



FACULTAD DE  
**CIENCIAS**

UDELAR | fcien.edu.uy



**Lucca Hofman, Romina  
Tortorella, Facundo Villalba**



# Intro

- Relación entre longitudes de onda y  $Z$
- ¿Cómo ayuda la mecánica ondulatoria a estudiar la tabla periódica?
  - Estudio del átomo de hidrógeno y átomos polielectrónicos
    - Principio de construcción
    - Estructura de capas de los átomos

# Números Cuánticos

$n$	número cuántico principal	<ul style="list-style-type: none"><li>• <math>n = 1, 2, \dots</math></li><li>• Asociado al nivel de energía</li></ul>
$l$	número cuántico azimutal	<ul style="list-style-type: none"><li>• <math>l = 0, \dots, n-1</math></li><li>• Asociado al módulo del momento angular</li><li>• Notación: s, p, d, f</li></ul>
$m_l$	número cuántico magnético	<ul style="list-style-type: none"><li>• <math>m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l</math></li><li>• Proyección del momento angular orbital</li></ul>
$m_s$	número cuántico de spin	<ul style="list-style-type: none"><li>• <math>m_s = \pm 1/2</math></li><li>• Relacionado al momento angular intrínseco</li></ul>

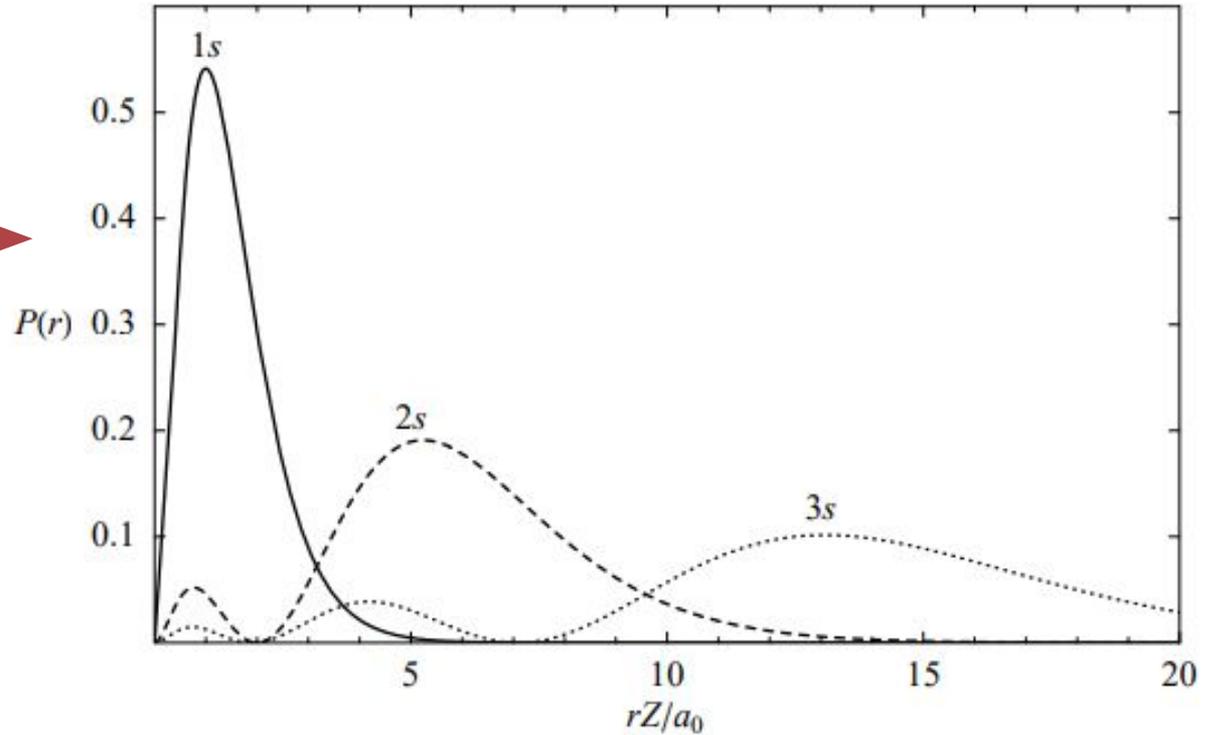
# Átomo de hidrógeno

Ec. de Schrödinger 
$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Caso unidimensional:

$$\psi(x) = A x e^{-bx}$$

Misma energía que predijo  
Bohr para estado  
fundamental!!

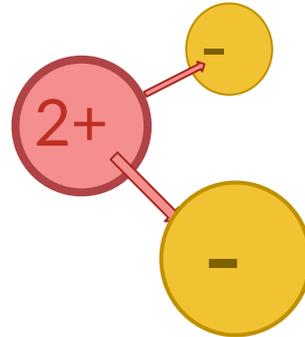


# Átomo de helio

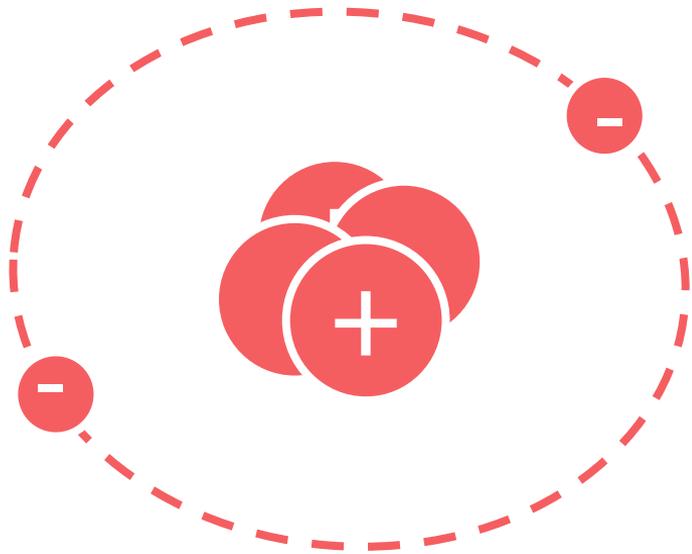
Ec. de Schrödinger para dos electrones:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) - \frac{kZe^2}{r} \psi(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) - \frac{kZe^2}{r} \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Aproximación, faltan interacciones entre electrones



# Construcción de un átomo típico



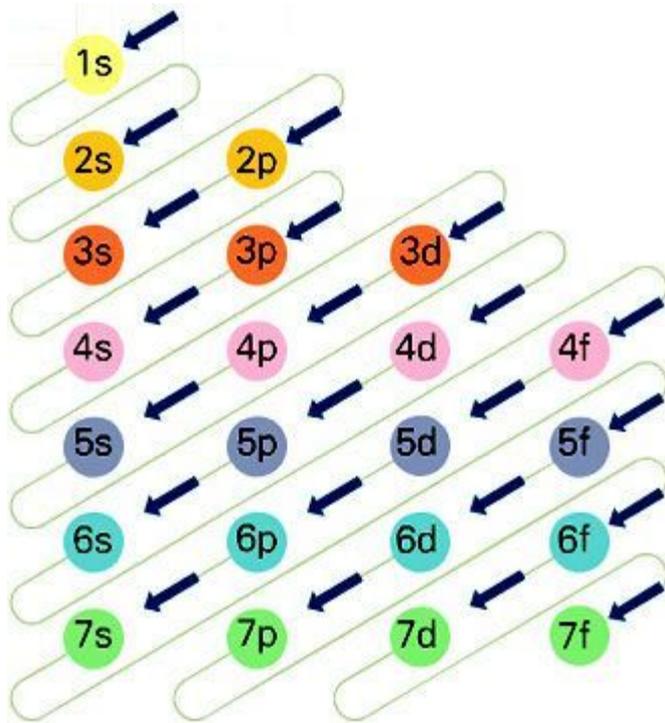
- Núcleo con  $Z$  protones y  $N=A-Z$  neutrones
- Masa  $e^- < 10^{-3}$  Masa nuclear
- Fuerzas electrostáticas
- $Z$  electrones para carga neutra

---

# Principios de Construcción

- Principio de los números cuánticos: Los números cuánticos del H describen electrones.
- Principio de Exclusión de Pauli: Dos electrones en un átomo no pueden compartir estado cuántico.
- Principio de Aufbau: Los electrones se van llenando de manera que resulte en un átomo de mínima energía.
  - ◆ Regla de Hund: Para una subcapa l se llenan primero todos los electrones con el mismo spin.

# Configuración electrónica



¿En qué orbitales se ubican los electrones?

- Utilizamos los principios de construcción
- No falla para átomos ligeros (puede haber irregularidades)
- Diagrama de Moeller

# Orbitales y Energía

H con electrón en  $n = 4$

$l = 0$   
 $l = 1$   
 $l = 2$   
 $l = 3$

$$E = \frac{m_e e^4 Z^2}{8 \epsilon_0 h^2 n^2} \rightarrow E = -0.85 \text{ eV}$$

Pb con un solo electrón  
(también en  $n = 4$ )

$l = 0$   
 $l = 1$   
 $l = 2$   
 $l = 3$

$$E = \frac{m_e e^4 Z^2}{8 \epsilon_0 h^2 n^2} \rightarrow E = -5720 \text{ eV}$$

# Orbitales y Energía

**TABLA 1** LOS NIVELES DE ENERGÍA DE LOS ELECTRONES CON  $n = 4$  EN TRES ÁTOMOS DIFERENTES

<i>Número cuántico orbital <math>l</math></i>	<i>Energía (eV)</i>		
	<i>Hidrógeno<sup>a</sup></i> <i>Z = 1</i>	<i>"Plomo"<sup>b</sup></i> <i>Z = 82</i>	<i>Plomo<sup>c</sup></i> <i>Z = 82</i>
0	-0.85	-5720	-890
1	-0.85	-5720	-710
2	-0.85	-5720	-420
3	-0.85	-5720	-140

# Orbitales y Energía

- Energía depende del número  $l$
- Apantallamiento

Pero un momento... ¿y el momento angular?

- Según Bohr,  $l=0$



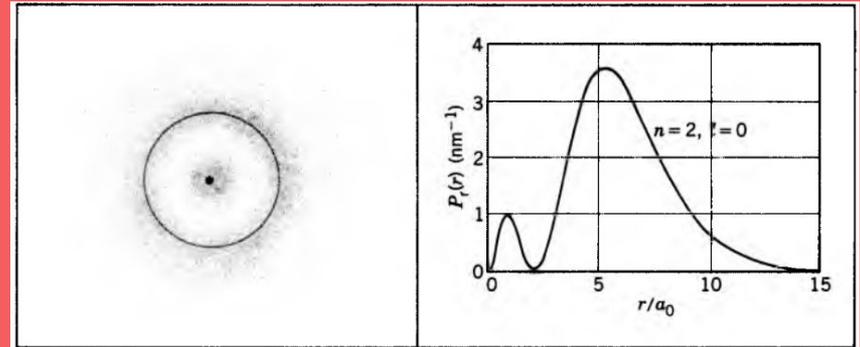
¿Todavía pensando el electrón como partícula?

# Orbitales y Energía

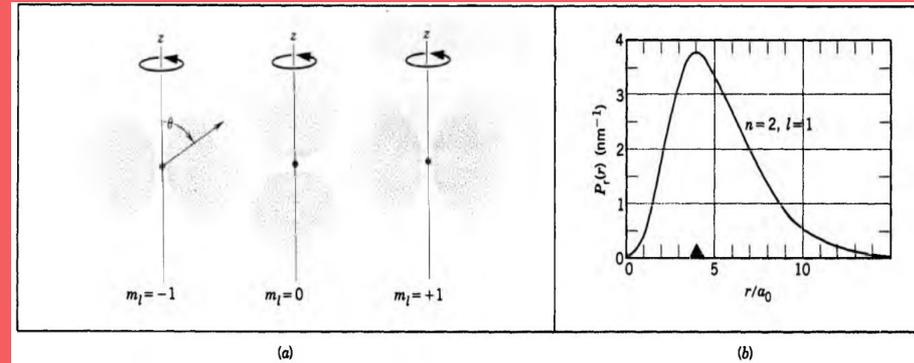
Recordemos átomos de H y He

- Muchas interacciones
- No hay solución analítica
- No hay expresión para energía

La energía aumenta con mayor  $l$  para un  $n$  dado



**Figura 17** (a) “Gráfica de puntos” que representa la densidad de probabilidad del hidrógeno atómico para el estado excitado con  $n = 2$  y  $l = 0$ . Se ha trazado un círculo con radio  $r = 4a_0$ . (b) La densidad de probabilidad radial.



**Figura 18** (a) Representaciones en “gráficas de puntos” de la densidad de probabilidad del hidrógeno atómico en el estado excitado con  $n = 2$  y  $l = 1$ . Para obtener el cuadro tridimensional completo, imaginemos cada gráfica girada alrededor del eje  $z$ . (b) La densidad de probabilidad radial. El triángulo oscuro muestra la localización del máximo en  $r = 4a_0$ .

20

24

Tp

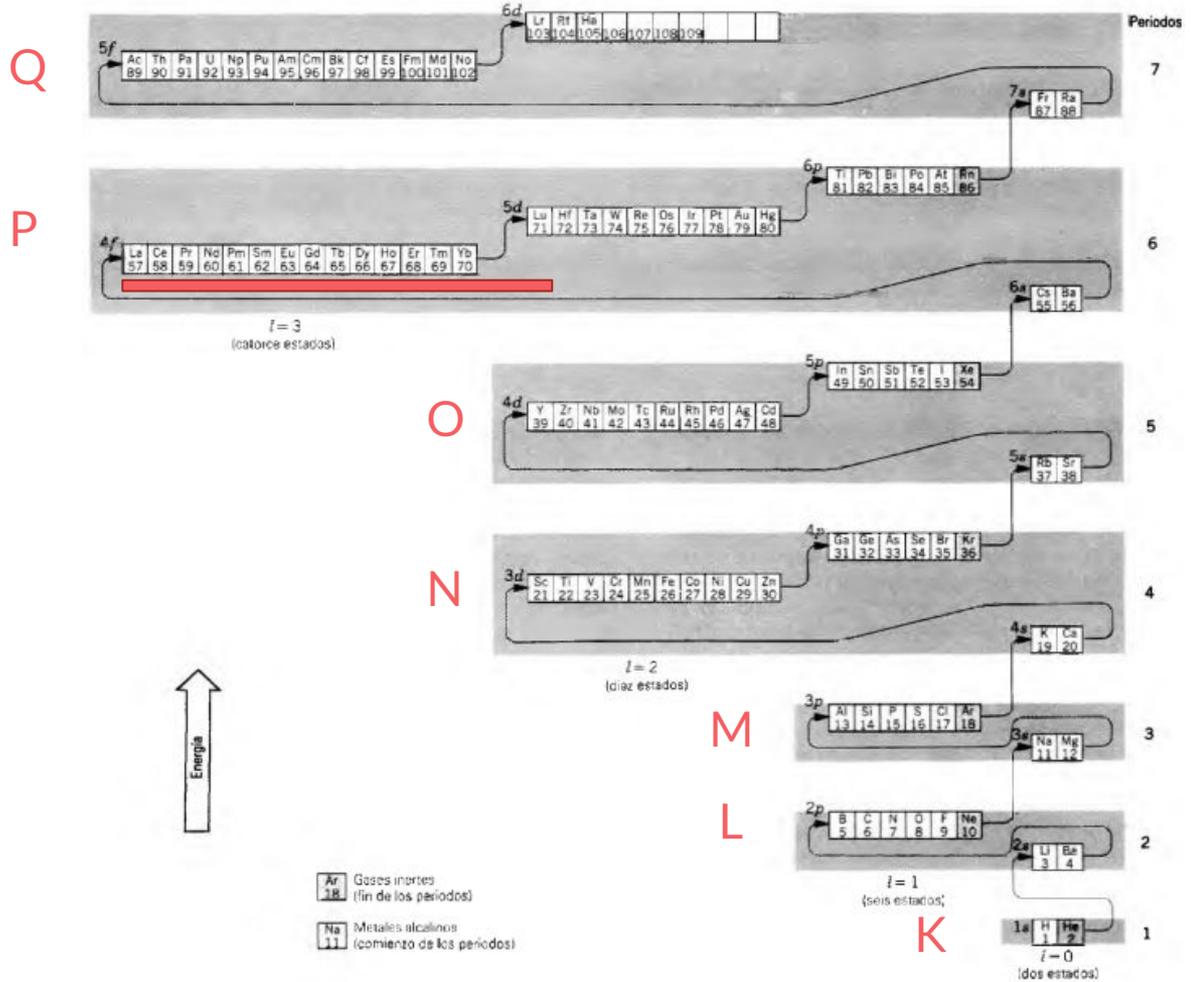
Tabla  
periódica

# Notaciones

- Capas
- Cercanos en energía
- Estabilidad al llenarlas



Ar 18 Gases inertes (fin de los periodos)  
 Na 11 Metales alcalinos (comienzo de los periodos)



# Retomando configuración electrónica

- F (Z=9)       $1s^2 2s^2 2p^5$       ➤ Acepta sin dificultad un electrón (halógeno)
- Ne (Z=10)       $1s^2 2s^2 2p^6$       ➤ No cede fácilmente electrones (gas noble)
- Na (Z=11)       $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$       ➤ Puede ceder un electrón (alcalino)



# Periodic Table of the Elements

1 IA 1A	Periodic Table of the Elements																18 VIII 8A
1 <b>H</b> Hydrogen 1.008	2 IIA 2A											13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	2 <b>He</b> Helium 4.003
3 <b>Li</b> Lithium 6.941	4 <b>Be</b> Beryllium 9.012											5 <b>B</b> Boron 10.811	6 <b>C</b> Carbon 12.011	7 <b>N</b> Nitrogen 14.007	8 <b>O</b> Oxygen 15.999	9 <b>F</b> Fluorine 18.998	10 <b>Ne</b> Neon 20.180
11 <b>Na</b> Sodium 22.990	12 <b>Mg</b> Magnesium 24.305	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 VIII 8	9 VIII 9	10 VIII 10	11 VIII 11	12 VIII 12	13 <b>Al</b> Aluminum 26.982	14 <b>Si</b> Silicon 28.086	15 <b>P</b> Phosphorus 30.974	16 <b>S</b> Sulfur 32.06	17 <b>Cl</b> Chlorine 35.453	18 <b>Ar</b> Argon 39.948
19 <b>K</b> Potassium 39.098	20 <b>Ca</b> Calcium 40.078	21 <b>Sc</b> Scandium 44.956	22 <b>Ti</b> Titanium 47.88	23 <b>V</b> Vanadium 50.942	24 <b>Cr</b> Chromium 52.00	25 <b>Mn</b> Manganese 54.938	26 <b>Fe</b> Iron 55.845	27 <b>Co</b> Cobalt 58.933	28 <b>Ni</b> Nickel 58.69	29 <b>Cu</b> Copper 63.546	30 <b>Zn</b> Zinc 65.38	31 <b>Ga</b> Gallium 69.723	32 <b>Ge</b> Germanium 72.64	33 <b>As</b> Arsenic 74.922	34 <b>Se</b> Selenium 78.96	35 <b>Br</b> Bromine 79.904	36 <b>Kr</b> Krypton 83.798
37 <b>Rb</b> Rubidium 85.468	38 <b>Sr</b> Strontium 87.62	39 <b>Y</b> Yttrium 88.906	40 <b>Zr</b> Zirconium 91.224	41 <b>Nb</b> Niobium 92.906	42 <b>Mo</b> Molybdenum 95.95	43 <b>Tc</b> Technetium 98.907	44 <b>Ru</b> Ruthenium 101.07	45 <b>Rh</b> Rhodium 102.906	46 <b>Pd</b> Palladium 106.42	47 <b>Ag</b> Silver 107.868	48 <b>Cd</b> Cadmium 112.414	49 <b>In</b> Indium 114.818	50 <b>Sn</b> Tin 118.711	51 <b>Sb</b> Antimony 121.760	52 <b>Te</b> Tellurium 127.6	53 <b>I</b> Iodine 126.904	54 <b>Xe</b> Xenon 131.294
55 <b>Cs</b> Cesium 132.905	56 <b>Ba</b> Barium 137.328	57-71	72 <b>Hf</b> Hafnium 178.49	73 <b>Ta</b> Tantalum 180.948	74 <b>W</b> Tungsten 183.84	75 <b>Re</b> Rhenium 186.207	76 <b>Os</b> Osmium 190.23	77 <b>Ir</b> Iridium 192.222	78 <b>Pt</b> Platinum 195.084	79 <b>Au</b> Gold 196.967	80 <b>Hg</b> Mercury 200.59	81 <b>Tl</b> Thallium 204.383	82 <b>Pb</b> Lead 207.2	83 <b>Bi</b> Bismuth 208.980	84 <b>Po</b> Polonium [208.982]	85 <b>At</b> Astatine 209.987	86 <b>Rn</b> Radon 222.018
87 <b>Fr</b> Francium 223.020	88 <b>Ra</b> Radium 226.025	89-103	104 <b>Rf</b> Rutherfordium [261]	105 <b>Db</b> Dubnium [262]	106 <b>Sg</b> Seaborgium [263]	107 <b>Bh</b> Bohrium [264]	108 <b>Hs</b> Hassium [265]	109 <b>Mt</b> Meitnerium [266]	110 <b>Ds</b> Darmstadtium [267]	111 <b>Rg</b> Roentgenium [268]	112 <b>Cn</b> Copernicium [269]	113 <b>Nh</b> Nihonium [270]	114 <b>Fl</b> Flerovium [271]	115 <b>Mc</b> Moscovium [272]	116 <b>Lv</b> Livermorium [273]	117 <b>Ts</b> Tennessine [274]	118 <b>Og</b> Oganesson [274]

# Periodic Tables

Lanthanide Series

57 <b>La</b> Lanthanum 138.905	58 <b>Ce</b> Cerium 140.116	59 <b>Pr</b> Praseodymium 140.908	60 <b>Nd</b> Neodymium 144.243	61 <b>Pm</b> Promethium 144.913	62 <b>Sm</b> Samarium 150.36	63 <b>Eu</b> Europium 151.964	64 <b>Gd</b> Gadolinium 157.25	65 <b>Tb</b> Terbium 158.925	66 <b>Dy</b> Dysprosium 162.500	67 <b>Ho</b> Holmium 164.930	68 <b>Er</b> Erbium 167.259	69 <b>Tm</b> Thulium 168.934	70 <b>Yb</b> Ytterbium 173.055	71 <b>Lu</b> Lutetium 174.967
---	--------------------------------------	--	---	--	---------------------------------------	--	---	---------------------------------------	--	---------------------------------------	--------------------------------------	---------------------------------------	---	--

Actinide Series

89 <b>Ac</b> Actinium 227.028	90 <b>Th</b> Thorium 232.038	91 <b>Pa</b> Protactinium 231.036	92 <b>U</b> Uranium 238.029	93 <b>Np</b> Neptunium 237.048	94 <b>Pu</b> Plutonium 244.064	95 <b>Am</b> Americium 243.061	96 <b>Cm</b> Curium 247.070	97 <b>Bk</b> Berkelium 247.070	98 <b>Cf</b> Californium 251.080	99 <b>Es</b> Einsteinium [254]	100 <b>Fm</b> Fermium 257.095	101 <b>Md</b> Mendelevium 258.1	102 <b>No</b> Nobelium 259.101	103 <b>Lr</b> Lawrencium [262]
--	---------------------------------------	--	--------------------------------------	---	---	---	--------------------------------------	---	---	---	--	--	---	---

# Radio atómico

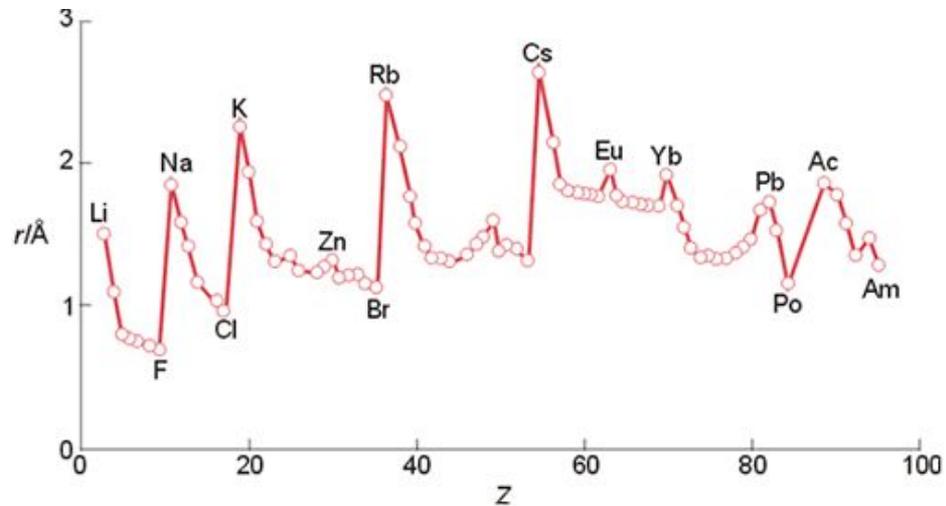
Enlace covalente

Fuerzas de Van der Waals

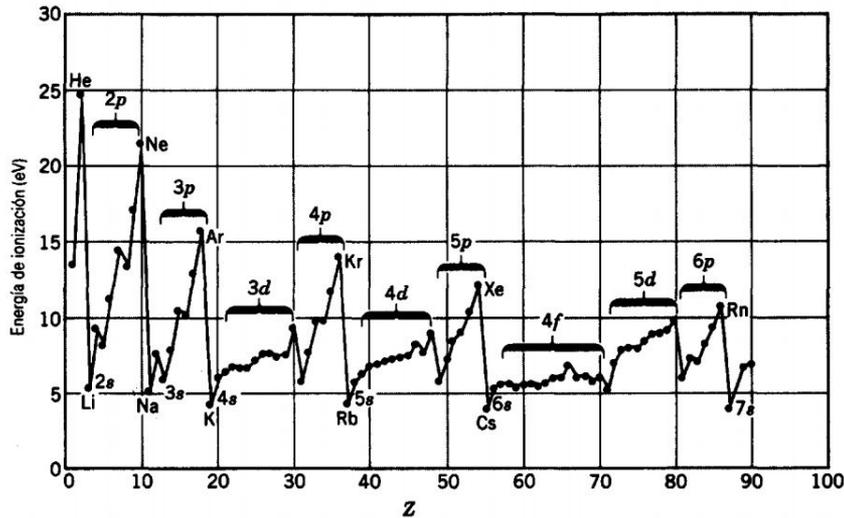
Depende del tipo de fuerzas

Enlace iónico

Enlace metálico



# Energía de ionización



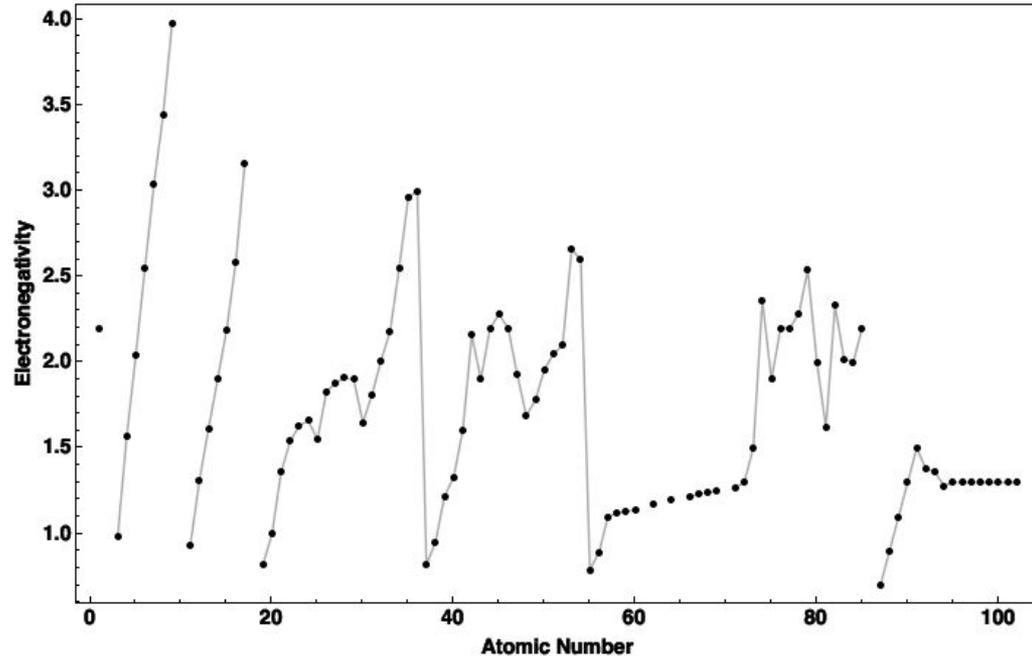
Energía necesaria para desprender al electrón más externo de un átomo

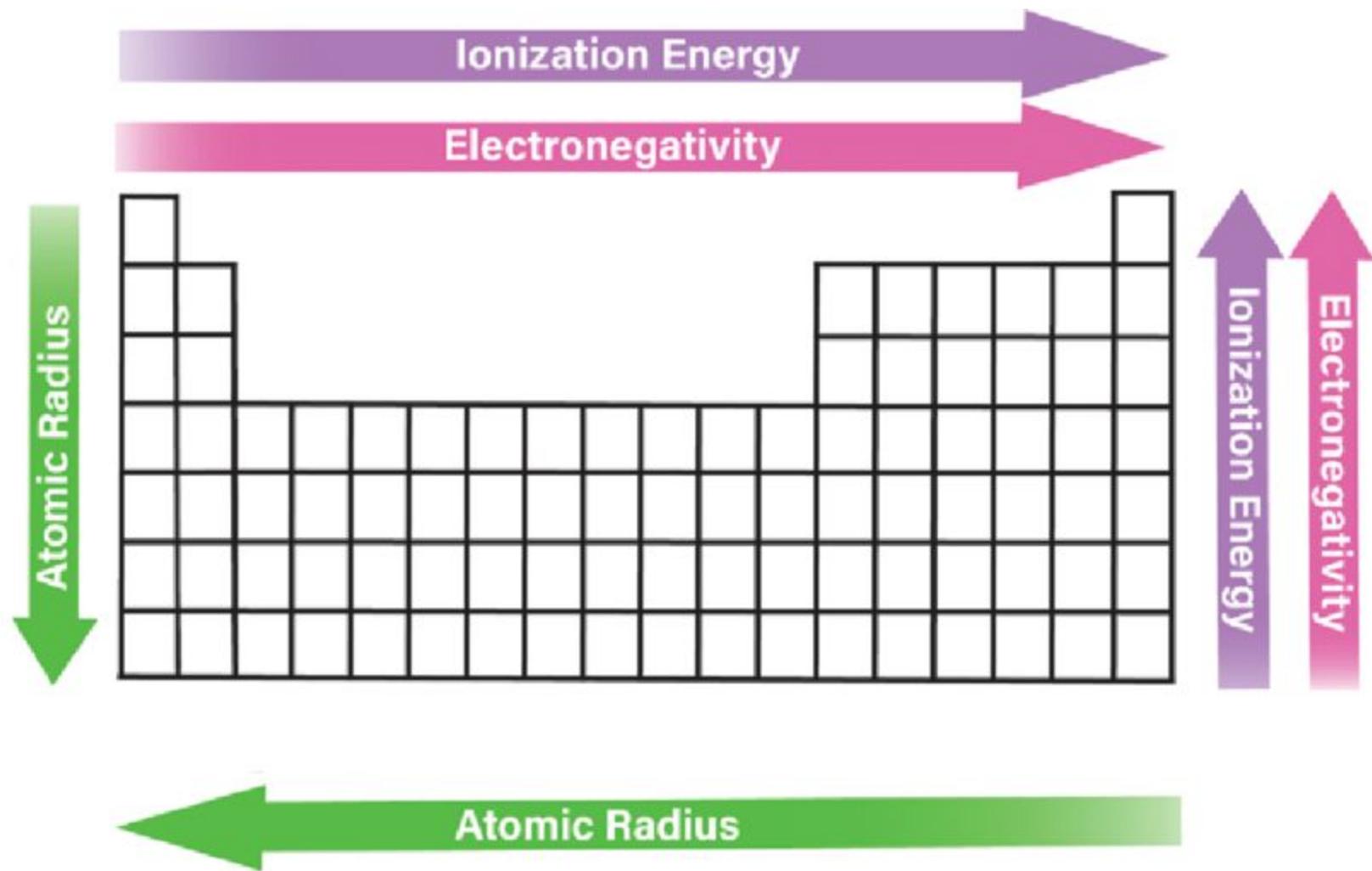
- Hay irregularidades. Ejemplo:  $Z=29$  Cobre
- Cuanto mayor es la atracción al núcleo sobre el electrón más externo, mayor será la energía requerida para arrancarlo del átomo

# Electronegatividad

Habilidad de los átomos para atraer electrones de otros átomos con los que están enlazados.

- No es propia de átomos individuales (depende del entorno)
- Es cualitativa
- Se relaciona con la energía de ionización y la afinidad electrónica





## Bloque s

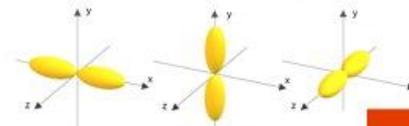


Suborbital s

1s	
2s	2s
3s	3s
4s	4s
5s	5s
6s	6s
7s	7s

2 elementos por nivel

## Bloque p



Suborbitales p

1s

2p	2p	2p	2p	2p	2p
3p	3p	3p	3p	3p	3p
4p	4p	4p	4p	4p	4p
5p	5p	5p	5p	5p	5p
6p	6p	6p	6p	6p	6p
7p	7p	7p	7p	7p	7p

6 elementos por nivel

## Bloque d

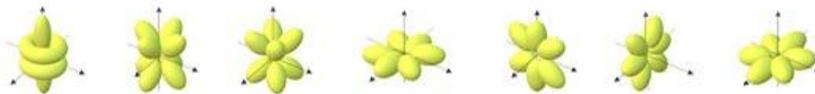


Suborbitales d

3d									
4d									
5d									
6d									

10 elementos por nivel

## Bloque f



Suborbitales f

4f												
5f												

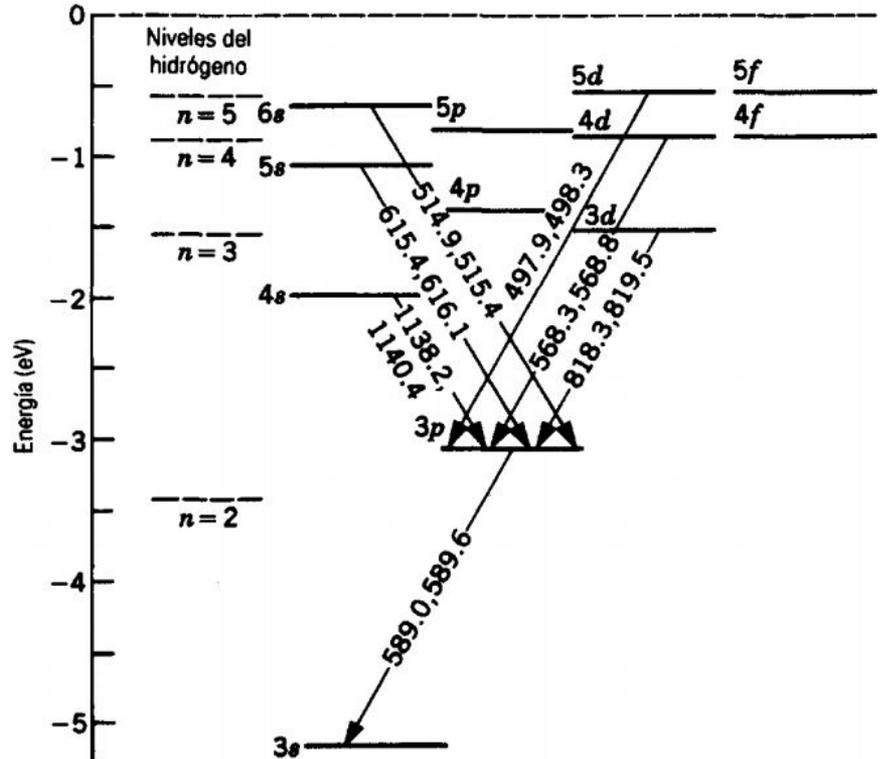
14 elementos por nivel

# Estados excitados y transiciones ópticas

- Rayos X
- Transiciones ópticas
- Ley de selección:

$$\Delta l = \pm 1$$

Estados excitados del sodio:



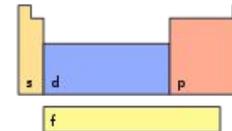
# Tabla periódica de los elementos

grupo 1																	18
1																	2
periodo 1																	
1																	
2																	
3																	
4																	
5																	
6																	
7																	

masa atómica o número másico del isótopo más estable: 55.845  
 1.ª energía de ionización: 762.5 kJ/mol  
 símbolo químico: **Fe**  
 nombre: Hierro  
 configuración electrónica: [Ar] 3d<sup>6</sup> s<sup>2</sup>  
 número atómico: 26  
 electronegatividad: +6, +5, +4, +3, +2, +1, -2  
 estados de oxidación más comunes están en negrita

- metales alcalinos
- alcalinotérreos
- otros metales
- metales de transición
- lantánidos
- actinidos
- metaloideos
- no metales
- halógenos
- gases nobles
- elementos desconocidos
- masas de elementos radiactivos entre paréntesis

Bloques de configuración electrónica



- Notas
- 1 kJ/mol = 96.485 eV.
  - Todos los elementos tienen un estado de oxidación implícito cero.
  - Los estados de oxidación de los elementos 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117 y 118 son predicciones.
  - Las configuraciones electrónicas de los elementos 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117 y 118 son tentativoas.

138.90545	140.116	140.90765	144.242	(145)	150.36	151.964	157.25	158.92535	162.500	164.93033	167.259	168.93426	173.054
La Lantano	Ce Cerio	Pr Praseodimio	Nd Neodimio	Pm Prometio	Sm Samario	Eu Europio	Gd Gadolinio	Tb Terbio	Dy Disprosio	Ho Holmio	Er Erbio	Tm Tulio	Yb Iterbio
(227)	232.03809	231.03589	238.02891	(237)	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)
Ac Actinio	Th Torio	Pa Protactinio	U Uranio	Np Neptunio	Pu Plutonio	Am Americio	Cm Curio	Bk Berkelio	Cf Californio	Es Einstenio	Fm Fermio	Md Mendelevio	No Nobelio



¿Preguntas?

## Bibliografía:

- Resnick-Halliday-Krane Cap 52.3, 52.4
  - Gasirowicz- Cap 32