

Propiedades periódicas de los elementos

Taller de Ciencia para Jóvenes 2019

Mariano Sánchez Castellanos

25-07-19

- 1 Introducción
 - Ecuación de Schrödinger
 - Átomo de hidrógeno
- 2 Átomos polielectrónicos
- 3 Propiedades periódicas

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \hat{H} \Psi(r, t)$$

donde

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r, t) .$$

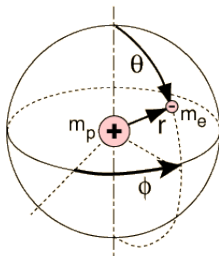
Si se considera un potencial independiente del tiempo la ecuación se transforma en

$$E\Psi(r) = \hat{H}\Psi(r)$$

o

$$E\Psi(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r)$$

La solución para el átomo de hidrógeno



$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

Función de onda

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

donde

$$n=1,2,3,\dots$$

$$l=0,1,2,\dots,n-1$$

$$m=-l,-(l-1),\dots,0,\dots,l-1,l$$

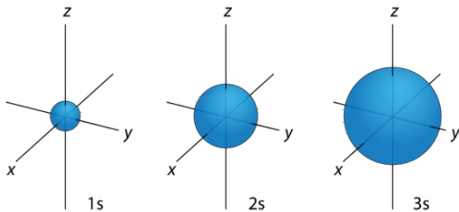
y la energía está dada por

$$E_n = \frac{\mu}{2\hbar n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)$$

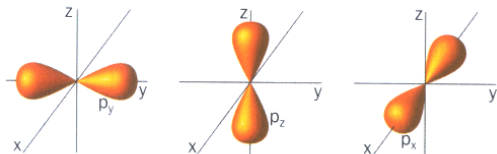
Orbitales del Hidrógeno

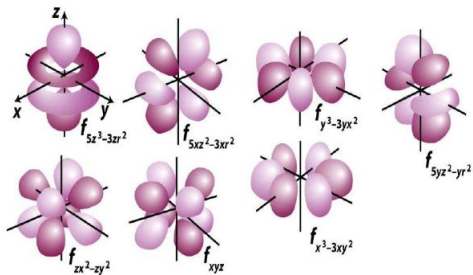
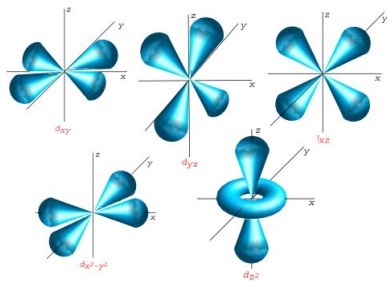
n	ℓ	m	R_{nl}	$Y_{\ell m}$	$\psi_{nlm} = R_{nl} Y_{\ell m}$
1	0	0	$2 \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$
2	1	± 1	$\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$2 \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a_0} + \frac{2}{27} (r/a_0)^2\right) e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2(r/a_0)^2\right) e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \cos \theta$
3	1	± 1	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0}$	$\pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	± 1	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$	$\pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	± 2	$\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$

Orbitales atómicos



Orbitales p





¿Qué pasa con átomos de dos o más electrones?

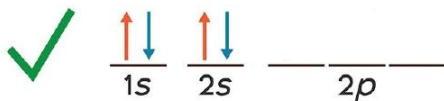
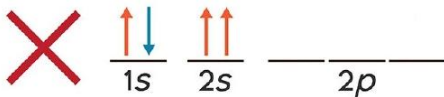
- El potencial incluye términos cruzados (interacción entre electrones).
- No hay solución analítica.
- Uno de los métodos consiste en proponer una solución en términos de las funciones hidrogenoides.
- El principio variacional establece que

$$E_{\Psi} \geq E_0$$

- Es fundamental tomar en cuenta el espín del electrón.

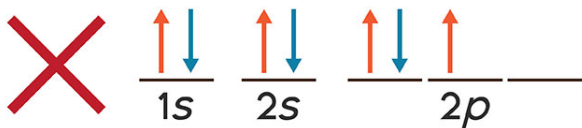
Principio de exclusión de Pauli

El principio de exclusión de Pauli sostiene que dos electrones no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales.

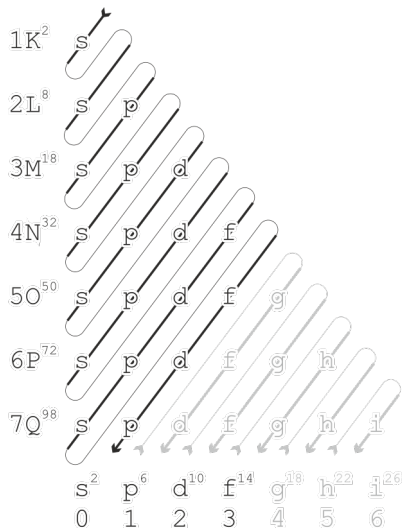


Regla de Hund

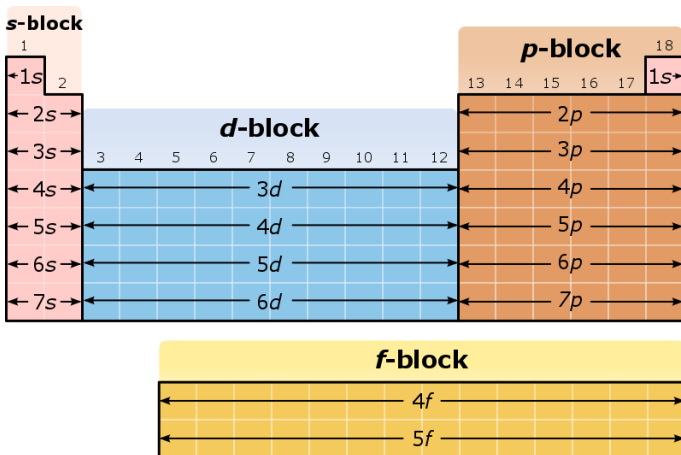
Regla de Hund: Al llenar orbitales de igual energía (los tres orbitales p, los cinco d, o los siete f) los electrones se distribuyen, siempre que sea posible, con sus espines paralelos, llenando los orbitales con la multiplicidad mayor. La configuración atómica es más estable (es decir, tiene menos energía) cuanto más electrones desapareados (espines paralelos) posee.



Principio de Aufbau



Configuración electrónica

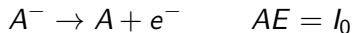


Propiedades de interés químico.

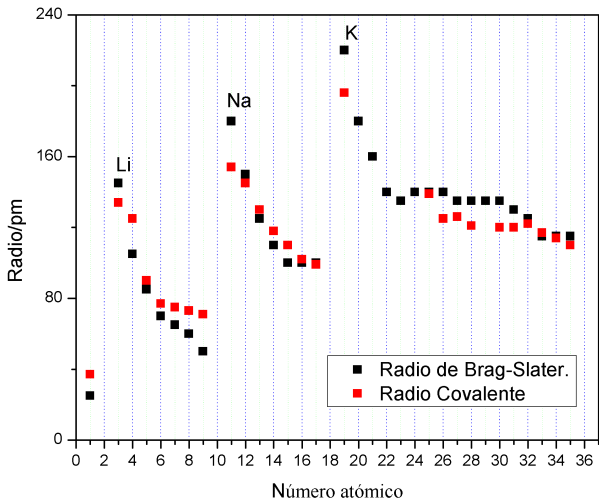
- Radio atómico.
 - radio iónico,
 - radio metálico,
 - radio covalente,
 - radio de van der Waals.
- Energía de ionización.



- Afinidad electrónica.



Radios experimentales.



¿Cómo lo explicamos?

- Interacciones electrostáticas.

Table 9.2 Effective nuclear charge, $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$

	H							He
1s	1							1.6875
	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
1s	2.6906	3.6848	4.6795	5.6727	6.6651	7.6579	8.6501	9.6421
2s	1.2792	1.9120	2.5762	3.2166	3.8474	4.4916	5.1276	5.7584
2p			2.4214	3.1358	3.8340	4.4532	5.1000	5.7584
	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
1s	10.6259	11.6089	12.5910	13.5745	14.5578	15.5409	16.5239	17.5075
2s	6.5714	7.3920	8.3736	9.0200	9.8250	10.6288	11.4304	12.2304
2p	6.8018	7.8258	8.9634	9.9450	10.9612	11.9770	12.9932	14.0082
3s	2.5074	3.3075	4.1172	4.9032	5.6418	6.3669	7.0683	7.7568
3p			4.0656	4.2852	4.8864	5.4819	6.1161	6.7641

Data: E. Clementi and D.L. Raimondi, *Atomic screening constants from SCF functions*. IBM Res. Note NJ-27 (1963). *J. Chem. Phys.* **38**, 2686 (1963).

$$\langle r \rangle = \left(\frac{a_0}{2Z^*} \right) [3n^2 - l(l+1)]$$

- Al aumentar la carga nuclear efectiva el radio atómico disminuye.

¿Qué pasa al cambiar de periodo?

- Principio de exclusión de Pauli.

$$\langle r \rangle = \left(\frac{a_0}{2Z^*} \right) [3n^2 - l(l+1)]$$

- Al aumentar el número cuántico principal el radio aumenta.

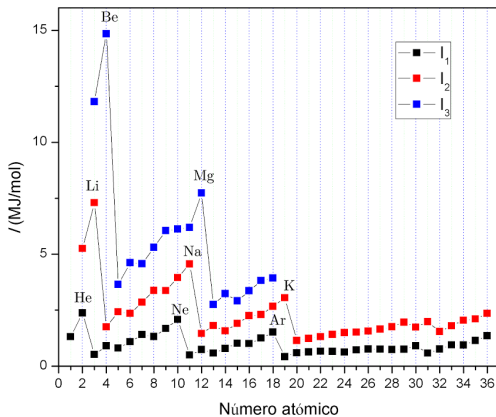
Radios iónicos

Ion	Radio (pm)
Li(+1)	90
Na(+1)	116
K(+1)	152
Rb(+1)	166
Cs(+1)	181
F(-1)	119
Cl(-1)	167
Br(-1)	182
I(-1)	201
O(-2)	126
S(-2)	170
Se(-2)	184
Te(-2)	207

Variación de radios atómicos y iónicos

Ion	Radio iónico(pm)	Radio atómico(pm)
Li(+1)	90	157
Na(+1)	116	191
K(+1)	152	135
Rb(+1)	166	250
Cs(+1)	181	272
F(-1)	119	71
Cl(-1)	167	99
Br(-1)	182	114
I(-1)	201	133
O(-2)	126	73
S(-2)	170	102
Se(-2)	184	117
Te(-2)	207	135

Energía de ionización.



Energías de ionización

Átomo	Configuración electrónica	I_1 (kJ/mol)
Na	[Ne] $3s^1$	495.8
Mg	[Ne] $3s^2$	737.7
Al	[Ne] $3s^2 3p^1$	577.4
Si	[Ne] $3s^2 3p^2$	786.5
P	[Ne] $3s^2 3p^3$	1011.7
S	[Ne] $3s^2 3p^4$	999.6
Cl	[Ne] $3s^2 3p^5$	1251.1
Ar	[Ne] $3s^2 3p^6$	1520.4

Afinidad electrónica

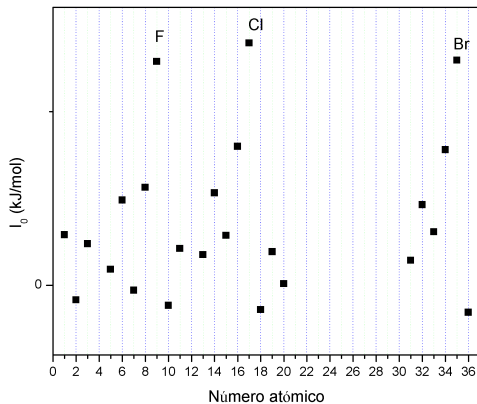
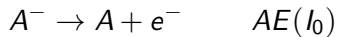


Tabla periódica

1																		18																																													
1 1.008* H hydrogen																		2 4.003 He helium																																													
3 6.94* Li lithium																		13 10.81* B boron		14 12.01* C carbon		15 14.01* N nitrogen		16 16.00* O oxygen		17 19.00 F fluorine		18 20.18 Ne neon																																			
4 9.012 Be beryllium																		13 26.98 Al aluminium		14 28.09* Si silicon		15 30.97 P phosphorus		16 32.06* S sulfur		17 35.45* Cl chlorine		18 39.95 Ar argon																																			
11 22.99 Na sodium		12 24.31* Mg magnesium																		19 39.10 K potassium		20 40.08 Ca calcium		21 44.96 Sc scandium		22 47.87 Ti titanium		23 50.94 V vanadium		24 52.00 Cr chromium		25 54.94 Mn manganese		26 55.85 Fe iron		27 58.93 Co cobalt		28 58.69 Ni nickel		29 63.55 Cu copper		30 65.38* Zn zinc		31 69.72 Ga gallium		32 72.63 Ge germanium		33 74.92 As arsenic		34 78.96* Se selenium		35 79.90* Br bromine		36 83.80 Kr krypton									
37 85.47 Rb rubidium		38 87.62 Sr strontium		39 88.91 Y yttrium		40 91.22 Zr zirconium		41 92.91 Nb niobium		42 95.96* Mo molybdenum		43 [98] Tc technetium		44 101.1 Ru ruthenium		45 102.9 Rh rhodium		46 106.4 Pd palladium		47 107.9 Ag silver		48 112.4 Cd cadmium		49 114.8 In indium		50 118.7 Sn tin		51 121.8 Sb antimony		52 127.6 Te tellurium		53 126.9 I iodine		54 131.3 Xe xenon																													
55 132.9 Cs caesium		56 137.3 Ba barium		57-71 Hf hafnium		72 178.5 Ta tantalum		73 180.9 W tungsten		74 183.8 Re rhenium		75 186.2 Os osmium		76 190.2 Ir iridium		77 192.2 Pt platinum		78 195.1 Au gold		79 197.0 Hg mercury		80 200.6 Tl thallium		81 204.4* Pb lead		82 207.2 Bi bismuth		83 209.0 Po polonium		84 [209] At astatine		85 [210] Rn radon																															
87 [223] Fr francium		88 [226] Ra radium		89-103 Rf rutherfordium		104 [267] Db dubnium		105 [268] Sg seaborgium		106 [269] Bh bohrium		107 [270] Hs hassium		108 [269] Mt meitnerium		109 [278] Ds darmstadtium		110 [281] Rg roentgenium		111 [281] Cn copernicium		112 [285] Uut ununtrium		113 [286] Fl flerovium		114 [289] Uup ununpentium		115 [288] Lv livermorium		116 [293] Uus ununseptium		117 [294] Uuo ununoctium																															
*H: [1.00784, 1.00811] Li: [6.938, 6.997] B: [10.806, 10.821] C: [12.0096, 12.0116] N: [14.00643, 14.00728] O: [15.99903, 15.99977] Mg: [24.304, 24.307] Si: [26.084, 26.086] S: [32.059, 32.076] Cl: [35.446, 35.457] Br: [79.901, 79.907] Ti: [204.382, 204.385] Zn: 65.38(2) Se: 78.96(3) Mo: 95.96(2)																		57 138.9 La lanthanum																		58 140.1 Ce cerium		59 140.9 Pr praseodymium		60 144.2 Nd neodymium		61 [145] Pm promethium		62 150.4 Sm samarium		63 152.0 Eu europium		64 157.3 Gd gadolinium		65 158.9 Tb terbium		66 162.5 Dy dysprosium		67 164.9 Ho holmium		68 167.3 Er erbium		69 168.9 Tm thulium		70 173.1 Yb ytterbium		71 175.0 Lu lutetium	
89 [227] Ac actinium																		90 232.0 Th thorium		91 231.0 Pa protactinium		92 238.0 U uranium		93 [237] Np neptunium		94 [244] Pu plutonium		95 [243] Am americium		96 [247] Cm curium		97 [247] Bk berkelium		98 [251] Cf californium		99 [252] Es einsteinium		100 [257] Fm fermium		101 [258] Md mendelevium		102 [259] No nobelium		103 [262] Lr lawrencium																			