

Capítulo

5

NÚMEROS CUÁNTICOS



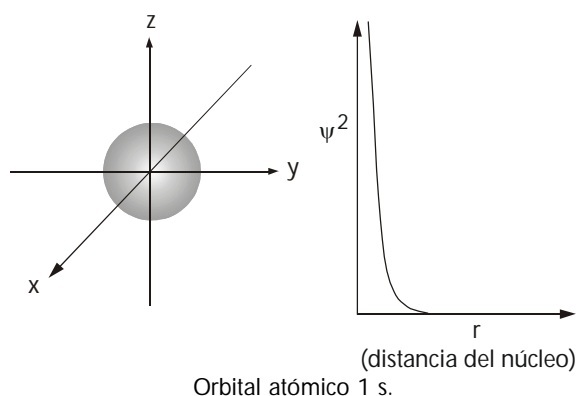
ERWIN SCHRÖDINGER

(Viena, 1887-id., 1961) Físico austriaco. Compartió el Premio Nobel de Física del año 1933 con Paul Dirac por su contribución al desarrollo de la mecánica cuántica. Ingresó en 1906 en la Universidad de Viena, en cuyo claustro permaneció, con breves interrupciones, hasta 1920. Sirvió a su patria durante la Primera Guerra Mundial, y luego, en 1921, se trasladó a Zurich, donde residió los seis años siguientes. En 1926 publicó una serie de artículos que sentaron las bases de la moderna mecánica cuántica ondulatoria, y en los cuales transcribió en derivadas parciales, su célebre ecuación diferencial, que relaciona la energía asociada a una partícula microscópica con la función de onda descrita por dicha partícula. Dedujo este resultado tras adoptar la hipótesis de De Broglie, enunciada en 1924, según la

cual la materia y las partículas microscópicas, éstas en especial, son de naturaleza dual y se comportan a la vez como onda y como corpúsculo.

NÚMEROS CUÁNTICOS

En 1926, Erwin Schrödinger propuso una ecuación, ahora conocida como la ecuación de onda de Schrödinger, que involucra los comportamientos tanto ondulatorios como de partícula del electrón. El trabajo de Schrödinger inició una nueva forma de tratar las partículas subatómicas conocida como **mecánica cuántica** o **mecánica ondulatoria**.

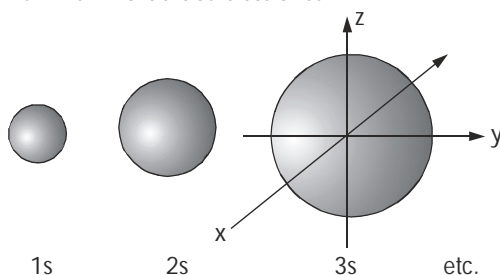


La solución completa de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno produce un conjunto de funciones de onda que se denominan **orbitales**, los cuales quedan definidos por un conjunto de tres números cuánticos: el número cuántico principal, el número cuántico azimutal y el número cuántico magnético.

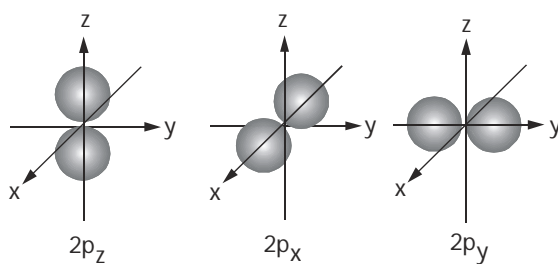
En 1928, Paul Dirac, reformuló la mecánica cuántica del electrón para tener en cuenta los efectos de la relatividad. Esto dio lugar a la aparición de un cuarto número cuántico: el número cuántico de espín.

Un **orbital atómico** es la región del espacio donde está concentrada el 90% de la densidad electrónica. También se podría decir que es la región del espacio donde existe la máxima probabilidad de encontrar a los electrones.

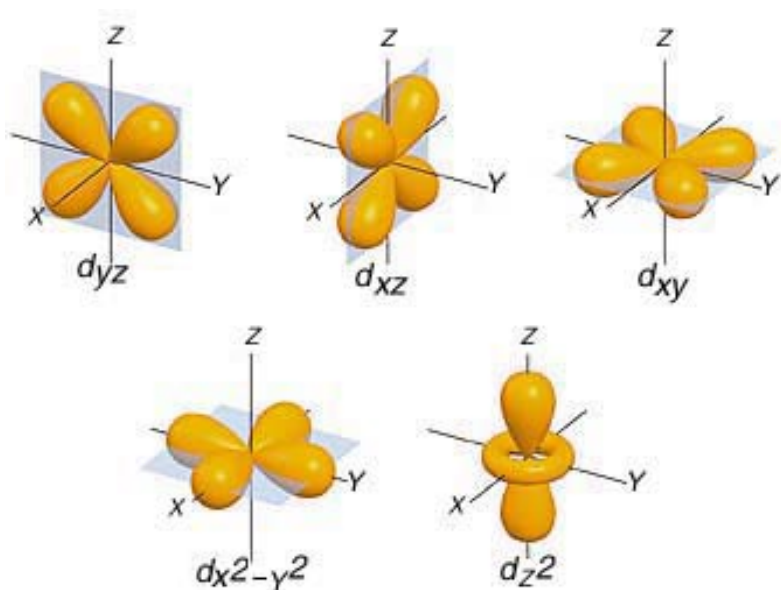
Todo orbital atómico es ocupado por un máximo de dos electrones.



A: ORBITALES ATÓMICOS S



B: ORBITALES ATÓMICOS P



C: ORBITALES ATÓMICOS D

FIGURA: REPRESENTACIÓN DE LOS ORBITALES.

NÚMERO CUÁNTICO PRINCIPAL (N)

Describe el tamaño del orbital atómico y con ello, los niveles energéticos asociados al electrón.

- * Toma valores enteros: 1, 2, 3 ... ∞ ,
- * A mayor "**n**", más grandes son las regiones de la densidad electrónica.
- * A mayor "**n**", el electrón tiene mayor energía y se encuentra menos "ligado" al núcleo.

n	1	2	3	4	5	6	7	
CAPA	K	L	M	N	O	P	Q

Máximo de orbitales por nivel = n^2

Máximo de electrones por nivel = $2n^2$

NÚMERO CUÁNTICO SECUNDARIO (ℓ)

Describe la forma del orbital atómico y con ello, otra parte de la energía asociada al electrón, a la cual se denomina subnivel de energía.

- * El valor del número cuántico secundario depende de "n" y toma valores enteros de **0** a **(n-1)**. Así, para n=1 sólo hay un valor posible $\ell = 0$. Para n=2 hay dos valores de ℓ : 0 y 1. Para n=3 hay tres valores posibles de ℓ : 0, 1 y 2.
- * Generalmente el valor de ℓ se representa por una letra en vez de por su valor numérico.

ℓ	0	1	2	3	4	5	6	n-1
Subnivel	s	p	d	f	g	h	i

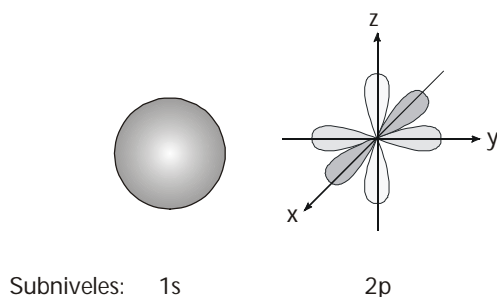


Figura: orbitales atómicos 1s y 2p.

$n = 1$	$n = 2$
$\ell = 0$	$\ell = 1$

$\# \text{ de orbitales en un subnivel} = 2\ell + 1$

$\# \text{ máximo de electrones en un subnivel} = 2(2\ell + 1)$

NÚMERO CUÁNTICO MAGNÉTICO (m_ℓ)

Describe la orientación espacial del orbital atómico. El número de valores que adopta el número cuántico magnético es igual al número de orbitales que posee un subnivel de energía.

$m_\ell : \text{desde } (-\ell) \text{ } 0, \text{ hasta } (+\ell)$

- * El valor del número cuántico magnético depende de ℓ . Toma valores enteros entre $-\ell$ y ℓ , incluyendo al 0. Para cierto valor ℓ hay $(2\ell + 1)$ valores de m_ℓ .
- * Describe la orientación del orbital en el espacio.

Veamos los diferentes orbitales que podemos tener para $n=3$. Tendremos entonces tres valores de ℓ : 0, 1 y 2. Los valores de m_ℓ para cada valor de ℓ se compilan en la tabla siguiente: (los orbitales que comparten los valores de n y ℓ se dicen que pertenecen al mismo subnivel –orbitales degenerados– y todos los orbitales con el mismo "n" formarían un nivel).

Cuadro: distribución de los orbitales para $n = 3$.

ℓ (define la forma) del orbital	Subnivel	m_ℓ (define orientación)	Nº de orbitales en el subnivel
0	3s	0	1
1	3p	-1, 0, 1	3
2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5

Los Orbitales degenerados: Son los orbitales energéticamente equivalentes. Por ejemplo, los orbitales $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ tienen la misma energía relativa y constituyen un conjunto de orbitales degenerados, llamado el subnivel $2p$. Por lo tanto, un subnivel de energía, es un conjunto de orbitales degenerados.

NÚMERO CUÁNTICO DE ESPÍN (m_s)

Este número cuántico no caracteriza los orbitales atómicos. Describe la interacción entre el campo magnético del electrón y el campo magnético aplicado. Si ambos campos magnéticos se refuerzan (vectorialmente están en el mismo sentido y dirección), se dice que el espín es $+1/2$ y en una descripción clásica, considerando que el electrón fuera una partícula macroscópica giraría en sentido antihorario. Si ambos campos magnéticos se contrarrestan (vectorialmente están en la misma dirección y sentidos opuestos), se dice que el espín es $-1/2$ y en una descripción clásica, considerando que el electrón fuera una partícula macroscópica, giraría en sentido horario.

Uhlenbeck y Goudsmit, en 1924, aportaron pruebas concluyentes del espín electrónico mediante un experimento en el que los electrones de átomos gaseosos se desdoblaban en dos sentidos opuestos al ser desviados por la interacción con un campo magnético.

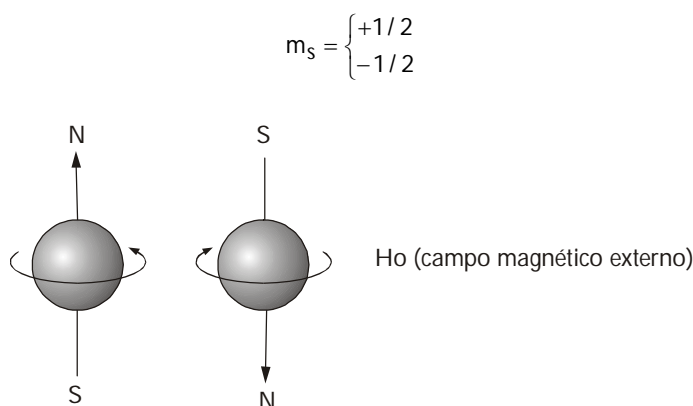


Figura 7.4: Espín electrónico en un campo magnético externo.

La energía relativa de los orbitales atómicos aumenta con la suma $(n + l)$

Según esta regla, la energía de los subniveles aumenta en este orden : $4s < 4p < 4d < 4f$

Para orbitales con el mismo valor de $(n + l)$, la energía del orbital aumenta con el incremento del número cuántico principal, n .

Según esta regla, la energía de los subniveles aumenta en este orden : $4f < 5d < 6p < 7s$

PROBLEMAS PROPUESTOS

01. De las siguientes combinaciones de números cuánticos, indique la que **no** es solución permitida de la ecuación de Schrödinger.
- a) 3, 2, 0, +1/2 b) 7, 0, 0, -1/2
c) 4, 3, -3, +1/2 d) 2, 2, 2, -1/2
e) 5, 4, 3, -1/2
02. Indicar qué representación cuántica es correcta:
- a) 2, 2, 0, -1/2 b) 2, 1, -2, +1/2
c) 3, 0, -3, +1/2 d) 4, 2, 2, +1/2
e) 5, 2, -1, -1/4
03. ¿Cuál de las representaciones correspondería un electrón ubicado en el subnivel 5p?
- a) 5, 0, 0, +1/2 b) 5, 1, 2, -1/2
c) 5, 2, 2, +1/2 d) 5, 2, 0, -1/2
e) 5, 1, -1, +1/2
04. ¿Cuántas de las siguientes combinaciones de números cuánticos **no** son soluciones permitidas de la ecuación de Schrödinger?
- | n | l | m_l | m_s |
|-----|-----|-------|-------|
| 3 | 0 | 0 | +1/2 |
| 2 | 1 | 1 | 0 |
| 6 | 5 | -3 | -1/2 |
| 3 | 2 | -1 | +1/4 |
| -2 | 1 | 0 | +1/2 |
| 2 | 2 | -2 | -1/2 |
| 7 | 4 | -3 | +1/2 |
| 3 | 1 | -1 | -1/2 |
| 4 | 0 | -1 | -1/2 |
- a) 3 b) 4 c) 5
d) 6 e) 7
05. ¿Cuántos electrones están asociados como máximo al número cuántico principal "n"?
- a) $2n+1$ b) n^2 c) $2n^2$
d) $2n$ e) n^2+1
06. ¿Qué orbital no presenta significado físico?
- a) 3 s b) 4 p_y c) 3 f_{z^3}
d) 5 d_{xy} e) 7g
07. Dada la configuración electrónica:
- $\uparrow \uparrow \downarrow$
np
- Estamos en contra de:
- a) Aufbau. b) Hund.
c) Pauli. d) Heisenberg.
e) De Broglie.
08. ¿Cuántos orbitales existen como máximo en un subnivel $g(l=4)$:
- a) 1 b) 3 c) 5
d) 7 e) 9
09. ¿Cuáles serían los posibles números cuánticos que corresponden a un electrón perteneciente al subnivel 4d?
- a) 4, 1, 0, -1/2 b) 4, 2, 2, +1/2
c) 4, 0, 0, +1/2 d) 4, 2, -3, -1/2
e) 4, 3, -2, -1/2
10. De acuerdo a la mecánica cuántica, ¿cuántos de los siguientes subniveles son imposibles de existir?
* 6 f * 2 d * 8 s * 5 h * 3 f
- a) 1 b) 2 c) 3
d) 4 e) 5
11. Hallar el número de electrones que presentan el estado cuántico (6, x, -2, y) donde **x** e **y** corresponden al número cuántico secundario y espín respectivamente.
- a) 4 b) 6 c) 8
d) 10 e) 12
12. El principio de exclusión de Pauli:
- a) Establece que los electrones tienen un comportamiento ondulatorio.
b) Limita el número de electrones que pueden ocupar un orbital a dos.
c) Dice que todos los electrones en un orbital tienen el mismo juego de cuatro números cuánticos.
d) Establece que el número cuántico del espín debe tener valores de -1/2 ó +1/2.
e) Señala que los electrones más cercanos al núcleo son más estables.
13. Determine. ¿Cuántas proposiciones son correctas?
* En el tercer nivel hay como máximo 18 electrones.
* En un orbital "d" hay como máximo 2 electrones.
* El subnivel "p" puede alojar un máximo de 6 electrones.
* Un subnivel "f" presenta 7 orbitales.
- a) 0 b) 1 c) 2
d) 3 e) 4
14. ¿Cómo varía la energía de un electrón en un átomo multielectrónico cuando el número cuántico principal es constante?
- a) Disminuye con el incremento de l .
b) Aumenta con el incremento de l .
c) Disminuye sin el aumento de l .
d) Aumenta sin el incremento de l .
e) La energía queda invariable.

26. Sabiendo que los números cuánticos para su electrón se listan en el siguiente orden: n, ℓ, m_ℓ, m_s ; diga qué conjunto es imposible para un electrón dentro de un átomo.
- a) 4, 2, 0, +1/2 b) 3, 2, -2, -1/2
c) 2, 0, 0, -1/2 d) 4, 3, -2, +1/2
e) 3, 2, -3, +1/2
27. Indique cuántos enunciados son falsos:
- * La energía de un electrón en el átomo de hidrógeno sólo depende del número cuántico principal
 - * La combinación de números cuánticos: 4, 3, 3, -1/2, es solución permitida para el electrón.
 - * La densidad electrónica en el núcleo de los orbitales 2p es nula.
 - * Uno de los orbitales 4f está caracterizado por 4, 3, -2.
- a) 0 b) 1 c) 2
d) 3 e) 4
28. Para un átomo con 4 niveles de energía. Calcule la suma del máximo y mínimo valor de la expresión:
- $$P = (n + \ell + m_\ell)^{2m_s}$$
- a) 17,5 b) 10,1 c) $0,91\sqrt{10}$
d) 14 e) $1,1\sqrt{10}$
29. Hallar el máximo valor de:
- $$R = \left(\frac{n+\ell}{m_\ell}\right)^{m_s}$$
- para todo $m_\ell \neq 0$ y además donde el mayor valor de "n" puede ser 3.
- a) 2 b) 1 c) $\sqrt{5}$
d) $\sqrt{7}$ e) $\sqrt{15}$
30. Se tiene un elemento con número atómico $Z=17$. Indique qué distribuciones pueden ser correctas, según la distribución de los electrones por orbitales.
- I. $[\text{Ne}] 3s^2 \frac{\uparrow\downarrow}{3p_x} \frac{\uparrow\downarrow}{3p_y} \frac{\uparrow\downarrow}{3p_z}$
II. $[\text{Ne}] 3s^2 \frac{\uparrow\uparrow}{3p_x} \frac{\uparrow\downarrow}{3p_y} \frac{\uparrow}{3p_z}$
III. $[\text{Ne}] 3s^2 \frac{\downarrow}{3p_x} \frac{\downarrow\uparrow}{3p_y} \frac{\downarrow\uparrow}{3p_z}$
- a) Sólo I b) Sólo II c) Sólo III
d) I y III e) II y III
31. Un orbital tiene como máximo:
- a) $3e^-$ b) $0e^-$ c) $2e^-$
d) $1e^-$ e) N.A.
32. De los siguientes subniveles, ¿cuál tendrá mayor energía?
- a) 5p b) 4s c) 3d
d) 4f e) 5s
33. Determinar el n.c. magnético para el último electrón de $3d^4$.
- a) -1 b) 0 c) +1
d) +2 e) -2
34. Ordenar de menor a mayor energía relativa los siguientes subniveles: 3s, 3p, 2s, 1s, 4d
- a) 4d, 3p, 2s, 3s, 1s
b) 3p, 4d, 3s, 2s, 1s
c) 1s, 2s, 3s, 3p, 4d
d) 1s, 2s, 3p, 3s, 4d
e) N.A.
35. ¿Qué valores puede asumir « ℓ » cuando: $n = 2$?
- a) 2 solamente. b) 1 y 2.
c) Solo 1. d) 0 y 1.
e) 1; 2; 3.
36. Determinar qué valores de números cuánticos son probables para un electrón del orbital «f».
- a) $n = 4; \ell = 3; m = -4; s = +1/2$
b) $n = 3; \ell = 1; m = -1; s = -1/2$
c) $n = 2; \ell = 2; m = 0; s = +1/2$
d) $n = 3; \ell = 1; m = +2; s = -1/2$
e) $n = 5; \ell = 3; m = -2; s = -1/2$
37. ¿Cuántos orbitales vacíos se encuentran presentes en $3p^2$?
- a) 0 b) 1 c) 2
d) 3 e) N.A.
38. En los siguientes subniveles, indique el más estable:
- a) 7s b) 4d c) 5f
d) 6p e) iguales
39. El número máximo de electrones que pueden albergar los subniveles «s», «p», «f» y «d» son respectivamente:
- a) 2; 6; 10; 14 b) 2; 5; 14; 10
c) 2; 6; 14; 10 d) 2; 6; 10; 12
e) N.A.
40. Indicar la cantidad de orbitales apareados que presenta $5p^4$.
- a) 1 b) 2 c) 3
d) 4 e) N.A.
41. ¿Qué estado cuántico es posible?

a) $2; 0; -1; +\frac{1}{2}$ b) $2; 0; 0; -\frac{1}{2}$

c) $4; 3; -4; -\frac{1}{2}$ d) $5; 1; -1; -\frac{3}{2}$

e) N.A.

42. Marque verdadero (V) o falso (F) según corresponda en:

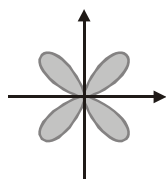
- * el número cuántico " ℓ " toma los valores: 0; 1; 2; 3; ...; n.
- * el valor de «m» determina los subniveles.
- * un orbital «d» tiene como máximo 10 e⁻.

- a) VVV b) FVV c) FFV
d) FFF e) N.A.

43. ¿Cuál es el mínimo valor de «n» para que los valores de « ℓ » sean: 0; 1; 2; 3; ...; (x + 1)?

- a) x b) x + 1 c) x + 2
d) x + 3 e) N.A.

44. El diagrama presenta como número cuántico secundario el valor:



- a) 0 b) 1 c) 2
d) 3 e) N.A.

45. Indique los enunciados que no corresponden a los números cuánticos:

- El n.c. secundario determina el subnivel de energía y la forma del orbital.
- El n.c. magnético define el orbital donde se encuentra el electrón en un determinado subnivel y la orientación espacial del orbital.
- El n.c. principal determina el nivel de energía y el tamaño o volumen del orbital.
- El n.c. spin nos indica el sentido de giro del electrón alrededor del núcleo.
- Los 4 n.c. derivan de la ecuación de onda de Shrödinger.

- a) Solo I b) Solo II c) I y III
d) IV y V e) I, II y IV

46. Para todo $m \neq 0$, si pertenece a la capa "M", hallar el máximo valor de "J" en:

$$J = \left(\frac{n + \ell}{m} \right)^s$$

donde "n", " ℓ ", "m" y "s" representan los números cuánticos.

a) 2 b) 1 c) $\sqrt{3}$

d) $\sqrt{5}$ e) N.A.

47. Determine el máximo valor que puede tomar la relación:

$$\left(\frac{n + \ell}{s} \right)^m ; \text{ para: } n = 3.$$

- a) 25 b) 50 c) 10
d) 100 e) N.A.

48. ¿Qué proposición es incorrecta?

- En un determinado nivel, el orden de estabilidad de los subniveles es: $f < d < p < s$
- El orbital 1s es el de mayor estabilidad para todos los átomos.
- Un orbital «f» presenta como máximo 2 electrones.
- El orbital «s» presenta forma dilobular.

- a) I y II b) Solo IV c) Solo II
d) II y IV e) I y IV

49. ¿Cuántos electrones cumplen con la siguiente expresión de n.c. $(5; 3; x; +1/2)$?; donde «x» es la variable?

- a) 2 b) 7 c) 14
d) 5 e) N.A.

50. Con respecto a los números cuánticos presentados:

- $3; 2; +2$;
- $4; 0; 0$;
- $3; 1; 0$;

Señalar lo incorrecto:

- I posee mayor energía relativa.
- el orbital en II es de forma esférica.
- II y III presentan la misma energía.
- II presenta menor energía relativa.
- N.A.

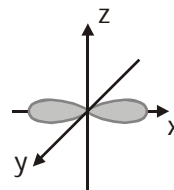
51. El n.c. secundario en $3d^7$ es:

- a) 0 b) 1 c) 2
d) 3 e) N.A.

52. ¿Cuántos orbitales desapareados hay en $4d^7$?

- a) 1 b) 2 c) 3
d) 4 e) N.A.

53. El diagrama representa el orbital:

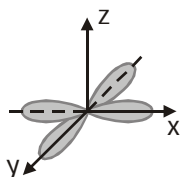


- a) s b) P_y c) d_{xy}
 d) P_x e) N.A.

54. ¿Qué secuencia de números cuánticos muestra incorrectamente a un electrón?

- I. 4; 0; 0; $-\frac{1}{2}$ IV. 1; 1; -1; $+\frac{1}{2}$
 II. 3; 1; -2; $+\frac{1}{2}$ V. 2; 1; 0; $-\frac{1}{2}$
 III. 2; 0; 0; $-\frac{1}{2}$

55. Para un electrón que se encuentra en el siguiente orbital:



Marque lo incorrecto:

- a) El valor mínimo del n.c. principal es $n = 3$.
 b) El único valor del n.c. secundario es $l = 2$.
 c) Los valores posibles del n.c. magnético son:
 $m = -2; -1; 0; +1; +2$.
 d) Los valores posibles del n.c. de spin son:
 $+\frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$.
 e) Representa un orbital «f».

56. Hallar los n.c. para el último electrón del ${}^{40}_{20}\text{Ca}$.

- a) 3; 1; +1; $-\frac{1}{2}$ b) 4; 0; 0; $+\frac{1}{2}$
 c) 4; 0; 0; $-\frac{1}{2}$ d) 3; 1; -1; $+\frac{1}{2}$
 e) N.A.

57. Se tiene un átomo con 4 niveles de energía, ¿cuál es el máximo valor para: $(n + l + m_l)^{2m_s}$?

- a) 6 b) 8 c) 10
 d) 12 e) 7

58. Se tiene un átomo con 5 niveles, calcular el máximo valor para la expresión:

$$E = \left(\frac{l - m_l}{m_s} \right)^n$$

- a) 2^{10} b) 2^{20} c) 2^{30}
 d) 2^{16} e) 2^{15}

59. ¿Cuántos electrones como máximo tienen un estado cuántico igual a $\left(n, x, y, -\frac{1}{2} \right)$ donde x e y representan los valores del número cuántico secundario y magnético respectivamente? (Dato: $n = 3$).

- a) 9 b) 16 c) 25
 d) 32 e) 50

60. Indicar las proposiciones correctas:

- I. Para $l = 0$ se cumple que m_l tomaría $(2Q + 1)$ valores.
 II. Si $n = 2$ el juego de valores de l y m_l son (0,1) y (0, +1, -1)
 III. Si $n = x$, entonces l tomará "x" valores.
 IV. Para cada valor de "l" existen $(2l + 1)$ valores para " m_l ".
 V. Para cualquier valor de m_l existe solamente dos valores para m_s

- a) Todas b) I, III y V c) II y III
 d) Ninguna e) I, V y IV

Claves

01.	<i>d</i>
02.	<i>d</i>
03.	<i>e</i>
04.	<i>c</i>
05.	<i>c</i>
06.	<i>c</i>
07.	<i>b</i>
08.	<i>e</i>
09.	<i>b</i>
10.	<i>c</i>
11.	<i>c</i>
12.	<i>b</i>
13.	<i>e</i>
14.	<i>b</i>
15.	<i>c</i>
16.	<i>d</i>
17.	<i>d</i>
18.	<i>a</i>
19.	<i>d</i>
20.	<i>e</i>
21.	<i>a</i>
22.	<i>d</i>
23.	<i>e</i>
24.	<i>c</i>
25.	<i>b</i>
26.	<i>e</i>
27.	<i>b</i>
28.	<i>b</i>
29.	<i>c</i>
30.	<i>e</i>

31.	<i>c</i>
32.	<i>d</i>
33.	<i>c</i>
34.	<i>c</i>
35.	<i>d</i>
36.	<i>e</i>
37.	<i>b</i>
38.	<i>b</i>
39.	<i>c</i>
40.	<i>a</i>
41.	<i>b</i>
42.	<i>d</i>
43.	<i>c</i>
44.	<i>c</i>
45.	<i>d</i>
46.	<i>d</i>
47.	<i>d</i>
48.	<i>b</i>
49.	<i>b</i>
50.	<i>d</i>
51.	<i>c</i>
52.	<i>c</i>
53.	<i>d</i>
54.	<i>IV</i>
55.	<i>e</i>
56.	<i>c</i>
57.	<i>c</i>
58.	<i>e</i>
59.	<i>a</i>
60.	<i>e</i>