

**A INFORMÁTICA NO ENSINO: IV.
OS ORBITAIS ATÔMICOS HIDROGENÓIDES****Léo Degrève**Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto
Universidade de São Paulo
Av. Bandeirantes, 3900; 14049 - Ribeirão Preto - SP

Recebido em 30/5/90; cópia revisada em 25/6/91

A didactical program, to be used on IBM-PC compatible micro-computers, showing the hydrogenlike atomic orbitals is presented. The main features are to show the electronic densities of any orbital up to the principal quantum number $n = 4$, linear combinations of orbitals, the electronic densities in different planes, to compare different orbitals and to identify the electronic densities due to the positive and negative part of the wave function.

Keywords: electronic densities, computer-aided atomic orbitals

APRESENTAÇÃO

As representações pictóricas dos orbitais são destinadas a extrair da fírmula da sua descrição matemática, informações suficientemente acessíveis para que o estudante, ou o profissional, possa dominar aspectos importantes das estruturas eletrônicas nos átomos e, conseqüentemente, compreender alguns dos fundamentos das estruturas eletrônicas em moléculas. Existem problemas não triviais associados à representação em espaços bi ou tridimensionais de uma propriedade que, como a densidade de carga, é definida no espaço cartesiano tridimensional^{1,2}. Clareza, exatidão, acessibilidade, generalidade e flexibilidade são necessárias para que se possa salientar melhor os aspectos mais importantes das estruturas eletrônicas básicas. O objetivo deste trabalho é apresentar e fornecer uma ferramenta didática para desenvolver o estudo geométrico, a

visualização bem como o entendimento de propriedades fundamentais dos orbitais atômicos do átomo de hidrogênio e de íons hidrogenóides. O programa proposto pode ser utilizado em microcomputadores do tipo PC, PC-XT, PC-AT e compatíveis, com ou sem co-processador aritmético, com saída de vídeo CGA (apenas uma cor é utilizada) ou EGA (diferencia os sinais da função de onda pela cor). A geometria dos orbitais atômicos a partir das funções de onda^{3,5} é melhor representada a partir da observação das densidades eletrônicas em um espaço tridimensional quando as funções de onda são reais. As combinações lineares das funções de onda complexas usadas para obter as funções reais permitem salientar claramente a dependência em todas as variáveis espaciais, isto é, a geometria dos orbitais. Na tela do vídeo, onde os orbitais são apresentados, não se pode utilizar com sucesso a combinação das três variáveis de posição como uma representação

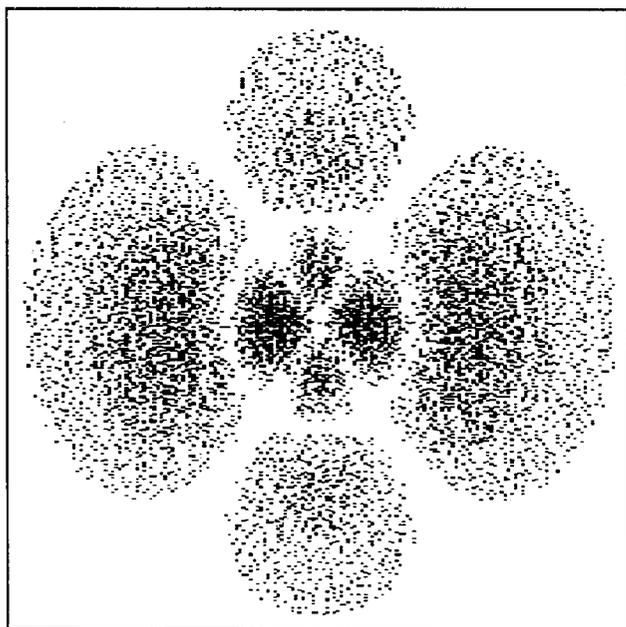


Figura 1 - Densidade eletrônica no plano X, Z, orbital: $4d_z^2$.

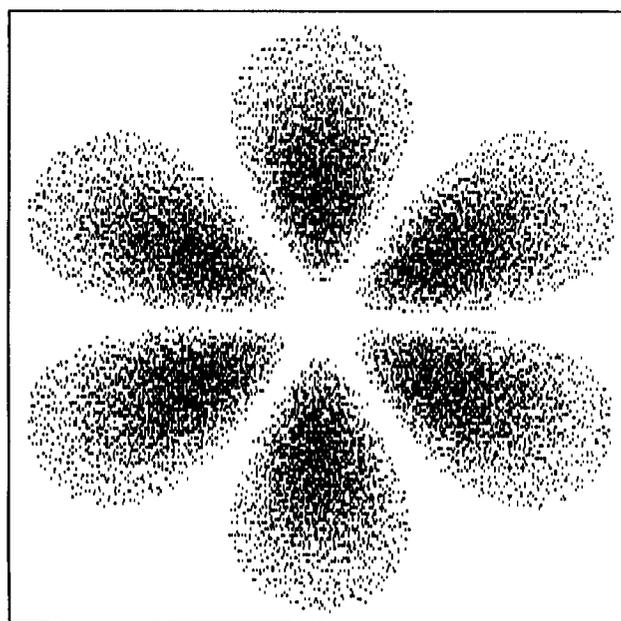


Figura 2 - Densidade eletrônica no plano X,Y,orbital: $4f_{3x^2 - y^2}$.

da densidade eletrônica. A alternativa é optar por descrever a densidade eletrônica como uma função de duas variáveis de posição ou optar por identificar somente as superfícies de densidade eletrônica constante. Este último tratamento é usualmente utilizado pelo químico em muitas aplicações. Posteriormente serão apresentados trabalhos para a análise dos orbitais do átomo de hidrogênio sob o ponto de vista das superfícies de densidade de probabilidade constante e para o estudo da formação de ligações químicas como combinações lineares de orbitais atômicos, enquanto que a primeira solução é usada no programa apresentado aqui. Além das informações

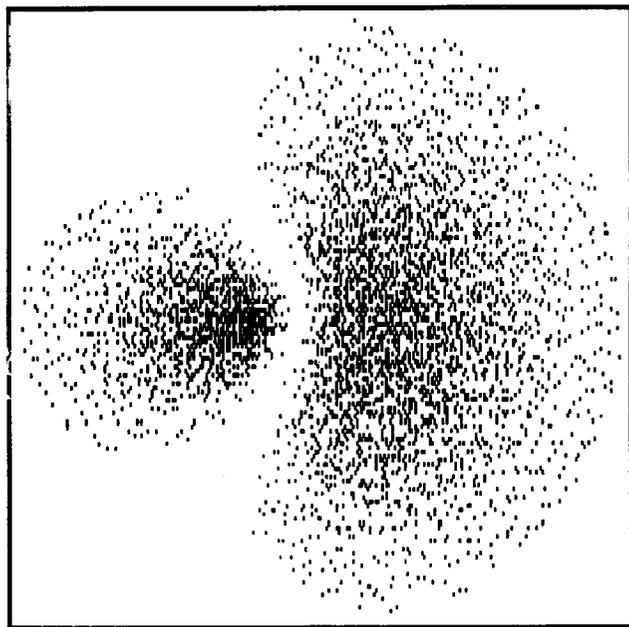


Figura 3 - Densidade eletrônica de um orbital híbrido sp^2 dado pela combinação linear $\{(2s) + \sqrt{2} \cdot (2p)\}^2/3$

relativas à geometria, são disponíveis também as informações relativas ao sinal da função de onda nas várias regiões espaciais. Isto é importante no entendimento e previsão da formação das ligações químicas.

Todos os orbitais com número quântico principal 1 a 4 podem ser representados. Como exemplo, a figura 1 representa o orbital $4d_{z^2}$ e a figura 2 o orbital $4f_{3x^2-y^2}$. Como complementação os orbitais híbridos, formados por combinações lineares de dois ou mais orbitais, podem igualmente ser visualizados. Neste caso é necessário escolher os orbitais atômicos a combinar bem como os coeficientes das combinações lineares. O exemplo do orbital sp^2 é mostrado na figura 3.

CONCLUSÃO

O programa apresentado facilita ao professor, ao estudante e ao pesquisador estudar detalhadamente a geometria dos orbitais do átomo de hidrogênio bem como os sinais das funções de onda. Os resultados destas observações costumam ser criteriosamente extrapolados às prováveis ou possíveis geometrias de orbitais de átomos mais complexos. Desde que os valores específicos das distâncias não sejam levados em consideração as propriedades direcionais e o sinal algébrico das funções de onda são suficientes para se obter informações qualitativas. A aplicação deste programa aos nossos estudantes tem sido encorajadora e muito bem recebida.

O interessado poderá solicitar o programa enviando ao autor um disco flexível para a cópia do programa e indicando qual é a versão desejada.

REFERÊNCIAS

1. Allendoerfer, R.D.; *J. Chem. Ed.*, (1990), **67**, 37.
2. Douglas, J.E.; *J. Chem. Ed.*, (1990), **67**, 43.
3. Pauling, L.; Wilson, E.B.; "Introduction to Quantum Mechanics", McGraw-Hill Book Co, Inc.; New York (1935).
4. Purcell, K.F.; Kotz, J.C.; "Inorganic Chemistry", W.B. Saunders Co; Philadelphia (1977).
5. Hanna, M.W.; "Quantum Mechanics in Chemistry", Benjamin/Cummings Pub. Co.; Menlo Park (1981).

Publicação financiada pela FAPESP