



Universitat de les Illes Balears
Departament de Química

1. Teniendo en cuenta los valores de la tabla de Z_{ef} para los primeros 18 elementos

a) ¿Cuánto vale la constante de pantalla del orbital 1s en el átomo de He?

$$\sigma_{1s} (He) = Z - Z_{ef} = 2 - 1,69 = 0,31$$

b) ¿Cuánto vale la constante de pantalla del orbital 1s en el átomo de Li, B y C?

$$\sigma_{1s} (Li) = Z - Z_{ef} = 3 - 2,69 = 0,31$$

$$\sigma_{1s} (B) = Z - Z_{ef} = 5 - 4,68 = 0,32$$

$$\sigma_{1s} (C) = Z - Z_{ef} = 6 - 5,67 = 0,33$$

c) Teniendo en cuenta el primer valor del átomo de He, haga una estimación de la contribución de los orbitales externos al apantallamiento de estos orbitales 1s en el Li, B y C.

$$Li: \sigma_{1s} (Li) - \sigma_{1s} (He) = 0,31 - 0,31 = 0$$

$$B: \sigma_{1s} (B) - \sigma_{1s} (He) = 0,32 - 0,31 = 0,01 \text{ (3\%)}$$

$$C: \sigma_{1s} (C) - \sigma_{1s} (He) = 0,33 - 0,31 = 0,02 \text{ (6\%)}$$

d) ¿Qué conclusión se puede extraer sobre la influencia de los orbitales externos en los electrones de tipo 1s?

Que el apantallamiento que un orbital externo, en este caso los electrones 2s y 2p ejercen sobre el interno, 1s, es muy pequeño, sobre todo si se compara con el apantallamiento mutuo de los dos electrones en el mismo nivel (1s).

2. Calcule el valor de σ_{2s} en el Li y en el Be

a) ¿Cuánto contribuye cada electrón 1s al apantallamiento de un 2s en el Li?

$$\sigma_{2s} (Li) = Z - Z_{ef} = 3 - 1,28 = 1,72 \text{ (causa por los dos electrones 1s)} \Rightarrow \text{contribución de cada 1s es : } 1,72/2 = 0,86$$

b) Asumiendo que la contribución de los 1s es igual en el Li que en el Be ¿Cuánto contribuye cada electrón 2s al apantallamiento de un 2s?

$\sigma_{2s}(\text{Be}) = Z - Z_{\text{ef}} = 4 - 1,91 = 2,09$ (causa por los dos electrones 1s y uno 2s) =>

La contribución del 2s a la pantalla es = total – contribución de los 1s. Es decir que la contribución del electrón 2s a la pantalla de su electrón compañero es = $2,09 - 1,72 = 0,37$

- c) ¿Es este valor mayor o menor que el efecto de un 1s sobre un 1s? (cuestión 1.a) Dé una explicación a este hecho.

*Es ligeramente mayor. Al ser el orbital **1s más penetrante que un 2s**, el electrón **1s está menos apantallado** (por otro de sus mismas características) de lo que lo estaría el 2s (por otro igual a él)*

3. Observe los valores de Z_{ef} para el orbital 2p en el Ne y en el B. Asumiendo para ellos funciones radiales hidrogenoides,

- a) Calcule cual sería el tamaño medio del orbital en ambos casos

$$\overline{r_{n,l}} = \frac{n^2 a_0}{Z_{\text{ef}}} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

Boro: $Z_{\text{ef}}(2p) = 2,42$; $n=2$; $l=1$

$$\overline{r_{2,1}} = \frac{4a_0}{2,42} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{2}{4} \right] \right\} = 2,06a_0$$

Neón: $Z_{\text{ef}}(2p) = 5,76$; $n=2$; $l=1$

$$\overline{r_{2,1}} = \frac{4a_0}{5,76} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{2}{4} \right] \right\} = 0,866a_0$$

- b) ¿Qué se puede concluir respecto al tamaño de ambos átomos?

Si asumimos que el tamaño de un átomo está directamente relacionado con el tamaño de su orbital de valencia más externo, entonces habrá que concluir que el tamaño del Neón ha de ser algo menor de la mitad del tamaño del Boro.

- c) En qué caso estará un electrón 2p más atraído por el núcleo

Evidentemente en el caso del Ne, ya que su radio es menor y la Z_{ef} es mayor (atracción coulombiana entre el núcleo y el electrón)

- d) De acuerdo con la variación del orbital 2p a lo largo de la serie desde el B al Ne ¿Cómo espera que sea el tamaño relativo de estos átomos?

El tamaño de los átomos irá disminuyendo del B al Ne, ya que tienen igual n y l de sus electrones externos, lo que implica que la carga nuclear efectiva irá aumentando a medida que aumenta Z y

como se ha visto en los apartados anteriores, este aumento de Z_{ef} (en el denominador de la expresión que da el tamaño medio del orbital) induce una disminución del tamaño del orbital

4. Observe el valor de la carga efectiva sobre el orbital 2s en el Li y 3s en el Na. Asumiendo para ellos funciones radiales hidrogenoides,

a) Calcule cual sería el radio medio en ambos casos

$$\overline{r_{n,l}} = \frac{n^2 a_0}{Z_{ef}} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

Li: $Z_{ef}(2s) = 1,28$; $n=2$; $l=0$

$$\overline{r_{2,0}} = \frac{4a_0}{1,28} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{0}{4} \right] \right\} = 4,68a_0$$

Na: $Z_{ef}(3s) = 2,51$; $n=3$; $l=0$

$$\overline{r_{3,0}} = \frac{9a_0}{2,51} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{0}{9} \right] \right\} = 5,38a_0$$

- b) ¿Qué se puede concluir respecto al tamaño de ambos átomos?

Si, como en el ejercicio anterior, asumimos que el tamaño de un átomo está directamente relacionado con el tamaño de su orbital de valencia más externo, entonces habrá que concluir que el tamaño del Sodio ha de ser mayor que el tamaño del Litio.

- c) Compensa, en cuanto al tamaño del orbital se refiere, el aumento de carga efectiva en el último electrón del Na respecto al Li el hecho de que en su función de onda n tenga un valor mayor.

No, no compensa. Aunque la carga efectiva en el Na sea mayor que en el Li, el hecho de que la dependencia del radio promedio del orbital con el número cuántico n sea cuadrática, mientras que la dependencia con Z_{ef} sea tan solo con su inversa (no con el cuadrado de su inversa), tiene como resultado una mayor relevancia para el cambio de n que para el aumento en Z_{ef} .

- d) Con los resultados del problema 3 y los del 4 ¿Qué puede concluir respecto al tamaño de los átomos de acuerdo al valor del número cuántico n de la función de onda de sus electrones de valencia?

Que para la misma configuración electrónica relativa, es decir para los átomos de los elementos de un mismo grupo, a media que aumenta n , aumenta el tamaño atómico del elemento.

5. Observe el valor de las Z_{ef} de los electrones 2s y 2p desde el Na al Ar. ¿Es cierta en estos casos que $Z_{\text{ef}}(s) > Z_{\text{ef}}(p) > Z_{\text{ef}}(d) > Z_{\text{ef}}(f)$? ¿Cuándo sí es cierta esta afirmación?

Tanto para el Na como para el Ar, los valores de la tabla indican que $Z_{\text{ef}}(s) < Z_{\text{ef}}(p)$. En estos dos casos la capa L, a la que pertenecen los orbitales 2s y 2p, no es la de valencia de los átomos. En los dos casos su capa de valencia es la M.

La regla a la que se refiere el problema **sólo es cierta para los orbitales de la capa de valencia.**

6. Busque el Niobio, Nb, en la tabla periódica de los elementos. ¿A qué grupo pertenece? ¿A qué periodo pertenece? Por tanto ¿Cuál debe ser la configuración de sus electrones de valencia en su estado fundamental? ¿Cuál es su configuración electrónica completa? Escribala de acuerdo con la nomenclatura spdf, completa y de gas noble y la nomenclatura por cajas, completa y de gas noble?

Pertenece al grupo 5. Es un elemento metálico de transición.

Pertenece al periodo 5, por tanto, debe tener la subcapa 5s llena, la subcapa 4d parcialmente llena y la subcapa 4f vacía.

Como es del grupo 5, quiere decir que tiene 3 electrones d, por tanto la configuración electrónica de sus electrones de valencia es: $4d^3 5s^2$.

Configuración completa:

Nomenclatura espectroscópica (spdf): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^5 4p^6 4d^3 5s^2$

El gas noble anterior al Nb es el Criptón: Kr, por tanto:

Nomenclatura spdf de gas noble: $[Kr] 4d^3 5s^2$

Nomenclatura por cajas:

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
1s	2s	2p			3s	3p			3d			4s		
↑↓	↑↓	↑↓	↑		↑	↑							↑↓	
4p					4d							5s		

Nomenclatura por cajas y gas noble:

$[Kr]$:

↑	↑	↑			↑↓
4d					5s

7. Establezca la configuración electrónica fundamental (spdf y de cajas) de los átomos con número atómico 17 y 29. Escriba para los dos una configuración electrónica de sus átomos excitados.

El átomo de **Z=17** es el Cl, 3er periodo, grupo 17 o VII, por tanto tiene 7 electrones de valencia del grupo principal $3s^2 3p^5$

Configuración completa spdf: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Nomenclatura por cajas:

$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$
1s	2s	2p			3s	3p		

Configuración de un Cl*: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 3d^1$

El átomo de **Z=29** es el Cu, elemento de transición que pertenece al grupo 11 y al 4º periodo, por tanto tiene 11 electrones de valencia que según la regla general debería ser: $3d^9 4s^2$. No obstante, es una excepción cuya configuración fundamental es $3d^{10} 4s^1$. Por tanto

Configuración completa: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

Nomenclatura por cajas:

$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\downarrow$
1s	2s	2p			3s	3p			3d				4s	

Configuración de un Cu*: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$

8. Indicar cuales de las siguientes configuraciones electrónicas son posibles para un elemento en su estado fundamental, cuales lo serían para estados excitados y cuales son inaceptables en cualquier caso: $2s$, $1s1p$, $1s^2 2s^2 2p^3$, $1s^2 2s^3 2p^5$, $1s^2 2s^2 2p^8$, $1s^2 2s^2 2p^6 2d^2$.

2s: De un átomo con un solo electrón, podría ser una configuración de un estado excitado.

1s1p: Inaceptable, el orbital 1p no existe.

$1s^2 2s^2 2p^3$: Es la configuración de un estado fundamental, del N.

$1s^2 2s^3 2p^5$: Inaceptable, no puede haber 3 electrones con la misma función de onda 2s.

$1s^2 2s^2 2p^8$ Inaceptable, no puede haber 8 electrones con la misma función de onda 2p

$1s^2 2s^2 2p^6 2d^2$ Inaceptable, porque el orbital 2d no existe

9. Escribir la configuración electrónica fundamental de los siguientes átomos e iones: Ar, Cl⁻, S²⁻, K⁺ y Ca²⁺ ¿Qué característica tienen en común?

Ar: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Cl⁻: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

S²⁻: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

K⁺: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Ca²⁺: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Son isoelectrónicos y tienen la misma configuración electrónica.

10. ¿Cuál es la configuración electrónica general de los halógenos?
¿Cuántos electrones de valencia tienen y cual es su configuración electrónica?

F: [He] $2s^2p^5$

Cl: [Ne] $3s^2p^5$

Br: [Ar] $3d^{10} 4s^2p^5$

I: [Kr] $4d^{10} 5s^2p^5$

At: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2p^5$

Todos tienen 7 electrones de valencia de configuración electrónica $ns^2 np^5$

11. ¿Cuántos electrones desapareados hay en el átomo de Cr en su estado fundamental? ¿Cuál es la valencia máxima posible para este elemento? Existe algún compuesto en el que el Cr actúe con esta valencia ¿Cuál?

El Cr, con $Z=24$, es un elemento cuya configuración electrónica de su estado fundamental es una excepción a la regla general:

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$

Su valencia máxima está constituida por el electrón $4s$ y los 5 electrones d , en total 6. Actúa con valencia 6 en:

el óxido de cromo (VI): CrO_3 ,

el ácido crómico H_2CrO_4

el anión cromato: $CrO_4^{=}$

el ácido dicrómico $H_2Cr_2O_7$

el anión dicromato: $Cr_2O_7^{=}$

12. ¿Cuál es la configuración electrónica del átomo con el número atómico 25? ¿Cuántos electrones de valencia tiene? ¿Cuántos electrones desapareados tiene en su estado fundamental?

Con $Z=25$ es el elemento siguiente al Cr, el Manganese: Mn

Configuración electrónica por cajas:

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↓	↑	↓↑
1s	2s	2p			3s	3p			3d				4s	

Tiene, por tanto **7 electrones de valencia**, 2 de tipo s y 5 de tipo d.

En su estado fundamental tiene desapareados los **5 electrones d**.