

ORBITALES ATÓMICOS HIDROGENOIDES tipo d, (primera parte)

Si los orbitales atómicos p tenían bastante complejidad ¿qué decir de los d? El alumno de enseñanzas medias, dibuja un trébol de cuatro hojas, que toma como modelo de este orbital y se queda tan tranquilo, sin enterarse de lo que está haciendo.

La condición cuántica que lo determina es $l=2$ y las funciones radiales que se deben representar corresponden a valores de ψ que para $n=3$, y para $n=4$, tienen las siguientes ecuaciones:

$$\Psi_{3d} = 0,00902r^2 e^{-\frac{r}{3}} \quad \text{y} \quad \Psi_{4d} = 0,007 \left(1 - \frac{r}{12}\right) r^2 e^{-\frac{r}{4}}$$

Si se representan en una hoja de cálculo se obtienen las gráficas, correspondientes a las figuras 1 y 2

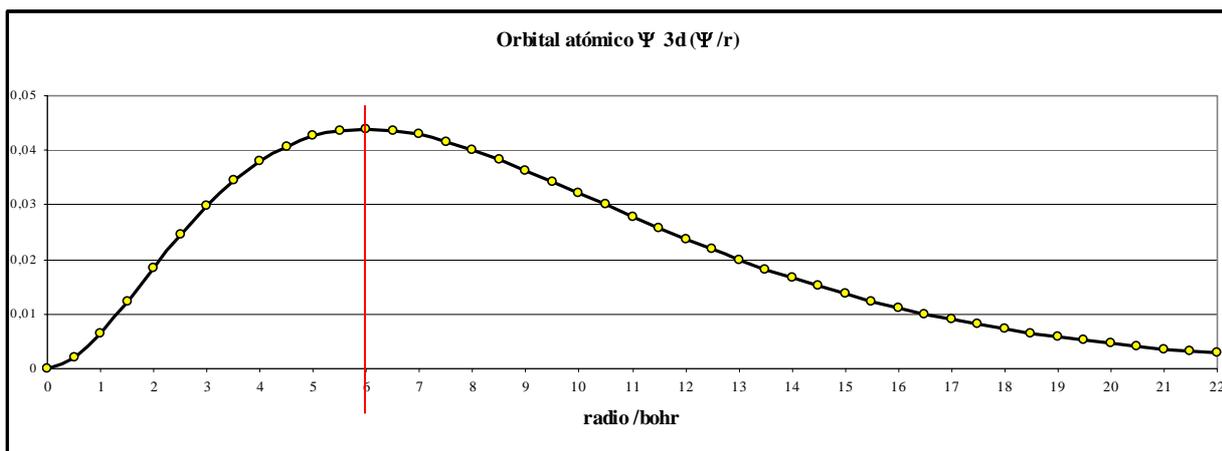


Fig. 1

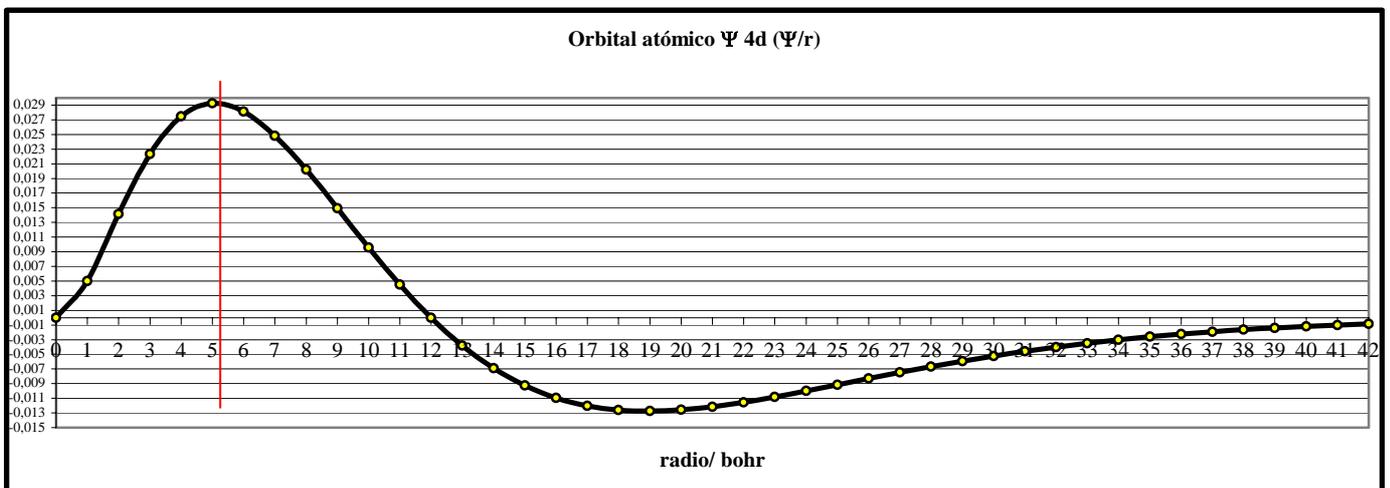


Fig. 2

En la función ψ_{4d} , se observa que para $r=0$ y para $r=12$, la función se anula. Este último valor va a generar una superficie nodal (superficie interior cuya densidad de probabilidad es nula)

Si las funciones dadas se elevan al cuadrado y se multiplican por r^2 , se obtiene la densidad de probabilidad radial (fig. 3 y 4).

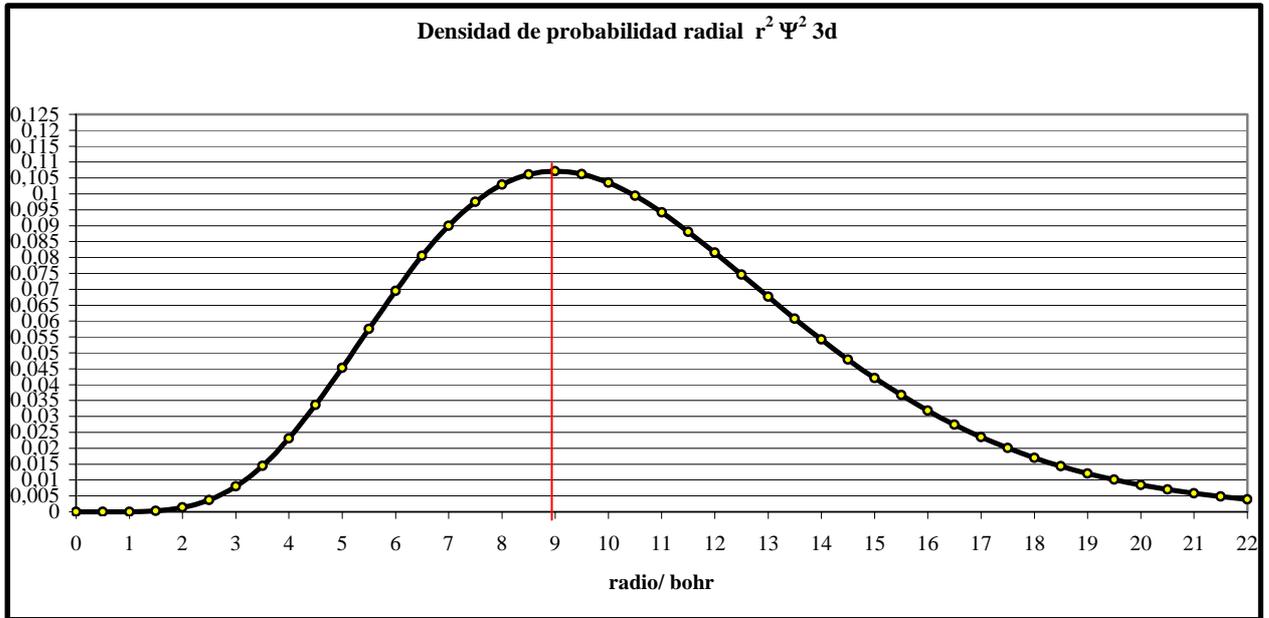
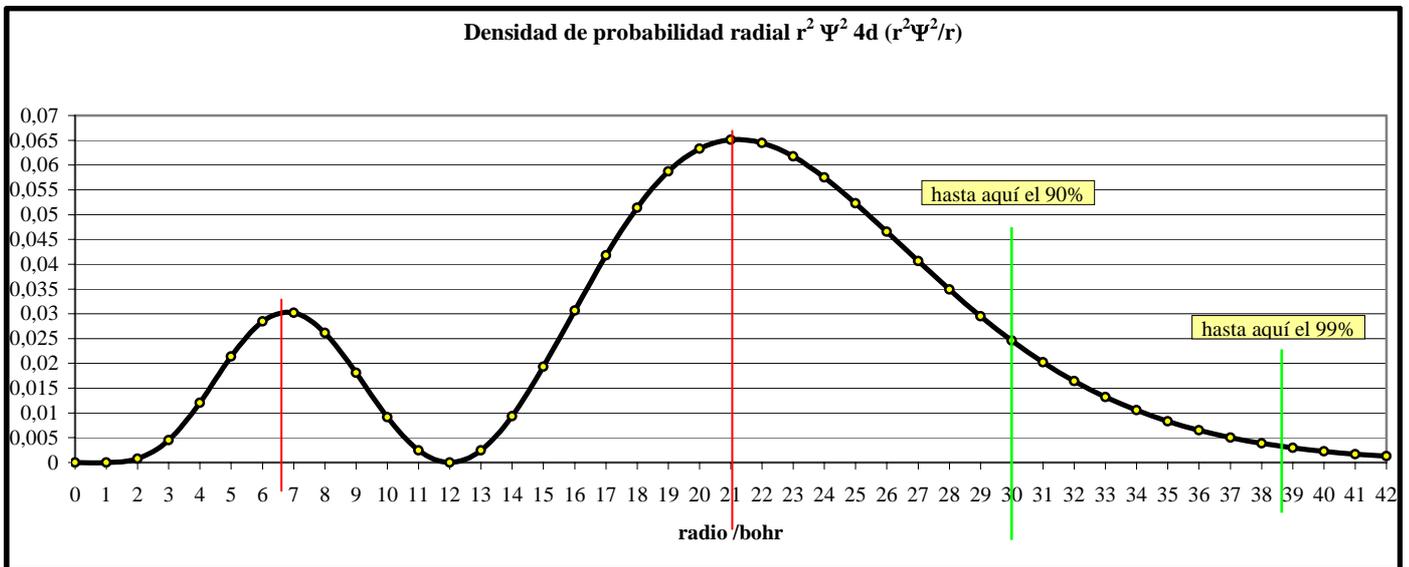


Fig. 3



Las propiedades acumulativas revelan que hasta el 90%, las distancias máximas de separación son de 16 y 30 bohr respectivamente (fig. 5)

Fig. 4

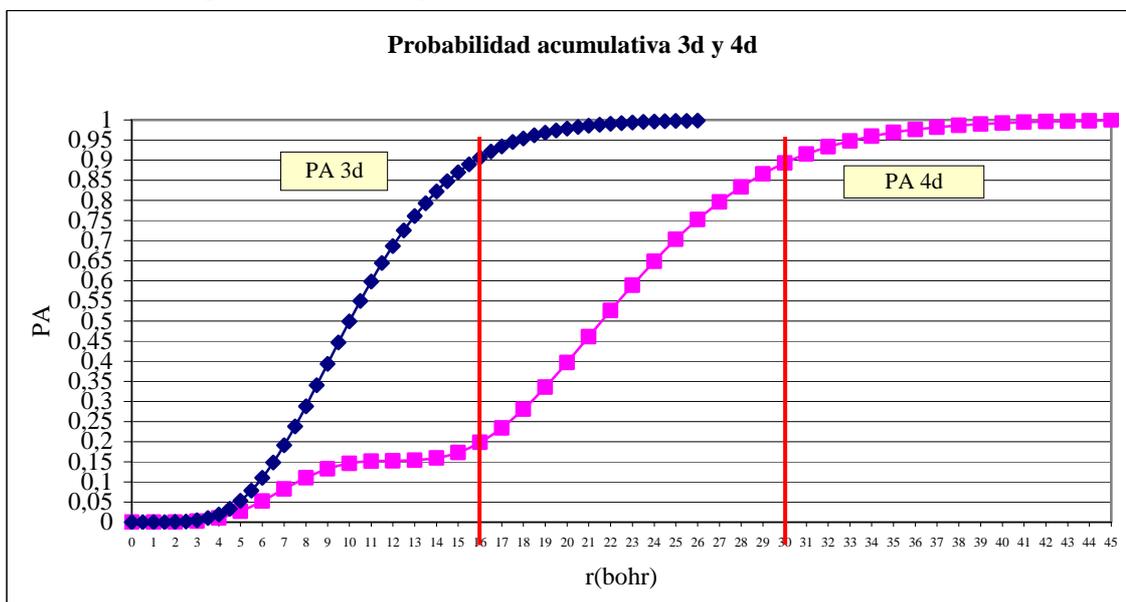


Fig. 5

La contribución angular a la función de onda total, es en este caso muy grande, y depende de los valores que tome el número cuántico m. Para $m=0$, se obtiene la función ψdz^2 . Para valores de $m=1$, -1 sería ψdxz y ψdyz y si $m=2$, y -2 ; ψxy y $\psi d(x^2-y^2)$.

Otra de las preguntas características de los alumnos de enseñanzas medias respecto a los nombres de los orbitales d, es ¿De dónde sale el orbital $3dxy$? ¿En qué se parece y diferencia del $3dxz$? ¿Y del $4dxy$?

Para explicarlo no queda mas remedio que ir a las ecuaciones de definición considerando la contribución radial y angular y que al ser representadas darán los diferentes OA d.

Serían:

$$\Psi_{3dxy} = 0,00985xye^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{3}} \quad ; \quad \Psi_{3dxz} = 0,00985xze^{-\frac{\sqrt{x^2+z^2}}{3}} \quad ; \quad \Psi_{3dyz} = 0,00985yze^{-\frac{\sqrt{z^2+y^2}}{3}}$$

Como se aprecia, las tres funciones son similares, lo único diferenciante es el plano en que se representan en función de las variables que intervienen. Así obtendríamos los tres orbitales d, de la misma forma, el $3dxy$, $3d xz$ y $3dyz$, con planos nodales coincidentes con dichos ejes. Obsérvese en las figuras 6 y 7, la forma de la función superficie para el orbital $3dxy$ y el detalle de las curvas de nivel, siempre en unidades bohr de distancia atómica, en los ejes correspondientes.

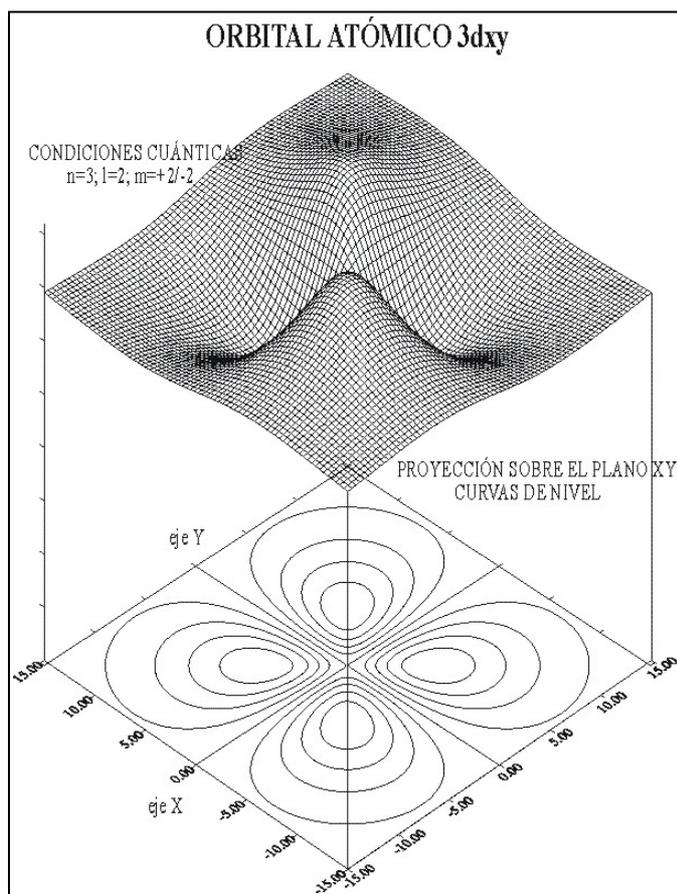


Fig. 7

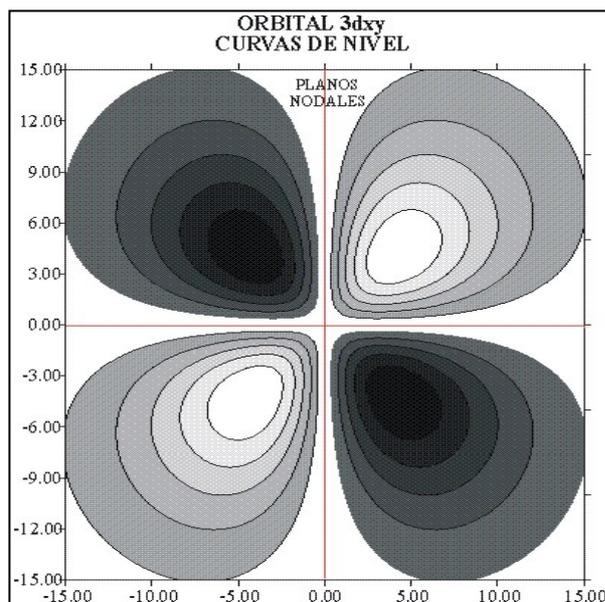


Fig. 6

Las zonas mas oscuras corresponden a valores de ψ_{3d} negativos (valles), mientras que las más claras corresponden a valores positivos (montañas), en la gráfica de superficie.

La función ψ elevada al cuadrado y representada daría lugar a la descripción de la densidad de probabilidad correspondiente. En la figura 8 la línea de contorno que abarca el 90% de probabilidad, se consideraría lo que habitualmente se dibuja como el OA $3dxy$. En la figura 9, se aprecia el detalle de las curvas de nivel de probabilidad.

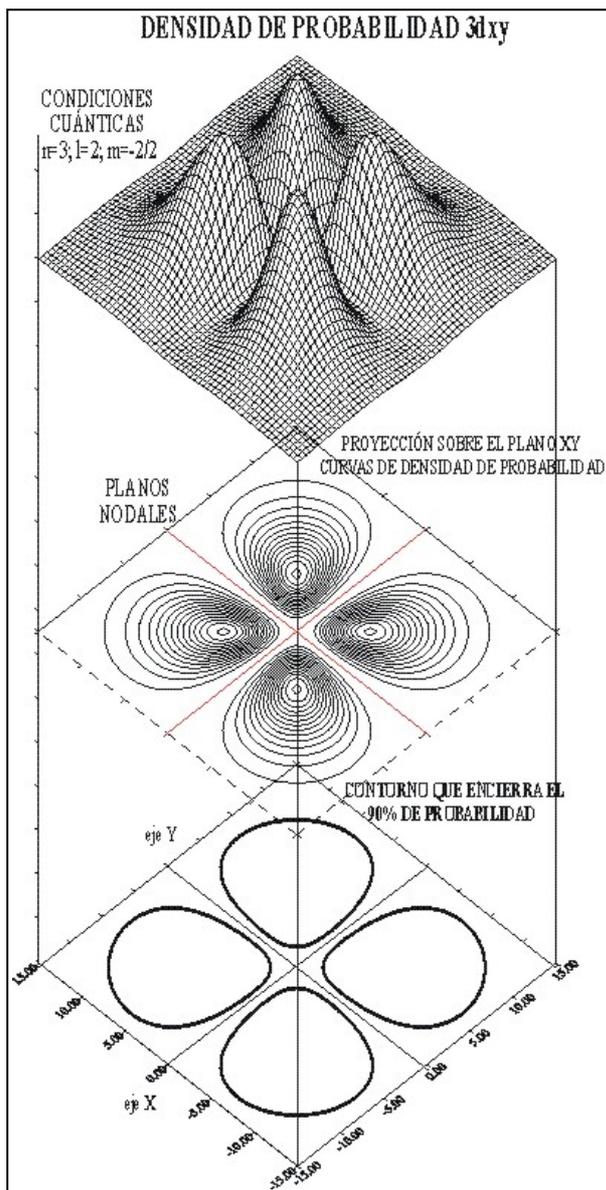


Fig. 8

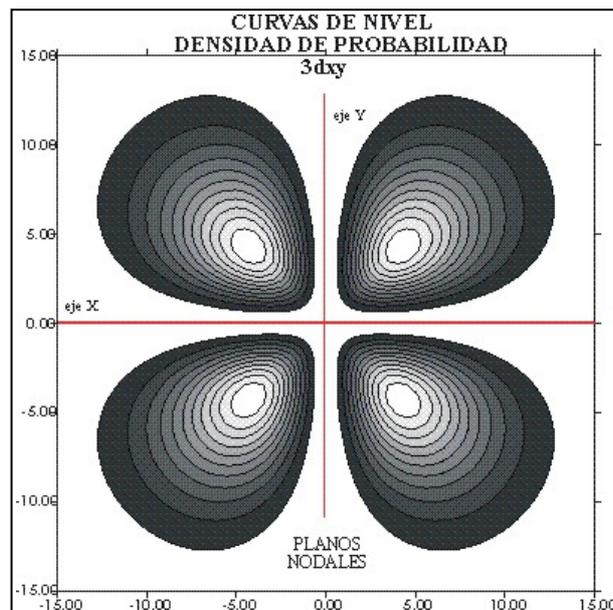


Fig. 9

Se va a comparar ahora este orbital con el $4d_{xy}$, sobre todo para romper los tópicos sobre su igualdad respecto a $3d_{xy}$. Es evidente que el tamaño no puede ser el mismo, como se aprecia en la función de distribución radial, pero tampoco lo es la forma, en contra de lo que parece.

La ecuación de la función $\psi_{4d_{xy}}$, es completamente distinta:

$$\Psi_{4d_{xy}} = 0,007648 \left(1 - \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{12} \right) xye^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{4}}$$

Lo cual indica un punto nodal, cuando el factor binómico se anule. Este punto nodal engendrará una superficie nodal, o sea una superficie interior en la que la probabilidad de encontrar al electrón es nula, que será el factor diferenciante en la forma del orbital frente al $3d_{xy}$.

La representación de la función de onda, y el detalle de las curvas de nivel, se dan en las figuras 10 y 11. A través de ellas se puede diferenciar perfectamente ambos orbitales atómicos.

También los dibujos permiten diferenciar, los planos nodales de las superficies nodales. Los primeros como dependen única y exclusivamente del valor de l , que es 2 para los orbitales d , ya sean $3d$ o $4d$, es un elemento de analogía, mientras que las superficies nodales que dependen de $n-(l+1)$, es diferenciante. Para el $3d$, las superficies nodales serían $3-(2+1)=0$, mientras que para el $4d$; $4-(2+1)=1$.

En las gráficas dadas, siguiendo el criterio general presentado en estos trabajos, a los valles, valores negativos, les corresponden las zonas más oscuras mientras que a las cumbres, valores positivos, les corresponden las zonas más claras.

Tampoco la forma de las curvas de nivel es la misma. El acotamiento al 90%, en zonas de muy poca pendiente, hace que aparezcan eliminadas zonas superficiales que modifican el trazado habitual.

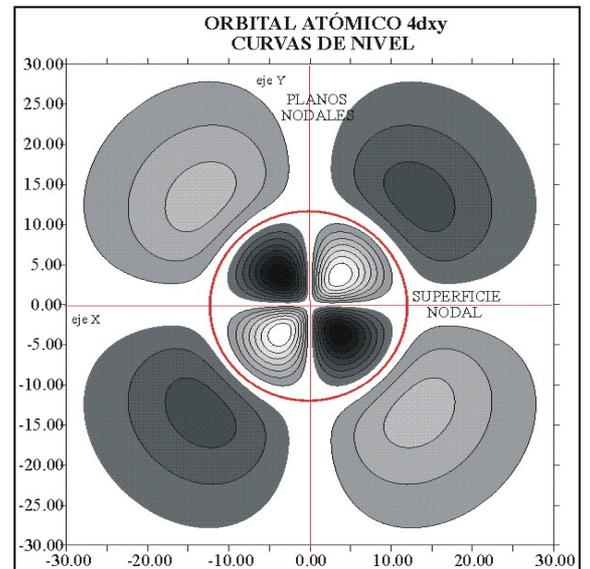
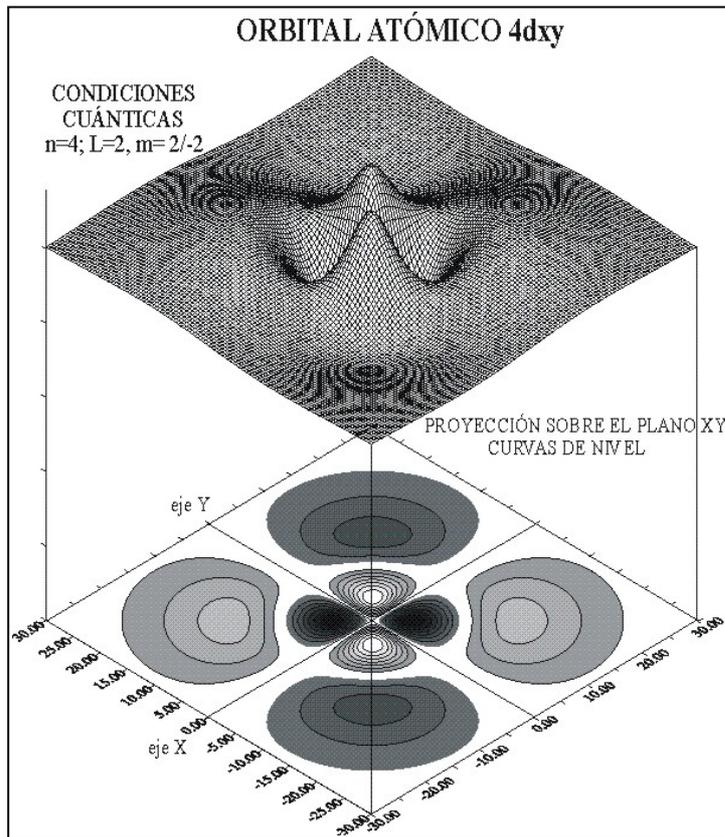


Fig. 11

Fig. 10

Las gráficas de las densidades de probabilidad para estas funciones, se exponen las figuras 12 y 13.

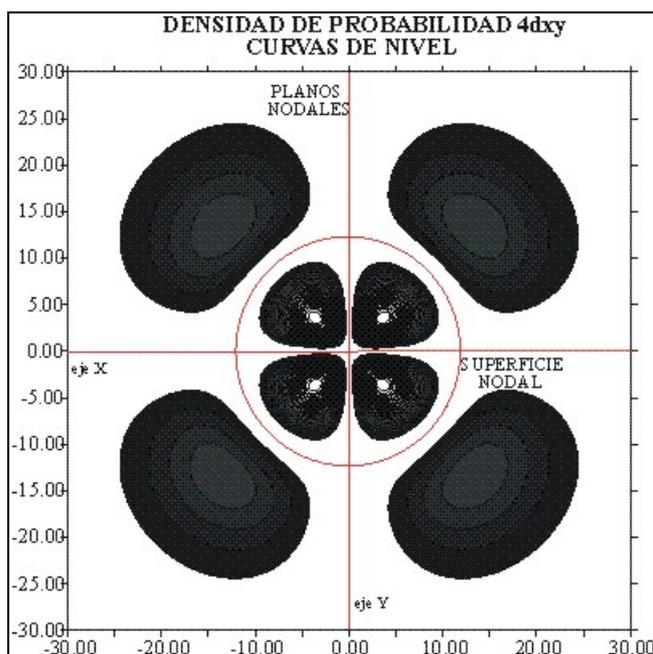


Fig. 13

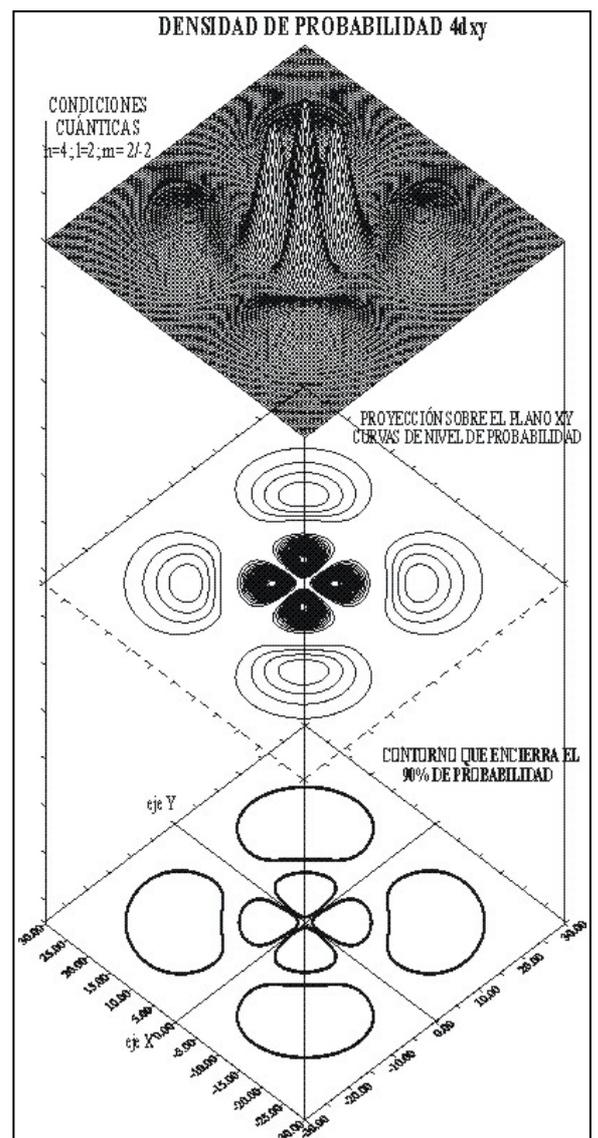


Fig. 12

En estas gráficas, los valores de la función al estar elevados al cuadrado siempre van a ser positivos, y por lo tanto no existe el criterio de tonalidades de grises anterior.

En la distribución espacial de lo que se considera como orbital atómico, haciendo girar la figura plana por el eje X, las superficies nodales interiores, quedan tapadas, y no se apreciarían.