

TEMA 3

Mecánica cuántica.

Números cuánticos.

Orbitales atómicos.

Átomos polieletrónicos

Configuraciones electrónicas.

Apantallamiento.

Tabla periódica.

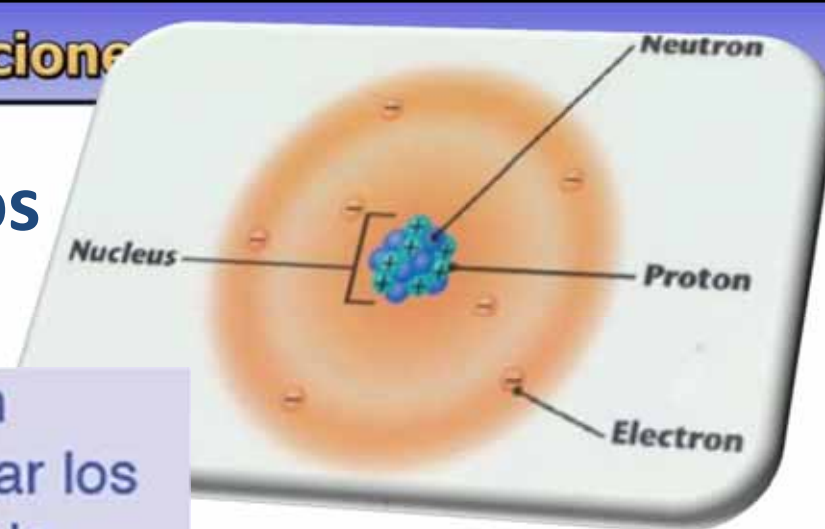


Estructura electrónica de los átomos multielectrónicos

El tratamiento de los átomos con mas de un electrón (**polielectrónicos**) 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



Átomos monoelectrónicos

átomos hidrogenoides: solo tienen un electrón



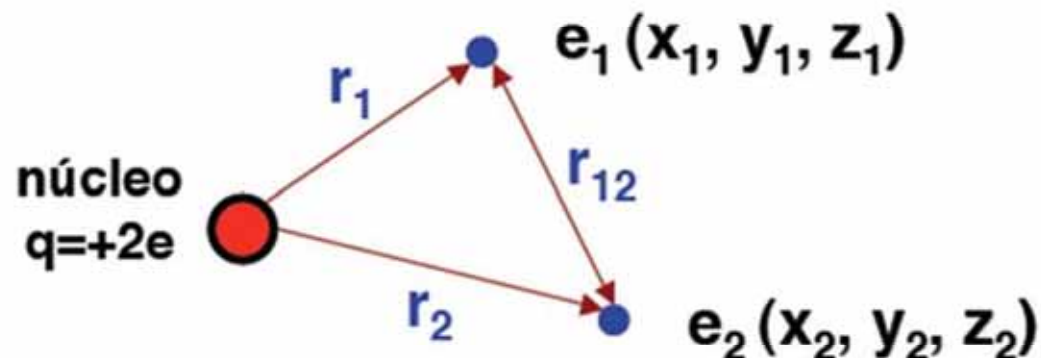
$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

Aplicamos la ecuación de Schrodinger

Encontramos soluciones exactas

Orbitales hidrogenoideos

Átomos polieletrónicos



Energía potencial V : ¿cuáles son las contribuciones?

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

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

La ecuación de Schrödinger no tiene
soluciones analíticas para átomos
polieletrónicos

Átomos multielectrónicos

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



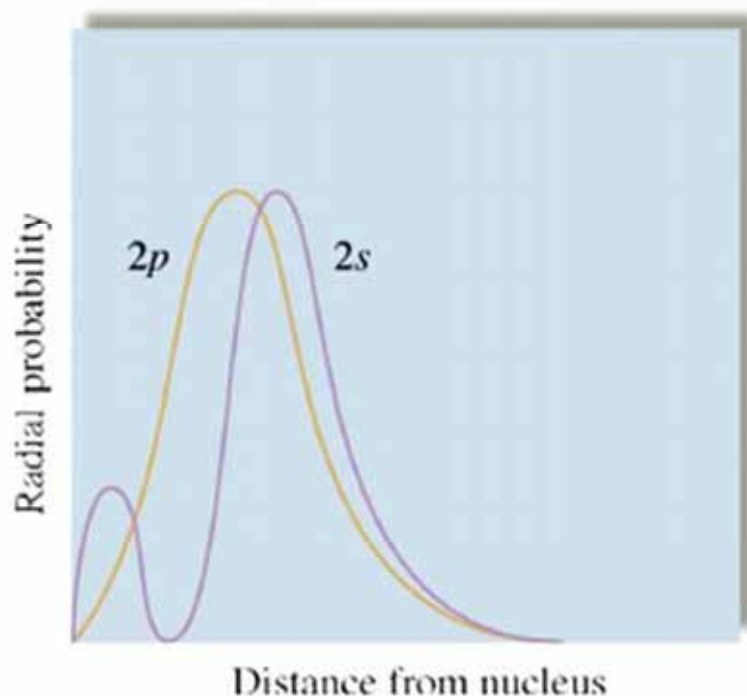
Penetración orbital

Capacidad de los electrones para estar próximo al núcleo

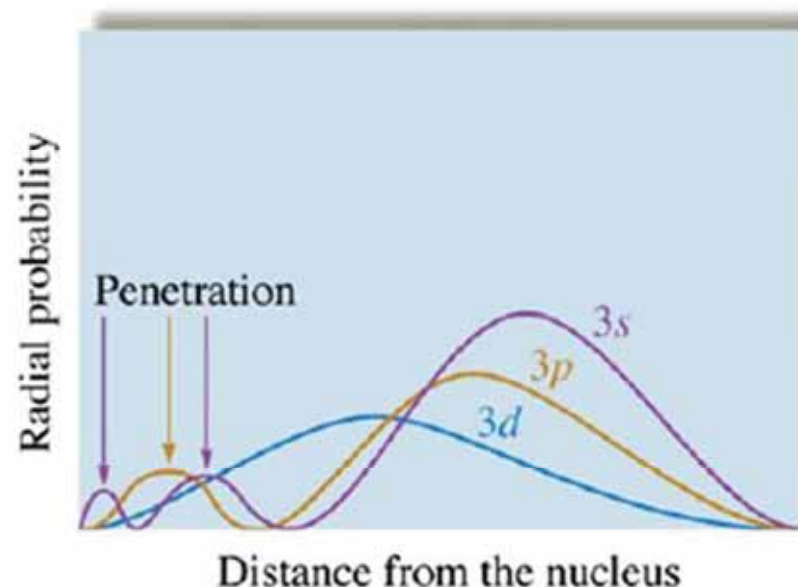
Para un mismo número cuántico principal n , cuanto menor sea el número cuántico l , mayor será su poder penetrante

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

$n = 2$ orbital

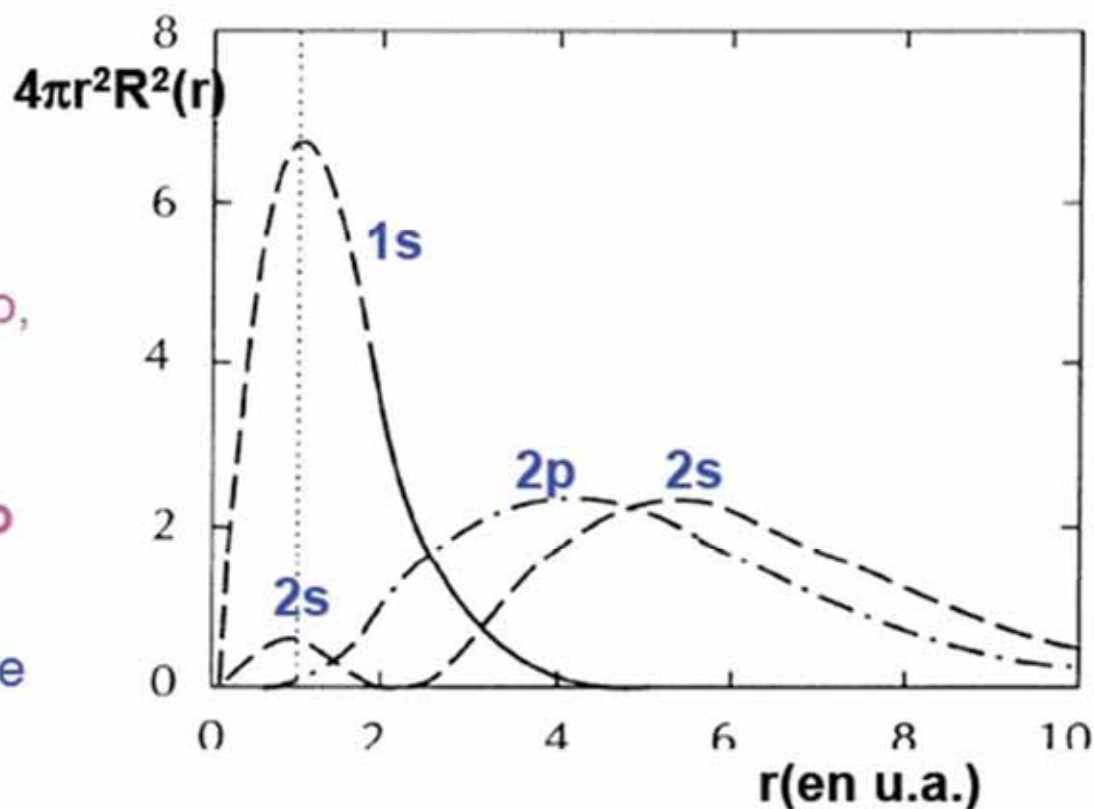


$n=3$ orbital



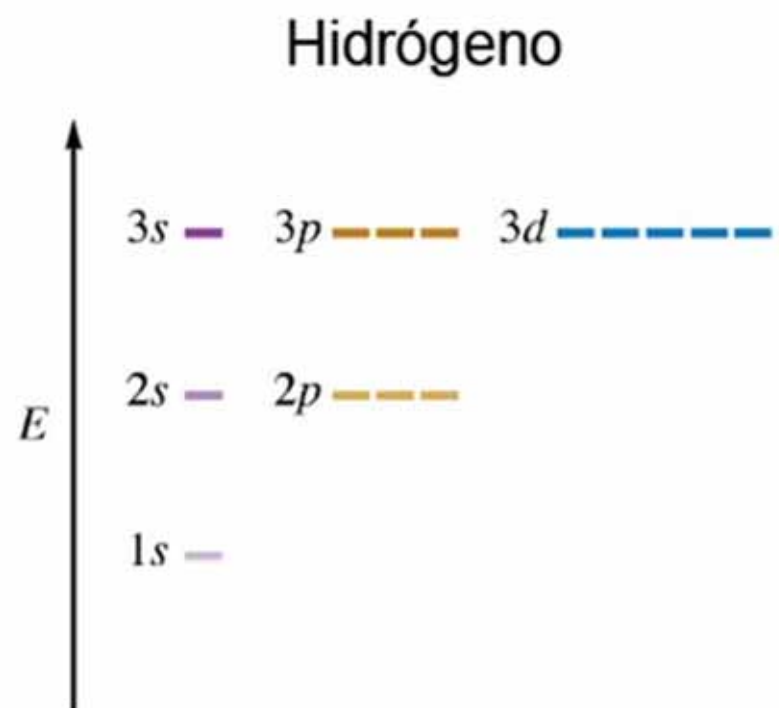
Poder penetrante

- 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

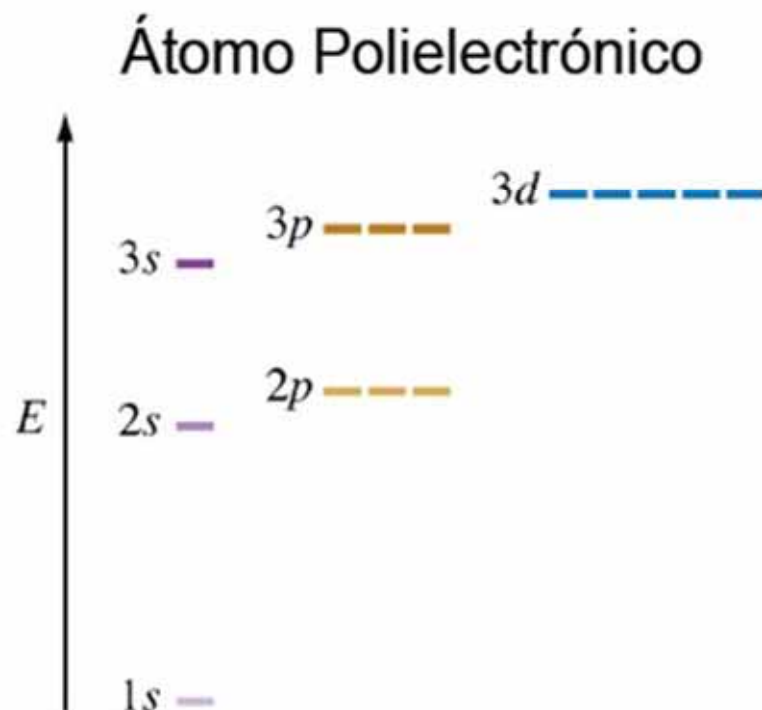


Poder penetrante: $s > p > d > f$

Energía de los orbitales en los átomos Polielectrónicos



Orbitales con el mismo número cuántico tienen la misma energía

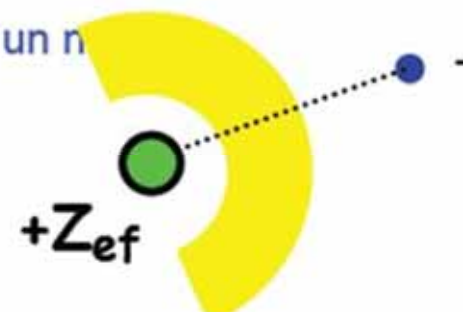


Se rompe la degeneración:

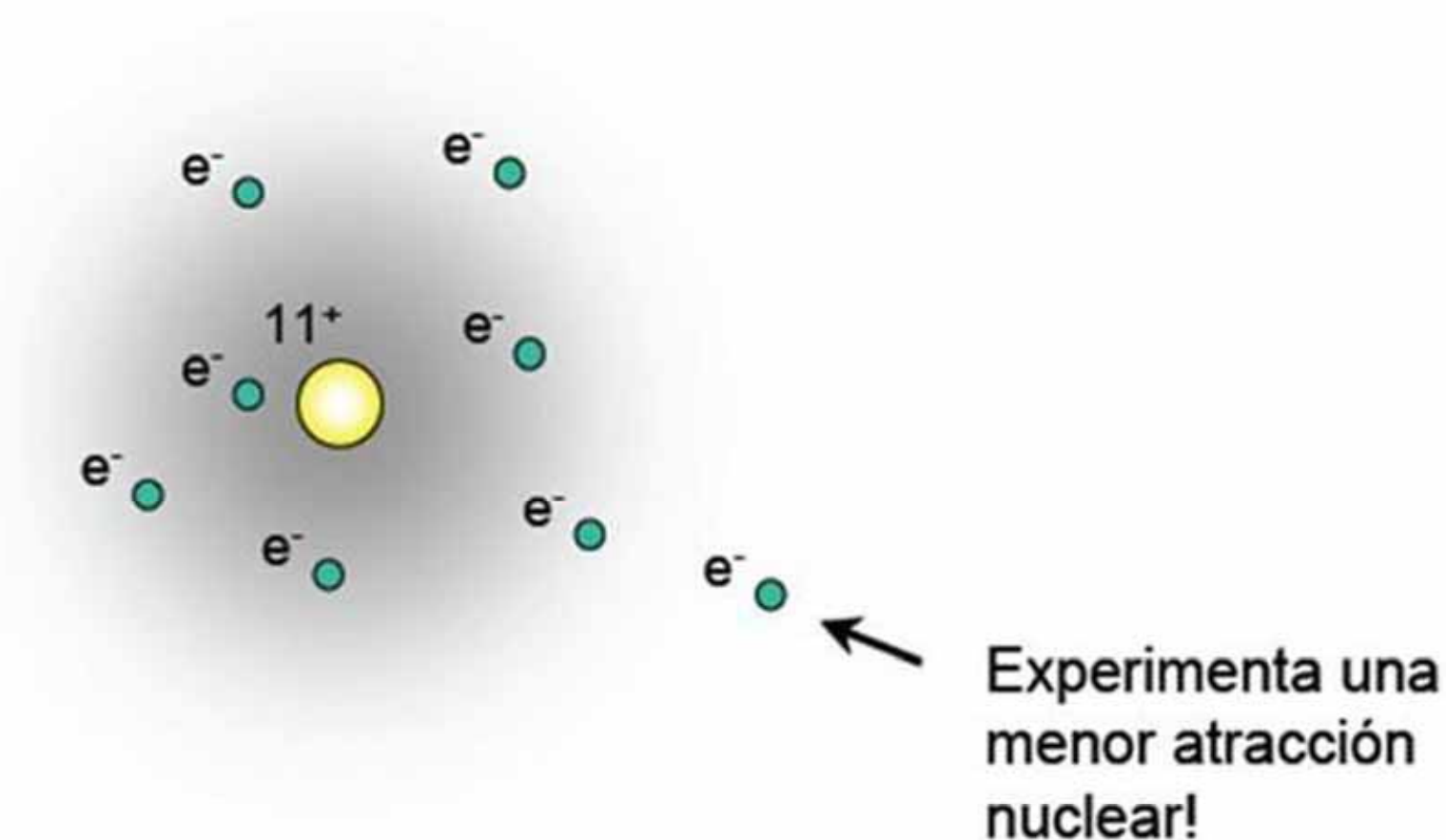
$$E_{ns} < E_{np} < E_{nd} < E_{nf}$$

Carga nuclear efectiva

- Un electrón dado en un átomo polielectrónico 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

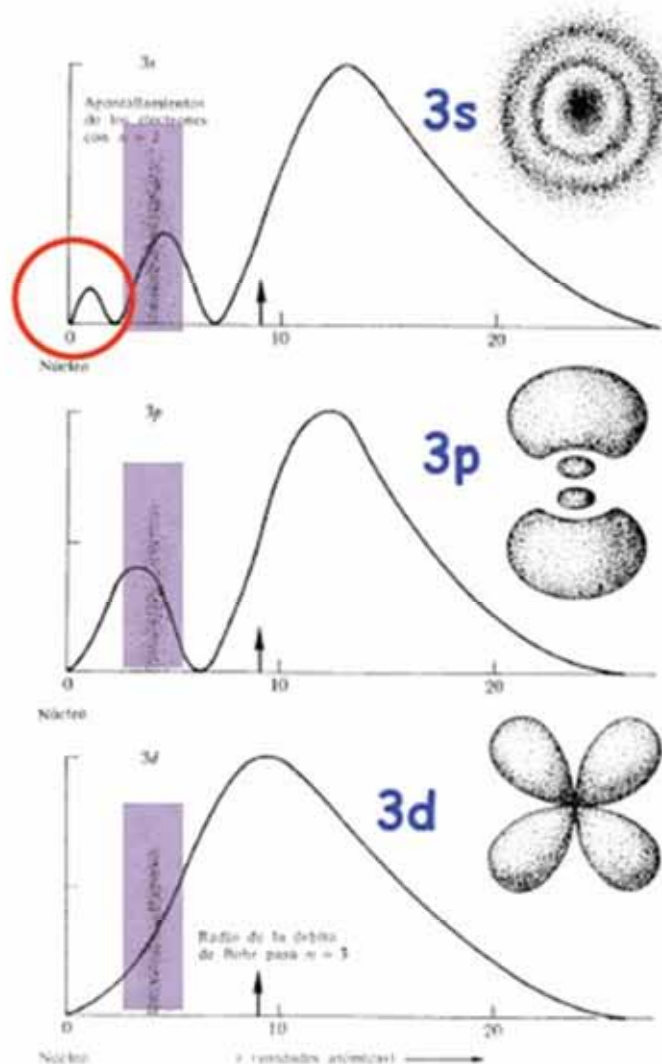


Apantallamiento del núcleo

- **Apantallamiento:** **S** es la disminución que experimenta la carga del electron 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 mas penetrantes que los 3p y estos mas 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 Zef 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 ($Z=3$) POLIELECTRONICO

- ◆ $EI(Li)_{exp} = 5,4 \text{ eV}$;
- ◆ $EI(Li)_{calc} = R_H (3^2/2^2) = 13,6 \times 2,25 = 30,6 \text{ eV} \rightarrow \text{inaceptable}$: 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 $Z=3$)

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



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

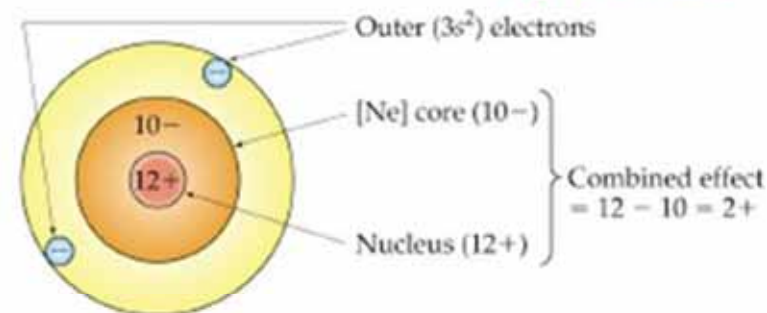
$$Z_{ef} = Z - S$$



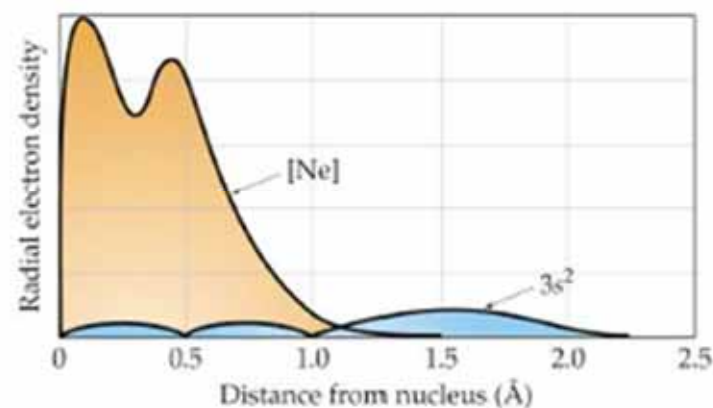
Carga nuclear efectiva

- 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 $+2$. ($Z_{ef} \approx 3,3$)

Mg: [Ne] $3s^2$



(a)



(b)

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

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

Reglas de Slater

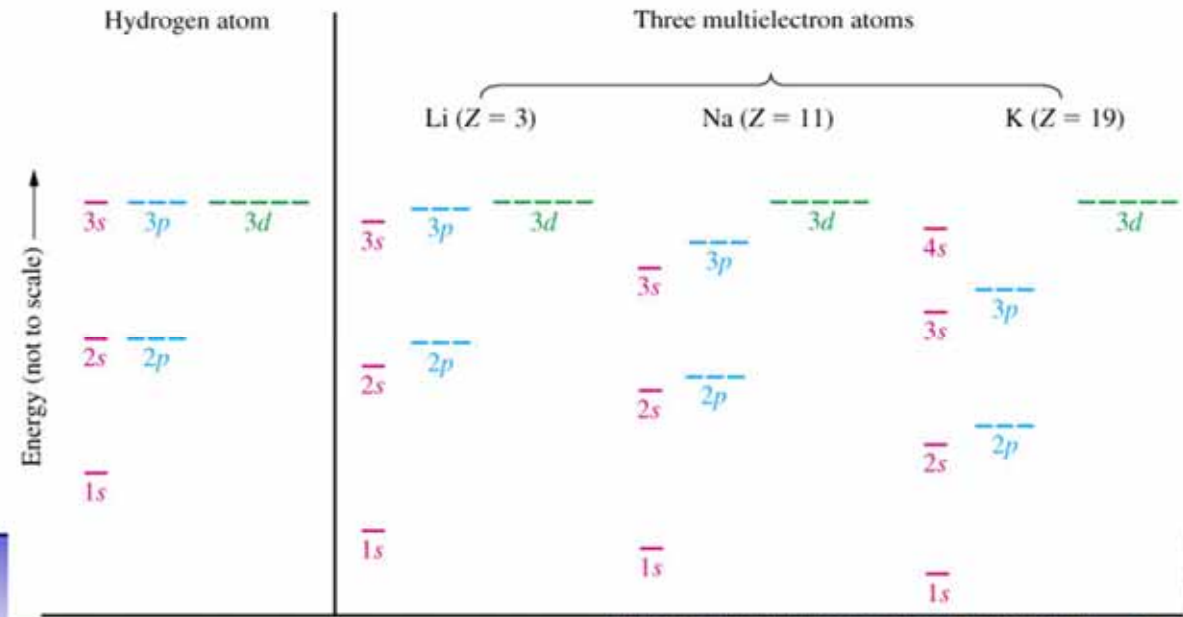
Consecuencia de la diferente penetración orbital

Consecuencia en los niveles energéticos

■ Se pierde la degeneración de los orbitales pertenecientes al mismo nivel n

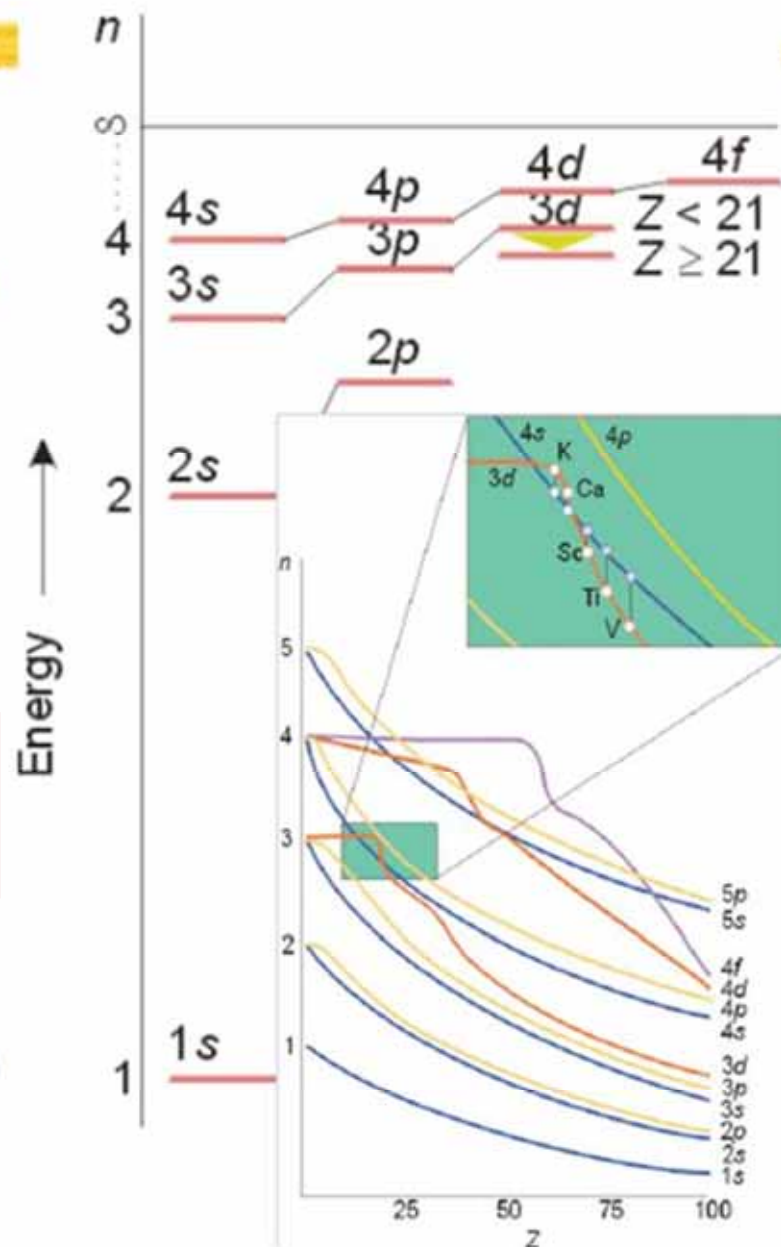
- ◆ El electrón s experimenta una carga Z_{ef} mayor, está más fuertemente atraído por el núcleo y en un nivel de energía más profundo (mas negativo) que el electrón p ; así mismo, el electrón p se encuentra en un nivel de energía más profundo que el d .
- ◆ $E(2s) < E(2p)$;
- ◆ $E(3s) < E(3p) < E(3d)$
- ◆ Para un mismo n : $E(ns) < E(np) < E(nd) \dots$
- ◆ 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):
 - $Z = 19(\text{K}), 20(\text{Ca}) \rightarrow E(4s) \leq E(3d)$ 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)

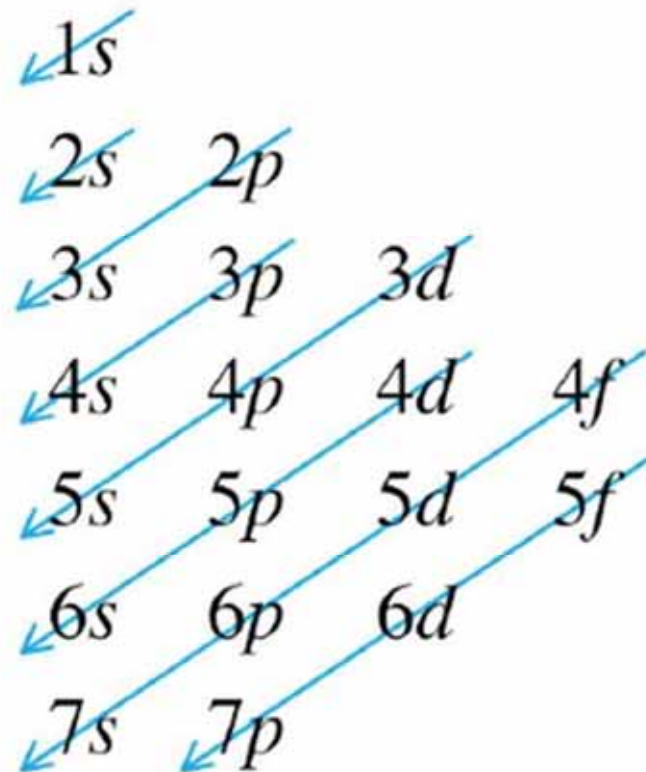


al pasar de un átomo al siguiente añadimos un protón al núcleo y un nuevo electrón en el orbital adecuado de modo que se minimice la energía total del sistema



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

Regla 2: Principio de exclusión de Pauli



W.E. Pauli
P. Nobel Física 1945

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

“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 $m_s = -1/2$.



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



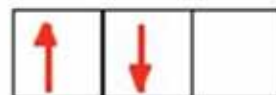
Regla 3: Regla de Hund

- “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.

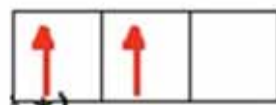
¿Son todos estos estados igualmente probables



estado de máxima energía



minimización de repulsión interelectrónica



estado fundamental

Capacidad de las capas electrónicas

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	

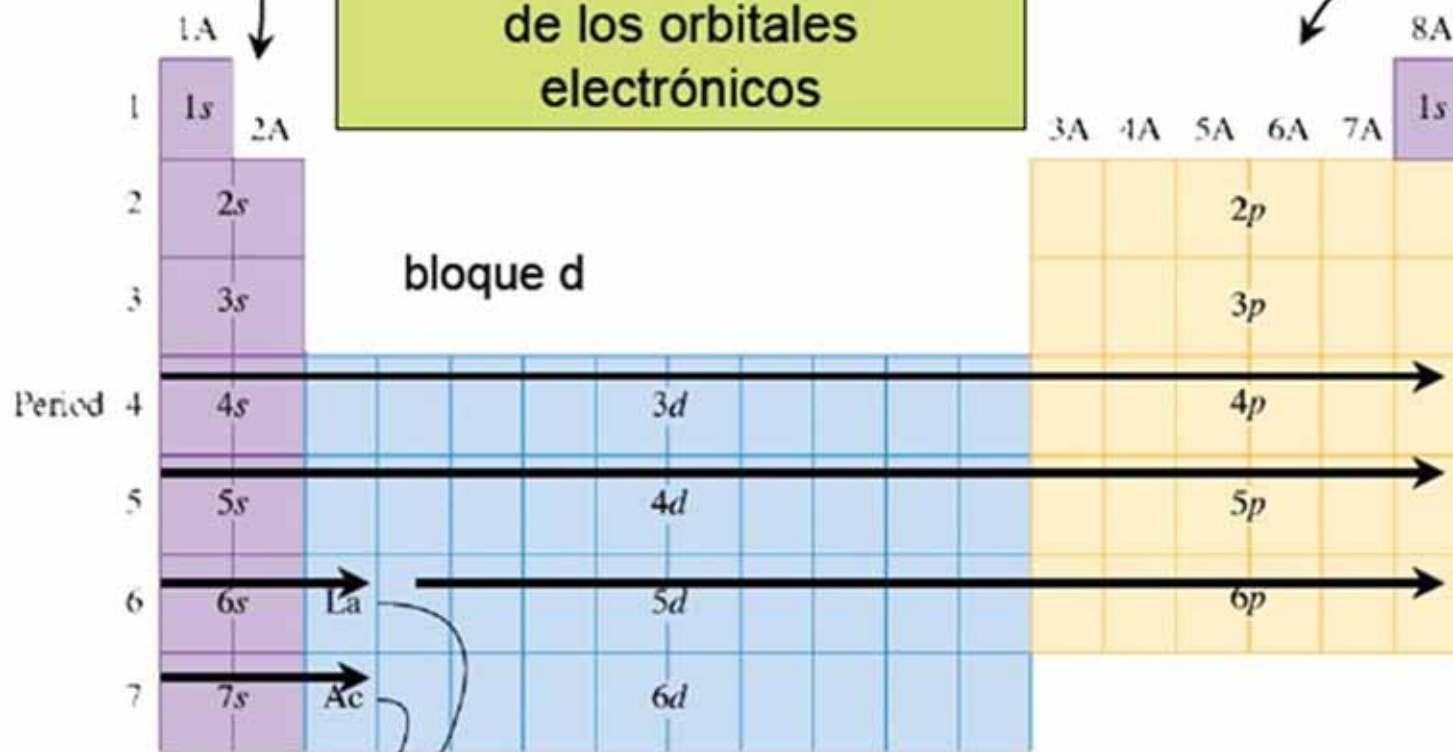
 $2n^2$


Llenando orbitales

bloque s

bloque p

Secuencia de ocupación
de los orbitales
electrónicos



Electron Configurations

lantánidos
actínicos

bloque f



Electron Configurations



Primer periodo

- 1^{er} período ($Z=1-2$):

Se llena el orbital 1s

	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							He

Configuración electrónica

Notación
spdf

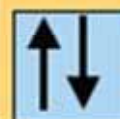
Diagrama de
orbitales

Hidrógeno: $Z=1$:

$1s^1$

Helio: $Z=2$:

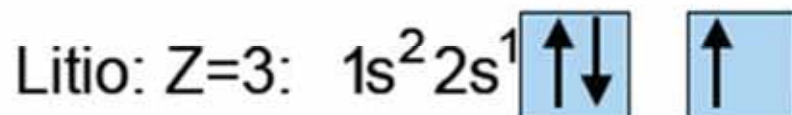
$1s^2$



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



Alternativa:

Li: [He]2s¹ [Electrones internos] Electrones de valencia
 [Core electrons] Outer electrons

Z	Elemento	Configuración
3	Li	[He] 2s ¹
4	Be	[He] 2s ²
5	B	[He] 2s ² 2p ¹
6	C	¿?

Los electrones de valencia determinan la química del elemento

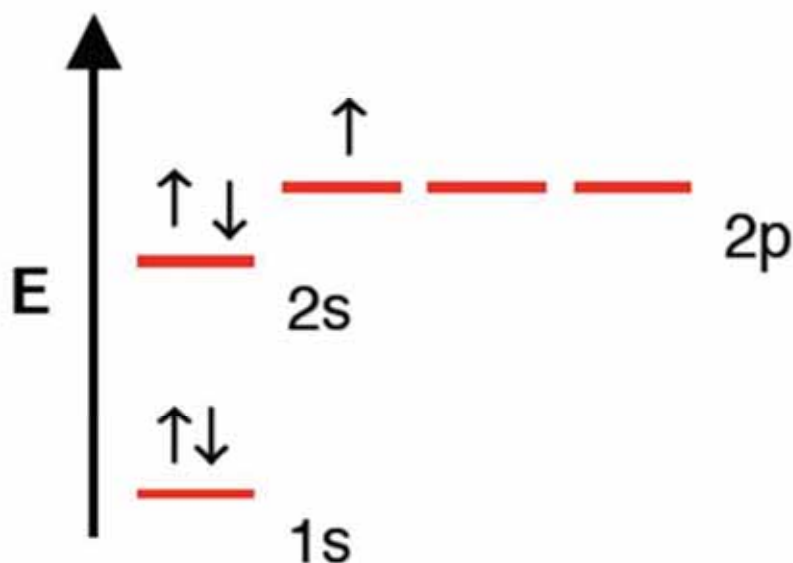


Segundo periodo

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

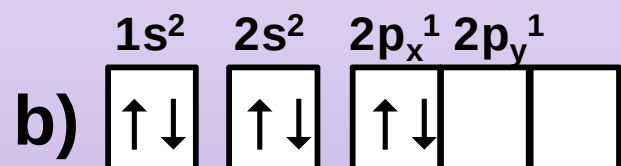
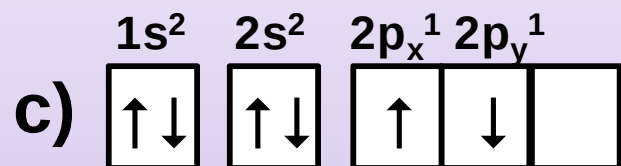
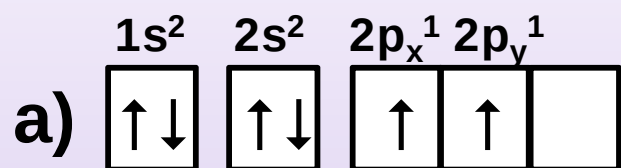
El electrón mas externo puede ocupar cualquiera de los orbitales 2p, con seis posibles combinaciones de numeros cuanticos:

$$\begin{array}{ccc}
 2 & 1 & \left\{ \begin{array}{c} -1 \\ 0 \\ +1 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} -1/2 \\ +1/2 \end{array} \right\} \\
 n & l & m_l \quad m_s
 \end{array}$$



Ejercicio

Para el C con $Z=6$ ¿Cuál será la configuración electrónica más probable?



c) ninguna de las anteriores

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



estado fundamental

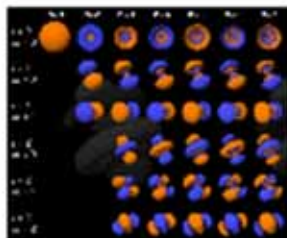


estado excitado, 122 kJ/mol



[◀ TEMA 2](#)

TEMA 3

[TEMA 4 ▶](#)

3.1. Dualismo onda-corpúsculo. Principio de incertidumbre. Mecánica ondulatoria. Números cuánticos.

3.2. Átomos multielectrónicos. Configuraciones electrónicas. Apantallamiento. Tabla periódica. Propiedades periódicas.

TEMA 3.1

-  [Transparencias TEMA 3 - Mecánica cuántica, números cuánticos](#)
-  [Transparencias TEMA 3 - Orbitales atómicos.](#)

TEMA 3.2

-  [Transparencias TEMA 3 - Átomos polielectrónicos, configuraciones y apantallamientos.](#)
-  [Practicar/comprobar configuraciones electrónicas](#)
-  [Transparencias TEMA 3 - Propiedades periódicas.](#)

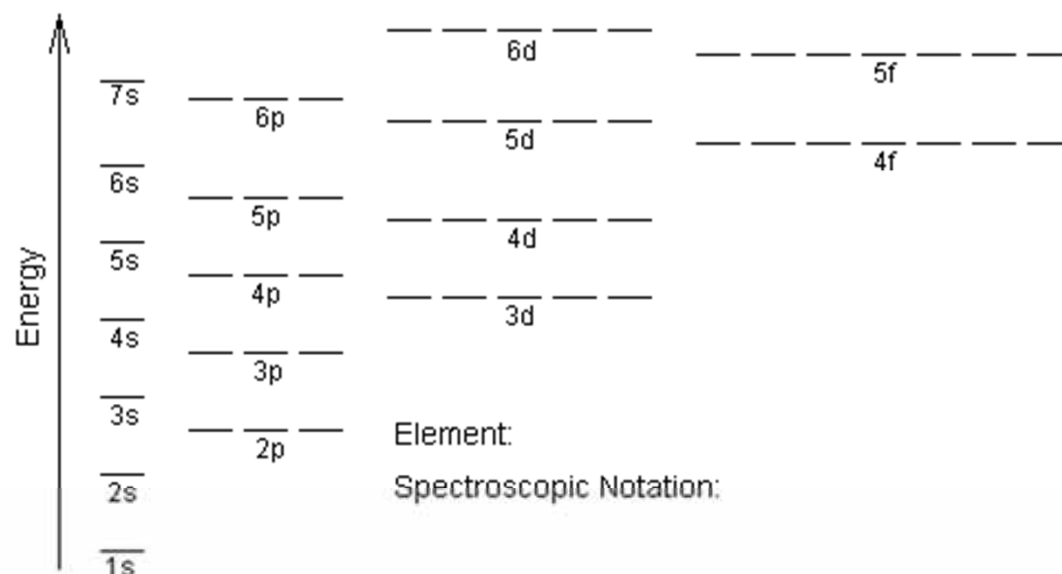
[◀ TEMA 2](#)[Volver a la página principal del curso](#)[TEMA 4 ▶](#)

Preview

File name:

AACFBWL0.dcr

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

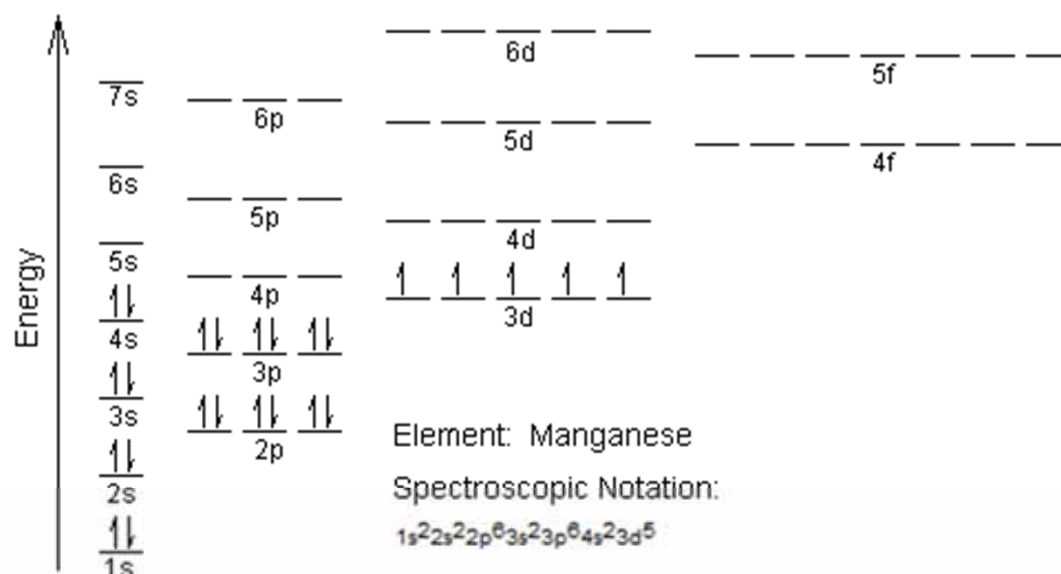


Preview

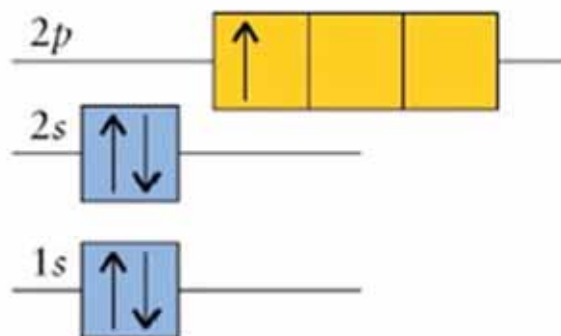
File name:

AACFBWL0.doc

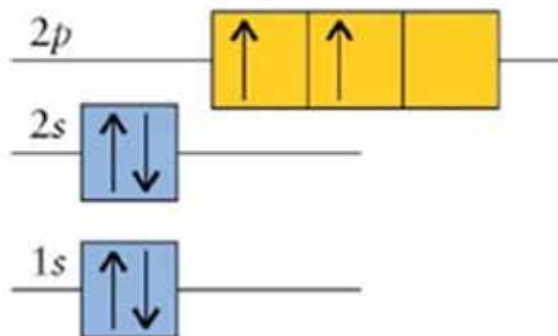
H																			He
Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg													Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra	Ac																	
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				



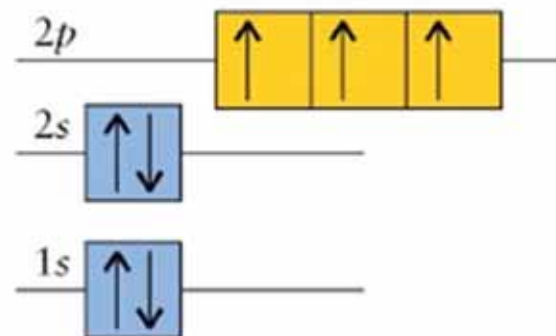
Segundo periodo



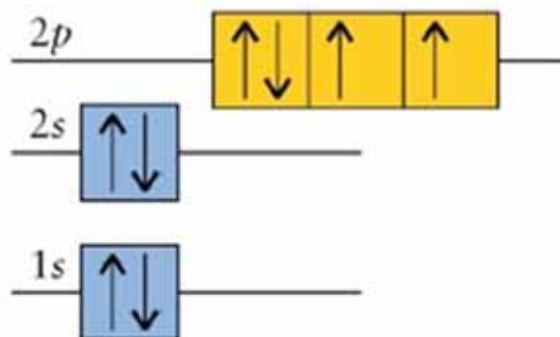
5 B $1s^2 2s^2 2p^1$



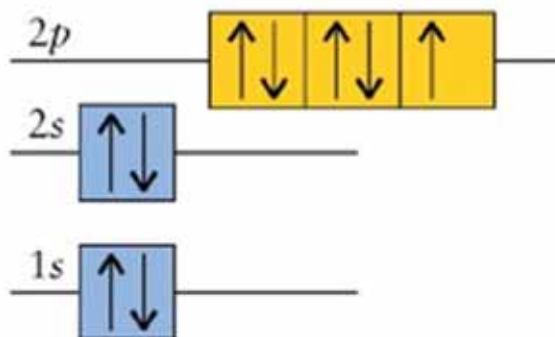
6 C $1s^2 2s^2 2p^2$



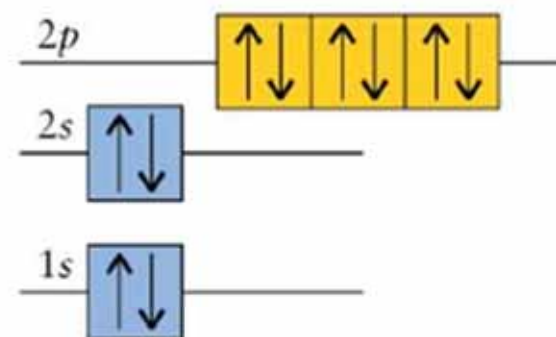
7 N $1s^2 2s^2 2p^3$



8 O $1s^2 2s^2 2p^4$, [He] $2s^2 2p^4$



9 F $1s^2 2s^2 2p^5$, [He] $2s^2 2p^5$



10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$, [He] $2s^2 2p^6$

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

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

K: [Ar] 4s ¹	Ca: [Ar] 4s ²
-------------------------	--------------------------

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

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

1ª serie transición irregularidades:

Cr: [Ar]3d⁵4s¹ Cu: [Ar]3d¹⁰4s¹

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,

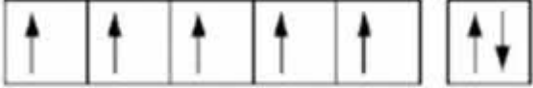
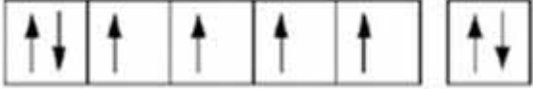
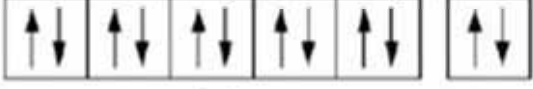
Co [Ar]4s² 3d⁷,

Ni [Ar]4s² 3d⁸,

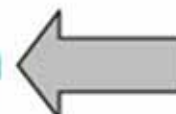
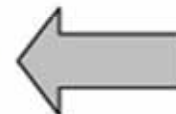
Cu [Ar]4s¹ 3d¹⁰,

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
	3d 4s	

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 periodo (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]
4d¹⁰5s²5p¹

Sn: [Kr]
4d¹⁰5s²5p²

Sb: [Kr]
4d¹⁰5s²5p³

Te: [Kr]
4d¹⁰5s²5p⁴

I: [Kr]
4d¹⁰5s²5p⁵

Xe: [Kr]
4d¹⁰5s²5p⁶

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,

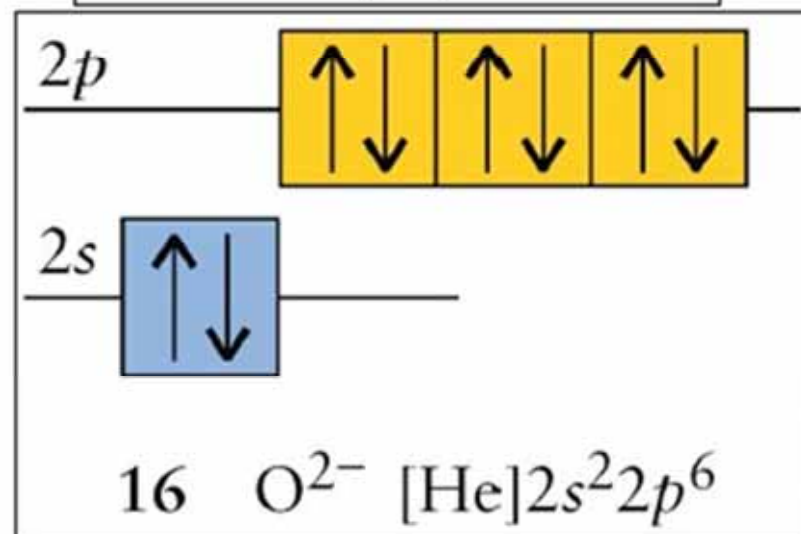
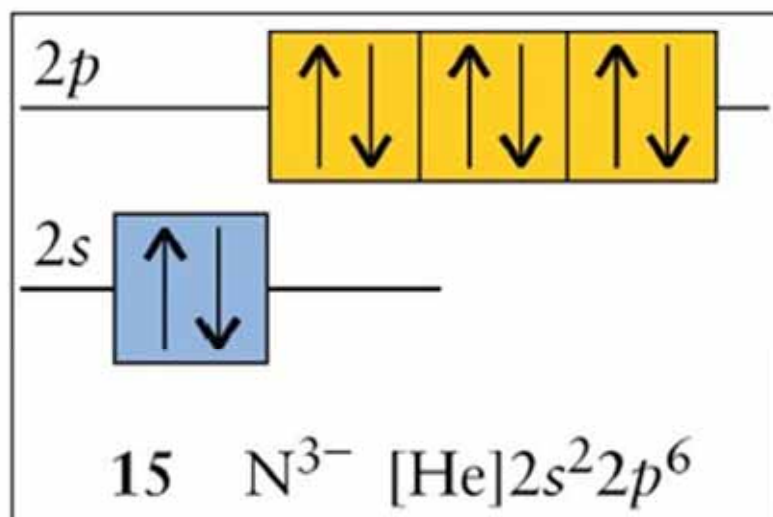
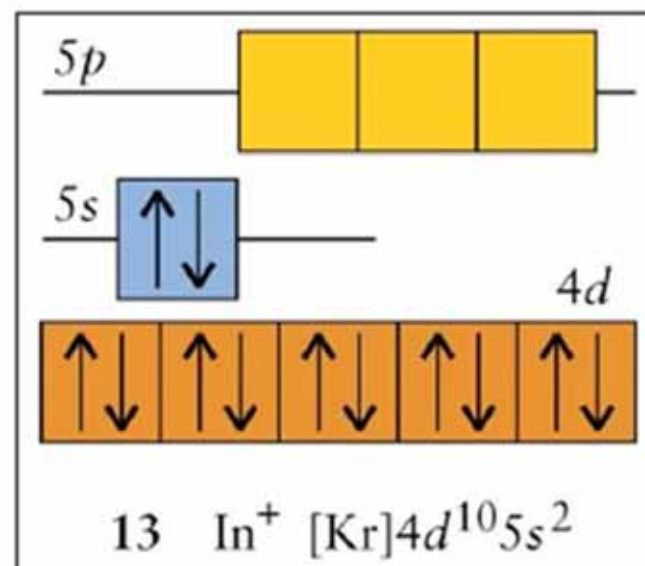
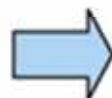
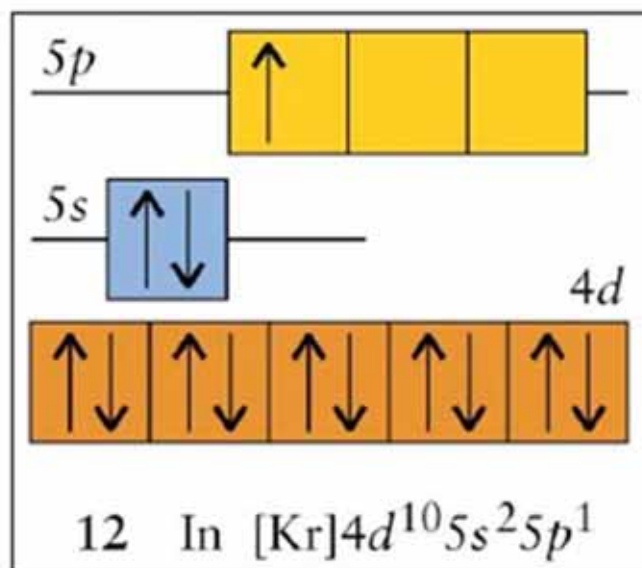
Pd [Kr]5s⁰ 4d¹⁰,

Ag [Kr]5s¹ 4d¹⁰,

Cd [Kr]5s² 4d¹⁰.

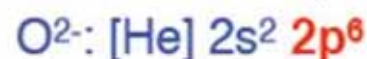


Configuración electrónica de iones



Configuración electrónica de iones

■ Iones de elementos representativos



■ 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**



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+} : $[Rn] 5f^{14} 6d^0 7s^0$



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 la 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 electrones apantallantes	Electrón apantallado	
	s o p	d o f
n	0,35	0,35 (1,00 si es s o p)
$n-1$	0,85	1,00
$n-2$	1,00	1,00



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 $s = 5 \cdot 0,35 + 2 \cdot 0,85 = 3,45$

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

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)	$13 \times 0,85$
$n \leq 2$	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)	$8 \times 1,0$
$n=1$	2(s)	$2 \times 1,0$
apantallamiento		19,4
carga nuclear efectiva		5,6