



# Estructura atómica

Viewing: Atomic weight

1	1																2	
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub						

Lanthanide Series	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Actinide Series	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

# Estructura de la Materia

## Unidad 2

Sigfrido Escalante Tovar  
23-may-2023

# Los grandes cambios

- Ondas electromagnéticas: J.C. Maxwell 1864.
- El electrón como partícula: J.J. Thompson, 1897.
- La cuantización de la energía: M. Planck, 1900.
- La luz como partícula: A. Einstein, 1905.
- El átomo cuántico: N. Bohr, 1913.
- El electrón como onda: L. V. de Broglie, 1923.
- La mecánica cuántica: E. Schrödinger, 1926.
- La controversia Bohr-Einstein



# La ecuación de Schrödinger

## La ecuación dependiente del tiempo

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \mathcal{V} \right\} \Psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$$

## La ecuación independiente del tiempo

La función de onda

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + \mathcal{V} \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$



# La ecuación relativista de Dirac

$$\left( \alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j c \right) \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t)$$

Matrices de Dirac

Función de onda que depende de las coordenadas espaciales y del tiempo

En la formulación relativista de Dirac aparecen los 4 números cuánticos, y las funciones de onda se llaman *espinores* que son tensores de 4 componentes:

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1(r, \theta, \phi) \\ \psi_2(r, \theta, \phi) \\ \psi_3(r, \theta, \phi) \\ \psi_4(r, \theta, \phi) \end{bmatrix}$$



# La ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.

la energía

$$\widehat{\mathcal{H}} \psi = E\psi$$

el operador hamiltoniano

la función de onda

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - k \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = E\psi$$

La ecuación con el operador hamiltoniano en coordenadas cartesianas:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - k \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = E\psi$$

La ecuación con el hamiltoniano en coordenadas esféricas polares:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E_T + k \frac{Ze^2}{r} \right) = 0$$



# La partícula en una caja

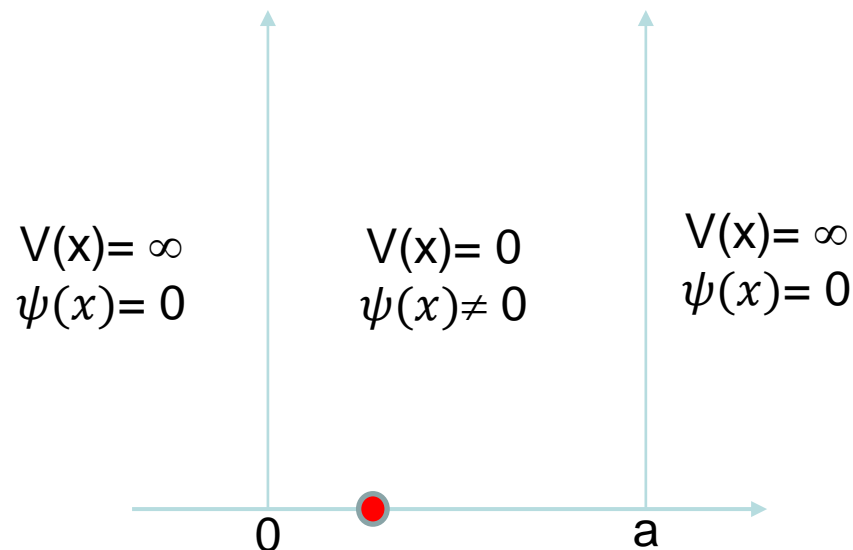
Imagine una partícula confinada en una caja unidimensional de potencial

$V(x)$  es un potencial repulsivo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$$

Las condiciones a la frontera son:

$$\psi(0) = 0 \quad \text{y} \quad \psi(a) = 0$$



Las soluciones son:

$$\psi(x) = A \sin \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} x$$

$$\psi(x) = A \cos \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} x$$

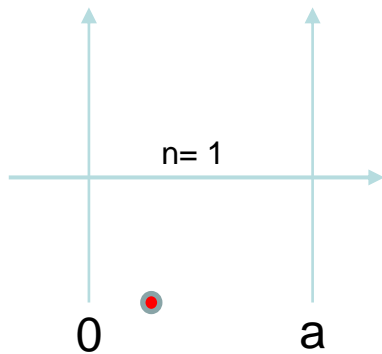
La energía solo puede valer:

$$E = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}, \quad \text{donde } n = 1, 2, 3, \dots$$



# La partícula en una caja

Imagine una partícula confinada en una caja unidimensional de potencial





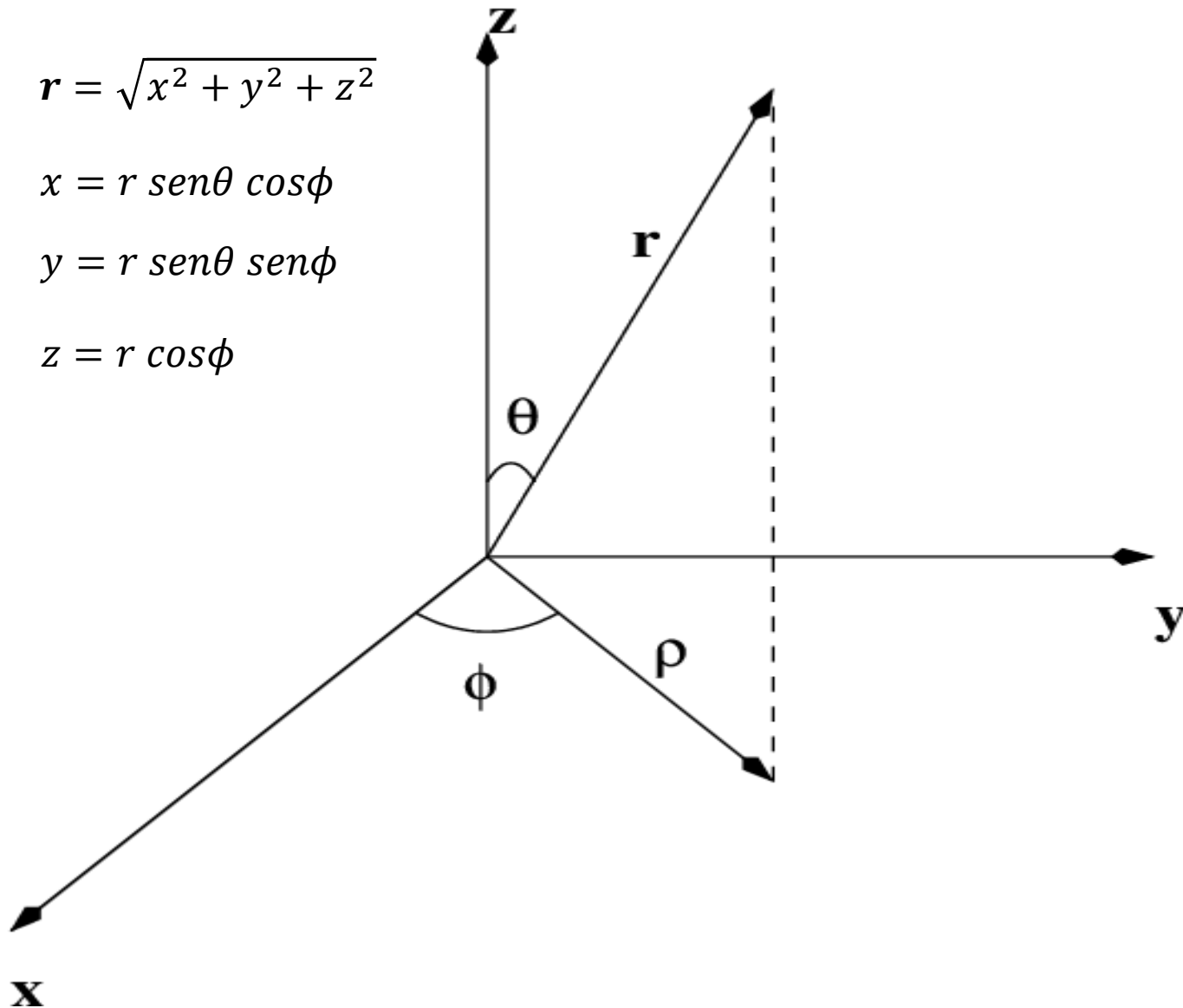
# Coordenadas esféricas

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$x = r \operatorname{sen}\theta \cos\phi$$

$$y = r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi$$

$$z = r \cos\phi$$







# Las soluciones de la ecuación de Schrödinger

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

La función de onda

La parte radial de la función de onda

La parte angular de la función de onda

La función de onda ( $\Psi$ ), aunque es fundamental, carece de significado físico.

Max Born en 1927 propuso que su cuadrado complejo puede interpretarse como una ***densidad de probabilidad***.



# Los 3 números cuánticos

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

- Número cuántico de energía

$n$  : 1, 2, 3 ...

- Número cuántico de momento angular

$l$  : 0, 1, 2... (n-1)

- Número cuántico magnético

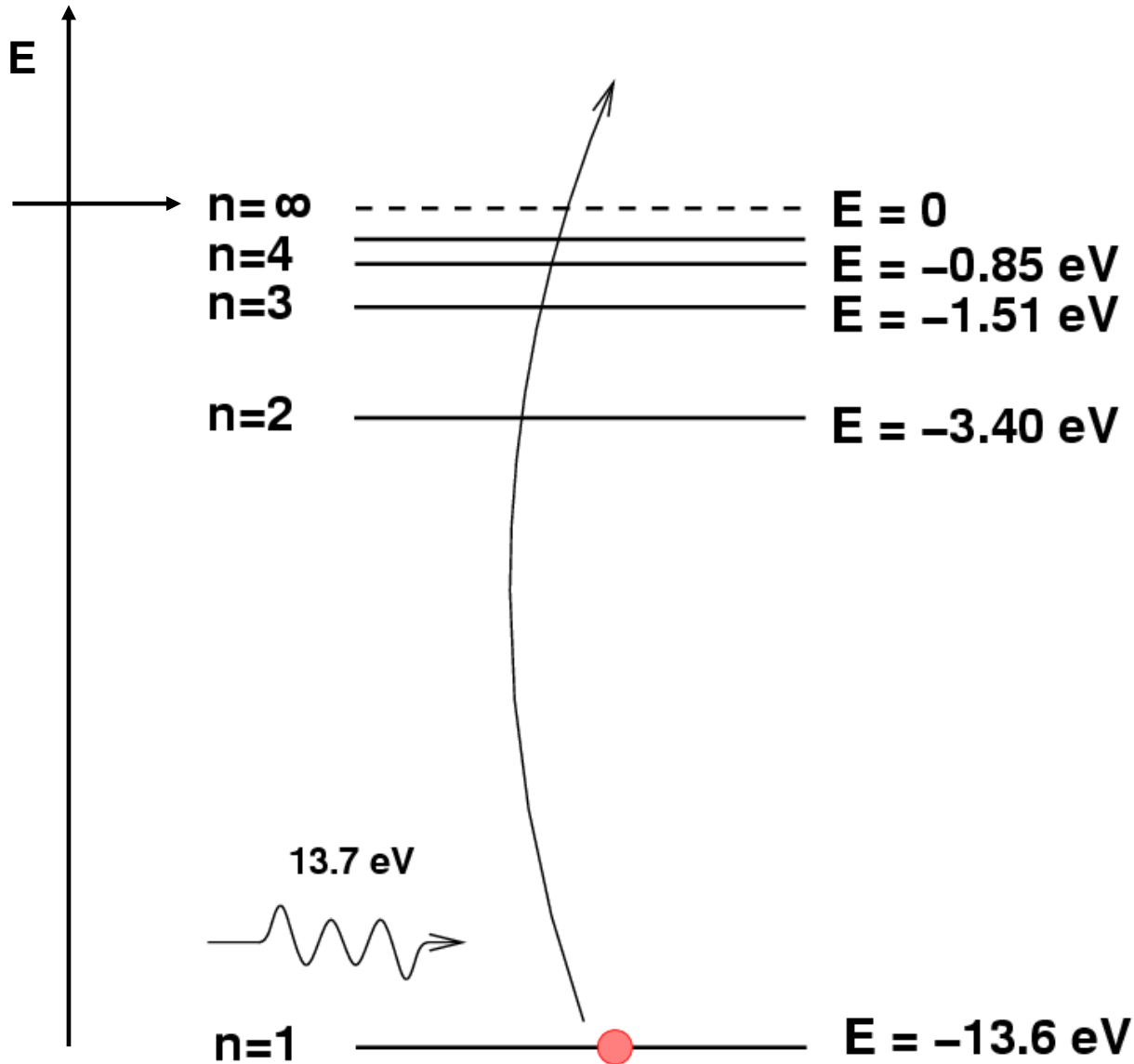
$m$  : -  $l$  ... 0 ... +  $l$

$s$  : +1/2 , -1/2

¿Y el cuarto número cuántico ( $s$ )?



# Niveles de energía

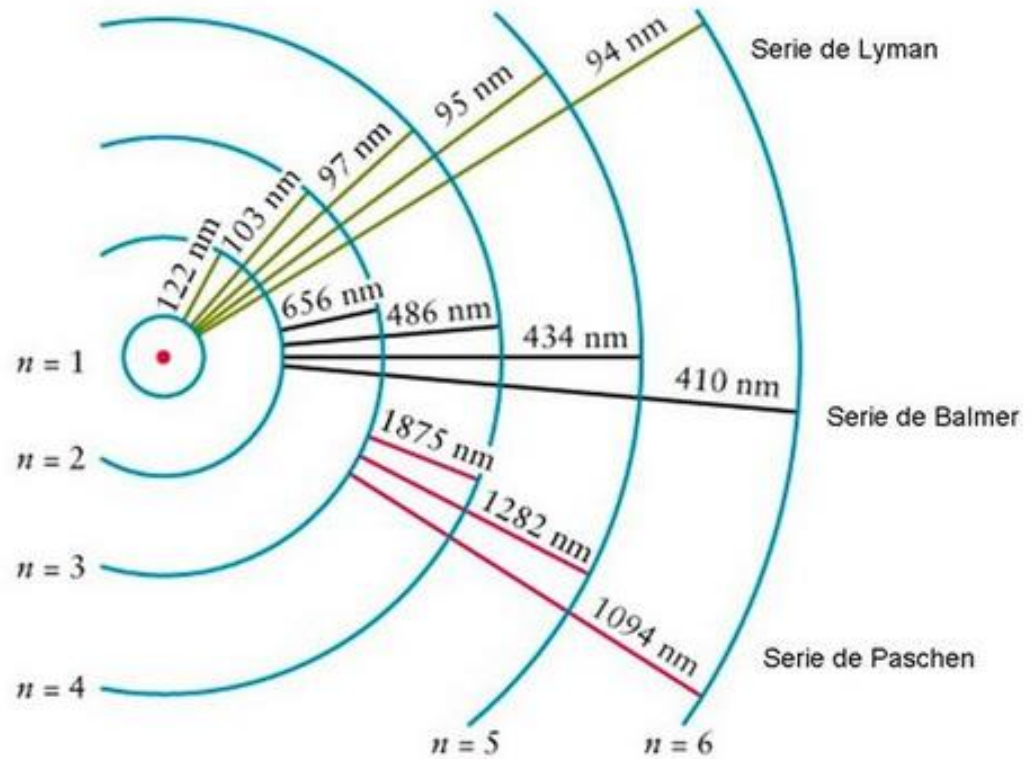
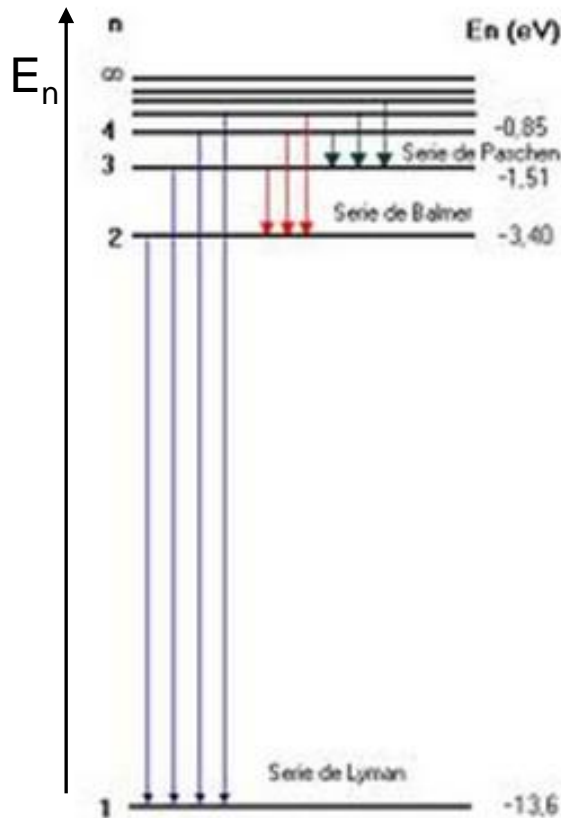
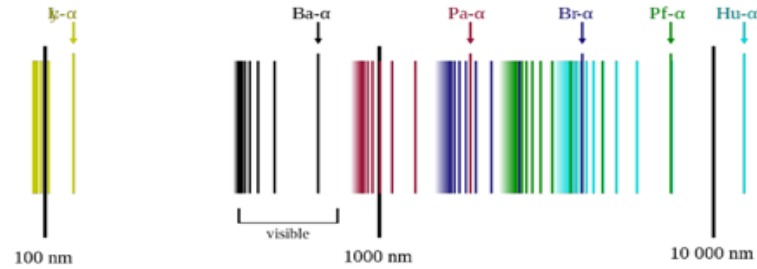


Los estados de energía van aproximándose conforme  $n$  crece.



# La espectroscopía

$$E_n = \frac{-13,64 \cdot Z^2}{n^2} \text{ (eV)}$$





# El número cuántico $l$

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

$l$	símbolo	significado
0	<i>s</i>	sharp
1	<i>p</i>	principal
2	<i>d</i>	diffuse
3	<i>f</i>	fundamental
4	<i>g</i>	ninguno
5	<i>h</i>	ninguno
...	...	...

Las funciones de onda (los orbitales) reciben su nombre de acuerdo con el valor de su número cuántico de momento angular  $l$ .



# La interpretación probabilística de la función de onda $\Psi$ .

# $\Psi$

La función de onda

$$\Psi^2 = |\Psi\Psi^*| = \frac{dP}{dV} = \rho \quad \boxed{\rho = \frac{dP}{dV}} \quad P(V) = \int_V \rho dV = \int_V \Psi^2 dV$$

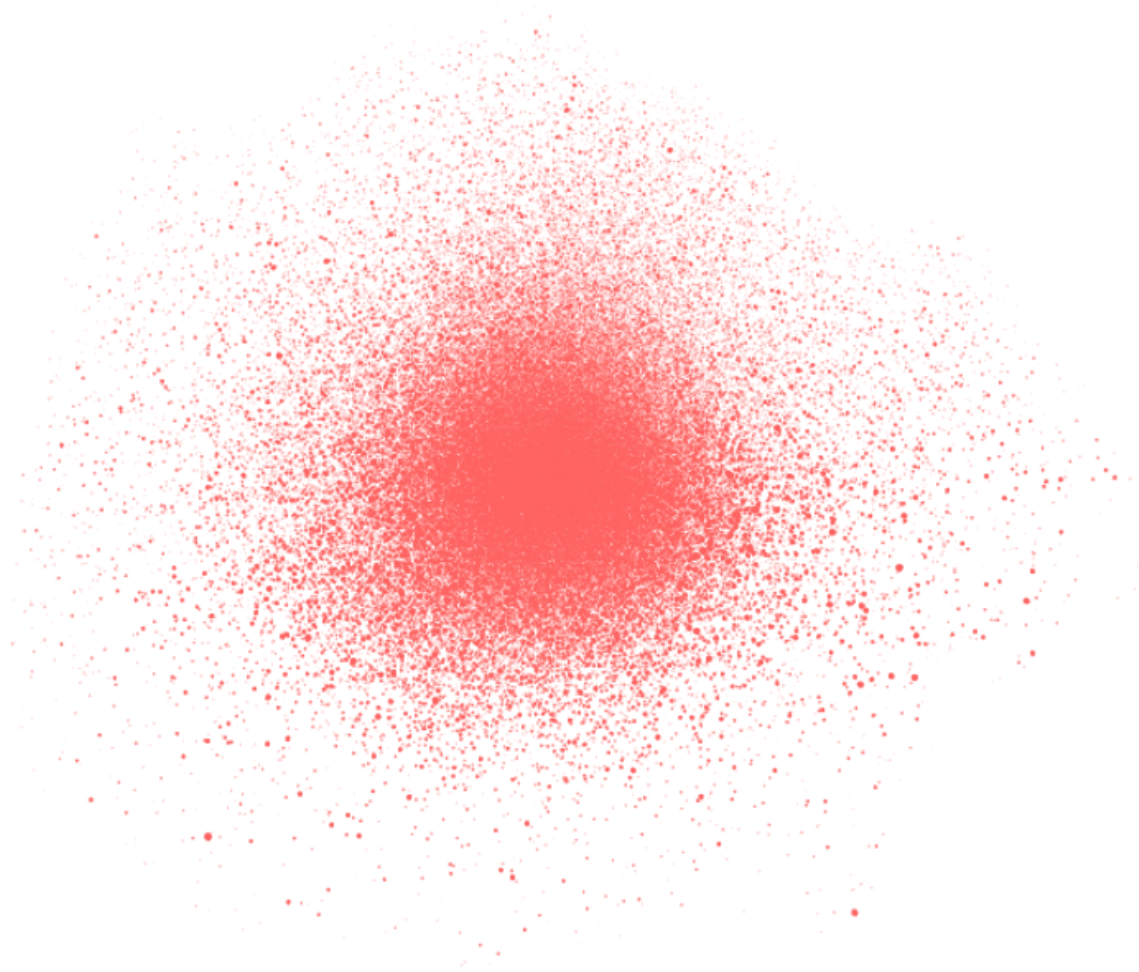
Densidad de  
probabilidad

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^2 dV = 1$$

Condición de normalización



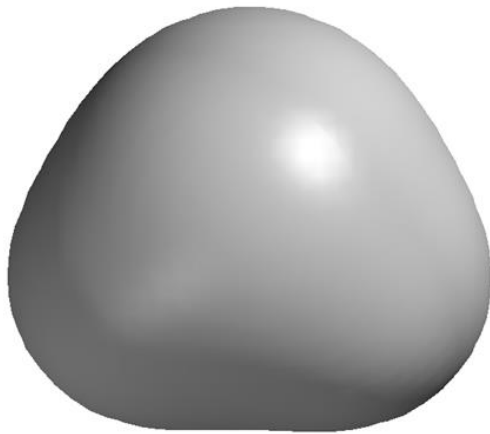
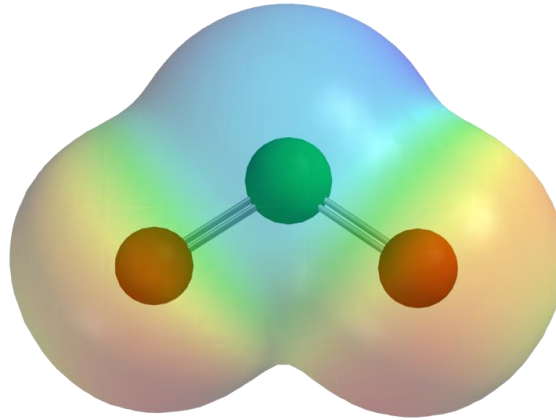
# La densidad electrónica



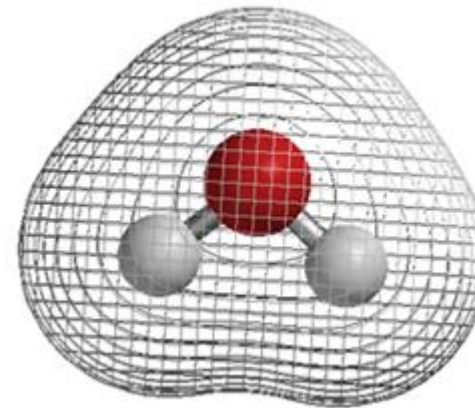
$\rho$



# Densidad electrónica del H<sub>2</sub>O



Isosuperficie de la  
densidad electrónica  $\rho$

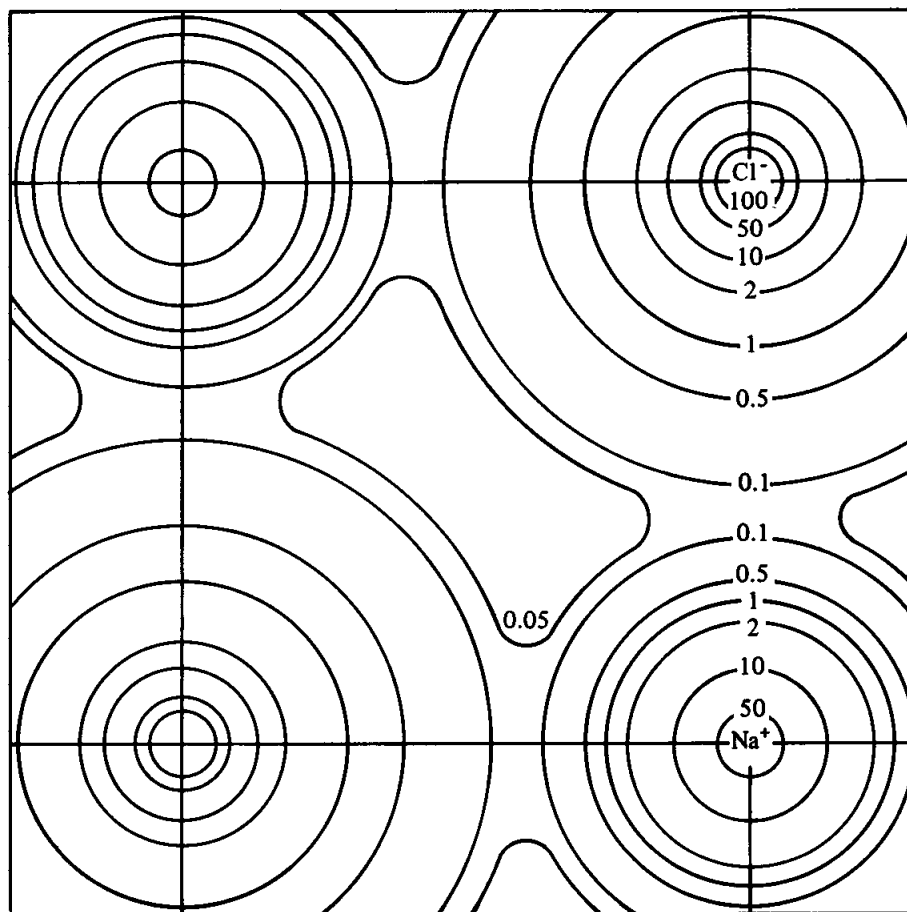


Mapa de contornos de la  
densidad electrónica  $\rho$





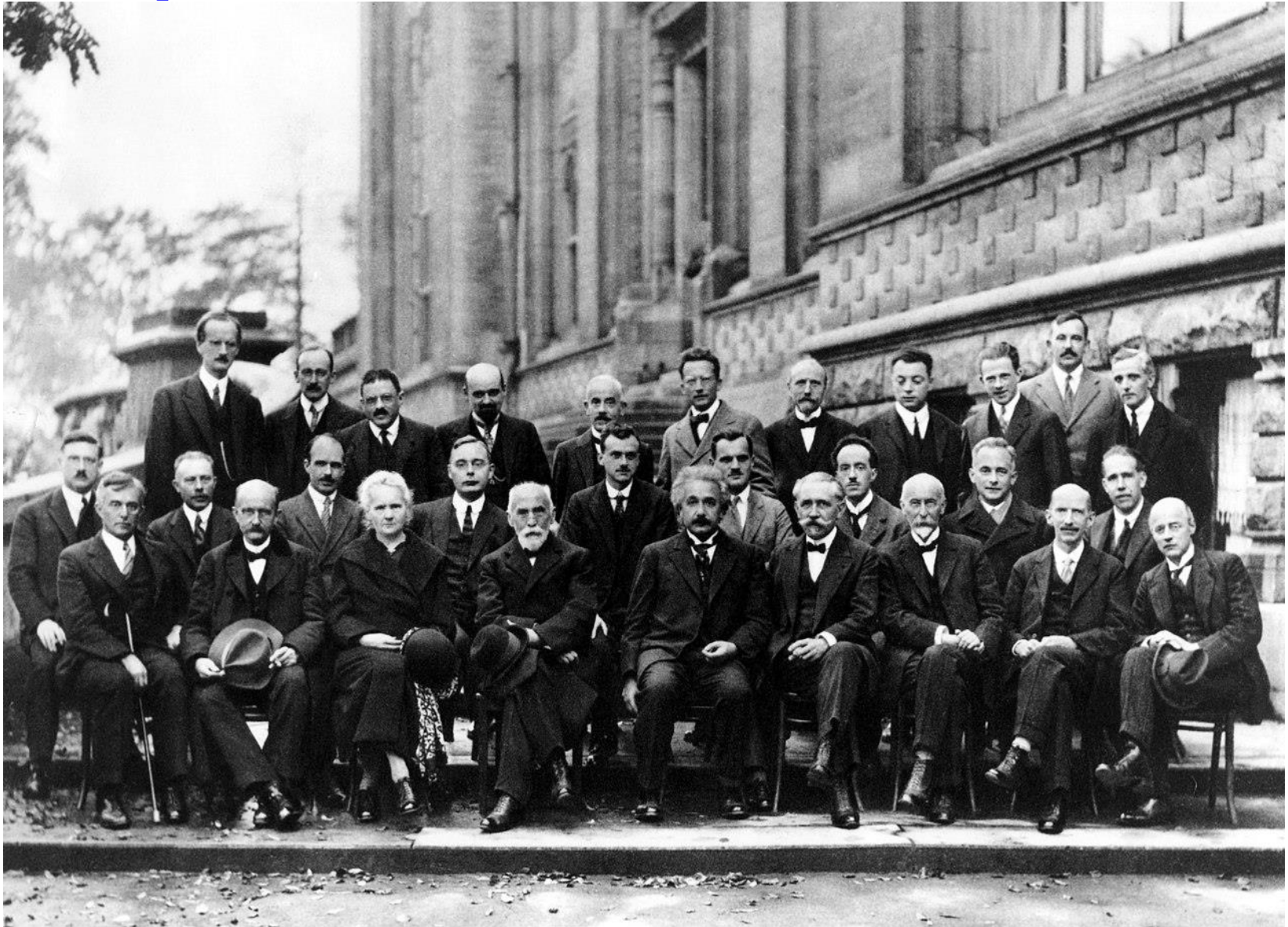
# Densidad electrónica en NaCl



**Fig. 4.10** Electron density contours in sodium chloride. Numbers indicate the electron density (electrons  $\text{\AA}^{-3} = 10^{-6}$  electrons  $\text{pm}^{-3}$ ) along each contour line. The “boundary” of each ion is defined as the minimum in electron density between the ions. The internuclear distance is 281 pm (= 2.81  $\text{\AA}$ ). [Modified from Schoknecht, *G. Z. Naturforsch.* 1957, 12A, 983. Reproduced with permission.]



# La “pandilla” se divide



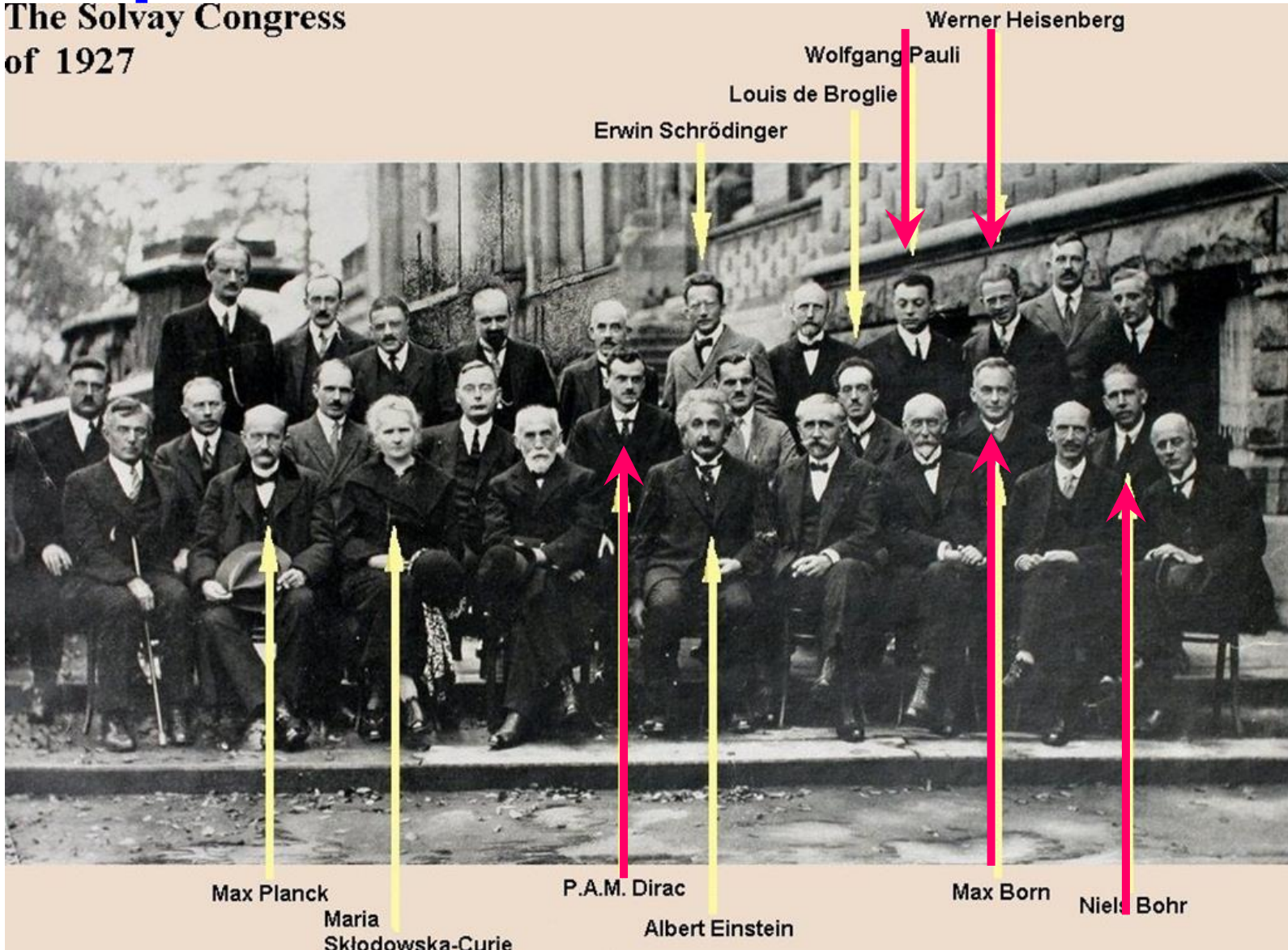
¿A quiénes logran identificar?





# La “pandilla” se divide

The Solvay Congress  
of 1927

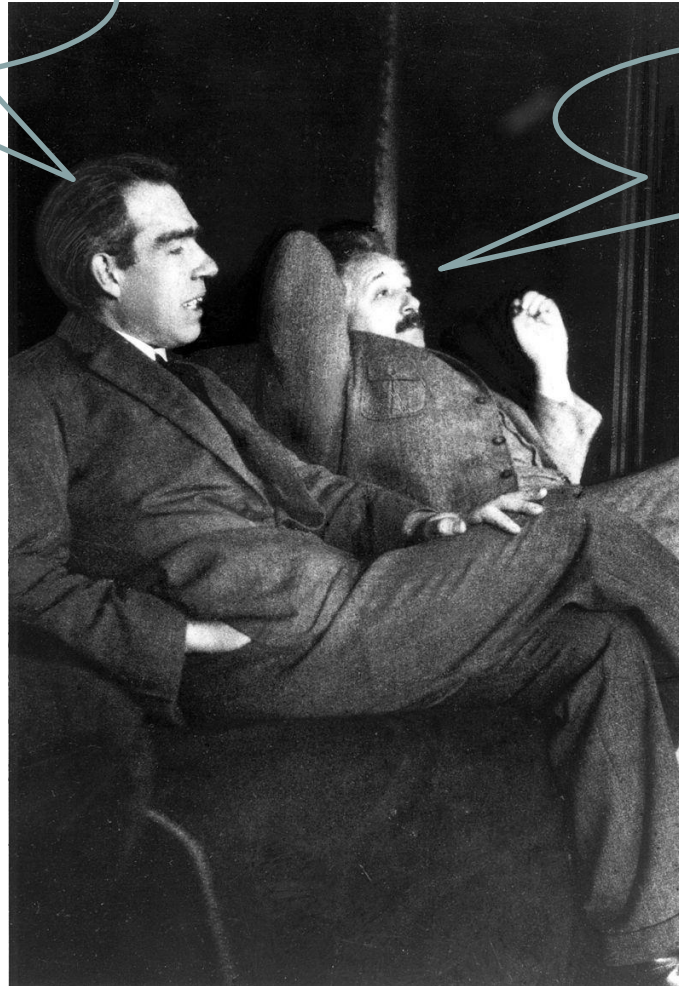


Los partidarios de la interpretación de Bohr (en rojo: escuela de Copenhague)<sup>19</sup>



# Una charla probable

“Albert, deja de decirle a Dios cómo usar sus dados”



“No creo que Dios juegue a los dados con el Universo”

## Otros temas:

- Escuela de Copenhage.
- Principios de: complementareidad y de correspondencia.
- El gato de Schrödinger
- Paradoja EPR.
- Entrelazamiento cuántico.
- Experimentos de Aspect, Bell...

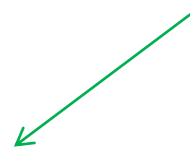
Bohr y Einstein adoptaron diferentes puntos de vista sobre cómo interpretar los resultados de la mecánica cuántica.



# Las soluciones: orbitales hidrogenoides

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Factor de normalización



La parte radial

$$R_{n,l}(r) = - \left[ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right] e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$a_0$  = radio de Bohr = 0.529 Å

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0}$$

$$\zeta = \frac{Z}{n}$$

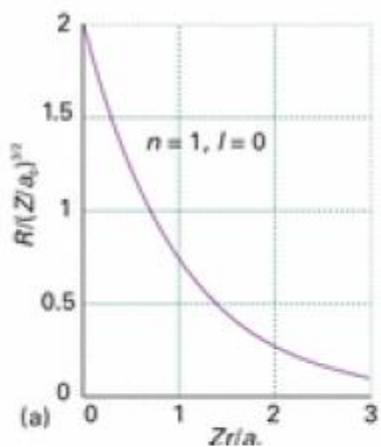


# La parte radial

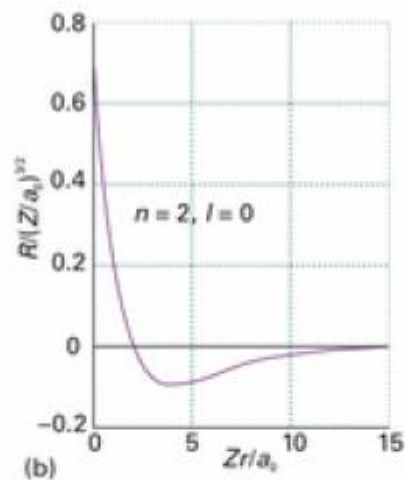
$n$	$l$	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2 \left( \frac{z}{a'_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a'_0}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a'_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{Zr}{a'_0} \right) e^{-Zr/2a'_0}$
2	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a'_0} \right)^{3/2} \left( \frac{Zr}{a'_0} \right) e^{-Zr/2a'_0}$
3	0	$\frac{2}{81\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a'_0} \right)^{3/2} \left[ 2 \left( \frac{Zr}{a'_0} \right)^2 - 18 \left( \frac{Zr}{a'_0} \right) + 27 \right] e^{-Zr/3a'_0}$
3	1	$\frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a'_0} \right)^{3/2} \left[ 6 - \left( \frac{Zr}{a'_0} \right) \right] \left( \frac{Zr}{a'_0} \right) e^{-Zr/3a'_0}$
3	2	$\frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{15}} \left( \frac{Z}{a'_0} \right)^{3/2} \left( \frac{Zr}{a'_0} \right)^2 e^{-Zr/3a'_0}$



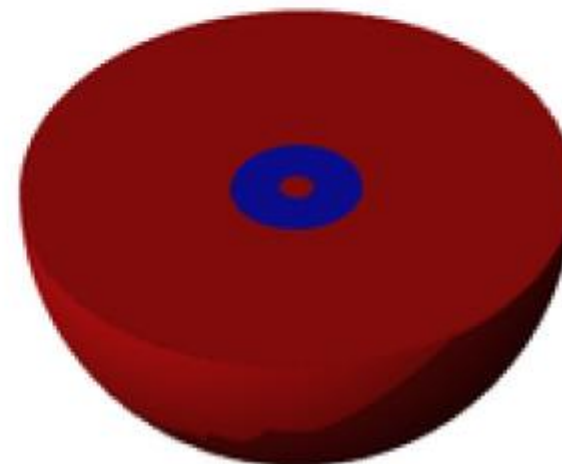
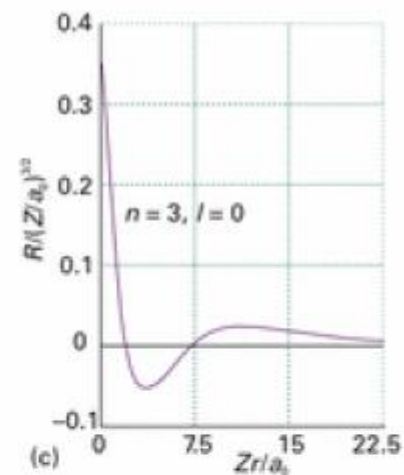
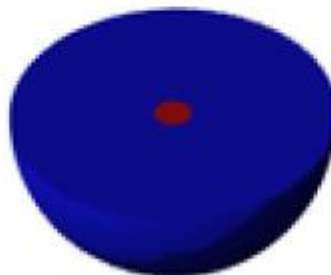
# Parte radial: funciones s



1s



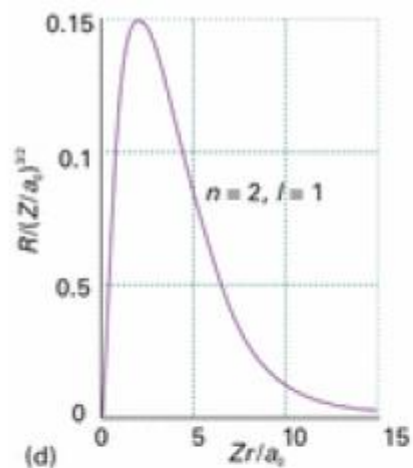
2s



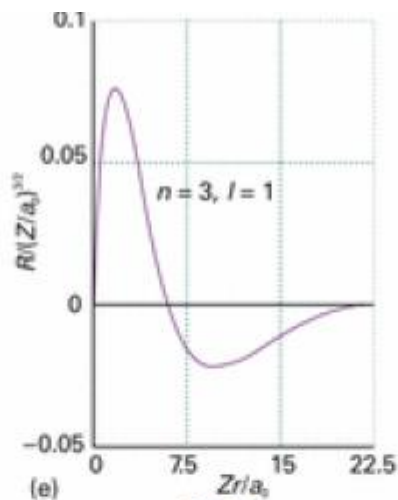
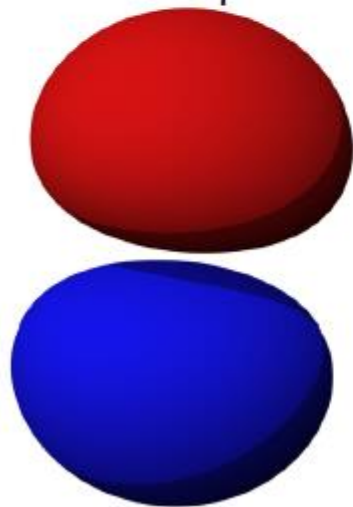




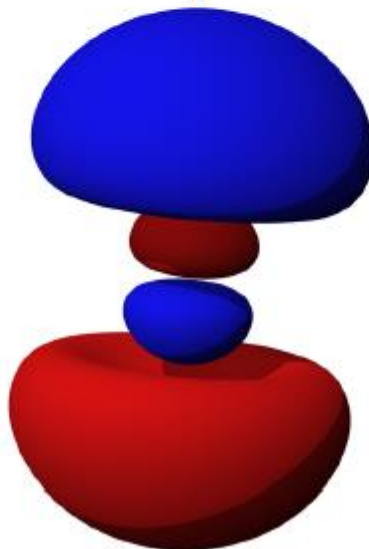
# Parte radial: funciones $p$



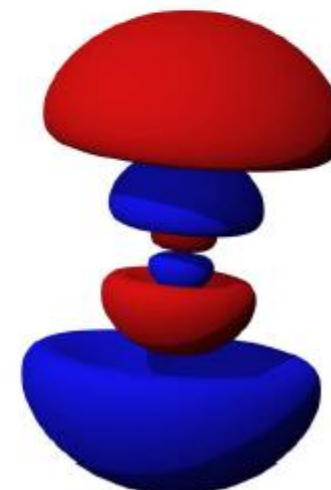
2p



3p



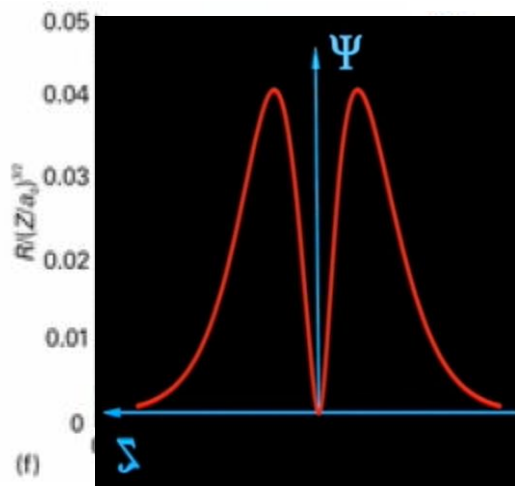
4p



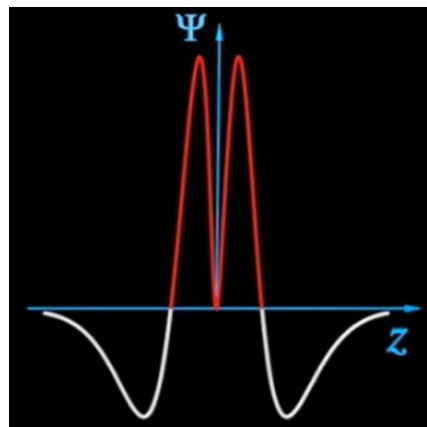
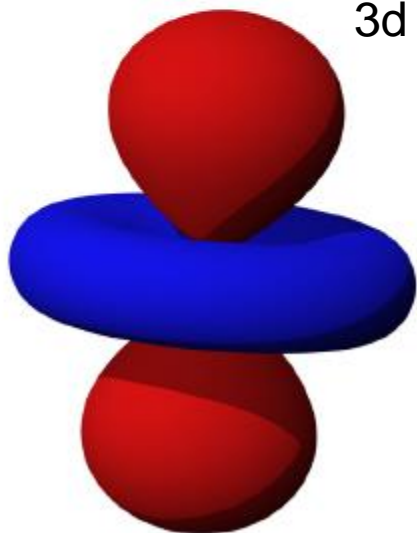




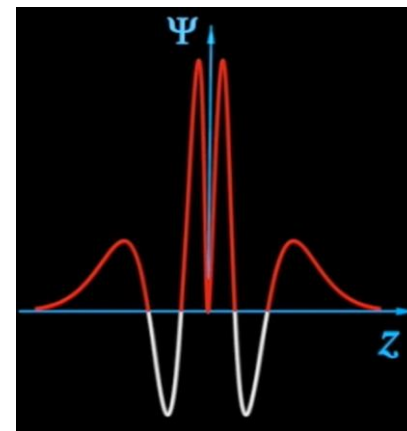
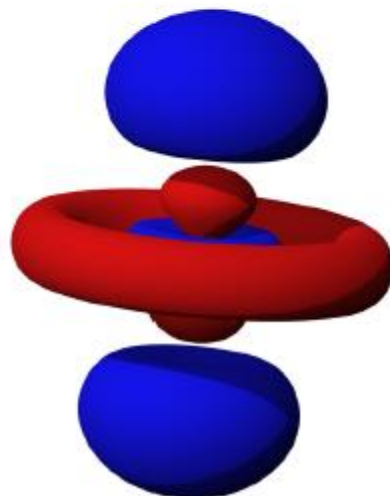
# Parte radial: funciones $d$



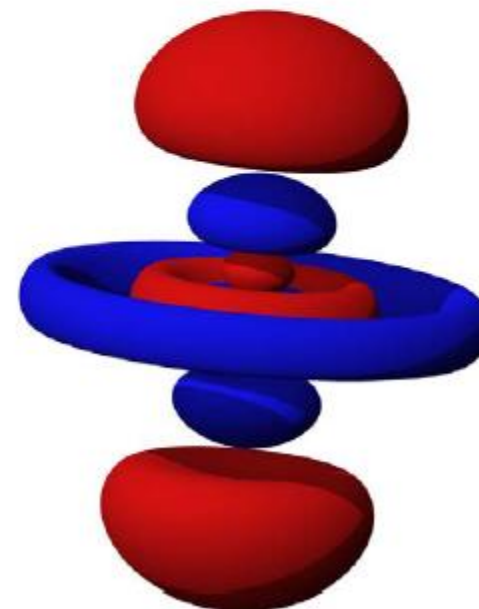
3d



4d



5d





# La función de distribución radial

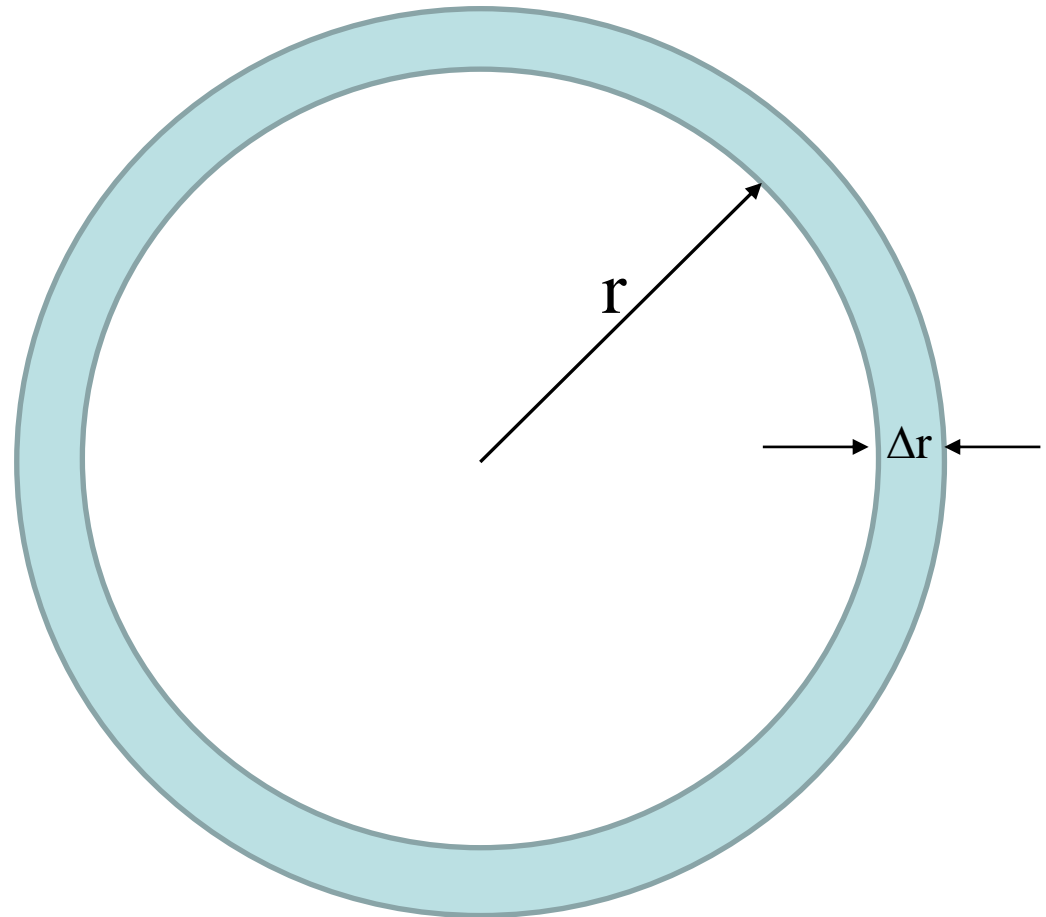


$$V = \frac{4}{3}\pi r^3$$

$$\Delta V = 4\pi r^2 \Delta r$$

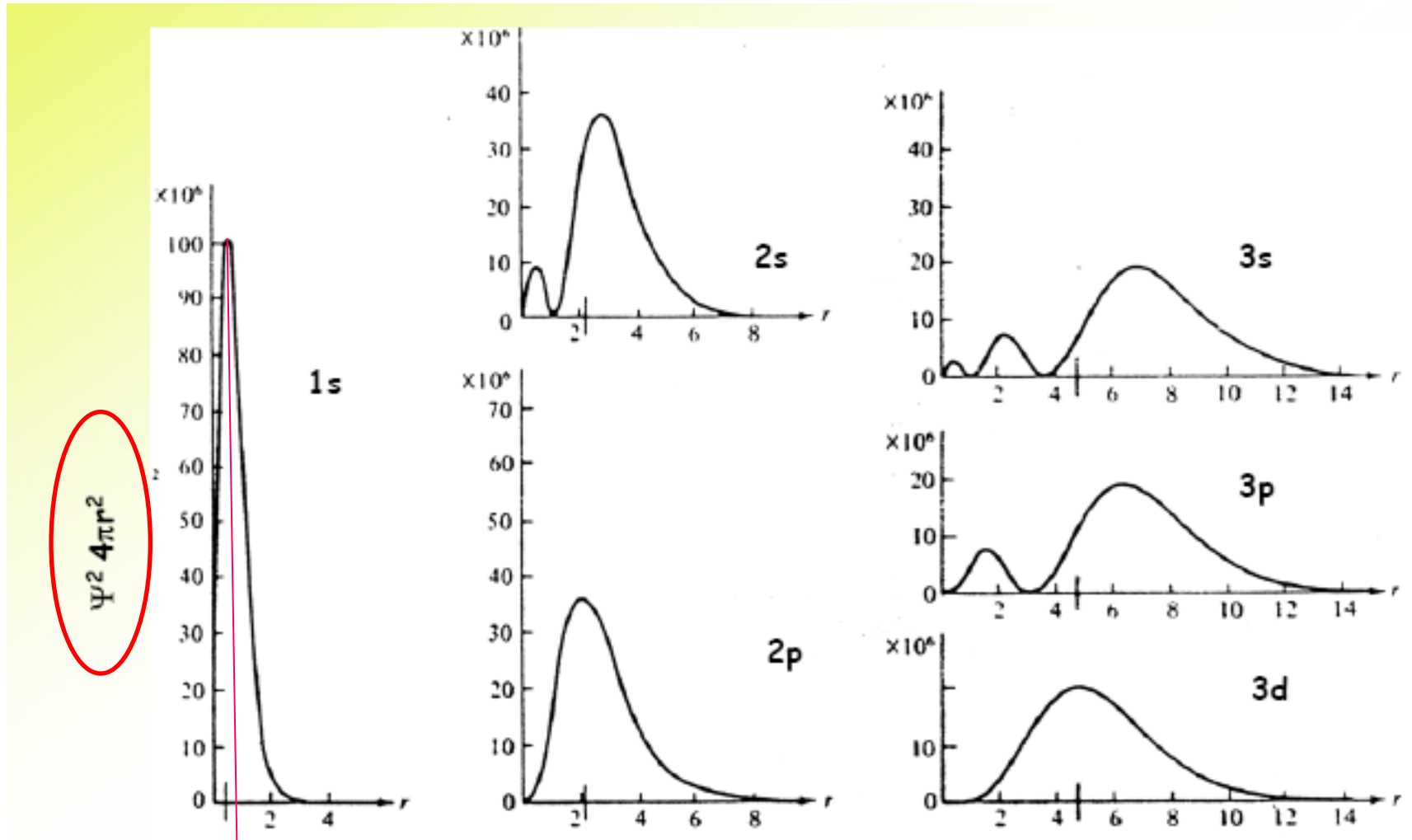
Si  $\Delta r$  es muy pequeño

$$P(\Delta V) \simeq \rho(r)\Delta V$$





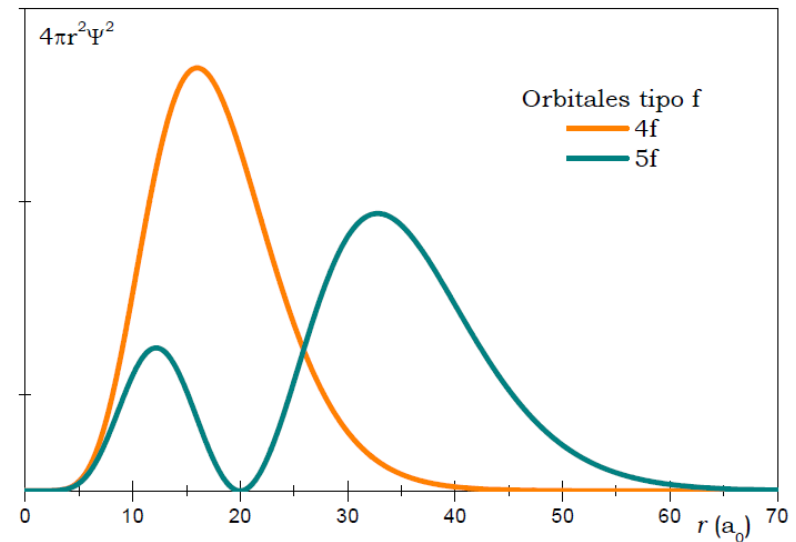
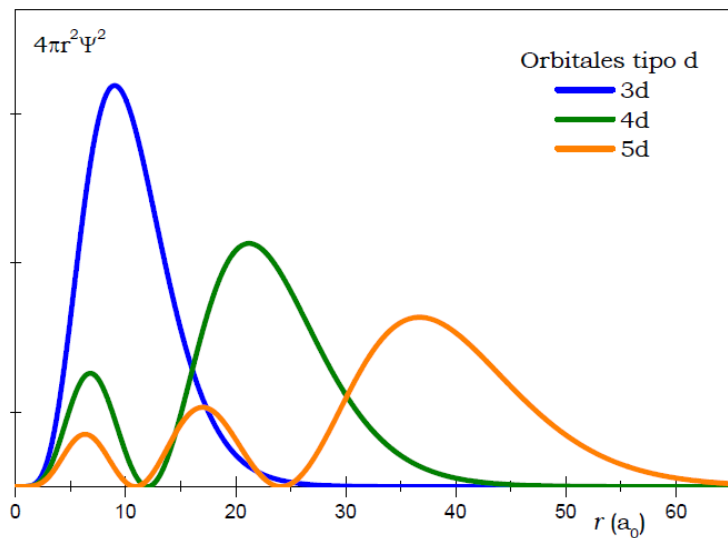
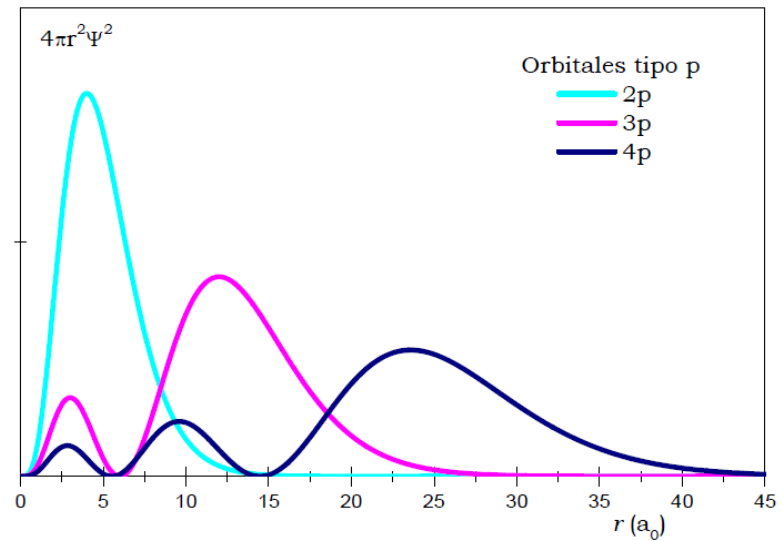
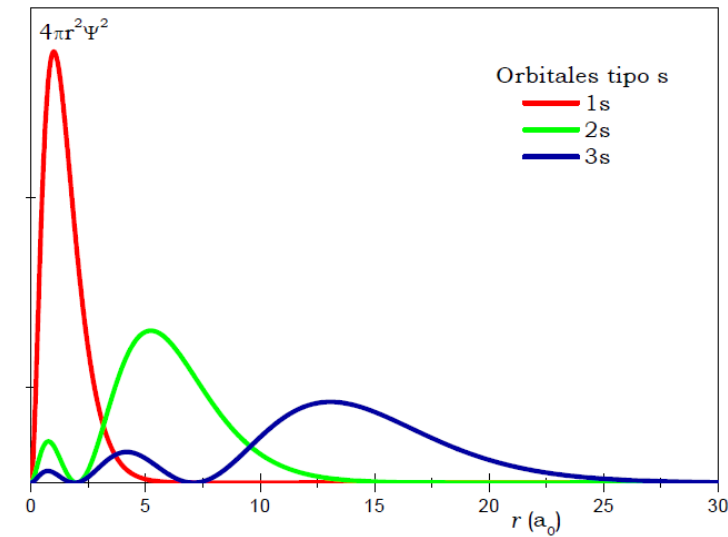
# La función de distribución radial



$a_0 =$  radio de Bohr =  $0.529 \text{ \AA}$

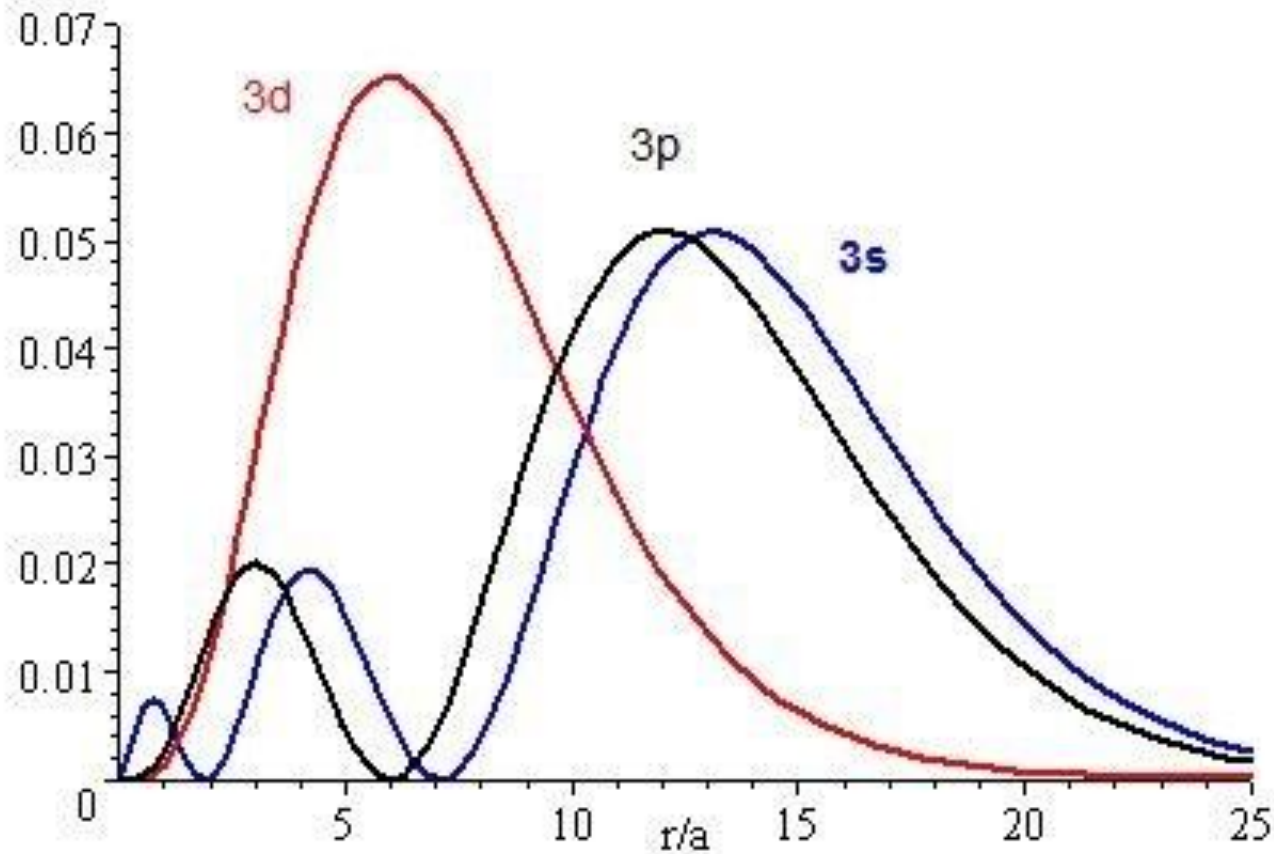


# Funciones de distribución radial





# Funciones de distribución radial: penetrabilidad





# La parte angular

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

$$\Theta_{l,m}(\theta) = \left[ \frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta)$$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$



# Las funciones angulares

$l$	$m$	$\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi)$
s	0	$(1/4\pi)^{1/2}$
	1	$(3/4\pi)^{1/2} \cos \theta$
	0	$(3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{i\phi}$
p	1	$(3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{-i\phi}$
	0	$(5/16\pi)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
d	1	$(15/8\pi)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
	2	$(15/8\pi)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}$
	1	$(15/32\pi)^{1/2} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$
	2	$(15/32\pi)^{1/2} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$
	0	$(15/32\pi)^{1/2} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$

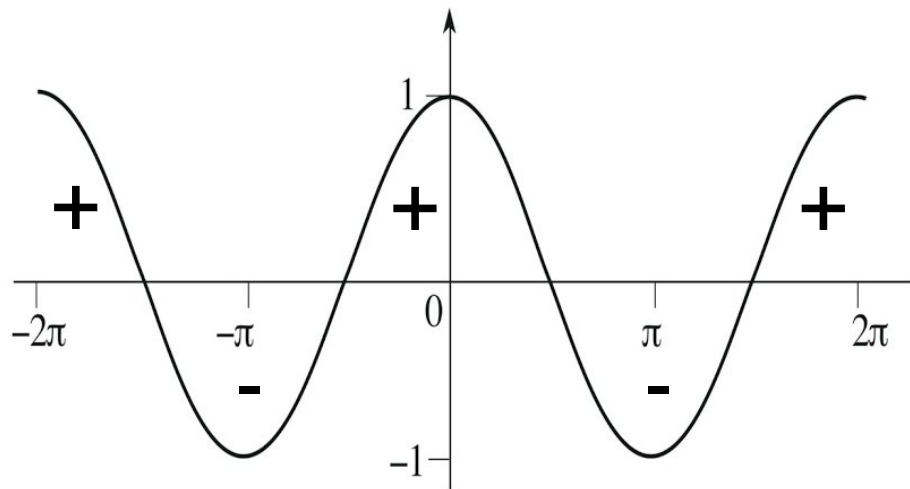


# Armónicos esféricos reales

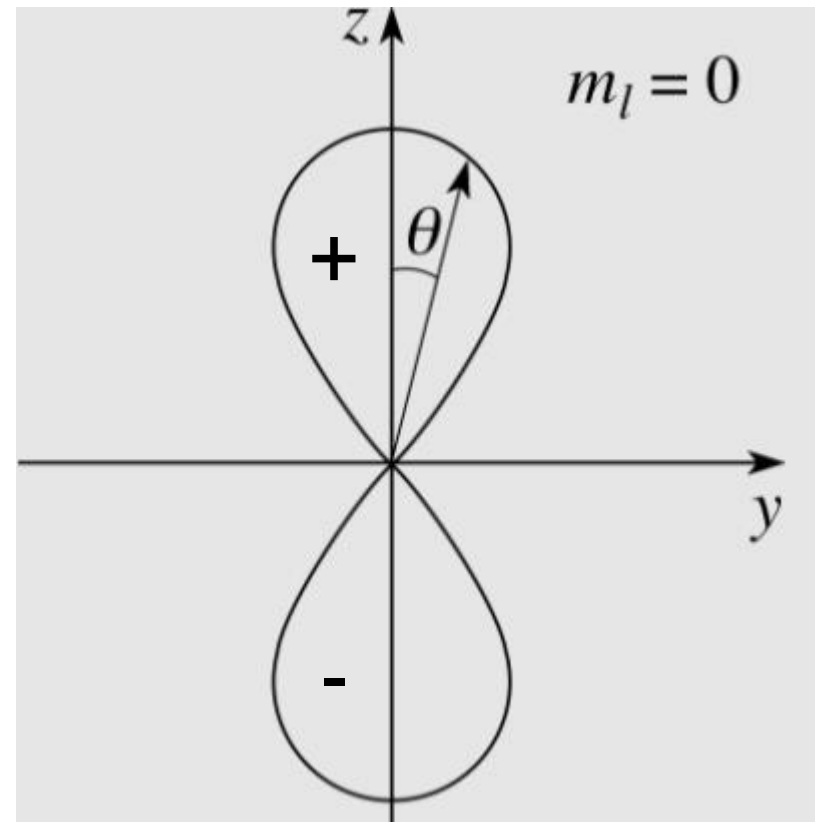
$Y_{l,m}$	NOMBRE	FUNCION
$Y_{0,0}$	$s$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
$Y_{1,0}$	$p_z$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
$Y_{1,1}^{\cos}$	$p_x$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \cos \phi$
$Y_{1,1}^{\text{sen}}$	$p_y$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \text{sen } \phi$
$Y_{2,0}$	$d_{z^2}^*$	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
$Y_{2,1}^{\cos}$	$d_{xz}$	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \cos \theta \cos \phi$
$Y_{2,1}^{\text{sen}}$	$d_{yz}$	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \text{sen } \theta \cos \theta \text{sen } \phi$
$Y_{2,2}^{\cos}$	$d_{x^2-y^2}$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \text{sen}^2 \theta \cos 2\phi$
$Y_{2,2}^{\text{sen}}$	$d_{xy}$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \text{sen}^2 \theta \text{sen } 2\phi$



# La función coseno



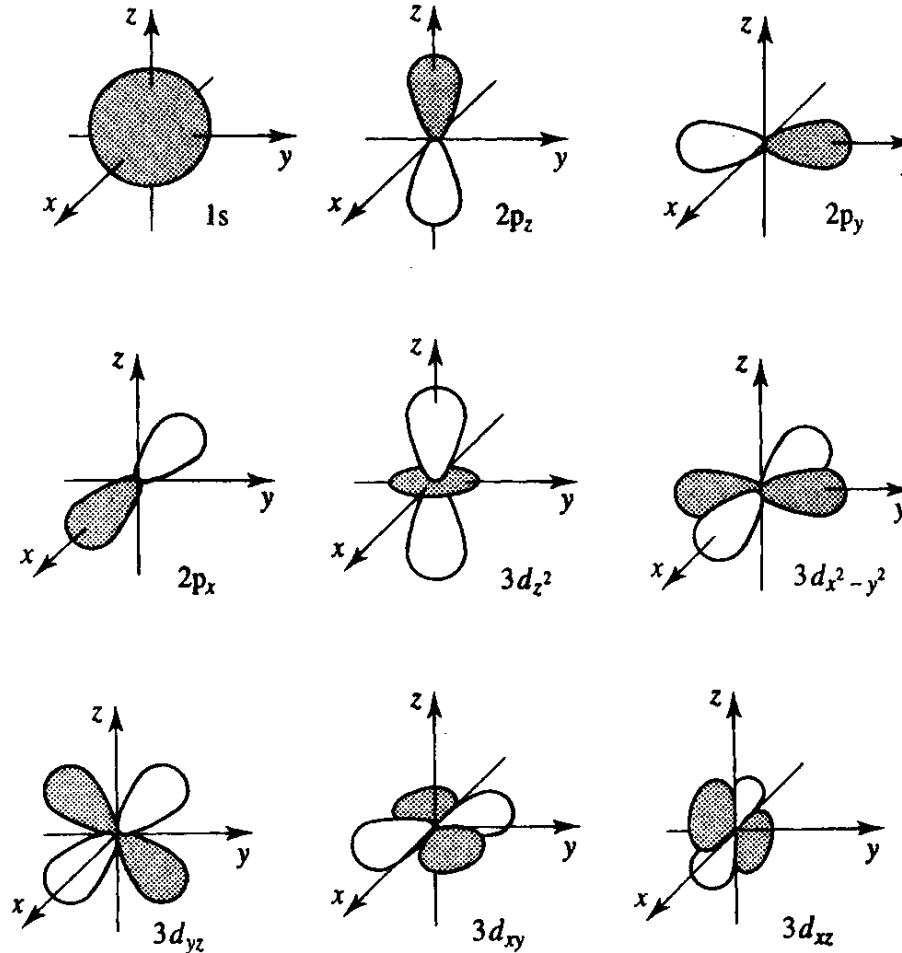
en coordenadas  
cartesianas (x,y)



en coordenadas  
polares ( r,  $\theta$  )

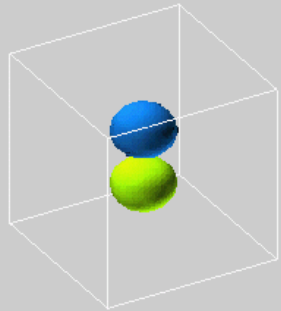


# Funciones angulares hidrogenoides

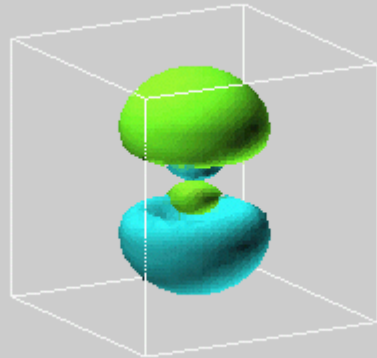




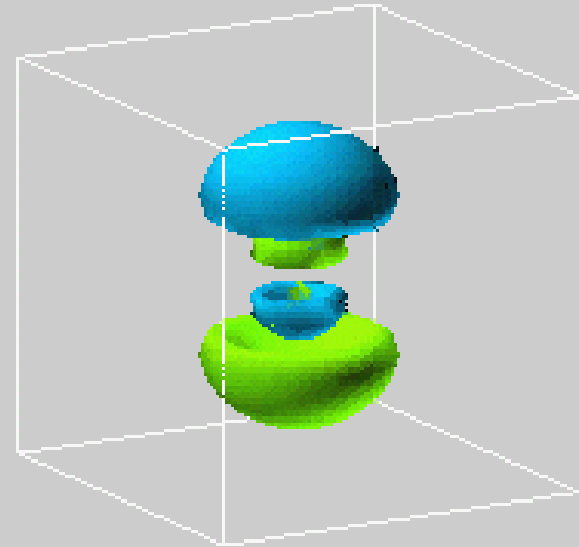
# Tamaño orbital



$2p$

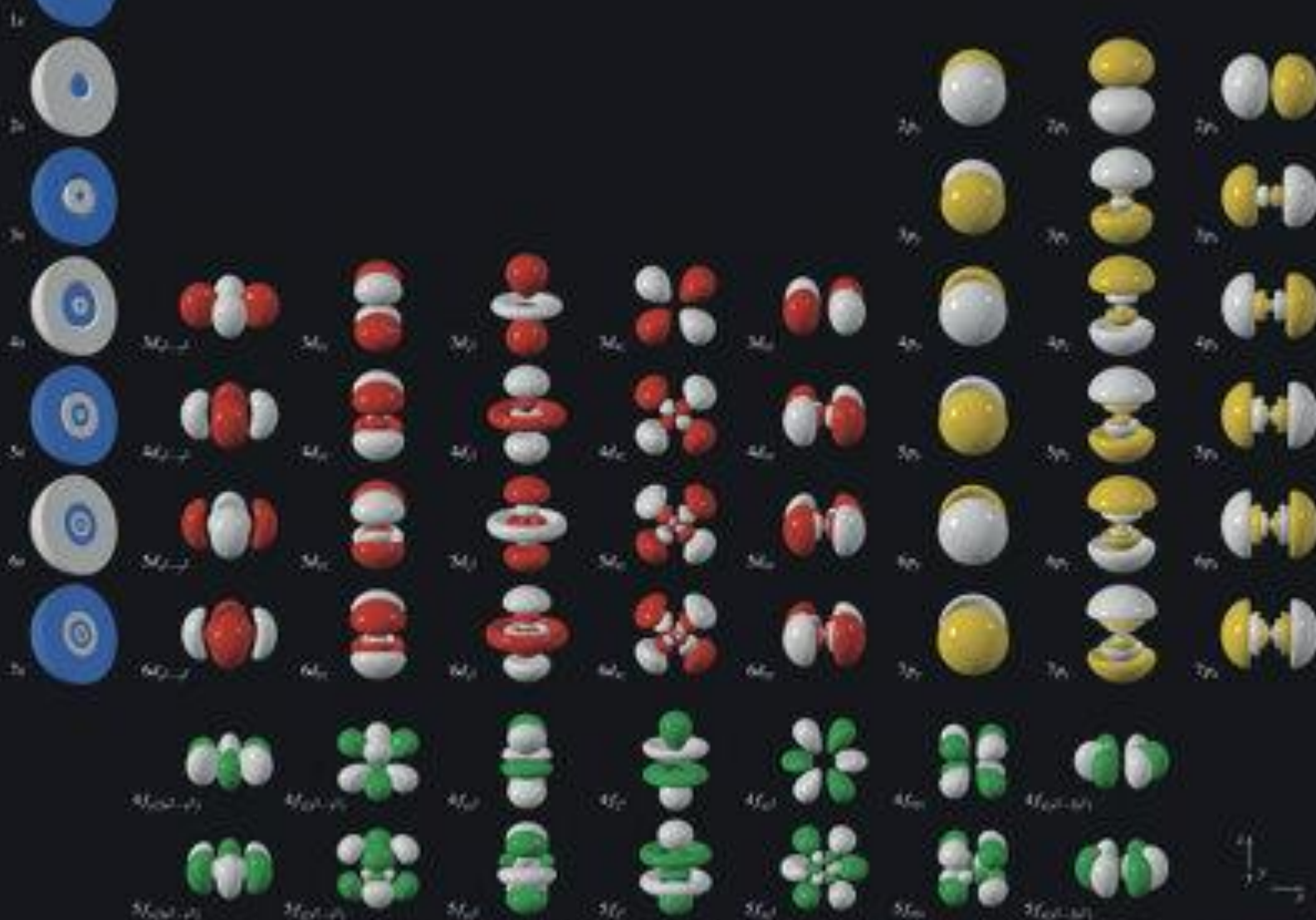


$3p$



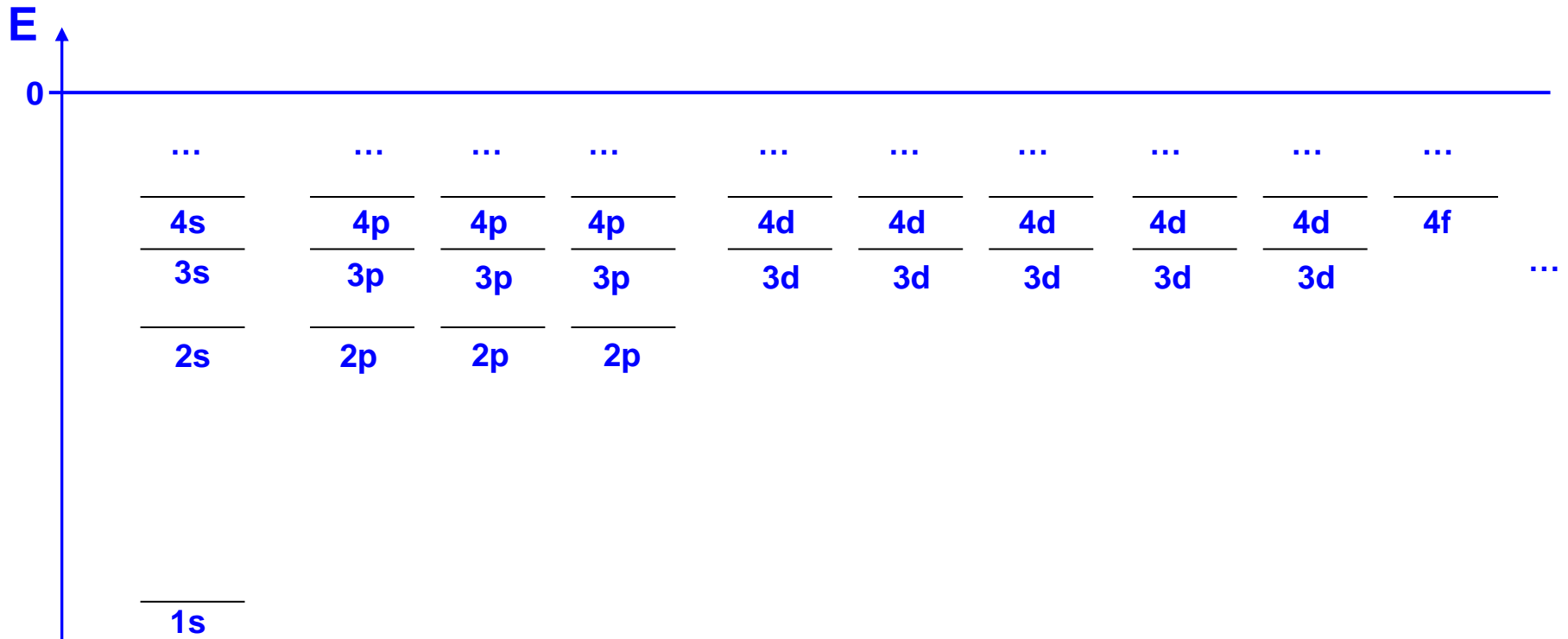
$4p$

# The Orbitron gallery of atomic orbitals





# H: niveles de energía

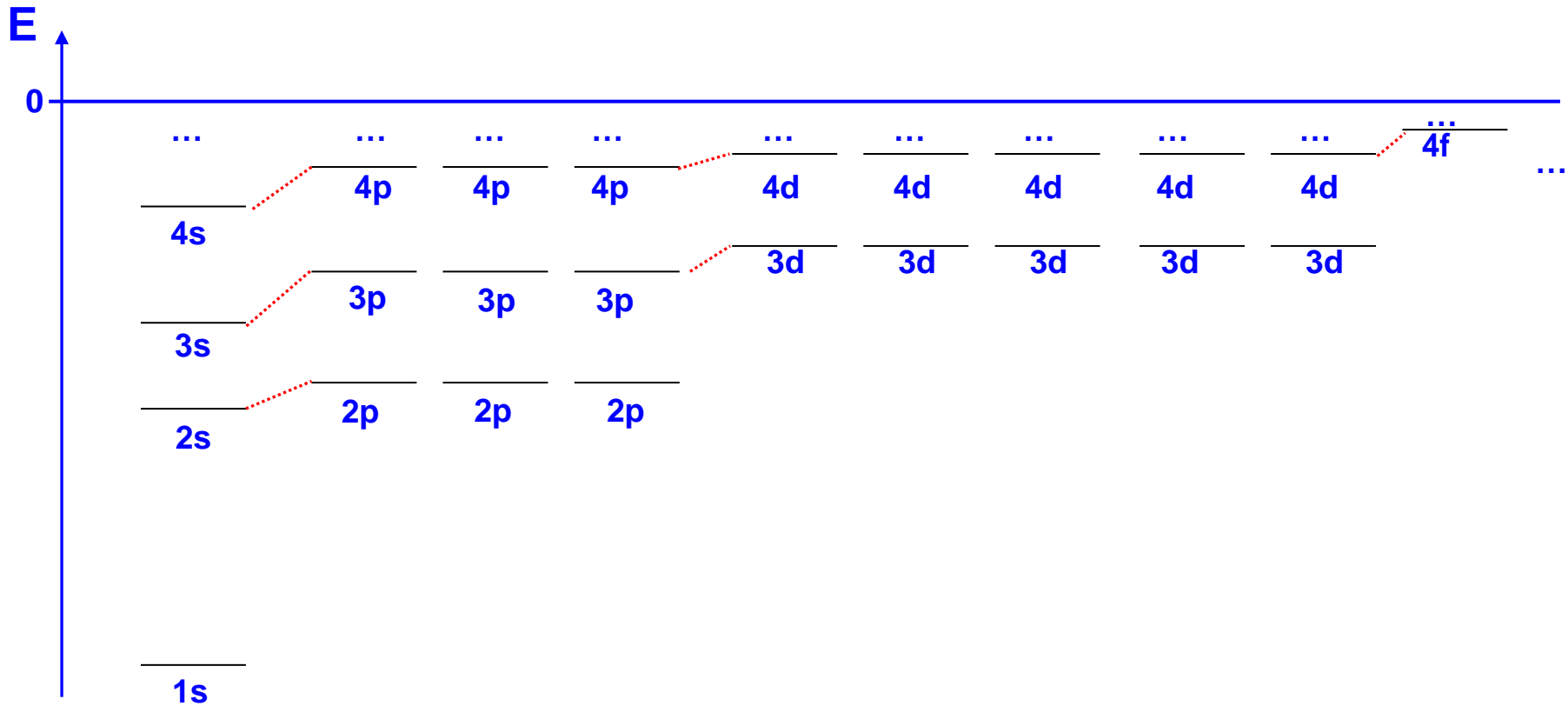


Los niveles de energía en el átomo de hidrógeno van aproximándose conforme  $n$  crece.

Las funciones con el mismo valor de  $n$  tienen la misma energía. Se dice que están **degeneradas** en energía.



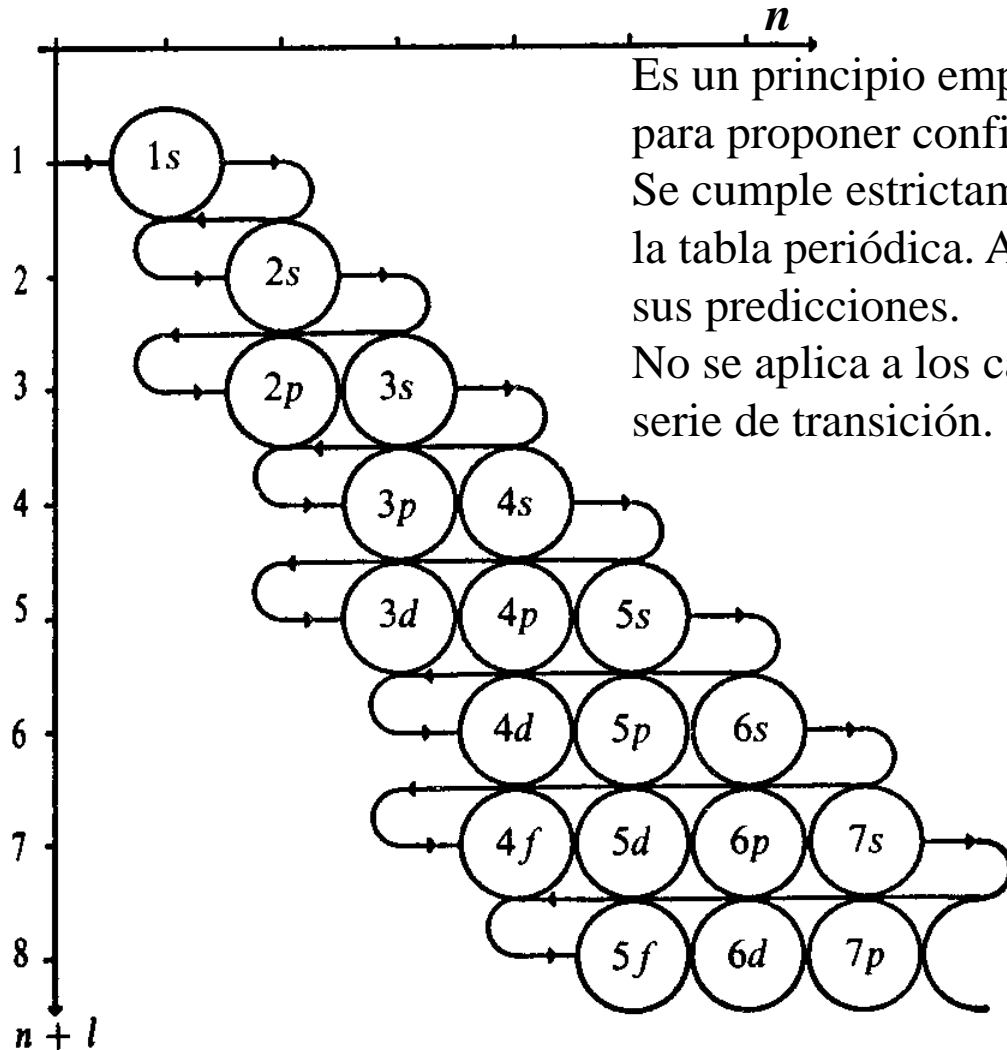
# Ruptura de la degeneración



En los átomos polielectrónicos se rompe la degeneración en el número cuántico  $l$ .



# El principio de construcción (aufbau)



Es un principio empírico que sirve de guía, más no de regla, para proponer configuraciones electrónicas aproximadas. Se cumple estrictamente para los primeros 20 elementos de la tabla periódica. A partir del cromo empiezan a no cumplirse sus predicciones.

No se aplica a los cationes mono y divalentes de la primera serie de transición.

**Figura 8.25(a)** De arriba hacia abajo crece el valor de  $(n + l)$ . Los orbitales en la misma fila tienen idéntica suma  $(n + l)$ , pero debe llenarse primero el de menor  $n$ ; o sea, el que está más a la izquierda.



# Funciones normalizadas

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

$$\int \Psi^* \Psi \, d\tau = 1$$

Las funciones que son aceptables como soluciones de la ecuación de onda deben ser: continuas, monovaluadas, cuadrado integrables, normalizadas y antisimétricas.





# Principio de exclusión

- Propuesto por W. Pauli en 1925.

“En un átomo no puede haber dos o más electrones con los mismos 4 números cuánticos”

- Posteriormente, Pauli propone un principio más general que contendría al principio de exclusión.



# Principio de antisimetría

- Propuesto por W. Pauli en 1940.
- Una función antisimétrica cambia de signo ante el intercambio de dos partículas idénticas, una función simétrica no lo cambia.

$$\textit{Antisimétrica: } \psi(1,2) = -\psi(2,1) \qquad \textit{Simétrica: } \psi(1,2) = \psi(2,1)$$

- Los sistemas compuestos por partículas idénticas con espín entero (***bosones***) deben estar descritos por funciones de onda simétricas.
- Los sistemas compuestos por partículas idénticas con valores de espín no enteros múltiplos de  $\frac{1}{2}$  (***fermiones***) deben estar descritos por funciones de onda antisimétricas.
- Los electrones protones y neutrones son ***fermiones***.
- De aquí se deriva el principio de exclusión de Pauli.



# Funciones de onda antisimétricas, ejemplo: el helio

$$\Psi = \begin{vmatrix} \chi_1(1) & \chi_2(1) \\ \chi_1(2) & \chi_2(2) \end{vmatrix} = \chi_1(1)\chi_2(2) - \chi_1(2)\chi_2(1)$$

Determinante de Slater

donde  $\chi_1$  y  $\chi_2$  son:

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \phi_{1s}(n)\alpha(n) \\ \chi_2 &= \phi_{1s}(n)\beta(n) \end{aligned}$$

*espín-orbitales:*

la parte espacial  $\phi_{1s}$  multiplicada por una función de espín  $\alpha(n)$  ó  $\beta(n)$

$$\Psi = A \begin{vmatrix} \chi_1(1) & \chi_2(1) \\ \chi_1(2) & \chi_2(2) \end{vmatrix} = A \begin{vmatrix} \phi_{1s}(1)\alpha(1) & \phi_{1s}(1)\beta(1) \\ \phi_{1s}(2)\alpha(2) & \phi_{1s}(2)\beta(2) \end{vmatrix} = 1s^2$$

factor de normalización

Los números entre paréntesis se refieren a los electrones 1 y 2 del helio



# Funciones de onda antisimétricas, ejemplo: el litio

$$\Psi(1,2,3) = A \begin{vmatrix} \phi_{1s}(1)\alpha(1) & \phi_{1s}(1)\beta(1) & \phi_{1s}(1)\alpha(1) \\ \phi_{1s}(2)\alpha(2) & \phi_{1s}(2)\beta(2) & \phi_{1s}(2)\alpha(2) \\ \phi_{1s}(3)\alpha(3) & \phi_{1s}(3)\beta(3) & \phi_{1s}(3)\alpha(3) \end{vmatrix} = 1s^3 = \mathbf{! 0 !}$$

El determinante anterior se anula pues la primera y tercera filas se repiten.

Por eso al litio se le asigna una configuración:  $1s^2 2s^1$  :

$$\Psi(1,2,3) = A \begin{vmatrix} \phi_{1s}(1)\alpha(1) & \phi_{1s}(1)\beta(1) & \phi_{2s}(1)\alpha(1) \\ \phi_{1s}(2)\alpha(2) & \phi_{1s}(2)\beta(2) & \phi_{2s}(2)\alpha(2) \\ \phi_{1s}(3)\alpha(3) & \phi_{1s}(3)\beta(3) & \phi_{2s}(3)\alpha(3) \end{vmatrix} = 1s^2 2s^1$$

Se concluye que: *en un mismo átomo, no puede haber dos electrones con sus cuatro números cuánticos iguales*, pues la función de onda y, por ende, su cuadrado se anularían lo que implica que la probabilidad de tener dos electrones con el mismo espín en cero.

El famoso principio de exclusión de Pauli es, como pueden ver, una consecuencia del principio de antisimetría.



# Espín orbitales

Para 3 electrones la configuración será:

$$\Psi(1,2,3) = A \begin{vmatrix} \phi_{1s}(1)\alpha(1) & \phi_{1s}(1)\beta(1) & \phi_{2s}(1)\alpha(1) \\ \phi_{1s}(2)\alpha(2) & \phi_{1s}(2)\beta(2) & \phi_{2s}(2)\alpha(2) \\ \phi_{1s}(3)\alpha(3) & \phi_{1s}(3)\beta(3) & \phi_{2s}(3)\alpha(3) \end{vmatrix} = 1s^2 2s^1$$

en forma más compacta:

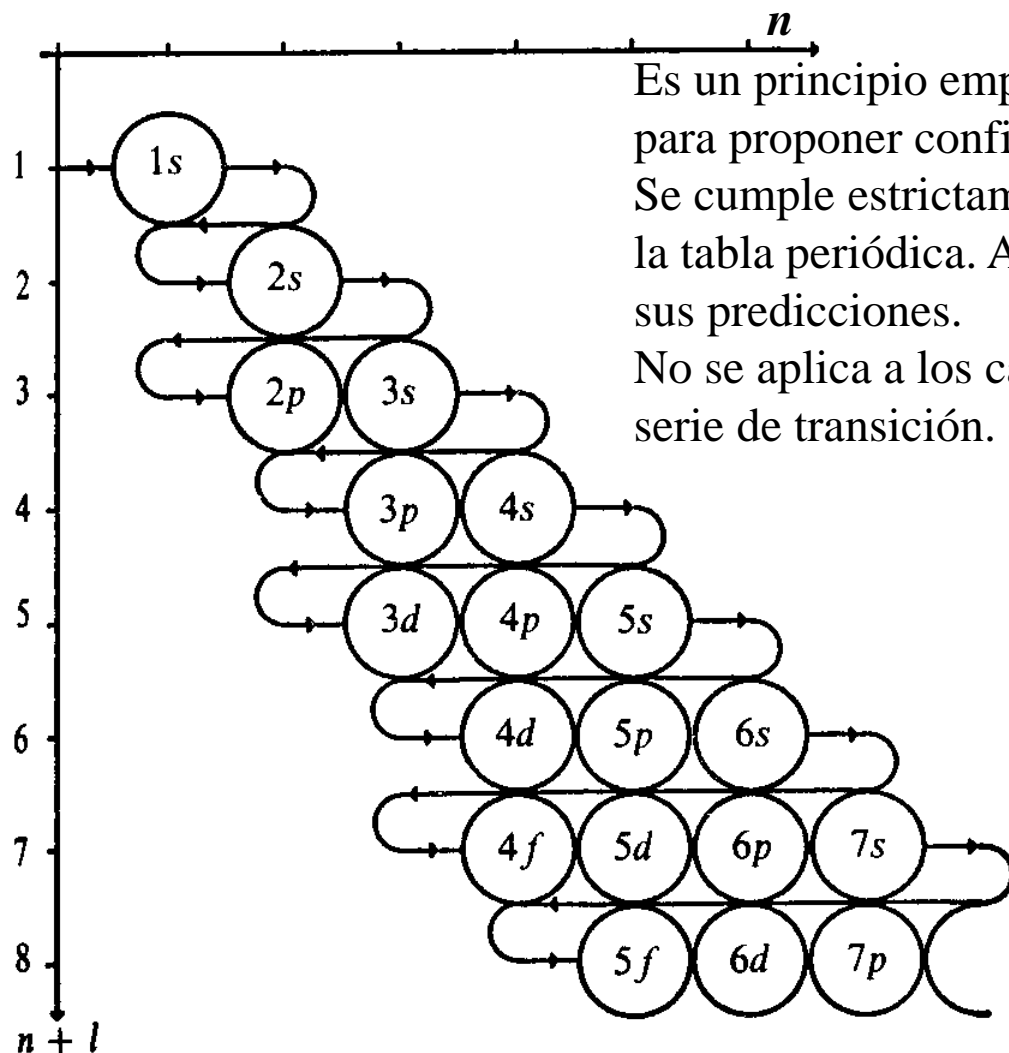
$$\Psi(1,2,3) = A \begin{vmatrix} \chi_1(1) & \chi_2(1) & \chi_3(1) \\ \chi_1(2) & \chi_2(2) & \chi_3(2) \\ \chi_1(3) & \chi_2(3) & \chi_3(3) \end{vmatrix}$$

Para  $N$  electrones:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \chi_1(1) & \chi_2(1) & \cdots & \chi_N(1) \\ \chi_1(2) & \chi_2(2) & \cdots & \chi_N(2) \\ \vdots & \vdots & & \\ \chi_1(N) & \chi_2(N) & \cdots & \chi_N(N) \end{vmatrix}$$



# El principio de construcción (aufbau)



Es un principio empírico que sirve de guía, más no de regla, para proponer configuraciones electrónicas aproximadas. Se cumple estrictamente para los primeros 20 elementos de la tabla periódica. A partir del cromo empiezan a no cumplirse sus predicciones.

No se aplica a los cationes mono y divalentes de la primera serie de transición.

**Figura 8.25(a)** De arriba hacia abajo crece el valor de  $(n + l)$ . Los orbitales en la misma fila tienen idéntica suma  $(n + l)$ , pero debe llenarse primero el de menor  $n$ ; o sea, el que está más a la izquierda.



# Las excepciones al principio de construcción.

- Solo se cumple rigurosamente hasta el calcio ( $N=20$ ).
- A partir de éste empiezan a aparecer excepciones en muchas configuraciones.
- Las configuraciones de los iones mono y divalentes de los metales de la primera serie de transición.
- Las configuraciones se asignan experimentalmente por medio de la espectroscopía.



# Las configuraciones de los cationes.

Considera las siguientes recomendaciones:

- Primero construye la configuración electrónica de la especie neutra.
- Retira los electrones que se requieran. Empieza con aquellos situados en el orbital con mayor número cuántico principal,  $n$ .
- De existir varios orbitales con el mismo valor en el número cuántico principal,  $n$ , retira el electrón del orbital con el mayor valor en el número cuántico de momento angular,  $l$ .





# Las reglas de Hund

**1a:** Dada una configuración, el estado con menor energía será aquél con la máxima multiplicidad de espín.

$$S = 2s + 1$$

donde:

$$s = \sum_{i=1}^n S_i$$



# Términos espectroscópicos

- Espectroscopía y transiciones electrónicas. Ver el video:

[https://drive.google.com/file/d/167eFlbTnnzl5L74lwmBdY\\_KEz5jAskjl/view?usp=sharing](https://drive.google.com/file/d/167eFlbTnnzl5L74lwmBdY_KEz5jAskjl/view?usp=sharing)

# Las configuraciones

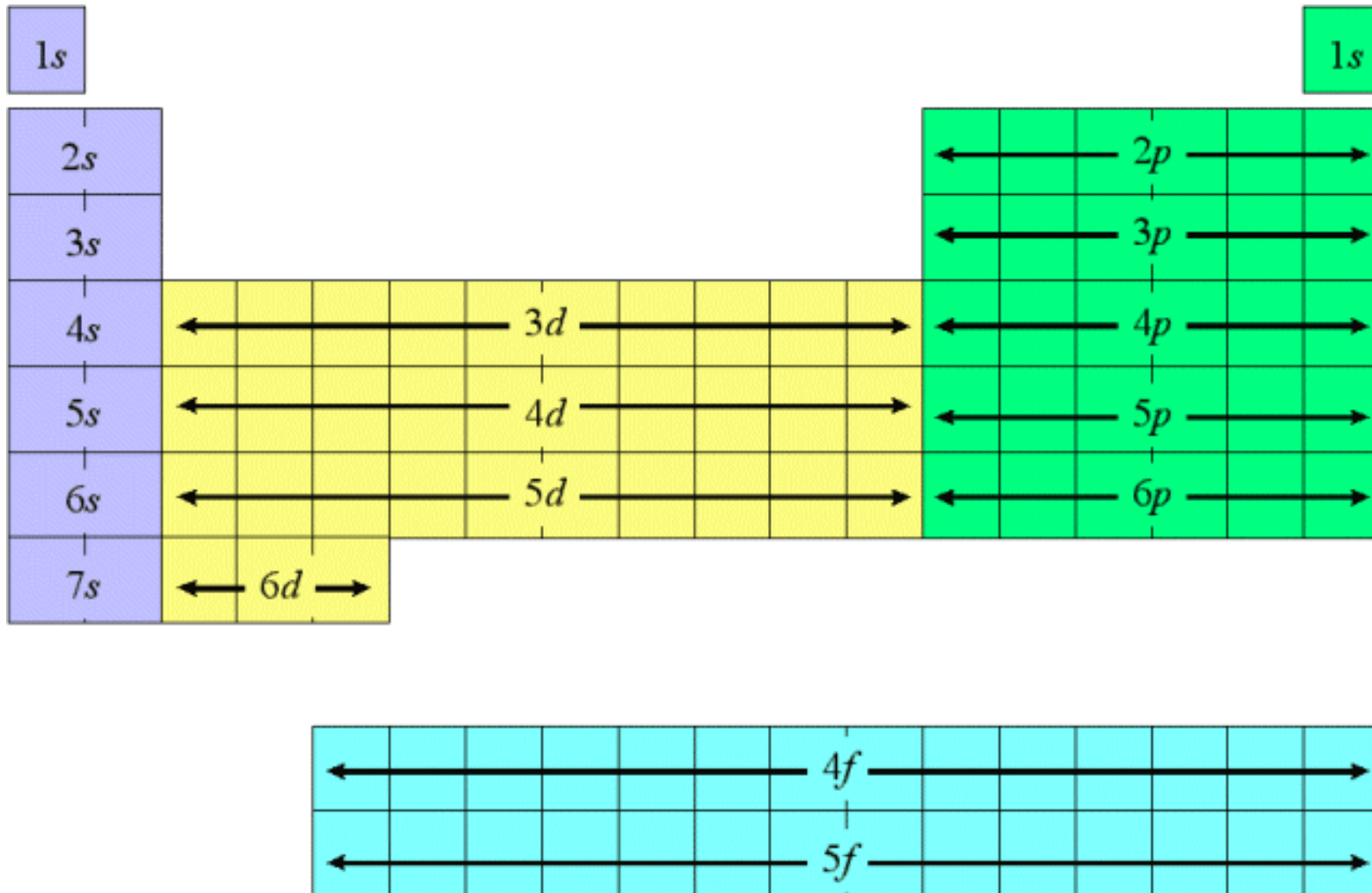
Únicamente de la capa de valencia

1 H $1s^1$																2 He $1s^2$					
3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$															5 B $2s^2 2p^1$	6 C $2s^2 2p^2$	7 N $2s^2 2p^3$	8 O $2s^2 2p^4$	9 F $2s^2 2p^5$	10 Ne $2s^2 2p^6$
11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$															13 Al $3s^2 3p^1$	14 Si $3s^2 3p^2$	15 P $3s^2 3p^3$	16 S $3s^2 3p^4$	17 Cl $3s^2 3p^5$	18 Ar $3s^2 3p^6$
19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $4s^2 3d^1$	22 Ti $4s^2 3d^2$	23 V $4s^2 3d^3$	24 Cr $4s^1 3d^5$	25 Mn $4s^2 3d^5$	26 Fe $4s^2 3d^6$	27 Co $4s^2 3d^7$	28 Ni $4s^2 3d^8$	29 Cu $4s^1 3d^{10}$	30 Zn $4s^2 3d^{10}$	31 Ga $4s^2 3d^{10} 4p^1$	32 Ge $4s^2 3d^{10} 4p^2$	33 As $4s^2 3d^{10} 4p^3$	34 Se $4s^2 3d^{10} 4p^4$	35 Br $4s^2 3d^{10} 4p^5$	36 Kr $4s^2 3d^{10} 4p^6$				
37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $5s^2 4d^1$	40 Zr $5s^2 4d^2$	41 Nb $5s^1 4d^4$	42 Mo $5s^1 4d^5$	43 Tc $5s^2 4d^5$	44 Ru $5s^1 4d^7$	45 Rh $5s^1 4d^8$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $5s^1 4d^{10}$	48 Cd $5s^2 4d^{10}$	49 In $5s^2 4d^{10} 5p^1$	50 Sn $5s^2 4d^{10} 5p^2$	51 Sb $5s^2 4d^{10} 5p^3$	52 Te $5s^2 4d^{10} 5p^4$	53 I $5s^2 4d^{10} 5p^5$	54 Xe $5s^2 4d^{10} 5p^6$				
55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 La $6s^2 5d^1$	72 Hf $6s^2 4f^{14} 5d^2$	73 Ta $6s^2 4f^{14} 5d^3$	74 W $6s^2 4f^{14} 5d^4$	75 Re $6s^2 4f^{14} 5d^5$	76 Os $6s^2 4f^{14} 5d^6$	77 Ir $6s^2 4f^{14} 5d^7$	78 Pt $6s^1 4f^{14} 5d^9$	79 Au $6s^1 4f^{14} 5d^{10}$	80 Hg $6s^2 4f^{14} 5d^{10}$	81 Tl $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^1$	82 Pb $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$	83 Bi $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$	84 Po $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^4$	85 At $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^5$	86 Rn $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$				
87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 Ac $7s^2 6d^1$	104 Rf $7s^2 5f^{14} 6d^2$	105 Db $7s^2 5f^{14} 6d^3$	106 Sg $7s^2 5f^{14} 6d^4$	107 Bh $7s^2 5f^{14} 6d^5$	108 Hs $7s^2 5f^{14} 6d^6$	109 Mt $7s^2 5f^{14} 6d^7$	110 —	111 —	112 —	114 —		116 —							

58 Ce $6s^2 4f^1 5d^1$	59 Pr $6s^2 4f^3$	60 Nd $6s^2 4f^4$	61 Pm $6s^2 4f^5$	62 Sm $6s^2 4f^6$	63 Eu $6s^2 4f^7$	64 Gd $6s^2 4f^7 5d^1$	65 Tb $6s^2 4f^9$	66 Dy $6s^2 4f^{10}$	67 Ho $6s^2 4f^{11}$	68 Er $6s^2 4f^{12}$	69 Tm $6s^2 4f^{13}$	70 Yb $6s^2 4f^{14}$	71 Lu $6s^2 4f^{14} 5d^1$
90 Th $7s^2 6d^2$	91 Pa $7s^2 5f^2 6d^1$	92 U $7s^2 5f^3 6d^1$	93 Np $7s^2 5f^4 6d^1$	94 Pu $7s^2 5f^6$	95 Am $7s^2 5f^7$	96 Cm $7s^2 5f^7 6d^1$	97 Bk $7s^2 5f^9$	98 Cf $7s^2 5f^{10}$	99 Es $7s^2 5f^{11}$	100 Fm $7s^2 5f^{12}$	101 Md $7s^2 5f^{13}$	102 No $7s^2 5f^{14}$	103 Lr $7s^2 5f^{14} 6d^1$



# La tabla periódica y el modelo mecánico-cuántico





# Algunas energías

Energía total electrónica

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{2N} \varepsilon_i - G$$

Repulsión interelectrónica

$$G = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (J_{i,j} - K_{i,j})$$

Valor promedio de la repulsión interelectrónica

$$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle = J \pm K$$

Energía de intercambio

$$E_{ex} = \sum \frac{N(N-1)}{2} K$$

$$J = \iint [\phi_{1s}(1)]^2 \left( \frac{1}{r_{12}} \right) [\phi_{2s}(2)]^2 dV_1 dV_2$$

Integral coulómbica

$$K = \iint [\phi_{1s}(1)][\phi_{2s}(1)] \left( \frac{1}{r_{12}} \right) [\phi_{1s}(2)][\phi_{2s}(2)] dV_1 dV_2$$

Integral de intercambio

$$E_{corr} = E_{exacta} - E_{HF}$$

Energía de correlación



# Modelo de la aproximación orbital

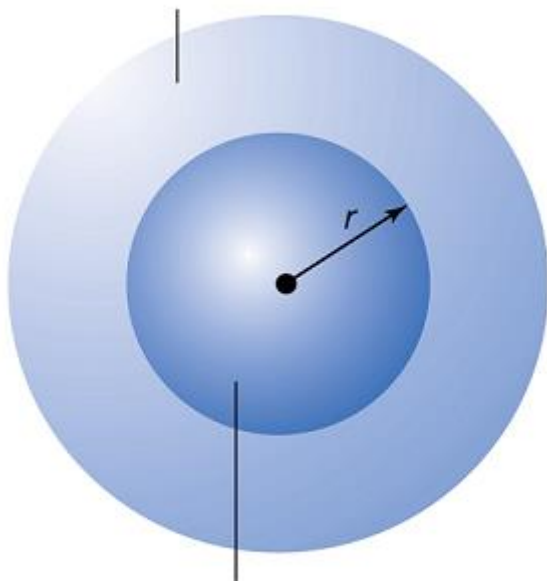
La función de onda,  $\Psi$ , de un átomo de  $N$  electrones puede expresarse como el producto de las  $N$  funciones de onda de cada uno de esos electrones (orbitales)

$$\Psi(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) = \psi_1(\mathbf{q}_1) \psi_2(\mathbf{q}_2) \dots \psi_N(\mathbf{q}_N)$$

(*electrones independientes*)

$\mathbf{q}_i$ : coordenadas espaciales del electrón  $i$ -ésimo  
 $\psi_i(\mathbf{q}_i)$ : orbital hidrogenoide.

Electrones que prácticamente no contribuyen al apantallamiento



Electrones que contribuyen fuertemente al apantallamiento

¿Cómo cuantificar las repulsiones interelectrónicas?: **carga nuclear efectiva**

$Z_{ef}$  = carga sobre un electrón particular a una distancia  $r$  del núcleo

$$Z_{ef} = Z - s$$

$Z$  = carga nuclear formal

$s$  = constante de apantallamiento.

# Penetración y apantallamiento

## Cargas nucleares efectivas para los electrones de los primeros 18 átomos

	n	1	2	2	3	3
Z		1s	2s	2p	3s	3p
1	H	1				
2	He	1,69				
3	Li	2,69	1,28			
4	Be	3,68	1,91			
5	B	4,68	2,58	2,42		
6	C	5,67	3,22	3,14		
7	N	6,66	3,85	3,83		
8	O	7,66	4,49	4,45		
9	F	8,65	5,13	5,10		
10	Ne	9,64	5,76	5,76		
11	Na	10,63	6,57	6,80	2,51	
12	Mg	11,61	7,39	7,83	3,31	
13	Al	12,59	8,21	8,96	4,12	4,07
14	Si	13,57	9,02	9,94	4,90	4,29
15	P	14,56	9,82	10,96	5,64	4,89
16	S	15,54	10,63	11,98	6,37	5,48
17	Cl	16,52	11,43	12,99	7,07	6,12
18	Ar	17,51	12,23	14,01	7,76	6,76

El orbital 2s es **penetrante** respecto al 1s.

Para un orbital 2s, el **apantallamiento** de un 1s no será  $-1$ , sino un valor menor en valor absoluto.

El orbital 3s es **penetrante** respecto al 2s y 2p.

En la capa de valencia la carga efectiva sobre los orbitales s es mayor que sobre los p como consecuencia de la mayor **penetración** de los primeros.

Los electrones 1s son muy internos y están muy poco apantallados.

Para un orbital cualquiera  $Z_{ef}$  aumenta con el número  $n$ .

En la capa de valencia,  $Z_{ef}(s) > Z_{ef}(p) > Z_{ef}(d) > Z_{ef}(f)$

$$Z_{ef} = Z - s$$





# La Tabla "oficial" en noviembre de 2016

IUPAC Periodic Table of the Elements

1 <b>H</b> hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																	2 <b>He</b> helium 4.0026
3 <b>Li</b> lithium 6.94 [6.938, 6.997]	4 <b>Be</b> beryllium 9.0122	Key: atomic number <b>Symbol</b> name conventional atomic weight standard atomic weight										13 <b>B</b> boron 10.81 [10.806, 10.821]	14 <b>C</b> carbon 12.011 [12.009, 12.012]	15 <b>N</b> nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]	16 <b>O</b> oxygen 15.999 [15.999, 16.000]	17 <b>F</b> fluorine 18.998	18 <b>Ne</b> neon 20.180
11 <b>Na</b> sodium 22.990	12 <b>Mg</b> magnesium 24.305 [24.304, 24.307]	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 <b>Al</b> aluminium 26.982	14 <b>Si</b> silicon 28.085 [28.084, 28.086]	15 <b>P</b> phosphorus 30.974	16 <b>S</b> sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 <b>Cl</b> chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 <b>Ar</b> argon 39.948
19 <b>K</b> potassium 39.098	20 <b>Ca</b> calcium 40.078(4)	21 <b>Sc</b> scandium 44.956	22 <b>Ti</b> titanium 47.867	23 <b>V</b> vanadium 50.942	24 <b>Cr</b> chromium 51.996	25 <b>Mn</b> manganese 54.938	26 <b>Fe</b> iron 55.845(2)	27 <b>Co</b> cobalt 58.933	28 <b>Ni</b> nickel 58.693	29 <b>Cu</b> copper 63.546(3)	30 <b>Zn</b> zinc 65.38(2)	31 <b>Ga</b> gallium 69.723	32 <b>Ge</b> germanium 72.630(8)	33 <b>As</b> arsenic 74.922	34 <b>Se</b> selenium 78.971(8)	35 <b>Br</b> bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 <b>Kr</b> krypton 83.798(2)
37 <b>Rb</b> rubidium 85.468	38 <b>Sr</b> strontium 87.62	39 <b>Y</b> yttrium 88.906	40 <b>Zr</b> zirconium 91.224(2)	41 <b>Nb</b> niobium 92.906	42 <b>Mo</b> molybdenum 95.95	43 <b>Tc</b> technetium 101.07(2)	44 <b>Ru</b> ruthenium 102.91	45 <b>Rh</b> rhodium 106.42	46 <b>Pd</b> palladium 107.87	47 <b>Ag</b> silver 112.41	48 <b>Cd</b> cadmium 112.41	49 <b>In</b> indium 114.82	50 <b>Sn</b> tin 118.71	51 <b>Sb</b> antimony 121.76	52 <b>Te</b> tellurium 127.60(3)	53 <b>I</b> iodine 126.90	54 <b>Xe</b> xenon 131.29
55 <b>Cs</b> caesium 132.91	56 <b>Ba</b> barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 <b>Hf</b> hafnium 178.49(2)	73 <b>Ta</b> tantalum 180.95	74 <b>W</b> tungsten 183.84	75 <b>Re</b> rhenium 186.21	76 <b>Os</b> osmium 190.23(3)	77 <b>Ir</b> iridium 192.22	78 <b>Pt</b> platinum 195.08	79 <b>Au</b> gold 196.97	80 <b>Hg</b> mercury 200.59	81 <b>Tl</b> thallium 204.38 [204.38, 204.39]	82 <b>Pb</b> lead 207.2	83 <b>Bi</b> bismuth 208.98	84 <b>Po</b> polonium	85 <b>At</b> astatine	86 <b>Rn</b> radon
87 <b>Fr</b> francium	88 <b>Ra</b> radium	89-103 actinoids	104 <b>Rf</b> rutherfordium	105 <b>Db</b> dubnium	106 <b>Sg</b> seaborgium	107 <b>Bh</b> bohrium	108 <b>Hs</b> hassium	109 <b>Mt</b> meitnerium	110 <b>Ds</b> darmstadtium	111 <b>Rg</b> roentgenium	112 <b>Cn</b> copernicium	113 <b>Nh</b> nihonium	114 <b>Fl</b> flerovium	115 <b>Mc</b> moscovium	116 <b>Lv</b> livermorium	117 <b>Ts</b> tennessine	118 <b>Og</b> oganesson



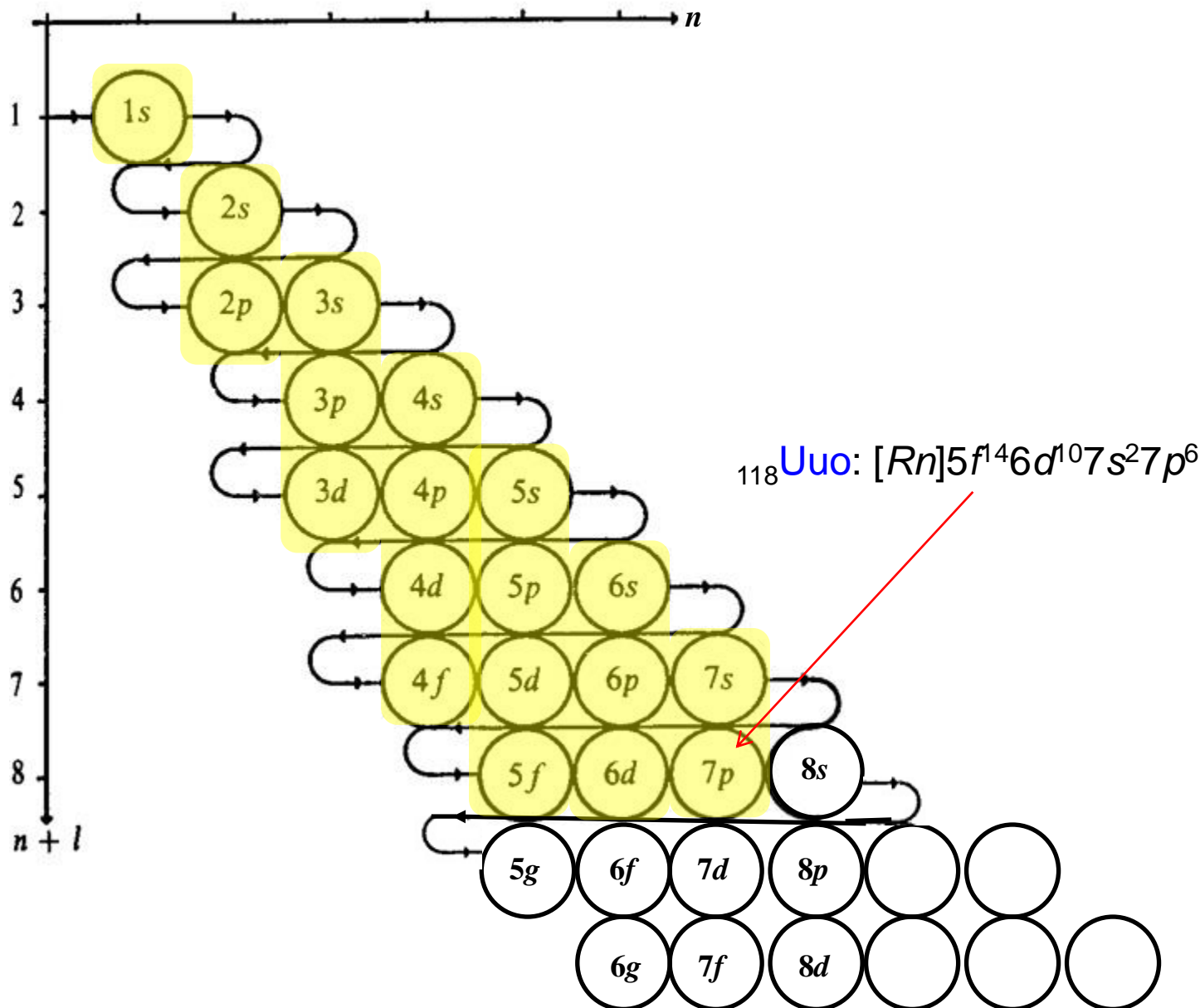
57 <b>La</b> lanthanum 138.91	58 <b>Ce</b> cerium 140.12	59 <b>Pr</b> praseodymium 140.91	60 <b>Nd</b> neodymium 144.24	61 <b>Pm</b> promethium	62 <b>Sm</b> samarium 150.36(2)	63 <b>Eu</b> europium 151.96	64 <b>Gd</b> gadolinium 157.25(3)	65 <b>Tb</b> terbium 158.93	66 <b>Dy</b> dysprosium 162.50	67 <b>Ho</b> holmium 164.93	68 <b>Er</b> erbium 167.26	69 <b>Tm</b> thulium 168.93	70 <b>Yb</b> ytterbium 173.05	71 <b>Lu</b> lutetium 174.97
89 <b>Ac</b> actinium 227.03	90 <b>Th</b> thorium 232.04	91 <b>Pa</b> protactinium 231.04	92 <b>U</b> uranium 238.03	93 <b>Np</b> neptunium	94 <b>Pu</b> plutonium	95 <b>Am</b> americium	96 <b>Cm</b> curium	97 <b>Bk</b> berkelium	98 <b>Cf</b> californium	99 <b>Es</b> einsteinium	100 <b>Fm</b> fermium	101 <b>Md</b> mendelevium	102 <b>No</b> nobelium	103 <b>Lr</b> lawrencium

For notes and updates to this table, see [www.iupac.org](http://www.iupac.org). This version is dated 28 November 2016.  
Copyright © 2016 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.





# Los elementos del futuro





# La tabla periódica del futuro

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Ha	106 Sg	107 Ns	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	(113) Nh	(114) Fv	(115) Mc	(116) Lv	(117) Ts	(118) Og
(119)	(120)	(121)	(154)	(155)	(156)	(157)	(158)	(159)	(160)	(161)	(162)	(163)	(164)	(165)	(166)	(167)	(168)

Número atómico

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr
----------	----------	---------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	-----------	-----------	-----------	-----------

(122)	(123)	(124)	(125)	(126)											(153)
-------	-------	-------	-------	-------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	-------



# Tema pospuesto:

- La partícula en una caja de potencial.  
Ilustra como interpretar la función de onda y su cuadrado, así como la aparición de los números cuánticos y su relación con la energía.



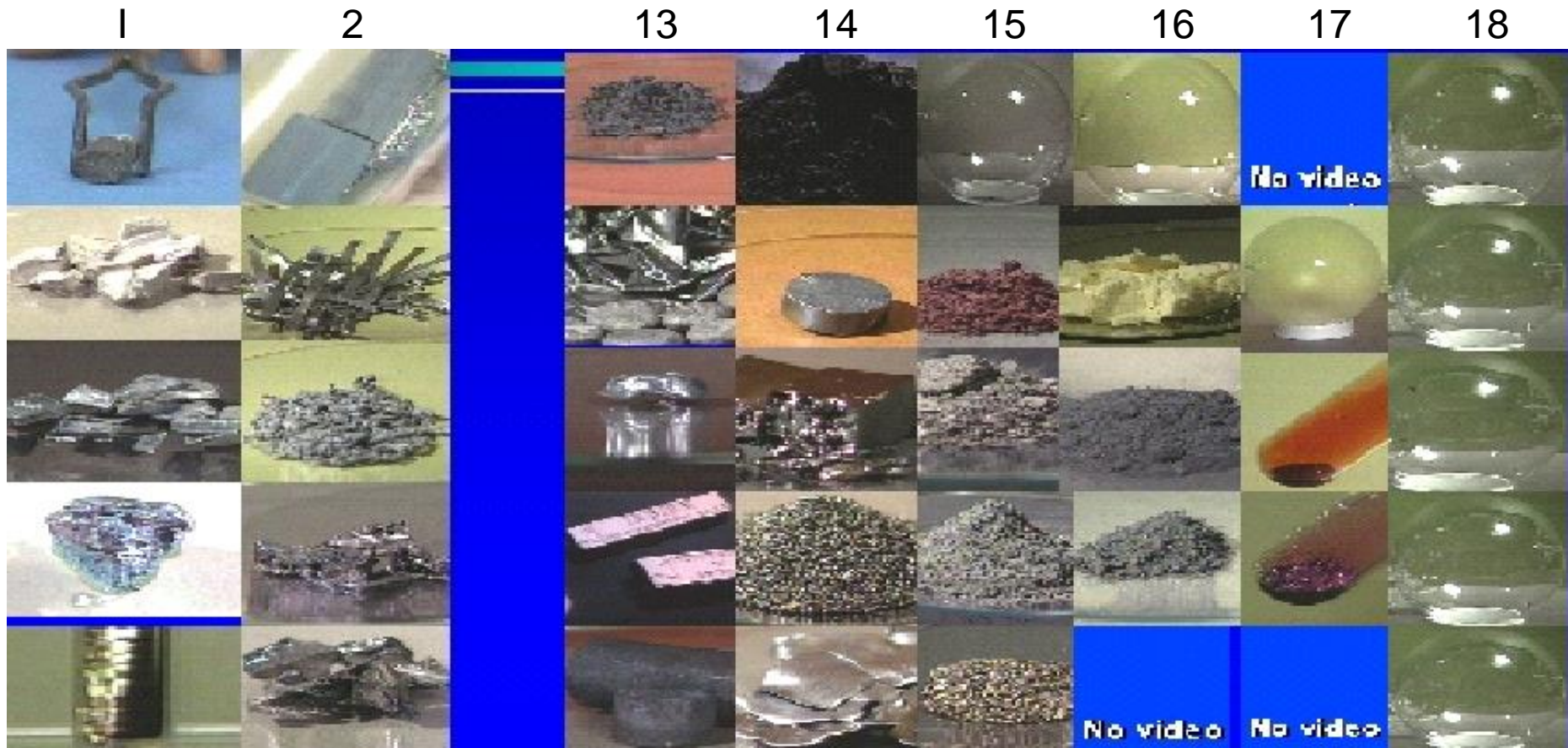
# La ley periódica

“Si ordenamos a los elementos en orden ascendente de su número atómico, sus propiedades se repiten o presentan variaciones periódicamente”

¿Cuáles son las propiedades periódicas?



# Los elementos y su aspecto





# Estado de agregación

	1											18						
1	<b>H</b> 1.0079											<b>He</b> 4.0026						
2	<b>Li</b> 6.941	<b>Be</b> 9.0122											<b>B</b> 10.811	<b>C</b> 12.011	<b>N</b> 14.007	<b>O</b> 15.999	<b>F</b> 18.998	<b>Ne</b> 20.18
3	<b>Na</b> 22.99	<b>Mg</b> 24.305											<b>Al</b> 26.982	<b>Si</b> 28.086	<b>P</b> 30.974	<b>S</b> 32.066	<b>Cl</b> 35.453	<b>Ar</b> 39.948
4	<b>K</b> 39.098	<b>Ca</b> 40.078	<b>Sc</b> 44.956	<b>Ti</b> 47.88	<b>V</b> 50.941	<b>Cr</b> 51.996	<b>Mn</b> 54.938	<b>Fe</b> 55.847	<b>Co</b> 58.933	<b>Ni</b> 58.693	<b>Cu</b> 63.546	<b>Zn</b> 65.39	<b>Ga</b> 69.723	<b>Ge</b> 72.61	<b>As</b> 74.922	<b>Se</b> 78.96	<b>Br</b> 79.904	<b>Kr</b> 83.8
5	<b>Rb</b> 85.468	<b>Sr</b> 87.62	<b>Y</b> 88.906	<b>Zr</b> 91.224	<b>Nb</b> 92.906	<b>Mo</b> 95.94	<b>Tc</b> (97.91)	<b>Ru</b> 101.07	<b>Rh</b> 102.91	<b>Pd</b> 106.42	<b>Ag</b> 107.87	<b>Cd</b> 112.41	<b>In</b> 114.82	<b>Sn</b> 118.71	<b>Sb</b> 121.76	<b>Te</b> 127.6	<b>I</b> 126.9	<b>Xe</b> 131.29
6	<b>Cs</b> 132.91	<b>Ba</b> 137.33	<b>La</b> 138.91	<b>Hf</b> 178.49	<b>Ta</b> 180.95	<b>W</b> 183.84	<b>Re</b> 186.21	<b>Os</b> 190.23	<b>Ir</b> 192.22	<b>Pt</b> 195.08	<b>Au</b> 196.97	<b>Hg</b> 200.59	<b>Tl</b> 204.38	<b>Pb</b> 207.2	<b>Bi</b> 208.98	<b>Po</b> (209)	<b>At</b> (210)	<b>Rn</b> (222)
7	<b>Fr</b> (223)	<b>Ra</b> (226)	<b>Ac</b> (227)	<b>Rf</b> (261.1)	<b>Db</b> (262.1)	<b>Sg</b> (263.1)	<b>Bh</b> (262.1)	<b>Hs</b> (265.1)	<b>Mt</b> (266.1)	<b>Uun</b> (269)	<b>Uuu</b> (272)	<b>Uub</b> (277)						



Gas



Sólido



Líquido

Lanthanide Series

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
<b>Ce</b>	<b>Pr</b>	<b>Nd</b>	<b>Pm</b>	<b>Sm</b>	<b>Eu</b>	<b>Gd</b>	<b>Tb</b>	<b>Dy</b>	<b>Ho</b>	<b>Er</b>	<b>Tm</b>	<b>Yb</b>	<b>Lu</b>
140.12	140.91	144.24	(144.9)	150.36	151.97	157.25	158.93	162.5	164.93	167.26	168.93	173.04	174.97

Actinide Series

90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
<b>Th</b>	<b>Pa</b>	<b>U</b>	<b>Np</b>	<b>Pu</b>	<b>Am</b>	<b>Cm</b>	<b>Bk</b>	<b>Cf</b>	<b>Es</b>	<b>Fm</b>	<b>Md</b>	<b>No</b>	<b>Lr</b>
232.04	231.04	238.03	(237)	(244.1)	(243.1)	(247.1)	(247.1)	(251.1)	(252.1)	(257.1)	(258.1)	(259.1)	(262.1)



# Estado de Agregación ?

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
2 Li	4 Be											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
3 Na	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7 Fr	88 Ra	89-103	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
Lantánidos			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
Actínidos			89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

■ Sólido	■ Gaseoso
■ Líquido	■ Desconocido



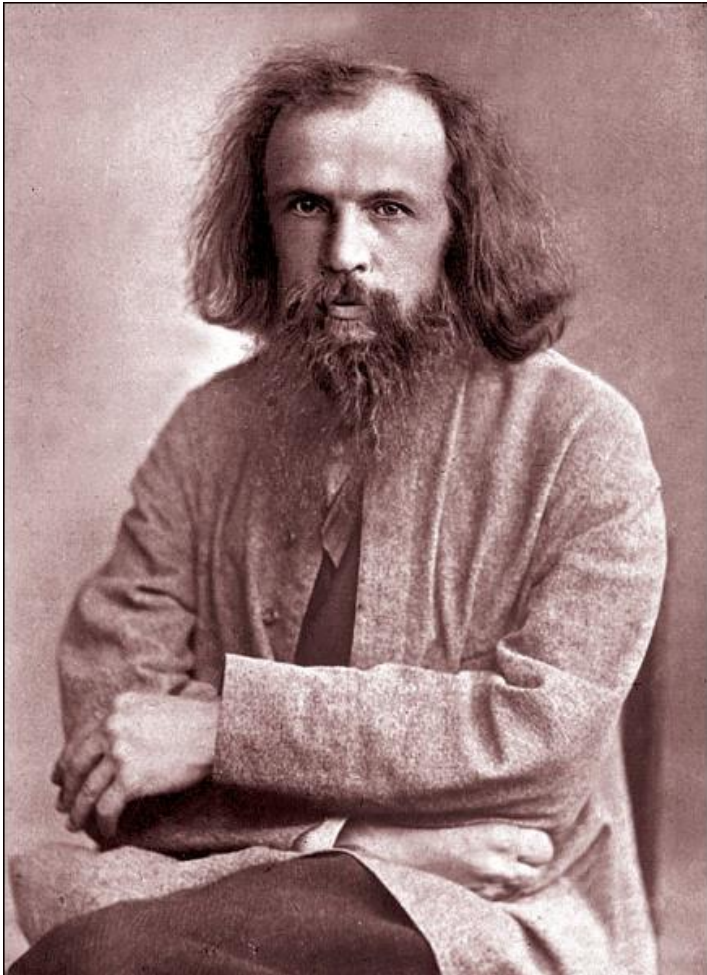
# La historia y los elementos

Fecha de descubrimiento																	
Antes de 1800			1800-1849				1850-1899				1900-1949			1950-2004			
1																18	
1 H 1.0079	2											13	14	15	16	17	2
3 Li 6.941	4 Be 9.0122											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.409	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89-103	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (277)	109 Mt (268)	110 Ds (271)	111 Uuu (272)	112 Uuu (272)	113 Uuu (272)	114 Uuu (272)	115 Uuu (272)	116 Uuu (272)	117 Uuu (272)	118 Uuu (272)
			57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
			89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)





# Dimitrij Ivanovič Mendělejev



En 1869, a los 35 años, presentó la ley periódica y su 1ª versión de la Tabla Periódica



# La ley periódica

“Si ordenamos a los elementos en orden ascendente de su número atómico, sus propiedades se repiten o varían periódicamente”

¿Cuáles son las propiedades periódicas?

<http://pubs.acs.org/cen/80th/elements.html>

*Systeme des Elements*  
*Essai d'une* *des Elements*  
*d'après leurs poids atomiques et*  
*fonctions chimiques par D. Mendeleeff*  
*publ. de l'Imprimerie de l'Université de Kazan, le 17 Fevrier 1869.*

*Менделѣевъ*  
*система элементовъ*

H=1	Li=7	Na=23	K=39	Rb=85	Cs=133
Be=9	B=12	C=12	N=14	O=16	F=19
Mg=24	Al=27	Si=28	P=31	S=32	Cl=35
Ca=40	Sc=45	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55
Fe=56	Ni=59	Cu=63	Zn=65	As=75	Se=78
Br=80	Sr=87	Y=90	Zr=92	Nb=94	Mo=96
Rh=104	Ru=101	Pd=106	Au=197	Hg=200	Pt=195
Ir=193	Os=192	Pl=200	U=238	Th=232	Pa=231
Ac=227	La=138	Ce=140	Pr=140	Nd=144	Pm=145
Sm=150	Eu=154	Gd=157	Tb=158	Dy=162	Ho=164
Er=167	Tm=168	Yb=173	Lu=175	Scandium	Yttrium
Indium	Thallium	Lead	Bismuth	Antimony	Arsenic
Tellurium	Selenium	Zinc	Cadmium	Mercury	Platinum
Gold	Silver	Copper	Nickel	Cobalt	Iron
Steel	Aluminum	Silicon	Phosphorus	Sulfur	Chlorine
Boron	Carbon	Nitrogen	Oxygen	Hydrogen	Lithium
Sodium	Potassium	Calcium	Strontium	Barium	Radium
Actinium	Thorium	Uranium	Protactinium	Polonium	Astatine
Francium	Radium	Actinium	Thorium	Uranium	Protactinium

18  $\frac{II}{17}$  69.

# La primera Tabla Periódica

Presentada el  
 6 de marzo de 1869 a la  
 Sociedad Química de  
 Rusia



# La tabla original, en limpio, de Dimitrij Ivanovič Mendělejev

## ОПЫТЪ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВЪ.

ОСНОВАННОЙ НА ИХЪ АТОМНОМЪ ВѢСѢ И ХИМИЧЕСКОМЪ СХОДСТВѢ.

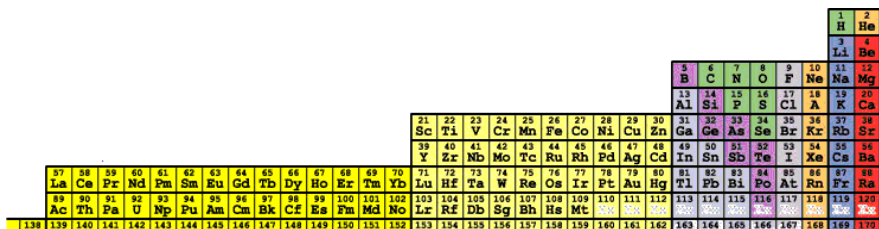
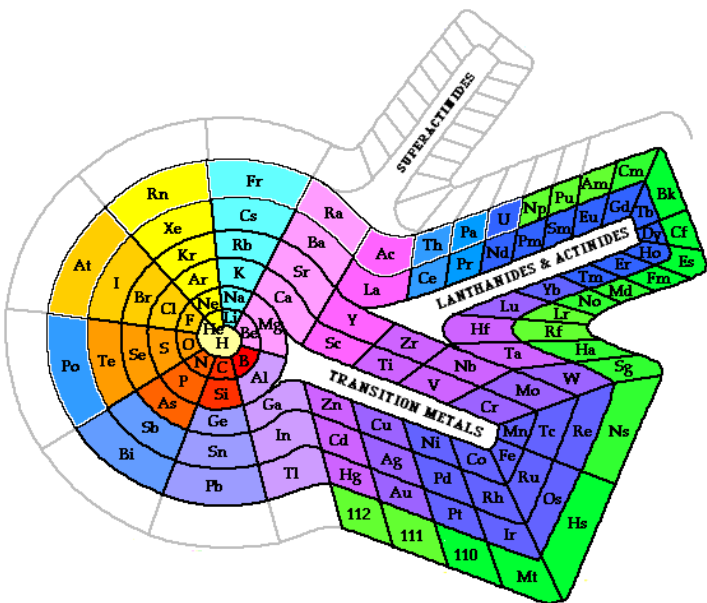
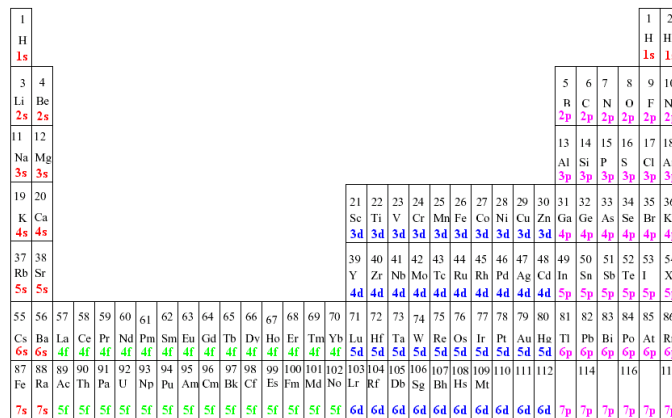
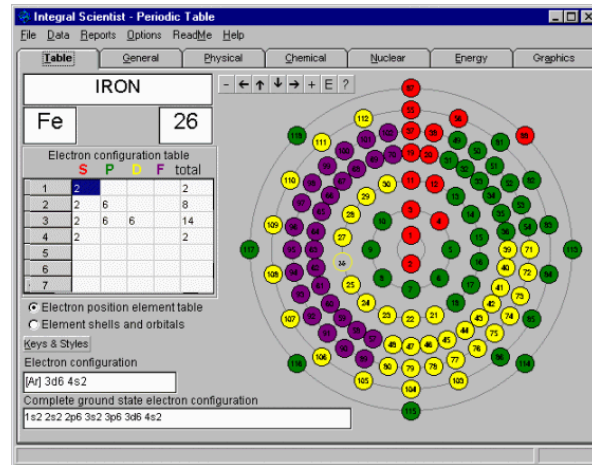
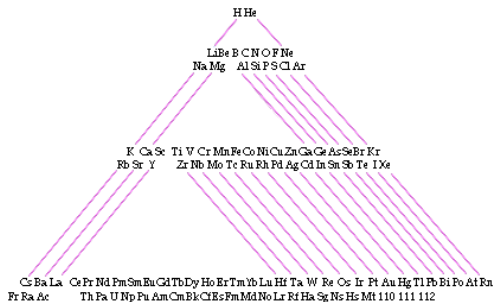
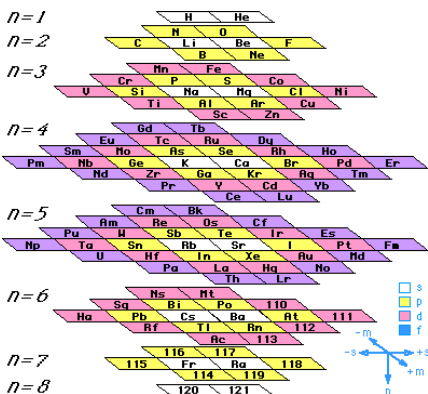
			Ti = 50	Zr = 90	? = 180.
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182.
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186.
			Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4
			Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198.
			Ni = 59	Pd = 106,8	Os = 199.
			Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200.
H = 1	Be = 9,4	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112	
	B = 11	Al = 27,4	? = 68	U = 116	Au = 197?
	C = 12	Si = 28	? = 70	Sn = 118	
	N = 14	P = 31	As = 75	Sb = 122	Bi = 210?
	O = 16	S = 32	Se = 79,4	Te = 128?	
	F = 19	Cl = 35,5	Br = 80	I = 127	
Li = 7	Na = 23	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133	Tl = 204.
		Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137	Pb = 207.
		? = 45	Ce = 92		
		?Er = 56	La = 94		
		?Yt = 60	Di = 95		
		?In = 75,6	Th = 118?		

Д. Менделѣевъ



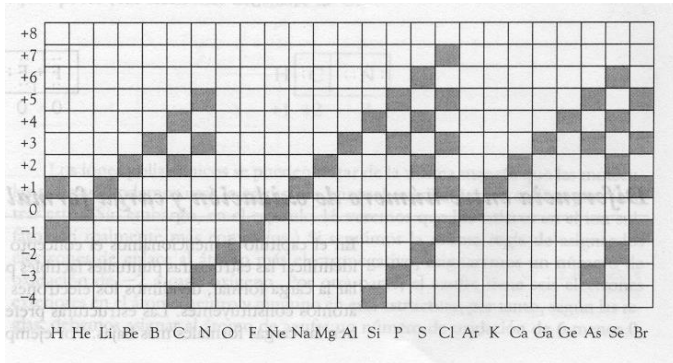
# Las diferentes tablas

## ¡ hay más de 600 !

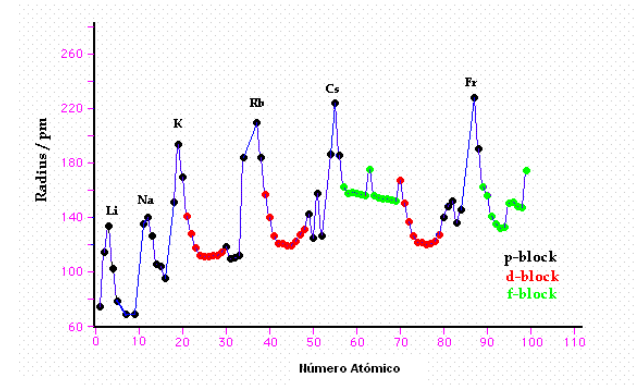




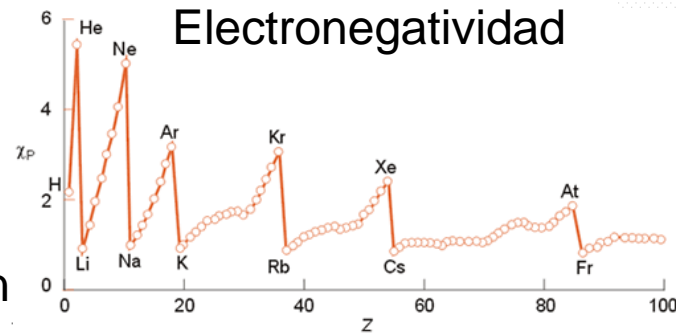
# Propiedades que tienen variaciones periódicas



Estado de oxidación

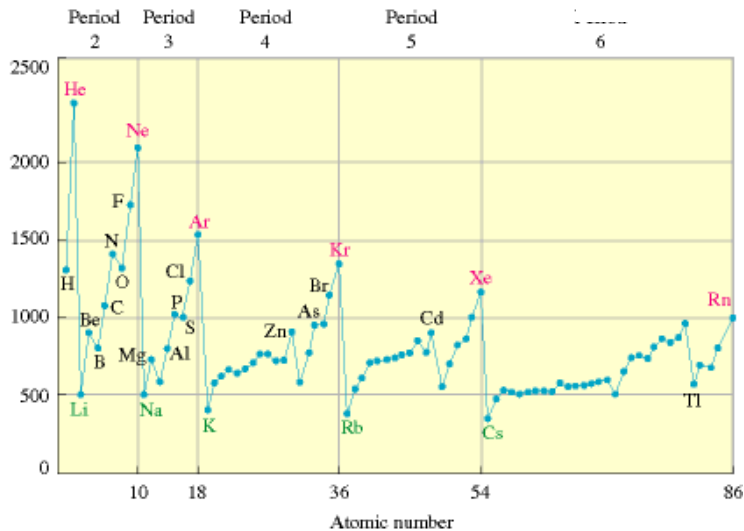


Tamaño

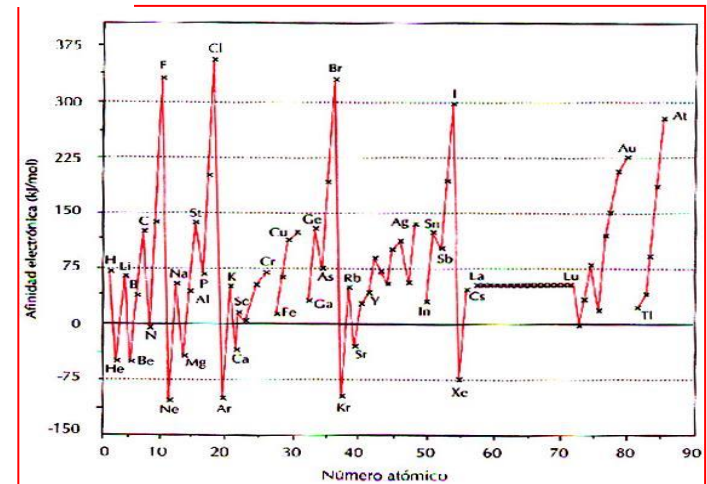


Electronegatividad

Energía de ionización

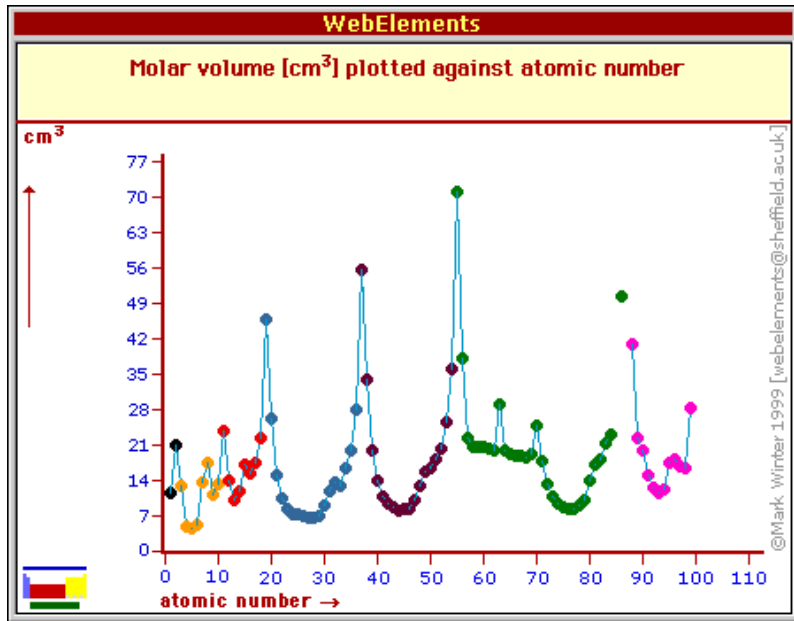


Afinidad electrónica



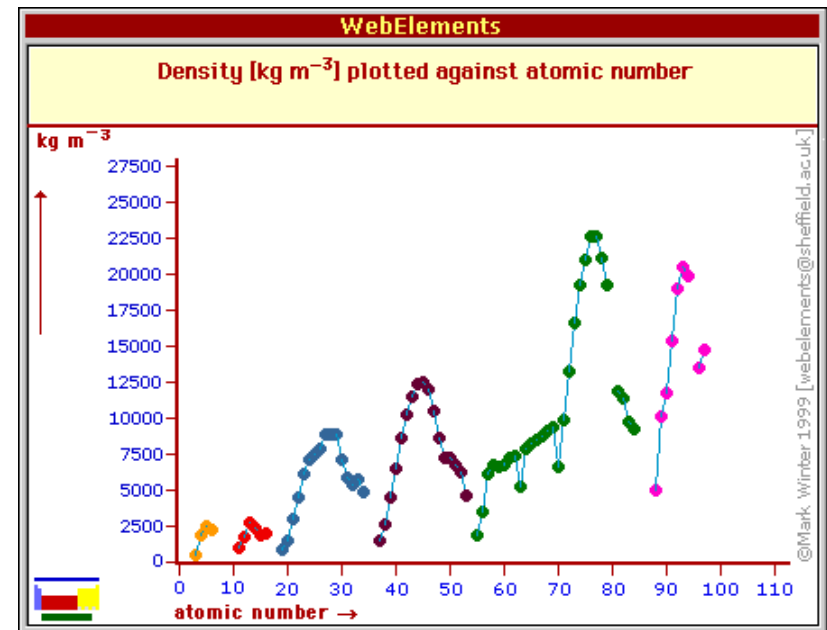


# Propiedades que tienen variaciones periódicas



Volumen molar

Densidad





# Elementos y compuestos

Los elementos químicos que conocemos provienen de una larga y compleja serie de procesos en el Universo que apenas empezamos a comprender.

Los compuestos de esos elementos reportados son:

**70 493 385 a las 18:10 hrs. 30/ene/2013**

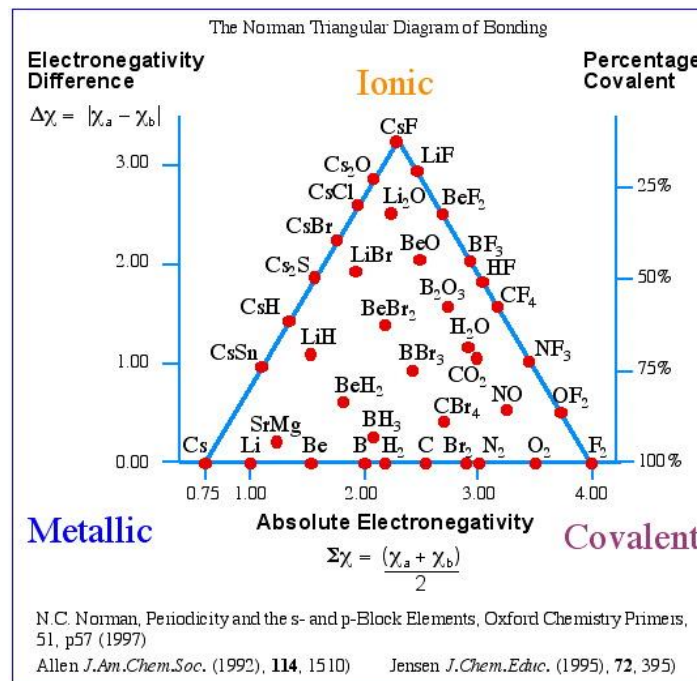
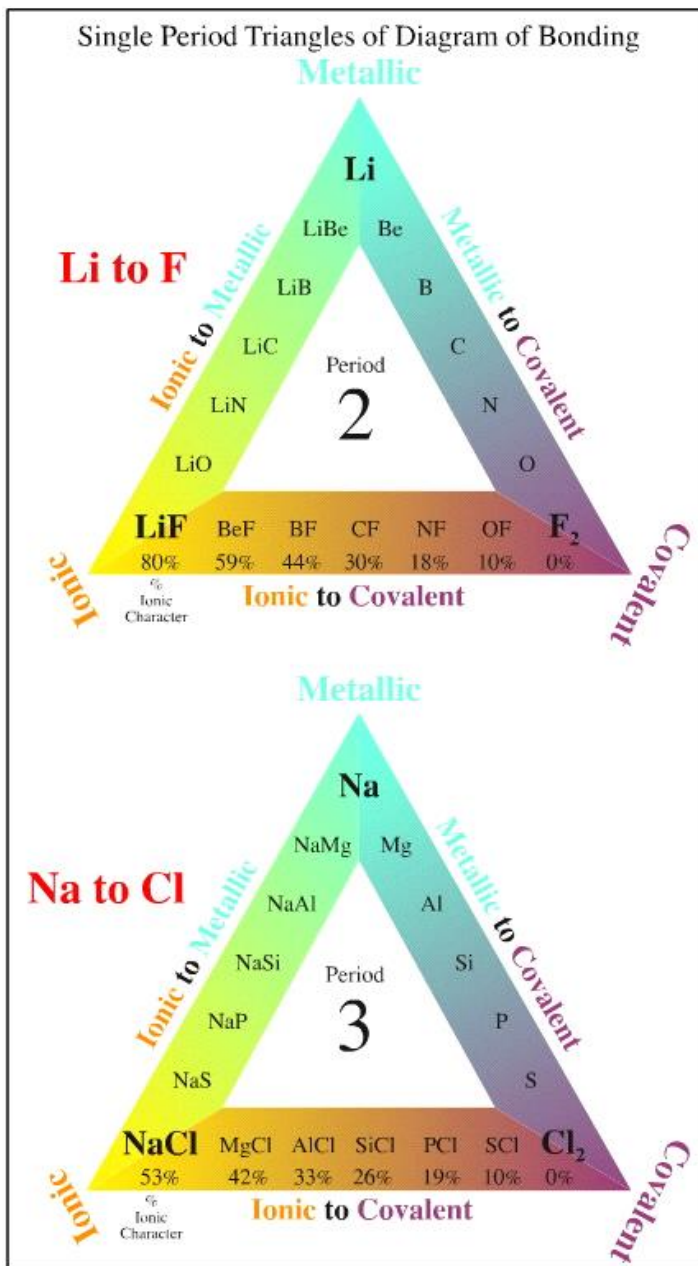
**¡ 85 404 946 ! a las 11:30 hrs. 3/abr/2014**

la cuenta crece 20 compuestos por minuto.

<http://www.cas.org/>



# Los diferentes tipos de compuestos



## Triángulos de Van Arkel-Ketelaar

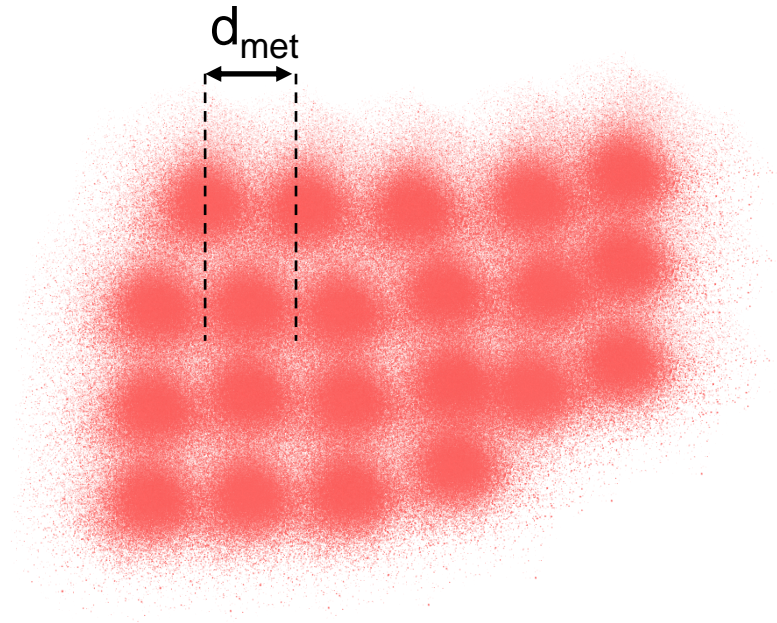
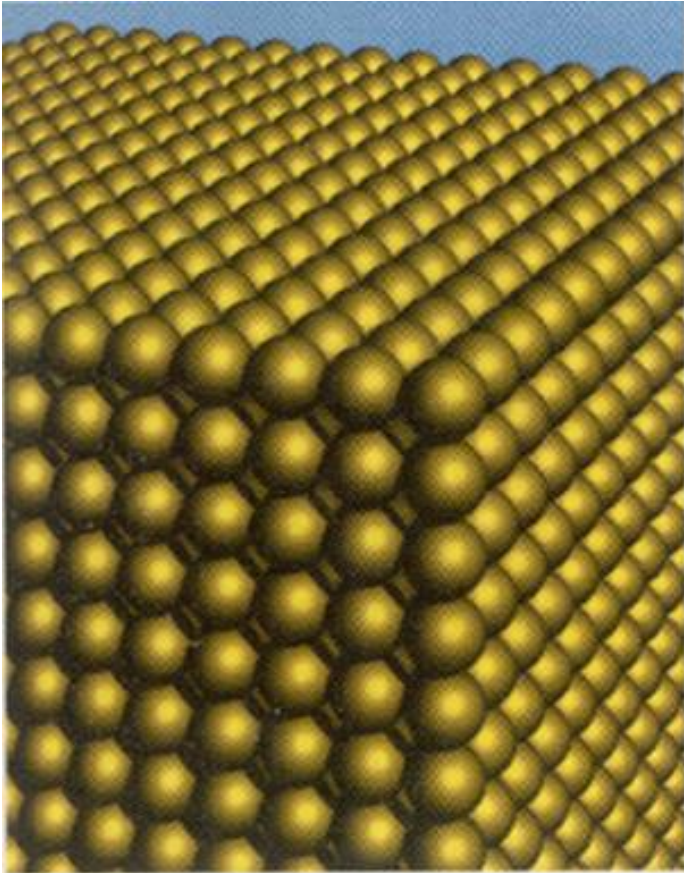


# La escala atómica

- $r(\text{protón}) = 1 \times 10^{-15} \text{ m} = 0.0015 \text{ pm}$
- $r(\text{núcleo}) = 1 \times 10^{-14} \text{ m}$
- $r(\text{átomo}) = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$
  
- $r(\text{H}^+) = 0.00066 \text{ pm}$
- $r(\text{H}) = 120 \text{ pm}$
- $r(\text{H}^-) = 208 \text{ pm}$

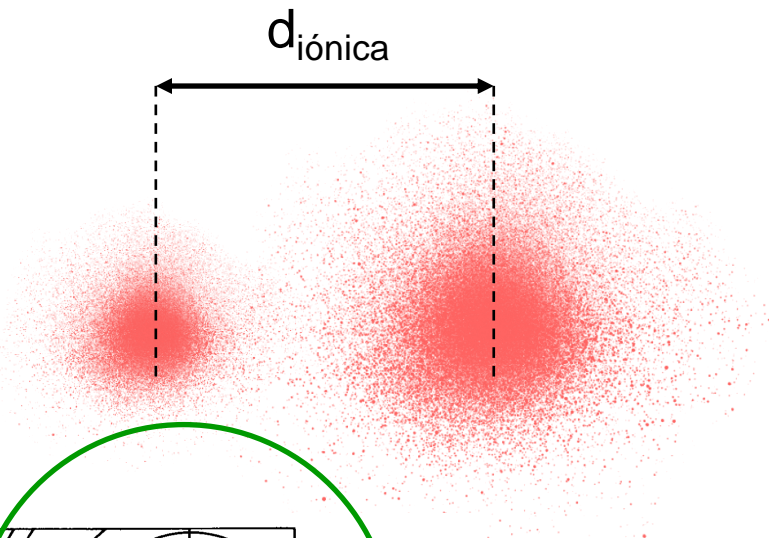
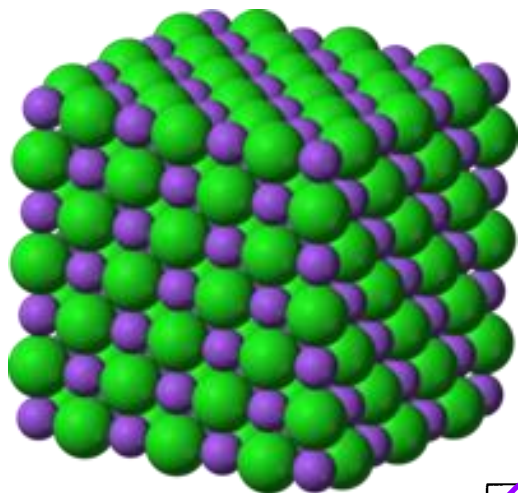


# Tamaño metálico



$$r_{\text{met}} = d_{\text{met}}/2$$

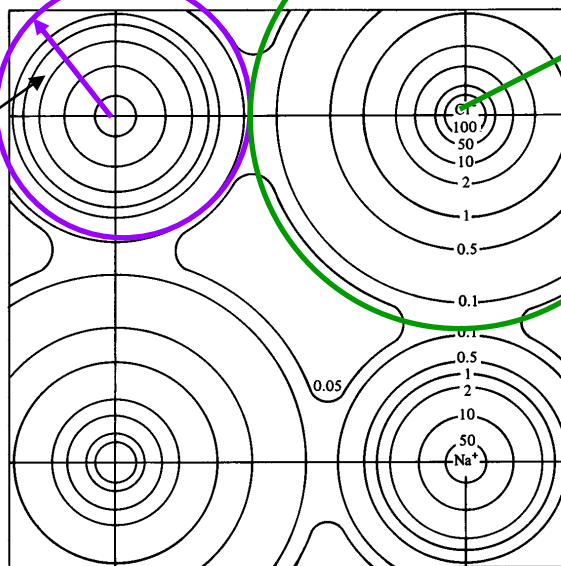
# Tamaño iónico



$r_{\text{catión}}$

$r_{\text{anión}}$

$$r_{\text{catión}} < r_{\text{anión}}$$

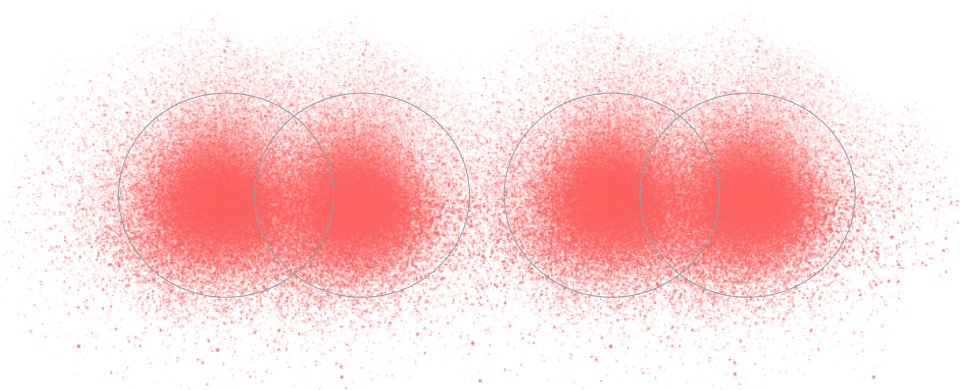
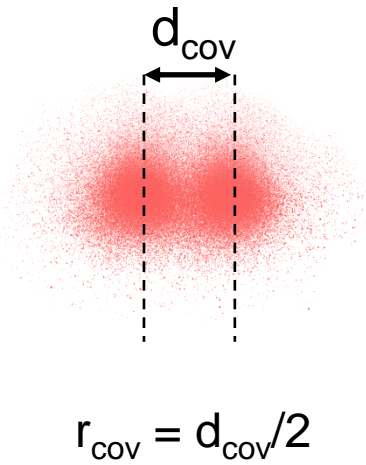
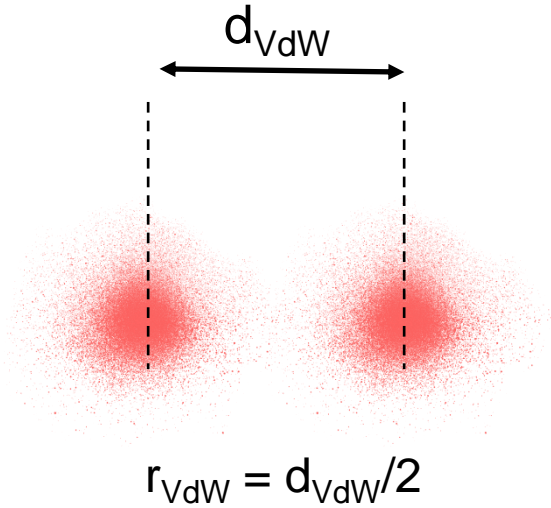


**Fig. 4.10** Electron density contours in sodium chloride. Numbers indicate the electron density (electrons  $\text{\AA}^{-3} = 10^{-6}$  electrons  $\text{pm}^{-3}$ ) along each contour line. The "boundary" of each ion is defined as the minimum in electron density between the ions. The internuclear distance is 281 pm (= 2.81  $\text{\AA}$ ). [Modified from Schoknecht, G. Z. *Naturforsch.* 1957, 12A, 983. Reproduced with permission.]

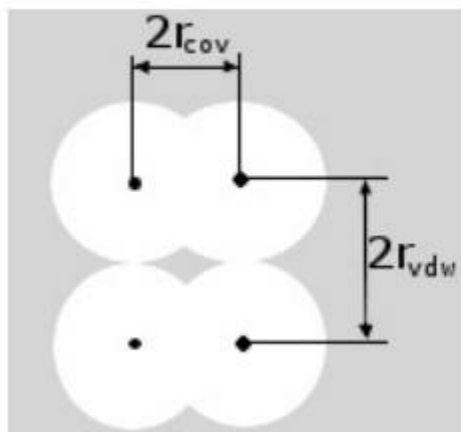
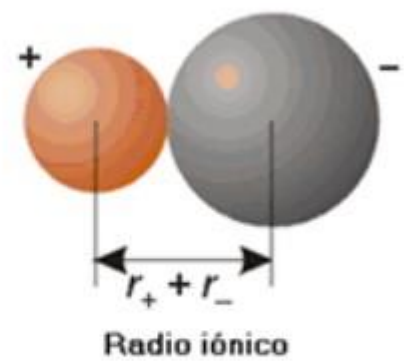
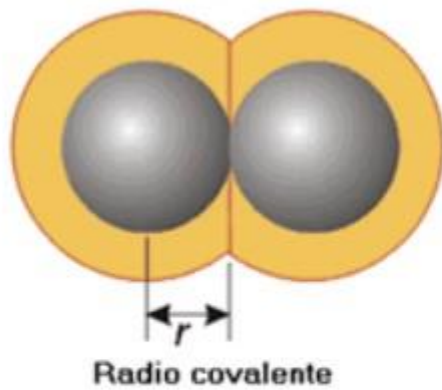
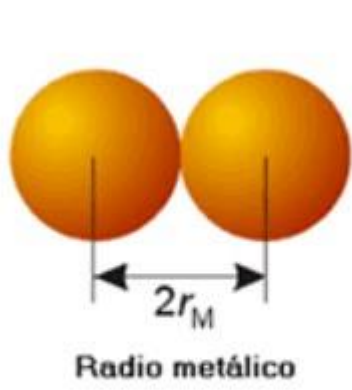




# Tamaño VdW y covalente

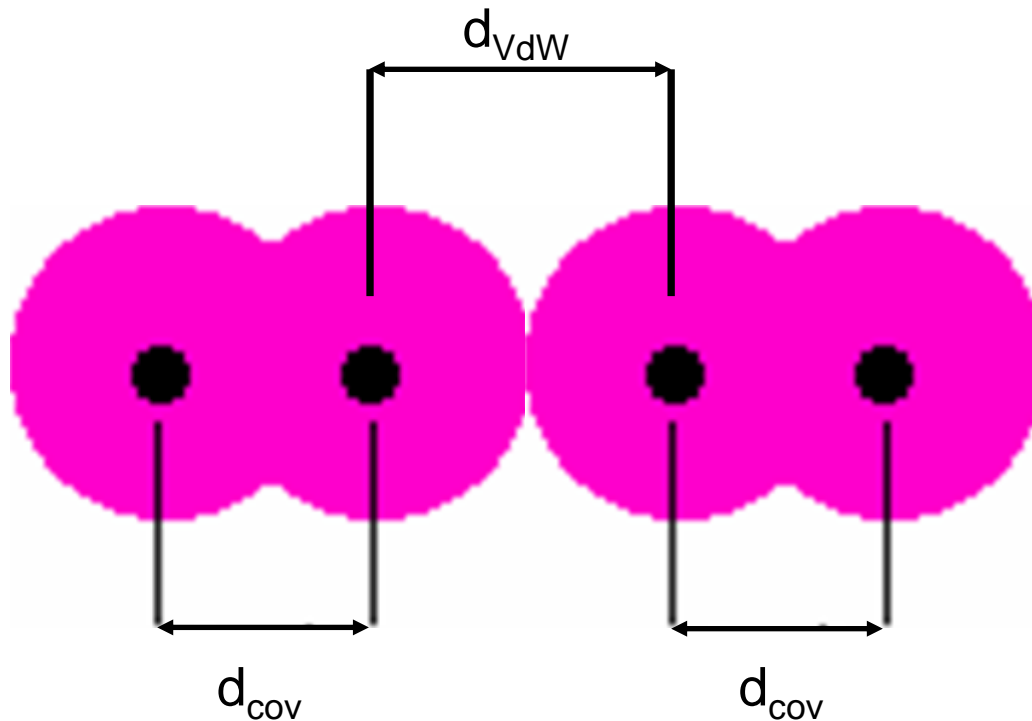


Como las interacciones VdW son más débiles que las covalentes, los átomos se acercan más en estas últimas y manifiestan un menor tamaño.





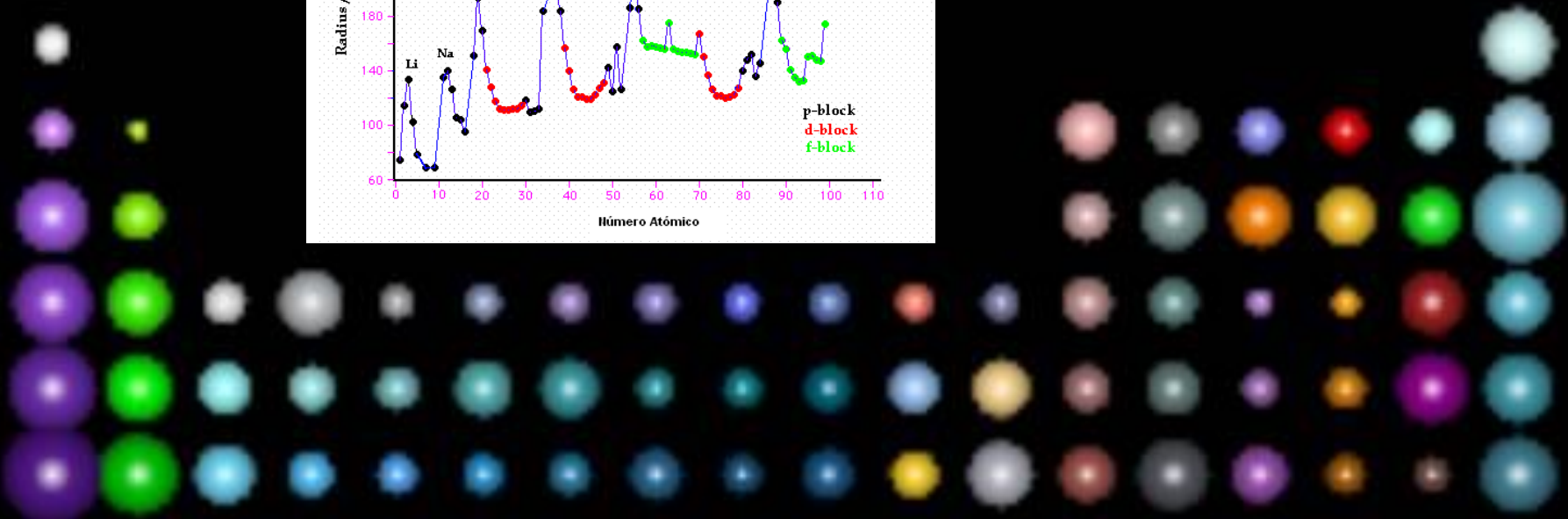
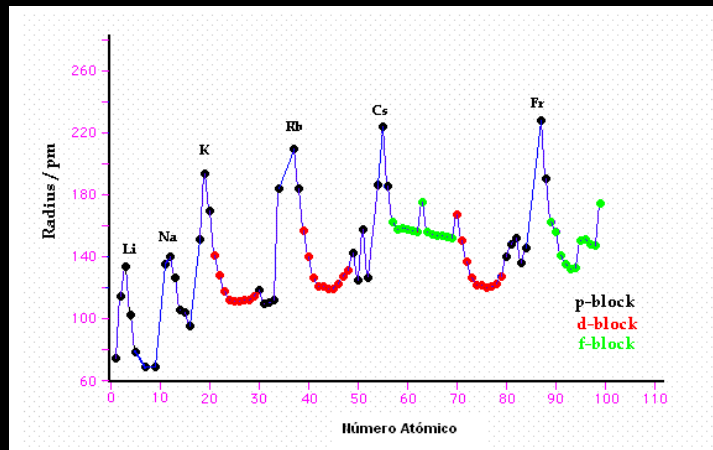
# Radio covalente vs radio de Van der Waals



$$d_{\text{cov}} < d_{\text{vdW}}$$



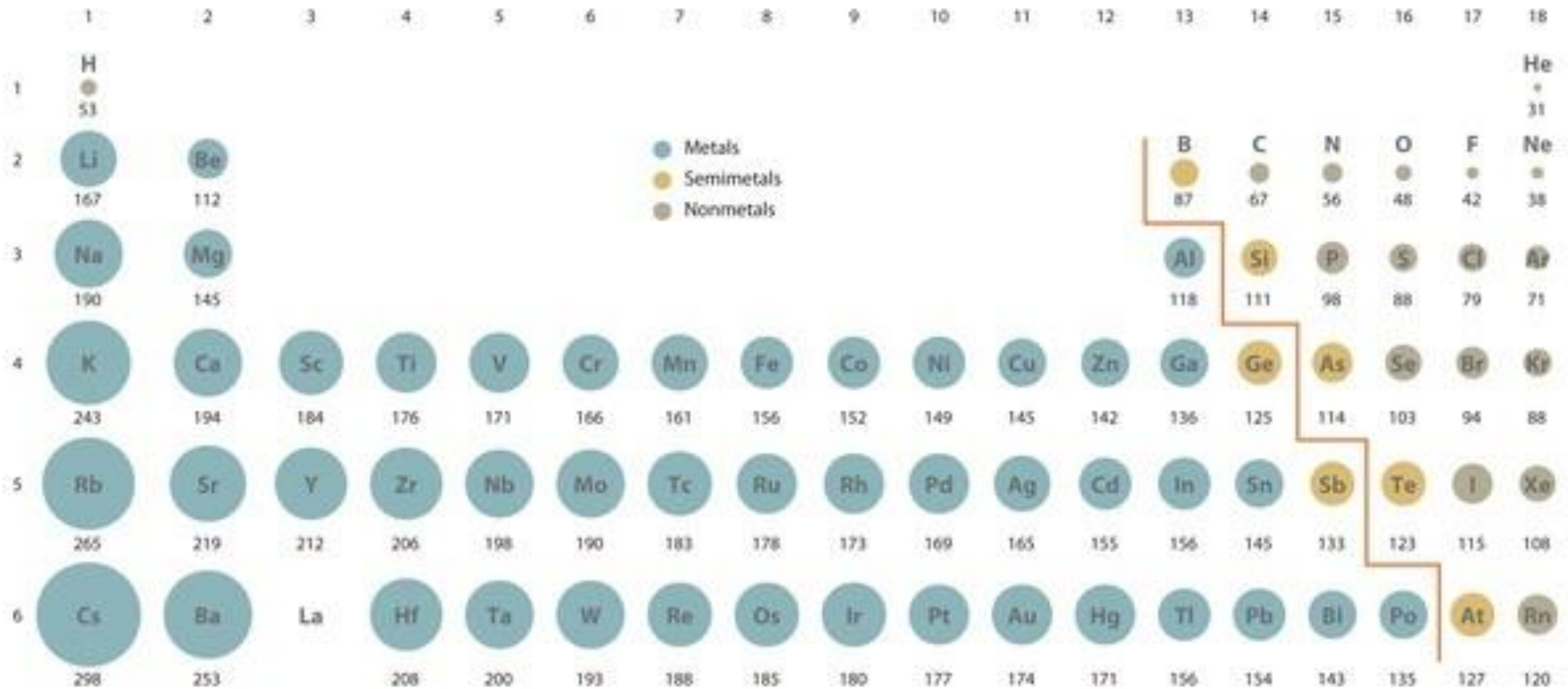
# Radios atómicos





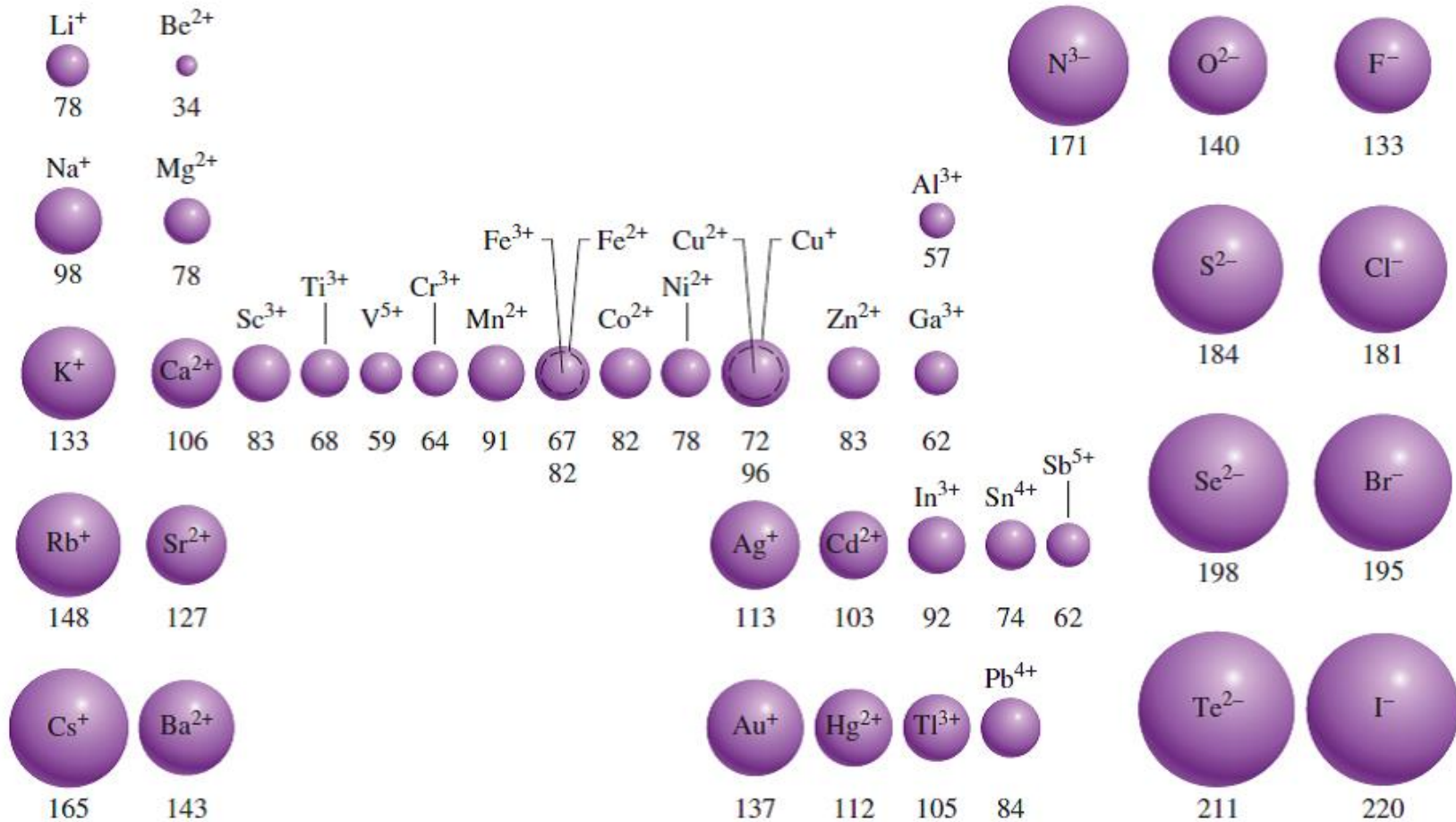


# Radios atómicos





# Radios iónicos



# Las configuraciones

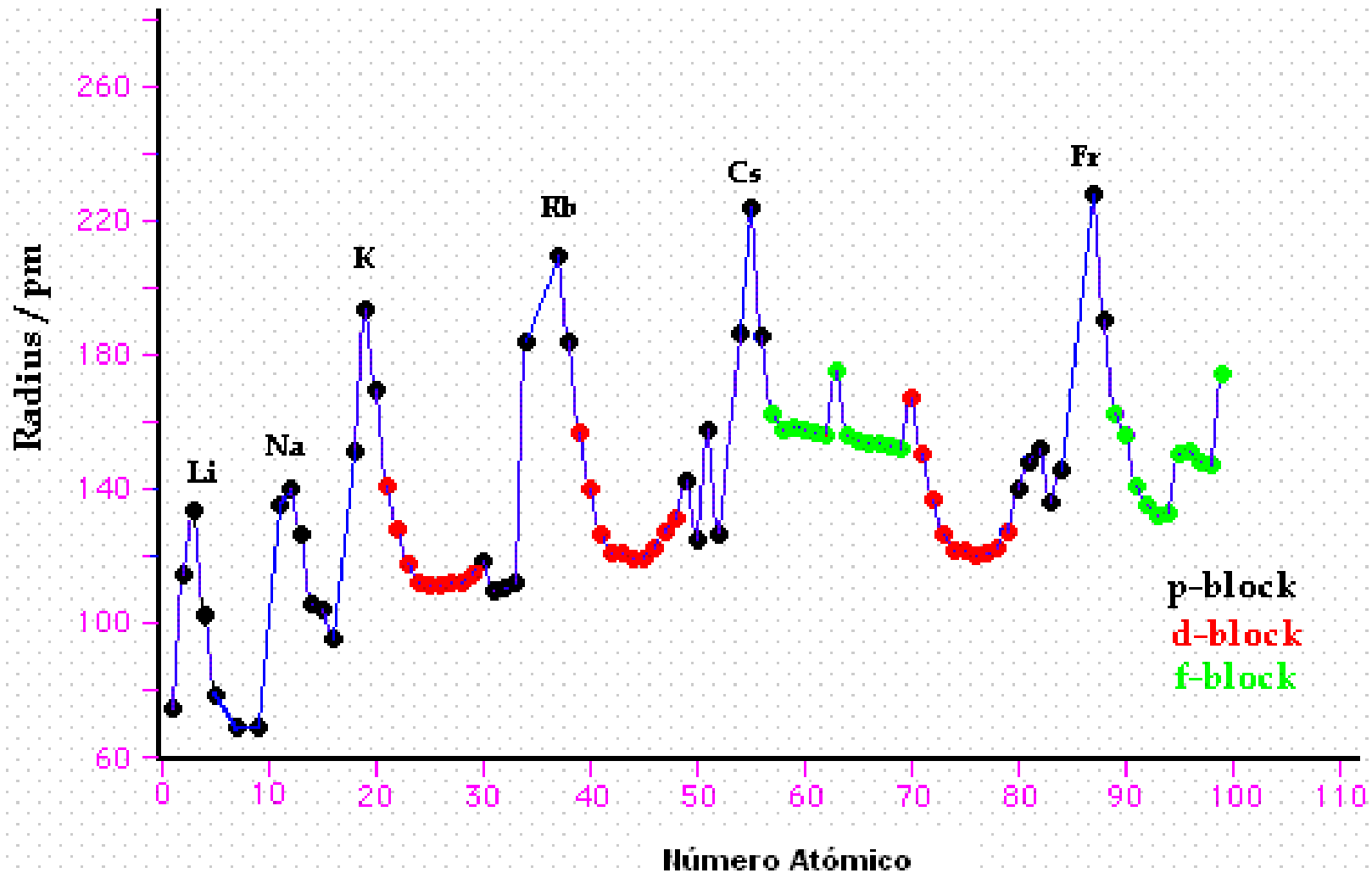
Únicamente de la capa de valencia

1 H $1s^1$																2 He $1s^2$					
3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$															5 B $2s^2 2p^1$	6 C $2s^2 2p^2$	7 N $2s^2 2p^3$	8 O $2s^2 2p^4$	9 F $2s^2 2p^5$	10 Ne $2s^2 2p^6$
11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$															13 Al $3s^2 3p^1$	14 Si $3s^2 3p^2$	15 P $3s^2 3p^3$	16 S $3s^2 3p^4$	17 Cl $3s^2 3p^5$	18 Ar $3s^2 3p^6$
19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $4s^2 3d^1$	22 Ti $4s^2 3d^2$	23 V $4s^2 3d^3$	24 Cr $4s^1 3d^5$	25 Mn $4s^2 3d^5$	26 Fe $4s^2 3d^6$	27 Co $4s^2 3d^7$	28 Ni $4s^2 3d^8$	29 Cu $4s^1 3d^{10}$	30 Zn $4s^2 3d^{10}$	31 Ga $4s^2 3d^{10} 4p^1$	32 Ge $4s^2 3d^{10} 4p^2$	33 As $4s^2 3d^{10} 4p^3$	34 Se $4s^2 3d^{10} 4p^4$	35 Br $4s^2 3d^{10} 4p^5$	36 Kr $4s^2 3d^{10} 4p^6$				
37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $5s^2 4d^1$	40 Zr $5s^2 4d^2$	41 Nb $5s^1 4d^4$	42 Mo $5s^1 4d^5$	43 Tc $5s^2 4d^5$	44 Ru $5s^1 4d^7$	45 Rh $5s^1 4d^8$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $5s^1 4d^{10}$	48 Cd $5s^2 4d^{10}$	49 In $5s^2 4d^{10} 5p^1$	50 Sn $5s^2 4d^{10} 5p^2$	51 Sb $5s^2 4d^{10} 5p^3$	52 Te $5s^2 4d^{10} 5p^4$	53 I $5s^2 4d^{10} 5p^5$	54 Xe $5s^2 4d^{10} 5p^6$				
55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 La $6s^2 5d^1$	72 Hf $6s^2 4f^{14} 5d^2$	73 Ta $6s^2 4f^{14} 5d^3$	74 W $6s^2 4f^{14} 5d^4$	75 Re $6s^2 4f^{14} 5d^5$	76 Os $6s^2 4f^{14} 5d^6$	77 Ir $6s^2 4f^{14} 5d^7$	78 Pt $6s^1 4f^{14} 5d^9$	79 Au $6s^1 4f^{14} 5d^{10}$	80 Hg $6s^2 4f^{14} 5d^{10}$	81 Tl $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^1$	82 Pb $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$	83 Bi $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$	84 Po $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^4$	85 At $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^5$	86 Rn $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$				
87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 Ac $7s^2 6d^1$	104 Rf $7s^2 5f^{14} 6d^2$	105 Db $7s^2 5f^{14} 6d^3$	106 Sg $7s^2 5f^{14} 6d^4$	107 Bh $7s^2 5f^{14} 6d^5$	108 Hs $7s^2 5f^{14} 6d^6$	109 Mt $7s^2 5f^{14} 6d^7$	110 —	111 —	112 —	114 —		116 —							

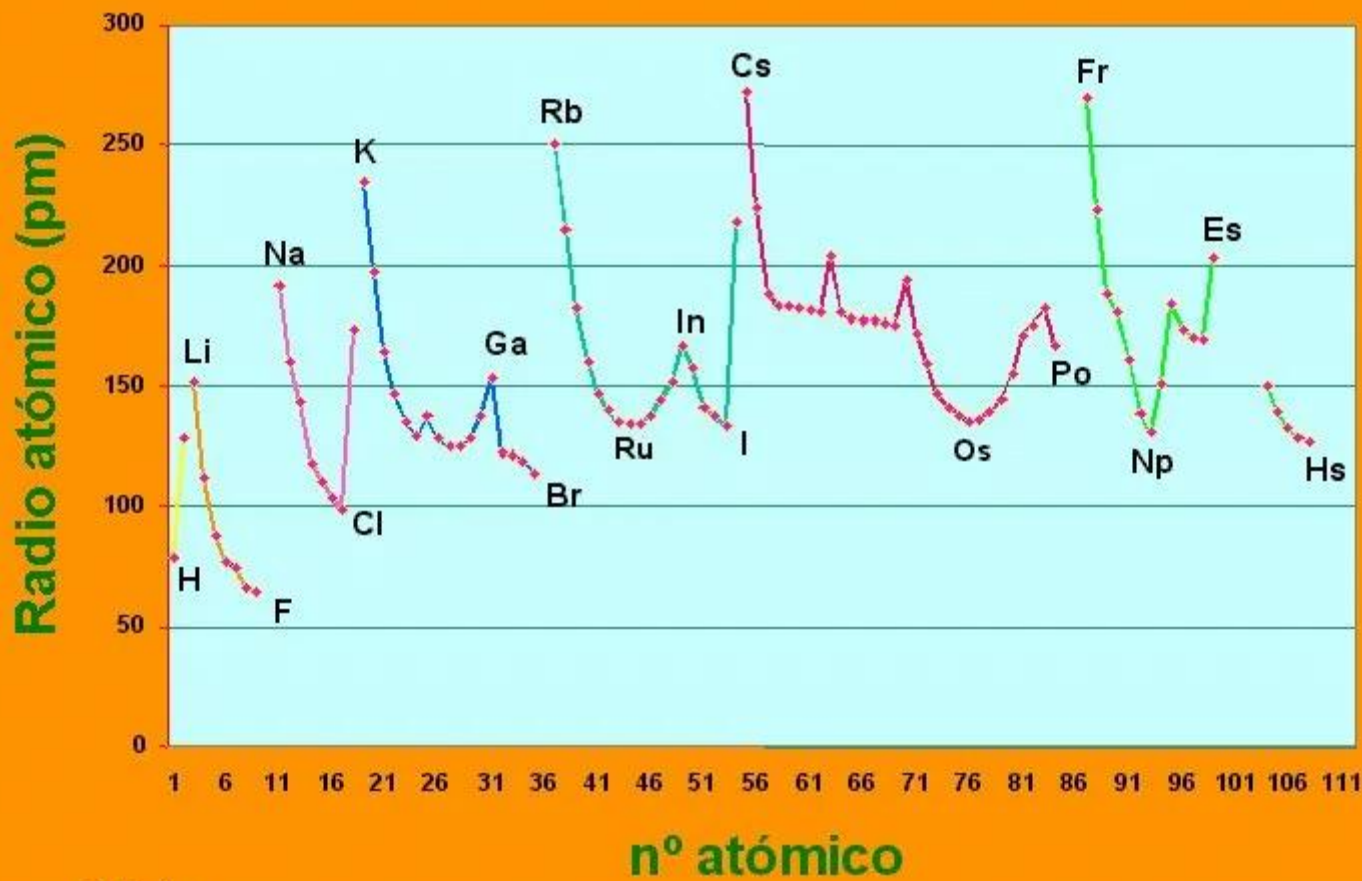
58 Ce $6s^2 4f^1 5d^1$	59 Pr $6s^2 4f^3$	60 Nd $6s^2 4f^4$	61 Pm $6s^2 4f^5$	62 Sm $6s^2 4f^6$	63 Eu $6s^2 4f^7$	64 Gd $6s^2 4f^7 5d^1$	65 Tb $6s^2 4f^9$	66 Dy $6s^2 4f^{10}$	67 Ho $6s^2 4f^{11}$	68 Er $6s^2 4f^{12}$	69 Tm $6s^2 4f^{13}$	70 Yb $6s^2 4f^{14}$	71 Lu $6s^2 4f^{14} 5d^1$
90 Th $7s^2 6d^2$	91 Pa $7s^2 5f^2 6d^1$	92 U $7s^2 5f^3 6d^1$	93 Np $7s^2 5f^4 6d^1$	94 Pu $7s^2 5f^6$	95 Am $7s^2 5f^7$	96 Cm $7s^2 5f^7 6d^1$	97 Bk $7s^2 5f^9$	98 Cf $7s^2 5f^{10}$	99 Es $7s^2 5f^{11}$	100 Fm $7s^2 5f^{12}$	101 Md $7s^2 5f^{13}$	102 No $7s^2 5f^{14}$	103 Lr $7s^2 5f^{14} 6d^1$



# Radios atómicos...cont.



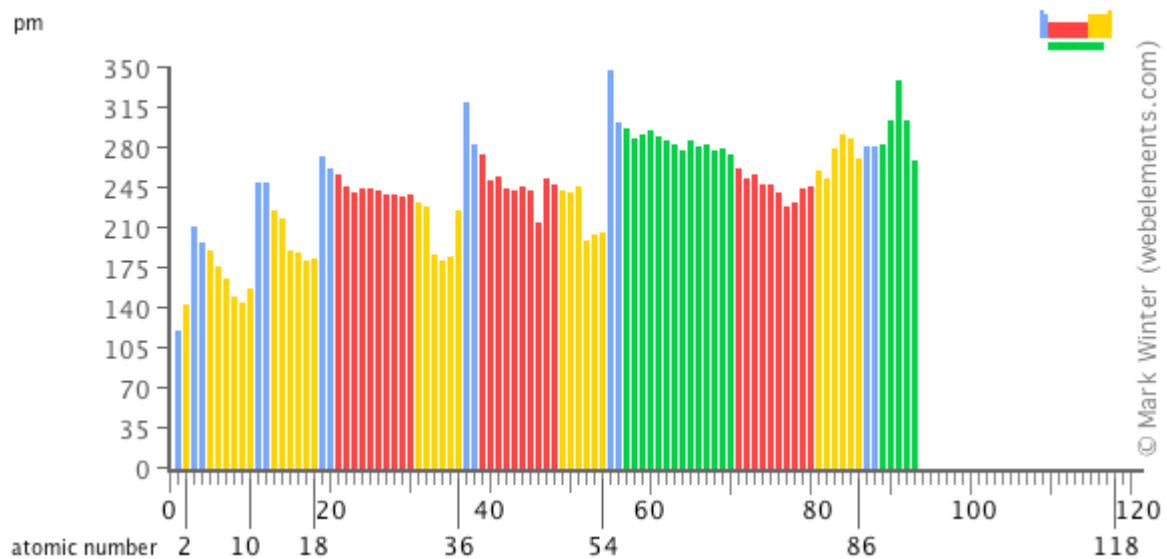
# Radio atómico



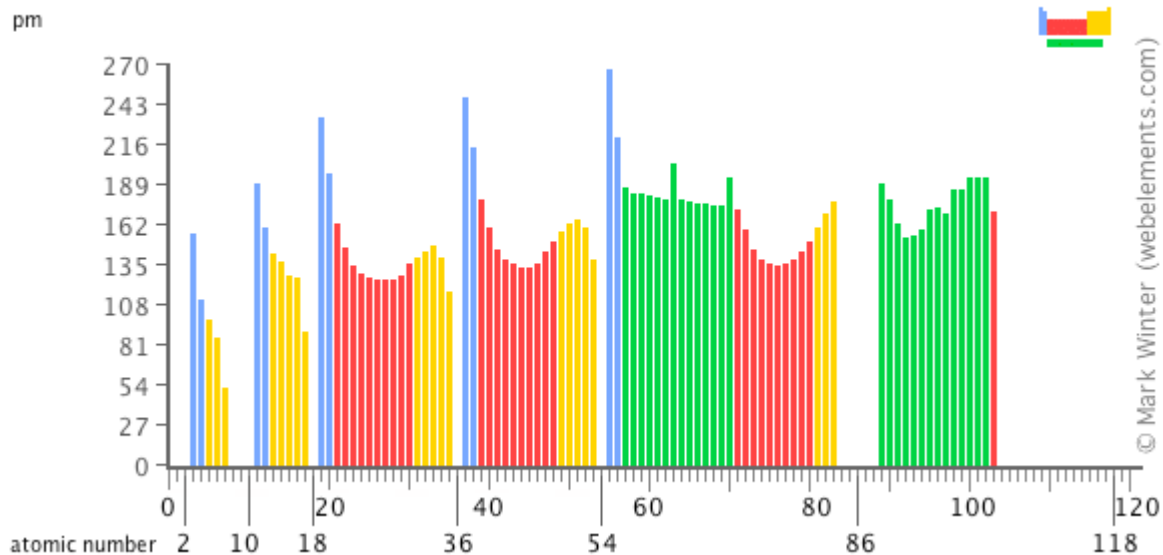
A. Jiménez

A. Jiménez

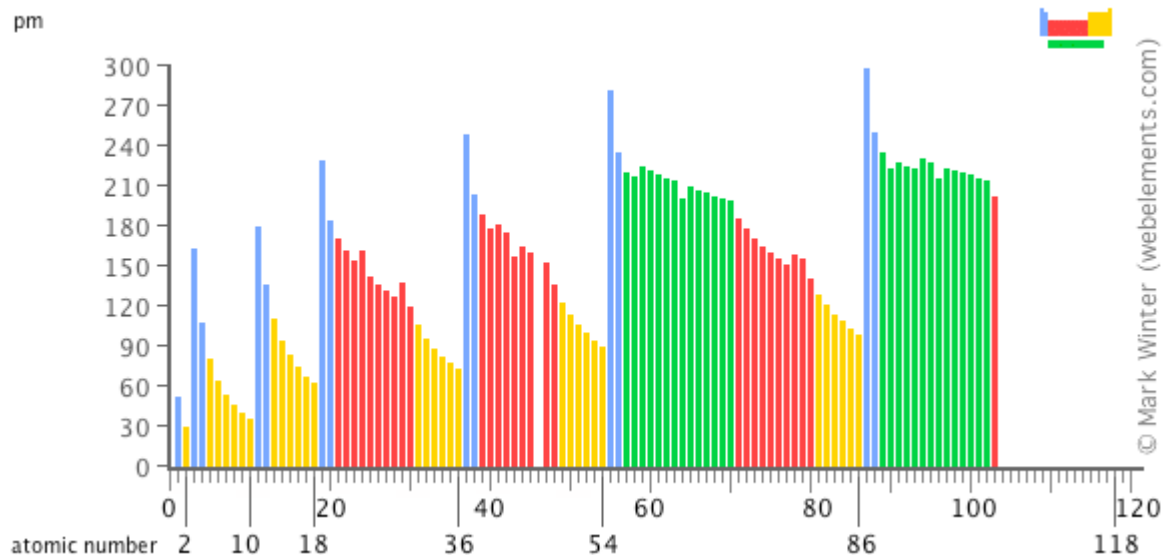
Van der Waals radius [pm] plotted against atomic number



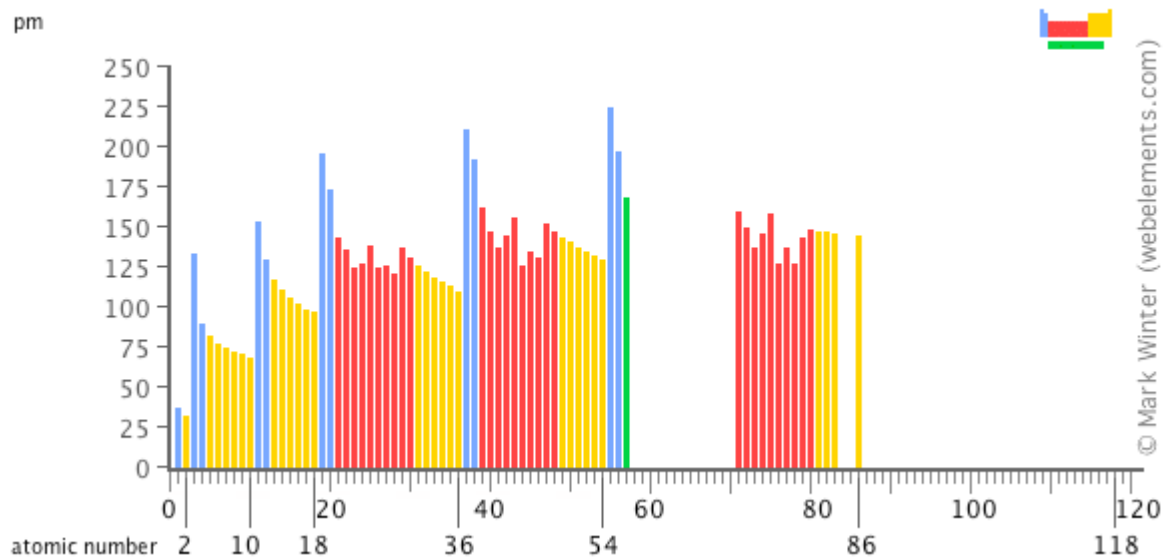
Radius - metallic (12) [pm] plotted against atomic number



valence s-orbital R(max) [pm] plotted against atomic number

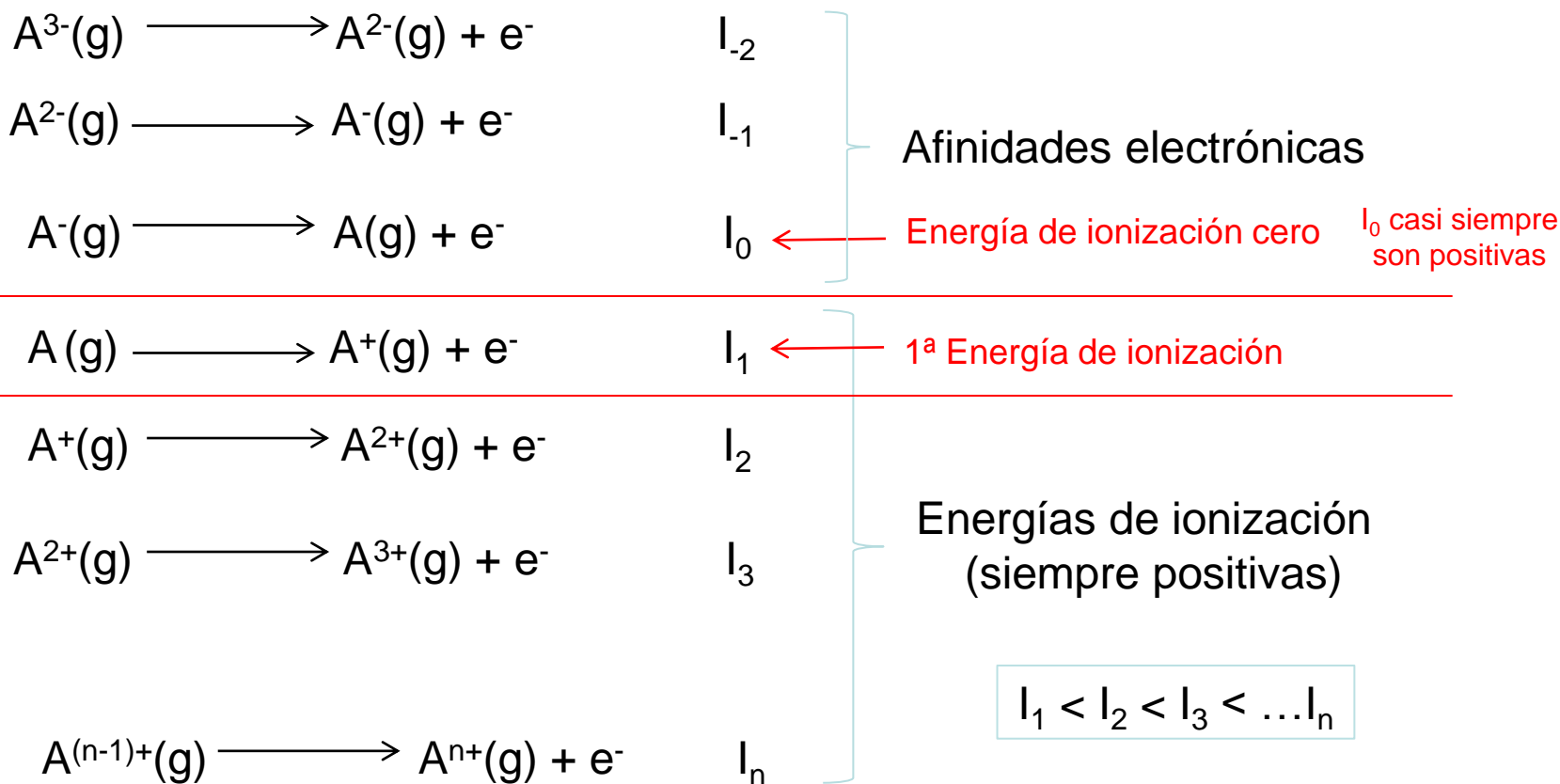


Covalent radius [pm] plotted against atomic number





# Energías de ionización

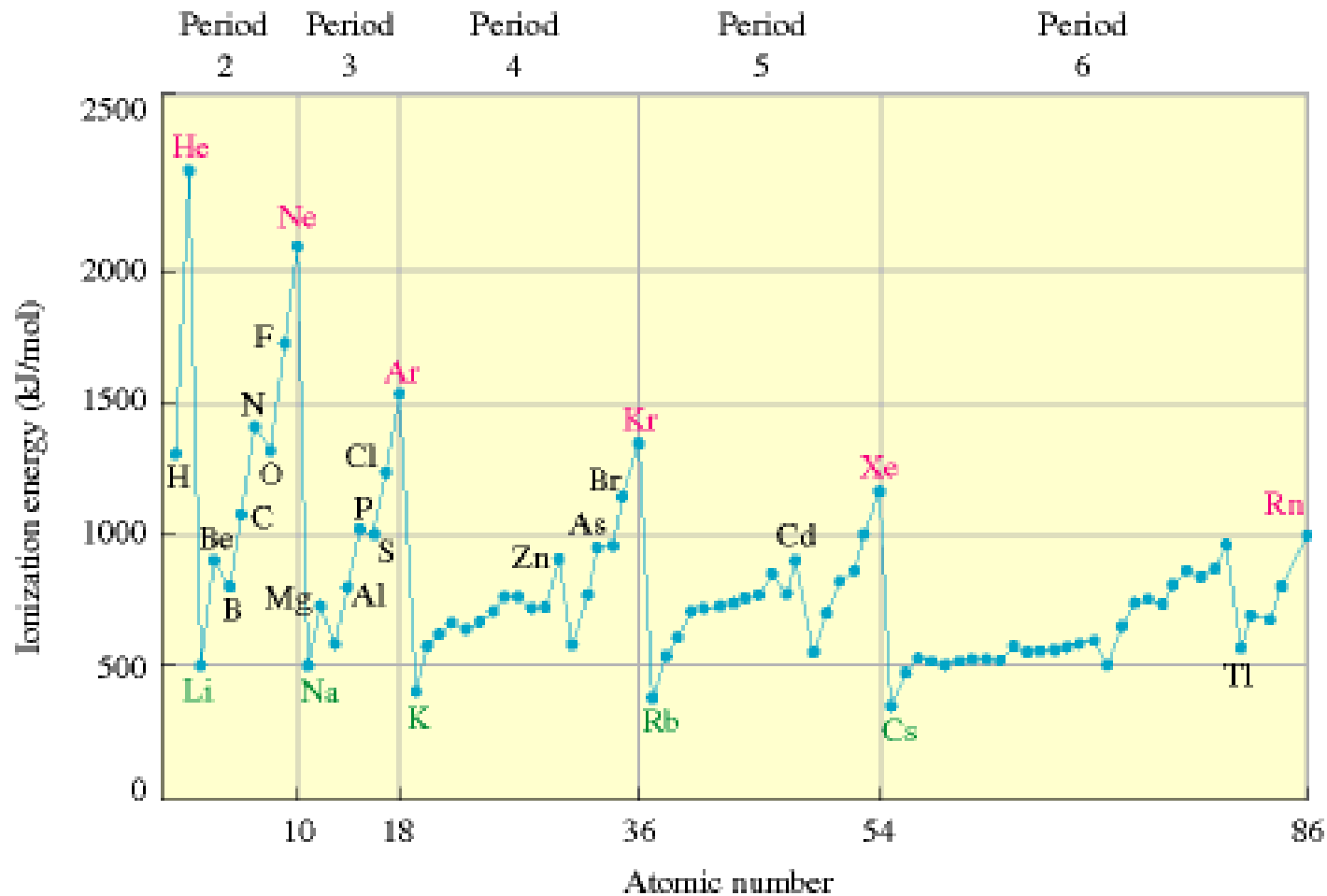
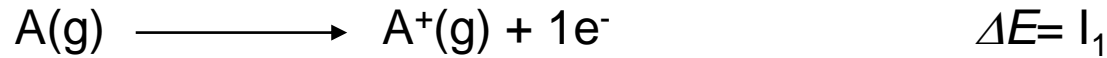


Mientras mayor sea el valor de  $I_0$ , más afín será ese átomo por los electrones ajenos, es decir, será más *electroafín* o tendrá mayor afinidad electrónica.



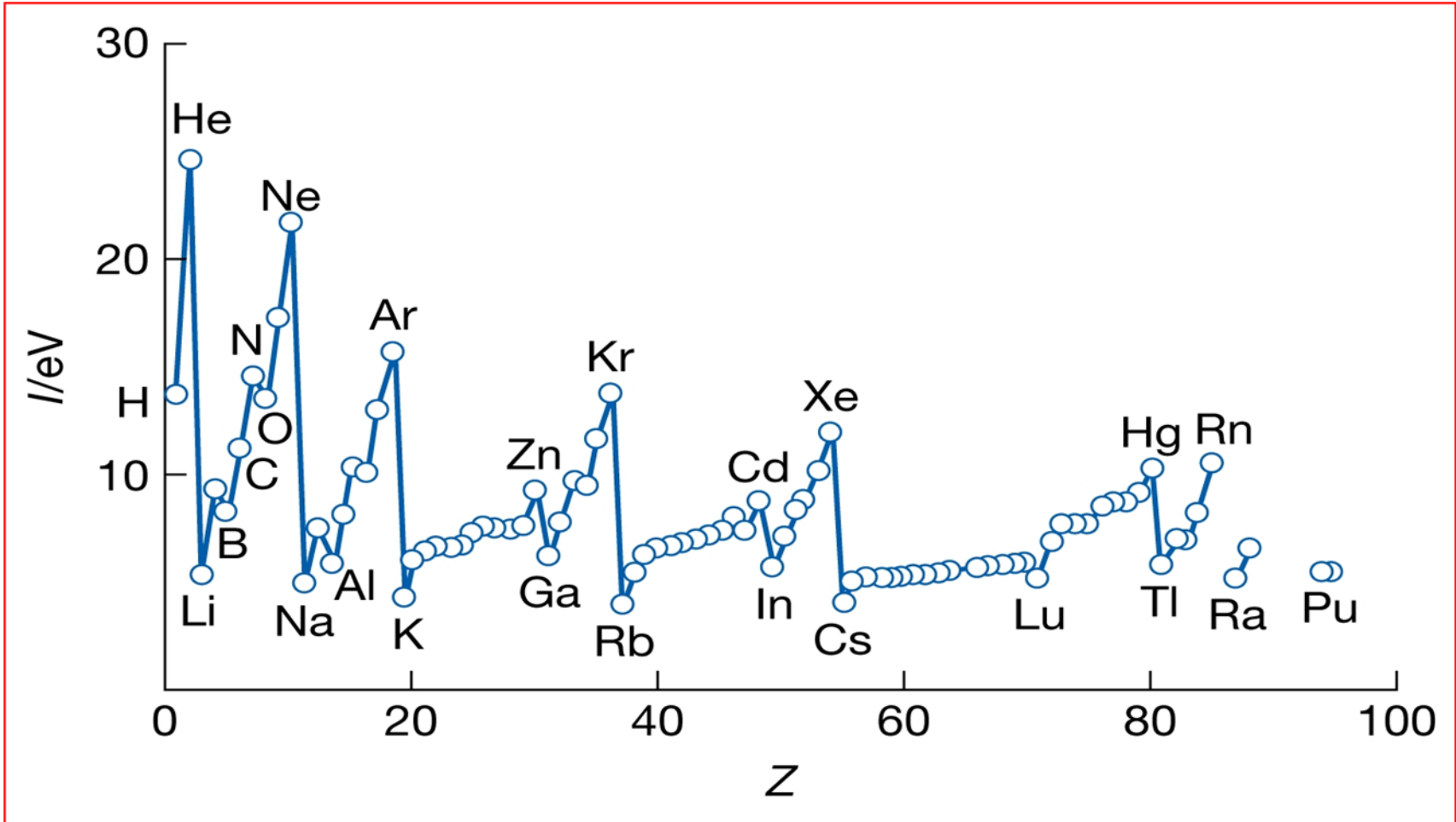


# 1a energía de ionización





# 1a energía de ionización: $I_1$





# Primeras energías de ionización $I_1$

**Table 6.6** First Ionization Energies of the Elements (kJ/mol)

	$s^1$	$s^2$	$s^2d^1$	$s^2d^2$	$s^2d^3$	$s^2d^4$	$s^2d^5$	$s^2d^6$	$s^2d^7$	$s^2d^8$	$s^2d^9$	$s^2d^{10}$	$s^2p^1$	$s^2p^2$	$s^2p^3$	$s^2p^4$	$s^2p^5$	$s^2p^6$	
1 H	1312																		He 2372
2 Li	520	Be 899											B 801	C 1086	N 1402	O 1314	F 1681		Ne 2081
3 Na	496	Mg 738											Al 578	Si 786	P 1012	S 1000	Cl 1251		Ar 1520
4 K	419	Ca 590	Sc 631	Ti 658	V 650	Cr 653	Mn 717	Fe 759	Co 758	Ni 737	Cu 746	Zn 906	Ga 579	Ge 762	As 944	Se 941	Br 1140		Kr 1351
5 Rb	403	Sr 550	Y 616	Zr 660	Nb 664	Mo 685	Tc 702	Ru 711	Rh 720	Pd 805	Ag 731	Cd 868	In 558	Sn 709	Sb 832	Te 869	I 1008		Xe 1170
6 Cs	376	Ba 503	Lu 524	Hf 654	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 880	Pt 870	Au 890	Hg 1007	Tl 589	Pb 716	Bi 703	Po 812	At		Rn 1037
7 Fr	509	Ra	Lr	Rf	Ha														
			$s^2f^1$	$s^2f^2$	$s^2f^3$	$s^2f^4$	$s^2f^5$	$s^2f^6$	$s^2f^7$	$s^2f^8$	$s^2f^9$	$s^2f^{10}$	$s^2f^{11}$	$s^2f^{12}$	$s^2f^{13}$	$s^2f^{14}$			
6	La 538	Ce 528	Pr 523	Nd 530	Pm 536	Sm 543	Eu 547	Gd 592	Tb 564	Dy 572	Ho 581	Er 589	Tm 597	Yb 603					
7	Ac 490	Th 590	Pa 570	U 590	Np 600	Pu 585	Am 578	Cm 581	Bk 601	Cf 608	Es 619	Fm 627	Md 635	No 642					



# Segundas energías de ionización I<sub>2</sub>

**Table 6.7** Second Ionization Energies of (+ 1 Ions of) the Elements (kJ/mol)

<i>s</i> <sup>1</sup>											<i>s</i> <sup>2</sup>	<i>s</i> <sup>2</sup> <i>p</i> <sup>1</sup>	<i>s</i> <sup>2</sup> <i>p</i> <sup>2</sup>	<i>s</i> <sup>2</sup> <i>p</i> <sup>3</sup>	<i>s</i> <sup>2</sup> <i>p</i> <sup>4</sup>	<i>s</i> <sup>2</sup> <i>p</i> <sup>5</sup>	<i>s</i> <sup>2</sup> <i>p</i> <sup>6</sup>	
1																	He 5250	Li 7298
2 Be 1757											B 2427	C 2353	N 2856	O 3388	F 3374	Ne 3952	Na 4562	
3 Mg 1451											Al 1817	Si 1577	P 1903	S 2251	Cl 2297	Ar 2666	K 3051	
4 Ca 1145	Sc 1235	Ti 1310	V 1414	Cr 1496	Mn 1509	Fe 1561	Co 1646	Ni 1753	Cu 1958	Zn 1733	Ga 1979	Ge 1537	As 1798	Se 2045	Br 2100	Kr 2350	Rb 2633	
5 Sr 1064	Y 1181	Zr 1267	Nb 1382	Mo 1558	Tc 1472	Ru 1617	Rh 1744	Pd 1875	Ag 2074	Cd 1631	In 1821	Sn 1412	Sb 1595	Te 1790	I 1846	Xe 2046	Cs 2230	
6 Ba 965	Lu 1340	Hf 1440	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt 1791	Au 1980	Hg 1810	Tl 1971	Pb 1450	Bi 1610	Po	At	Rn	Fr	
7 Ra 979	Lr	Rf	Ha	106	107		109											
6	La 1067	Ce 1047	Pr 1018	Nd 1034	Pm 1052	Sm 1068	Eu 1085	Gd 1170	Tb 1112	Dy 1126	Ho 1139	Er 1151	Tm 1163	Yb 1175				
7	Ac 1170	Th 1110	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No				



# Terceras energías de ionización $I_3$

**Table 6.8** Third Ionization Energies of (+ 2 Ions of) the Elements (kJ/mol)

$d^1$	$d^2$	$d^3$	$d^4$	$d^5$	$d^6$	$d^7$	$d^8$	$d^9$	$d^{10}$	$s^1$	$s^2$	$s^2p^1$	$s^2p^2$	$s^2p^3$	$s^2p^4$	$s^2p^5$	$s^2p^6$	
1																Li 11815	Be 14849	
2										B 3660	C 4621	N 4578	O 5300	F 6050	Ne 6122	Na 6912	Mg 7733	
3										Al 2745	Si 3232	P 2912	S 3361	Cl 3822	Ar 3931	K 4411	Ca 4912	
4	Sc 2389	Ti 2652	V 2828	Cr 2987	Mn 3248	Fe 2957	Co 3232	Ni 3393	Cu 3554	Zn 3833	Ga 2963	Ge 3302	As 2736	Se 2973	Br 3500	Kr 3565	Rb 3900	Sr 4210
5	Y 1980	Zr 2218	Nb 2416	Mo 2621	Tc 2850	Ru 2747	Rh 2997	Pd 3177	Ag 3361	Cd 3616	In 2705	Sn 2943	Sb 2440	Te 2698	I 3200	Xe 3100	Cs	Ba
6	Lu 2022	Hf 2250	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au 3300	Hg 2878	Tl 2082	Pb 2466	Bi	Po	At	Rn		
$f^1$	$f^2$	$f^3$	$f^4$	$f^5$	$f^6$	$f^7$	$f^8$	$f^9$	$f^{10}$	$f^{11}$	$f^{12}$	$f^{13}$	$f^{14}$					
6	La 1850	Ce 1949	Pr 2086	Nd 2130	Pm 2150	Sm 2260	Eu 2400	Gd 1990	Tb 2110	Dy 2200	Ho 2200	Er 2190	Tm 2284	Yb 2415				
7	Ac 1930	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No				

# Las configuraciones

Únicamente de la capa de valencia

1 H $1s^1$																2 He $1s^2$					
3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$															5 B $2s^2 2p^1$	6 C $2s^2 2p^2$	7 N $2s^2 2p^3$	8 O $2s^2 2p^4$	9 F $2s^2 2p^5$	10 Ne $2s^2 2p^6$
11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$															13 Al $3s^2 3p^1$	14 Si $3s^2 3p^2$	15 P $3s^2 3p^3$	16 S $3s^2 3p^4$	17 Cl $3s^2 3p^5$	18 Ar $3s^2 3p^6$
19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $4s^2 3d^1$	22 Ti $4s^2 3d^2$	23 V $4s^2 3d^3$	24 Cr $4s^1 3d^5$	25 Mn $4s^2 3d^5$	26 Fe $4s^2 3d^6$	27 Co $4s^2 3d^7$	28 Ni $4s^2 3d^8$	29 Cu $4s^1 3d^{10}$	30 Zn $4s^2 3d^{10}$	31 Ga $4s^2 3d^{10} 4p^1$	32 Ge $4s^2 3d^{10} 4p^2$	33 As $4s^2 3d^{10} 4p^3$	34 Se $4s^2 3d^{10} 4p^4$	35 Br $4s^2 3d^{10} 4p^5$	36 Kr $4s^2 3d^{10} 4p^6$				
37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $5s^2 4d^1$	40 Zr $5s^2 4d^2$	41 Nb $5s^1 4d^4$	42 Mo $5s^1 4d^5$	43 Tc $5s^2 4d^5$	44 Ru $5s^1 4d^7$	45 Rh $5s^1 4d^8$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $5s^1 4d^{10}$	48 Cd $5s^2 4d^{10}$	49 In $5s^2 4d^{10} 5p^1$	50 Sn $5s^2 4d^{10} 5p^2$	51 Sb $5s^2 4d^{10} 5p^3$	52 Te $5s^2 4d^{10} 5p^4$	53 I $5s^2 4d^{10} 5p^5$	54 Xe $5s^2 4d^{10} 5p^6$				
55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 La $6s^2 5d^1$	72 Hf $6s^2 4f^{14} 5d^2$	73 Ta $6s^2 4f^{14} 5d^3$	74 W $6s^2 4f^{14} 5d^4$	75 Re $6s^2 4f^{14} 5d^5$	76 Os $6s^2 4f^{14} 5d^6$	77 Ir $6s^2 4f^{14} 5d^7$	78 Pt $6s^1 4f^{14} 5d^9$	79 Au $6s^1 4f^{14} 5d^{10}$	80 Hg $6s^2 4f^{14} 5d^{10}$	81 Tl $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^1$	82 Pb $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$	83 Bi $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$	84 Po $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^4$	85 At $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^5$	86 Rn $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$				
87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 Ac $7s^2 6d^1$	104 Rf $7s^2 5f^{14} 6d^2$	105 Db $7s^2 5f^{14} 6d^3$	106 Sg $7s^2 5f^{14} 6d^4$	107 Bh $7s^2 5f^{14} 6d^5$	108 Hs $7s^2 5f^{14} 6d^6$	109 Mt $7s^2 5f^{14} 6d^7$	110 —	111 —	112 —	114 —		116 —							

58 Ce $6s^2 4f^1 5d^1$	59 Pr $6s^2 4f^3$	60 Nd $6s^2 4f^4$	61 Pm $6s^2 4f^5$	62 Sm $6s^2 4f^6$	63 Eu $6s^2 4f^7$	64 Gd $6s^2 4f^7 5d^1$	65 Tb $6s^2 4f^9$	66 Dy $6s^2 4f^{10}$	67 Ho $6s^2 4f^{11}$	68 Er $6s^2 4f^{12}$	69 Tm $6s^2 4f^{13}$	70 Yb $6s^2 4f^{14}$	71 Lu $6s^2 4f^{14} 5d^1$
90 Th $7s^2 6d^2$	91 Pa $7s^2 5f^2 6d^1$	92 U $7s^2 5f^3 6d^1$	93 Np $7s^2 5f^4 6d^1$	94 Pu $7s^2 5f^6$	95 Am $7s^2 5f^7$	96 Cm $7s^2 5f^7 6d^1$	97 Bk $7s^2 5f^9$	98 Cf $7s^2 5f^{10}$	99 Es $7s^2 5f^{11}$	100 Fm $7s^2 5f^{12}$	101 Md $7s^2 5f^{13}$	102 No $7s^2 5f^{14}$	103 Lr $7s^2 5f^{14} 6d^1$

# Penetración y apantallamiento

## Cargas nucleares efectivas para los electrones de los primeros 18 átomos

	n	1	2	2	3	3
Z		1s	2s	2p	3s	3p
1	H	1				
2	He	1,69				
3	Li	2,69	1,28			
4	Be	3,68	1,91			
5	B	4,68	2,58	2,42		
6	C	5,67	3,22	3,14		
7	N	6,66	3,85	3,83		
8	O	7,66	4,49	4,45		
9	F	8,65	5,13	5,10		
10	Ne	9,64	5,76	5,76		
11	Na	10,63	6,57	6,80	2,51	
12	Mg	11,61	7,39	7,83	3,31	
13	Al	12,59	8,21	8,96	4,12	4,07
14	Si	13,57	9,02	9,94	4,90	4,29
15	P	14,56	9,82	10,96	5,64	4,89
16	S	15,54	10,63	11,98	6,37	5,48
17	Cl	16,52	11,43	12,99	7,07	6,12
18	Ar	17,51	12,23	14,01	7,76	6,76

El orbital 2s es **penetrante** respecto al 1s.

Para un orbital 2s, el **apantallamiento** de un 1s no será  $-1$ , sino un valor menor en valor absoluto.

El orbital 3s es **penetrante** respecto al 2s y 2p.

En la capa de valencia la carga efectiva sobre los orbitales s es mayor que sobre los p como consecuencia de la mayor **penetración** de los primeros.

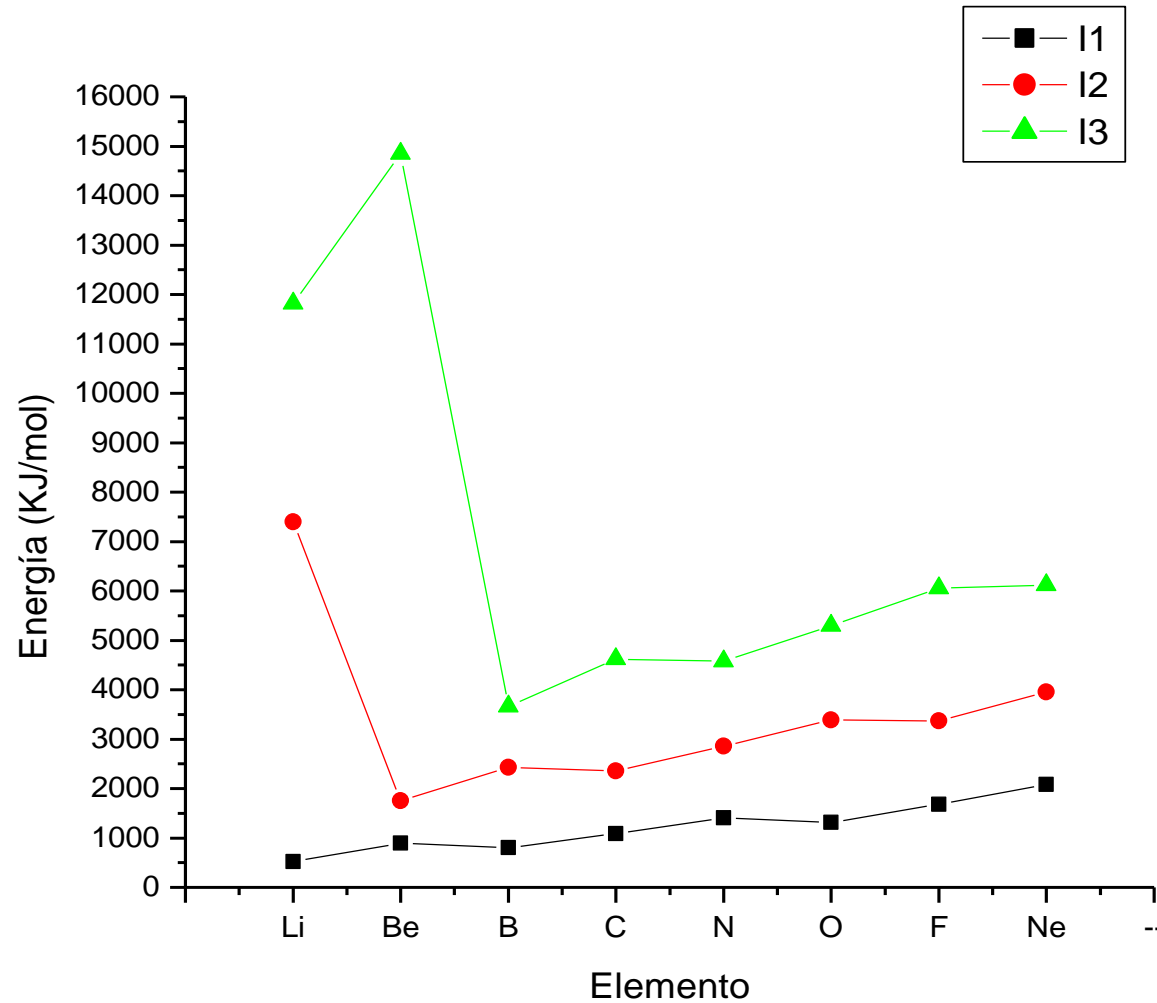
Los electrones 1s son muy internos y están muy poco apantallados.

Para un orbital cualquiera  $Z_{ef}$  aumenta con el número  $n$ .

En la capa de valencia,  $Z_{ef}(s) > Z_{ef}(p) > Z_{ef}(d) > Z_{ef}(f)$



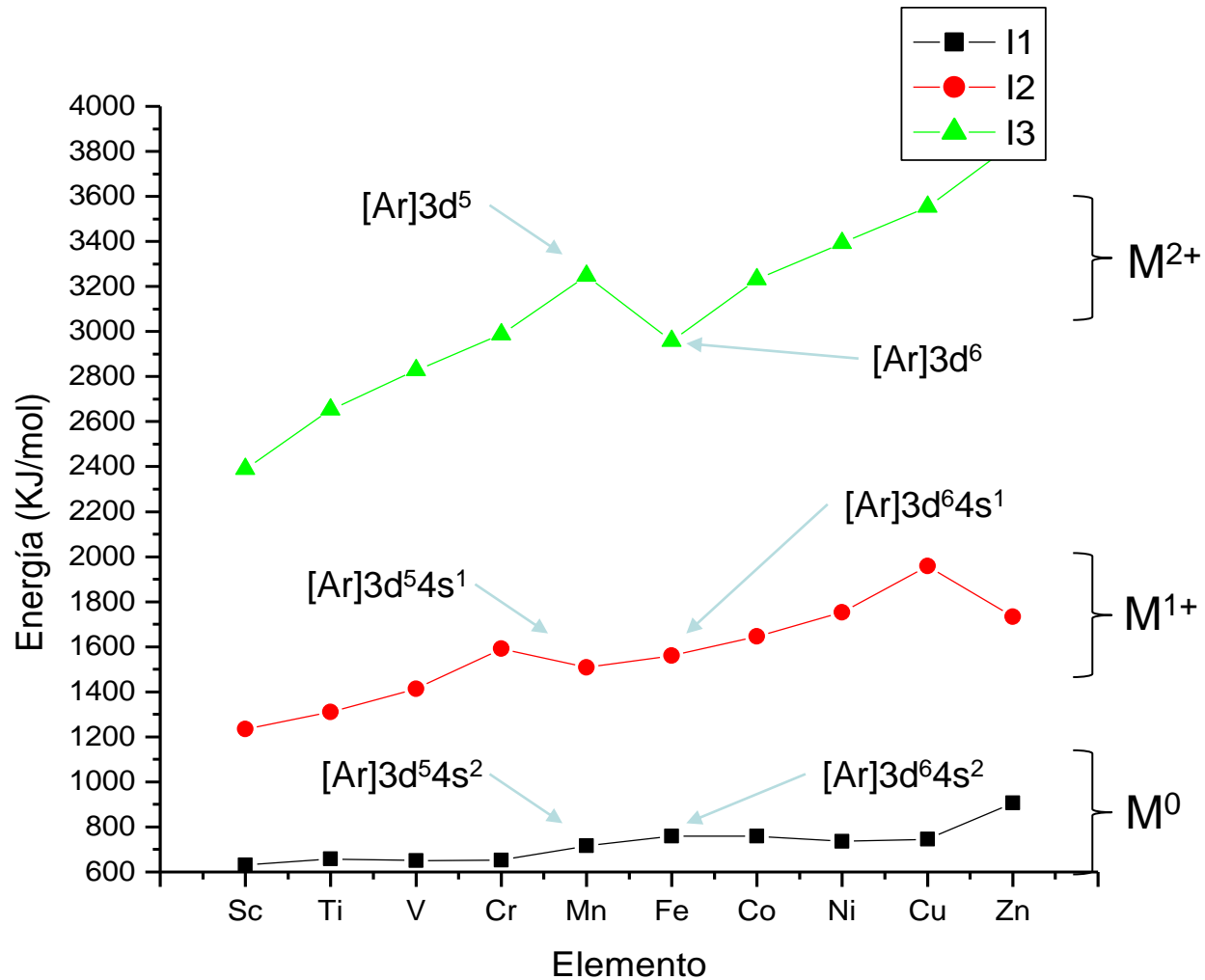
# 2o período: $I_1$ , $I_2$ e $I_3$





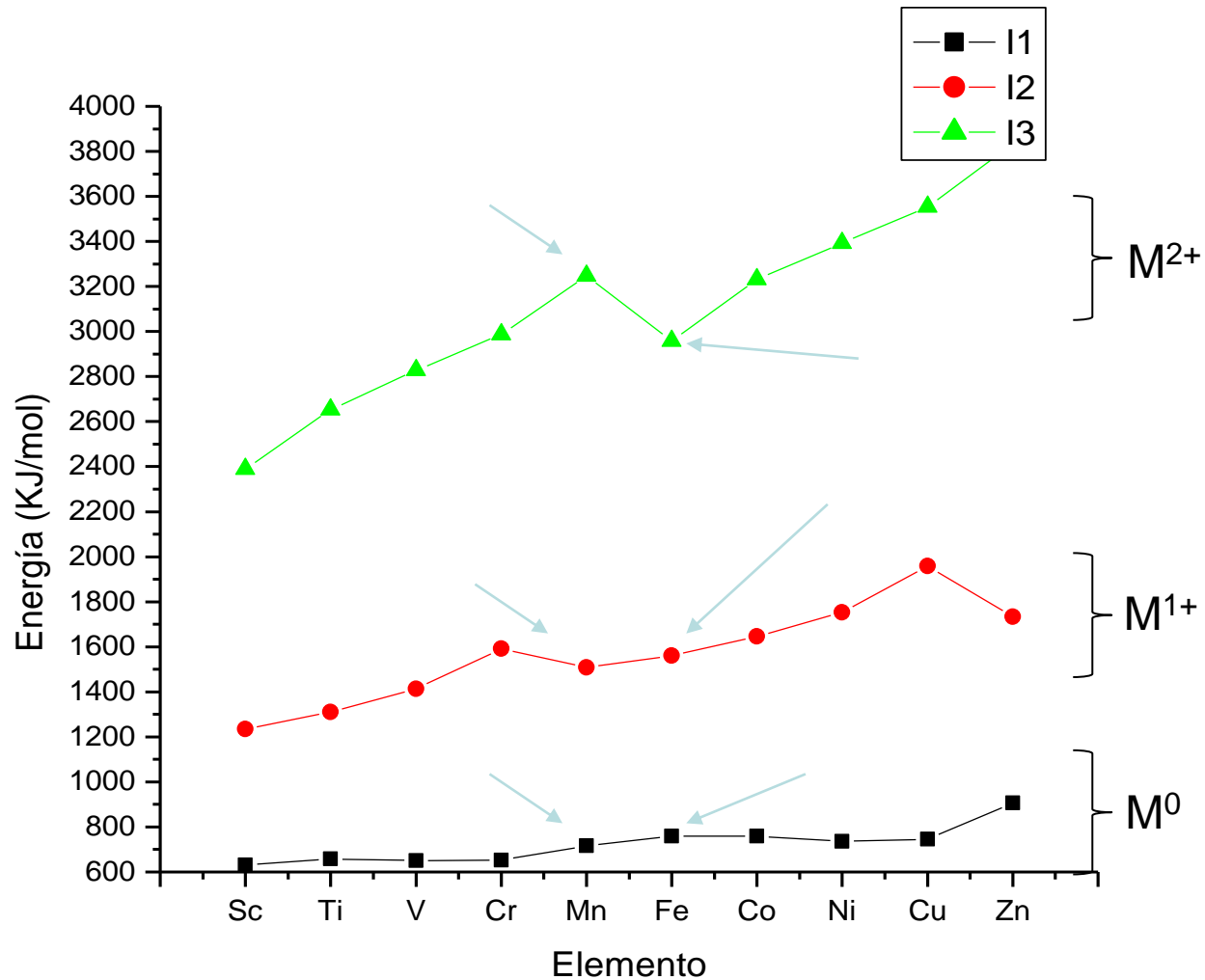


# 1a serie de transición: I<sub>1</sub>, I<sub>2</sub> e I<sub>3</sub>



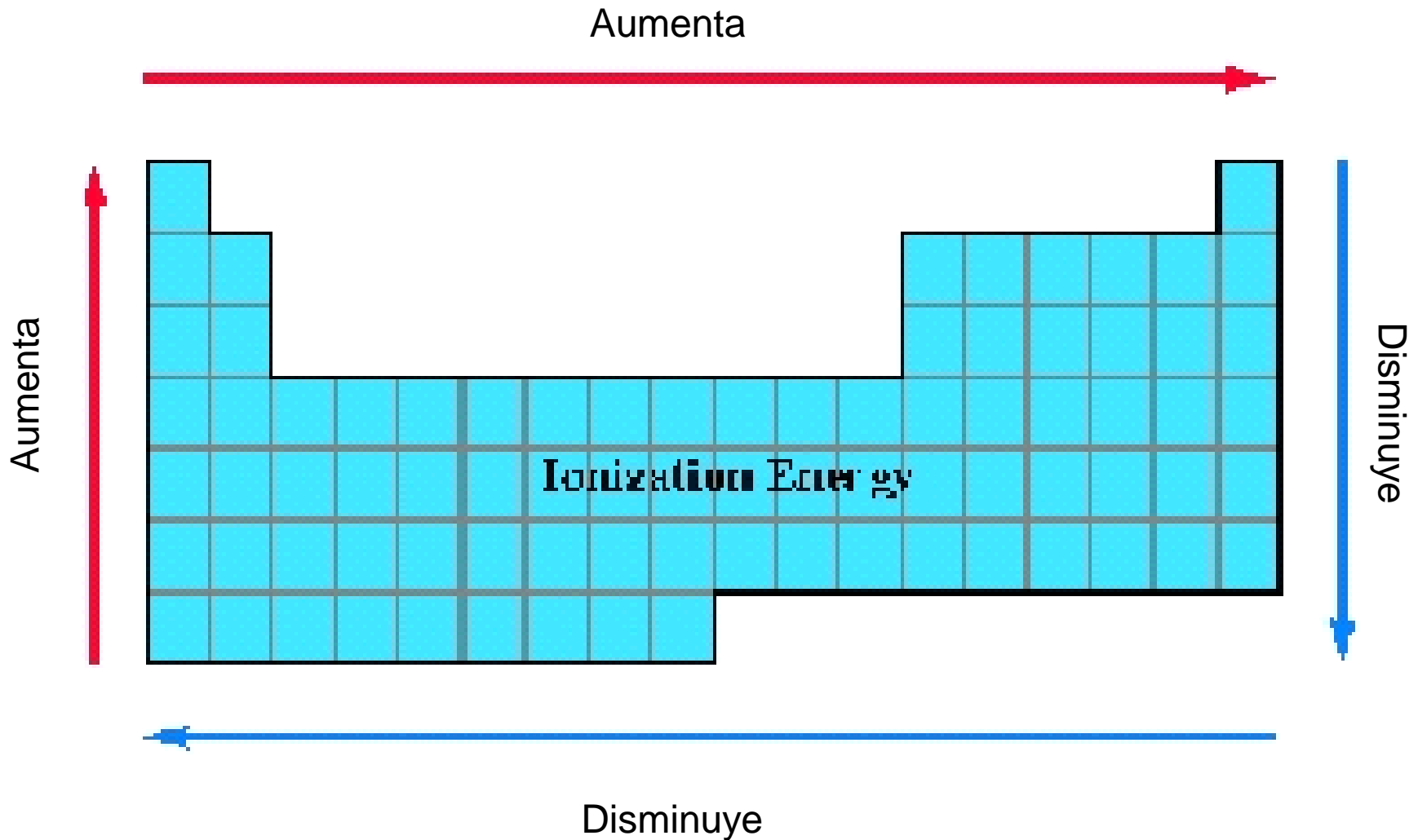


# 1a serie de transición: $I_1$ , $I_2$ e $I_3$





# Tendencias en $I_1$





# También la afinidad electrónica presenta variaciones periódicas

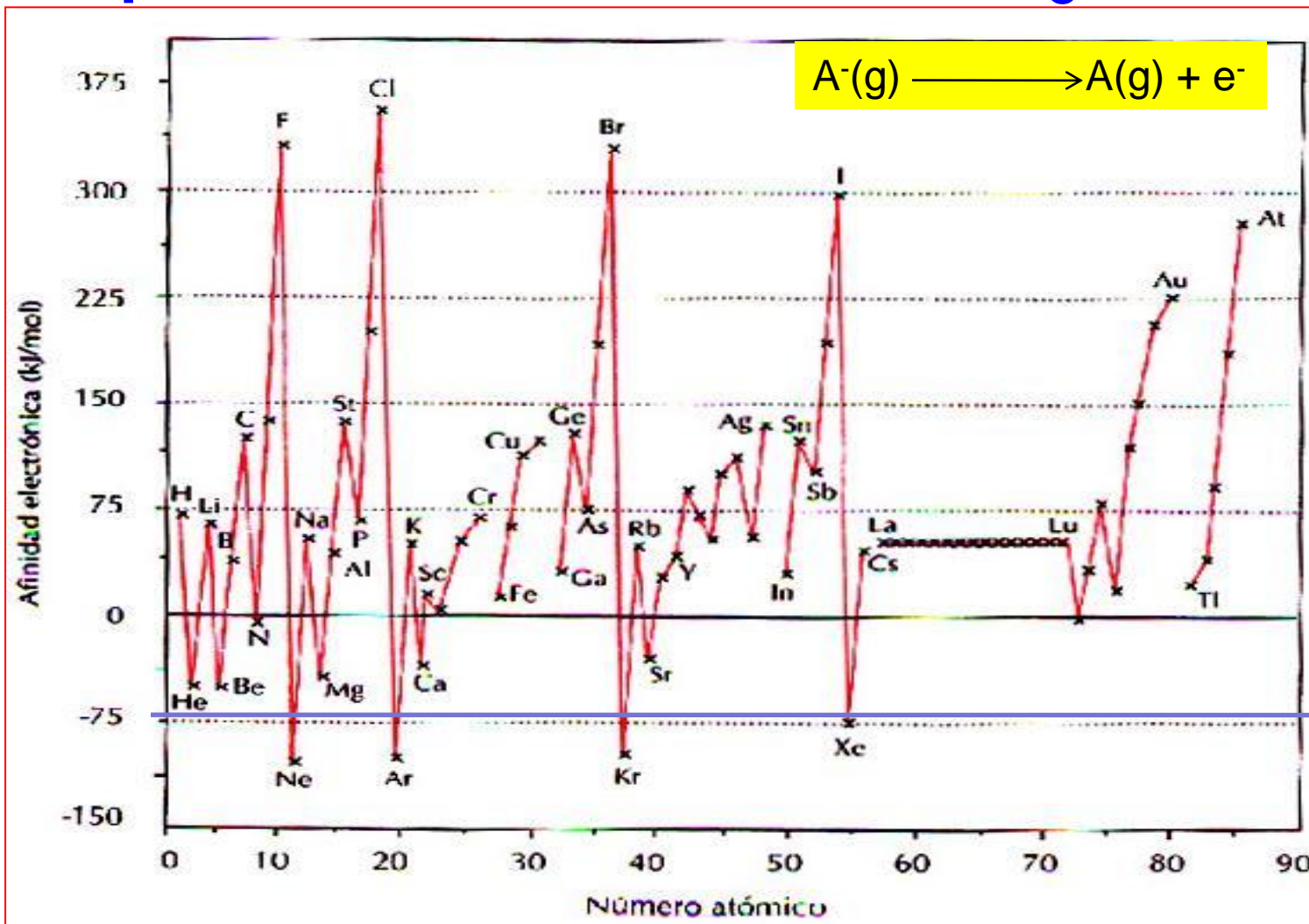
Para empezar, ¿Qué es la afinidad electrónica?

Es la energía involucrada en el siguiente proceso:





# $AE_1$ expresada como $I_0$



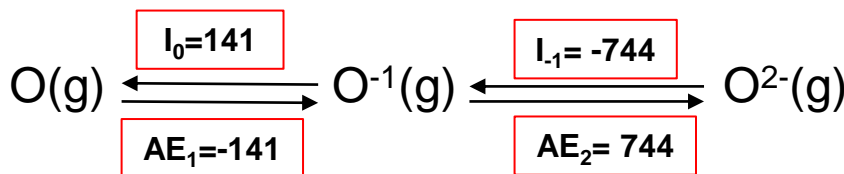
Las afinidades electrónicas se pueden determinar indirectamente mediante cálculos termoquímicos en ciclos de Born-Haber y experimentalmente por espectroscopía fotoelectrónica mediante técnicas de *laser photodetachment*.



# Energías de ionización cero

**Table 6.9** Electron Affinities of the Elements (kJ/mol) (Zeroth Ionization Energies of the  $-1$  Ions of the Elements)

$s^1$	$s^2$	$s^2p^1$											$s^2p^2$	$s^2p^3$	$s^2p^4$	$s^2p^5$	$s^2p^6$	
1	H 73																	
2	He 0	Li 60	Be 0											B 27	C 122	N -7	O 141	F 328
3	Ne 0	Na 53	Mg 0											Al 44	Si 134	P 72	S 200	Cl 349
4	Ar 0	K 48	Ca 0	Sc 0	Ti 20	V 50	Cr 64	Mn 0	Fe 24	Co 70	Ni 111	Cu 118	Zn 0	Ga 29	Ge 120	As 77	Se 195	Br 325
5	Kr 0	Rb 47	Sr 0	Y 0	Zr 50	Nb 100	Mo 100	Tc 70	Ru 110	Rh 120	Pd 60	Ag 126	Cd 0	In 29	Sn 121	Sb 101	Te 190	I 295
6	Xe 0	Cs 46	Ba 0	Lu 50	Hf 0	Ta 60	W 60	Re 15	Os 110	Ir 160	Pt 205	Au 223	Hg 0	Tl 30	Pb 110	Bi 110	Po 180	At 270



¿Cómo explicar las segundas afinidades electrónicas?

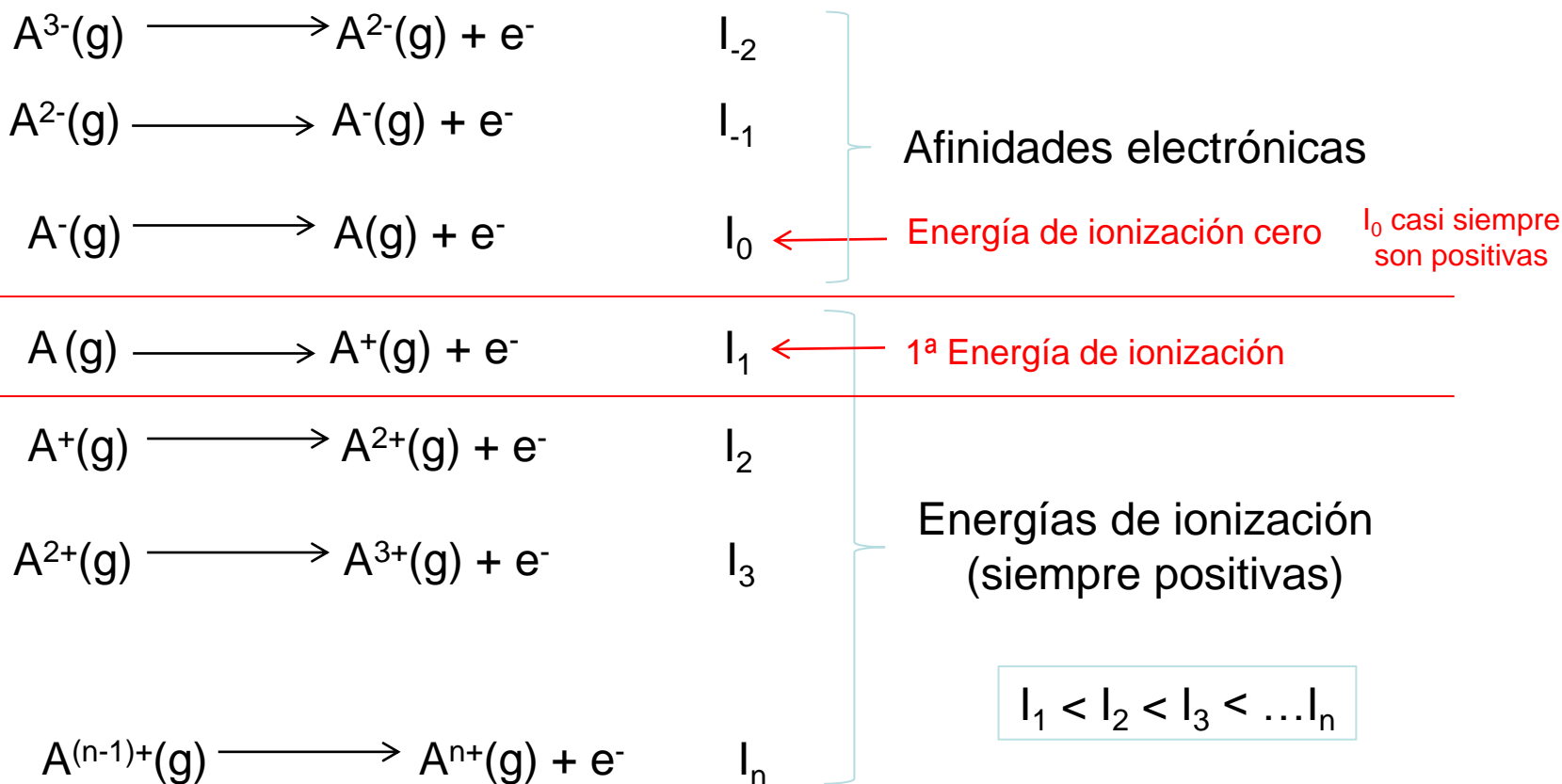
$$I_{-1}(\text{O}) = -AE_2(\text{O}) = -744 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$I_{-1}(\text{S}) = -AE_2(\text{S}) = -456 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Tabla tomada del libro de texto de G. Wulfsberg



# Energías de ionización



Mientras mayor sea el valor de  $I_0$ , más afín será ese átomo por los electrones ajenos, es decir, será más *electroafín* o tendrá mayor afinidad electrónica.



# Energías de ionización cero

©1998-2003 Synergy Creations™

**Electron Affinity**

-41 348.97

kilojoules per mole (kJ/mol)

1																	18					
H 72.767																	He -21					
2																	13	14	15	16	17	
Li 59.62	Be -18											B 26.725	C 121.84	N -6.75	O 140.97	F 327.9	Ne -29					
Na 52.865	Mg -21	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al 42.55	Si 133.6	P 72.023	S 200.40	Cl 348.97	Ar -34					
K 48.38	Ca 2.369	Sc 18.14	Ti 7.62	V 50.65	Cr 64.3	Mn 0.0	Fe 15.7	Co 63.8	Ni 111.5	Cu 118.5	Zn -9	Ga 29	Ge 118.96	As 78.2	Se 194.95	Br 324.66	Kr -40.5					
Rb 46.882	Sr 4.63	Y 29.6	Zr 41.1	Nb 86.2	Mo 71.9	Tc 53.1	Ru 101	Rh 109.7	Pd 53.7	Ag 125.6	Cd -26	In 29	Sn 107.3	Sb 100.9	Te 190.14	I 295.14	Xe -41.0					
Cs 45.503	Ba 14.5	La 48	Hf 0.0	Ta 31.1	W 78.6	Re 14.5	Os 106	Ir 151.0	Pt 205.3	Au 222.73	Hg -18.04	Tl 19.3	Pb 35.1	Bi 91.3	Po 183	At 270	Rn -41.0					
Fr 44	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	113	Uuq	115	116	117	118					

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
48	0.0	-29	-29	29	-29	48	48	-29	-29	-29	29	-29	48
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
48	29	29	29	-29	-29	29	-29	-29	-29	-10	96	-29	29

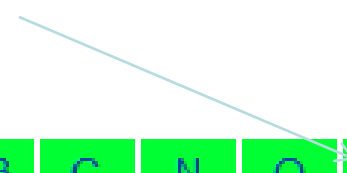




# Afinidades electrónicas tradicionales

Grupo 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18  
Periodo

**Pongan atención en los signos**



1	H -73																He 21	
2	Li -60	Be 19										B -27	C -122	N 7	O -141	F -328	Ne 29	
3	Na -53	Mg 19										Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar 35	
4	K -48	Ca 10	Sc -18	Ti -8	V -51	Cr -64	Mn	Fe -16	Co -64	Ni -112	Cu -118	Zn 47	Ga -29	Ge -116	As -78	Se -195	Br -325	Kr 39
5	Rb -47	Sr	Y -30	Zr -41	Nb -86	Mo -72	Tc -53	Ru -101	Rh -110	Pd -54	Ag -126	Cd 32	In -29	Sn -116	Sb -103	Te -190	I -295	Xe 41
6	Cs -45	Ba	Lu	Hf	Ta -31	W -79	Re -14	Os -106	Ir -151	Pt -205	Au -223	Hg 61	Tl -20	Pb -35	Bi -91	Po -183	At -270	Rn 41
7	Fr -44	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

Tabla periódica de afinidades electrónicas, en kJ/mol

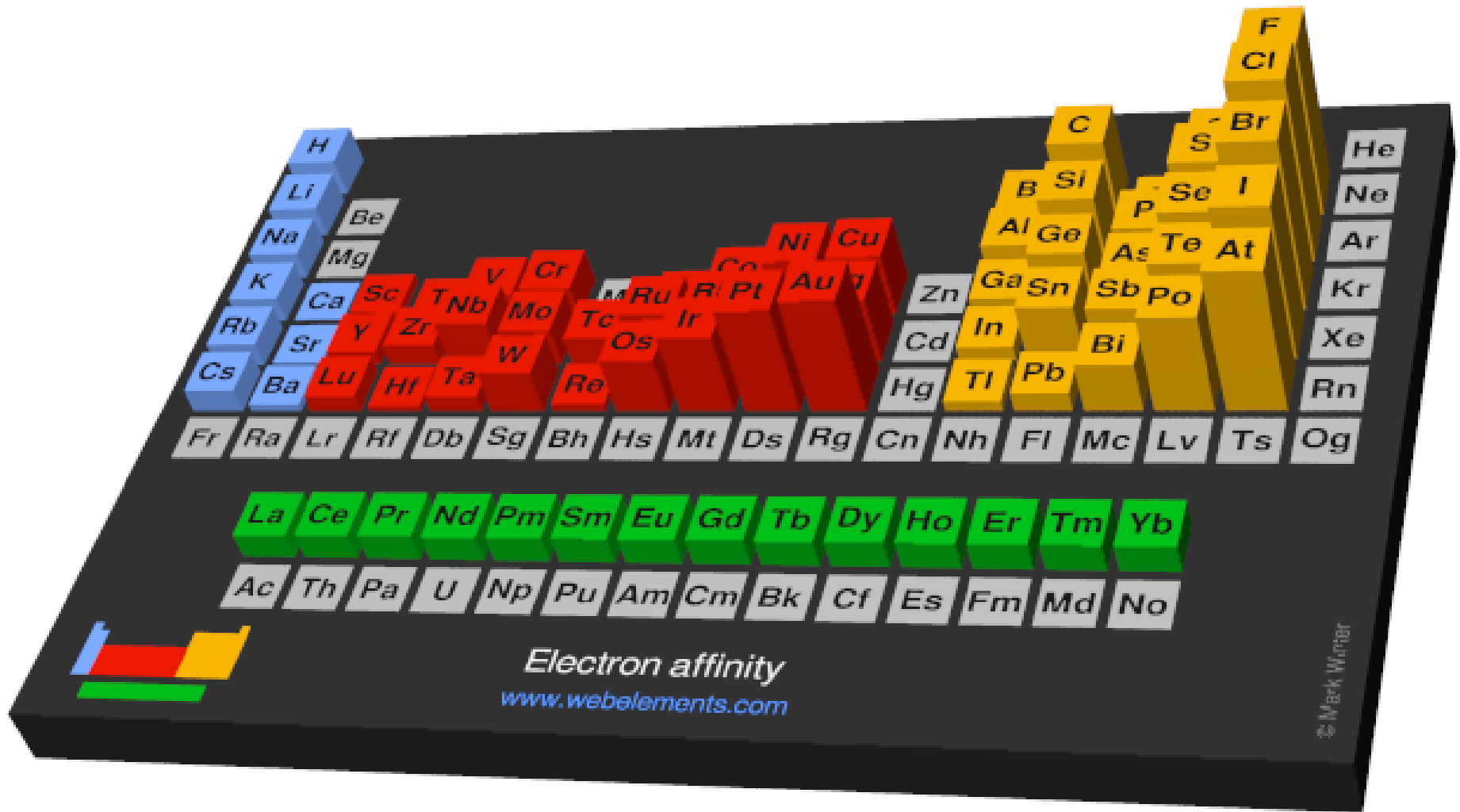


# no todos están de acuerdo

Li -60	Be 0	B -26	C -154	N -7	O -141	F -328	Ne 0
Na -53							
K -48							
Rb -47							
Cs -46							

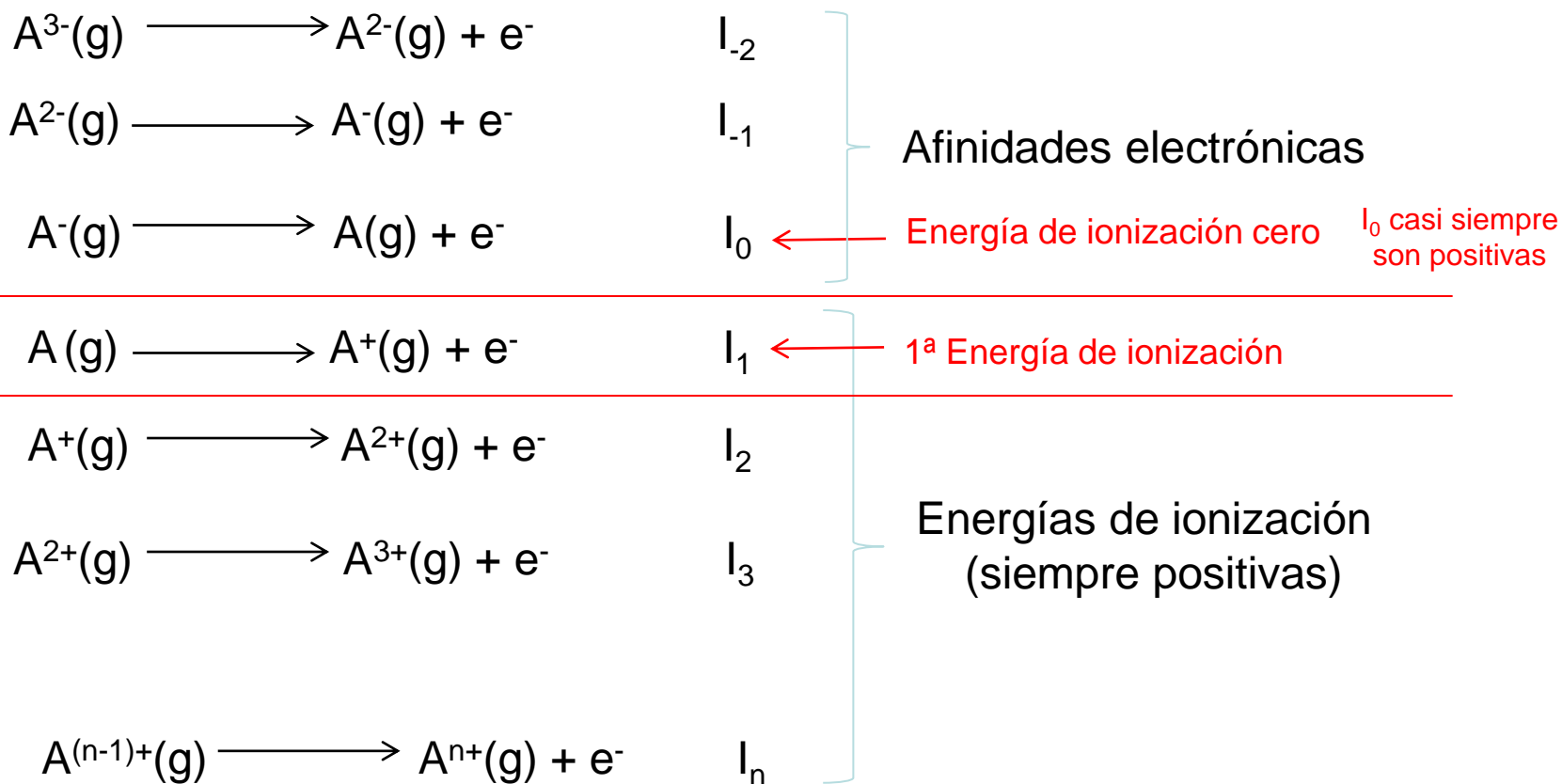
**Figura 2.14** Afinidades electrónicas ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) de un grupo y un periodo representativos.

Tabla tomada de tu libro de texto  
**G. Rayner-Canham**





# Energías de ionización



Mientras mayor sea el valor de  $I_0$ , más afín será ese átomo por los electrones ajenos, es decir, será más *electroafín* o tendrá mayor afinidad electrónica.



# Modelo vs observaciones

- Las propiedades periódicas observables experimentalmente se pueden explicar mediante el modelo mecánico-cuántico.