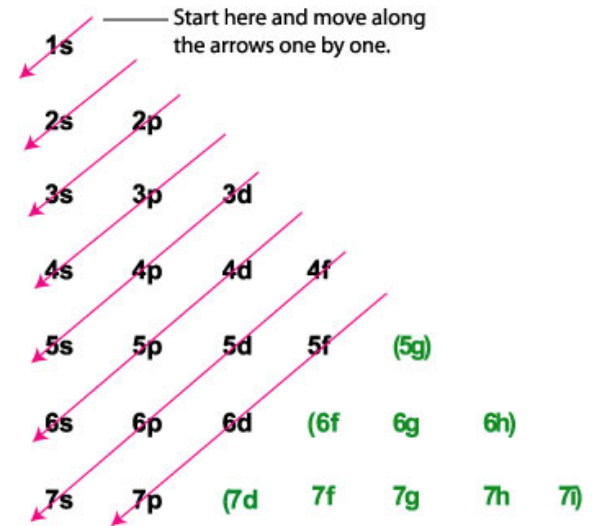


Configuraciones electrónicas y Propiedades periódicas

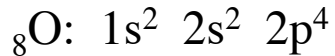
Configuraciones electrónicas

$H\Psi = E\Psi$ → Configuración electrónica del estado basal (E_0) →

- Principio de exclusión de Pauli
 - Regla de Hund (máxima multiplicidad)
- $$M_s = 2S + 1$$



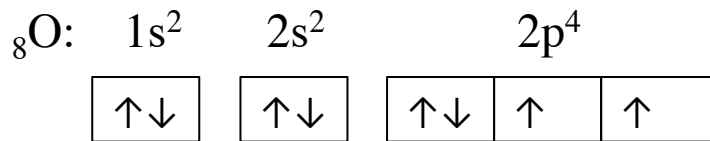
- Configuración electrónica completa



- Configuración electrónica compacta (Kernel)



- Configuración electrónica desarrollada



Diamagnético: No tiene electrones desapareados

$$M_s = 1$$

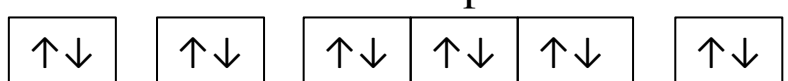
Paramagnético: Tiene electrones desapareados

$$M_s > 1$$

Ejemplos (Mg, V, Se):

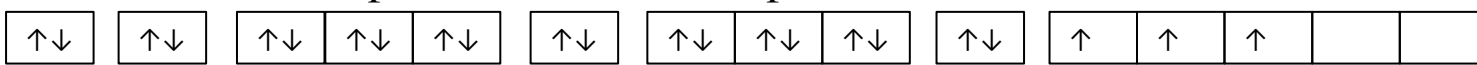
Completa ${}_{12}\text{Mg} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

Kernel ${}_{12}\text{Mg} : [\text{Ne}] 3s^2$

Desarrollada ${}_{12}\text{Mg} : 1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^2$  **Diamagnético**

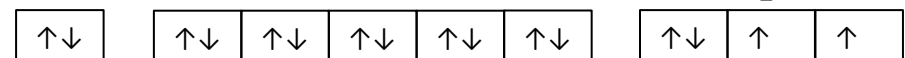
Completa ${}_{23}\text{V} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$

Kernel ${}_{23}\text{V} : [\text{Ar}] 4s^2 3d^3$

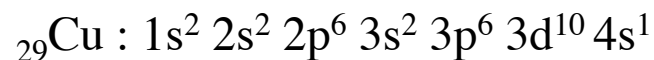
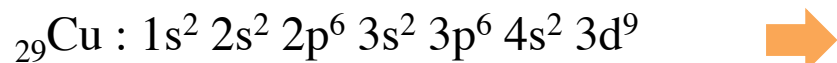
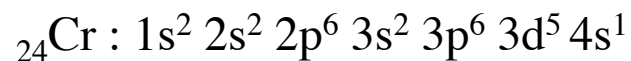
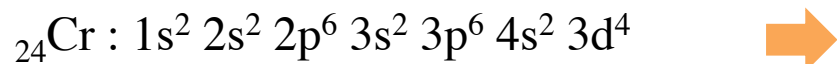
Desarrollada ${}_{23}\text{V} : 1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^2 \quad 3p^6 \quad 4s^2 \quad 3d^3$  **Paramagnético**

Completa ${}_{34}\text{Se} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^4$

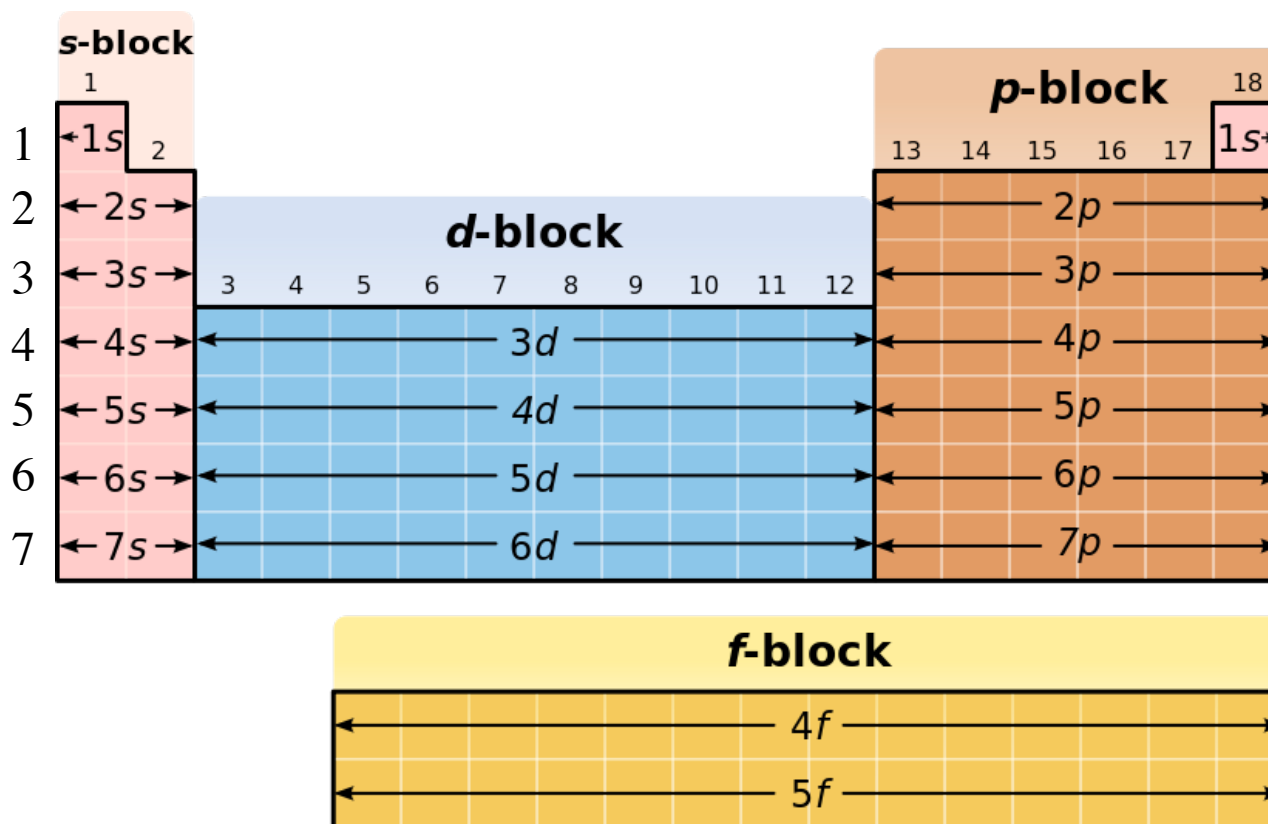
Kernel ${}_{34}\text{Se} : [\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^4$

Desarrollada ${}_{34}\text{Se} : [\text{Ar}] \quad 4s^2 \quad 3d^{10} \quad 4p^4$  **Paramagnético**

Excepciones (configuraciones semillena y llena):



En la tabla periódica:



Carga nuclear efectiva (Z^*)

La energía del átomo de hidrógeno:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{kZ^2 e^2}{n^2 a_0}$$

Z = carga nuclear = número atómico

n = nivel de energía

Z aumenta más rápido que n :

	H	He	Li	Be	...
	$1s^1$	$1s^2$	$1s^2 2s^1$	$1s^2 2s^2$...
Z	1	2	3	4	...
n	1	1	2	2	...
¿La energía para quitar un electrón crece continuamente?	1312 kJ/mol		520 kJ/mol		
	E. I.				

- 1) La distancia promedio para un electrón $2s$ es mayor que un $1s$
- 2) El electrón $2s^1$ siente repulsión de los electrones más internos $1s^2$: “Efecto pantalla”

Efecto pantalla



Efecto de protección del núcleo mediante los electrones internos (kernel o core). Los electrones externos (de valencia) solo sienten parte de la carga total del núcleo (Carga nuclear efectiva, Z^*).

$$Z^* = Z - \sigma$$

σ = constante de apantallamiento

De la parte radial:

s > p > d > f

más
penetrantes



Generan mayor
efecto pantalla

Sienten menor
efecto pantalla

Mayor Z^*

menos
penetrantes



Generan menor
efecto pantalla

Sienten mayor
efecto pantalla

Menor Z^*

Reglas de Slater: Reglas empíricas para calcular la magnitud del efecto pantalla (σ).

1) Escribir la configuración electrónica en el siguiente orden y agrupamiento:

(1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p) ...

Para electrones en orbitales en ns o np :

2) Los e^- a la derecha de un grupo (ns , np) no contribuyen

3) Cada e^- del mismo grupo (ns , np) contribuye 0.35

4) Cada e^- en grupos $n-1$ contribuye 0.85

5) Cada e^- en grupos $n-2$ contribuye 1.0

Para electrones en orbitales en nd o nf :

6) Los e^- a la derecha de un grupo (nd) o (nf) no contribuyen

7) Cada e^- del mismo grupo (nd) o (nf) contribuye 0.35

8) Cada e^- en grupos a la izquierda contribuye 1.0

Ejemplos:

Calcula la carga nuclear efectiva de los electrones de valencia de los siguientes átomos:

	C. E.	C. Slater	σ	$Z^* = Z - \sigma$
${}_1\text{H}$	$1s^1$	$(1s)^1$	$\sigma = 0$	$Z^* = 1$
${}_2\text{He}$	$1s^2$	$(1s)^2$	$\sigma = 0.35$	$Z^* = 2 - 0.35 = 1.65$
${}_3\text{Li}$	$1s^2 2s^1$	$(1s)^2 (2s, 2p)^1$	$\sigma = 2(0.85) = 1.70$	$Z^* = 3 - 1.70 = 1.3$
${}_7\text{N}$	$1s^2 2s^2 2p^3$	$(1s)^2 (2s, 2p)^5$	$\sigma = 4(0.35) + 2(0.85)$ $\sigma = 3.1$	$Z^* = 7 - 3.1 = 3.9$
${}_{30}\text{Zn}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$	$(1s)^2 (2s, 2p)^8 (3s, 3p)^8 (3d)^{10} (4s, 4p)^2$	$\sigma = 1(0.35) + 18(0.85) + 10(1.0)$ $\sigma = 25.65$	$Z^* = 30 - 25.65 = 4.35$
	Para un electrón 3d:		$\sigma = 9(0.35) + 18(1.0)$ $\sigma = 21.15$	$Z^* = 30 - 21.15 = 8.85$

Para calcular la energía de cada orbital de Slater:

$$\epsilon_i = -\frac{1}{2} \frac{kZ^{*2}e^2}{n^{*2}a_0}$$

Z^* = carga nuclear efectiva

n^* = número cuántico efectivo

n	n^*
1	1
2	2
3	3
4	3.6
5	4.0
6	4.2

	H	Li		
	$1s^1$	$1s^2 2s^1$		
E.I. (exp)	1312 kJ/mol	520 kJ/mol	→	0.5 Ha 0.198 Ha

$$EI_i = -\epsilon_i$$



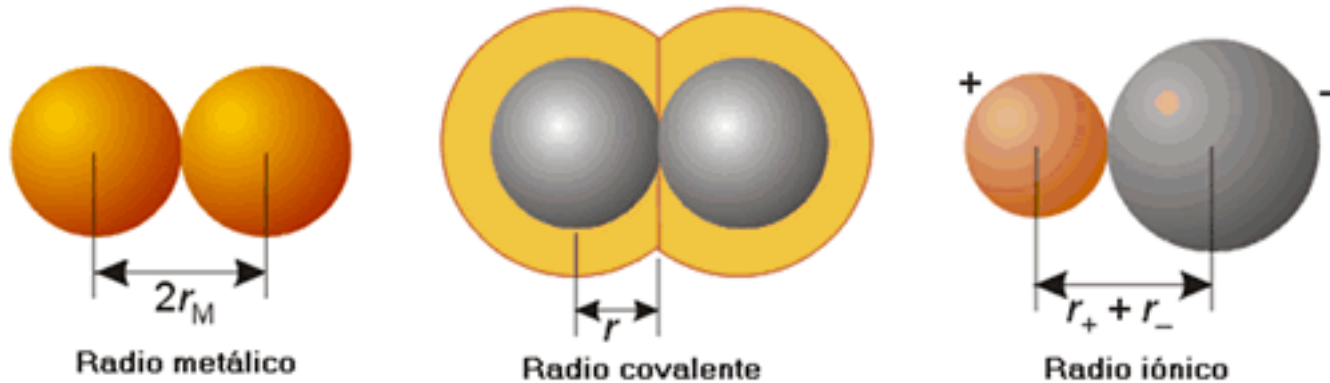
Teorema de Koopmans

H $EI = -\epsilon_{1s} = 0.5 \text{ Ha}$

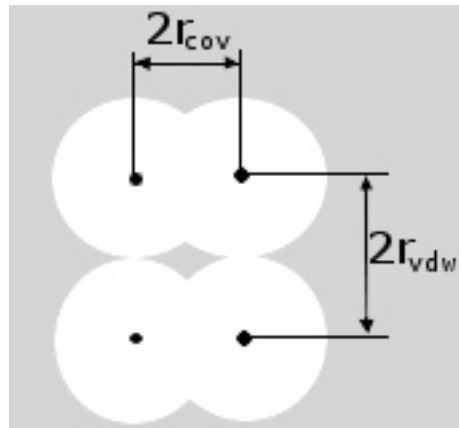
Li $EI_1 = -\epsilon_{2s} = (1.3)^2 / 8 = 0.2112 \text{ Ha}$

Tamaño de los átomos

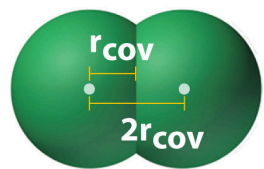
Radio atómico.- Mitad de la distancia entre dos núcleos de dos átomos adyacentes



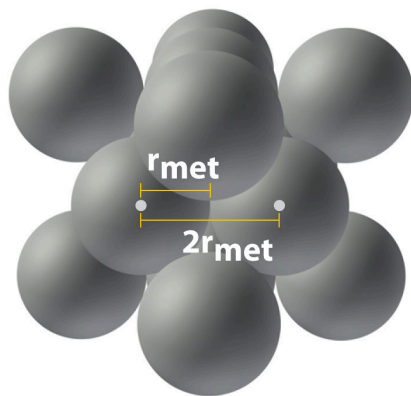
Radio de van der Waals.- Mitad de la distancia entre dos núcleos de dos átomos adyacentes no enlazados



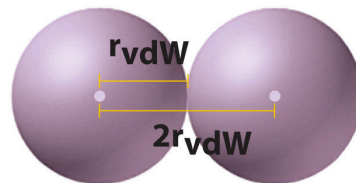
Radio atómico (R)



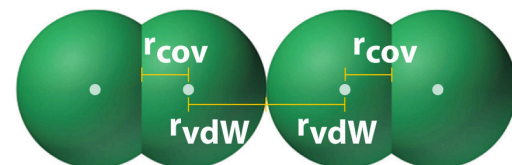
$\text{Cl}_2(\text{g})$



$\text{Al}(\text{s})$



$2\text{Ar}(\text{s})$



$2\text{Cl}_2(\text{s})$

(a) Covalent radius, r_{cov}

(b) Metallic radius, r_{met}

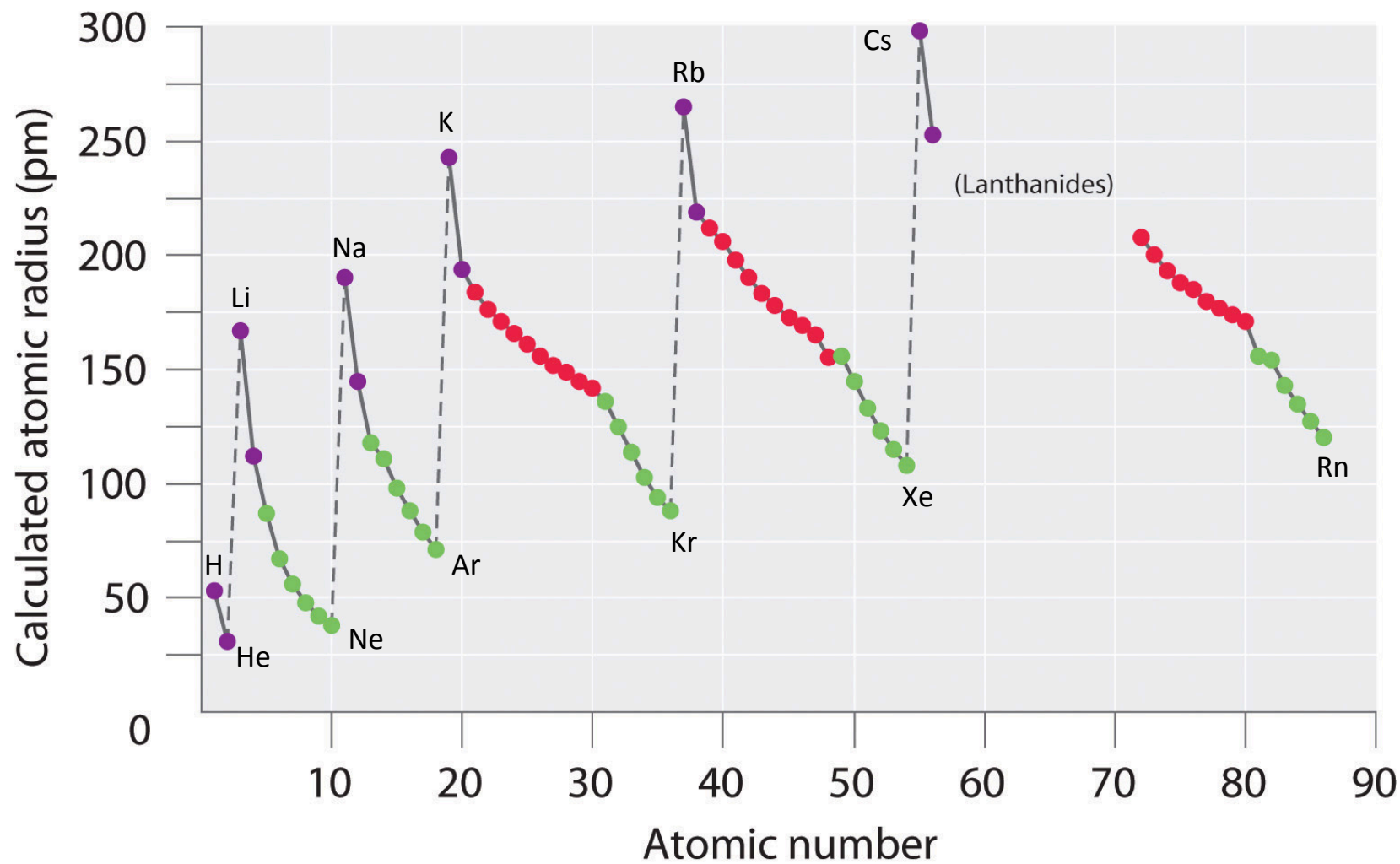
(c) van der Waals radius, r_{vdW}

(d) Covalent vs. vdW radii

Radios atómicos

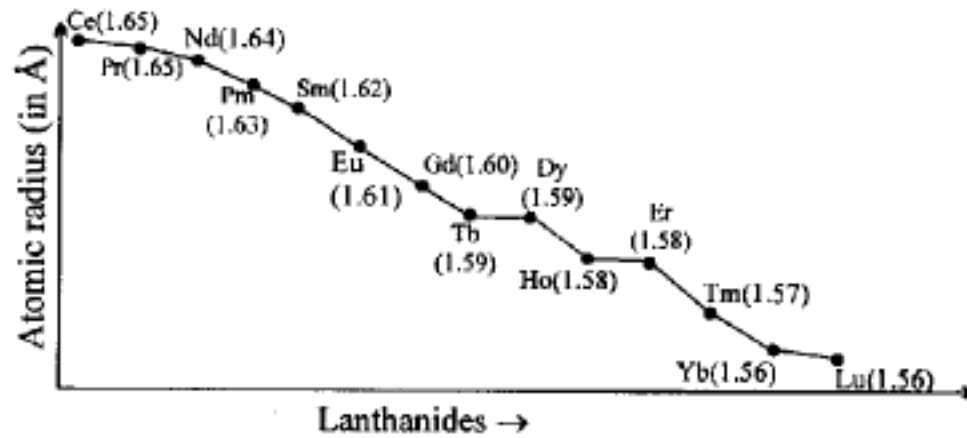


n vs Z^*



Contracción lantánida

ATOMIC RADIUS (LANTHANIDE CONTRACTION)

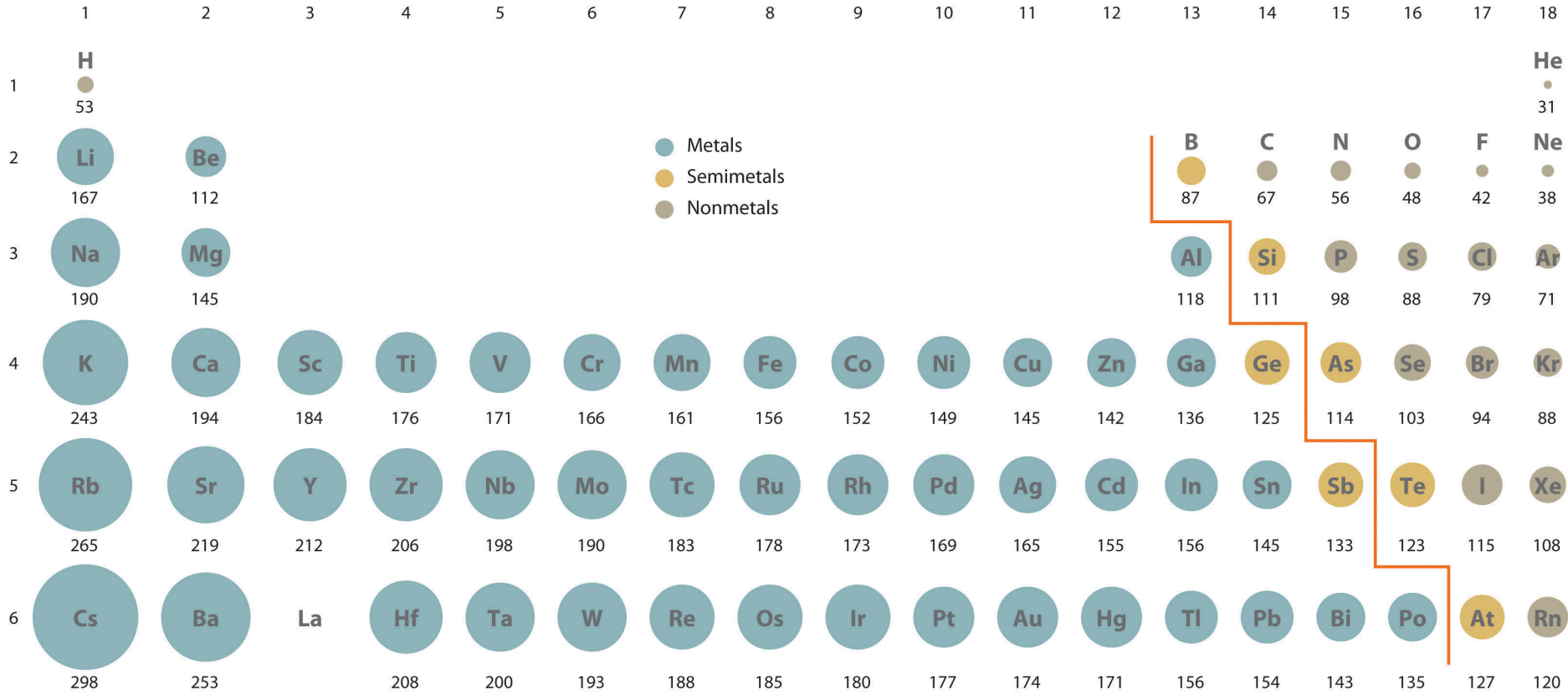


Radios atómicos

n vs Z^*

R aumenta

R aumenta



Ejemplos:

De acuerdo a su posición en la tabla periódica, ordena de mayor a menor radio atómico los siguientes conjuntos de átomos:

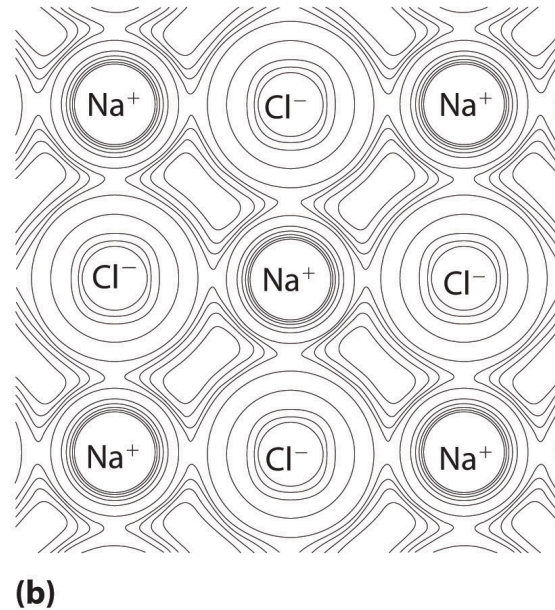
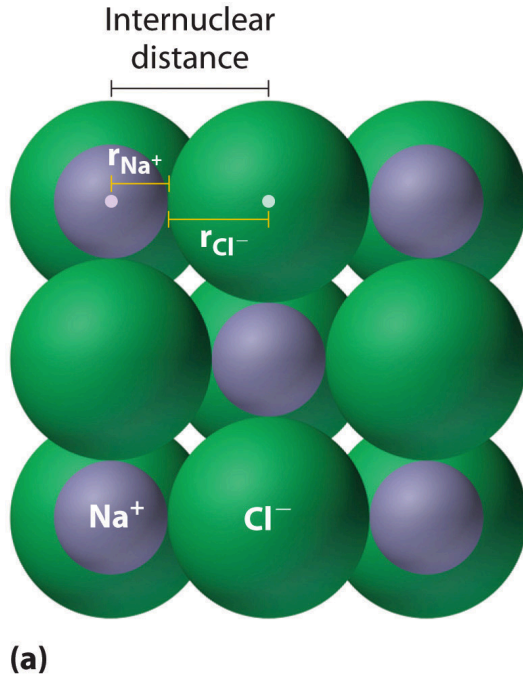
Al, C, Si  Al > Si > C

O, P, K, S  K > P > S > O

Fe, Cs, Al, Ca  Cs > Ca > Fe > Al

Radio iónico (R^\pm)

- Radio que tiene un átomo al perder o ganar electrones.
- La distancia internuclear es igual a la suma de los radios del catión y el anión.

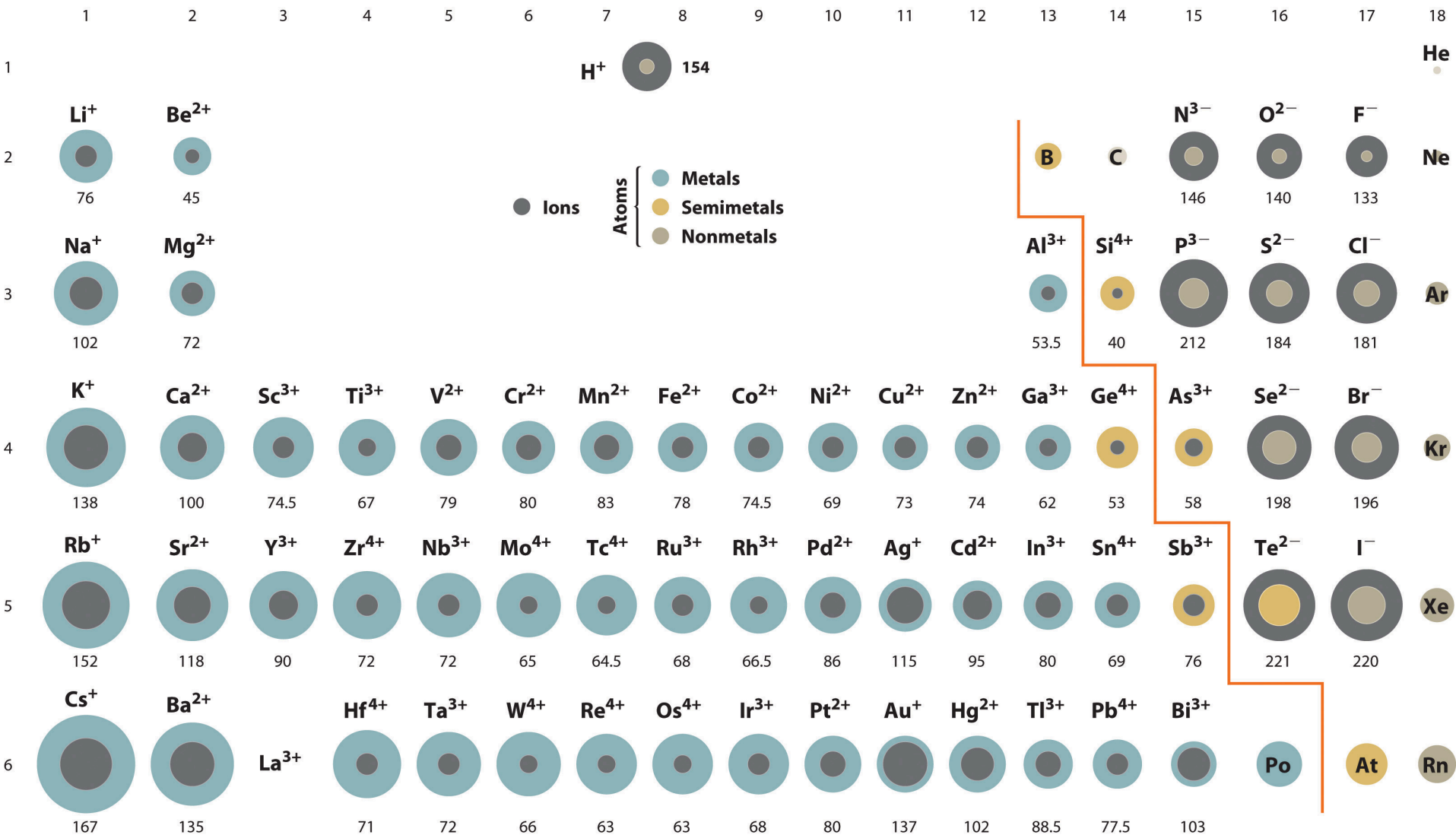


Catión → Disminuye de tamaño respecto al átomo neutro
Anión → Aumenta de tamaño respecto al átomo neutro

Radios iónicos

R^{\pm} aumenta

R^{\pm} aumenta



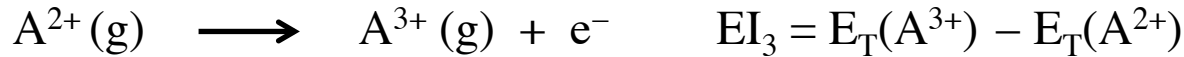
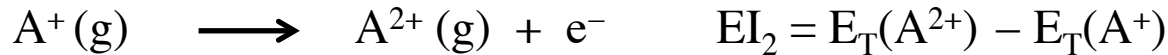
Ejemplos:

De acuerdo a su posición en la tabla periódica, ordena de mayor a menor radio iónico los siguientes conjuntos de iones:

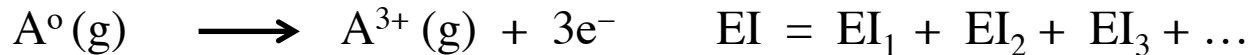


Energía de ionización (EI)

“Energía necesaria para quitar un electrón de un átomo aislado en fase gaseosa”



⋮



Al quitar e^{-} , los restantes son atraídos con más fuerza: $EI_1 < EI_2 < EI_3 \dots$

Teorema de Koopmans



Estima las energías de ionización

$$EI_i = -\varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i = -\frac{1}{2} \frac{kZ^{*2}e^2}{n^{*2}a_0}$$

Cálculo de energías de ionización por el método de Koopmans para ${}_4\text{Be}$:

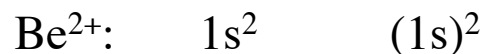
	EI	EI _{exp} (kJ/mol)	EI (Koopmans)
EI ₁	$\text{Be}^0 \rightarrow \text{Be}^+ + e^-$	899.5	1247.9
EI ₂	$\text{Be}^+ \rightarrow \text{Be}^{2+} + e^-$	1757.1	1736.1
EI ₃	$\text{Be}^{2+} \rightarrow \text{Be}^{3+} + e^-$	14 848.7	17 489.1
EI ₄	$\text{Be}^{3+} \rightarrow \text{Be}^{4+} + e^-$	21 006.5	21 004.0



$$\sigma = 1(0.35) + 2(0.85) = 2.05$$

$$Z^* = 4 - 2.05 = 1.95$$

$$EI_1 = -\varepsilon_{2s} = \frac{(1.95)^2}{2(2)^2} = 0.4753 \text{ Ha}$$



$$\sigma = 1(0.35) = 0.35$$

$$Z^* = 4 - 0.35 = 3.65$$

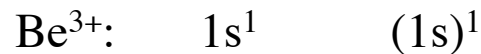
$$EI_3 = -\varepsilon_{1s} = \frac{(3.65)^2}{2(1)^2} = 6.66125 \text{ Ha}$$



$$\sigma = 2(0.85) = 1.70$$

$$Z^* = 4 - 1.70 = 2.3$$

$$EI_2 = -\varepsilon_{2s} = \frac{(2.3)^2}{2(2)^2} = 0.66125 \text{ Ha}$$



$$\sigma = 0.0$$

$$Z^* = 4$$

$$EI_4 = -\varepsilon_{1s} = \frac{(4.0)^2}{2(1)^2} = 8.0 \text{ Ha}$$

También podemos estimar las EI haciendo la diferencia de energías totales, para ${}_4\text{Be}$:

	EI	EI _{exp} (kJ/mol)	EI (diferencia de E)
EI ₁	$\text{Be}^0 \rightarrow \text{Be}^+ + \text{e}^-$	899.5	769.6
EI ₂	$\text{Be}^+ \rightarrow \text{Be}^{2+} + \text{e}^-$	1757.1	
EI ₃	$\text{Be}^{2+} \rightarrow \text{Be}^{3+} + \text{e}^-$	14 848.7	
EI ₄	$\text{Be}^{3+} \rightarrow \text{Be}^{4+} + \text{e}^-$	21 006.5	

$$\text{EI}_1 = E_T(\text{Be}^+) - E_T(\text{Be}^0)$$



$$E_T(\text{Be}^0) = 2\varepsilon_{1s} + 2\varepsilon_{2s}$$

$$E_T(\text{Be}^+) = 2\varepsilon_{1s} + \varepsilon_{2s}$$

$$\sigma_{1s} = 1(0.35) = 0.35$$

$$\sigma_{2s} = 1(0.35) + 2(0.85) = 2.05$$

$$\sigma_{1s} = 1(0.35) = 0.35$$

$$\sigma_{2s} = 2(0.85) = 1.7$$

$$Z^* = 4 - 0.35 = 3.65$$

$$Z^* = 4 - 2.05 = 1.95$$

$$Z^* = 4 - 0.35 = 3.65$$

$$Z^* = 4 - 1.7 = 2.3$$

$$E_T = -2 \left(\frac{(3.65)^2}{2 (1)^2} \right) - 2 \left(\frac{(1.95)^2}{2 (2)^2} \right) = -14.273 \text{ Ha}$$

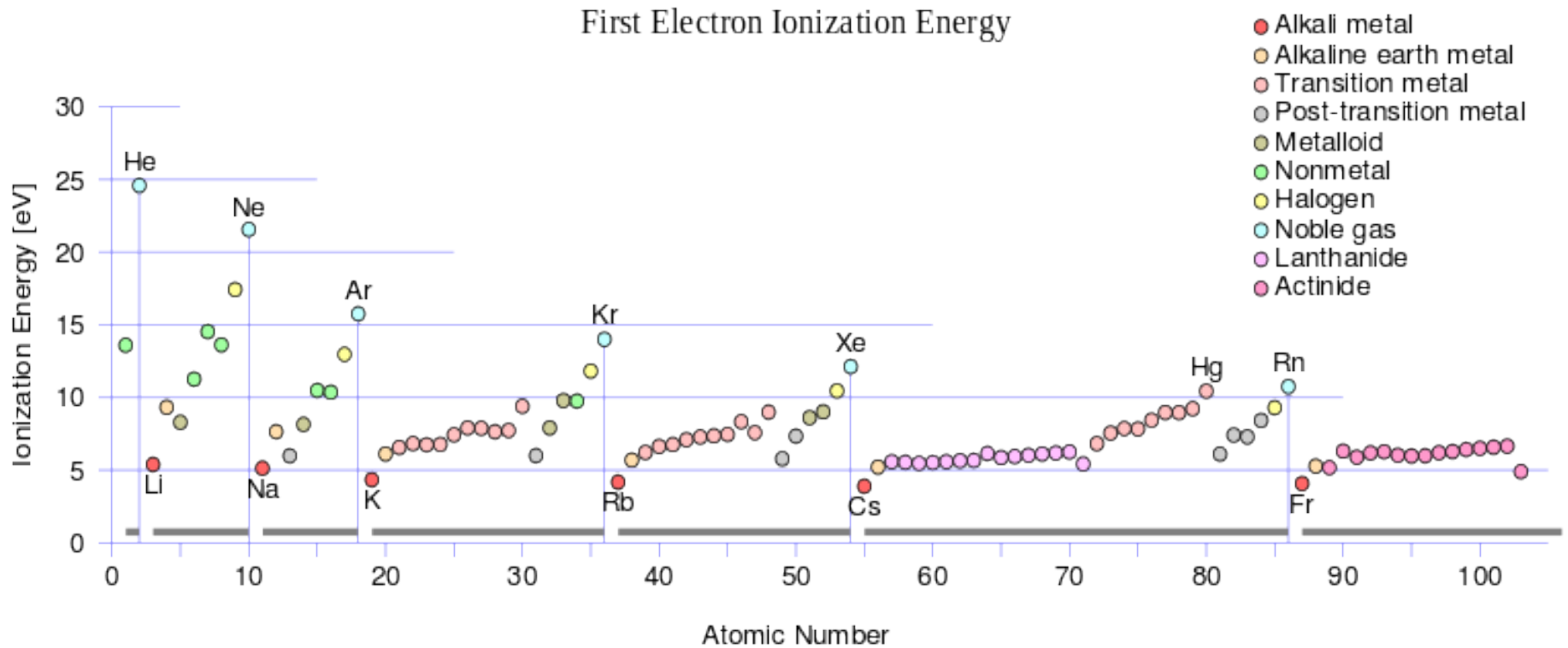
$$E_T = -2 \left(\frac{(3.65)^2}{2 (1)^2} \right) - \left(\frac{(2.3)^2}{2 (2)^2} \right) = -13.98 \text{ Ha}$$

$$\text{EI}_1 = -13.98 \text{ Ha} - (-14.273 \text{ Ha}) = 0.2931 \text{ Ha}$$

Energías de ionización



R vs Z^*



Ejemplos:

Ordena los siguientes elementos en orden creciente de su primer energía de ionización:

Si, Cl, Na  Na < Si < Cl

Sr, Se, S, Sb  Sr < Sb < Se < S

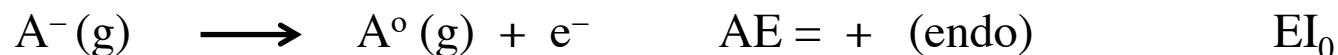
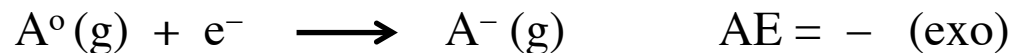
Ordena los siguientes elementos en orden decreciente de su segunda energía de ionización:

Ca, I, Rb, Kr  Rb > Kr > I > Ca

¿Porqué la primer energía de ionización del azufre es menor que la del fósforo?

Afinidad Electrónica (AE)

“Energía necesaria para que un átomo aislado en fase gaseosa acepte un electrón”



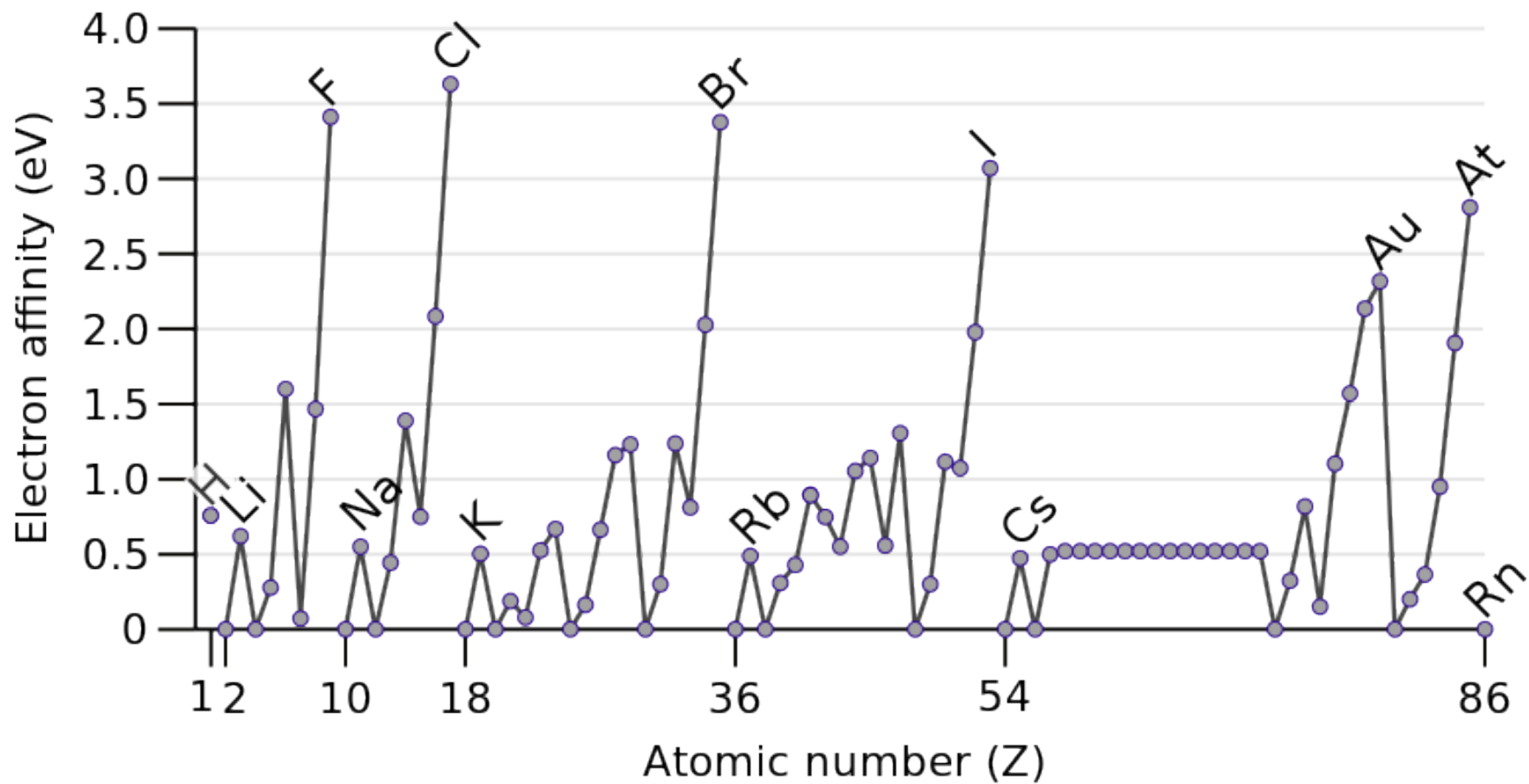
$$AE = E_T(A^{\circ}) - E_T(A^{-})$$

$$AE = +$$

El ion A^{-} es más estable, hay una tendencia a aceptar un e^{-}

$$AE = -$$

El ion A° es más estable, no se forma A^{-}



La afinidad de los gases nobles es cero!

AE aumenta



AE aumenta



Grupo →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓ Período																		
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 Uuq	115 Uup	116 Uuh	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			

La afinidad electrónica es una medida de la capacidad de un átomo para aceptar electrones:

AE altas



los e^- se aceptan fácilmente



formación de iones negativos

Ejemplos:

Ordena los siguientes elementos de menor a mayor afinidad electrónica:



De las siguientes configuraciones electrónicas que corresponden a átomos neutros, ¿Cuál tiene mayor afinidad electrónica?

