

## **Física II**

### Relación 5: Orígenes de la Física atómica

**Juan J. Meléndez**

## Problema 5.1

Determinar la energía y longitud de onda del fotón correspondiente a la primera y última línea de las series de Lyman, Balmer, Paschen y Brackett del átomo de hidrógeno.

La longitud de onda del fotón emitido cuando un electrón pasa de un nivel  $n_2$  a un nivel  $n_1$  verifica

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (1)$$

donde  $R_H = 1.096776 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  es la constante de Rydberg. De acuerdo con (1), la mínima longitud de onda en una serie corresponde a  $n_2 \rightarrow \infty$ , mientras que la menor longitud corresponde a  $n_2 = n_1 + 1$ .

La serie de Lyman corresponde a transiciones hasta el nivel  $n_1 = 1$ . En esta serie, la mayor longitud de onda corresponde a  $n_2 = 2$ . Entonces, para la serie de Lyman,

$$\frac{1}{\lambda_{\text{mín}}^{\text{Lyman}}} = R_H$$

y

$$\frac{1}{\lambda_{\text{máx}}^{\text{Lyman}}} = R_H \left( 1 - \frac{1}{4} \right) = \frac{3}{4} R_H,$$

esto es,

$$\lambda_{\text{mín}}^{\text{Lyman}} = 91.18 \text{ nm}$$

y

$$\lambda_{\text{máx}}^{\text{Lyman}} = 121.57 \text{ nm}$$

La serie de Balmer corresponde a transiciones al nivel  $n_1 = 2$ , de manera que la máxima longitud de onda corresponde a  $n_2 = 3$ . Las longitudes de onda mínima y máxima verifican entonces

$$\frac{1}{\lambda_{\text{mín}}^{\text{Balmer}}} = \frac{1}{4} R_H$$

y

$$\frac{1}{\lambda_{\text{máx}}^{\text{Balmer}}} = R_H \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) = \frac{5}{36} R_H,$$

de manera que

$$\lambda_{\text{mín}}^{\text{Balmer}} = 364.71 \text{ nm}$$

y

$$\lambda_{\text{máx}}^{\text{Balmer}} = 656.47 \text{ nm}$$

Para la serie de Paschen es  $n_1 = 3$ . Entonces

$$\frac{1}{\lambda_{\text{mín}}^{\text{Paschen}}} = \frac{1}{9} R_H$$

y

$$\frac{1}{\lambda_{\text{máx}}^{\text{Paschen}}} = R_H \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{16} \right) = \frac{7}{144} R_H,$$

de manera que

$$\lambda_{\text{mín}}^{\text{Paschen}} = 820.59 \text{ nm}$$

y

$$\lambda_{\text{máx}}^{\text{Paschen}} = 1875.63 \text{ nm}$$

Finalmente, la serie de Brackett corresponde a  $n_1 = 4$ . En esta serie,

$$\frac{1}{\lambda_{\text{mín}}^{\text{Brackett}}} = \frac{1}{16} R_H$$

y

$$\frac{1}{\lambda_{\text{máx}}^{\text{Brackett}}} = R_H \left( \frac{1}{16} - \frac{1}{25} \right) = \frac{9}{400} R_H,$$

de manera que

$$\lambda_{\text{mín}}^{\text{Brackett}} = 1458.82 \text{ nm}$$

y

$$\lambda_{\text{máx}}^{\text{Brackett}} = 4052.28 \text{ nm}$$

## Problema 5.2

Utilizando el modelo de Bohr, calcular, para el átomo de hidrógeno en su estado fundamental, la velocidad orbital y la energía cinética del electrón y la energía potencial electrostática del átomo.

En el modelo de Bohr, la velocidad de un electrón en el nivel  $n$ -ésimo está dada por

$$v_n = \kappa \frac{Ze^2}{\hbar} \frac{1}{n}, \quad (2)$$

donde  $\kappa$  es la constante de Coulomb,  $e$  es la carga del electrón,  $\hbar$  es la constante de Planck reducida y  $Z = 1$  para el átomo de hidrógeno. En nuestro caso, en el estado fundamental  $n = 1$  es

$$v_1 = \kappa \frac{e^2}{\hbar} = 2.19 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

y la energía cinética, por tanto, es

$$K_1 = \frac{1}{2} m_e v_1^2 = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13.6 \text{ eV}$$

Por otro lado, el radio de la  $n$ -ésima órbita está dado por

$$r_n = \frac{a_0}{Z} n, \quad (3)$$

de manera que la energía potencial electrostática del átomo de hidrógeno es

$$E_{p,n} = -\kappa \frac{Ze^2}{r_n} = -\kappa \frac{Z^2 e^2}{a_0} \frac{1}{n} = -\kappa \frac{mZ^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n},$$

esto es, numéricamente,

$$E_{p,n} = -4.36 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -27.2 \text{ eV}$$

### Problema 5.3

Un átomo de hidrógeno se encuentra en su primer estado excitado. Utilizando el modelo atómico de Bohr, calcular

- el radio de la órbita del electrón;
- su momento lineal y su momento angular;
- las energías cinética, potencial y total.

a) Teniendo en cuenta la expresión (3), para el primer estado excitado ( $n = 2$ ) se tiene

$$r_2 = \frac{4}{a_0} = 2.12 \text{ \AA}$$

b) La velocidad del electrón en el primer estado excitado está dada por (2) con  $n = 2$ , de manera que el momento lineal en ese estado es

$$p_2 = mv_2 = \kappa \frac{me^2}{2\hbar} = 9.96 \cdot 10^{-25} \text{ kg}\cdot\text{m/s}, \quad (4)$$

mientras que el momento angular, por hipótesis del modelo de Bohr, es

$$L_2 = 2\hbar = 2.11 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

c) La energía cinética del sistema se puede calcular a partir de (4) como

$$K_2 = \frac{p_2^2}{2m_e} = 5.45 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 3.4 \text{ eV},$$

mientras que la energía total del segundo estado excitado es

$$\varepsilon_2 = -\frac{E_1}{4} = -3.4 \text{ eV}$$

Teniendo en cuenta finalmente que las energías potencial y cinética están relacionadas, en un potencial central, como

$$K = -\frac{1}{2}E_p,$$

resulta finalmente

$$E_{p,2} = -2K = 6.8 \text{ eV}$$

### Problema 5.4

Un átomo de hidrógeno en su quinto estado excitado emite un fotón de longitud de onda 1090 nm. Calcular el momento angular máximo que puede tener el electrón tras la emisión.

Cuando el electrón, que inicialmente se encuentra en un estado excitado de número cuántico principal  $n_i > 1$ , se desexcita emitiendo un fotón, la energía de este se relaciona con la de los estados inicial y final del electrón como

$$\varepsilon_i - \varepsilon_f = \varepsilon_{\text{fotón}},$$

esto es, en el átomo de hidrógeno,

$$-\frac{E_1}{n_i^2} + \frac{E_1}{n_f^2} = E_1 \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = \frac{hc}{\lambda},$$

donde  $n_f$  es el número cuántico principal del estado al que se desexcita el electrón,  $\lambda$  es la longitud de onda del fotón emitido,  $h$  es la constante de Planck y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. De aquí,

$$\frac{1}{n_f^2} = \frac{1}{n_i^2} + \frac{hc}{\lambda E_1},$$

esto es

$$n_f = \left( \frac{1}{n_i^2} + \frac{hc}{\lambda E_1} \right)^{-1/2}$$

Sustituyendo valores numéricos, teniendo en cuenta que el quinto estado excitado tiene  $n_i = 6$ , resulta

$$n_f = 3,$$

de manera que el electrón decae al segundo estado excitado al emitir el fotón de esa longitud de onda. En tal caso, el máximo valor permitido para el número cuántico orbital  $\ell$  es 2, de manera que el momento angular máximo que puede tener el electrón en ese estado, en módulo, es

$$|L_{\text{máx}}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

Numéricamente,

$$|L_{\text{máx}}| = 2.58 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 1.61 \cdot 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

## Problema 5.5

Demostrar que el número de estados en el átomo de hidrógeno para un valor dado del número cuántico principal  $n$  es  $2n^2$ .

Para un valor dado del número cuántico principal  $n$ , los valores de  $\ell$  posibles están comprendidos entre 0 y  $n - 1$  de uno en uno. Para cada uno de estos valores de  $\ell$ , son posibles  $2\ell + 1$  estados, correspondientes a los valores posibles de  $m_\ell$ . Teniendo en cuenta, además, que para valor del par  $\ell$ ,  $m_\ell$  son posibles dos estados de espín, correspondientes a los valores permitidos de  $m_s$ , el número de estados compatible con un valor dado de  $n$  está dado por la cantidad

$$S = \sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1) = 2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1), \quad (5)$$

que es una serie aritmética de término general

$$a_\ell = 2\ell + 1$$

La suma de  $N$  términos de una serie aritmética está dada por

$$S_N = \sum_{n=1}^N a_n = N \frac{a_1 + a_N}{2} \quad (6)$$

y, antes de poder utilizar (6) en (5), debemos hacer que el primer término de la serie corresponda al término  $a_1$ . Para ello, definamos  $p = \ell + 1$ , de modo que  $\ell = 0$  corresponde a  $p = 1$  y  $\ell = n - 1$  corresponde a  $p = n$ . La serie (5) se escribe entonces como

$$S = 2 \sum_{p=1}^n [2(p-1) + 1] = 2 \sum_{p=1}^n (2p-1),$$

donde ahora el término general es

$$b_p = 2p - 1$$

Utilizando (6), la expresión (5) da entonces

$$S = 2 \times \frac{n}{2} \left( \underbrace{b_1}_1 + \underbrace{b_n}_{2n-1} \right) = n(1 + 2n - 1) = 2n^2,$$

como queríamos demostrar.

## Problema 5.6

Para el estado fundamental del átomo de hidrógeno,

- demostrar que la función de onda está normalizada;
- calcular la probabilidad de encontrar al electrón entre  $r_1 = \frac{a_0}{2}$  y  $r_2 = \frac{3a_0}{2}$ ;
- calcular la distancia más probable entre el electrón y el núcleo atómico.

La función de onda del estado fundamental del átomo de hidrógeno es

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0},$$

donde  $a_0$  es el radio de Bohr.

- La función de onda está normalizada si verifica

$$\int |\psi_{1s}(r)|^2 d\vec{r} \equiv \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty |\psi_{1s}(r)|^2 r^2 \cos \theta dr d\theta d\phi = 1 \quad (7)$$

En este caso, como la función de onda no depende de las variables angulares, la integración en  $\theta$  y  $\phi$  se realiza trivialmente, y (7) se escribe

$$4\pi \int_0^\infty |\psi_{1s}(r)|^2 r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr = 1 \quad (8)$$

Calculemos entonces la integral que aparece en (8). Integrando por partes, resulta

$$\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr =$$

$$\begin{aligned}
&= \left\| \begin{array}{l} u = r^2 \quad du = 2r \, dr \\ dv = e^{-2r/a_0} \, dr \quad v = -\frac{a_0}{2} e^{-2r/a_0} \end{array} \right\| = -\frac{a_0}{2} r^2 e^{-2r/a_0} \Big|_0^\infty + a_0 \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} \, dr = \\
&= \left\| \begin{array}{l} u = r \quad du = dr \\ dv = e^{-2r/a_0} \, dr \quad v = -\frac{a_0}{2} e^{-2r/a_0} \end{array} \right\| = -\frac{a_0^2}{2} r e^{-2r/a_0} \Big|_0^\infty + \frac{a_0^2}{2} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} \, dr = \\
&= \frac{a_0^2}{2} \left( -\frac{a_0}{2} e^{-2r/a_0} \right) \Big|_0^\infty = \frac{a_0^3}{4},
\end{aligned}$$

de modo que, sustituyendo en (8), resulta que la función de onda del estado fundamental del átomo de hidrógeno está efectivamente normalizada.

- b) La probabilidad de encontrar a un electrón en un elemento de volumen  $d\vec{r}$  centrado en el punto  $\vec{r}$  está dada por

$$dP(\vec{r}) = |\psi_{1s}(r)|^2 d\vec{r}$$

o bien, teniendo en cuenta que esta probabilidad no depende de las variables angulares,

$$dP(r) = 4\pi |\psi_{1s}(r)|^2 r^2 dr \quad (9)$$

La probabilidad de encontrar al electrón en un cierto intervalo de distancias se calcula entonces integrando (9) al intervalo en cuestión. Es decir,

$$P(r_1 < r < r_2) = 4\pi \int_{r_1}^{r_2} |\psi_{1s}(r)|^2 r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_{r_1}^{r_2} r^2 e^{-2r/a_0} dr \quad (10)$$

La integral que aparece en (10) se calcula nuevamente por partes:

$$\begin{aligned}
&\int r^2 e^{-2r/a_0} = \\
&= \left\| \begin{array}{l} u = r^2 \quad du = 2r \, dr \\ dv = e^{-2r/a_0} \, dr \quad v = -\frac{a_0}{2} e^{-2r/a_0} \end{array} \right\| = -\frac{a_0}{2} r^2 e^{-2r/a_0} + a_0 \int r e^{-2r/a_0} \, dr = \\
&= \left\| \begin{array}{l} u = r \quad du = dr \\ dv = e^{-2r/a_0} \, dr \quad v = -\frac{a_0}{2} e^{-2r/a_0} \end{array} \right\| = -\frac{a_0}{2} r^2 e^{-2r/a_0} + a_0 \left( -\frac{a_0}{2} \right) r e^{-2r/a_0} + \\
&+ \frac{a_0^2}{2} \underbrace{\int e^{-2r/a_0} \, dr}_{-\frac{a_0}{2} e^{-2r/a_0}} = -\left( \frac{a_0}{2} r^2 + \frac{a_0^2}{2} r + \frac{a_0^3}{4} \right) e^{-2r/a_0} = -\frac{a_0}{2} \left( r^2 + a_0 r + \frac{a_0^2}{2} \right) e^{-2r/a_0}
\end{aligned}$$

Entonces, teniendo en cuenta que  $r_1 = \frac{a_0}{2}$  y  $r_2 = \frac{3a_0}{2}$ , resulta

$$\begin{aligned}
\int_{r_1}^{r_2} r^2 e^{-2r/a_0} &= -\frac{a_0}{2} \left( r^2 + a_0 r + \frac{a_0^2}{2} \right) e^{-2r/a_0} \Big|_{r_1}^{r_2} = \\
&= \frac{a_0}{2} \left[ \left( \frac{a_0^2}{4} + \frac{a_0^2}{2} + \frac{a_0^2}{2} \right) e^{-1} - \left( \frac{9a_0^2}{4} + \frac{3a_0^2}{2} + \frac{a_0^2}{2} \right) e^{-3} \right] = \frac{5a_0^2}{8} e^{-1} - \frac{17a_0^3}{8} e^{-3} = \\
&= \frac{5a_0^3}{8} e^{-1} \left( 1 - \frac{17}{5} e^{-2} \right),
\end{aligned}$$

que, sustituida en (10), da el resultado que pide el problema:

$$P(r_1 < r < r_2) = \frac{5}{2} e^{-1} \left( 1 - \frac{17}{5} e^{-2} \right) = 0.496 \approx 0.5$$

- c) La densidad de probabilidad de que un electrón se encuentre a una distancia  $r$  del núcleo está dada por la función de distribución radial,

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi_{1s}(r)|^2 = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0},$$

y esta función tiene un máximo a una distancia  $\bar{r}$  que verifica

$$\left. \frac{dP(r)}{dr} \right|_{\bar{r}} = 0 \quad (11)$$

En nuestro caso, la condición (11) equivale a

$$\left(1 - \frac{\bar{r}}{a_0}\right) \bar{r} e^{-2\bar{r}/a_0} = 0,$$

cuyas soluciones son

$$\bar{r}_1 = 0$$

y

$$\bar{r}_2 = a_0$$

Para identificar cuál de estas soluciones corresponde a un máximo de probabilidad, debemos calcular la segunda derivada de la función de distribución radial:

$$\frac{d^2P(r)}{dr^2} = \frac{8}{a_0^3} \left(1 - \frac{4r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) e^{-2r/a_0},$$

y es fácil verificar que

$$\left. \frac{d^2P(r)}{dr^2} \right|_{r_1} = \frac{8}{a_0^3} > 0,$$

de manera que la probabilidad de encontrar al electrón es mínima en  $r_1 = 0$ . Por otra parte,

$$\left. \frac{d^2P(r)}{dr^2} \right|_{r_2} = -\frac{8}{a_0^3} e^{-2} < 0,$$

así que la máxima probabilidad de encontrar al electrón se da en  $r_2 = a_0$ .

## Problema 5.7

Para un electrón en el estado  $2p$  del átomo de hidrógeno, determinar la distancia más probable entre el electrón y el núcleo.

Las funciones de onda de los estados  $2p$  del átomo de hidrógeno son las siguientes:

$$\psi_{2p,\pm 1}(r) = \frac{1}{\sqrt{64\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{i\phi} e^{-r/2a_0}$$

$$\psi_{2p,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-r/2a_0}$$

Por otra parte, como sabemos, la probabilidad de que un electrón se encuentre a una cierta distancia radial del núcleo está dada por la función de distribución radial, que se calcula eliminando

las componentes angulares de la probabilidad de presencia. En nuestro caso, para los estados  $2p_{\pm 1}$ , esta densidad de probabilidad radial es

$$\begin{aligned} P_{2p,\pm 1}(r) &= r^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi_{2p,\pm 1}(r, \theta, \varphi)|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \frac{1}{64\pi a_0^5} r^4 e^{-r/a_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^3 \theta \, d\theta \, d\varphi = \\ &= \frac{1}{64\pi a_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^4 e^{-r/a_0} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin^3 \theta \, d\theta \end{aligned} \quad (12)$$

La integral en  $\varphi$  de (12) se calcula trivialmente:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi$$

Por otra parte, la integral en  $\theta$  es

$$\int_0^\pi \sin^3 \theta \, d\theta = \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) \sin \theta \, d\theta$$

o bien, introduciendo el cambio de variable  $x = \cos \theta$ ,

$$\int_1^{-1} (1 - x^2) (-dx) = \int_{-1}^1 (1 - x^2) dx = \left(x - \frac{x^3}{3}\right) \Big|_{-1}^1 = \frac{4}{3}$$

En definitiva, la ecuación (12) queda, tras simplificar,

$$P_{2p,\pm 1}(r) = \frac{1}{24a_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^4 e^{-r/a_0} \quad (13)$$

Análogamente, para el estado  $2p_0$ ,

$$\begin{aligned} P_{2p,0}(r) &= r^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi_{2p,0}(r, \theta, \varphi)|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = \\ &= \frac{1}{32\pi a_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^4 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta \, d\theta \end{aligned} \quad (14)$$

donde ahora, usando de nuevo el cambio de variable  $x = \cos \theta$ ,

$$\int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta \, d\theta = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3},$$

de manera que (14) queda finalmente

$$P_{2p,0}(r) = \frac{1}{24a_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^4 e^{-r/a_0} \quad (15)$$

Según (13) y (15), las densidades de probabilidad radial para los estados  $2p$  son independientes del valor de  $m_\ell$  y ambas tienen, por tanto, los mismos máximos y mínimos. Para calcular estos extremos, hagamos de nuevo

$$\left. \frac{dP_{2p}(r)}{dr} \right|_{\bar{r}} = 0,$$

que lleva a

$$\frac{1}{a_0} \left(\frac{\bar{r}}{a_0}\right)^3 \left(4 - \frac{\bar{r}}{a_0}\right) e^{-\bar{r}/a_0} = 0 \quad (16)$$

Las soluciones de (16) son

$$\bar{r}_1 = 0$$

que corresponde a un mínimo de probabilidad (como se comprueba sin más que calcular la derivada segunda de la función de distribución radial), y

$$\boxed{\bar{r}_2 = 4a_0}$$

que corresponde al máximo de probabilidad que pide el problema.

## Problema 5.8

La función de probabilidad radial de un átomo hidrogenoide (esto es, un átomo con número atómico  $Z$  y un solo electrón) en su estado fundamental se puede escribir como

$$P(r) = Cr^2 e^{-2Zr/a_0},$$

donde  $C$  es una constante y  $a_0$  es el radio de Bohr. Demostrar que  $P(r)$  tiene su valor máximo para

$$r_{\text{máx}} = \frac{a_0}{Z}$$

El máximo de la función  $P(r)$  se alcanza para las distancias  $\bar{r}$  que verifican las condiciones

$$\left. \frac{dP(r)}{dr} \right|_{\bar{r}} = 0 \quad (17)$$

$$\left. \frac{d^2P(r)}{dr^2} \right|_{\bar{r}} < 0 \quad (18)$$

En nuestro caso, (17) lleva a

$$2C \left( 1 - \frac{Z}{a_0} \bar{r} \right) \bar{r} e^{-2Z\bar{r}/a_0} = 0,$$

cuyas soluciones son

$$\bar{r}_1 = 0$$

y

$$\bar{r}_2 = \frac{a_0}{Z}$$

La derivada segunda de la función  $P(r)$ , por otra parte, es

$$\frac{d^2P(r)}{dr^2} = 2Ce^{-2Zr/a_0} \left( 1 - \frac{4Zr}{a_0} + \frac{2Zr^2}{a_0^2} \right),$$

de modo que

$$\left. \frac{d^2P(r)}{dr^2} \right|_{\bar{r}_1} = 2C > 0$$

y

$$\left. \frac{d^2P(r)}{dr^2} \right|_{\bar{r}_2} = -2Ce^{-2} < 0$$

Según esto, la solución  $\bar{r}_1 = 0$  corresponde a un mínimo de probabilidad, y la solución  $\bar{r}_2 = \frac{a_0}{Z}$  corresponde a un máximo, como queríamos demostrar.

## Problema 5.9

Escribir los números cuánticos compatibles con las capas electrónicas K, L, y M.

La capa K corresponde al valor  $n = 1$  del número cuántico principal. Este valor solo es compatible con  $\ell = 0$  que, a su vez, solo es compatible con  $m_\ell = 0$ . Los números cuánticos  $(n, \ell, m_\ell, s, m_s)$  de los electrones en la capa K son, por tanto,

$$\left( 1, 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \text{ y } \left( 1, 0, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right),$$

de modo que esta capa solo puede albergar dos electrones.

La capa L corresponde a  $n = 2$ , que es compatible con  $\ell = 1$  y  $\ell = 0$ . Los valores de  $m_\ell$  compatibles con un  $\ell$  dado están comprendidos entre  $-\ell$  y  $\ell$ , de uno en uno. Los números cuánticos de los electrones en la capa L son entonces

$$\begin{aligned} \ell = 0 &\implies \left(2, 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \text{ y } \left(2, 0, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ \ell = 1 &\implies \left(2, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(2, 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(2, 1, -1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ &\quad \left(2, 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \left(2, 1, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \text{ y } \left(2, 1, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \end{aligned}$$

de manera que en la capa L puede haber ocho electrones.

La capa M corresponde a  $n = 3$ , para la que  $\ell$  puede tomar los valores  $\ell = 0$ ,  $\ell = 1$  y  $\ell = 2$ . Los números cuánticos compatibles son entonces

$$\begin{aligned} \ell = 0 &\implies \left(3, 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \text{ y } \left(3, 0, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ \ell = 1 &\implies \left(3, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(3, 1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(3, 1, -1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ &\quad \left(3, 1, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \left(3, 1, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \text{ y } \left(3, 1, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \\ \ell = 2 &\implies \left(3, 2, 2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(3, 2, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(3, 2, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(3, 2, -1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(3, 2, -2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ &\quad \left(3, 2, 2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \left(3, 2, 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \left(3, 2, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \left(3, 2, -1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \text{ y } \left(3, 2, -2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

## Problema 5.10

Determinar el valor mínimo del ángulo  $\theta$  que forman el momento angular orbital  $\vec{L}$  y el eje  $OZ$  para

- a)  $\ell = 1$ ;
- b)  $\ell = 4$ ;
- c)  $\ell = 50$ .

Consideremos un electrón con número cuántico orbital  $\ell$ . Como sabemos, este número cuantiza el módulo del momento angular orbital del electrón como

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar$$

La dirección del momento angular, por otro lado, está cuantizada por el número cuántico magnético  $m_\ell$ , de forma que la componente según el eje  $OZ$  del momento angular está dada por

$$L_z = m_\ell\hbar$$

Según esto, para un valor de  $\ell$  dado (esto es, fijo el módulo del vector  $\vec{L}$ ), solo son posibles ciertas orientaciones de ese vector, correspondiente a los  $2\ell + 1$  valores posibles de  $m_\ell$ ; esta situación se representa en la figura de la derecha para  $\ell = 2$ . Según esta figura, el ángulo que forma el momento angular con el eje  $OZ$  verifica

$$\cos \theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_\ell \hbar}{\sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar},$$

y su valor mínimo corresponde al máximo valor de  $m_\ell$ , esto es,  $m_\ell = \ell$ . En definitiva

$$\theta_{\text{mín}} = \arccos \frac{\ell}{\sqrt{\ell(\ell + 1)}}$$

a) Para  $\ell = 1$ , el ángulo mínimo es

$$\theta_{\text{mín}}(\ell = 1) = \arccos \frac{1}{\sqrt{2}} = 45^\circ$$

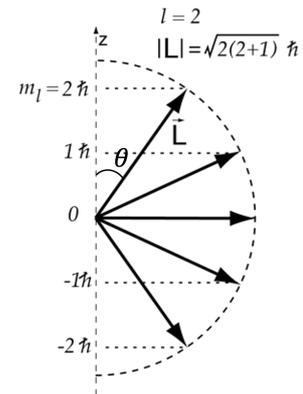
b) Para  $\ell = 4$  es ahora

$$\theta_{\text{mín}}(\ell = 4) = \arccos \frac{4}{\sqrt{20}} = 26.56^\circ$$

c) Finalmente, para  $\ell = 50$  se tiene

$$\theta_{\text{mín}}(\ell = 50) = \arccos \frac{50}{\sqrt{2550}} = 8.08^\circ$$

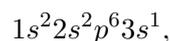
Como vemos, el ángulo mínimo que forma el momento angular con el eje  $OZ$  disminuye al aumentar el valor de  $\ell$ . En el límite clásico,  $\ell \rightarrow \infty$ , el ángulo mínimo es cero grados.



## Problema 5.11

Escribir las configuraciones electrónicas de los átomos con números atómicos entre  $Z = 11$  y  $Z = 19$ .

Para  $Z = 11$  (átomo de sodio), los primeros dos electrones se sitúan en la capa K, con  $n = 1$ ; la capa L, por su parte, puede albergar a ocho electrones, correspondientes a  $\ell = 0$  y  $\ell = 1$  con  $n = 2$ . El electrón adicional se sitúa en el nivel  $3s$ . la configuración electrónica del átomo con  $Z = 11$  es entonces



que se suele escribir como



porque la configuración electrónica del neón es  $1s^2 2s^2 2p^6$  y corresponde a una capa electrónica, la capa K, completamente llena.

El átomo con  $Z = 12$  (magnesio) tiene un electrón más que el  $Z = 11$ , que puede ser también alojado en la subcapa  $3s$ , de manera que la configuración electrónica del magnesio es



El átomo con  $Z = 13$  (aluminio) tiene un electrón más que el magnesio, pero este electrón no puede alojarse en el estado  $3s$ , que ya tiene dos electrones. El electrón adicional se sitúa en una subcapa  $3p$ , de manera que la configuración electrónica del aluminio es

$$[\text{Ne}]3s^2p^1$$

Esta subcapa  $3p$ , de hecho, puede alojar seis electrones, de manera que las configuraciones electrónicas de los átomos con  $Z = 14$  a  $Z = 18$  (silicio, fósforo, azufre, cloro y argón, respectivamente), son

$$[\text{Ne}]3s^2p^2$$

$$[\text{Ne}]3s^2p^3$$

$$[\text{Ne}]3s^2p^4$$

$$[\text{Ne}]3s^2p^5$$

$$[\text{Ne}]3s^2p^6$$

Para el átomo con  $Z = 19$  (potasio), el electrón adicional ya no puede encontrarse en la capa M, sino que ocupa uno de los estados de la siguiente subcapa, la  $4s$ . Su configuración electrónica es entonces

$$[\text{Ne}]3s^2p^64s^1,$$

que se suele escribir como

$$[\text{Ar}]4s^1$$

## Problema 5.12

Determinar el elemento de valencia  $z = 3$  cuyo electrón más externo se encuentra en el estado  $3p$ .

Si un átomo tiene valencia  $z = 3$ , entonces su última capa ocupada contiene tres electrones. Según el enunciado, esta capa es la capa M, puesto que la última subcapa ocupada es la  $3p$ . Entonces las capas K y L, con dos y ocho electrones, respectivamente, están completamente ocupadas, y la capa M contiene tres electrones. En definitiva, el elemento en cuestión contiene 13 electrones ( $Z = 13$ ), y se trata, por tanto, del aluminio.