Introducción

Las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger y de Dirac para átomos de hidrógeno dan funciones de onda, ψ, que describen los diversos estados disponibles para un solo electrón de hidrógeno.

Cada uno de estos posibles estados se describe mediante cuatro números cuánticos que podemos usar para designar los arreglos electrónicos en todos los átomos. Estos números cuánticos juegan un papel importante en la descripción de los niveles de energía de los electrones y las formas de los orbitales que describen las distribuciones de electrones en el espacio.

Números cuánticos

Número cuántico principal (n). Indica el nivel de energía principal, o capa, que ocupa un electrón. Puede ser cualquier número entero positivo.

$$n = 1, 2, 3, \ldots \tag{1}$$

Número cuántico del momento angular (l). Corresponde con el subnivel, o subcapa, del orbital atómico que puede ocupar un electrón. Este número puede tomar valores integrales desde 0 hasta $(n-1)$.

$$l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1) \tag{2}$$

Número cuántico magnético (m_l). Indica un orbital específico dentro de una subcapa, debido a que los orbitales dentro de una subcapa dada difieren en sus orientaciones en el espacio, pero no en sus energías. Puede ser cualquier número desde $-l$ hasta $+l$.

$$m_l = -l, \ldots, 0, \ldots, +l \tag{3}$$

Número cuántico de espín (m_s). Se refiere al giro de un electrón y la orientación del campo magnético producido por este giro. Solo puede tomar dos valores: $-1/2$ o $+1/2$.

$$m_s = \pm\frac{1}{2} \tag{4}$$

Problemas

1. Responde. ¿Cuáles son los valores de n y l para las subcapas siguientes? (a) 1s (b) 3s (c) 5p (d) 3d (e) 4f

✍ Solución

Existe una notación de letras para cada valor de l. Cada letra corresponde con un subnivel y un orbital de forma diferente: s, cuando $l = 0$; p, si $l = 1$; d, cuando $l = 2$; y f, si $l = 3$.

Por otro lado, en una subcapa del tipo Ab, A indica el valor del número cuántico principal, mientras que b representa (con letra) al número cuántico del momento angular. Por tanto, en (a) $n = 1$ y $l = 0$; en (b), $n = 3$ y $l = 0$; en (c), $n = 5$ y $l = 1$; en (d), $n = 3$ y $l = 2$; y en (e), $n = 4$ y $l = 3$.

2. Responde. ¿Cuál es el número máximo de electrones en un átomo con los números cuánticos siguientes?

(a) $n = 3$ y $l = 1$
(b) $n = 3$ y $l = 2$
(c) $n = 3$, $l = 0$ y $m_l = -1$
(d) $n = 3$, $l = 1$, $m_l = -1$
(e) $n = 3$, $l = 1$, $m_l = 0$ y $m_s = -1/2$

✍ Solución

Las subcapas se componen de entre uno y siete orbitales, de acuerdo con el valor de l. La subcapa s cuenta con un orbital; p, con 3 orbitales; d, con 5 orbitales; y f, con 7 orbitales.

Cada orbital corresponde con un valor de m_l y en él se asigna uno o dos electrones (como máximo), de acuerdo con el Principio de Aufbau, la Regla de Hund y el Principio de Exclusión de Pauli que estudiaremos durante el próximo taller.

Por otro lado, a cada electrón de un orbital le corresponde un valor de m_s, considerando que dos electrones en un mismo orbital no pueden tener (nunca) el mismo valor de m_s.

De acuerdo con lo anterior, el número máximo de electrones en (a) son 6, ya que los números cuánticos $n = 3$ y $l = 1$ representan la subcapa 3p con 3 orbitales; en (b), son 10 electrones, debido a que $n = 3$ y $l = 2$ corresponden con la subcapa 3d con 5 orbitales; en (c), ningún electrón, porque es imposible una combinación entre $l = 0$ y $m_l = -1$; en (d), son 2 electrones ya que $n = 3$, $l = 1$ y $m_l = -1$ representan uno de los orbitales 3p; en (e), 1 electrón, ya que $n = 3$, $l = 1$, $m_l = 0$ y $m_s = -1/2$ representan a uno de los electrones en un orbital 3p.

3. Indica cuáles son los posibles valores de m_l para los subniveles que se mencionan a continuación.

(a) Subnivel p
(b) Subnivel f
(c) Todos los subniveles donde $n = 3$

✍ Solución

Los posibles valores de m_l dependen en gran parte del valor de l, puesto que $m_l = -l, \ldots, 0, \ldots, +l$; por tanto, en (a), $m_l = -1, 0, +1$; y en (b), $m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$.

En el caso de (c), si $n = 3$, $l = 0, 1, 2$, debido a que l puede tener cualquier valor desde 0 hasta $(n-1)$; por tanto, si $l = 0$, $m_l = 0$; si $l = 1$, $m_l = -1, 0, +1$; y si $l = 2$, $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$.

4. Responde. ¿Cuántos orbitales individuales hay en la tercera capa? Escribe los valores de n, l, m_l y m_l para cada uno y rotula cada conjunto con las designaciones s, p, d y f.

✍ Solución

Este problema se relaciona con el 3-c. Ahí vimos que en la tercera capa ($n=3$) solo hay tres valores del número cuántico angular: $l=0,1,2$, por lo que en esta capa hay 9 orbitales: un orbital s, tres orbitales p y cinco orbitales d. Por otro lado, en cada orbital se pueden colocar dos electrones como máximo, esto implica que por cada orbital tendremos dos conjuntos distintos de números cuánticos. Para esto, asignaremos valores de $m_s = -1/2$ para un conjunto de números cuánticos en un orbital y de $m_s = +1/2$ para otro conjunto.

Para entender de mejor manera el problema, y adaptarnos a lo que veremos en el taller siguiente, representemos a cada orbital como una casilla y asignemos dentro de cada una un valor de m_l, de acuerdo con el orbital que corresponda:

3s	$m_l=0$				
3p	$m_l=-1$	$m_l=0$	$m_l=+1$		
3d	$m_l=-2$	$m_l=-1$	$m_l=0$	$m_l=+1$	$m_l=+2$

Por tanto, los valores de n, l y m_l para cada orbital, son:

Orbital	n	l	m_l	m_s
3s	3	0	0	$-1/2$
3s	3	0	0	$+1/2$
3p	3	1	-1	$-1/2$
3p	3	1	-1	$+1/2$
3p	3	1	0	$-1/2$
3p	3	1	0	$+1/2$
3p	3	1	+1	$-1/2$
3p	3	1	+1	$+1/2$
3d	3	2	-2	$-1/2$
3d	3	2	-2	$+1/2$
3d	3	2	-1	$-1/2$
3d	3	2	-1	$+1/2$
3d	3	2	0	$-1/2$
3d	3	2	0	$+1/2$
3d	3	2	+1	$-1/2$
3d	3	2	+1	$+1/2$
3d	3	2	+2	$-1/2$
3d	3	2	+2	$+1/2$

5. Indica si los conjuntos de números cuánticos siguientes, con orden n, l, m_l y m_s, son posibles o no.

(a) (3,3,-3,$-1/2$)
(b) (2,1,0,$+1/2$)
(c) (4,4,+2,$-1/2$)
(d) (3,2,-3,$+1/2$)
(e) (1,0,0,1)

✍ Solución

El conjunto (a) no es posible, debido a que n no puede ser igual que l (siempre es mayor); el conjunto (b) es posible; el conjunto (c) no es posible; el conjunto (d) no es posible, ya que m_l solo puede tener valores de $-l$ a $+l$ (incluyendo el 0); y el conjunto (e) no es posible, porque m_s solo puede tener valores de $\pm 1/2$.

Recursos adicionales

1. Apoyo educativo virtual. (s.f.). Los números cuánticos [Web]. Disponible en www.edutics.mx/cDJ.
2. Hernández E., D. y Astudillo S., L. (2013). Conociendo los números cuánticos [Artículo]. Disponible en www.edutics.mx/cDZ.
3. Químicas. (s.f.). Los orbitales atómicos [Web]. Disponible en www.edutics.mx/cDo.
4. Traful. (mayo, 2017). Números cuánticos [Video]. Disponible en www.edutics.mx/cDw.
5. Traful. (mayo, 2017). Orbitales atómicos [Video]. Disponible en www.edutics.mx/cDi.