Orbitales s con ayuda de la hoja de cálculo EXCEL

Las ecuaciones que se suelen encontrar sobre los orbitales están dadas en coordenadas polares

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_o}} \qquad \Psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}}\left(2-\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_o}}$$

$$\Psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{\frac{3}{2}}\left(27-\frac{18Zr}{a_o}+\frac{2Z^2r^2}{a_o^2}\right)e^{\frac{-Zr}{3a_o}}$$

Los orbitales s no tienen componentes angulares por lo que es posible realizar los cálculos con una hoja adecuada de cálculo como por ejemplo Excel.
Para el átomo de hidrógeno Z=1 y utilizando para r unidades del radio de bohr resulta

$$\Psi_{1s} = 0{,}564 * e^{-r} \quad ; \quad \Psi_{2s} = 0{,}1(2-r)\ e^{-\frac{r}{2}}$$

$$\Psi_{3s} = 4.10^{-3}\left(27-18r+2r^2\right)e^{\frac{-r}{3}}$$

Orbital Ψ_{1s}

Dando valores a r se obtiene la representación gráfica del orbital (figura 1)

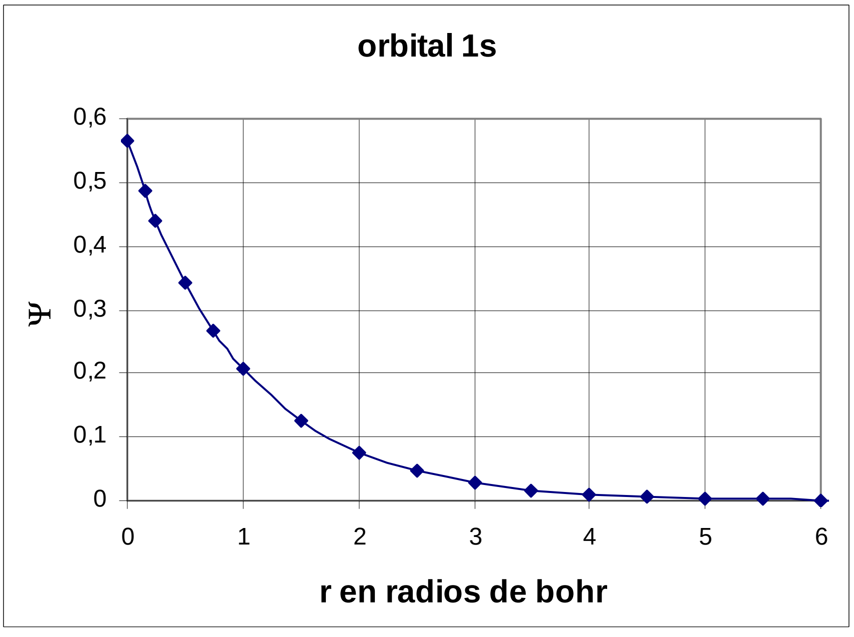

Fig.1

La función de onda disminuye exponencialmente y a cinco radios de bohr es prácticamente nula.

Teniendo en cuenta que la interpretación de Ψ^2 está relacionada con la probabilidad de encontrar al electrón en una zona del espacio

$$P = \int \Psi^2 dV$$

se puede hacer otra representación gráfica. Con centro en el núcleo consideramos una capa esférica de radio r y espesor dr, el volumen de esa capa esférica es

$$dV = 4\pi\ r^2 dr$$

Hacemos la representación gráfica de $4\pi\ r^2\Psi^2$ frente a r (fig 2)

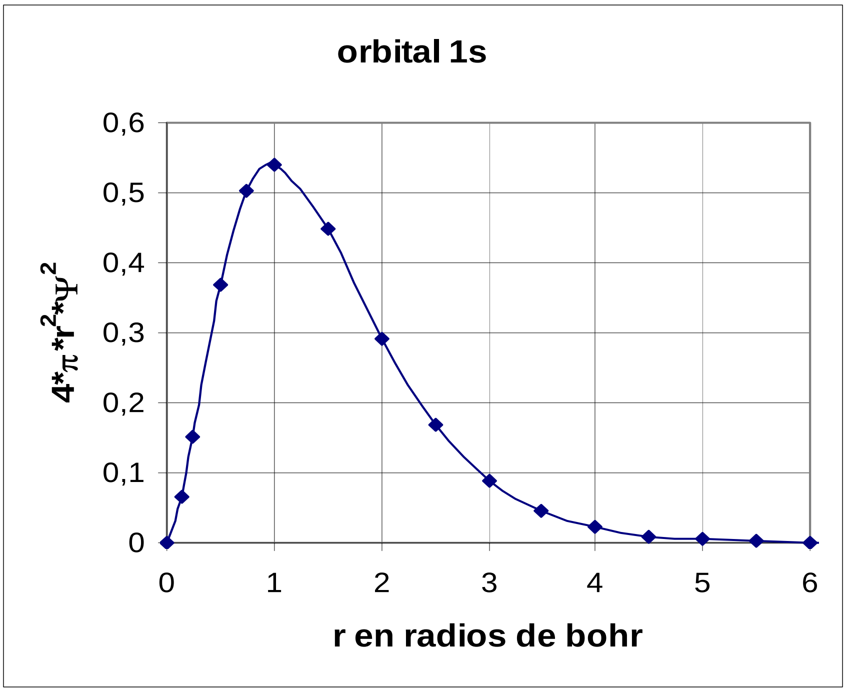

Fig.2

La curva de la figura 2 nos dice:

a) que la máxima probabilidad de encontrar al electrón es a una distancia de un radio de bohr

b) el área bajo la curva mide la probabilidad de encontrar al electrón. Dado que la curva se extiende hasta el infinito esa área vale 1 o sea probabilidad 100%.

En general la representación de la probabilidad se limita a 0,9 (90%). Si medimos el área comprendida entre r = 0 y r $\approx$ 3 radios de bohr, el área vale aproximadamente 0,9. En consecuencia el orbital es una esfera centrada en el núcleo y cuyo radio es aproximadamente igual a 3 radios de bohr indica que en ese volumen la probabilidad de encontrar al electrón es el 90%.
Si en vez de dibujar el orbital tratamos de representar la probabilidad de encontrar al electrón, mediante un diagrama de puntos, dibujamos un círculo cuyo radio es aproximadamente 3 radios de bohr (con mayor precisión 2,6 radios de bohr) en una imagen de puntos como la de la figura 3.

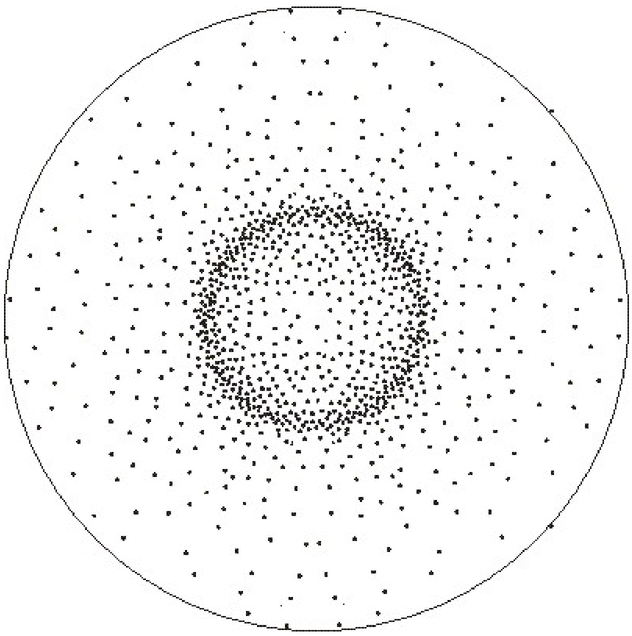

Fig.3

Nota
Este dibujo se hizo a escala.
Originalmente se tomó 8mm=1 Bohr, haciendo circunferencias concéntricas, cada milímetro, después de fueron insertando punto a punto proporcionalmente al indicativo de densidad de probabilidad radial. El perímetro del OA, está hecho a partir del 90%, o sea 2,66 bohr, o sea 21 mm aproximadamente.
Si imprime este dibujo esa escala varía, pero siempre encontrará que la región de máxima probabilidad se encuentra a 1 bohr de distancia del núcleo.

Orbital Ψ_{2s}

Dando valores a r en la función $\Psi_{2s} = 0{,}1(2-r)e^{-\frac{r}{2}}$ se obtiene la curva de la figura 4

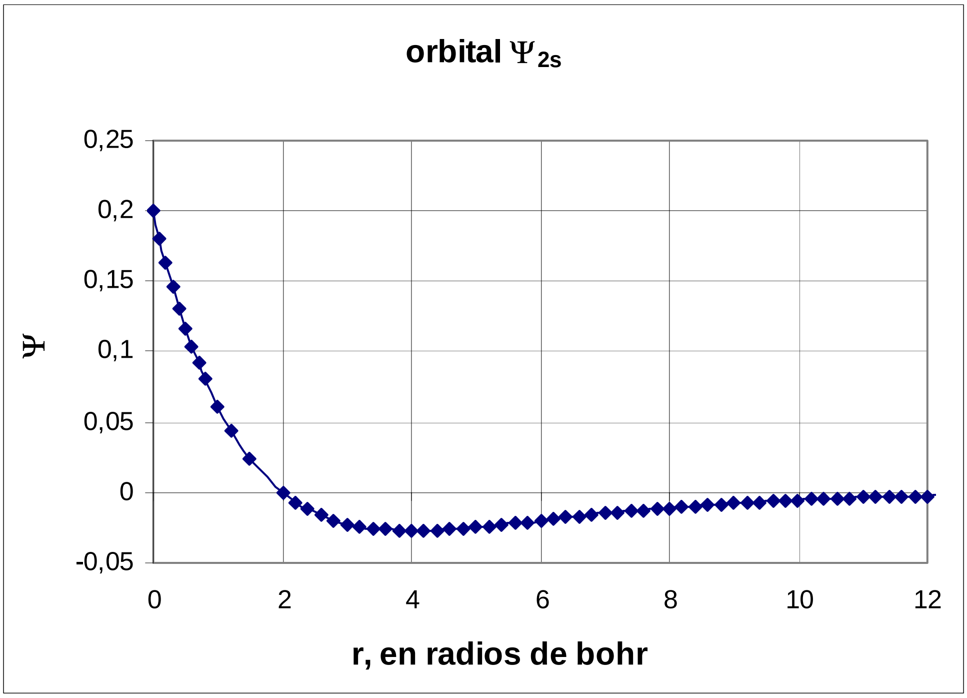

Fig.4

La figura 4 nos indica que la función de onda entre r =0 y r =2 es positiva y a partir de r =2 negativa, siendo nula en r =2. Prácticamente a unos 12 radios de bohr la función de onda es nula.
La representación espacial de la función de onda es una esfera pero debido a que se anula su valor en r =2 y además toma valores positivos y negativos no es posible hacer una representación tridimensional clara.
Si dibujamos la función $4\pi\ r^2\Psi$ frente a r obtenemos la figura 5

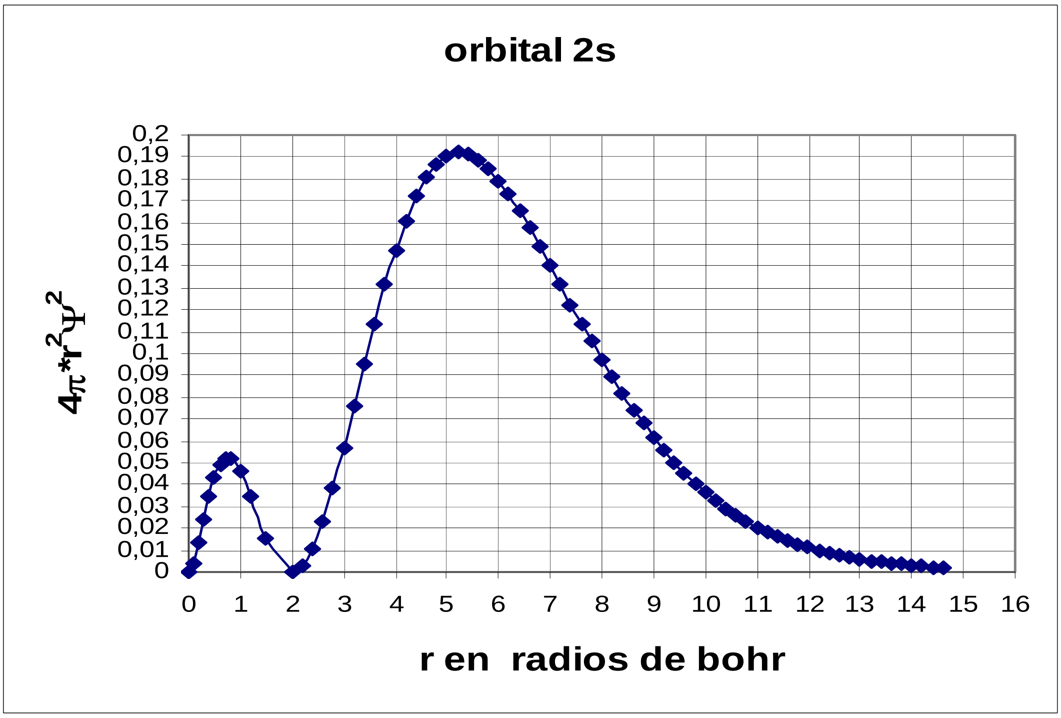

Fig.5

Si se comparan las figuras 2 y 5, se observa que el primer máximo del orbital 2s está más cerca del núcleo que el máximo del orbital 1s.

El área bajo la curva mide la probabilidad de encontrar al electrón. Si nos limitamos a una probabilidad del 90%, el área bajo la curva comprendida entre r =0 y aproximadamente r = 9,5 radios de bohr contiene esa probabilidad. La representación bidimensional, en un diagrama de puntos, es la fig 6

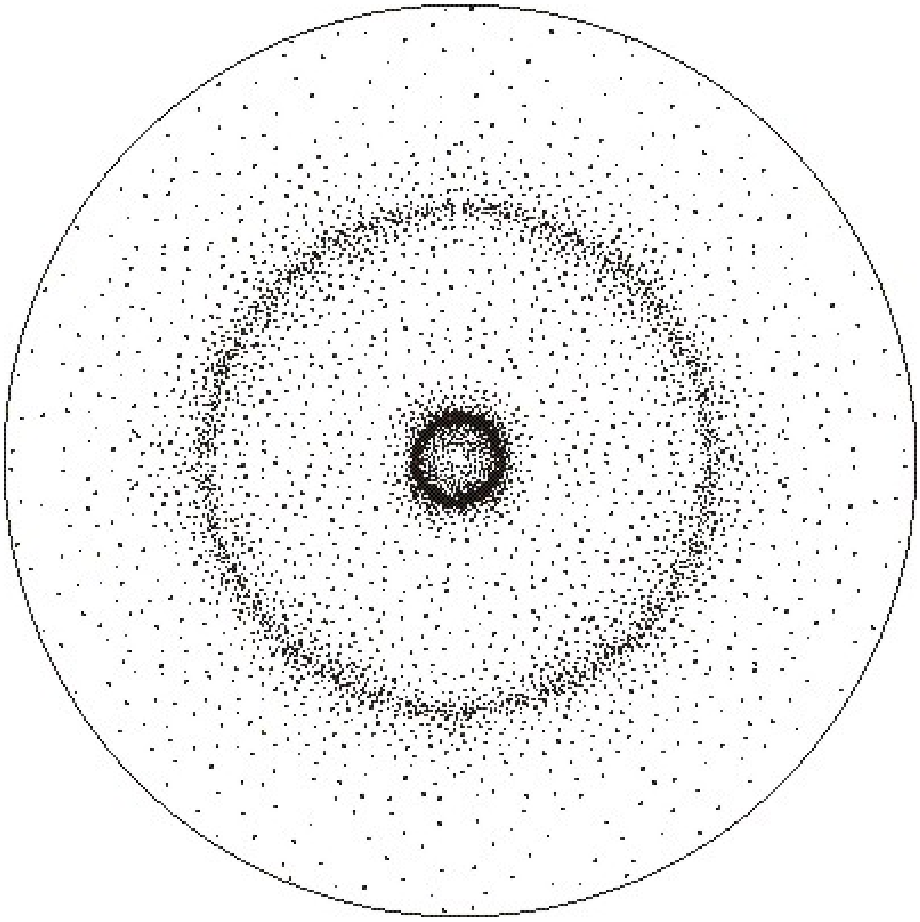

Fig.6

Está hecho a escala según lo indicado en la figura 5, siguiendo el mismo criterio de nube de puntos, y de tamaños que en la figura 3.

Cuando r =2 radios de bohr aparece una zona en blanco (en realidad es una corona circular de cierto espesor, que depende de la escala que se ha utilizado para dibujar) que corresponde a la región donde la probabilidad de encontrar al electrón es nula. Si se pusiesen juntas las representaciones bidimensionales de los orbitales 1s y 2s y se respetasen sus tamaños, el orbital 2s tendría unas tres veces mayor tamaño que el 1s, abarcando en ambos casos la misma probabilidad del 90%.

Orbital Ψ3s

Dando valores a r en la función $\Psi_{3s} = 4.10^{-3}\left(27 - 18r + 2r^2\right)e^{\frac{-r}{3}}$ se obtiene la curva de la figura 7

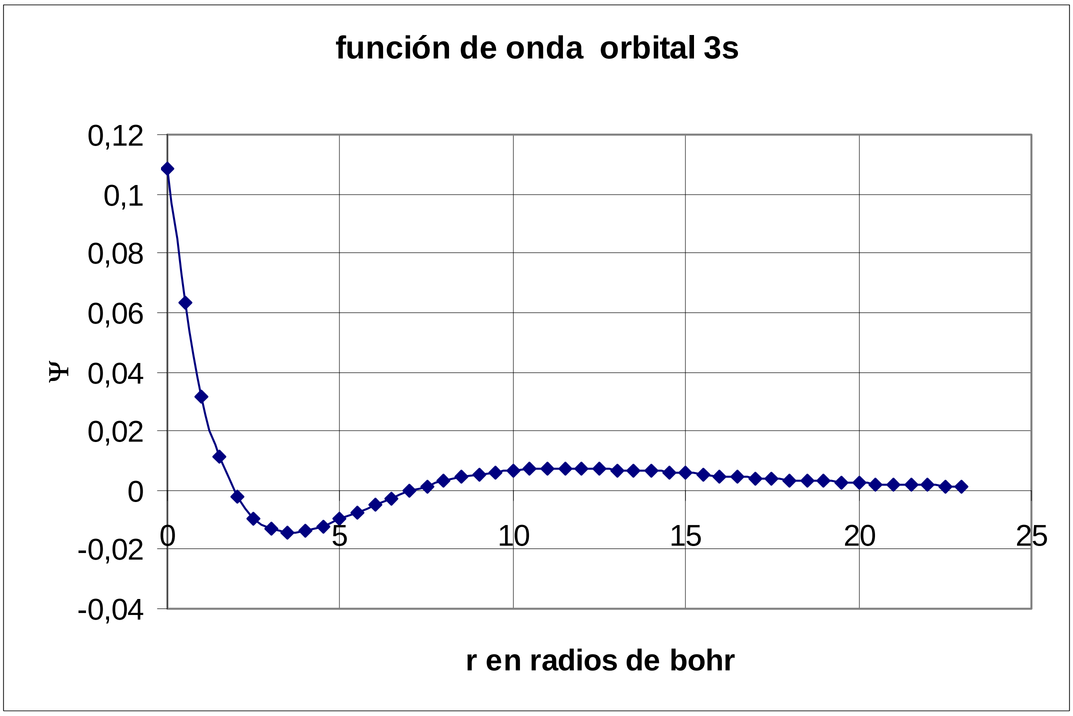

Fig.7

La figura 7 nos indica que la función de onda presenta dos nodos
Si dibujamos la función $4\pi r^2\Psi$ frente a r obtenemos la figura 8

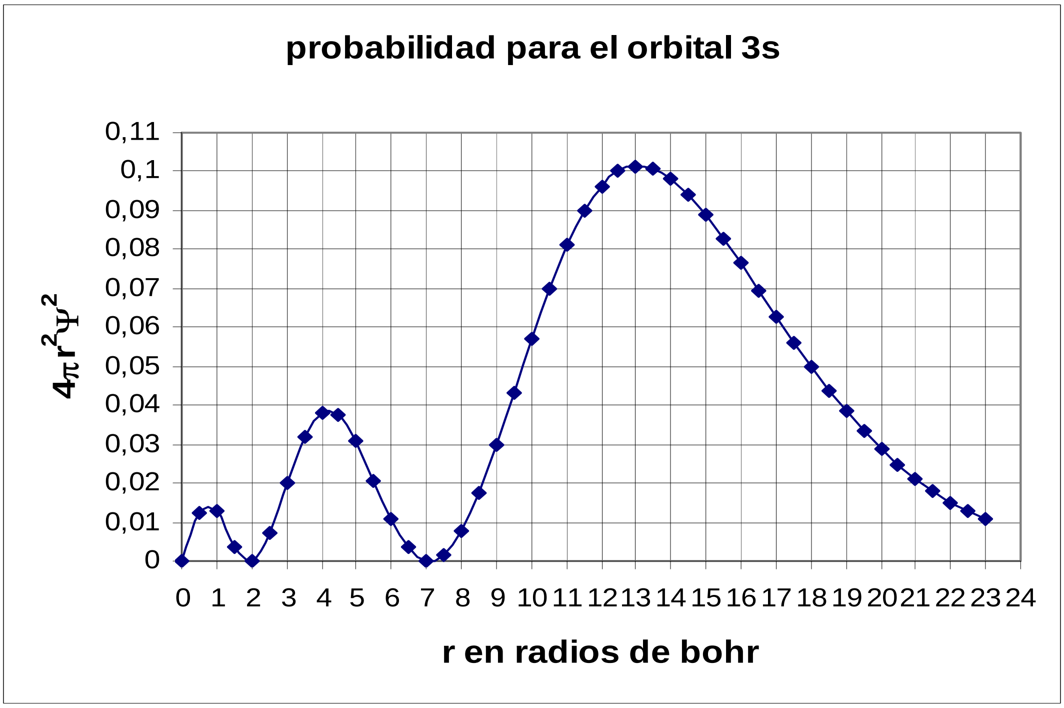

Fig.8

El área bajo la curva mide la probabilidad de encontrar al electrón. Si nos limitamos a una probabilidad del 90%, el área bajo la curva comprendida entre r =0 y aproximadamente r = 20 radios de bohr.
Si se comparasen los tamaños de los orbitales para el 90 % de probabilidad el orbital 2s sería aproximadamente 3 veces mayor que el 1s y el 3s aproximadamente 6 veces mayor

Cálculos de la probabilidad más precisos

La probabilidad de encontrar al electrón es $P = \int \Psi^2 dV$. Si consideramos una capa esférica de radio r y espesor dr tenemos : $P = \int \Psi^2 * 4\pi r^2 dr$.

Para el orbital 1s $P = \int \left(0{,}564 * e^{-r}\right)^2 * 4\pi r^2 dr = \int 4 \; r^2 e^{-2r} \; dr = 1 - e^{-2r}\left(1 + 2r + 2r^2\right)$

Con la hoja de cálculo Excel representamos P frente a r (fig. 9)

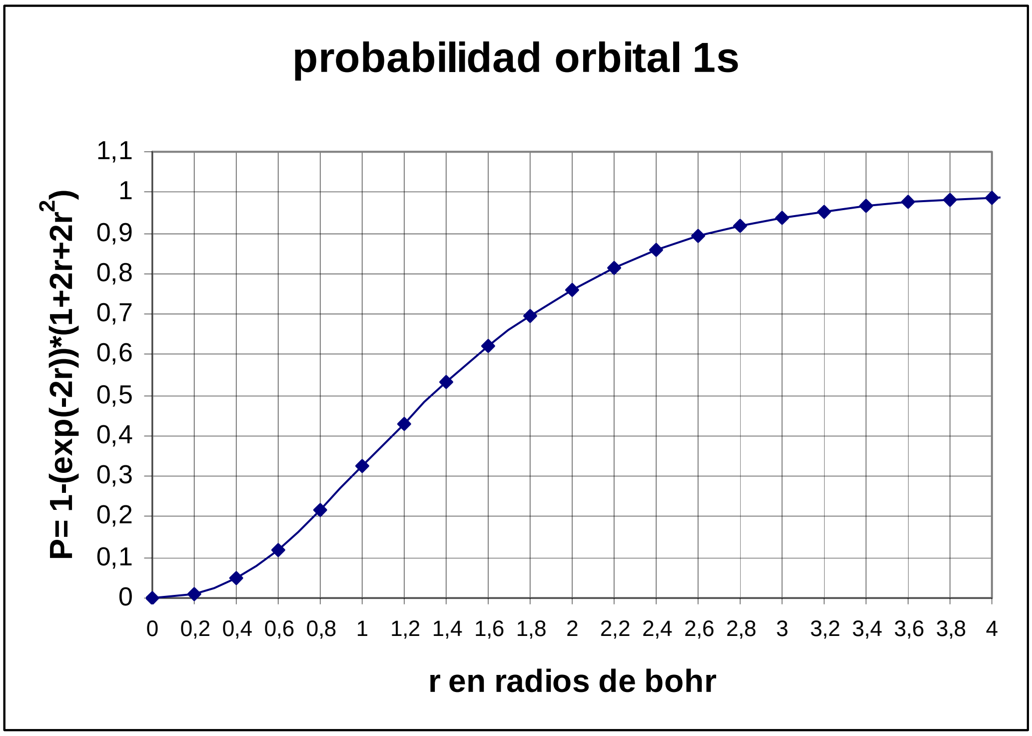

Fig.9

Una probabilidad del 90 % de encontrar al electrón es tal como indica la gráfica r = 2,6 radios de bohr

Para el orbital 2s

$$P = \int [0{,}1*(2-r)]^2 * e^{-r} * 4\pi r^2 dr = \int 0{,}125*(2-r)^2 e^{-r} * r^2 \ dr =$$
$$= \int 0{,}125*(4r^2 + r^4 - 4r^3)\ e^{-r}dr = \int (0{,}5r^2 + 0{,}125r^4 - 0{,}5r^3)\ e^{-r}dr =$$
$$= 1 - e^{-r} * (1 + r + 0{,}5r^2 + 0{,}125r^4)$$

Con la hoja de cálculo Excel representamos P frente a r (fig. 10)

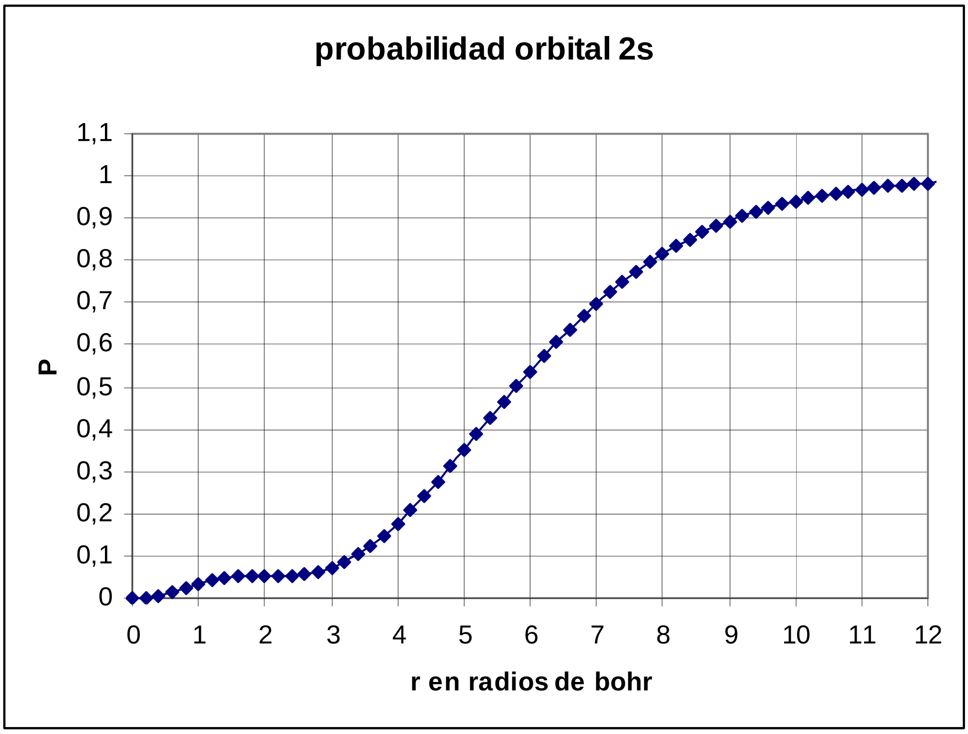

Fig.10

Una probabilidad del 90 % de encontrar al electrón es tal como indica la gráfica de la figura 10, r $\approx$9 radios de bohr

Para el orbital 3s

$$P = \int \left(4.10^{-3}(27 - 18r + 2r^2)e^{\frac{-r}{3}}\right)^2 * 4\pi r^2 dr = \int 2.10^{-4}(27 - 18r + 2r^2)^2 * r^2 * e^{\frac{-2r}{3}} dr =$$
$$= 1 - e^{\frac{-2r}{3}}\left(1 + \frac{2}{3}r + \frac{2}{9}r^2 + \frac{4}{81}r^4 + \frac{8}{729}r^5 + \frac{8}{8561}r^6\right)$$

Con la hoja de cálculo Excel representamos P frente a r (fig. 11)

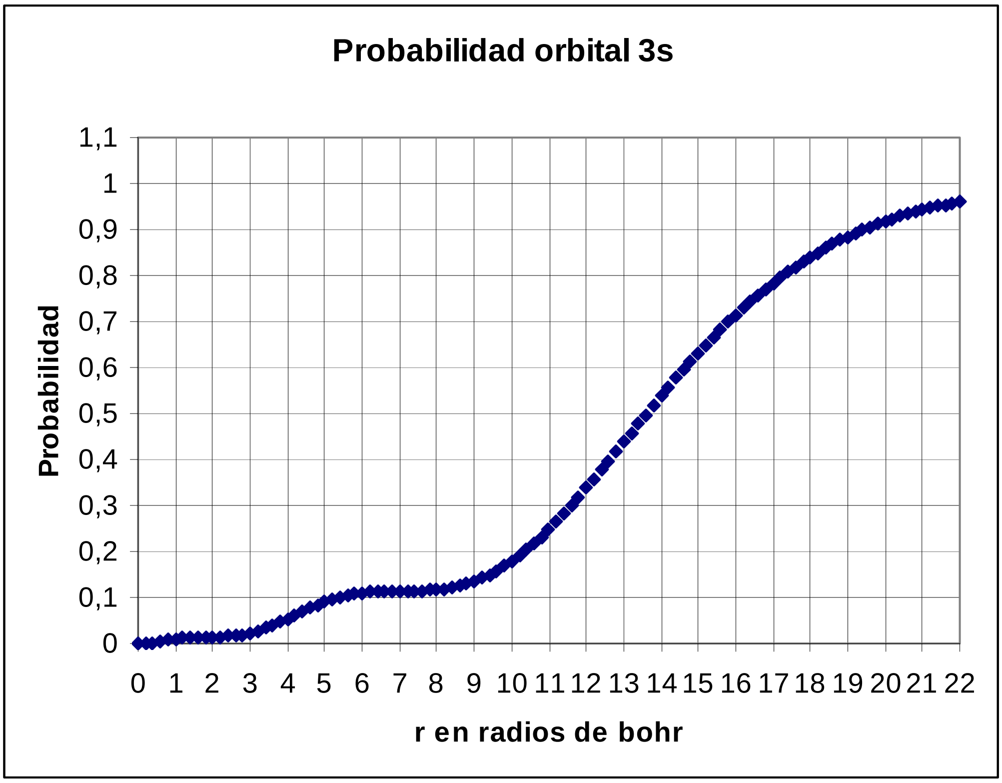

Fig.11

Una probabilidad del 90 % de encontrar al electrón es tal como indica la gráfica de la figura 11, r ≈19,5 radios de bohr.

Si se dibujan en dos dimensiones los tres orbitales comparando sus tamaños se obtiene la fig 12.

Comparación entre orbitales s y con el átomo de Bohr

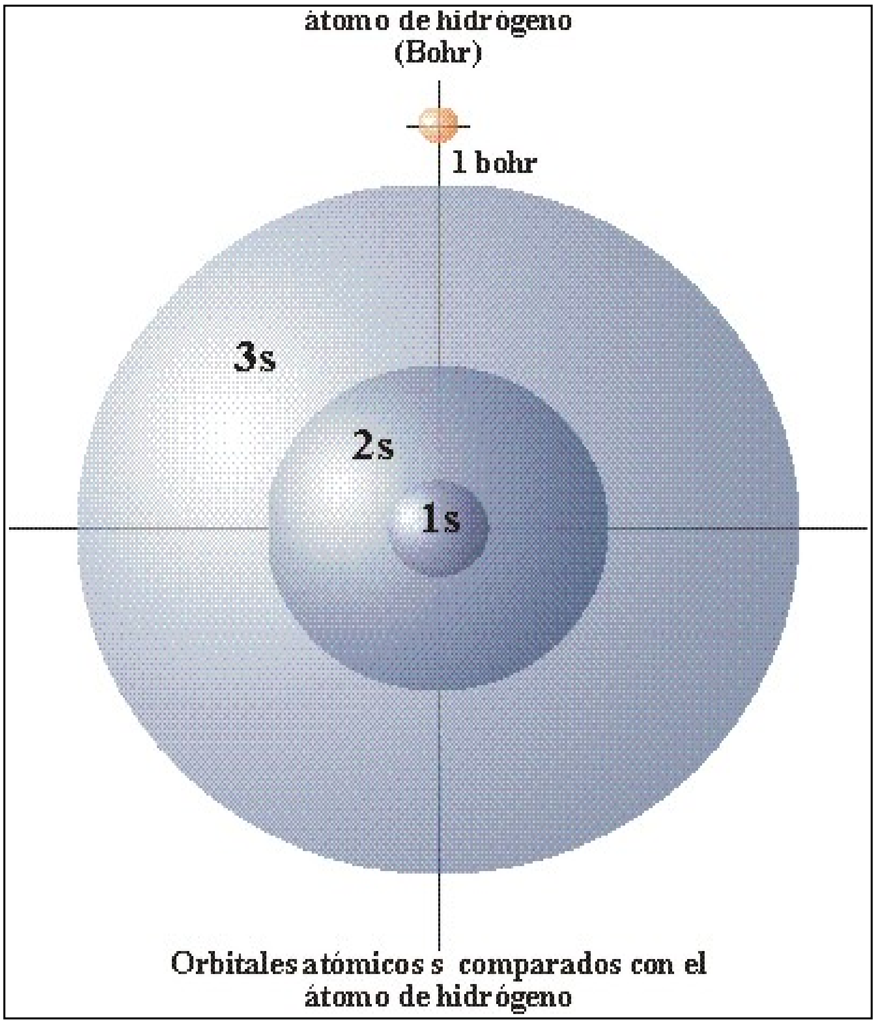

Fig.12