

ORBITALES ATÓMICOS HIDROGENOIDES tipo f (continuación)

Si siguiendo la descripción de los OA 4f, se van a representar los condicionados por los números cuánticos $n=4, l=3, m= \pm 2$. Estos OA 4f se denominan en función de las funciones angulares que los representan: $4f_{z(x^2-y^2)}$ y $4f_{xyz}$.

Las funciones angulares respectivas en coordenadas rectangulares son:

$$F_z(x^2 - y^2) = 0,04324z \frac{x^2 - y^2}{r^3} \quad \text{y} \quad F_{xyz} = 0,04324 \frac{2xyz}{r^3}$$

Al tener en cuenta que $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, y después de incorporar la parte radial común a todas, se obtienen unas funciones $R_{4f}(4,3,\pm 2)$ que al representarse mediante un programa matemático, generan 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 $y=z$), esto es representamos $R_{4f}(x,y,z=y)$.

En las figuras se dibujan la función superficial (fig 1) y su proyección o mapa de contorno (fig.2) que corresponden al primer orbital el $4f_{z(x^2-y^2)}$

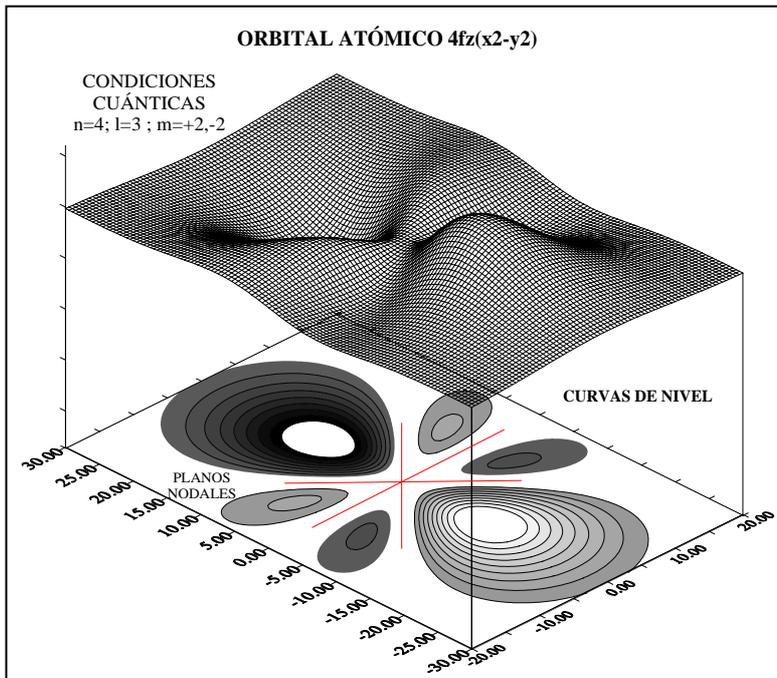


Fig. 1

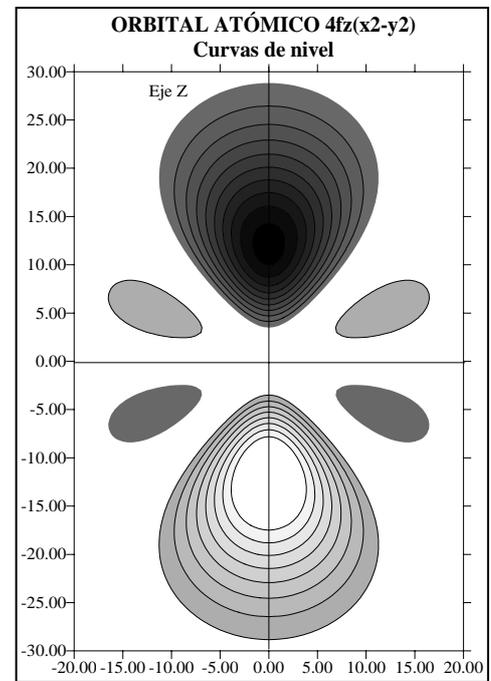


Fig. 2

La gráfica de la densidad de probabilidad R^2 y su línea de contorno de ese mismo orbital R tienen un problema para visualizarse, y es que los lóbulos laterales son tan pequeños que si se toma la línea de contorno que encierra en 90% de probabilidad apenas se distinguen; por ello vamos a visualizar las densidades de probabilidad para el 95% y para el 99% (fig.3 y 4), y comparativamente las gráficas de contorno de curvas de nivel para 90, 95 y 99% de probabilidad (fig 5, 6 y 7)

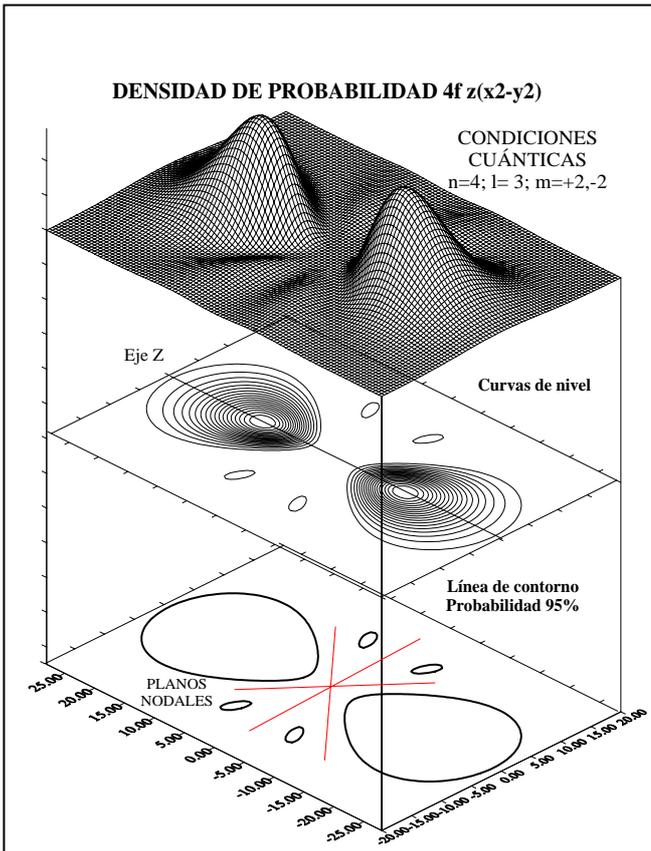


Fig. 3

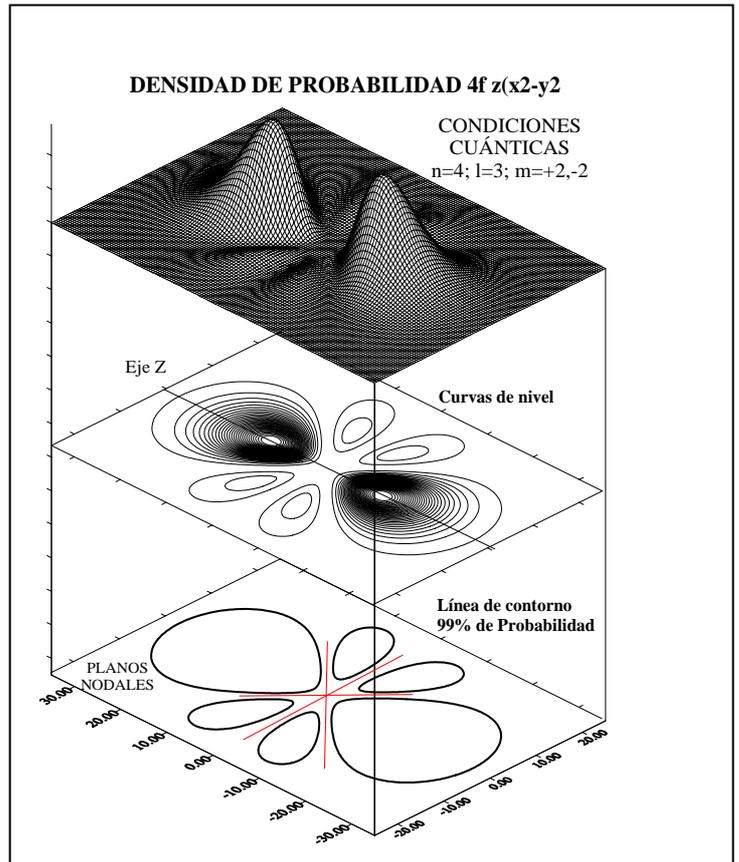


Fig. 4

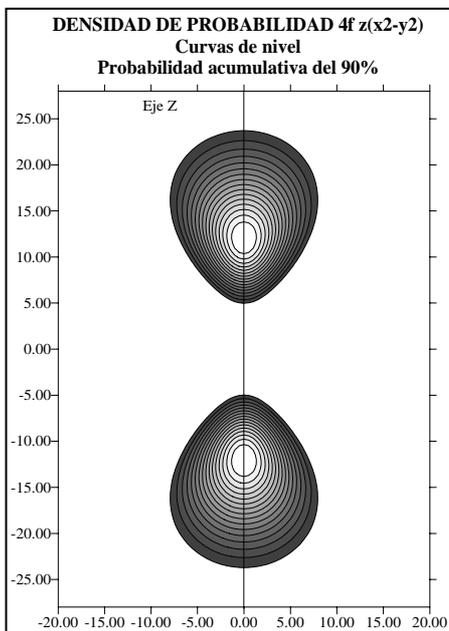


Fig. 5

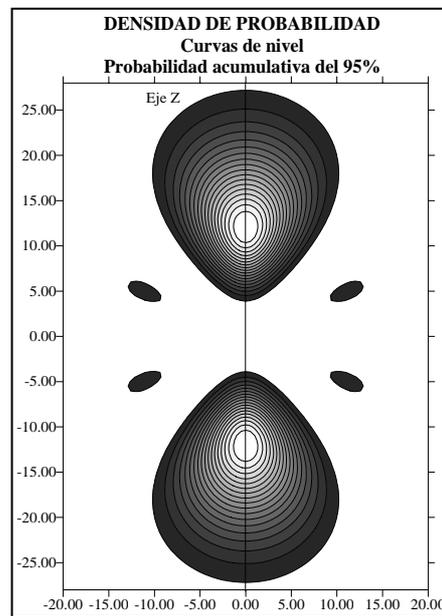


Fig. 6

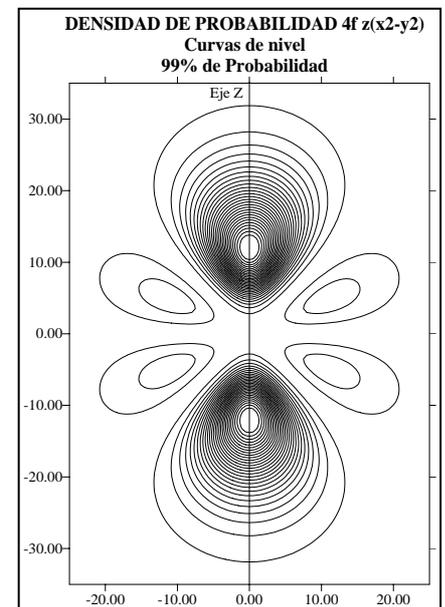


Fig. 7

La línea de contorno marca el dibujo del OA 4f. Como se observa, solo aparecen los 3 planos nodales para probabilidades acumulativas a partir del 95%.

Seguendo el mismo procedimiento a partir del orbital $R4f_{xyz}$ se obtiene la función:

$$\Psi(x, y, z) = 0,00002814(2xy^2)e^{-\frac{\sqrt{(x^2+y^2)}}{4}},$$

Para visualizar los lóbulos del orbital, se nuevo se elegirán las condiciones de contorno para el 90 y 99% de probabilidad (fig 8 y 9)

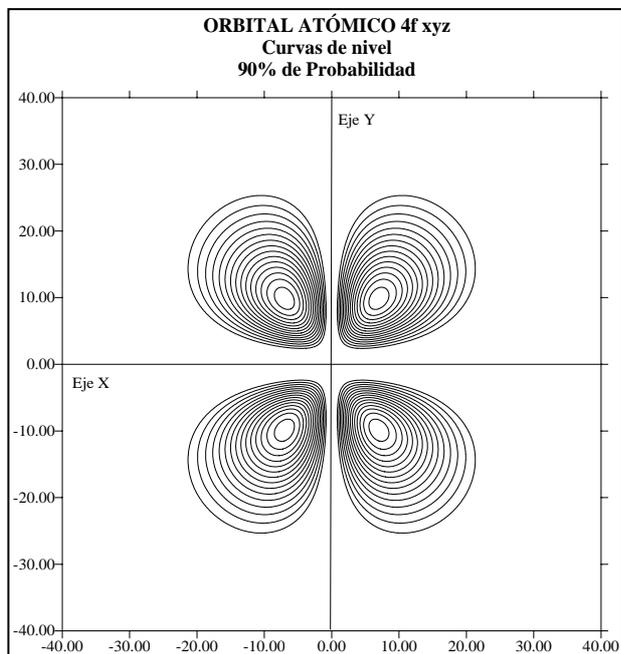


Fig. 8

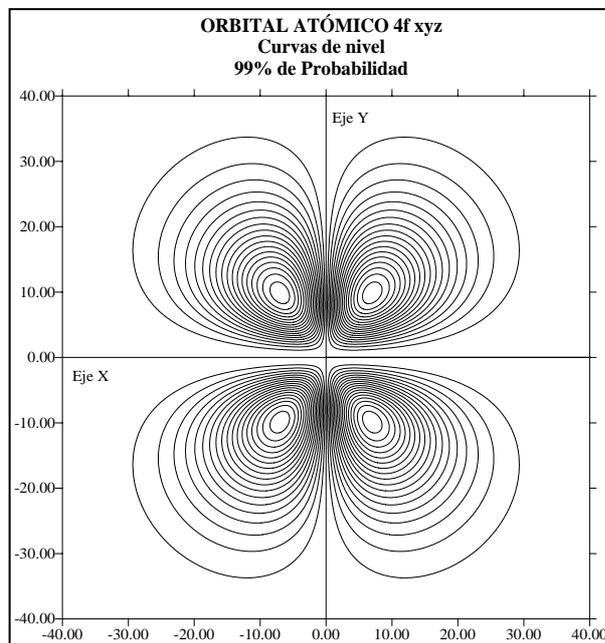


Fig. 9

Como la gráfica del cuadrado de la función no presenta ninguna variación frente a la del orbital, se obvia su representación.

Con las condiciones cuánticas $n = 4$, $l = 3$, $m = \pm 3$, se tienen los orbitales $4f_{x(x^2-3y^2)}$ y el $4f_{y(3x^2-y^2)}$, que tienen la misma forma aunque orientados hacia sus respectivos ejes dominantes (los que le dan el nombre).

Las funciones angulares en coordenadas rectangulares son:

$$F_x(x^2 - 3y^2) = 0,0265x \frac{x^2 - 3y^2}{r^3} \quad \text{y} \quad F_y(3x^2 - y^2) = 0,0265y \frac{3x^2 - y^2}{r^3}$$

Operando como en los casos anteriores, obtenemos los siguientes gráficos (fig 10 y 11) para el orbital $R4f(x(x^2-3y^2))$

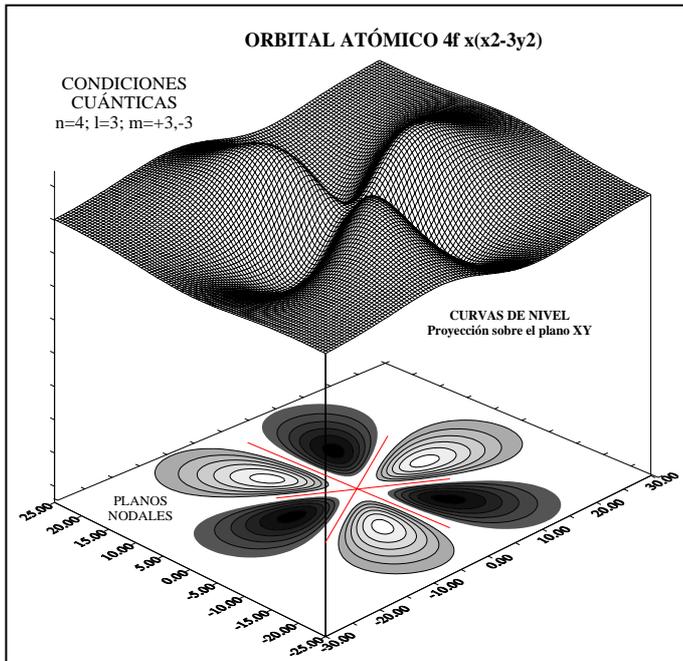


Fig. 10

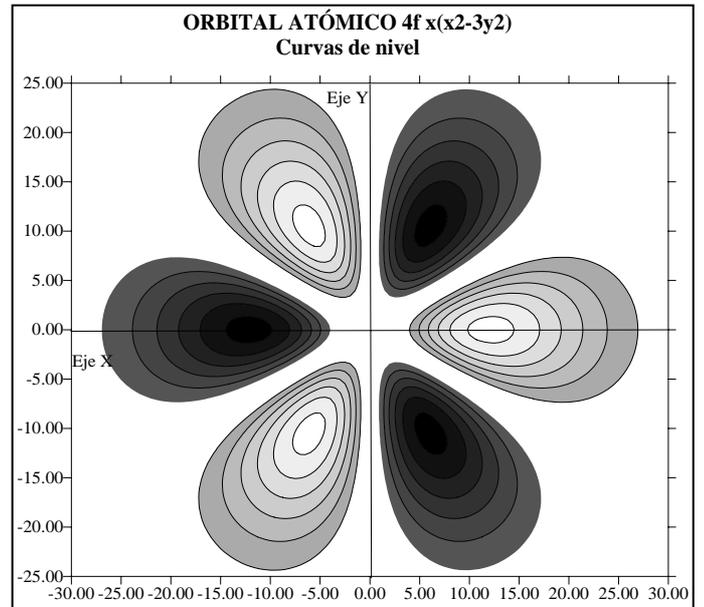


Fig. 11

Al elevar al cuadrado las funciones anteriores, y representarlas, se obtienen las figuras 12 y 13. La 13 corresponde a las curvas de nivel de densidad de probabilidad, cuya línea de contorno define el dibujo del orbital atómico.

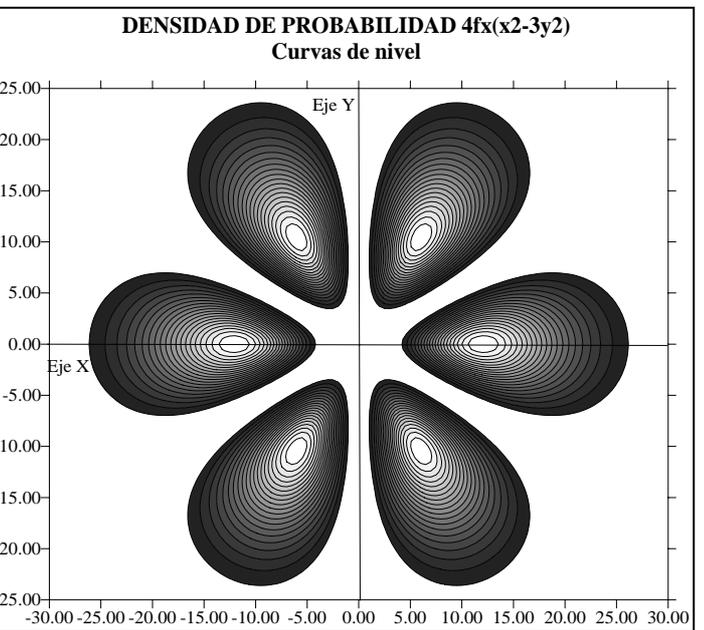
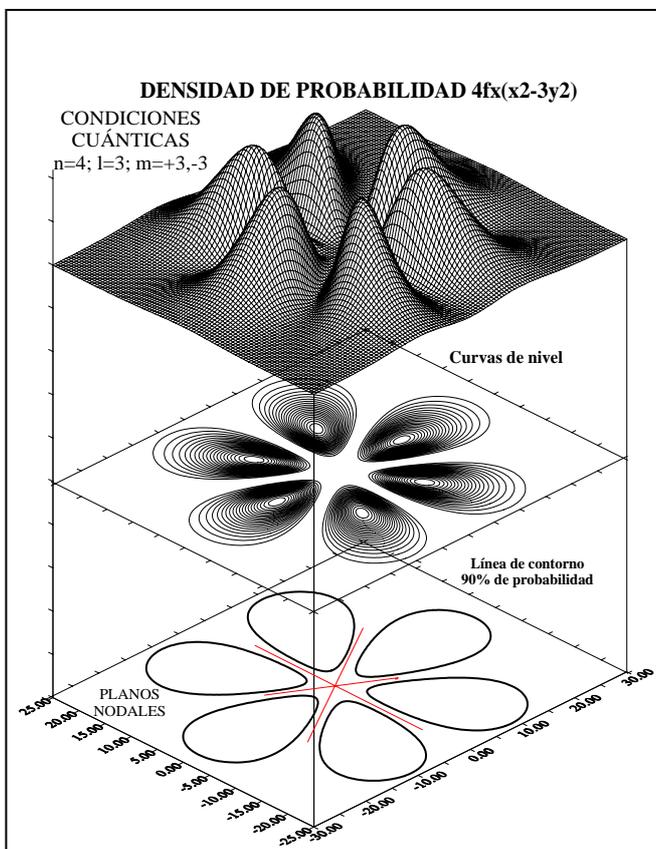


Fig. 12

Fig. 13

El orbital que nos queda es simétrico del anterior, con la única permutación de los ejes X e Y . Véanse las figuras 14,15 16 y 17

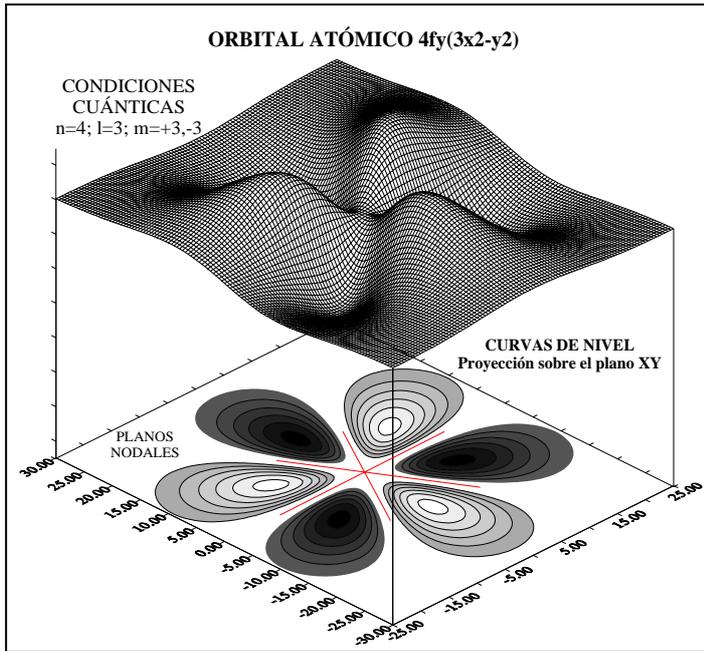


Fig. 14

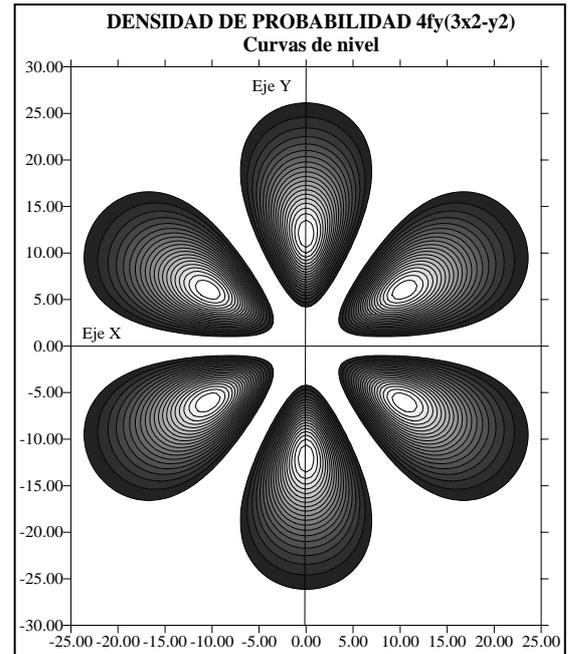


Fig. 15

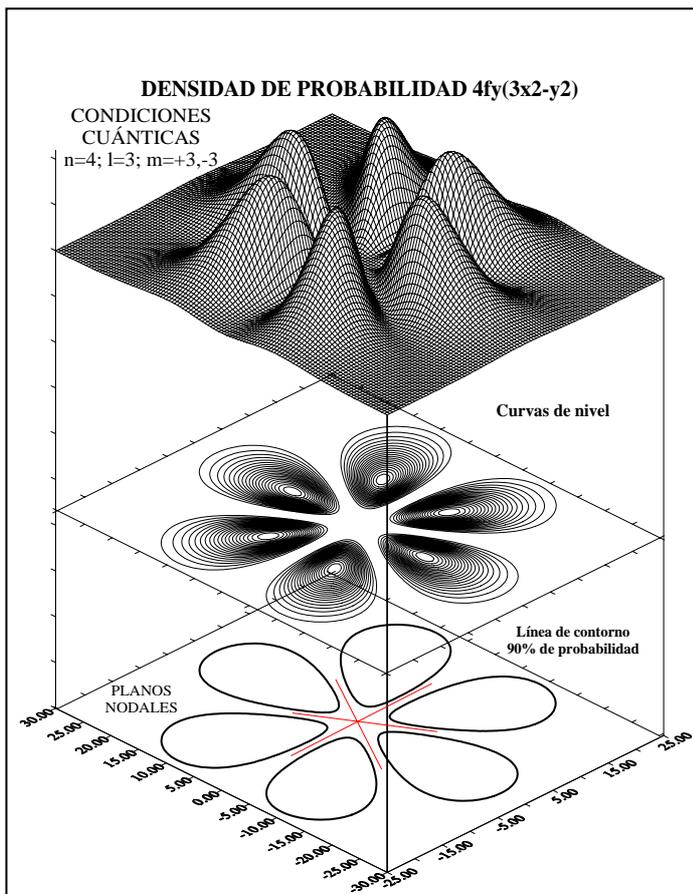


Fig. 16

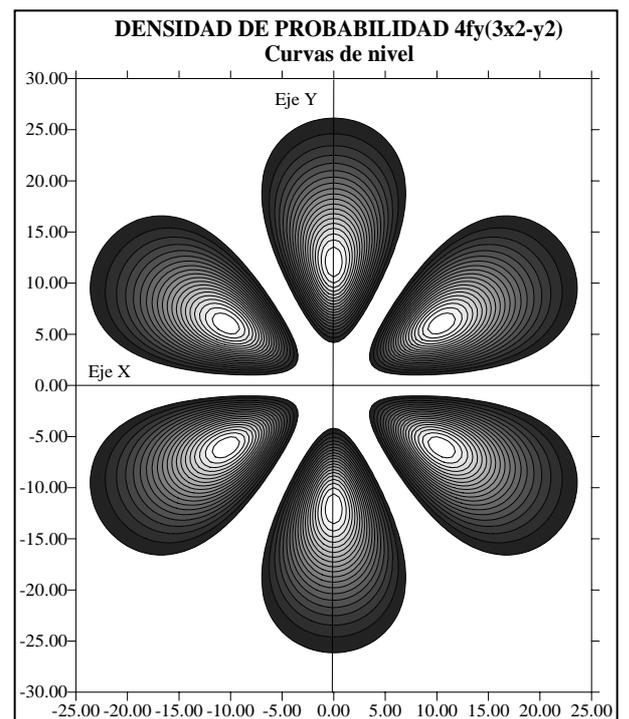


Fig. 17