



Estructura electrónica y periodicidad

Viewing: Atomic weight

1	H 1.0079	2											18	He 4.0026										
2	Li 6.941	Be 9.0122											13	B 10.811	14	C 12.011	15	N 14.007	16	O 15.999	17	F 18.998	18	Ne 20.18
3	Na 22.99	Mg 24.305											13	Al 26.982	14	Si 28.086	15	P 30.974	16	S 32.065	17	Cl 35.453	18	Ar 39.948
4	K 39.098	Ca 40.078	Sc 44.956	Ti 47.88	V 50.941	Cr 51.996	Mn 54.938	Fe 55.847	Co 58.933	Ni 58.693	Cu 63.546	Zn 65.39	Ga 69.723	Ge 72.61	As 74.922	Se 78.96	Br 79.904	83.8	Kr 83.8					
5	Rb 85.468	Sr 87.62	Y 88.906	Zr 91.224	Nb 92.906	Mo 95.94	Tc 97.907	Ru 101.07	Rh 102.91	Pd 106.42	Ag 107.87	Cd 112.41	In 114.82	Sn 118.71	Sb 121.76	Te 127.6	I 126.9	131.29	Xe 131.29					
6	Cs 132.91	Ba 137.33	La 138.91	Hf 178.49	Ta 180.95	W 183.84	Re 186.21	Os 193.22	Ir 192.22	Pt 195.08	Au 196.97	Hg 200.59	Tl 204.38	Pb 207.2	Bi 208.98	Po (209)	At (210)	222	Rn (222)					
7	Fr 223	Ra 226	Ac (227)	Rf (261.1)	Db (262.1)	Sg (263.1)	Bh (262.1)	Hs (265.1)	Mt (266.1)	Uun (269)	Uuu (272)	Uub (277)												

Lanthanide Series	Ce 140.12	Pr 140.91	Nd 144.24	Pm 144.9	Sm 150.36	Eu 151.97	Gd 157.25	Tb 158.93	Dy 162.5	Ho 164.93	Er 167.26	Tm 168.93	Yb 173.04	Lu 174.97
Actinide Series	Th 232.04	Pa 231.04	U 238.03	Np 237	Pu 244.1	Am 243.1	Cm 247.1	Bk 247.1	Cf 251.1	Es 252.1	Fm 257.1	Md 258.1	No 259.1	Lr 262.1

Principios de Estructura de la Materia

Unidad 0: Antecedentes

Sigfrido Escalante Tovar
ene - 2020



Los elementos químicos

1 2 13 14 15 16 17 18





Estado de agregación

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



Gas



Sólido



Líquido

Lanthanide Series

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
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
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
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)



La Tabla "oficial" el 30 de enero de 2013

IUPAC Periodic Table of the Elements

Key:
atomic number
Symbol
name
standard atomic weight

1 H hydrogen (1.007, 1.008)																	18 He helium 4.002
3 Li lithium (6.938, 6.941)	4 Be beryllium 9.012											5 B boron (10.81, 10.82)	6 C carbon (12.00, 12.01)	7 N nitrogen (14.00, 14.01)	8 O oxygen (15.99, 16.00)	9 F fluorine 18.99	10 Ne neon 20.18
11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium 24.31											13 Al aluminium 26.98	14 Si silicon (28.08, 28.09)	15 P phosphorus 30.97	16 S sulfur (32.05, 32.06)	17 Cl chlorine (35.44, 35.46)	18 Ar argon 39.95
19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 51.99	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc (65.38, 65.40)	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.64	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium (78.94, 78.96)	35 Br bromine 79.90	36 Kr krypton 83.80
37 Rb rubidium 85.47	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.91	40 Zr zirconium 91.22	41 Nb niobium 92.91	42 Mo molybdenum 95.94(2)	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.1	45 Rh rhodium 103.1	46 Pd palladium 106.4	47 Ag silver 107.9	48 Cd cadmium 112.4	49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3
55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium (204.3, 204.4)	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.9	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium						
			57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.1	71 Lu lutetium 175.0
			89 Ac actinium 227.0	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

Notes

- IUPAC 2009 Standard atomic weights abridged to four significant digits (Table 4 published in *Pure Appl. Chem.* 83, 359-396 (2011); doi:10.1351/PAC-REP-10-09-14). The uncertainty in the last digit of the standard atomic weight value is listed in parentheses following the value. In the absence of parentheses, the uncertainty is one in that last digit. An interval in square brackets provides the lower and upper bounds of the standard atomic weight for that element. No values are listed for elements which lack isotopes with a characteristic isotopic abundance in natural terrestrial samples. See PAC for more details.

- "Aluminum" and "caesium" are commonly used alternative spellings for "aluminium" and "caesium."

- Claims for the discovery of all the remaining elements in the last row of the Table, namely elements with atomic numbers 113, 115, 117 and 118, and for which no assignments have yet been made, are being considered by a IUPAC and IUPAP Joint Working Party.

For updates to this table, see iupac.org/reports/periodic_table/. This version is dated 1 June 2012.

Copyright © 2012 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.





La Tabla “oficial” en enero de 2016

IUPAC Periodic Table of the Elements

													13	14	15	16	17	18
1 H hydrogen [1.007, 1.009]													5 B boron [10.80, 10.82]	6 C carbon [12.00, 12.02]	7 N nitrogen [14.00, 14.01]	8 O oxygen [15.99, 16.00]	9 F fluorine 19.00	10 Ne neon 20.18
3 Li lithium [6.938, 6.997]	4 Be beryllium 9.012											13 Al aluminum 26.98	14 Si silicon [28.08, 28.09]	15 P phosphorus 30.97	16 S sulfur [32.05, 32.07]	17 Cl chlorine [35.44, 35.46]	18 Ar argon 39.95	
11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium [24.30, 24.31]																	
19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 52.00	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc [65.382]	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.63	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.97	35 Br bromine [79.90, 79.91]	36 Kr krypton 83.80	
37 Rb rubidium 85.47	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.91	40 Zr zirconium 91.22	41 Nb niobium 92.91	42 Mo molybdenum 95.95	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.1	45 Rh rhodium 102.9	46 Pd palladium 106.4	47 Ag silver 107.9	48 Cd cadmium 112.4	49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3	
55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium [204.3, 204.4]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon	
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113 Uut ununtrium	114 F1 flerovium	115 Uup ununpentium	116 Lv livermorium	117 Uus ununseptium	118 Uuo ununoctium	

Key:
atomic number
Symbol
name
standard atomic weight



INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.0	71 Lu lutetium 175.0
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

For notes and updates to this table, see www.iupac.org. This version is dated 8 January 2016.
Copyright © 2016 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.



La Tabla "oficial" en noviembre de 2016

IUPAC Periodic Table of the Elements

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



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

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

<https://iupac.org/what-we-do/periodic-table-of-elements/>

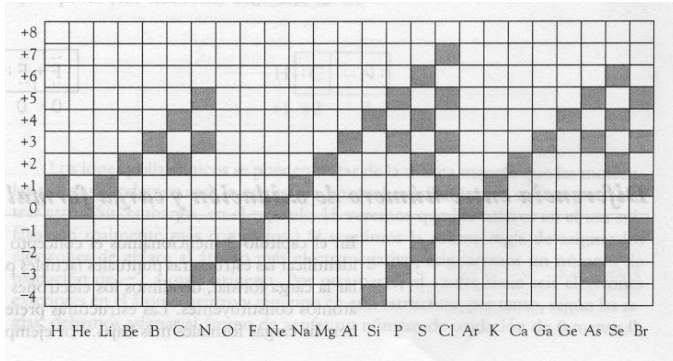


La ley periódica

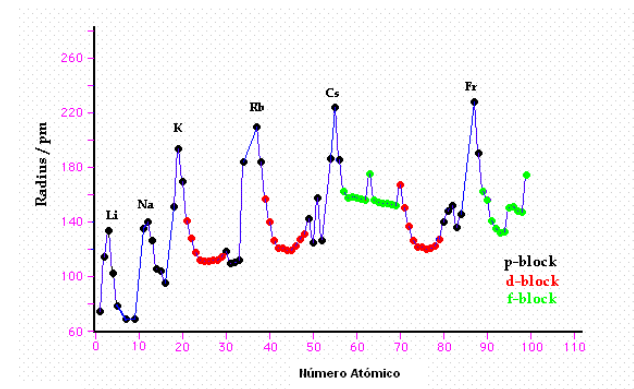
“Si ordenamos a los elementos en orden ascendente de su número atómico, sus propiedades se repiten o presentan variaciones periódicamente”

¿Cuáles son las propiedades periódicas?

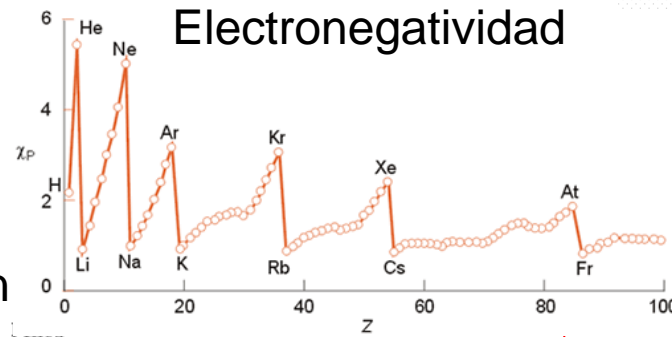
Propiedades que tienen variaciones periódicas



Estado de oxidación

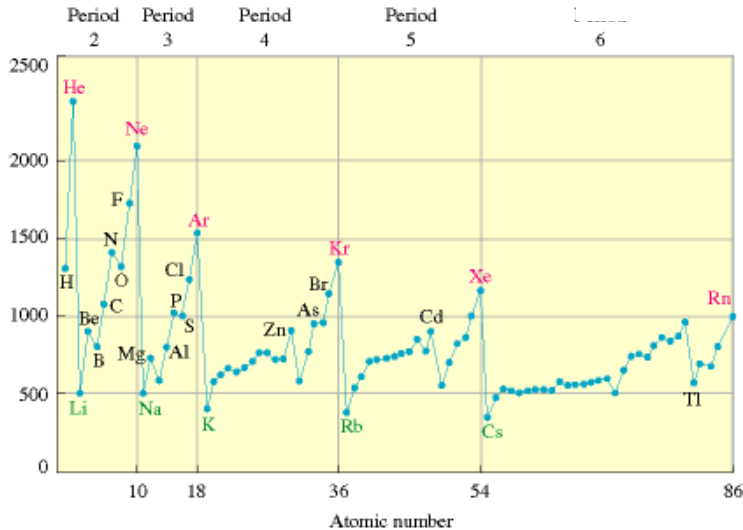


Tamaño

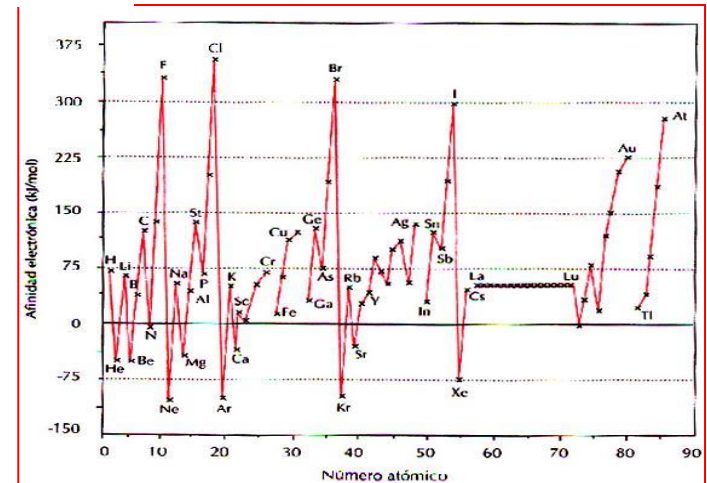


Electronegatividad

Energía de ionización

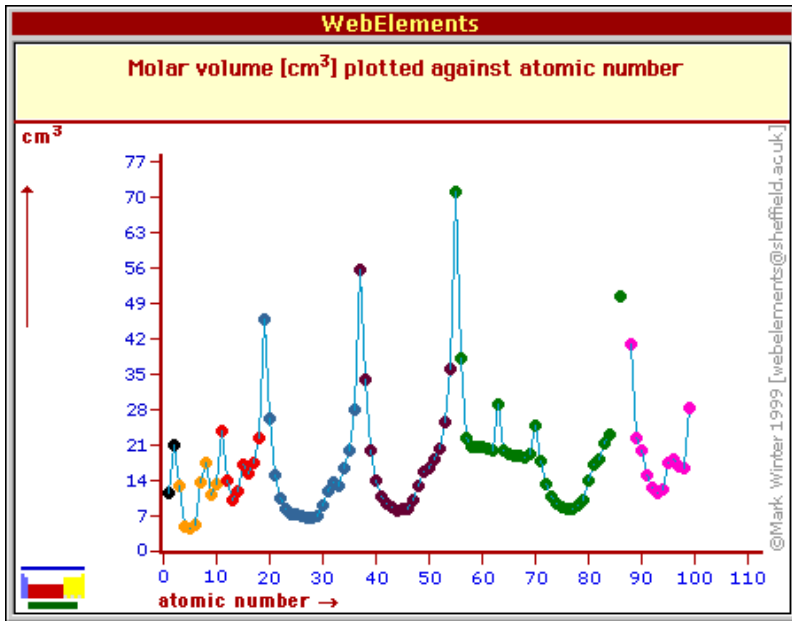


Afinidad electrónica



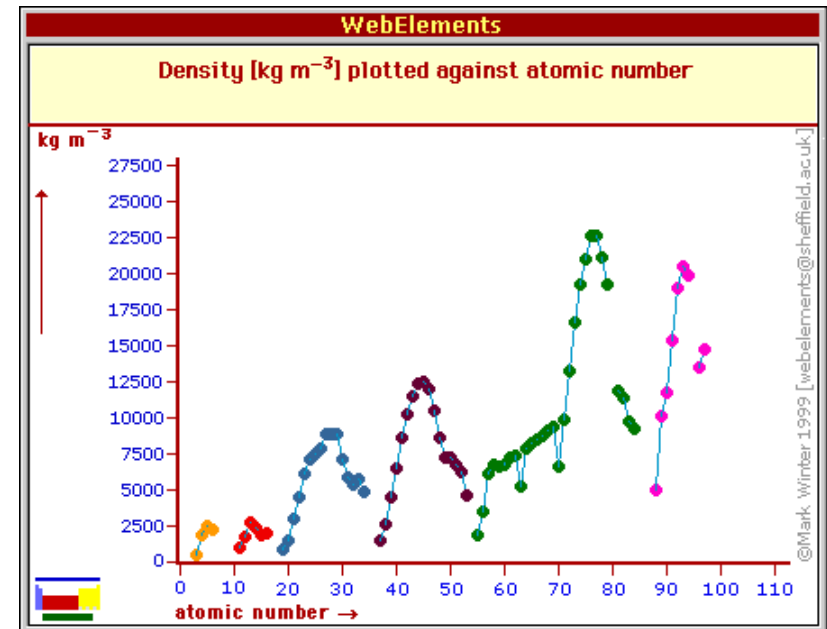


Propiedades que tienen variaciones periódicas



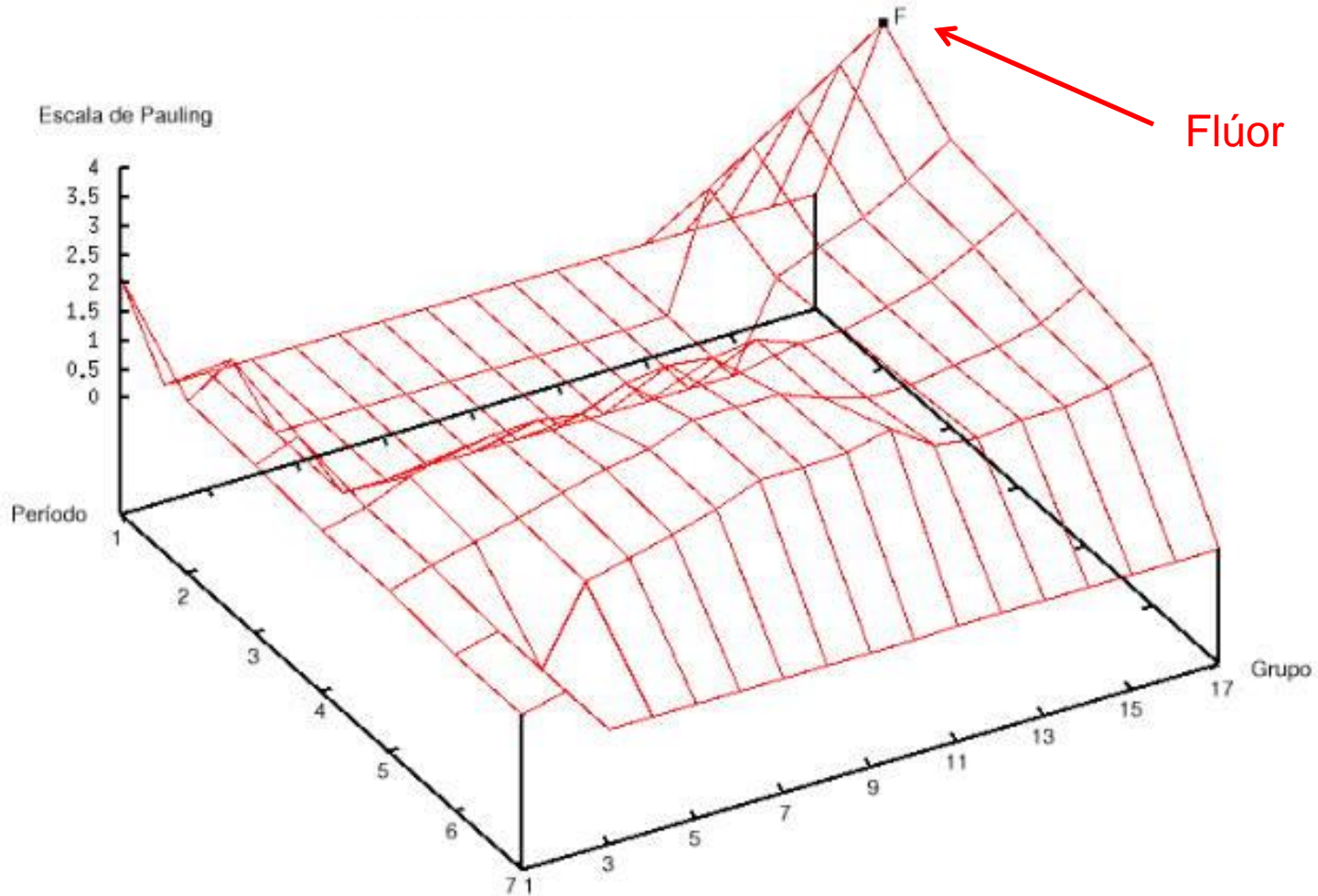
Volumen molar

Densidad





Variaciones en la electronegatividad



- http://enciclopedia.us.es/index.php/Escales_Pauling



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

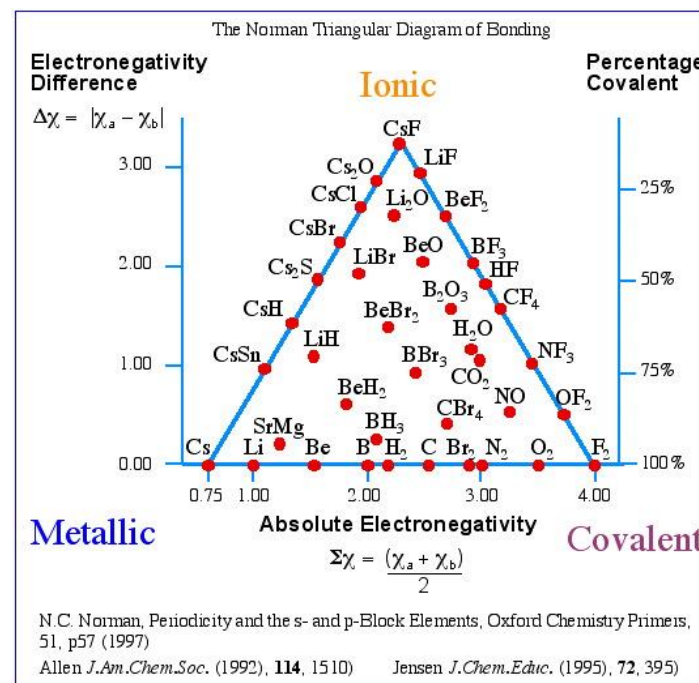
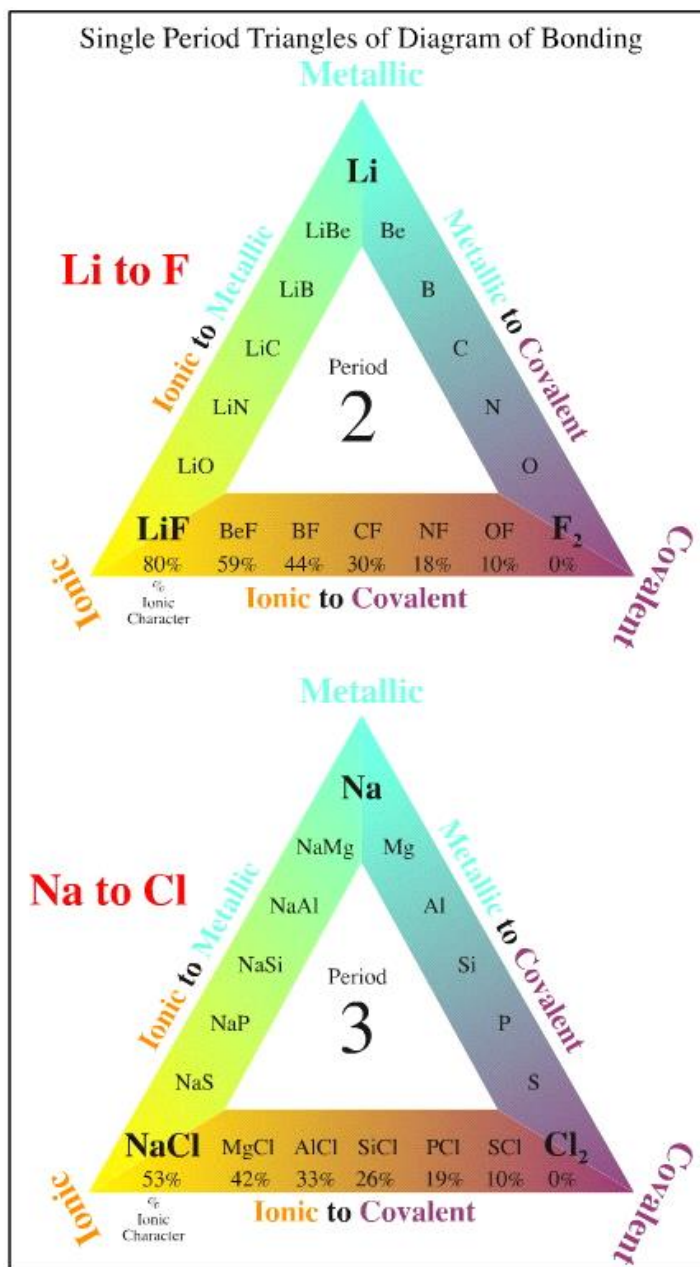
¡ 85 404 946 ! a las 11:30 hrs. 3/abr/2014

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 (núcleo) $\cong 1 \times 10^{-14}$ m
- r (átomo) $\cong 1 \times 10^{-10}$ m

- r (H^+) = 0.84087 fm
- r (H) = 120 pm
- r (H^-) = 208 pm



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

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



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

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

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

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



Las soluciones ...cont.

La parte angular

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

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

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

Modelo de la aproximación orbital

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

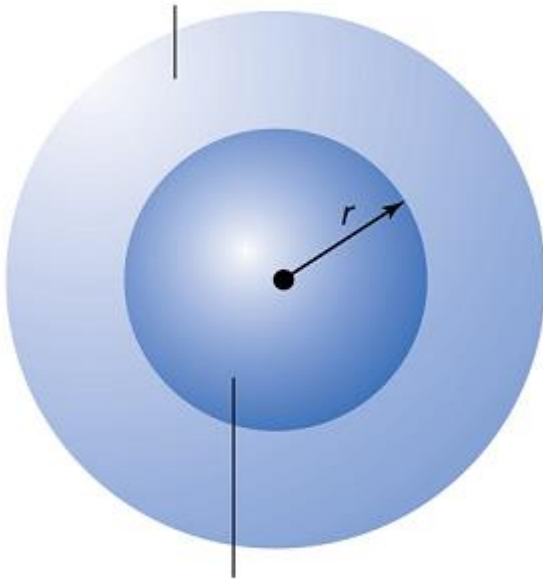
$$\Psi(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) = \psi_1(\mathbf{q}_1) \psi_2(\mathbf{q}_2) \dots \psi_N(\mathbf{q}_N)$$

(*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 sobre los electrones de los 18 primeros 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

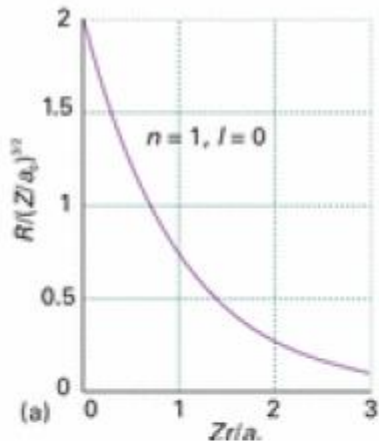
- El orbital 2s es **penetrante** respecto al 1s
- Para un orbital 2s, el **apantallamiento** de un 1s no será -1 , sino un valor menor en valor absoluto
- El orbital 3s es **penetrante** respecto al 2s y 2p
- En la capa de valencia la carga efectiva sobre los orbitales s es mayor que sobre los p como 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 .

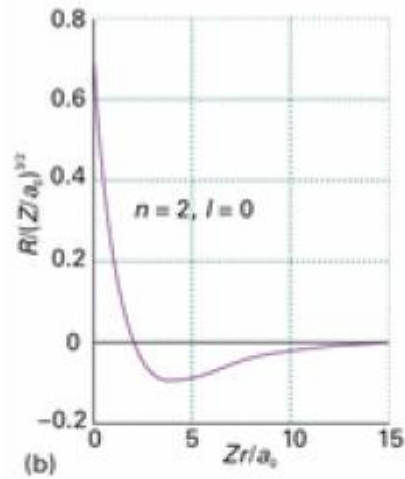
- En la capa de valencia, $Z_{ef}(s) > Z_{ef}(p) > Z_{ef}(d) > Z_{ef}(f)$



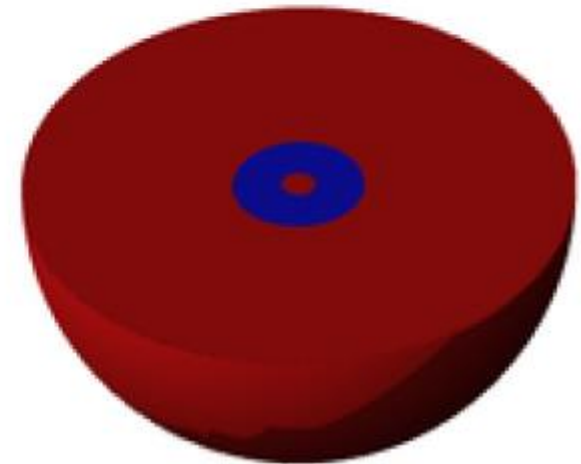
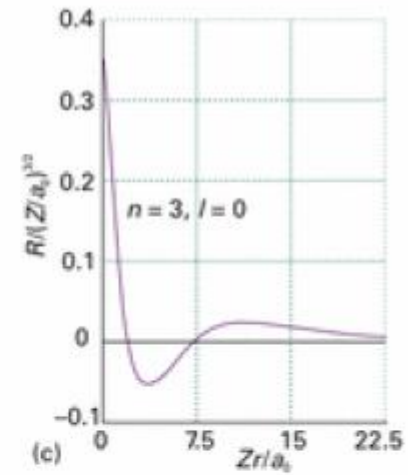
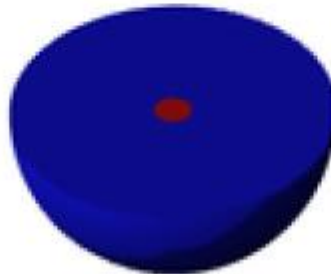
Nodos radiales: s



1s

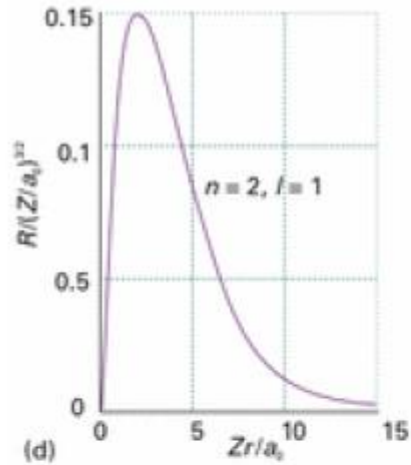


2s

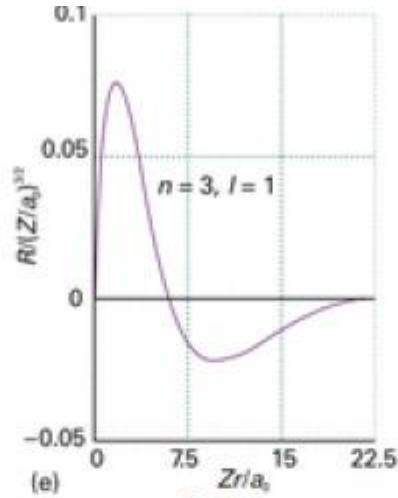
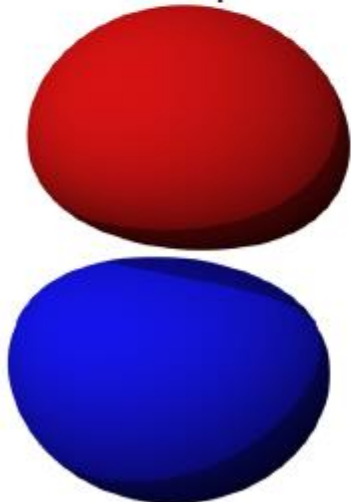




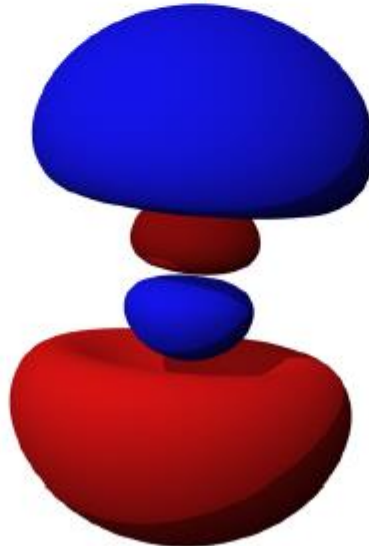
Nodos radiales: p



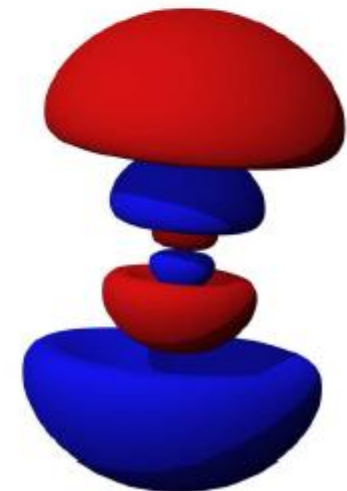
2p



3p

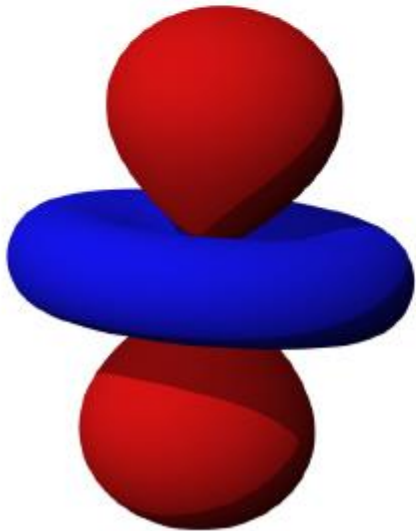
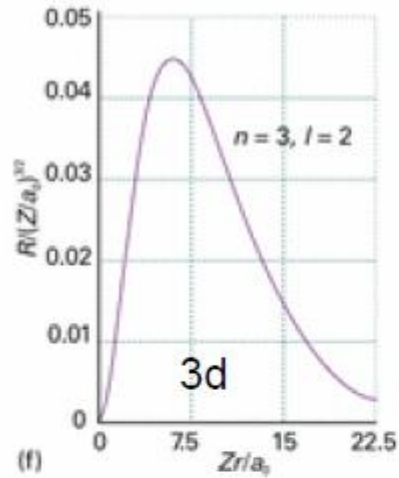


4p

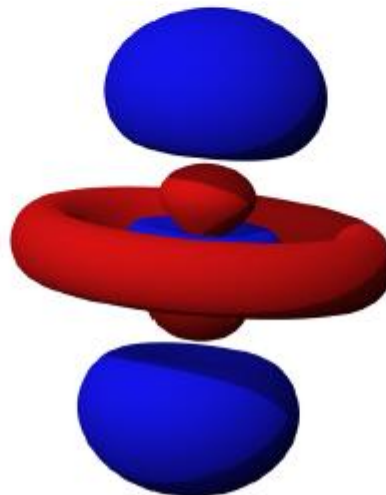




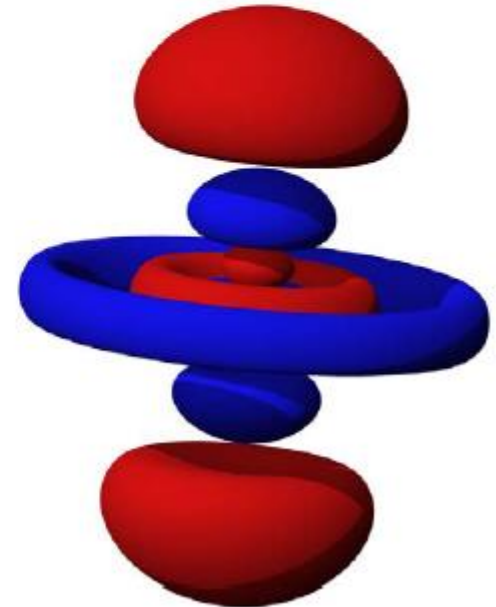
Nodos radiales: *d*



4d



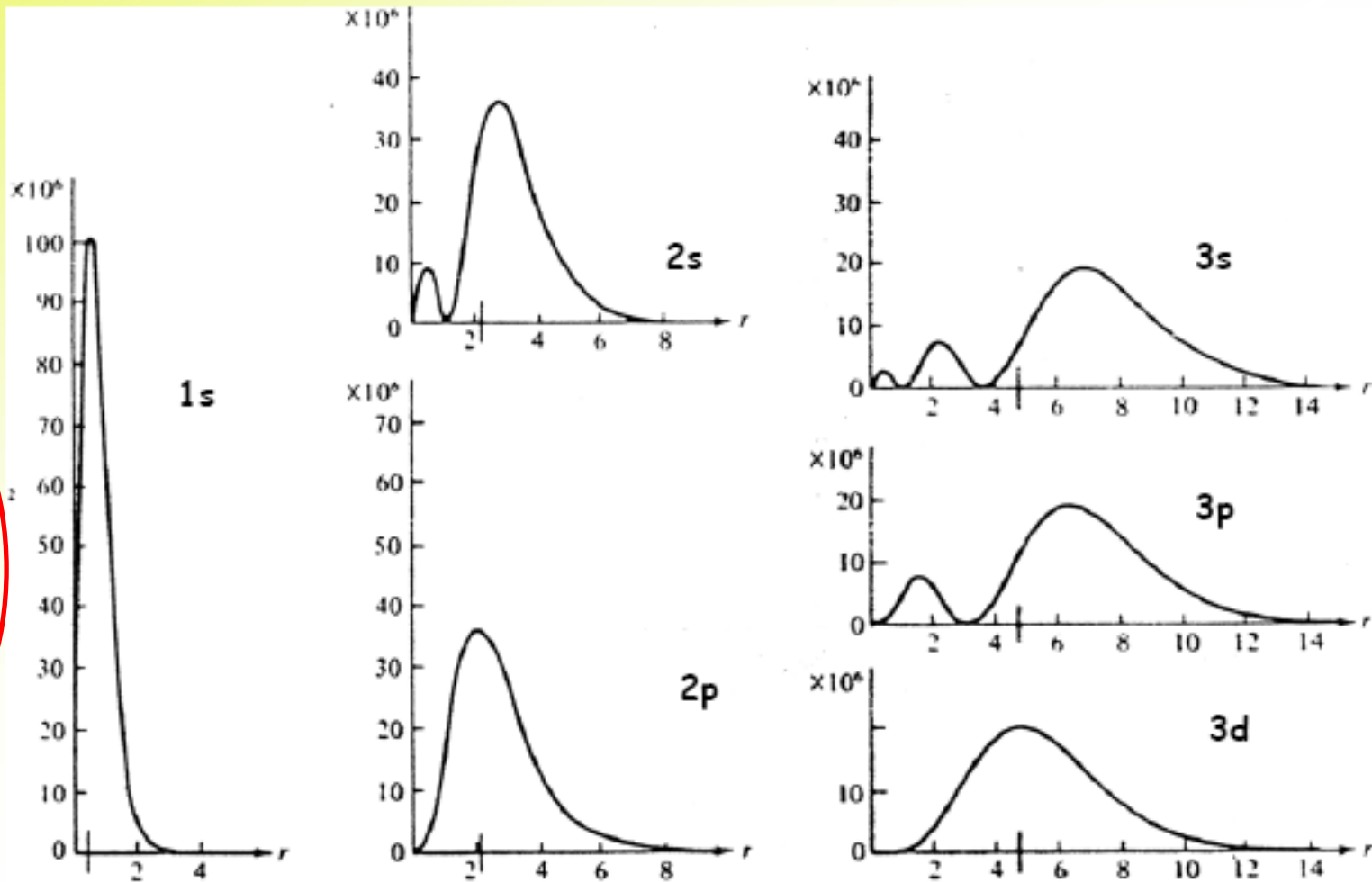
5d





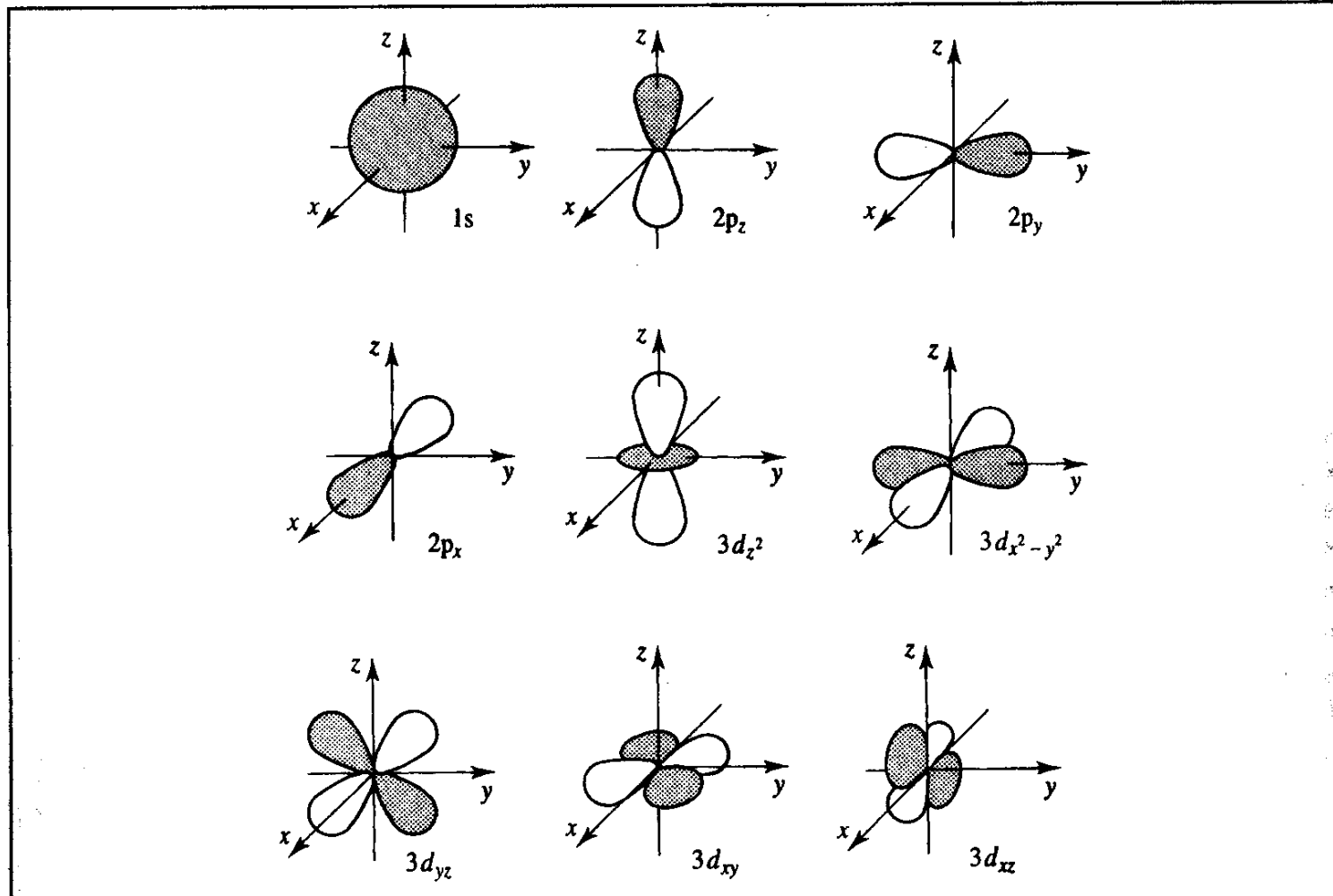
La función de distribución radial

$$\psi^2 4\pi r^2$$



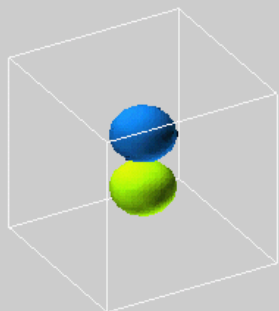


Funciones angulares hidrogenoides

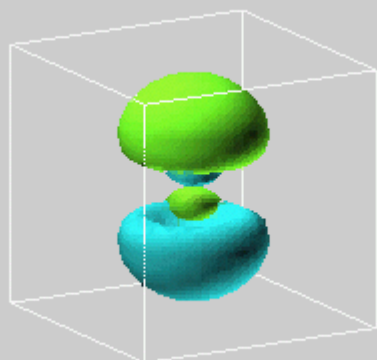




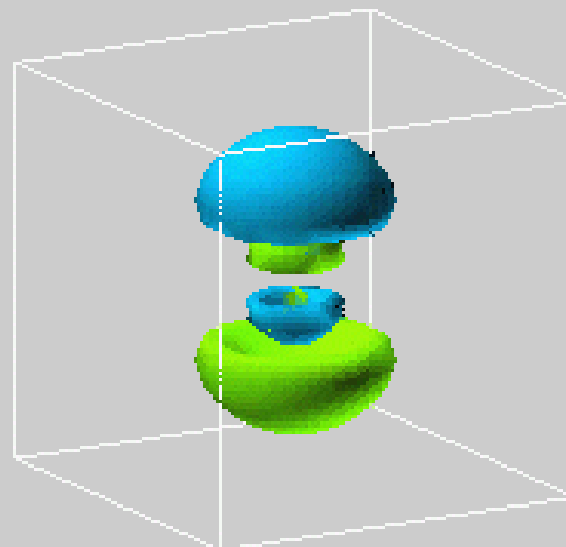
Tamaño orbital



$2p$



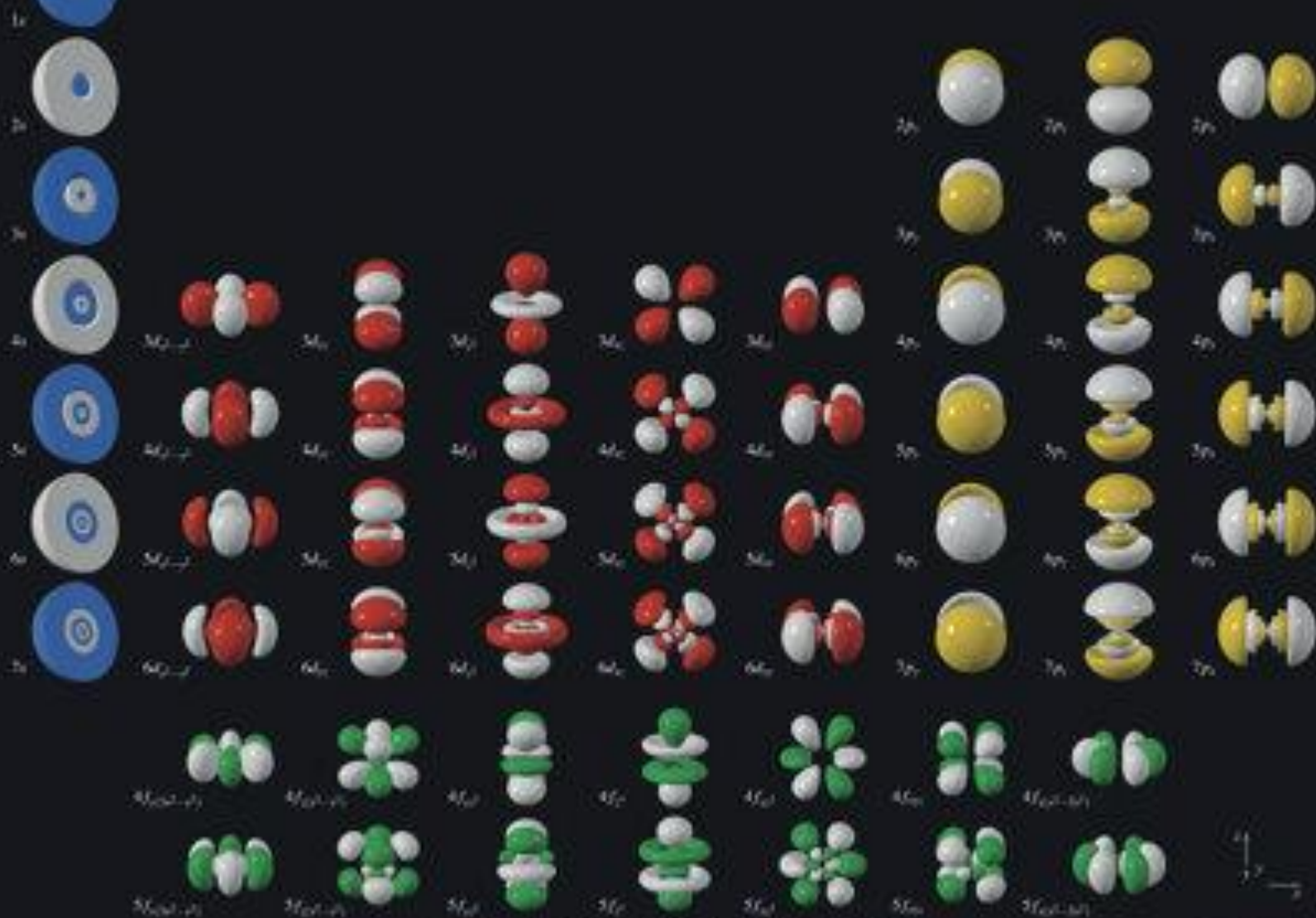
$3p$



$4p$

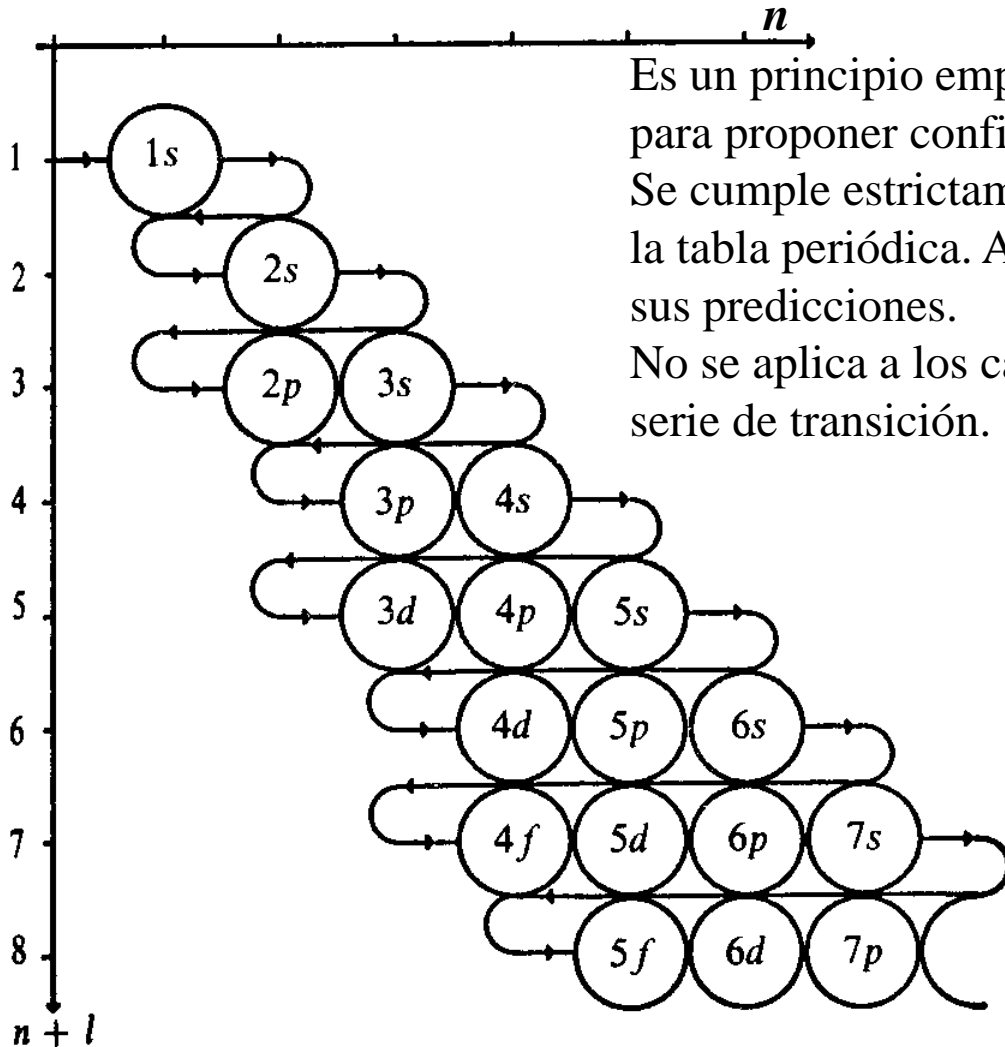
<http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>

The Orbitron gallery of atomic orbitals





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.



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 coulombica

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

Integral de intercambio

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

Energía de correlación



Periodicidad, “anomalías”

- Contracciones lantánida, escándida y boránida
- Relaciones diagonales
- Propiedades de elementos del 3er período
- Efecto del par inerte
- Efectos relativistas
- Enlaces π .



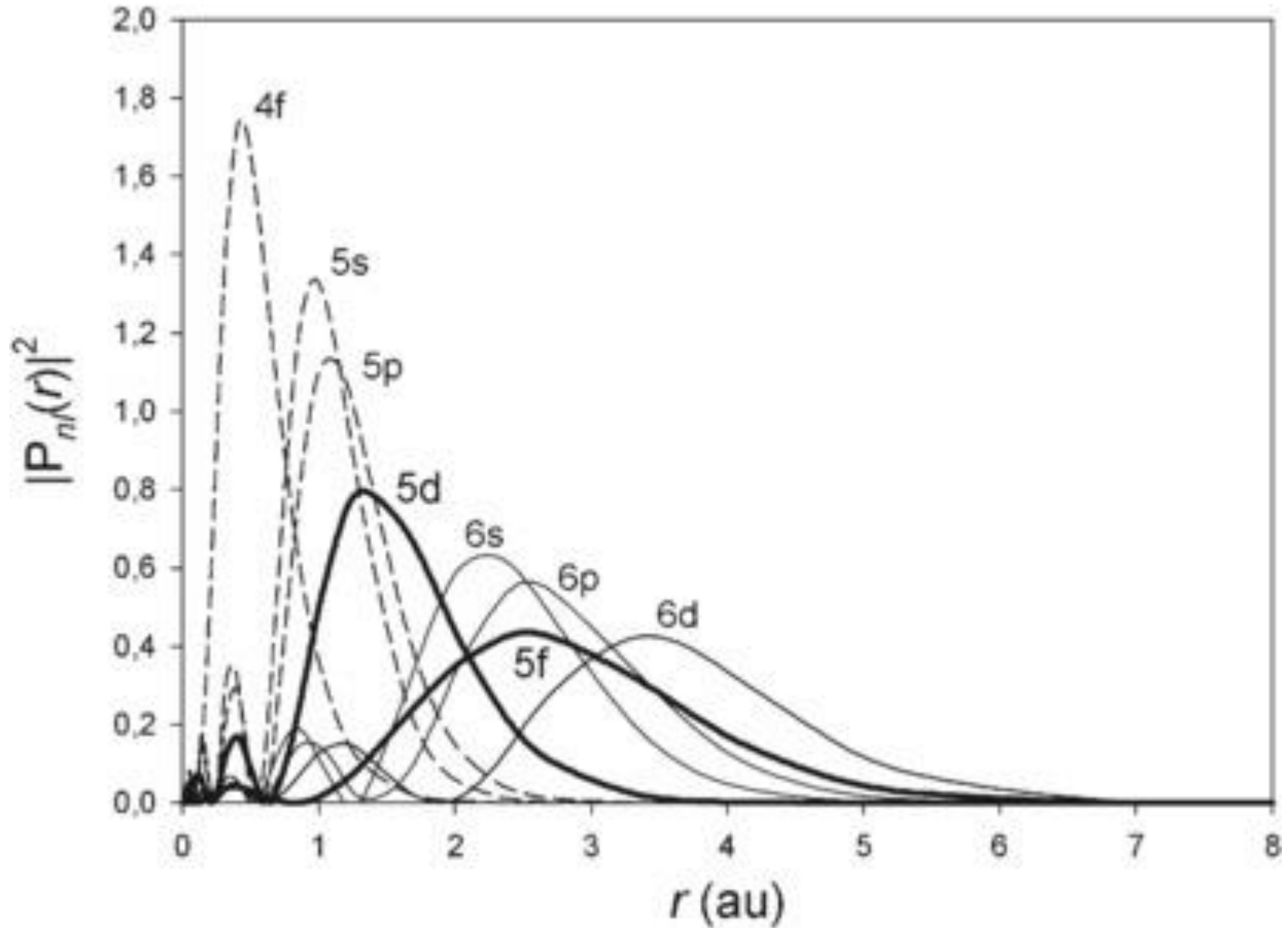
Contracción lantánida

Gpo 8	r (pm)	Gpo 10	r (pm)	Gpo 11	r (pm)
Fe	124	Ni	125	Cu	128
Ru	134	Pd	138	Ag	144
Os	135	Pt	138	Au	144

- A lo largo de un período disminuye el radio, excepto cuando se entra al bloque p .
- En algunas familias, el incremento de n **no** necesariamente da lugar a un aumento del radio.
- De la comparación de cálculos no-relativistas y relativistas se observa que esta contracción se debe, entre un 5 y un 15%, a efectos relativistas.



Funciones de distribución radial





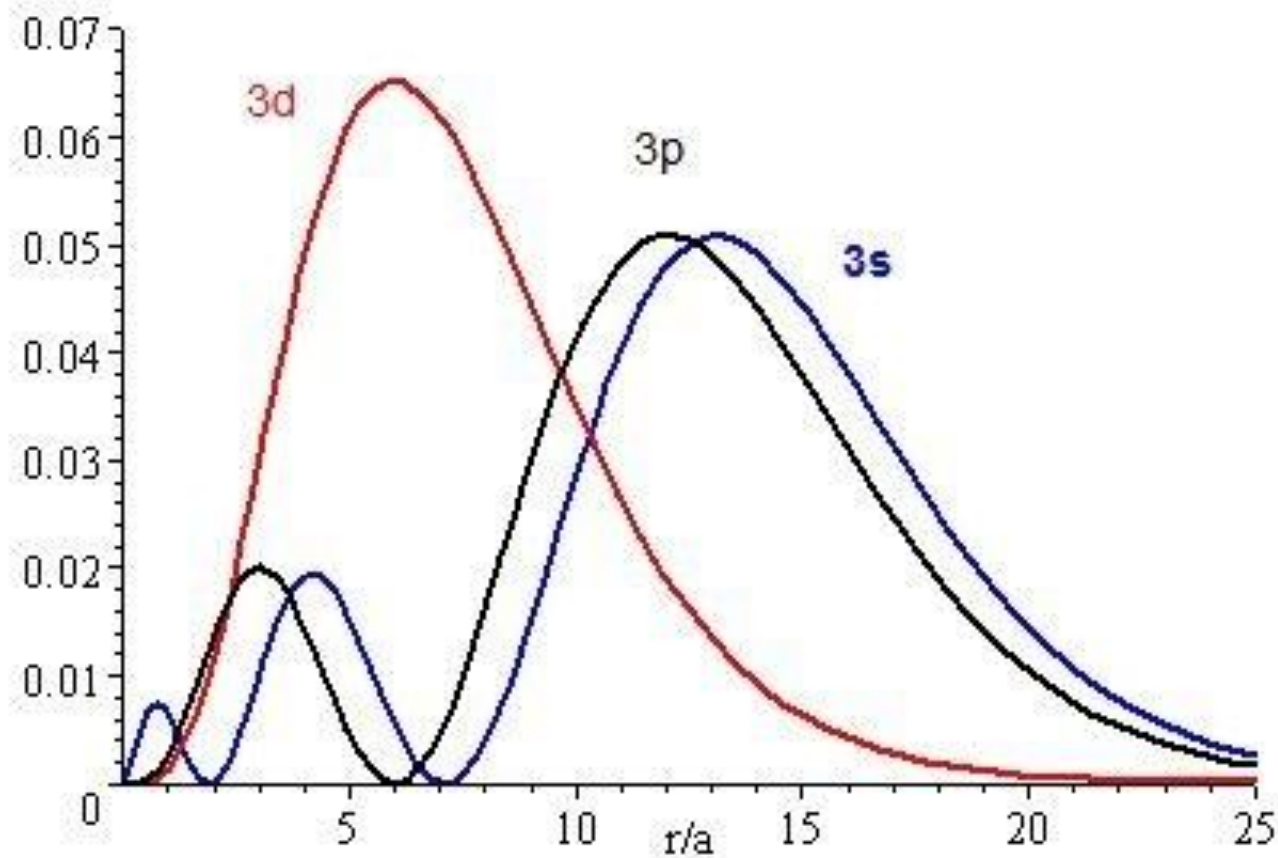
Contracciones escándica y boránica

Gpo 13	r (pm)			Gpo 11	r (pm)
Al	143			Li	205
Ga	135			Na	223
In	167			K	277

Cada vez que cambia por primera vez el número cuántico ℓ , ocurre una contracción de los elementos que siguen. **¿Por qué?**



Funciones de distribución radial: penetrabilidad





La Tabla "oficial"

IUPAC Periodic Table of the Elements

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

Key:
atomic number
Symbol
name
conventional atomic weight
standard atomic weight



INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

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

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



Apantallamiento de los orbitales 4f

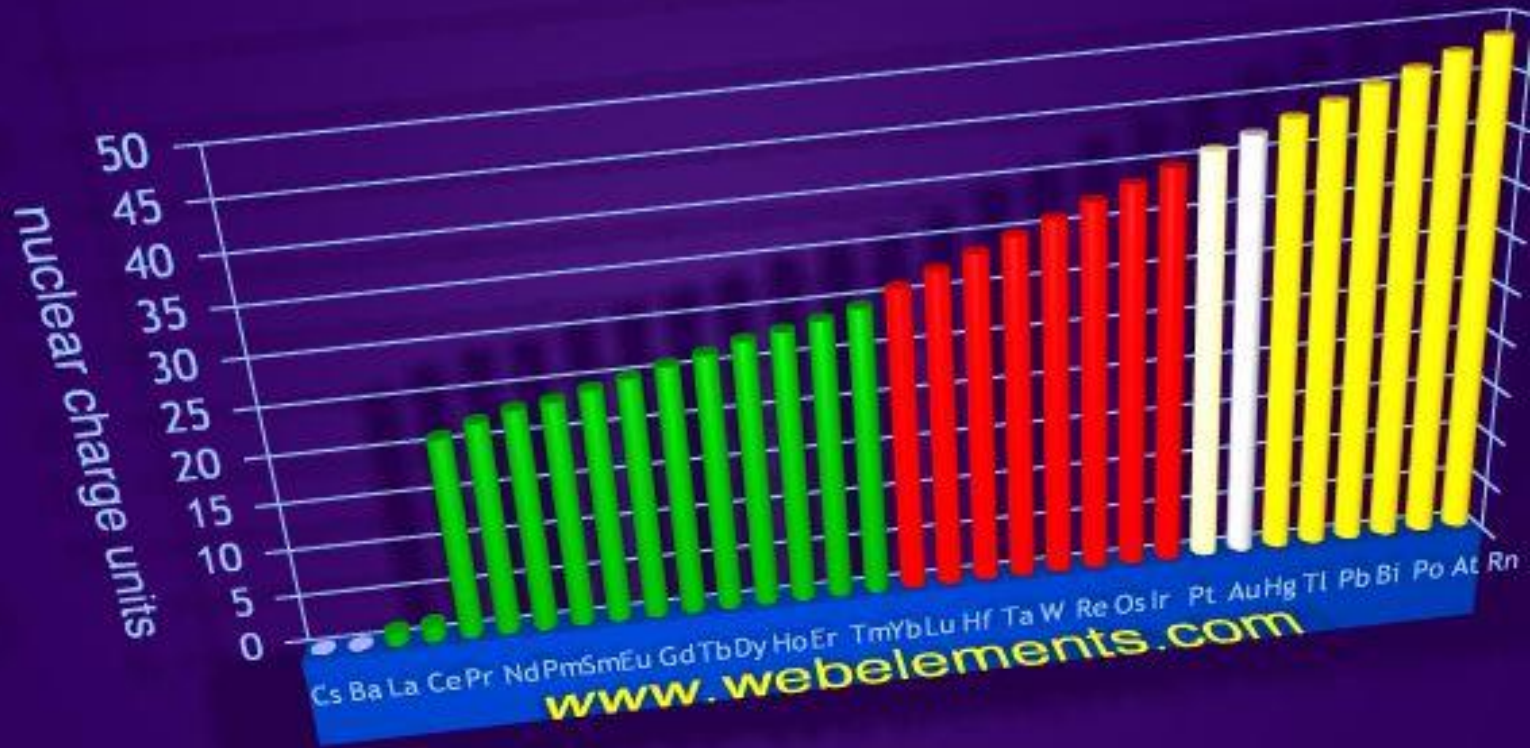
Elemento	Num. atómico	Z^*_{6s}
Sm	62	8.01
Eu	63	8.12
Gd	64	8.21
Tb	65	8.30
Dy	66	8.34
Ho	67	8.44
Er	68	8.48
Tm	69	8.58
Yb	70	8.59
Lu	71	8.80

Cuando se comparan cálculos relativistas de esos átomos con cálculos no-relativistas, se estima que de un 5 a un 15% de la contracción se debe a efectos relativistas.



Z_{ef} en los 4f

Effective nuclear charge (Clementi) – 4f



Para ver más propiedades, haz doble click en la figura

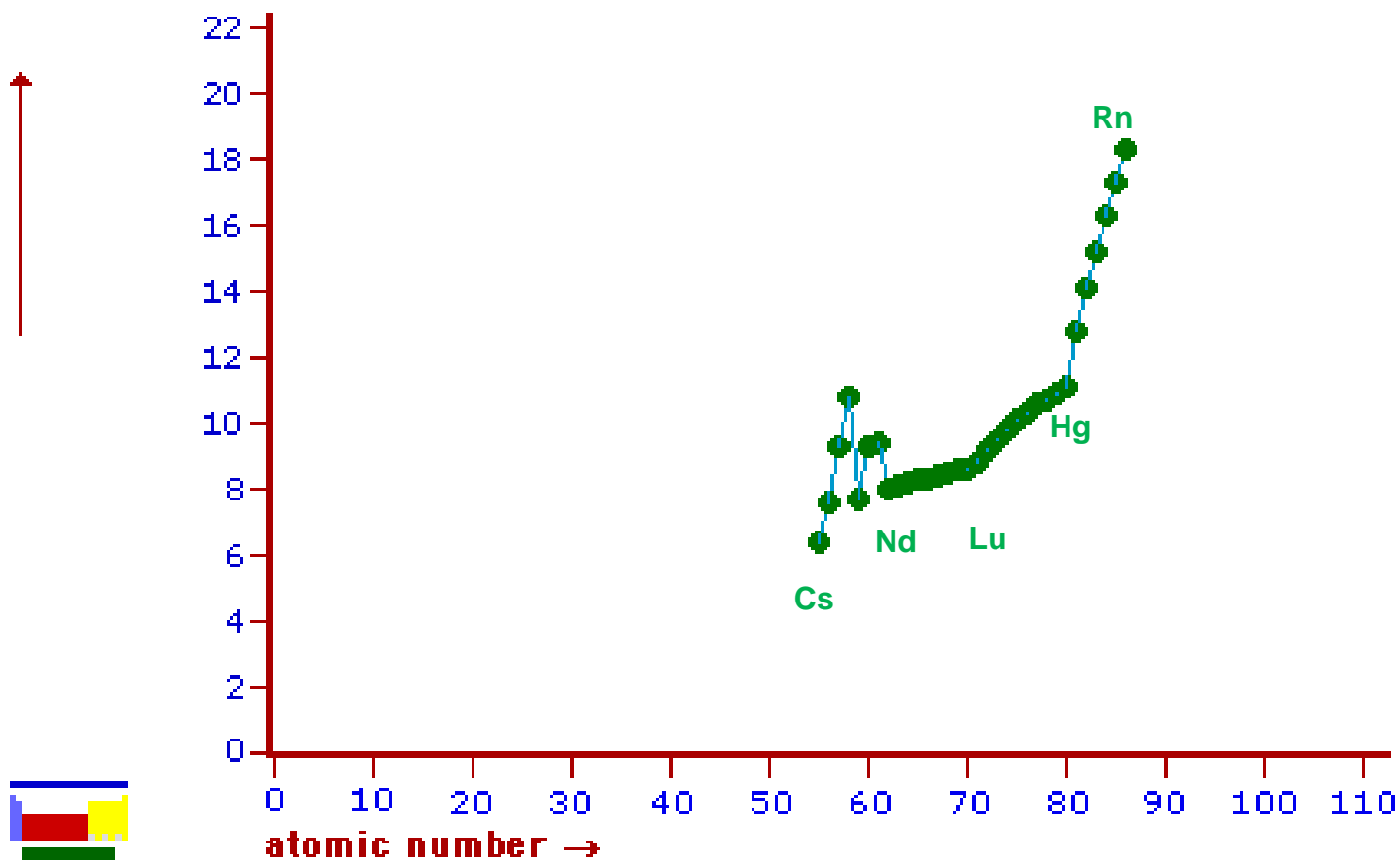


Z_{ef} en los 6s

WebElements

Effective nuclear charge (Clementi) – 6s [nuclear charge units]
plotted against atomic number

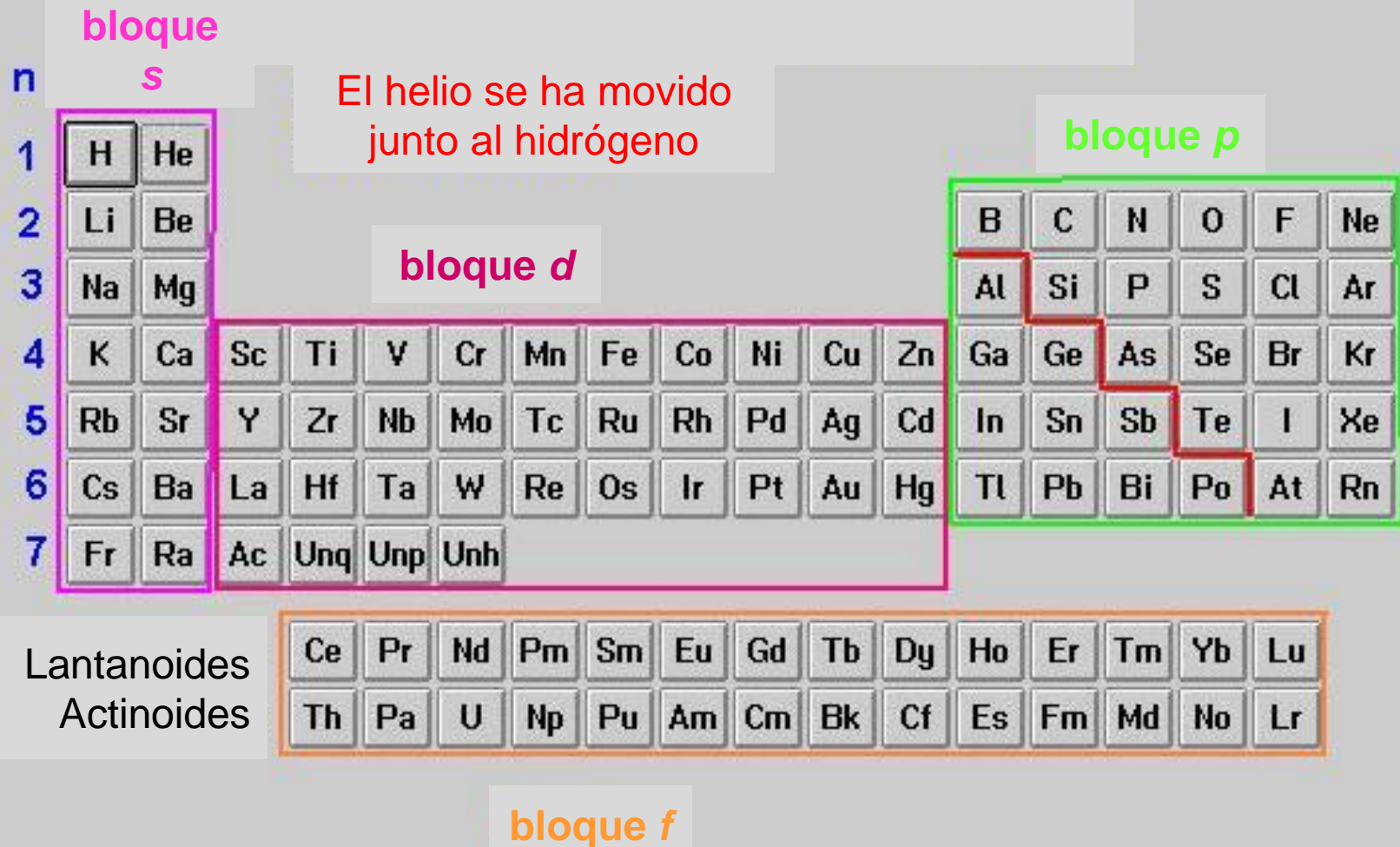
nuclear charge units



©Mark Winter 1999 [webelements@sheffield.ac.uk]



Bloques: *s*, *p*, *d*, *f*





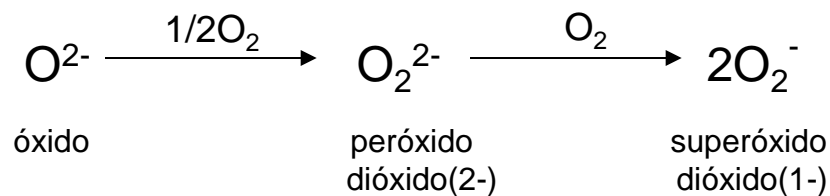
Periodicidad en óxidos

Producto preferente en su reacción con oxígeno:

Li: Li_2O el óxido

Na: Na_2O_2 el peróxido

Los demás: KO_2 , RbO_2 , CsO_2 el superóxido



La reactividad y propiedades del litio, cabeza del grupo, son diferentes a las del resto del grupo. Su pequeño tamaño y su electronegatividad son determinantes.

Periodicidad en Alcalinotérreos

Viewing: Atomic weight

1	2											13	14	15	16	17	18	
1	H 1.00794																He 4.00260	
2	Li 6.941	Be 9.0122											B 10.811	C 12.011	N 14.007	O 15.999	F 18.998	Ne 20.18
3	Na 22.990	Mg 24.305											Al 26.982	Si 28.086	P 30.974	S 32.065	Cl 35.453	Ar 39.948
4	K 39.098	Ca 40.078	Sc 44.956	Ti 47.88	V 50.941	Cr 51.996	Mn 54.938	Fe 55.847	Co 58.933	Ni 58.693	Cu 63.546	Zn 65.39	Ga 69.723	Ge 72.61	As 74.922	Se 78.96	Br 79.904	Kr 83.8
5	Rb 85.468	Sr 87.62	Y 88.906	Zr 91.224	Nb 92.906	Mo 95.94	Tc 97.91	Ru 101.07	Rh 102.91	Pd 106.42	Ag 107.87	Cd 112.41	In 114.82	Sn 118.71	Sb 121.76	Te 127.6	I 126.9	Xe 131.29
6	Cs 132.91	Ba 137.33	La 138.91	Hf 178.49	Ta 180.95	W 183.84	Re 186.21	Os 190.23	Ir 192.22	Pt 195.08	Au 196.97	Hg 200.59	Tl 204.38	Pb 207.2	Bi 208.98	Po (209)	At (210)	Rn (222)
7	Fr 223	Ra 226	Ac 227	Rf (261.1)	Db (262.1)	Sg (263.1)	Bh (264.1)	Hs (265.1)	Mt (266.1)	Uun (269)	Uuu (272)	Uub (277)						

Lanthanide Series	Ce 140.12	Pr 140.91	Nd 144.24	Pm (144.9)	Sm 150.36	Eu 151.97	Gd 157.25	Tb 158.93	Dy 162.5	Ho 164.93	Er 167.26	Tm 168.93	Yb 173.04	Lu 174.97
Actinide Series	Th 232.04	Pa 231.04	U 238.03	Np (237)	Pu (244.1)	Am (243.1)	Cm (247.1)	Bk (247.1)	Cf (261.1)	Es (262.1)	Fm (267.1)	Md (268.1)	No (289.1)	Lr (260.1)

- Todos son metales
- Magnesio se parece a Zn
- Berilio, cabeza de grupo, es muy diferente, se parece al Aluminio. Por ejemplo, su óxido BeO es claramente covalente.
- Los demás, Ca, Sr, Ba y Ra son más similares entre sí.
- Su reactividad aumenta con el número atómico, aunque son menos reactivos que los alcalinos.
- Todos forman nitruros mientras que sólo el litio lo hace en los alcalinos



Relaciones diagonales

Electronegatividad

C = 2.55	N = 3.04	O = 3.44	F = 3.98
Si = 1.90	P = 2.19	S = 2.58	Cl = 3.16

Potencial iónico ($\phi = Z/r$)

Li = 1.11	Be = 3.39	B = 7.32	C = 13.32
Na = 0.86	Mg = 2.32	Al = 4.41	Si = 7.41



Enlaces π

Energías de enlace (kJ mol^{-1})

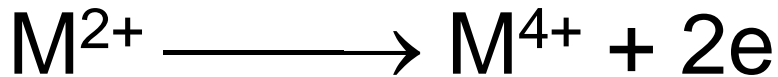
C=C	272				
C=Si	159		Si=Si	105	
C=Ge	130		Si=Ge	105	Ge=Ge 105
C=Sn	79				

Los dobles enlaces más estables son los que se forman entre carbonos.



Preferencias en las valencias

- Grupo 14



Viewing: Atomic weight

1	H 1.0079																	He 4.0026
2	Li 6.941	Be 9.0122											B 10.811	C 12.011	N 14.007	O 15.999	F 18.998	Ne 20.18
3	Na 22.99	Mg 24.305											Al 26.982	Si 28.086	P 30.974	S 32.065	Cl 35.453	Ar 39.948
4	K 39.098	Ca 40.078	Sc 44.956	Ti 47.88	V 50.941	Cr 51.996	Mn 54.938	Fe 55.847	Co 58.933	Ni 58.693	Cu 63.546	Zn 65.39	Ga 69.723	Ge 72.61	As 74.922	Se 78.96	Br 79.904	Kr 83.8
5	Rb 85.468	Sr 87.62	Y 88.906	Zr 91.224	Nb 92.906	Mo 95.94	Tc (97.91)	Ru 101.07	Rh 102.91	Pd 106.42	Ag 107.87	Cd 112.41	In 114.82	Sn 118.71	Sb 121.76	Te (127.6)	I 126.9	Xe 131.29
6	Cs 132.91	Ba 137.33	La 138.91	Hf 178.49	Ta 180.95	W 183.84	Re 186.21	Os 190.23	Ir 192.22	Pt 195.08	Au 196.97	Hg 200.59	Tl 204.38	Pb 207.2	Bi 208.98	Po (209)	At (210)	Rn (222)
7	Fr (223)	Ra (226)	Ac (227)	Rf (261.1)	Db (262.1)	Sg (263.1)	Bh (265.1)	Hs (266.1)	Mt (268)	Uun (272)	Uuu (273)	Uub (277)						

Lanthanide Series	Ce 140.12	Pr 140.91	Nd 144.24	Pm (144.9)	Sm 150.36	Eu 151.97	Gd 157.25	Tb 158.93	Dy 162.5	Ho 164.93	Er 167.26	Tm 168.93	Yb 173.04	Lu 174.97
Actinide Series	Th 232.04	Pa 231.04	U 238.03	Np (237)	Pu (244.1)	Am (243.1)	Cm (247.1)	Bk (247.1)	Cf (251.1)	Es (252.1)	Fm (257.1)	Md (258.1)	No (259.1)	Lr (262.1)

Conforme se descende en el grupo 14 el estado de oxidación preferente es 2, en lugar de 4.

Algo similar ocurre en los grupos 13 y 15.



Tendencias en la valencia

- $\text{GeCl}_2 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{GeCl}_4$
(reacción incontrolablemente rápida)
- $\text{SnCl}_2 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{SnCl}_4$
(reacción lenta)
- $\text{PbCl}_2 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{PbCl}_4$
(ocurre bajo condiciones drásticas)



Tendencias en la valencia

<u>Hidruro</u>	<u>Temperatura de descomposición (°C)</u>
CH_4	800
SiH_4	450
GeH_4	285
SnH_4	150
PbH_4	0



Estados de oxidación

ox/red	E_0	ox/red	E_0	ox/red	E_0
• C^{4+}/C^{2+}	-0.106	C^{2+}/C	0.517		
• Si^{4+}/Si^{2+}	-0.967	Si^{2+}/Si	-0.808		
• Ge^{4+}/Ge^{2+}	0.00	Ge^{2+}/Ge	0.247	Ge^{4+}/Ge	0.124
• Sn^{4+}/Sn^{2+}	0.15	Sn^{2+}/Sn	-0.141		
• Pb^{4+}/Pb^{2+}	1.69	Pb^{2+}/Pb	-0.1251		

La tendencia a oxidarse cambia gradualmente hacia abajo en los grupos

Viewing: Atomic weight

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H 1.00794	He 4.00260											B 10.811	C 12.011	N 14.007	O 15.999	F 18.998	Ne 20.18
Li 6.941	Be 9.0122											Al 26.982	Si 28.086	P 30.974	S 32.065	Cl 35.453	Ar 39.948
Na 22.990	Mg 24.305																
K 39.098	Ca 40.078	Sc 44.956	Ti 47.88	V 50.942	Cr 51.996	Mn 54.938	Fe 55.847	Co 58.933	Ni 58.693	Cu 63.546	Zn 65.39	Ga 69.723	Ge 72.61	As 74.922	Se 78.96	Br 79.904	Kr 83.8
Rb 85.468	Sr 87.62	Y 88.906	Zr 91.224	Nb 92.906	Mo 95.94	Tc 97.91	Ru 101.07	Rh 102.31	Pd 106.42	Ag 107.87	Cd 112.41	In 114.82	Sn 118.71	Sb 121.76	Te 127.6	I 126.9	Xe 131.29
Ce 137.91	Ba 137.33	La	Hf 178.49	Ta 180.95	W 183.84	Re 186.21	Os 190.23	Ir 192.22	Pt 195.08	Au 196.97	Hg 200.59	Tl 204.38	Pb 207.2	Bi 208.98	Po (209)	At (210)	Rn (222)
Fr 223	Ra 226	Ac	Rf (261.1)	Db (262.1)	Sg (263.1)	Bh (264.1)	Hs (265.1)	Mt (266.1)	Uun (269)	Uuu (272)	Uub (277)						

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



Efecto del par inerte

Energía de ionización I_n	C	Si	Ge	Sn	Pb
$I_1: M(g) \longrightarrow M^+(g) + e^-$	1086	786	760	707	715
$I_2: M^+(g) \longrightarrow M^{2+}(g) + e^-$	2354	1573	1534	1409	1447
$I_3: M^{2+}(g) \longrightarrow M^{3+}(g) + e^-$	4621	3232	3300	2943	3087
$I_4: M^{3+}(g) \longrightarrow M^{4+}(g) + e^-$	6223	4351	4409	3821	4081
$I_3 + I_4$	10844	7583	7709	6764	7168

Como puede verse de la suma de las terceras (I_3) y cuartas (I_4) energías de ionización del plomo, éste cede sus electrones 6s aún con más facilidad que el germanio, el silicio o el carbono.

No obstante, estos elementos no manifiestan el efecto de par inerte mientras que el el plomo sí lo hace.



Efectos relativistas

- Provocan contracciones del *core* y, por ende, alteran las distancias de enlace.

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (v^2 / c^2)}}$$

m_0 = masa en reposo
 v = velocidad
 c = velocidad de la luz

La velocidad v de un electrón 1s en un átomo con carga nuclear $+Ze$ está dada por:

$$v_{1s} = Z \mathbf{a} c$$

$\mathbf{a} = 0.0073$ (cte. de estructura fina, adimensional)

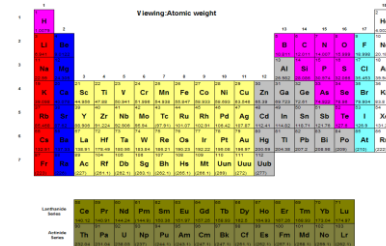
Por ejemplo: para un átomo como $_{82}\text{Pb}$: $v_{1s} = 0.0073 (82) c = \mathbf{0.5986 c}$

$$a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi Z e^2 m}$$

a_0 = radio atómico
 m = masa
 ϵ_0 = permitividad en el vacío
 h = cte. de Planck



...Efectos relativistas



- La contracción del enlace es particularmente significativa en los enlaces de átomos pesados como Au y Pt donde llega a ser del orden de 0.2 Å (20pm).
- Aún en compuestos de Cu llega a ser de 0.02-0.03 Å, es decir, superior a la incertidumbre de las distancias experimentales.
- Por ejemplo, la distancia de enlace M-H en AuH es menor que en AgH (1.52 vs 1.62 Å). Se ha propuesto que otras importantes propiedades de los elementos pesados como la conductividad eléctrica, el estado líquido del mercurio y el *efecto del par inerte* encuentran una componente importante en los efectos relativistas.



...más consecuencias

- La expansión relativista de los orbitales $5d$ contribuye a explicar porqué tungsteno forma hexacloruros covalentes más estables que los del cromo.
- La expansión de los $6d$ también apoya el hecho de que uranio forme UF_6 y UCl_6 mientras que neodimio ni siquiera presenta ese estado de oxidación.
- La contracción de los $6s$ explica la elevada electronegatividad de Au y Hg.
- El acoplamiento espín-órbita ($J = l \pm 1/2$) tiene una componente relativista que afecta importantemente el orden de llenado de orbitales en átomos pesados así como sus propiedades de enlace.



Los metales nobles

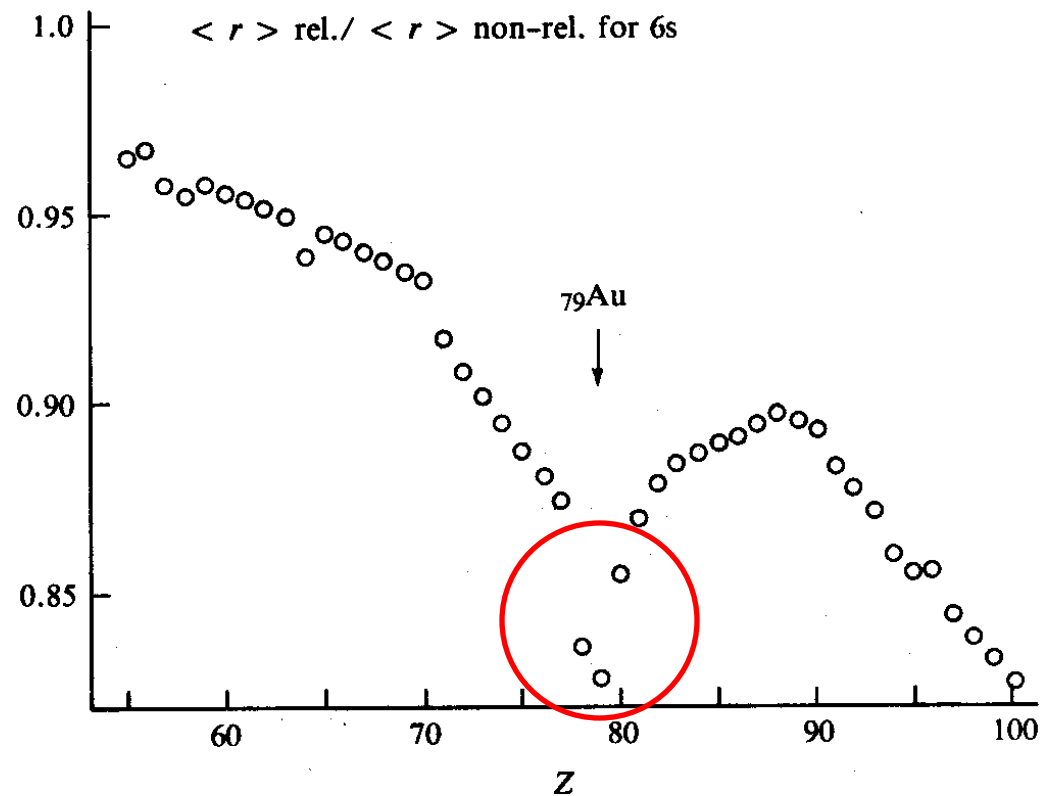


Figure 11.8 The relativistic contraction of the 6s orbital in the elements Cs ($Z = 55$) to Fm ($Z = 100$). Reprinted with permission from P. Pyykko and J.-P. Desclaux, *Accounts Chem. Res.*, 12, 276 (1979). Copyright © 1979 American Chemical Society.



Los metales nobles

- ${}_{78}\text{Pt}$: $[\text{Xe}]4f^{14} 5d^9 6s^1$
- ${}_{79}\text{Au}$: $[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^1$
- ${}_{80}\text{Hg}$: $[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2$

Estos elementos presentan contracción relativista de los $6s$ y, por lo tanto, separación de los $6p$ vacíos. Además los $5d$ presentan expansión relativista.

Hg con esta capa de valencia casi inexistente, parece comportarse como un gas noble o, mejor dicho, como un líquido noble. (Ver sus ΔH_{at} , I_0 y presión de vapor)



Los elementos del futuro

- Según los modelos actuales de estructura nuclear es posible que existan “islas de estabilidad” para núcleos con Z alrededor del 118.

IUPAC Periodic Table of the Elements

1 H hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																	2 He helium 4.0026
3 Li lithium 6.94 [6.938, 6.997]	4 Be beryllium 9.0122											5 B boron 10.81 [10.806, 10.821]	6 C carbon 12.01 [12.009, 12.012]	7 N nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]	8 O oxygen 15.999 [15.999, 16.000]	9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180
11 Na sodium 22.990	12 Mg magnesium 24.305 [24.304, 24.307]											13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.085 [28.084, 28.086]	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 Ar argon 39.948
19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.95	43 Tc technetium 101.07(2)	44 Ru ruthenium 102.91	45 Rh rhodium 106.42	46 Pd palladium 107.87	47 Ag silver 112.41	48 Cd cadmium 112.41	49 In indium 114.82	50 Sn tin 118.71	51 Sb antimony 121.76	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.90	54 Xe xenon 131.29
55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.97	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium 204.38 [204.38, 204.39]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.98	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganeson

Key:
atomic number
Symbol
name
conventional atomic weight
standard atomic weight



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

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



Tiempos de decaimiento

Table 12.1 Principal Isotopes of Transuranium Elements

Isotope	Half-life	Quantities Available
^{237}Np	2,200,000 years	many kilograms
^{239}Pu	24,360 years	many kilograms
^{244}Pu	82,800,000 years	> 1 milligram
^{243}Am	7,650 years	> 100 grams
^{244}Cm	18.12 years	> 100 grams
^{247}Cm	16,000,000 years	traces
^{247}Bk	1,400 years	traces
^{249}Bk	314 days	> 1 milligram
^{251}Cf	800 years	traces
^{252}Cf	2.57 years	> 1 milligram
^{254}Es	276 days	> 1 milligram
^{257}Fm	94 days	> 0.001 milligram
^{258}Md	53 days	traces
^{255}No	3 minutes	traces
^{256}Lr	45 seconds	
^{261}Rf	70 seconds	

SOURCES: Data from F. A. Cotton and G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry: A Comprehensive Text*, 4th ed., Wiley-Interscience, New York, 1980; and the *Handbook of Chemistry and Physics*, 50th ed., Chemical Rubber Co., Cleveland, 1969, pp. B-267 to B-561.



Estabilidad de los núcleos

- **Decaimiento α** : emisión de un ${}^4\text{He}$. Z decrece.
- **Decaimiento β^-** : emisión de un electrón (a veces junto con un fotón γ), resulta de la conversión de un neutrón en un protón. Z crece.
- **Decaimiento β^+** : emisión de un positrón (e^+), también provoca la conversión de un protón en un neutrón. Z decrece.
- **EC**: captura de un electrón ($1s$), provoca la conversión de un protón en un neutrón. Z decrece.



Elementos súperpesados

Números mágicos: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 114p, 126n y 164p, 184n y 196n. (“**islas de estabilidad**”)

Los núcleos que tienen este número de protones o neutrones son más estables que los demás.

Resulta decepcionante que el elemento ^{298}Fl con 114 protones y 184 neutrones no sea estable. El flerovio tiene una vida media de sólo 3 segundos.

Z	Desc.	lab.	Símbolo/Nombre	Reacción	t _{1/2} (s) (aprox.)
109	ago-1982	Darmstadt Alemania	Mt meitnerio	$^{58}\text{Fe} + ^{209}\text{Bi}$ $\rightarrow ^{268}\text{Mt}$	3.7 ms
110	nov-94 ago-2003	Darmstadt Alemania	Ds darmstadtio	$^{62}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$ $\rightarrow ^{269}\text{Ds}$	100 años (teo.) 17 μs
111	dic-1994 2003	Darmstadt Alemania	Rg roentgenio	$^{64}\text{Ni} + ^{209}\text{Bi}$ $\rightarrow ^{272}\text{Uuu}$	3.6 seg
112	1996 ago-2009	Darmstadt Alemania	Cn copernicio	$^{6?}\text{Zn} + ^{208}\text{Pb}$ $\rightarrow ^{227}\text{Cn}$	0.6 ms, 29 s
113		California EEUU	Nh nihonio		
114	1999 jun-2011	Dubna Rusia	Fl flerovio	$^{48}\text{Ca} + ^{244}\text{Pu}$ $\rightarrow ^{289}\text{Fl}$	3 s
115	feb-2004	Dubna Rusia	Mc moscovio	$^{48}\text{Ca} + ^{243}\text{Am}$ $\rightarrow ^{288}\text{Uup}$	100 ms
116	jun-2011	Dubna Rusia	Lv livermorio	$^{48}\text{Ca} + ^{248}\text{Cm}$ $\rightarrow ^{292}\text{Lv}$	47 ms
117	2010 may-2014	Rusia Darmstadt	Ts tenesino	$^{48}\text{Ca} + ^{249}\text{Bk}$ $\rightarrow ^{294}\text{Uus}$	¡ 80 ms !
118	¿ jun-1999 ?	California EEUU	Og oganeson		?



Los elementos del futuro

Group

Period	I		II												III	IV	V	VI	VII	VIII
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
1	1 H																		2 He	
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4	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		
5	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		
6	55 Cs	56 Ba	*	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	87 Fr	88 Ra	**	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		
8	119 Uum																			
			* Lanthanides	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		
			** Actinides	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		





La tabla periódica del futuro

Número atómico

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)

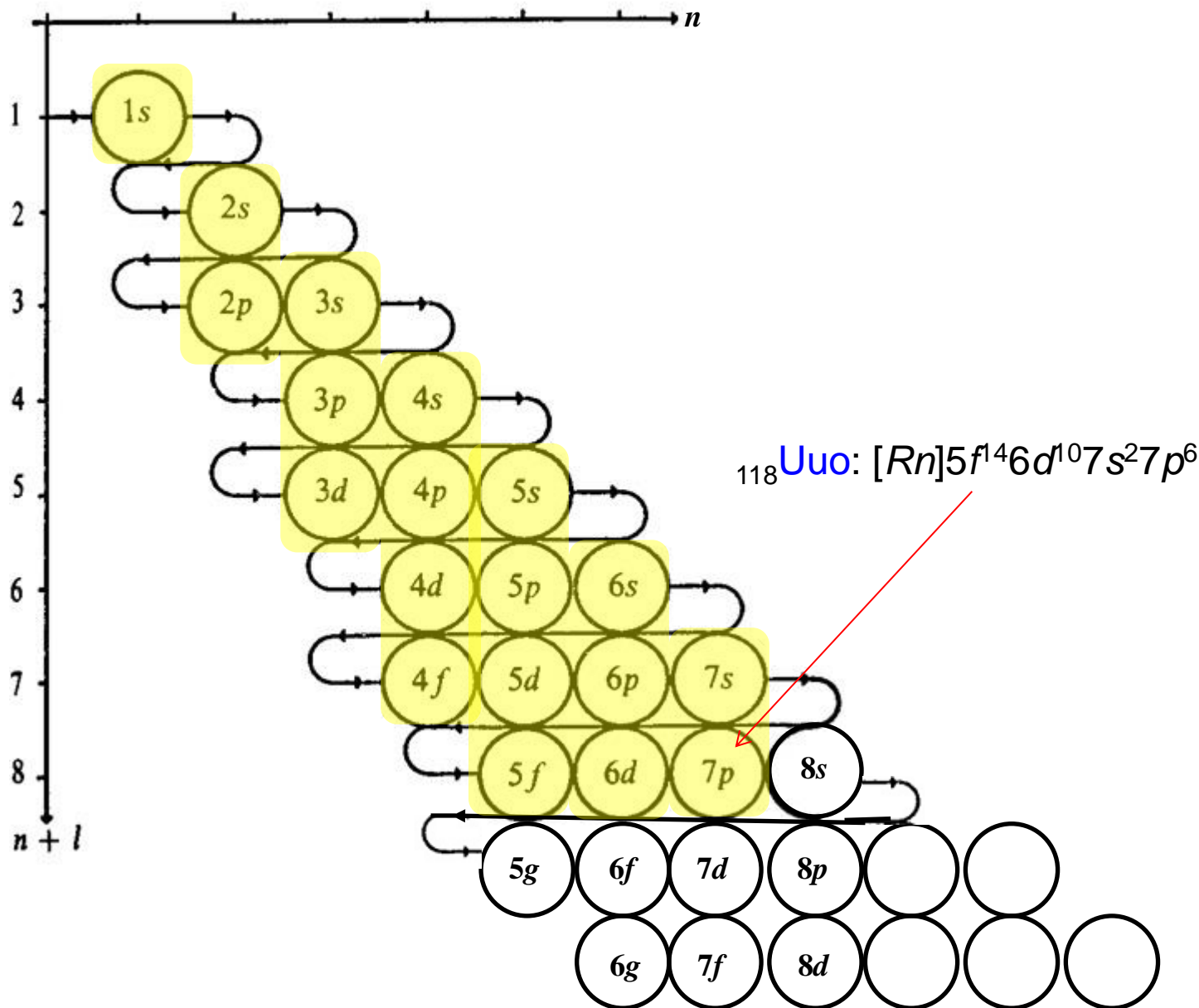
58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

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)
-------	-------	-------	-------	-------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	-------



Los elementos del futuro





¿Cómo serán los elementos transactínidos o transférmicos?

- Es muy probable que manifiesten efectos relativistas aún mayores que los del 6^o periodo.
- La mayor estabilidad de los electrones $7s^2$ en el ${}_{112}\text{Cp}$ lo convertirán en el siguiente líquido noble.
- Posiblemente el ${}_{114}\text{Fv}$ con una configuración $7s^2 7p_{1/2}^2$ sea también un líquido.
- En el 8^o periodo aparecerá el bloque g con 18 elementos.
- Los orbitales $5g$ no alcanzarán a los $8s$ y, por lo tanto, tendrán constantes de apantallamiento de 1, lo que provocará que esos elementos tengan igual tamaño, electronegatividad y una química común.
- Sin considerar los efectos relativistas se predice el orden de llenado siguiente: $8s < 5g < 6f < 7d < 8p$.
- Si los efectos relativistas (SO) se toman en cuenta, puede ocurrir que el orbital $8p_{1/2}$ se llene justo después del $8s$.
- Así, el elemento ${}_{119}\text{Uum}$ quedaría debajo del francio pero con una valencia de +4 debido a la facilidad de la ionización de sus $7p_{3/2}$.



¿En dónde está la ciencia?



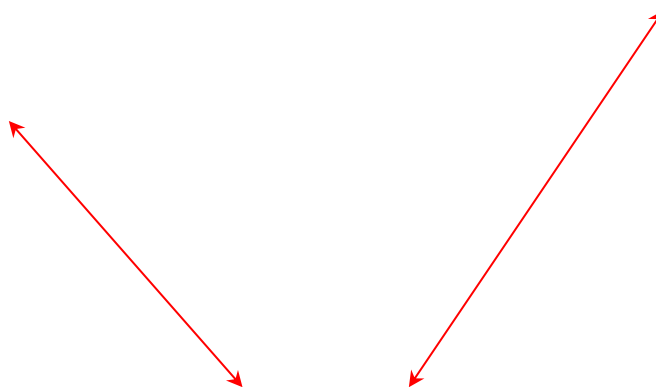


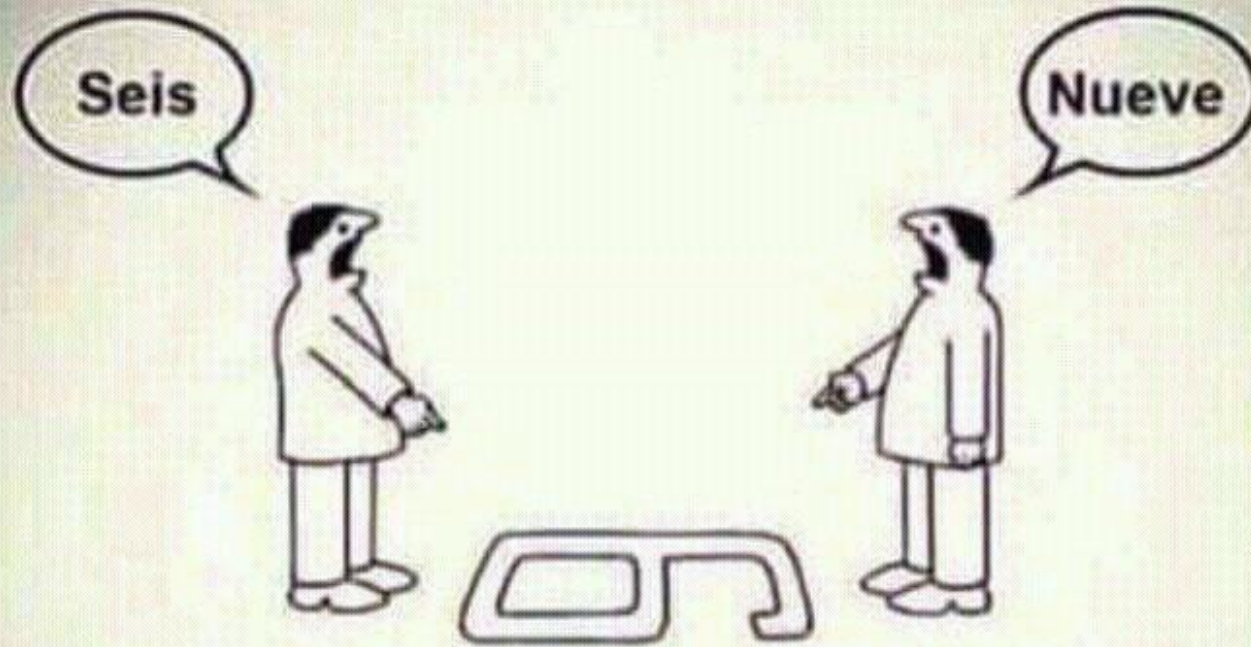
por ejemplo:

Modelos para explicar las propiedades
de los compuestos covalentes
(las teorías)

Compuestos covalentes
(la realidad)

Conceptos asociados a los
modelos de los compuestos
covalentes:
el enlace covalente
(el lenguaje)





El hecho de que tengas razón,
no quiere decir que estoy equivocado.
Simplemente no has visto la vida
desde mi lado.



Apéndice

Ver la primera tarea en AMyD:

<http://amyd.quimica.unam.mx>

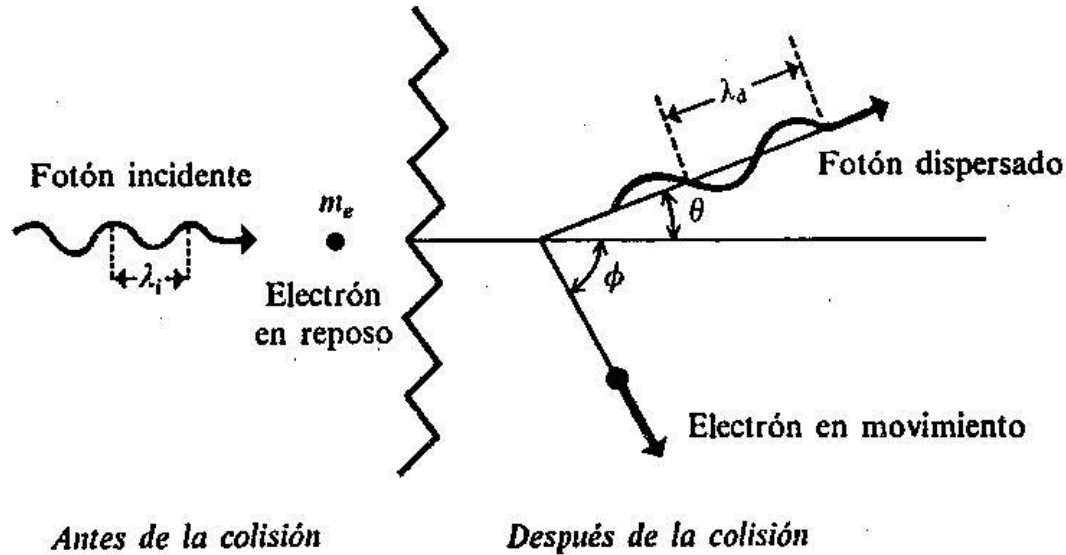


Algunos temas

- Ondas
- Radiación de cuerpo negro
- Efecto fotoeléctrico
- Efecto Compton
- Cuantización del momento angular
- Evidencia de niveles de energía discretos
- Naturaleza ondulatoria de las partículas
- Difracción de electrones
- Experimento de la doble rendija en electrones



Efecto Compton y los fotones



Tomando en cuenta las ideas corpusculares de Einstein:

$$E_f = h \frac{c}{\lambda} \qquad p_f = \frac{h}{\lambda}$$

puede calcularse la diferencia de longitudes de onda como un problema de colisiones entre partículas.

$$\lambda_d - \lambda_i = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$



Funciones ortonormalizadas

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

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

$$\int \Psi_m \Psi_n \, d\tau = 0 \quad (m \neq n)$$

$$\int \Psi_m \Psi_n \, d\tau = \delta_{m,n} \quad (\delta = \textit{delta de Kronecker})$$



Espín orbitales

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{vmatrix} \chi_1(1) & \chi_2(1) & \chi_3(1) \\ \chi_1(2) & \chi_2(2) & \chi_3(2) \\ \chi_1(3) & \chi_2(3) & \chi_3(3) \end{vmatrix}$$

3 electrones

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

N electrones

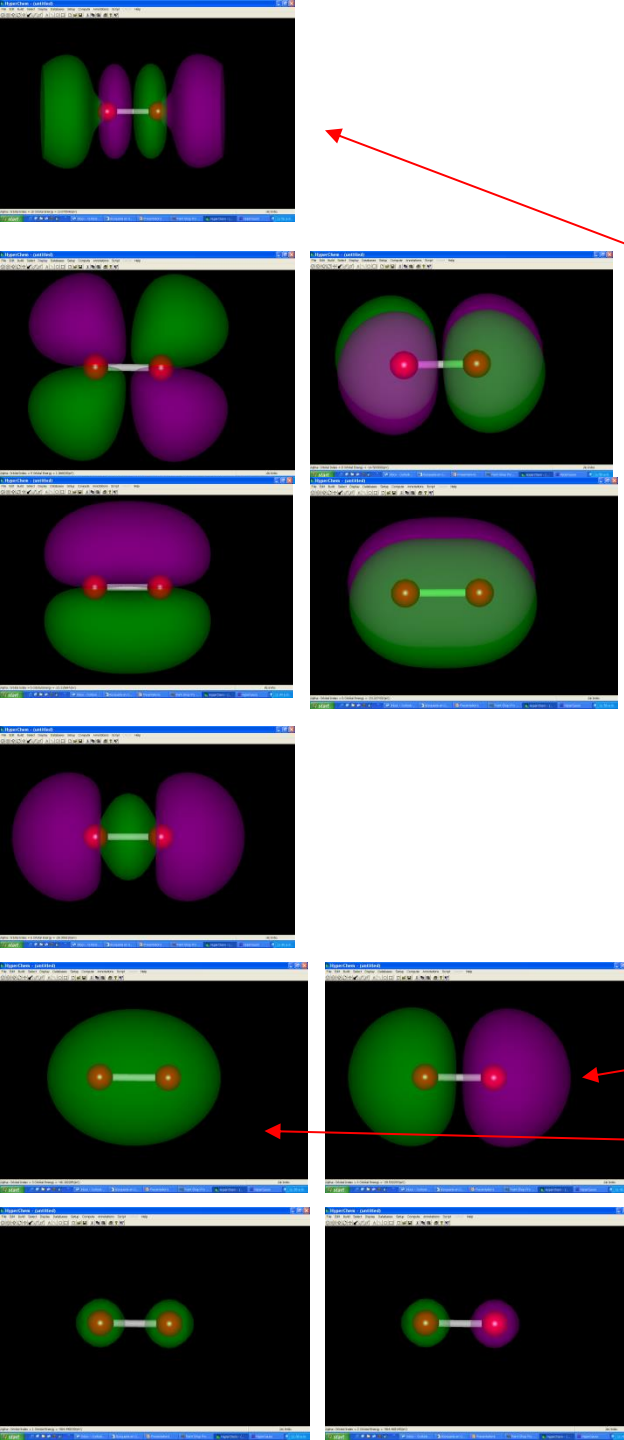
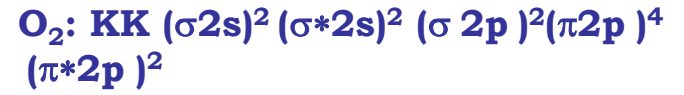


La evidencia experimental y el modelo



Oxígeno líquido entre los polos de un potente magneto

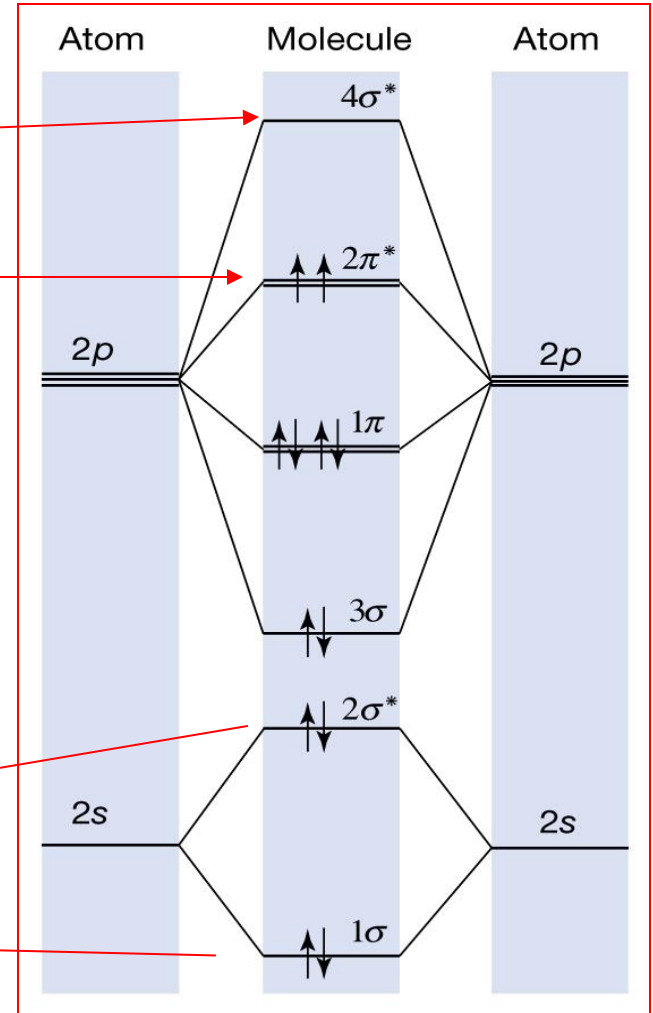
Nomenclatura de OM de los átomos separados.



LUMO

HOMO

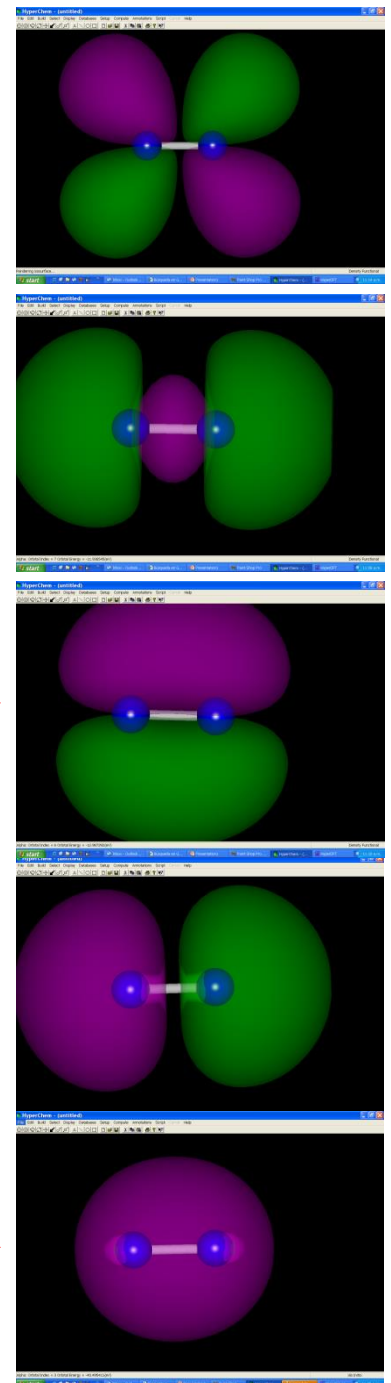
Diagrama de energía de los OM



Nomenclatura



Nomenclatura de OM de los átomos separados.



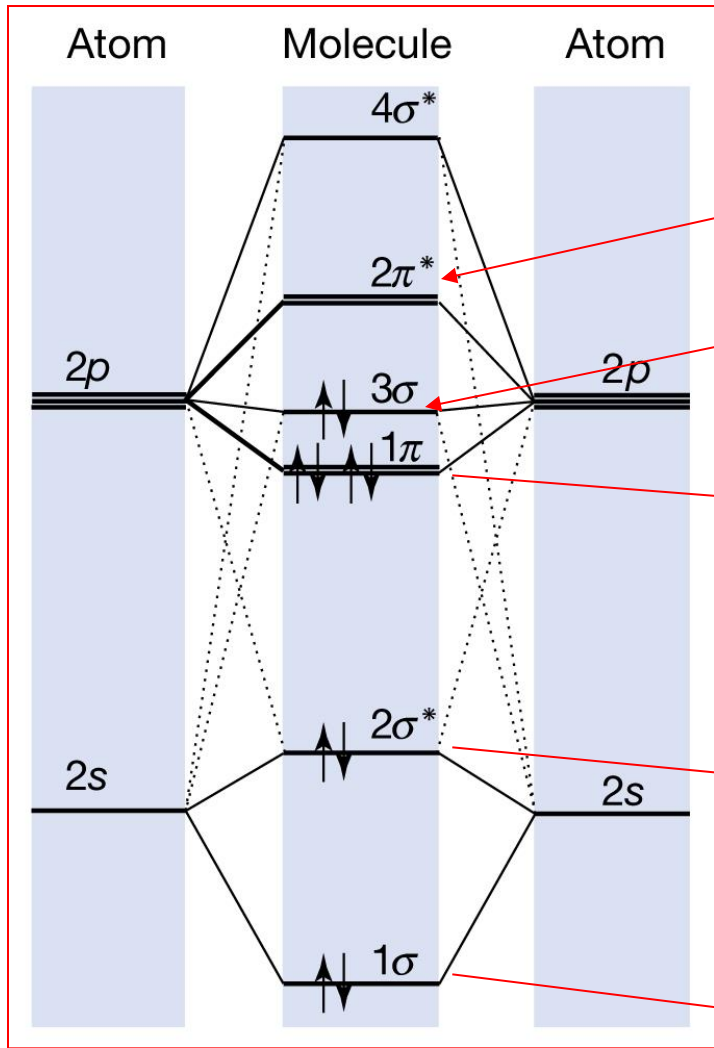
LUMO

HOMO

Diagrama de energía de los OM

Nomenclatura

N_2 : [KK] $(\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2 (\pi 2p)^4 (\sigma 2p)^2$



N_2 : [KK] $(1\sigma)^2 (2\sigma^*)^2 (1\pi)^4 (3\sigma)^2$



Orbitales moleculares

