

ORBITALES ATÓMICOS HIDROGENOIDES tipo f (primera parte)

Por lo general en el bachillerato, los profesores dejan al margen de sus explicaciones los orbitales f. Describen los d, estudian los problemas que encierran, y se marginan los f, calificándolos como muy complejos. Se argumenta que tampoco se van a explicar los elementos cuyos electrones completan esos orbitales, aunque se estudien otros que sí los han rellenado. Al ser unos orbitales internos, no superponen con otros orbitales y por lo tanto no dan lugar a enlaces. Por eso no son importantes.

Es evidente que se supone una pérdida de tiempo explicar los orbitales f en bachillerato, porque realmente su descripción es compleja. Se definen a partir de unas condiciones cuánticas $n=4, l=3$, que implican la existencia de 3 planos nodales en cada orbital. Esto provoca dificultades al dibujarlos.

La función radial $4f$, tiene por ecuación $\Psi_{4f} = 0,000651 r^3 e^{-\frac{r}{4}}$

Si se representa en una hoja de cálculo produce la siguiente gráfica (fig.1):

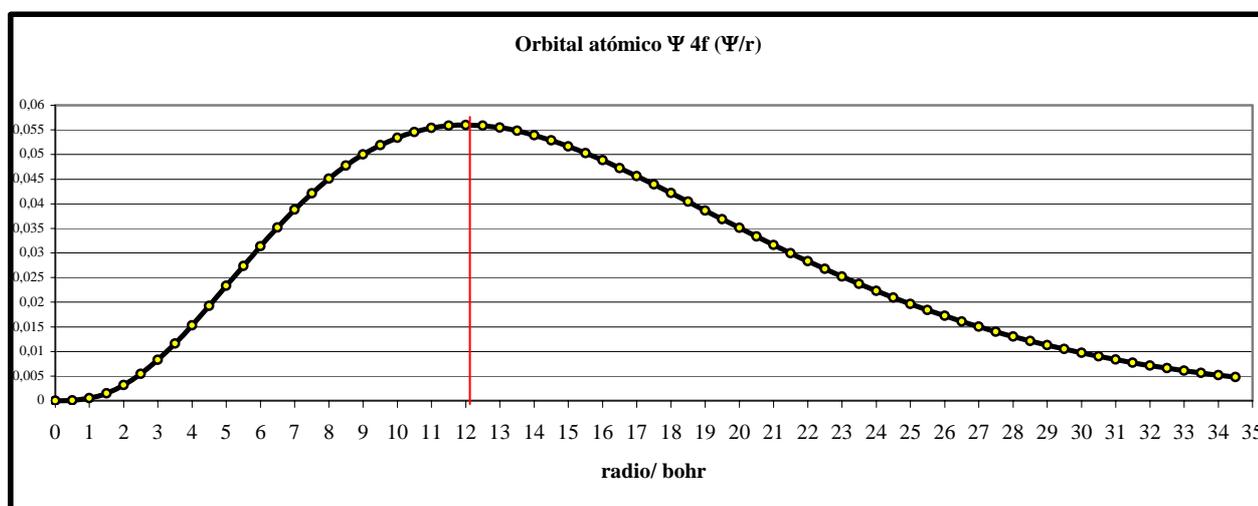


Fig. 1

Con una densidad de probabilidad $r^2 R^2$ (fig.2)

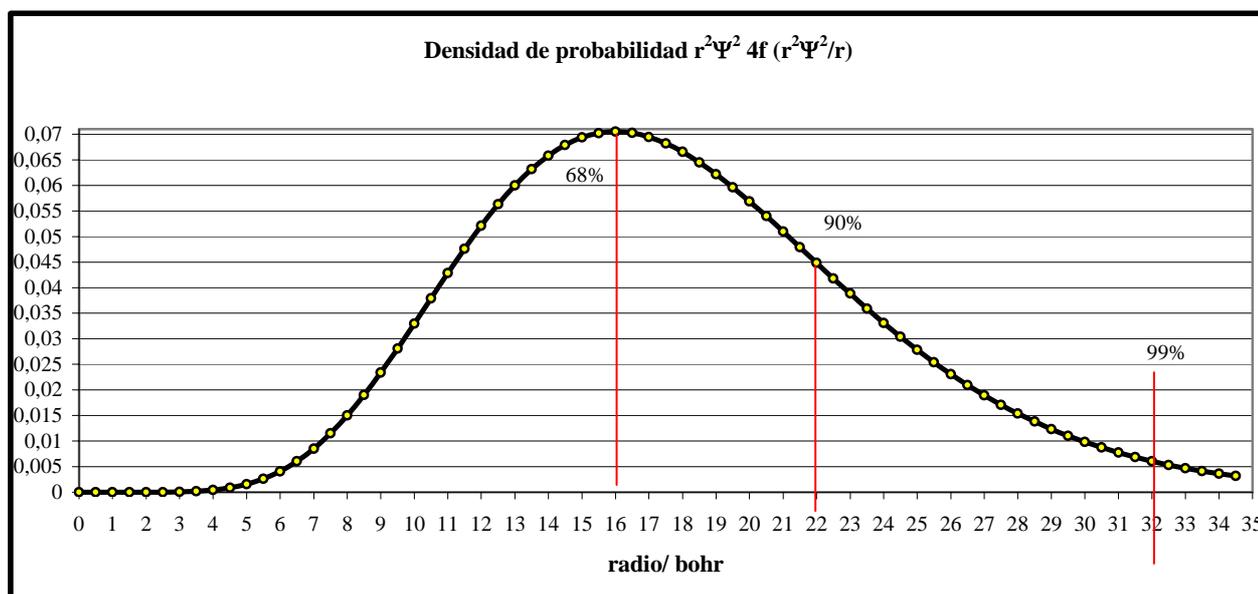


Fig. 2

A 16 bohr, existe un máximo de densidad de probabilidad, que como se ve en las gráficas de probabilidades acumulativas abarca el 68%.

La gráfica de probabilidad acumulativa es:

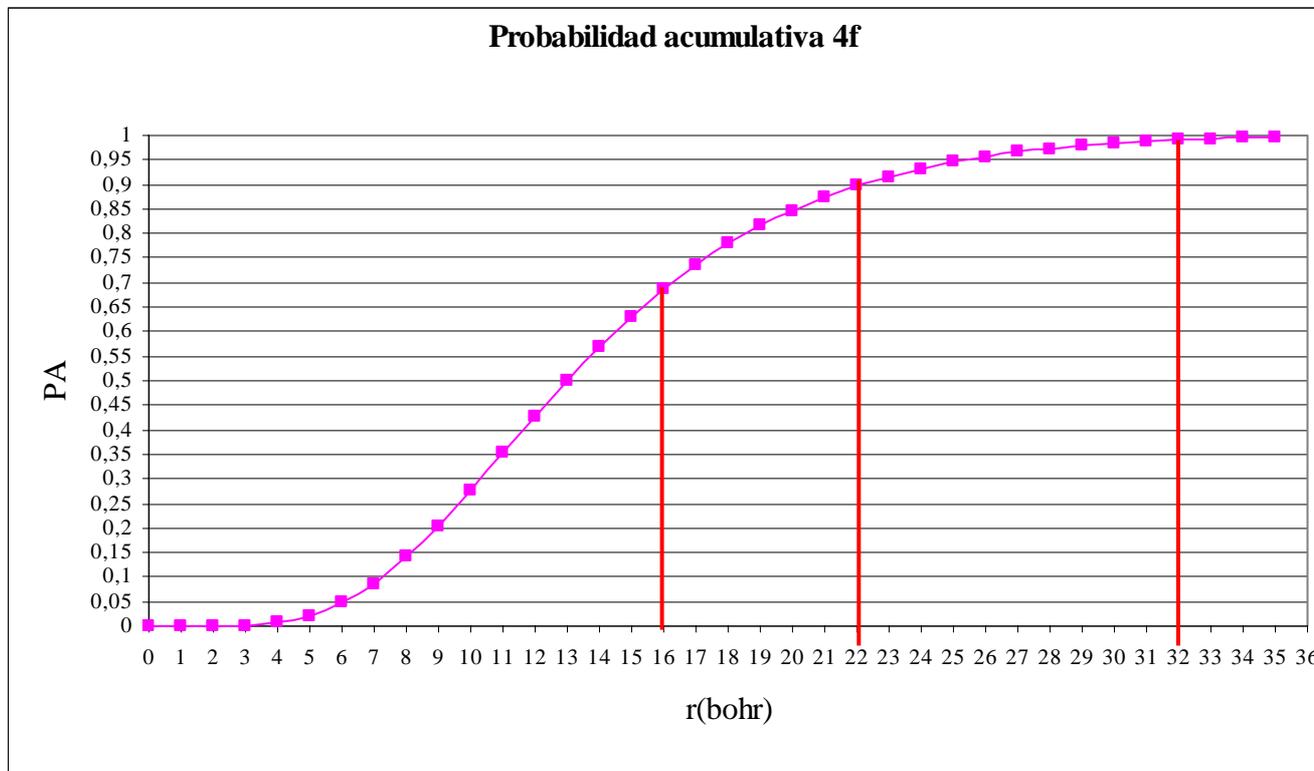


Fig. 3

Si comparamos con la gráfica 4d (orbitales atómicos d, primera parte), observamos que en la 4d, el máximo tenía lugar a 22 bohr, mientras que en el 4f ocurre a 16 bohr ; es más interno. En el 4d, existe un punto nodal a 12 bohr, mientras que en el 4f no existe, dado que $n-(l+1) = 0$.

El 90% de probabilidad se encuentra encerrado en un volumen de radio 22 bohr, mientras que en el 4d, el radio que encerraba dicho porcentaje era de 30 bohr.

Donde se dan las mayores diferencias es en la función angular, y por lo tanto en la forma del propio orbital. Ya se ha explicado que depende de los valores de m, que en este caso pueden ser siete: $\pm 3, \pm 2, \pm 1$ y 0. Por lo tanto existen 7 orbitales 4f.

Estudiaremos primero aquellos orbitales 4f condicionados por $m = 0, m = \pm 1$.

En el primer caso el orbital atómico recibe el nombre de $4fz^3$. Suele recibir este nombre debido al término con mayor exponente que aparece en la función o con el producto de las variables que lo definen, como va a ocurrir en la mayoría de los OA 4f.

La función angular es, en coordenadas rectangulares:

$$F(x, y, z) = 0,167z \frac{5z^2 - 3r^2}{r^3}, \text{ que modificada teniendo en cuenta que } r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \text{ y}$$

después de incorporar la parte radial común a todas, produce una función $R_{4f}(4,3,0)$ que al representarse mediante un programa matemático, genera el siguiente gráfico superficial (para reducir una dimensión y representar las características más sobresalientes del orbital, proyectamos sobre los ejes "y" y "x" el corte de la función de ondas cuando $y=z$).

En las figuras 4 y 5, se dibujan la función superficial (fig 4) y su proyección o mapa de contorno (fig.5).

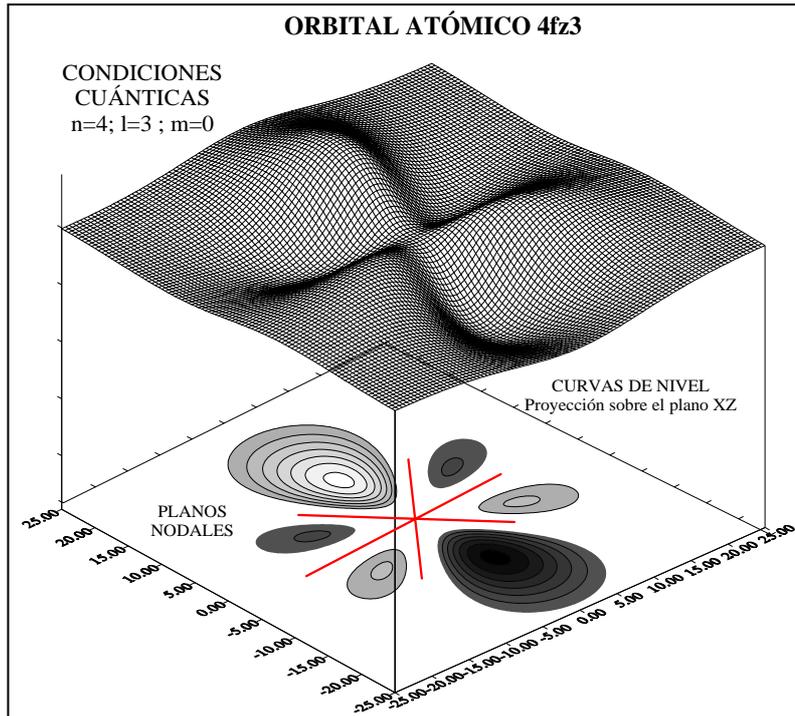


Fig. 4

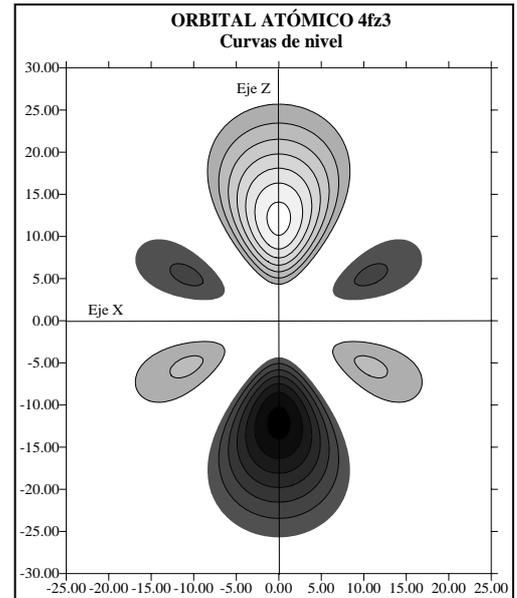


Fig. 5

Se observan perfectamente los 3 planos nodales característicos.

La gráfica de la densidad de probabilidad R^2 y su línea de contorno se dan en las fig.6 y 7

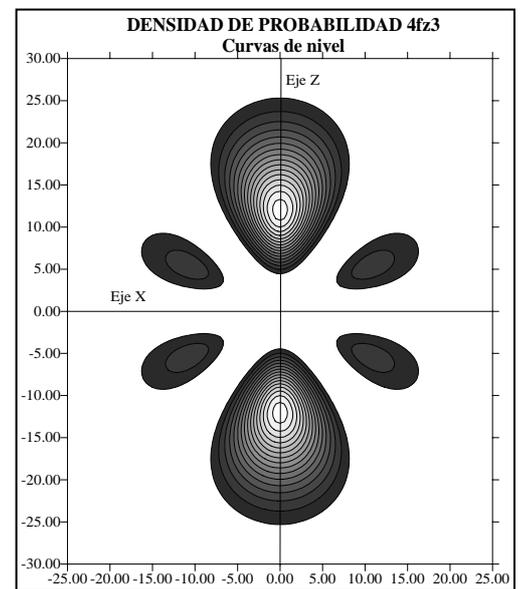
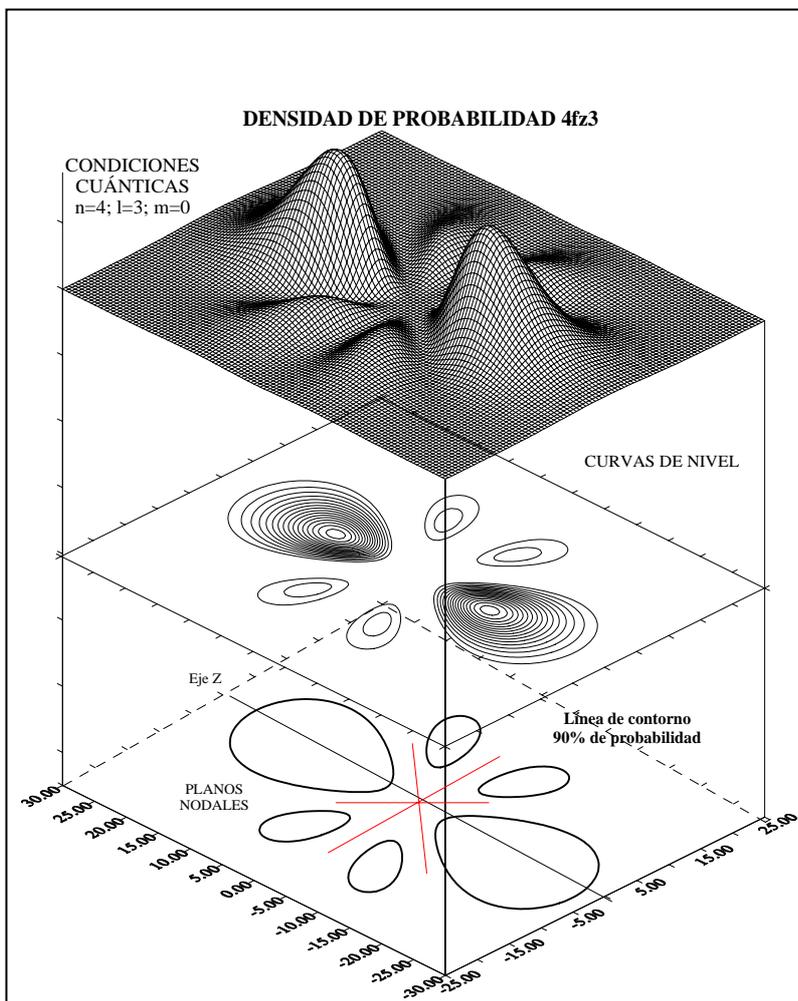


Fig. 6

Fig. 7

La línea de contorno marca el dibujo del OA 4f. Como se observa, no sería muy difícil de dibujar para un alumno de Enseñanzas Medias.

Con las condiciones cuánticas $n = 4, l = 3, m = \pm 1$, se tienen los denominados orbitales $4f_{x^3}$ y el $4f_{y^3}$, que son exactamente iguales aunque orientados en los ejes dominantes (los que le dan el nombre).

Las funciones angulares respectivas en coordenadas rectangulares son:

$$F(x, y, z) = 0,0342x \frac{5z^2 - r^2}{r^3} \quad \text{y} \quad F(x, y, z) = 0,0342y \frac{5z^2 - r^2}{r^3}$$

Operando como en el caso anterior, produce los siguientes gráficos para $R_{4f}(4,3,\pm 1)$ (fig 8 y 9).

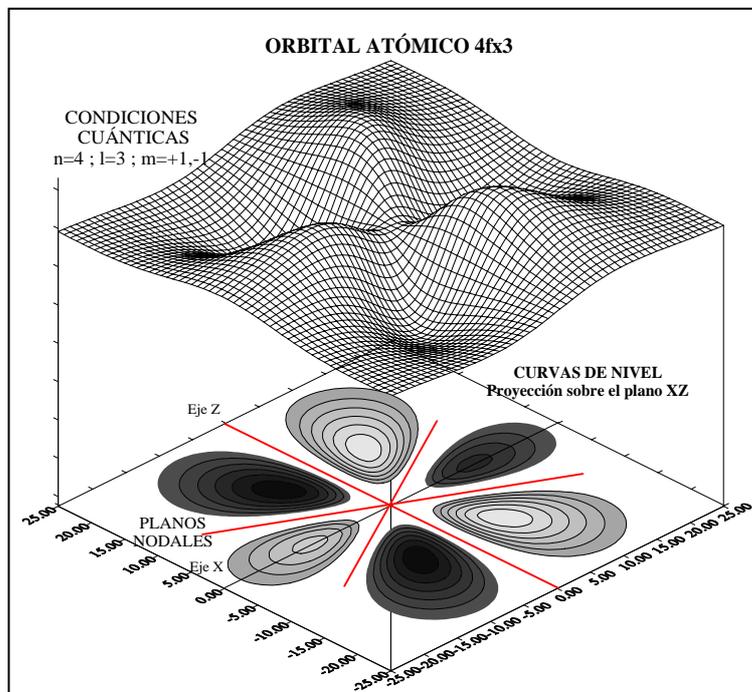


Fig. 8

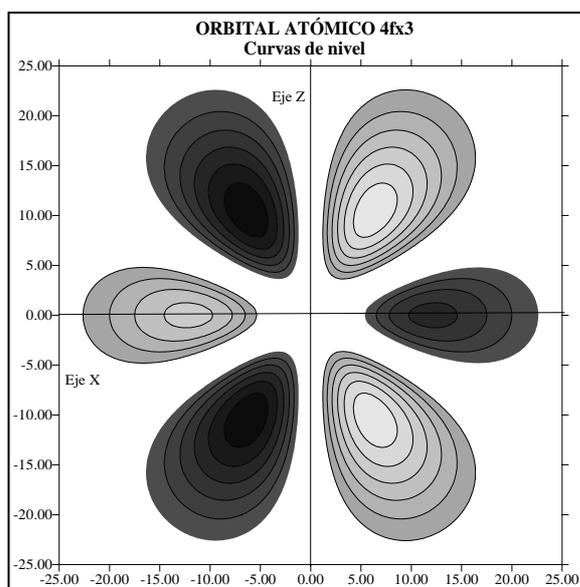


Fig. 9

Este orbital atómico se conoce con el nombre de $4fx^3$. La representación del OA $4fy^3$, sólo cambiaría el eje x por el y, al tener en cuenta la simplificación de ejes.

Al elevar al cuadrado las funciones anteriores, y representarlas, se obtienen las figuras 10 y 11. La 11 corresponde a las curvas de nivel de densidad de probabilidad, cuya línea de contorno definiría el dibujo del orbital atómico.

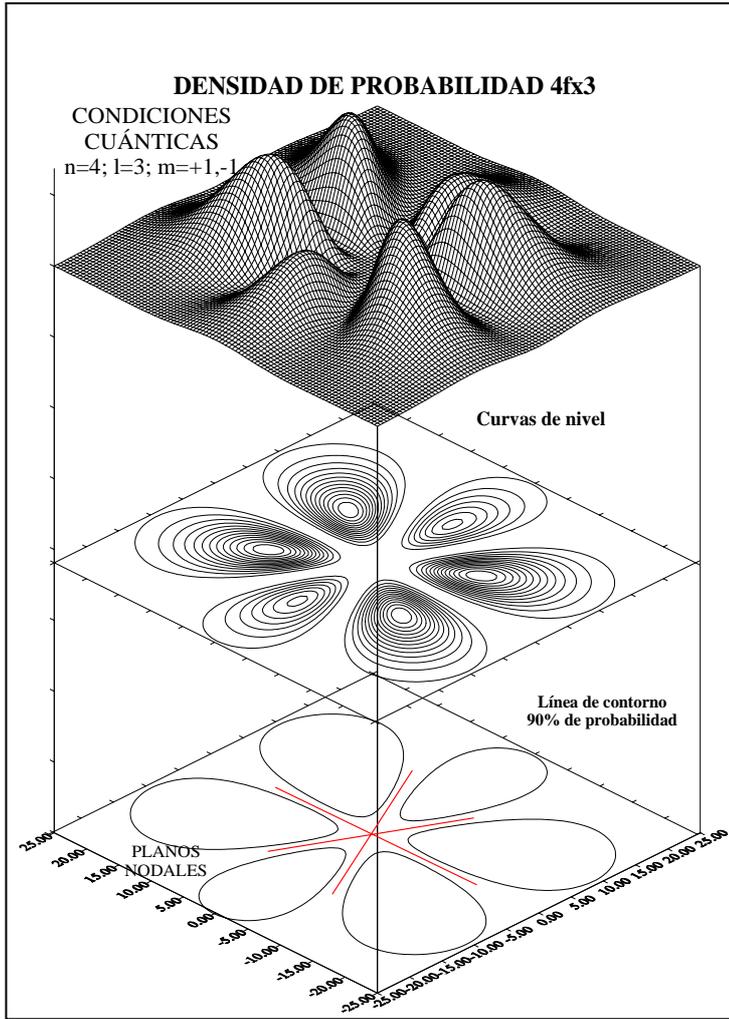


Fig. 10

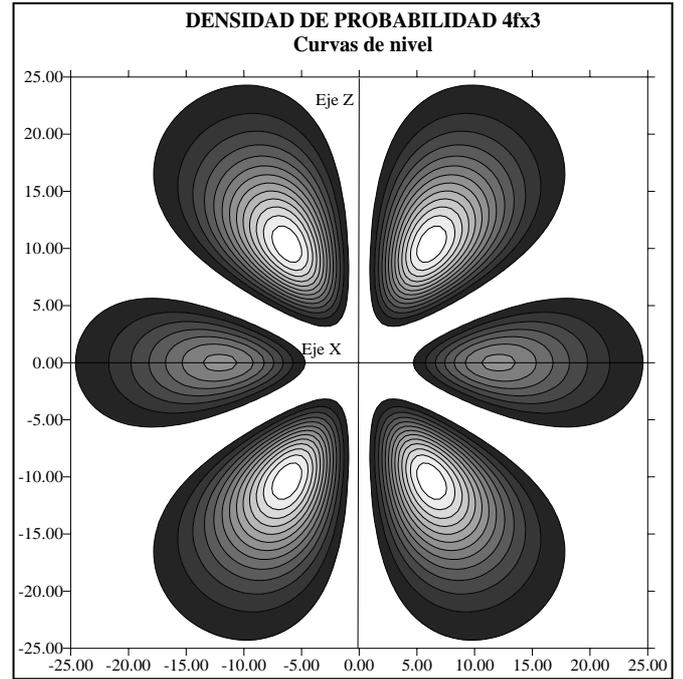


Fig. 11

