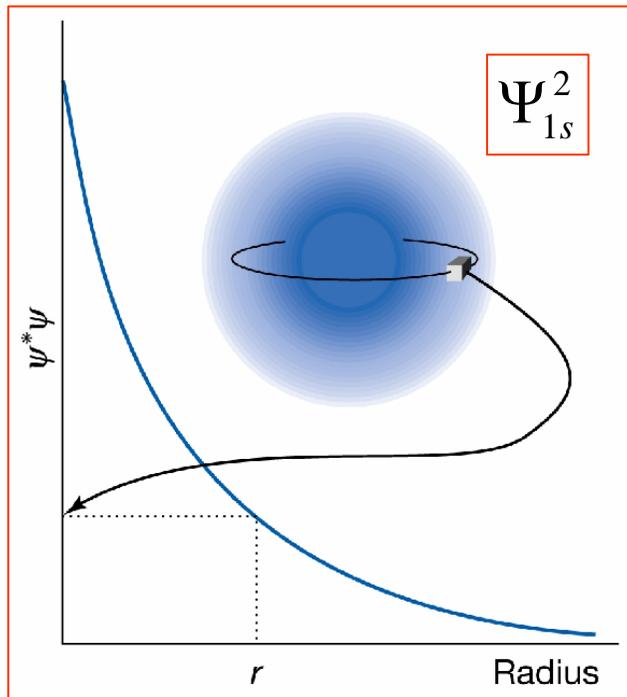
Función radial

$$Y_{0,0}(s) = \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

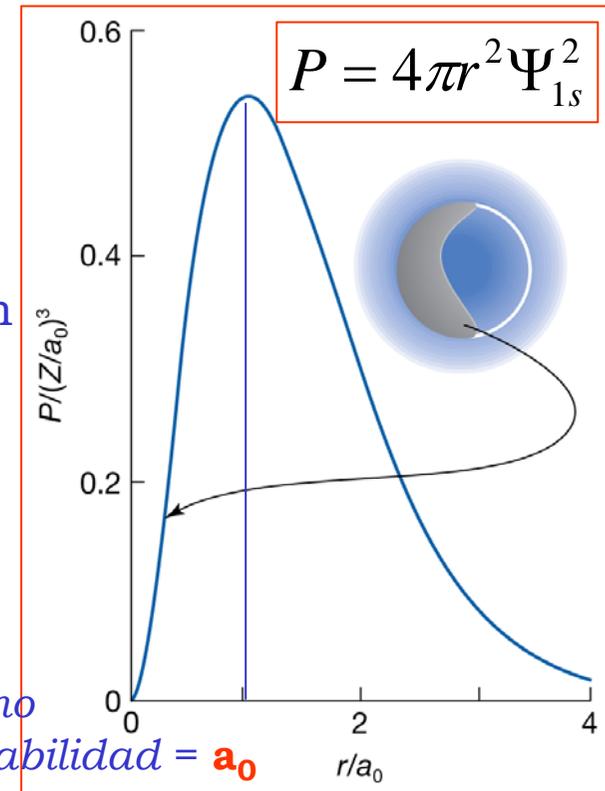
Función angular

$$\Psi(1s) = \left( \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-Zr/a_0}$$

Función total



Significado de la función de densidad,  $\Psi^2$  (izquierda), su variación con r en un orbital 1s; y de la función de distribución radial,  $r^2R^2$  (derecha)



$Z=1$ , átomo de hidrógeno

Radio de máxima probabilidad =  $a_0$

## Orbitales de tipo s (simetría esférica)

$$R_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

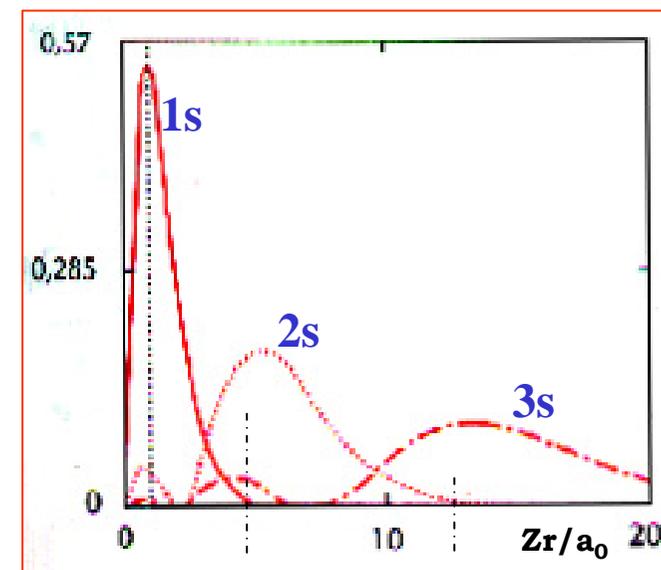
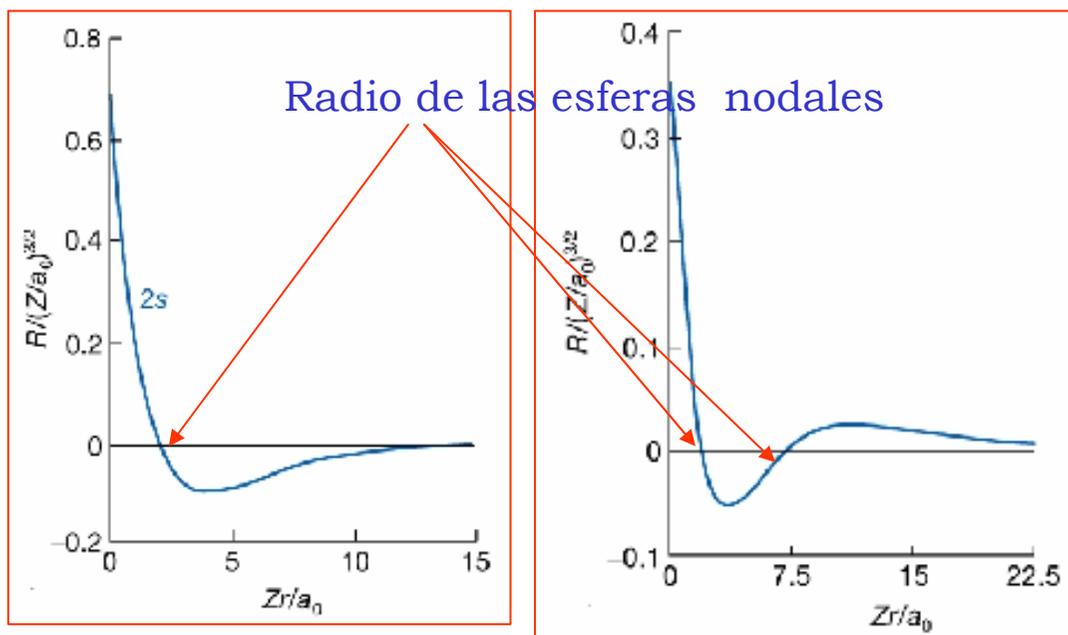
$$R_{3,0} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2Z^2 r^2}{27a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

Función radial

$$\Psi(2s) = R_{2,0} \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

$$\Psi(3s) = R_{3,0} \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

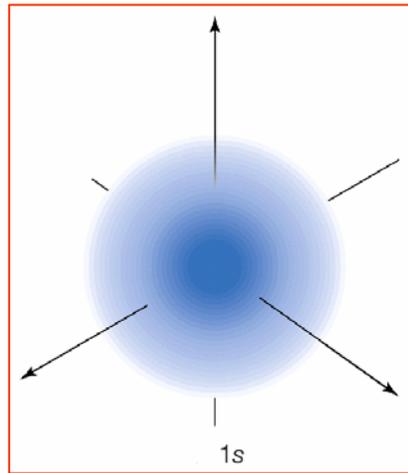
Función Total



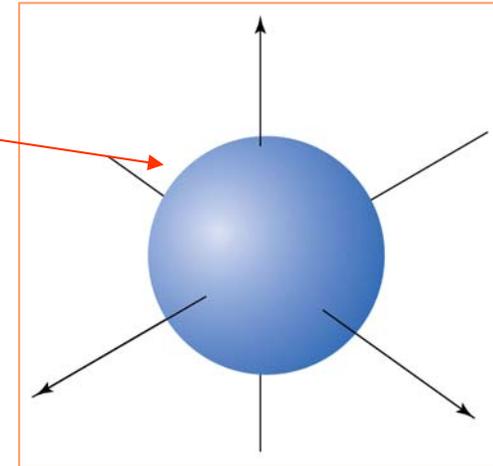
Comparación de las funciones de distribución radial de los orbitales 1s, 2s y 3s (*posición relativa, penetración*)

**Esferas nodales** en los orbitales 2s y 3s

## - Orbitales de tipo s (simetría esférica)

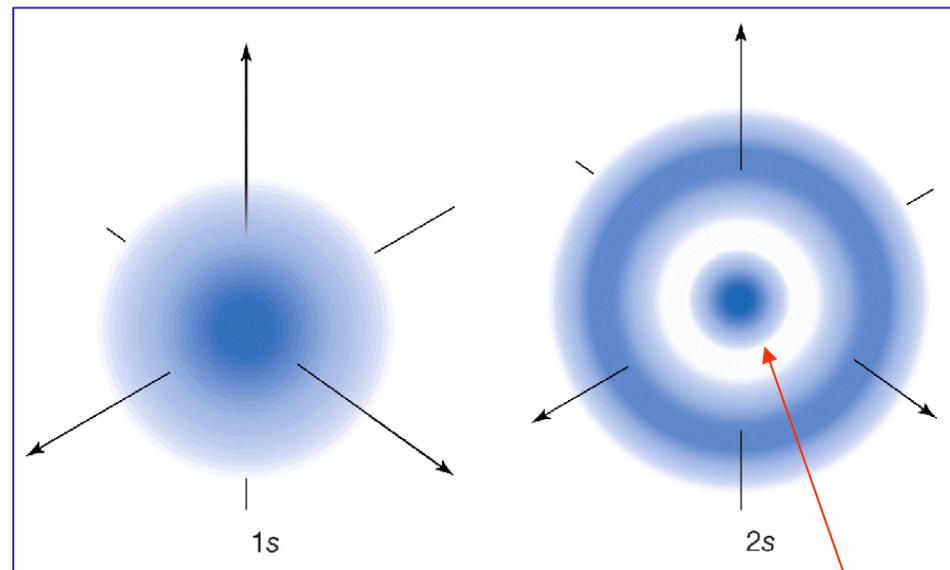


Esfera dentro de la que la probabilidad de encontrar al electrón es del 90%



La intensidad del color es proporcional a la **densidad de probabilidad** de encontrar al electrón

Comparación de las densidades electrónicas en un orbital 1s y otro 2s



*Esfera nodal*

Átomos hidrogenoides

- Orbitales de tipo p (1 plano nodal)

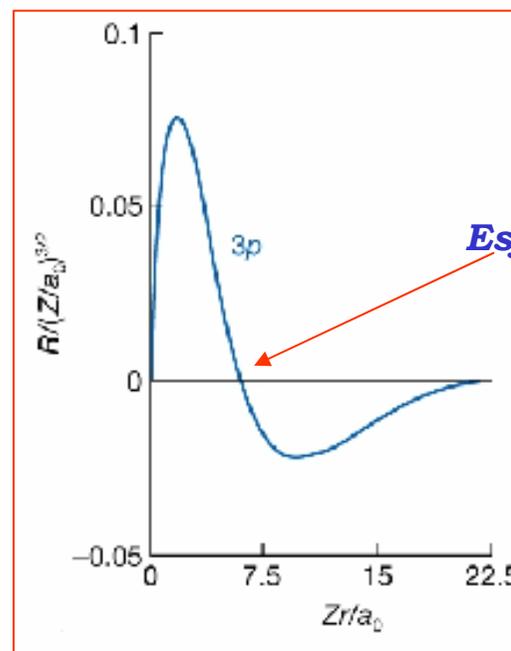
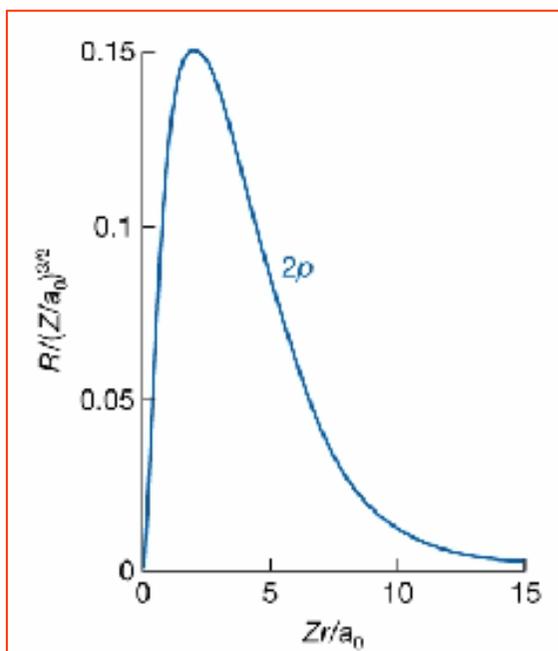
-Tamaño y penetración-

$$R_{2,1} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0}$$

Función radial 2p

$$R_{3,1} = \frac{8}{27\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( \frac{Zr}{a_0} - \frac{Z^2 r^2}{6a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

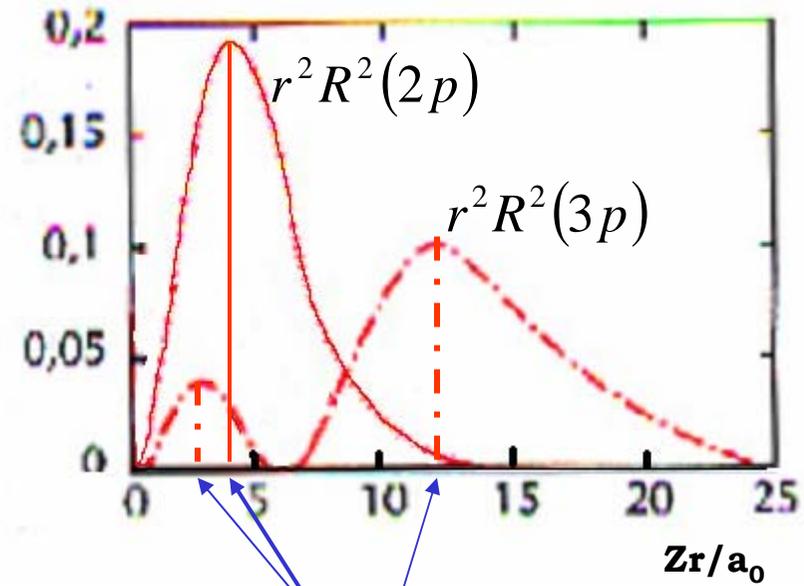
Función radial 3p



Átomos hidrogenoides

- Orbitales de tipo p (1 plano nodal)

-Tamaño-

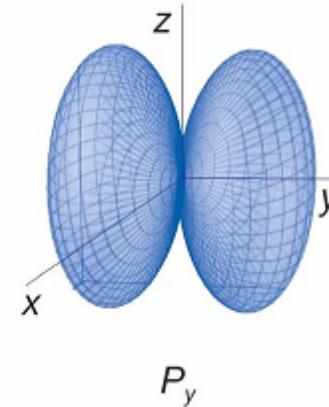
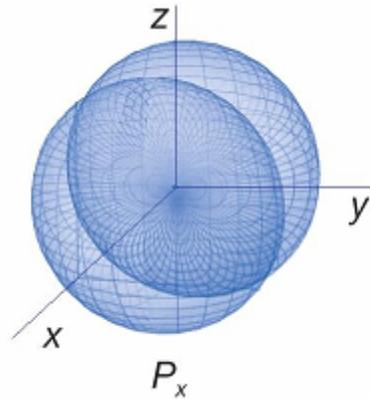
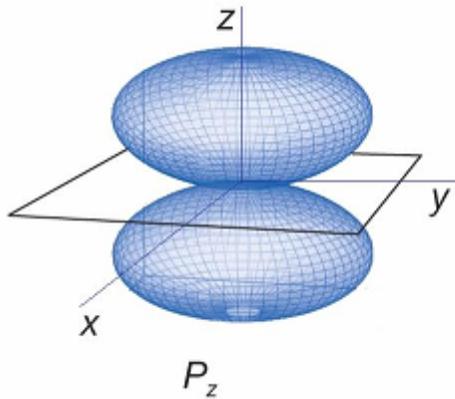


Radios de máxima probabilidad

- Orbitales de tipo p (1 plano nodal)

- Forma

$$Y_{1,\pm 1}(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen}\theta \cos\varphi$$



$$Y_{1,0}(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$$

$$Y_{1,\pm 1}(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen}\theta \text{sen}\varphi$$

$$\Psi(2p_z) = R_{2,1}Y(p_z)$$

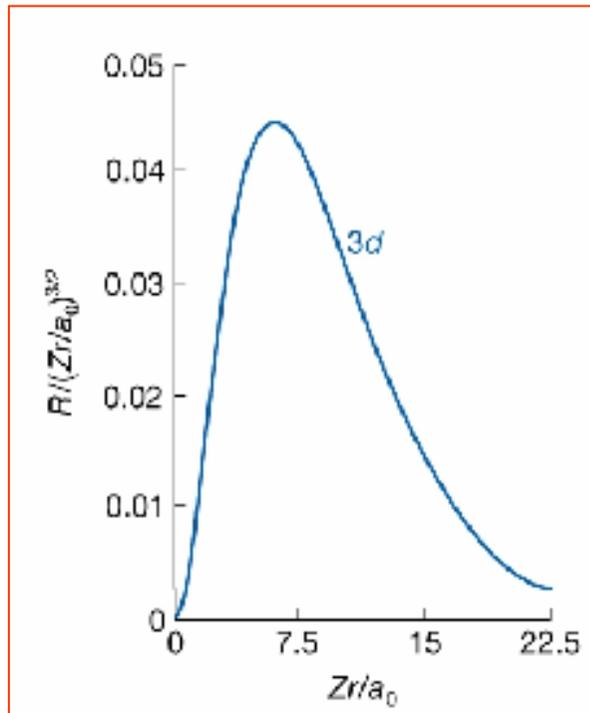
$$\Psi(2p_x) = R_{2,1}Y(p_x)$$

$$\Psi(2p_y) = R_{2,1}Y(p_y)$$

## Átomos hidrogenoides

### - Orbitales de tipo d (2 planos nodales)

$$R_{3,2} = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0}$$



Función radial 3d

### Funciones angulares 3d

$$Y_{3,0}(d_{z^2}) = \left( \frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_{3,\pm 1}(d_{xz}) = \left( \frac{10}{4\pi} \right)^{1/2} (\sin\theta \cos\theta \cos\varphi)$$

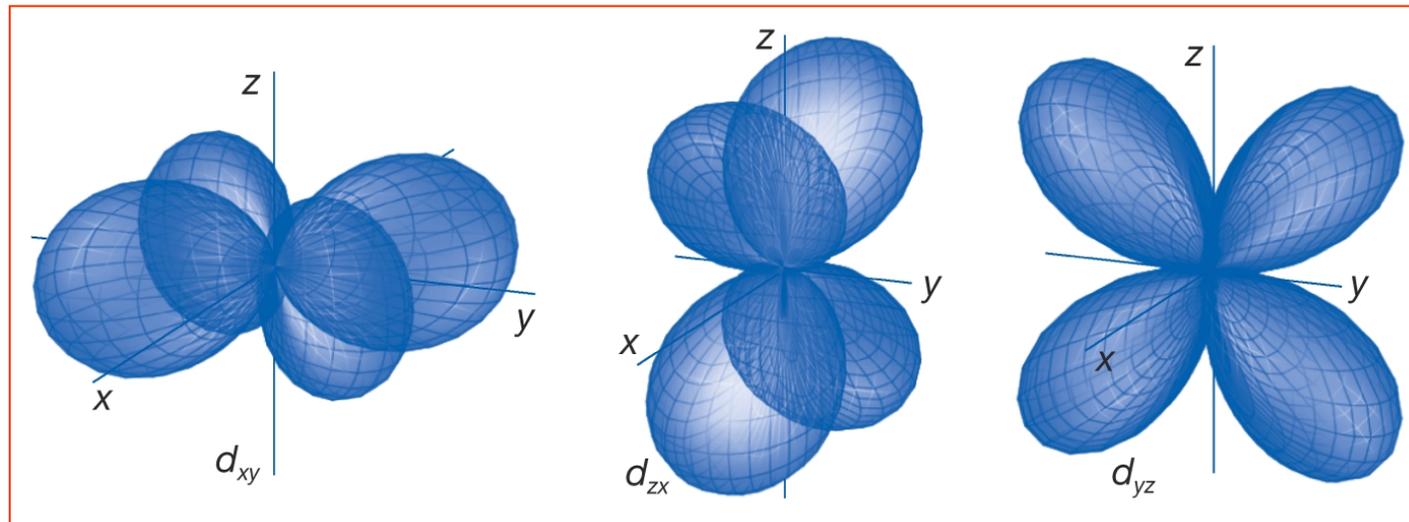
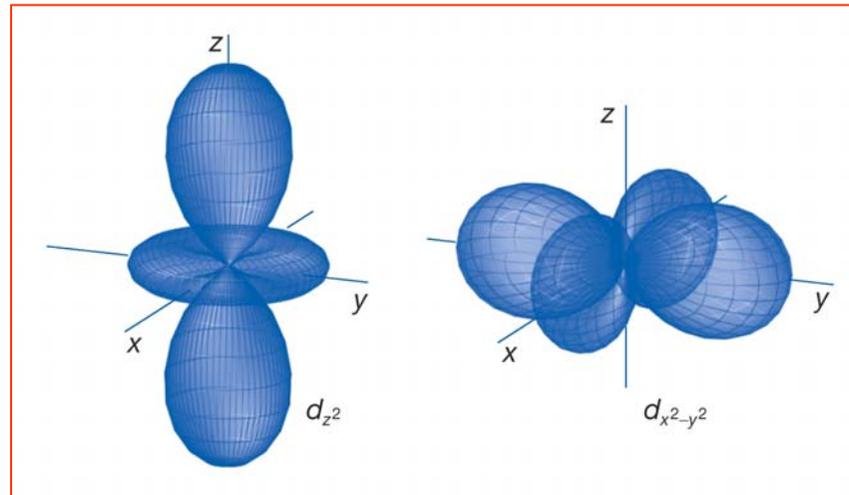
$$Y_{3,\pm 1}(d_{yz}) = \left( \frac{10}{4\pi} \right)^{1/2} (\sin\theta \cos\theta \sin\varphi)$$

$$Y_{3,\pm 2}(d_{x^2-y^2}) = \left( \frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} (\sin^2\theta \cos 2\varphi)$$

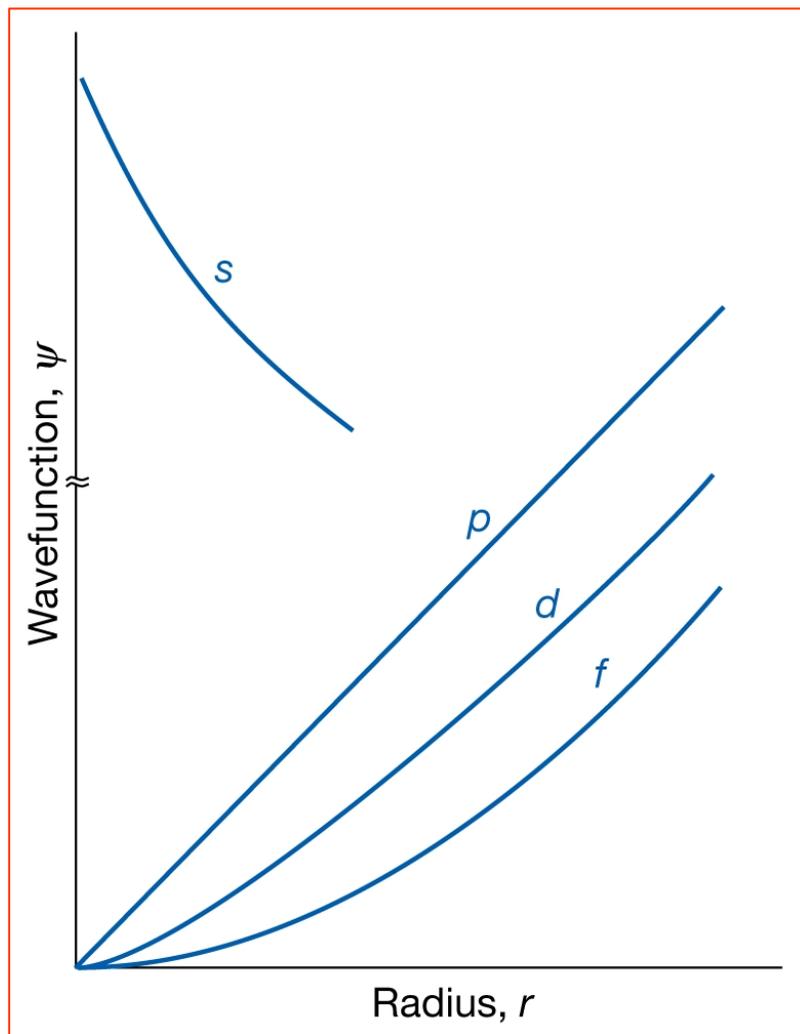
$$Y_{3,\pm 2}(d_{xy}) = \left( \frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} (\sin^2\theta \sin 2\varphi)$$

Átomos hidrogenoides

- Orbitales de tipo d (2 planos nodales)



## Comparación de la función de onda de los orbitales s, p, d... :



Cerca del núcleo los orbitales,

- $p$  son proporcionales a  $r$
- $d$  son proporcionales a  $r^2$
- $f$  son proporcionales a  $r^3$

Los electrones son progresivamente excluidos de las cercanías del núcleo a medida que aumenta su momento angular orbital.

Solo los orbitales s tienen un valor finito no nulo en el núcleo.

[Galería de Orbitales Atómicos en la Universidad de Sheffield:](http://www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron/)

<http://www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron/>

## Átomos hidrogenoides

### ● Momento Angular de Espín, $\vec{S}$

El espín es un momento angular intrínseco, propio y característico de cada partícula que no tienen una imagen clásica

(Puede explicarse a partir de la Mecánica Cuántica Relativista (Dirac))

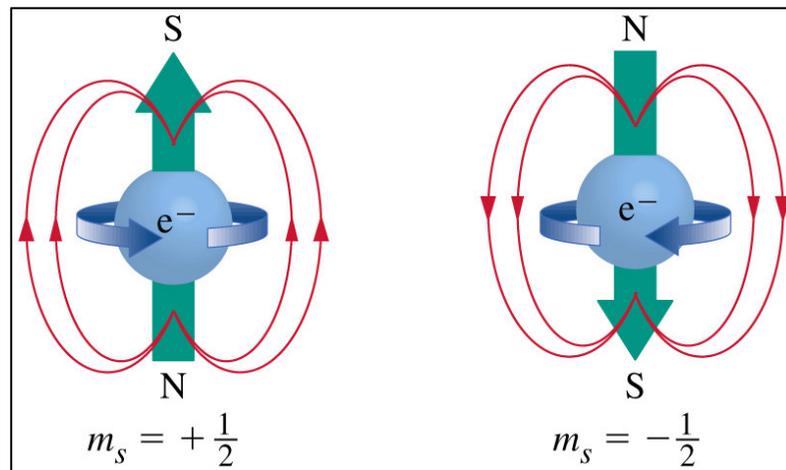
$$|\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; \text{ Para el electrón } s=1/2$$

$$\mathbf{S}_z = m_s \hbar ; m_s = \pm 1/2$$

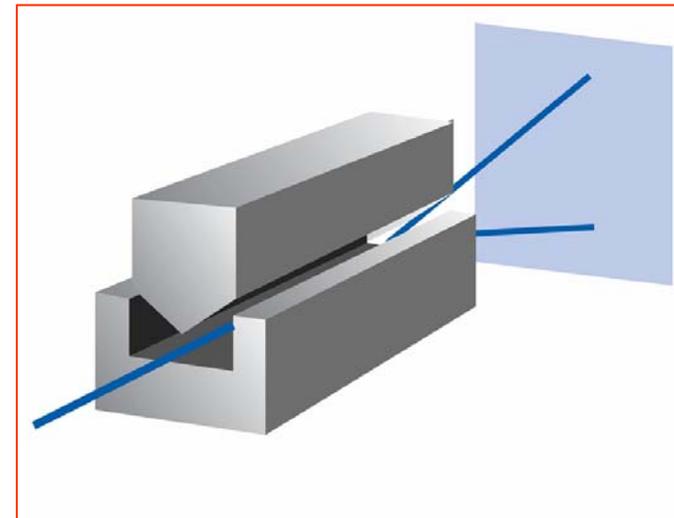
Cuarto número cuántico:  $m_s$

$m_s = +1/2$  estado  $\alpha$

$m_s = -1/2$  estado  $\beta$



Símil de los estados  $\alpha$  y  $\beta$  del electrón



Experimento de Stern-Gerlach. Al pasar a través de un campo magnético inhomogéneo los átomos de hidrógeno en el estado fundamental se orientan (responden al campo) de dos formas, con igual valor del momento y signo contrario. El momento magnético solo puede venir del espín, ya que  $l=0$

## El momento angular de espín del electrón:

- Afecta a la energía total del estado electrónico atómico, lo que se refleja en el espectro del átomo (desdoblamiento de las líneas espectrales).
- Es crucial para entender la estructura y distribución electrónica en los átomos polielectrónicos.
- **La función Orbital-Espín**

La función de onda total del electrón debe tener en cuenta tanto la contribución espacial como la de espín

Función Orbital-Espín = Función Orbital (n,l,m).Función Espín ( $m_s$ )

### **Bibliografía**

**Química General.Vol 1. Enlace Químico y Estructura de la Materia. 8ª Ed. R.H. PETRUCCI, W.S. HARWOOD, F.G. HERRING. Prentice Hall. Madrid. 2002**

**Química y Reactividad Química. 5ª ed. J. C. KOTZ, P.M. TREICHEL. Ed. Paraninfo-Thomson Learning. Madrid. 2003**

**Fisicoquímica, I. N. LEVINE, 4ª edición, Ed. Mc Graw Hill, 1996**