

## ORBITALES ATÓMICOS HIDROGENOIDES tipo d, 2 (continuación)

Continuaremos con el tema de los orbitales atómicos d.

Las preguntas siguientes a responder son ¿de dónde proceden los OA  $3dz^2$  y  $3d(x^2-y^2)$ ? ¿Por qué esos nombres? ¿En qué se diferenciarían de los 4d respectivos?

Comenzamos con los  $3dz^2$  y  $4dz^2$

Comparemos las ecuaciones de definición con las respectivas contribuciones angular y radial:

$$\Psi_{3dz^2} = 0,002843(2z^2 - x^2)e^{-\frac{\sqrt{x^2+z^2}}{3}} ; \quad \Psi_{4dz^2} = 0,0022 \left(1 - \frac{\sqrt{z^2 + x^2}}{12}\right) (2z^2 - x^2)e^{-\frac{\sqrt{x^2+z^2}}{4}}$$

Como podemos apreciar existe en ambas, la participación de la componente  $z^2$ , que da nombre al orbital, procedente de la contribución angular del orbital atómico. Sus representaciones y detalles, se dan en las figuras 1 y 2 (OA  $3d$ ) y 3 y 4(OA4d).

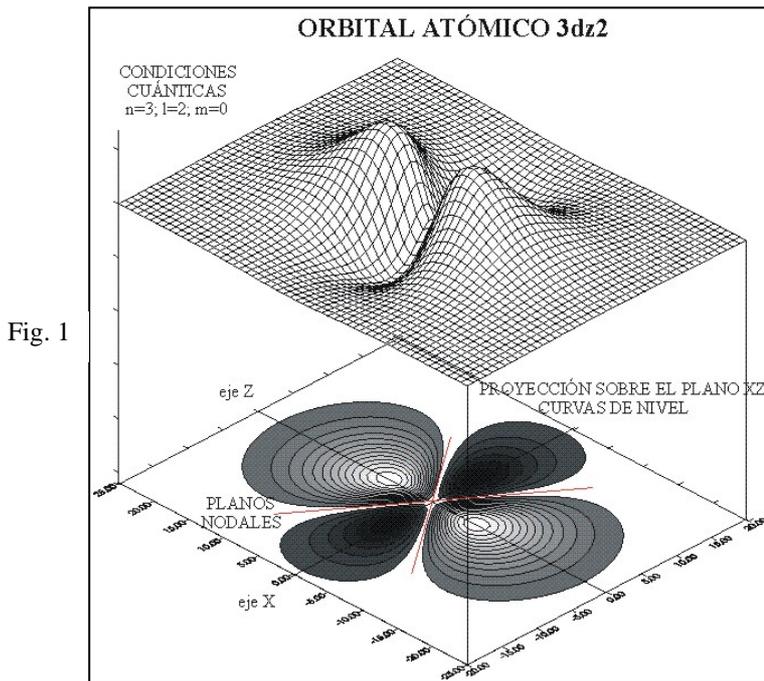


Fig. 1

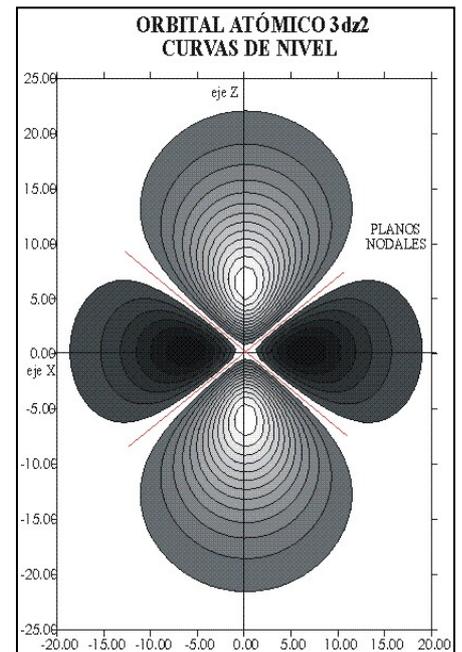


Fig. 2

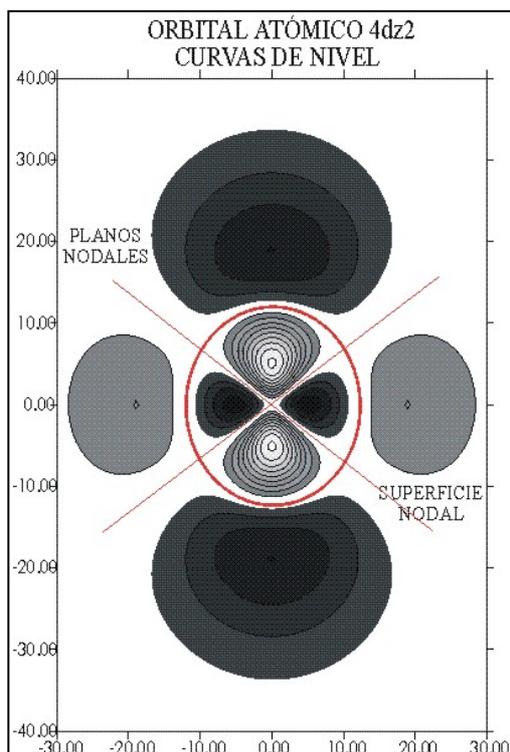


Fig. 4

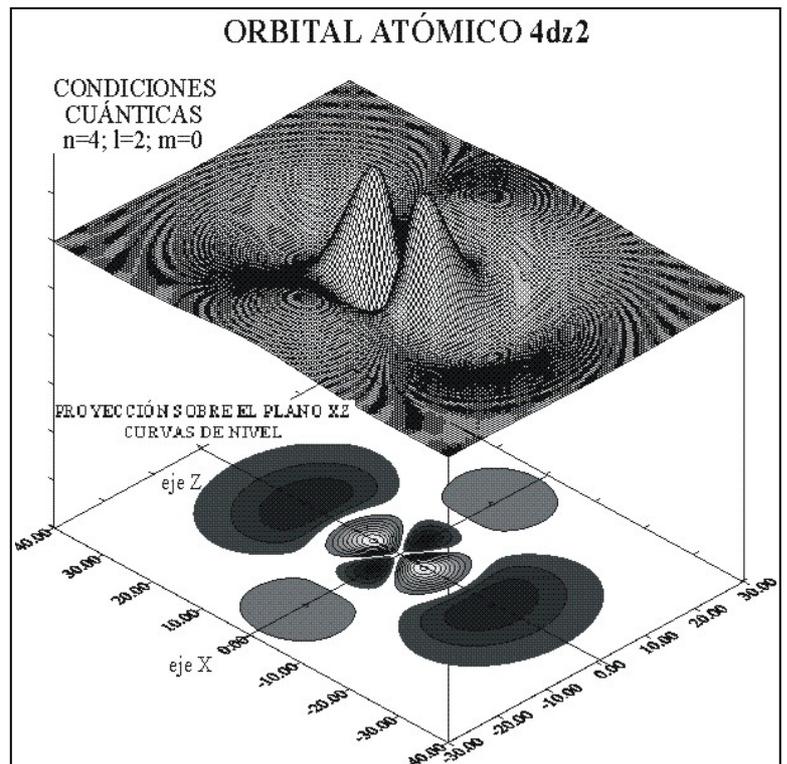


Fig. 3

La observación de los dibujos anteriores, evita cualquier tipo de aclaración. Los criterios de diseño, son los empleados en la primera parte del tema (OAd1), o sea los valores positivos (montañas), más claros, y los negativos (valles), más oscuros. El reforzamiento sobre el eje z, de las zonas de probabilidad es lo más destacado.

Las funciones elevadas al cuadrado, nos dan, las densidades de probabilidad que se van a comparar siguiendo la misma distribución anterior. Véanse las figuras 5,6, 7 y 8.

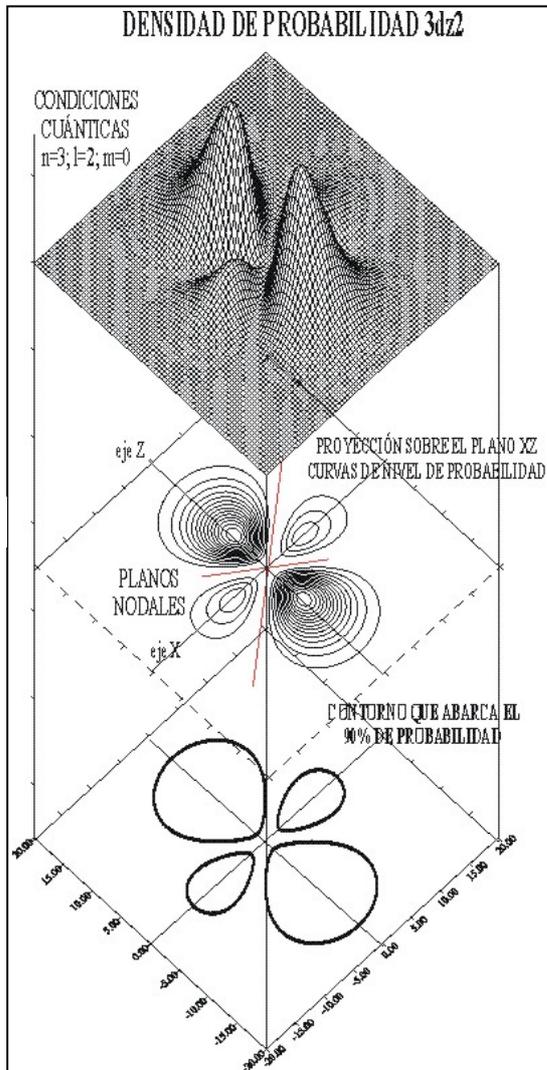


Fig. 5

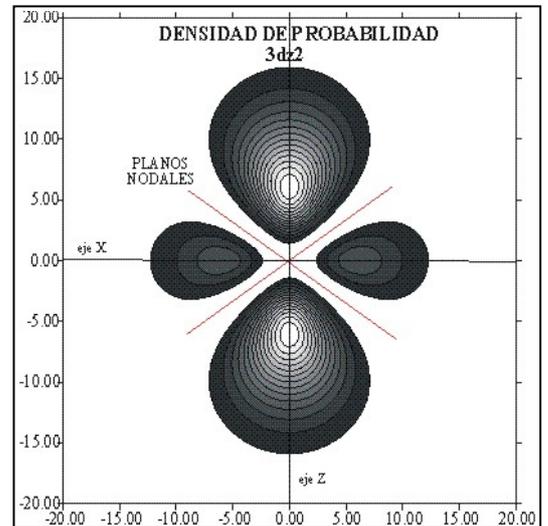


Fig. 6

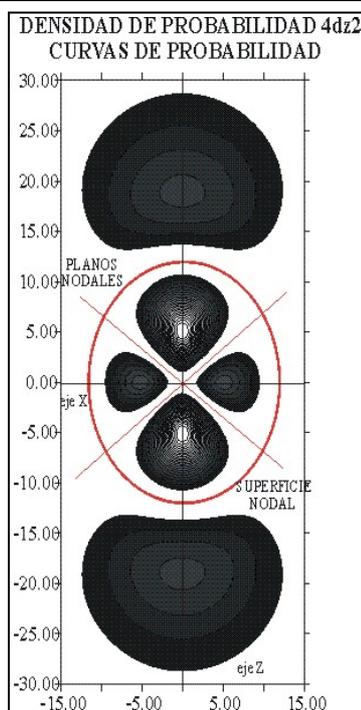


Fig. 8

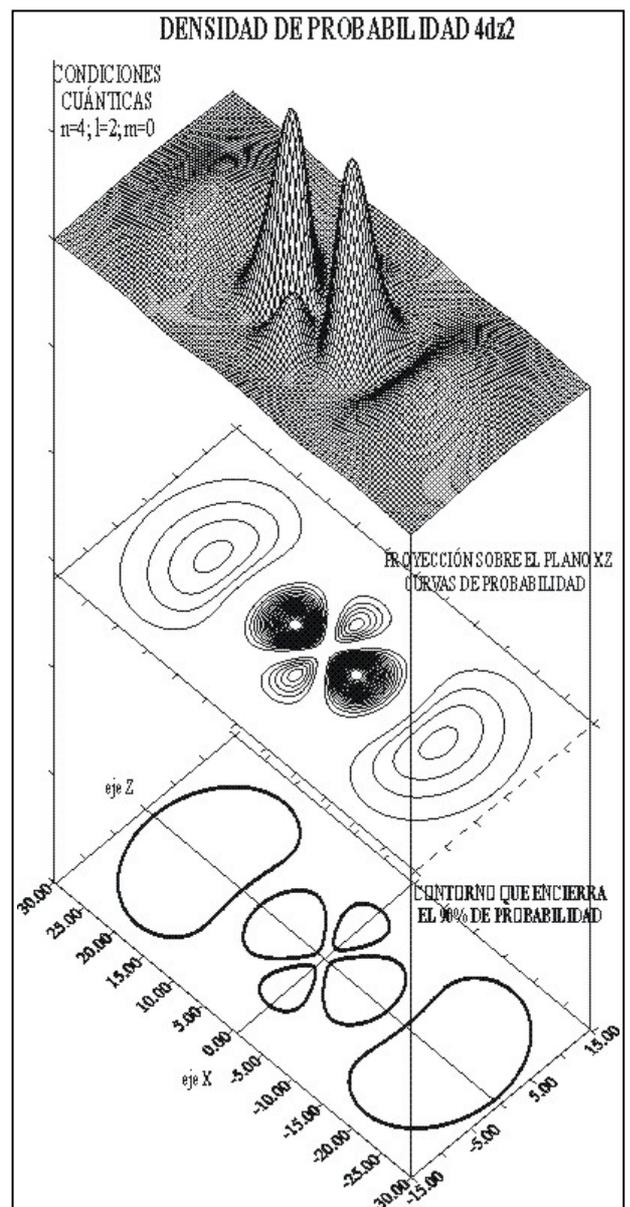


Fig. 7

Pasemos a los OA  $3d(x^2-y^2)$  y  $4d(x^2-y^2)$ . Las ecuaciones de ambos son:

$$\Psi_{3d}(x^2 - y^2) = 0,004925(x^2 - y^2)e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{3}} \quad y$$

$$\Psi_{4d}(x^2 - y^2) = 0,003824 \left( 1 - \frac{\sqrt{y^2 + x^2}}{12} \right) (x^2 - y^2)e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{4}}$$

Como se aprecia, el factor que da nombre al orbital, surge en ambas ecuaciones, procedente de la contribución angular. Sus representaciones gráficas y las curvas de nivel correspondientes se dan en las figuras 9,10, 11 y 12. Las comparaciones se pueden hacer a partir de estos dibujos, que emplean los mismos criterios de dibujos anteriores.

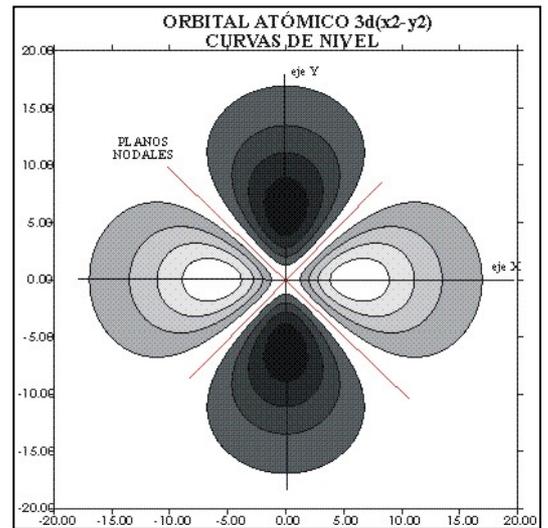
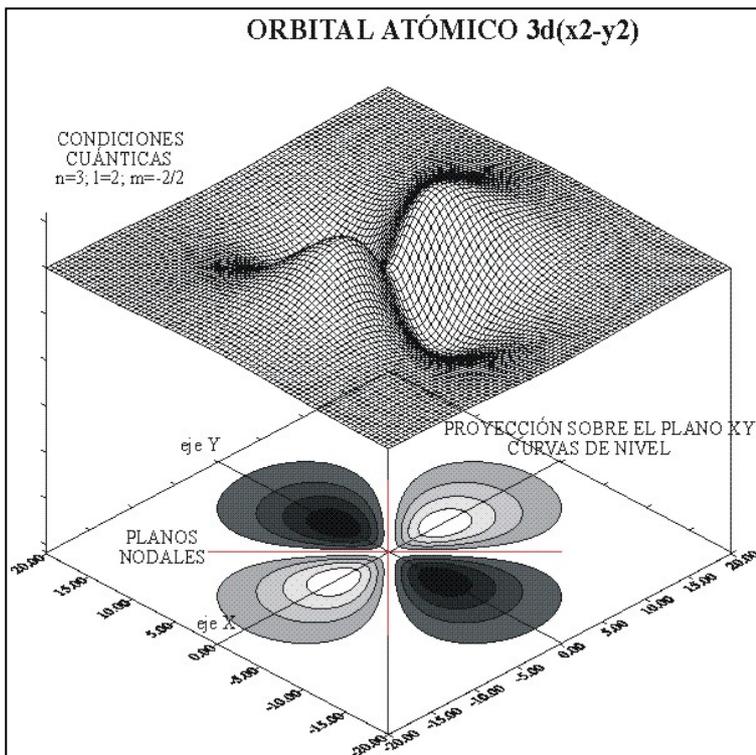


Fig. 10

Fig. 9

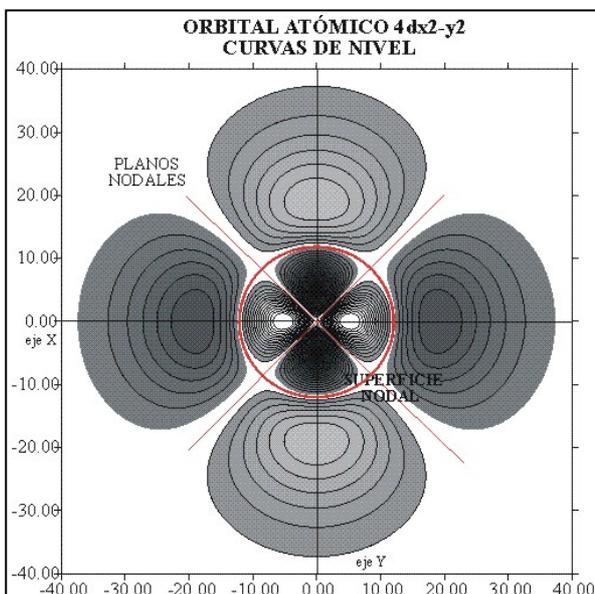


Fig. 12

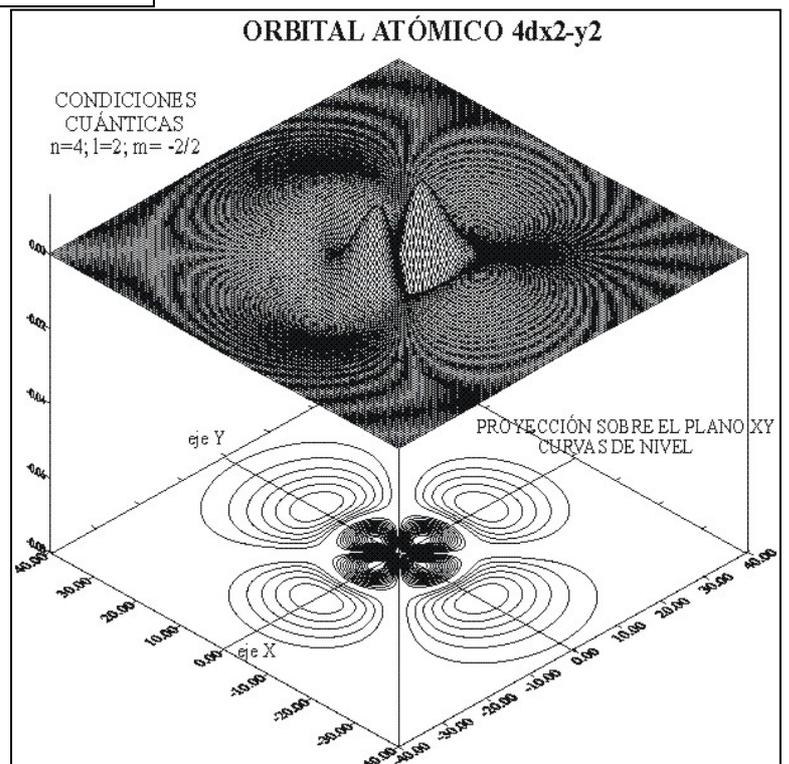


Fig. 11

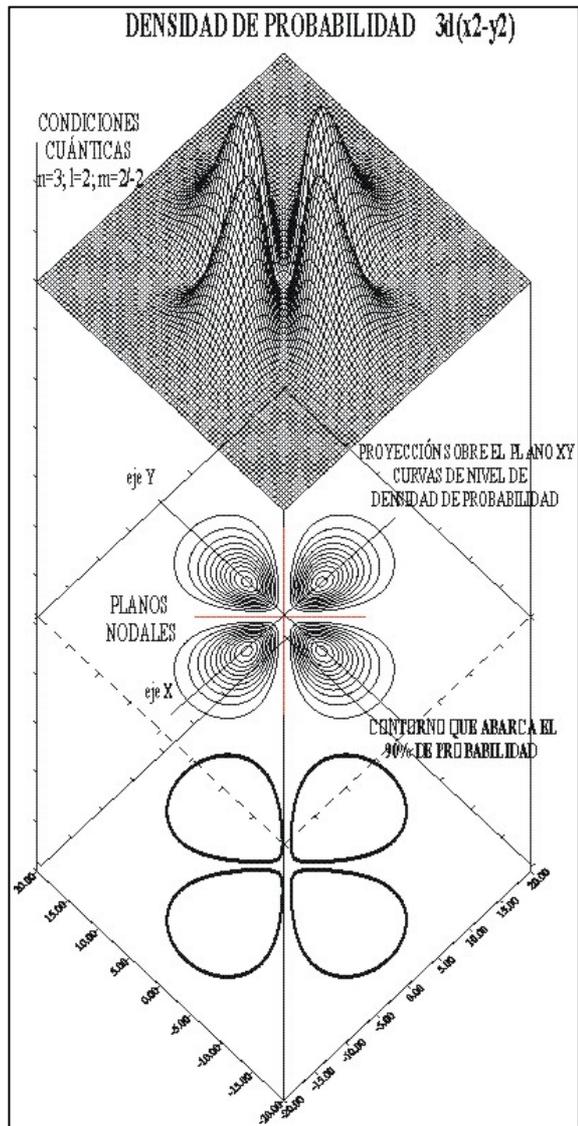


Fig. 13

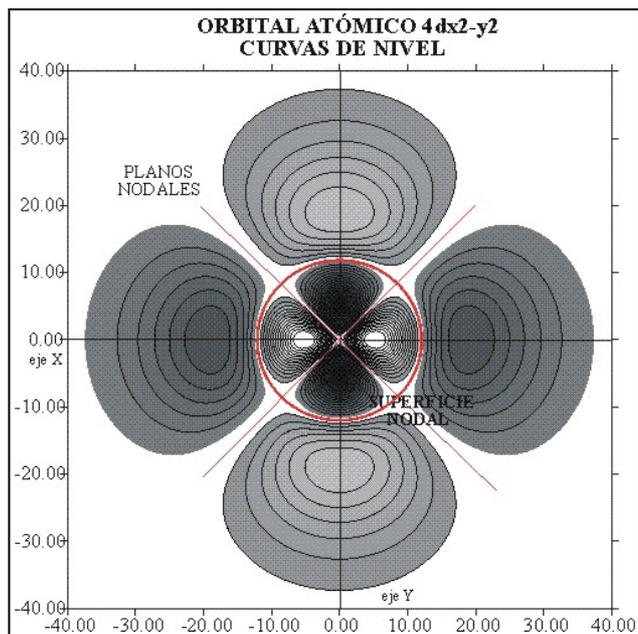


Fig. 16

Por fin las densidades de probabilidad respectivas serían las indicadas en las figuras 13,14,15 y 16:

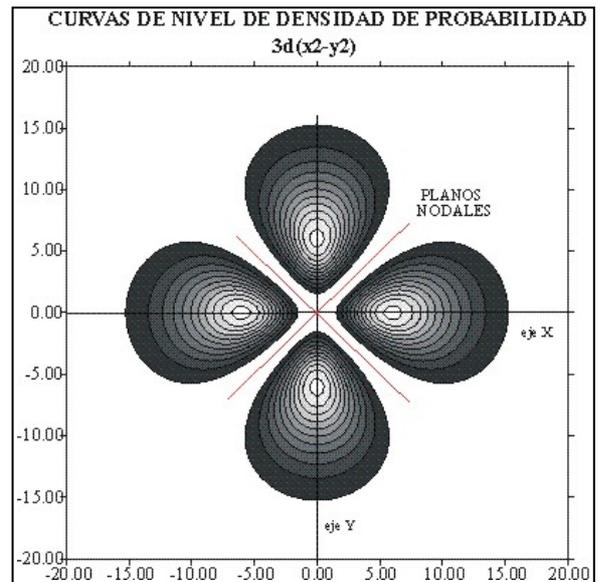


Fig. 14

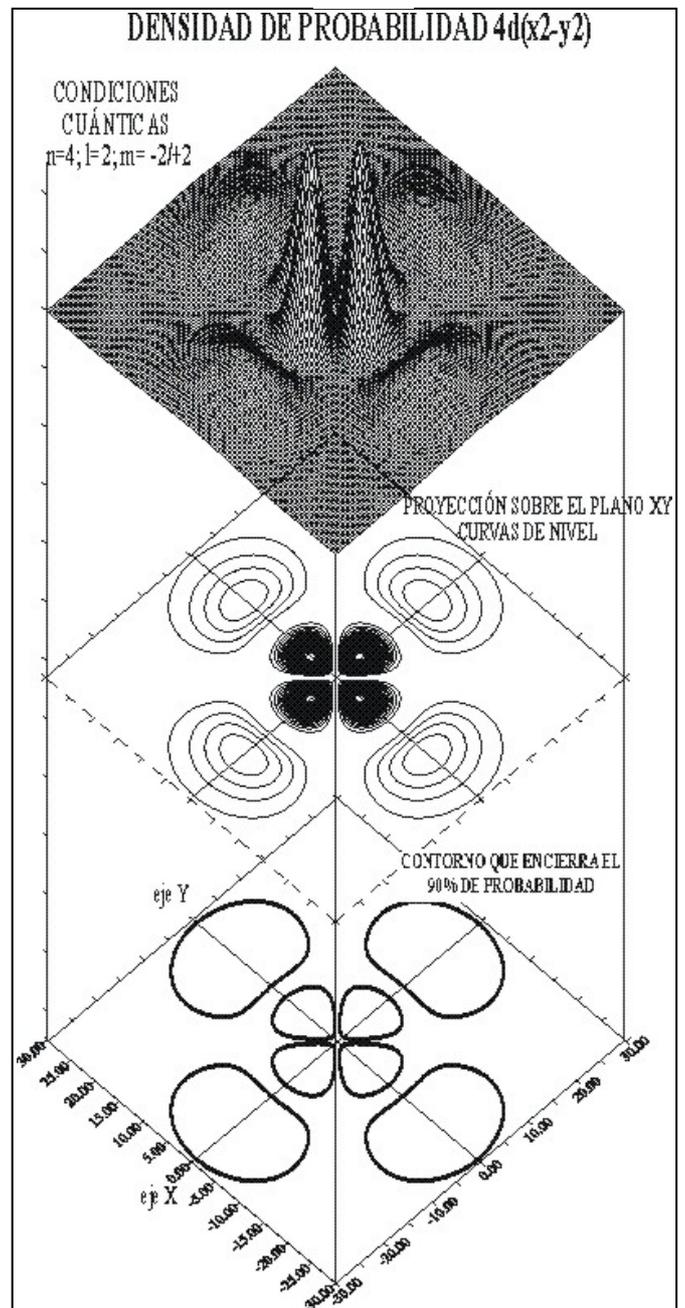


Fig. 15