

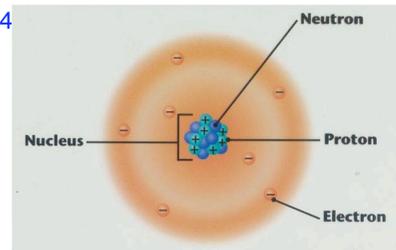


Tema 3

Estructura electrónica de los átomos polieletrónicos

Bibliografía

- Tema 9 del Petrucci (pag. 334)



El tratamiento de los átomos con más de un electrón (**polieletrónicos**) requiere considerar los efectos de las **repulsiones interelectrónicas**, la **penetración orbital** hacia el núcleo, el **apantallamiento nuclear** y un número cuántico adicional —el **número cuántico de espín**— que especifica la energía intrínseca de un electrón en cualquier orbital.

La restricción en cuanto al número de electrones que puede contener un orbital conduce a la discusión del **principio de exclusión de Pauli**, las **reglas de Hund** y el **principio aufbau**.

Todas estas consideraciones son necesarias para entender la organización de la Tabla Periódica de los Elementos

Objetivos del tema

Debes entender lo siguiente:

- La repulsión interelectrónica es la responsable de la complicada estructura electrónica de los átomos polieletrónicos
- Conceptos: poder penetrante, apantallamiento nuclear, carga nuclear efectiva
- Los orbitales atómicos hidrogenoideos sufren una pérdida de la degeneración cuando hay en juego más de un electrón
- Los electrones poseen una energía intrínseca debido al número cuántico de espín
- Conocer los tres principios básicos para determinar las configuraciones electrónicas: principio de exclusión de Pauli, regla de Hund, principio Aufbau
- Aplicar el principio Aufbau para escribir las configuraciones electrónicas
- Un orbital puede estar ocupado por un máximo de dos electrones
- La estructura general de la tabla periódica
- Las irregularidades en el llenado de los orbitales d y f

Átomos polieletrónicos

Poder penetrante, apantallamiento y carga nuclear efectiva.

Energía de los orbitales hidrogenoideos: inversión de niveles y pérdida de degeneración.

Átomos monoeléctricos

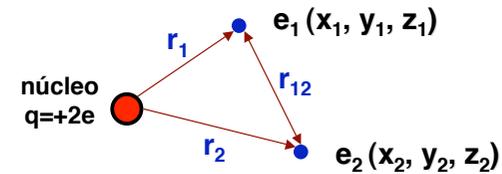
átomos hidrogenoides: solo tienen un electrón



Encontramos soluciones exactas

Orbitales hidrogenoides

Átomos polielectricos



Energía potencial V: ¿cuáles son las contribuciones?

- ❖ atracción núcleo-electrón 1
- ❖ atracción núcleo-electrón 2
- ❖ repulsión interelectrónica e_1-e_2

En los átomos multielectricos hay que considerar las repulsiones electrón-electrón

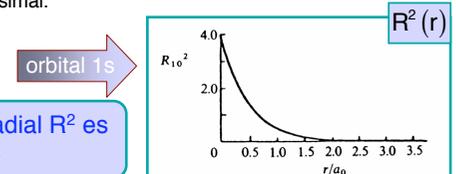
La ecuación de Schrödinger no tiene soluciones analíticas para átomos polielectricos

Átomos multielectricos

- La ecuación de Schrödinger sólo tiene soluciones analíticas para sistemas monoeléctricos.
 - ◆ En los átomos multielectricos hay que utilizar métodos computacionales (Hartree-Fock)
- Aproximación: Considerar los orbitales en los átomos polielectricos como si fueran orbitales hidrogenoides
 - ◆ su distribución espacial: es aproximadamente la misma que para los hidrogenoides
 - ◆ energía de los electrones: se modifica notablemente. **Se pierde la degeneración de los orbitales con el mismo valor de n pero diferente l.**

Penetración orbital

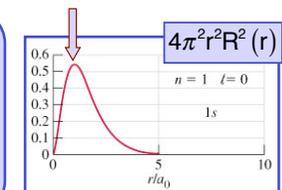
- **Penetración orbital:** Capacidad de los electrones para estar próximos al núcleo
- Para describir la penetración necesitamos conocer la distribución radial de la densidad electrónica
 - ◆ Distribución radial de probabilidad: Probabilidad de encontrar al electrón en una capa esférica de radio r y espesor infinitesimal.
 - ◆ Expresada por la función $4\pi r^2 R^2(r)$



La densidad de probabilidad radial R^2 es máxima en el núcleo

Para un orbital 1s
La distribución de probabilidad radial $4\pi r^2 R^2$ tiene un comportamiento diferente:

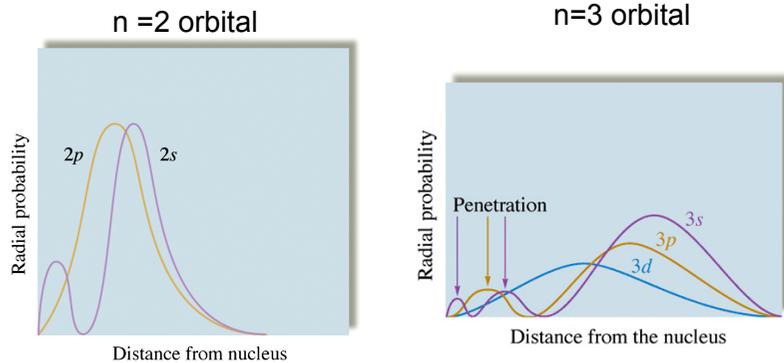
- se anula en el núcleo
- es máxima a una distancia que, para el orbital 1s del átomo de hidrogeno, es a_0 (53pm)



Penetración orbital

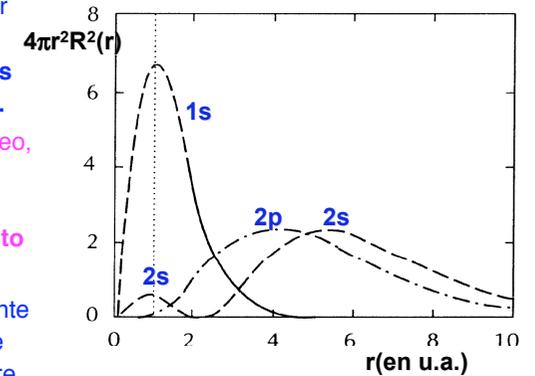
Para un mismo número cuántico principal n , cuanto menor sea el número cuántico l , mayor será su poder penetrante

$$4\pi r^2 R^2(r)$$



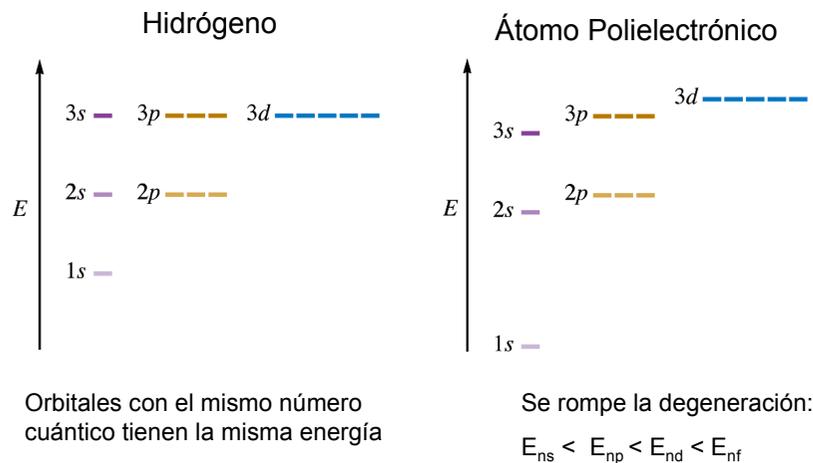
Poder penetrante

- Los electrones 2s tiene una probabilidad mayor de estar cerca del núcleo que un electrón 2p. **El orbital 2s es más penetrante que el 2p.**
- Al estar mas cerca del núcleo, los electrones 2s perciben una carga nuclear efectiva mayor que los 2p y **por tanto tienen menor energía**
- La consecuencia del diferente poder penetrante es que se pierde la degeneración entre los orbitales del mismo n pero diferente l



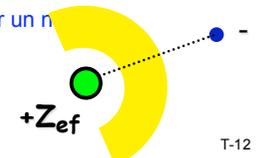
Poder penetrante: $s > p > d > f$

Energía de los orbitales en los átomos Polieletrónicos

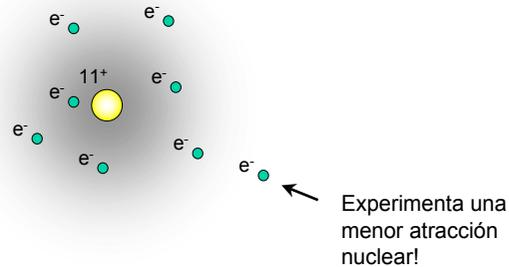


Carga nuclear efectiva

- Un electrón dado en un átomo polieletrónico experimenta dos tipos de interacciones:
 - Fuerza atractiva (Coulomb) entre ese electrón y el núcleo.
 - Depende de la carga nuclear neta que actúa sobre el electrón y de la distancia media entre el núcleo y electrón
 - Fuerza repulsiva ejercida por otros electrones.
 - Son muy numerosas y complicadas de calcular
- La carga nuclear que percibe un electrón como consecuencia de la presencia de otros electrones se denomina **carga nuclear efectiva**
 - Se puede calcular como la carga nuclear Z menos el promedio de electrones que hay entre el núcleo y ese electrón.
 - Al efecto apantallante de los electrones mas internos se le denomina **constante de apantallamiento**
 - la constante de apantallamiento no tiene por qué ser un número entero



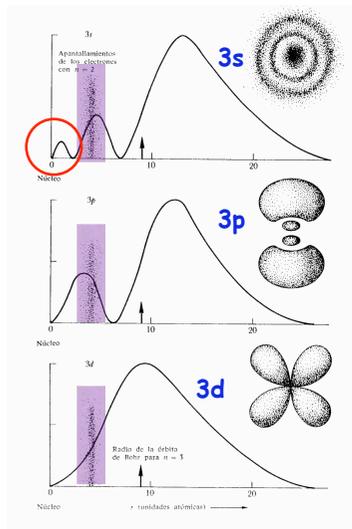
Carga nuclear efectiva



Apantallamiento del núcleo

- **Apantallamiento:** S es la disminución que experimenta la carga del núcleo experimentada por el electrón apantallado como consecuencia de las repulsiones interelectrónicas que generan los electrones más próximos al núcleo
- El apantallamiento de electrones reduce la eficacia de la atracción del núcleo hacia el electrón objeto del apantallamiento. **Los electrones apantallados perciben una carga nuclear efectiva Z_{ef} menor que Z .**
- El apantallamiento que experimenta un electrón dado depende de dos factores:
 - ◆ del tipo de orbital en que se alojen los electrones más internos
 - Electrones en orbitales s tienen una cierta densidad de probabilidad cerca del núcleo, mientras que en los p y d las densidades de probabilidad en el núcleo son muy bajas. Por tanto los electrones tipo s apantallan mejor que los de tipo p o d .
 - ◆ del tipo de orbital en el que se aloja el electrón apantallado.

Orden de apantallamiento



- Los orbitales $3s$ son más penetrantes que los $3p$ y estos más que los $3d$.
- Cuando haya electrones en la capa $n=2$, estos apantallan a los de la capa $n=3$.
- El poder apantallante de los electrones $n=2$ respecto del nivel $n=3$ aumenta en el orden $3s < 3p < 3d$
- La Z_{ef} que soporta un electrón en un orbital $3s$ será mayor que la de un $3p$ y un $3d$.

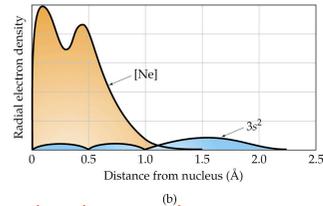
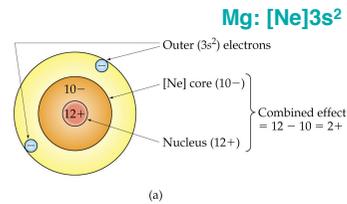
Carga nuclear efectiva. Evidencia experimental

- Niveles de energía átomo hidrogenoide $E_n = -R_H (Z^2/n^2)$
 - ◆ La energía de ionización calculada $EI(H)_{calc} = 13,6 \text{ eV}$: es coherente con el valor experimental
 - ◆ ¿Válida para polielectrónicos??
- Átomo de Litio ($Z=3$) POLIELECTRÓNICO
 - ◆ $EI(Li)_{exp} = 5,4 \text{ eV}$;
 - ◆ $EI(Li)_{calc} = R_H (3^2/2^2) = 13,6 \times 2,25 = 30,6 \text{ eV}$ → **inaceptable**: muy alejada de la experimental
 - ◆ ¿Razon? La carga nuclear que percibe el electrón de valencia del Litio es mucho menor que la empleada en esa formula
 - $Z_{ef} \approx 1,3$ (en vez de $Z=3$)

$$E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2} \Rightarrow E_n = -R_H \frac{Z_{ef}^2}{n^2} \quad Z_{ef} = Z - S$$

Carga nuclear efectiva

- Mg. La carga nuclear efectiva que perciben los electrones más externos es aproximadamente:
 - $Z=12$ menos la carga -10 de la capa llena interna de [Ne]
- Si los electrones internos fueran absolutamente eficaces para apantallar a los electrones de valencia, el electrón $3s$ experimentaría una carga nuclear efectiva de $+2$
- Los electrones externos $3s$ tienen una cierta probabilidad de estar cerca del núcleo. Los electrones penetran y por ello el escudo protector no es perfecto. La carga nuclear efectiva que perciben los electrones es mayor que $+2$. ($Z_{ef} \approx 3,3$)



los electrones internos son muy eficaces para escudar a los de valencia, aunque no de modo perfecto

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



para saber mas ...

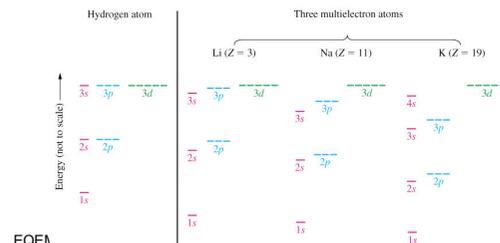
Reglas de Slater para determinar cuantitativamente las constantes de apantallamiento y por tanto estimar la carga nuclear efectiva. Al final del tema

Consecuencia de la diferente penetración orbital

Consecuencia en los niveles energéticos

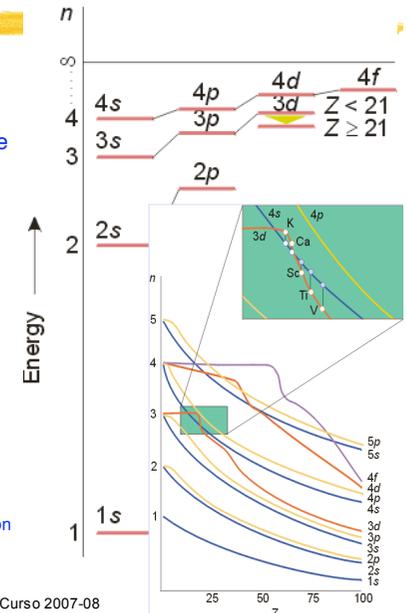
- Se pierde la degeneración de los orbitales pertenecientes al mismo nivel n
 - El electrón s experimenta una carga Z_{ef} mayor, está más fuertemente atraído por el núcleo y en un nivel de energía más profundo (mas negativo) que el electrón p ; así mismo, el electrón p se encuentra en un nivel de energía más profundo que el d .
 - $E(2s) < E(2p)$;
 - $E(3s) < E(3p) < E(3d)$
 - Para un mismo n : $E(ns) < E(np) < E(nd)$...
 - La energía del orbital depende de n y de ℓ

$$E_n = -R_H \frac{Z_{ef}^2}{n^2}$$



Niveles de energía

- Para el H: la energía de los electrones solo depende de n
- Para átomos polielectrónicos: la energía de los electrones con el mismo n , aumenta al hacerlo ℓ . La energía depende de n y ℓ
 - Se pierde la degeneración del nivel
- Cuanto mayor es el número atómico, mayor es la atracción que ejerce su núcleo sobre el electrón y las energías van estabilizando poco a poco (se hacen más negativa)
- Regla $(n+\ell)$
 - Los niveles de energía van en el orden $(n+\ell)$. Si dos niveles tienen el mismo valor de $(n+\ell)$ la menor energía corresponde al que tiene menor n
 - "Inversión" del orden $4s-3d$ ($5s-4d$, $6s-5d$, $5d-4f$):
 - $Z = 19(K), 20(Ca) \rightarrow E(4s) \leq E(3d)$ inversion
 - $Z > 20 \rightarrow E(3d) \leq E(4s)$



Configuraciones electrónicas del estado fundamental de los átomos polielectrónicos

Reglas para la dilucidación de las configuraciones electrónicas

Reglas para la distribución de los electrones

- **Regla 1:** Los electrones ocupan los orbitales de modo que se minimice la energía del átomo
- **Regla 2:** dos electrones de un átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales (**Principio de exclusión de Pauli**)
- **Regla 3:** Cuando hay orbitales de idéntica energía (degenerados), los electrones ocupan inicialmente estos orbitales de forma que se alcance la máxima multiplicidad de espín (**Regla de Hund**)

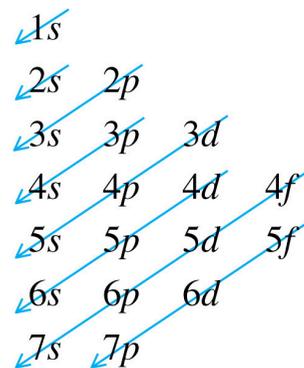
Principio de Aufbau (construcción progresiva)



al pasar de un átomo al siguiente añadimos un protón al núcleo y un nuevo electrón en el orbital adecuado de modo que se minimice la energía total del sistema

Regla 1: minimización de la energía total

- El orden de llenado exacto se establece experimentalmente mediante estudios espectroscópicos y magnéticos
- **No hay una ordenación que sirva para todos los elementos**
- Regla nemotécnica: se ordenan según el valor de $(n + \ell)$ creciente
 - ◆ a igualdad de este valor, tiene menor energía el orbital con menor n .
- Los orbitales semillenos y totalmente llenos son más estables que los parcialmente llenos
- Para los lantánidos y actínidos no se observan estas regularidades debido a que la diferencia de energía entre los orbitales d y f son pequeñas



orden usual de llenado:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p

Regla 2: Principio de exclusión de Pauli

- ¿Cuántos electrones caben en un orbital?
 - ◆ $n, l, m_l \rightarrow$ definen un orbital
 - ◆ $m_s \rightarrow +1/2, -1/2$



W.E. Pauli
Nobel Física 1945

“En un átomo 2 electrones no pueden tener sus 4 números cuánticos iguales”

Un orbital viene definido por n, ℓ y m_l . Por lo tanto un orbital sólo puede acomodar dos electrones con $m_s = +1/2$ y $m_s = -1/2$.

biografía de Pauli



Si en un átomo hay electrones con espines paralelos, estos electrones ocupan diferentes orbitales.

Regla 3: Regla de Hund

- “Cuando se están ocupando orbitales de idéntica energía (degenerados), los electrones se distribuyen de manera que:
 - el número de electrones desapareados se maximice
 - tales electrones desapareados mantengan sus espines paralelos”
- Justificación:** Los electrones se repelen debido a su carga negativa, por lo tanto intentan estar tan separados como sea posible.

¿Son todos estos estados igualmente probables



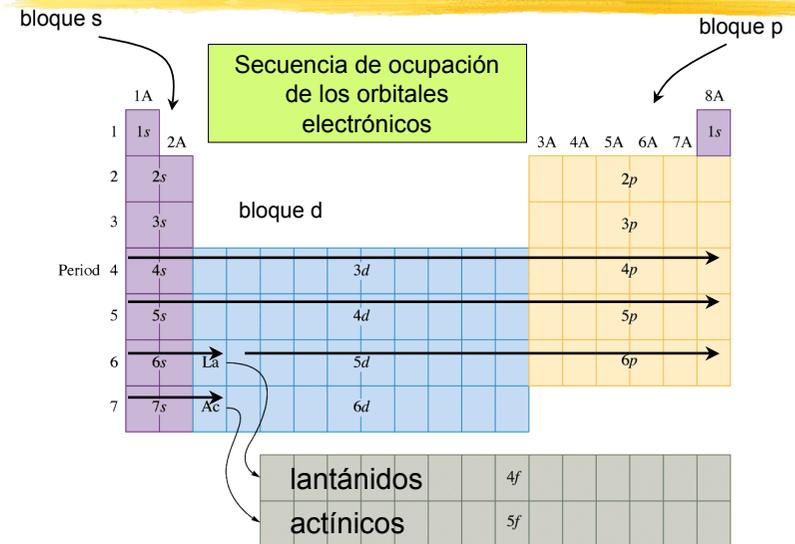
Capacidad de las capas electronicas

Capa	n	ℓ	m _ℓ	designación	nº orbitales	nº electrones	nº total electrones
K	1	0	0	1s	1	2	2
L	2	0	0	2s	1	2	8
		1	-1 0 1	2p	3	6	
M	3	0	0	3s	1	2	18
		1	-1 0 1	3p	3	6	
		2	-2 -1 0 1 2	3d	5	10	
N	4	0	0	4s	1	2	32
		1	-1 0 1	4p	3	6	
		2	-2 -1 0 1 2	4d	5	10	
		3	-3 -2 -1 0 1 2 3	4f	7	14	

2n²

Electron Configurations

Llenando orbitales



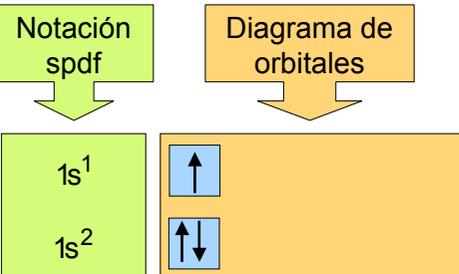
Primer periodo

• 1er período (Z=1-2):

Se llena el orbital 1s

	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							He

Configuración electrónica



Hidrógeno: Z=1:

Helio: Z=2:

Segundo Periodo

• 2º período (Z=3-10):

–Se llenan los orbitales 2s, 2p

	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne

Litio: Z=3: $1s^2 2s^1$

Alternativa:

Li: $[\text{He}]2s^1$ [Electrones internos] Electrones de valencia

[Core electrons] Outer electrons

Z	Elemento	Configuración
3	Li	$[\text{He}] 2s^1$
4	Be	$[\text{He}] 2s^2$
5	B	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$
6	C	¿?

Los electrones de valencia determinan la química del elemento

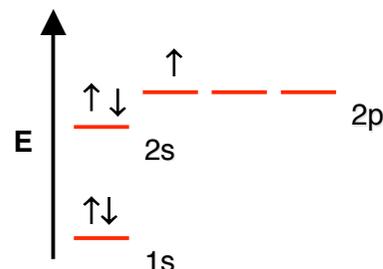
Segundo periodo

B (Z=5) : $1s^2 2s^2 2p^1$; alternativamente: $[\text{He}] 2s^2 2p^1$

El electrón mas externo puede ocupar cualquiera de los orbitales 2p, con seis posibles combinaciones de numeros cuanticos:

$$2 \ 1 \ \left\{ \begin{array}{c} -1 \\ 0 \\ +1 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} -1/2 \\ +1/2 \end{array} \right\}$$

n l m_l m_s



2º Periodo

Regla de Hund

“Cuando se están ocupando orbitales degenerados, los electrones se distribuyen de manera que mantengan sus espines paralelos mientras sea posible”

	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne

C Z=6 C: $[\text{He}] 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

estado fundamental



C Z=6 C*: $[\text{He}] 2s^2 2p_x^2$

estado excitado, 122 kJ/mol



2º Periodo

	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne

N Z=7 N: [He] 2s² 2p_x¹ 2p_y¹ 2p_z¹



N Z=7 N*: [He] 2s² 2p_x² 2p_y¹



Aparear electrones cuesta energía debido a la repulsión interelectrónica

2º Periodo

	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne

Z=8 O: [He] 2s² 2p_x² 2p_y¹ 2p_z¹



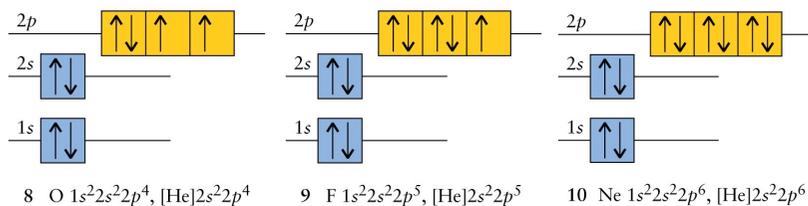
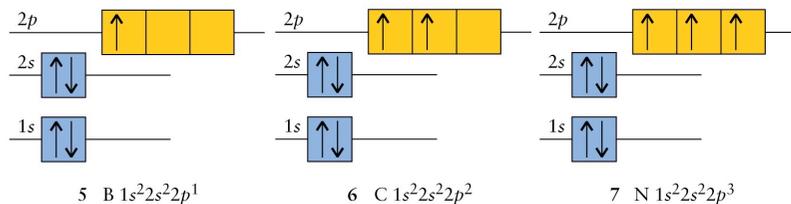
Z=9 F: [He] 2s² 2p_x² 2p_y² 2p_z¹



Z=10 Ne: [He] 2s² 2p_x² 2p_y² 2p_z²



Segundo periodo



3º Periodo

Se llenan los orbitales 3s, 3p

Z=11 Na: [Ne] 3s¹

Z=12 Mg: [Ne] 3s²

Z=13 Al: [Ne] 3s² 3p¹

Z=14 Si: [Ne] 3s² 3p²

Z=15 P: [Ne] 3s² 3p³

Z=16 S: [Ne] 3s² 3p⁴

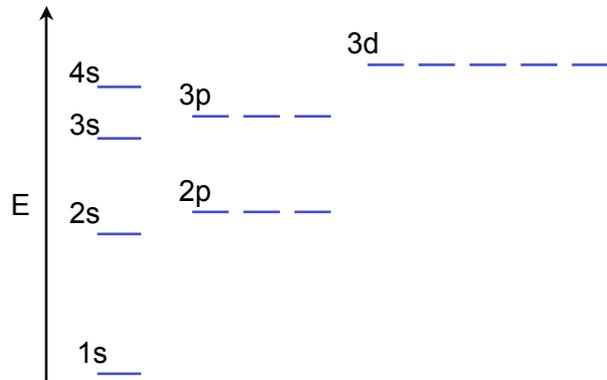
Z=17 Cl: [Ne] 3s² 3p⁵

Z=18 Ar: [Ne] 3s² 3p⁶

	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							He
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar

Regularidad perfecta

Orbitales d



Debido al mayor poder de penetración de los orbitales s, el orbital 4s tiene menor energía que el 3d

4º Periodo

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		He
																		Ne
																		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	

4º período (Z=19-36): Se llenan los 4s, 3d, 4p

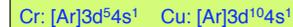
a) Z=19 y 20



b) Z=21-30: 1ª serie de transición (Sc-"Zn")

energía de los orbitales 3d ≥ 4s: "3dⁿ 4s²" (2 excepciones): Cr y Cu

1ª serie transición irregularidades:



c) Z=31-36: (Ga-Kr): orbitales 4p

Ga: [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	Ge: [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	As: [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	Se: [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	Br: [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	Kr: [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶
---	---	---	---	---	---

1ª Serie transición

Sc [Ar]4s² 3d¹,
Ti [Ar]4s² 3d²,
V [Ar]4s² 3d³,
Cr [Ar]4s¹ 3d⁵,
Mn [Ar]4s² 3d⁵,
Fe [Ar]4s² 3d⁶,
Co [Ar]4s² 3d⁷,
Ni [Ar]4s² 3d⁸,
Cu [Ar]4s¹ 3d¹⁰,

Zn [Ar]4s² 3d¹⁰,

Llenando los orbitales d (elementos de transición)

Sc: [Ar]	↑				↑↓	[Ar]3d ¹ 4s ²
Ti: [Ar]	↑	↑			↑↓	[Ar]3d ² 4s ²
V: [Ar]	↑	↑	↑		↑↓	[Ar]3d ³ 4s ²
Cr: [Ar]	↑	↑	↑	↑	↑	[Ar]3d ⁵ 4s ¹
Mn: [Ar]	↑	↑	↑	↑	↑	[Ar]3d ⁵ 4s ²
Fe: [Ar]	↑↓	↑	↑	↑	↑	[Ar]3d ⁶ 4s ²
Co: [Ar]	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	[Ar]3d ⁷ 4s ²
Ni: [Ar]	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	[Ar]3d ⁸ 4s ²
Cu: [Ar]	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹
Zn: [Ar]	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²

Excepciones

5º periodo

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		He
																		Ne
																		Ar
																		Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	

5º período (Z=37-54): Se llenan los 5s, 4d, 5p

a) Z=37 y 38 Rb: [Kr] 5s¹ Sr: [Kr] 5s²

b) Z=39-48: 2ª serie de transición (Y-"Cd")

✓ energía de los orbitales 4d ≥ 5s: "4dⁿ 5s²" (llenado irregular)

2ª serie transición: irregularidades en el llenado

c) Z=49-54: (In-Xe) orbitales 5p

In: [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹	Sn: [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	Sb: [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	Te: [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	I: [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	Xe: [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶
---	---	---	---	--	---

2ª Serie transición

Y [Kr]5s² 4d¹,
Zr [Kr]5s² 4d²,
Nb [Kr]5s² 4d³,
Mo [Kr]5s¹ 4d⁵,
Tc [Kr]5s² 4d⁵,
Ru [Kr]5s¹ 4d⁷,
Rh [Kr]5s¹ 4d⁸,
Pd [Kr]5s⁰ 4d¹⁰,
Ag [Kr]5s¹ 4d¹⁰,

Cd [Kr]5s² 4d¹⁰,

6º Periodo

6º período (Z=55-86): Se llenan los orbitales 6s,5d,4f,6p

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
6	Cs	Ba	La(*)	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

a) Z=55 y 56 (orbitales 6s)



b) ¿5d o 4f?

La: [Xe] 5d¹ 6s² "vs" [Xe] 4f¹ 5d⁰ 6s²

Subnivel 4f: lantánidos (Z=58-71)

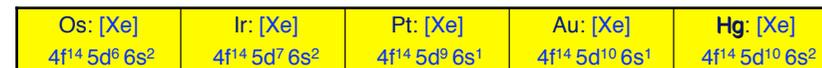
Al ser muy semejante la energía de los orbitales (n-2)f-(n-1)d-ns es difícil conocer la estructura electrónica verdadera

Ce: [Xe] 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	Pr: [Xe] 4f ³ 5d ⁰ 6s ²	Nd: [Xe] 4f ⁴ 5d ⁰ 6s ²	Pm: [Xe] 4f ⁵ 5d ⁰ 6s ²	Sm: [Xe] 4f ⁶ 5d ⁰ 6s ²	Eu: [Xe] 4f ⁷ 5d ⁰ 6s ²	Gd: [Xe] 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²
Tb: [Xe] 4f ⁹ 5d ⁰ 6s ²	Dy: [Xe] 4f ¹⁰ 5d ⁰ 6s ²	Ho: [Xe] 4f ¹¹ 5d ⁰ 6s ²	Er: [Xe] 4f ¹² 5d ⁰ 6s ²	Tm: [Xe] 4f ¹³ 5d ⁰ 6s ²	Yb: [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁰ 6s ²	Lu: [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²

6º Periodo

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
6	Cs	Ba	La(*)	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

c) Subnivel 5d: 3ª serie de transición (Z=72-80)



d) Subnivel 6p: Z=81-86 (Tl-Rn)



7º Periodo

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
6	Fr	Ra	Ac(*)	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Da	Rg	Uub	¿?	Uuq	¿?	Uuh	¿?	Uuo

Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
----	----	---	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

a) Z=87 y 88 (orbitales 7s)



b) ¿Cuál es más estable? 6d o 5f

Ac: [Rn] 6d¹ 7s² "vs" [Xe] 5f¹ 6d⁰ 7s²

Tras el Ac, se llenan los orbitales 5f. Subnivel 5f: actínidos (Z=90-103)

Th: [Rn] 5f ⁰ 6d ² 7s ²	Pa: [Rn] 5f ² 6d ¹ 7s ²	U: [Rn] 5f ³ 6d ¹ 7s ²	Np: [Rn] 5f ⁴ 6d ¹ 7s ²	Pu: [Rn] 5f ⁶ 6d ⁰ 7s ²	Am: [Rn] 5f ⁷ 6d ⁰ 7s ²	Cm: [Rn] 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²
Bk: [Rn] 5f ⁹ 6d ⁰ 7s ²	Cf: [Rn] 5f ¹⁰ 6d ⁰ 7s ²	Es: [Rn] 5f ¹¹ 6d ⁰ 7s ²	Fm: [Rn] 5f ¹² 6d ⁰ 7s ²	Md: [Rn] 5f ¹³ 6d ⁰ 7s ²	No: [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁰ 7s ²	Lr: [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²

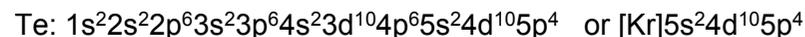
Configuración electrónica

Identify the period and the group of the element

Zirconium is in period 5 and is the 2nd element in the d-transition element group.



Tellurium is in period 5 and is the 4th element in the 'p'- group.



Configuración electrónica de iones

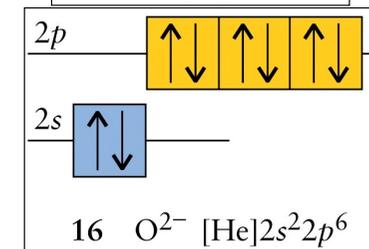
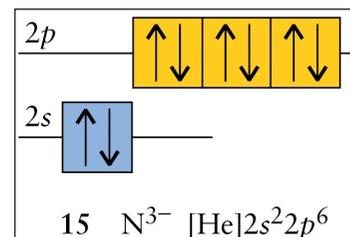
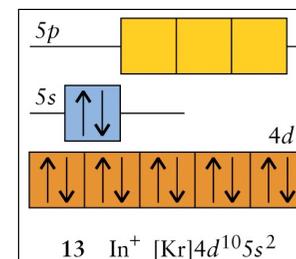
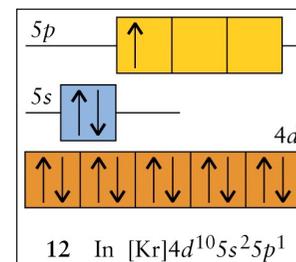
- Átomos neutros y aniones \longrightarrow aufbau
- Cationes \longleftarrow abbau

Regla abbau (J. Chem. Educ, 1987, 64, 943)

Partir de la configuración electrónica del estado fundamental para el átomo neutro

1. Eliminar los electrones del orbital de mayor n , si hay varios, comenzar por el de mayor valor de ℓ .
2. Una vez vaciados los orbitales de mayor valor de n , eliminar los electrones de los niveles d parcialmente llenos y si hiciera falta más, seguir con los f parcialmente llenos
3. Si aún fuera necesario eliminar más electrones volver a la regla 1.

Configuración electrónica de iones



Configuración electrónica de iones

■ Iones de elementos representativos

- Z=11 Na: 1s² 2s² 2p⁶ 3s¹ Na⁺: 1s² 2s² 2p⁶ 3s⁰
- Z=8 O: [He] 2s² 2p⁴ O²⁻: [He] 2s² 2p⁶

■ Iones de transición (bloques d y f)

- ◆ Los electrones ns se pierden antes que los $(n-1)d$, y estos antes que los $(n-2)f$

- Z=26 Fe: [Ar] 3d⁶ 4s² Fe²⁺: [Ar] 3d⁶ 4s⁰
- Z=58 Ce: [Xe] 4f² 5d⁰ 6s² Ce³⁺: [Xe] 4f¹ 5d⁰ 6s⁰

66	Dy: [Xe] 4f ¹⁰ 6s ²	Dy ³⁺ : [Xe] 4f ⁹ 6s ⁰
71	Lu: [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	Lu ³⁺ : [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁰ 6s ⁰
91	Pa: [Rn] 5f ² 6d ¹ 7s ²	Pa ³⁺ : [Rn] 5f ² 6d ⁰ 7s ⁰
94	Pu: [Rn] 5f ⁶ 6d ¹ 7s ²	Pu ³⁺ : [Rn] 5f ⁶ 6d ⁰ 7s
103	Lr: [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²	Lr ³⁺ : [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁰ 7s ⁰

Para saber mas

Reglas de Slater

Reglas de Slater

■ Propuestas para la determinación de la constante de apantallamiento

S:

1. Escribir la configuración electrónica completa y agrupar los orbitales ns y np, disponer separadamente de los demás:
[1s] [2s 2p] [3s 3p] [3d] [4s 4p] [4d] [4f] [5s 5p] [5d] [5f] ...
2. Todos los electrones de orbitales con n mayor (los situados a la derecha) no contribuyen al apantallamiento
3. Para electrones s o p:
 - a) Los electrones en el mismo (ns np) apantallan 0,35 unidades de carga nuclear.
 - b) Los electrones en los niveles n-1 apantallan 0,85 unidades
 - c) Los electrones en niveles n-2 o inferiores apantallan completamente (1,0 unidades)

$$Z_{\text{ef}} = Z - \sigma$$

Reglas de Slater

4. Para electrones d o f:
 - a) Los electrones en el mismo (nd nf) apantallan 0,35 unidades de carga nuclear.
 - b) Los electrones en los grupos situados a la izquierda apantallan completamente (1,0 unidades)
5. Para obtener la carga nuclear efectiva experimentada por el electrón: restaremos a la carga nuclear verdadera Z, la suma de las constantes de apantallamiento obtenidas al aplicar las reglas 2-4

$$Z_{\text{ef}} = Z - \sigma$$

Reglas de Slater

$$Z_{\text{ef}} = Z - \sigma$$

■ Propuestas para la determinación de la constante de apantallamiento:

- ◆ Todos los electrones de orbitales con n mayor no contribuyen al apantallamiento
- ◆ Cada electrón con el mismo valor de n contribuye con 0,35 excepto cuando el electrón estudiado es de tipo d o f en cuyo caso los electrones s o p contribuyen con 1,0
- ◆ Los electrones (n-1) contribuyen con 0,85 excepto cuando el electrón estudiado es de tipo d o f en cuyo caso contribuyen con 1,00
- ◆ Todos los electrones en niveles inferiores a (n-1) contribuyen con 1,00

nivel de los electrones apantallantes	Electrón estudiado	
	s o p	d o f
n	0,35	1,00 para los electrones s y p 0,35 para los d o f
n-1	0,85	1,00 para los electrones s y p 0,85 para los d o f
n-2	1,00	1,00

Cargas nucleares efectivas. Calculadas según Clementi y Raimondi (resultados diferentes a las reglas anteriores)

Z		1s	2s	2p	3s	3p
1	H	1,00	----	----	----	----
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

Ejercicios

Calcula la carga nuclear efectiva que siente uno de los electrones 2p del átomo de oxígeno.

Configuración electrónica O: $1s^2 2s^2 2p^4$

Los 5 electrones del nivel $n=2$ apantallan con 0,35.

Los 2 electrones del nivel $n=1$ apantallan con 0,85 cada uno

La constante de apantallamiento $s = 5 \times 0,35 + 2 \times 0,85 = 3,45$

$Z_{ef} = Z - s = 8 - 3,45 = 4,55$

Calcula la carga nuclear efectiva sobre un electrón 3d y otro 4s del manganeso

Configuración electrónica Mn: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$

	Electrones	contribución
$n=4$	1 (s)	$1 \times 0,35$
$n=3$	13 (s, p, d)	$13 \times 0,85$
$n=2$	10 (s o p)	$10 \times 1,0$
apantallamiento		21,4
carga nuclear efectiva		3,6

	Electrones	contribución
$n=4$	2	0
$n=3$	4(d) + 8(s, p)	$4 \times 0,35 + 8 \times 1,0$
$n=2$	8 (s, p)	$10 \times 1,0$
$n=1$	2(s)	$2 \times 1,0$
apantallamiento		19,4
carga nuclear efectiva		5,6

Biografía de W.E. Pauli



Wolfgang Pauli was born on April 25th, 1900 in Vienna. He received his early education in Vienna before studying at the University of Munich under Arnold Sommerfeld. He obtained his doctor's degree in 1921 and spent a year at the University of Göttingen as assistant to Max Born and a further year with Niels Bohr at Copenhagen. The years 1923-1928 were spent as a lecturer at the University of Hamburg before his appointment as Professor of Theoretical Physics at the Federal Institute of Technology in Zurich. During 1935-1936, he was visiting Professor at the Institute for Advanced Study, Princeton, New Jersey and he had similar appointments at the University of Michigan (1931 and 1941) and Purdue University (1942). He was elected to the Chair of Theoretical Physics at Princeton in 1940 but he returned to Zurich at the end of World War II.

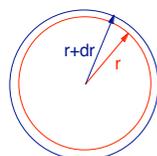
Pauli was outstanding among the brilliant mid-twentieth century school of physicists. He was recognized as one of the leaders when, barely out of his teens and still a student, he published a masterly exposition of the theory of relativity. His exclusion principle, which is often quoted bearing his name, crystallized the existing knowledge of atomic structure at the time it was postulated and it led to the recognition of the two-valued variable required to characterize the state of an electron. Pauli was the first to recognize the existence of the neutrino, an uncharged and massless particle which carries off energy in radioactive β -disintegration; this came at the beginning of a great decade, prior to World War II, for his centre of research in theoretical physics at Zurich.

Pauli helped to lay the foundations of the quantum theory of fields and he participated actively in the great advances made in this domain around 1945. Earlier, he had further consolidated field theory by giving proof of the relationship between spin and "statistics" of elementary particles. He has written many articles on problems of theoretical physics, mostly quantum mechanics, in scientific journals of many countries; his Theory of Relativity appears in the Enzyklopaedie der Mathematischen Wissenschaften, Volume 5, Part 2 (1920), his Quantum Theory in Handbuch der Physik, Vol. 23 (1926), and his Principles of Wave Mechanics in Handbuch der Physik, Vol. 24 (1933).

Pauli was a Foreign Member of the Royal Society of London and a member of the Swiss Physical Society, the American Physical Society and the American Association for the Advancement of Science. He was awarded the Lorentz Medal in 1930.

Sentido geométrico de la distribución de probab

para saber más...



$$4\pi^2 r^2 R^2(r)$$

diferencia de volúmenes entre la esfera exterior y la interior:

$$\frac{4}{3}\pi(r+dr)^3 - \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi r^2 dr + \frac{4}{3}\pi r dr^2 + \frac{4}{3}\pi dr^3 - \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi r^2 dr$$

$\rightarrow 0$ $\rightarrow 0$



Fin