Universitat de les Illes Balears
Departament de Química

Ejercicios para el Seminario de día 1 de Diciembre de 2008. (la solución debe entregarse después de vacaciones de Navidad 2008-2009)

En la tabla se dan algunos datos de propiedades atómicas de los elementos de cuarto periodo. (Fuente: Web Elements: http://www.webelements.com/)

	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
I_1(kJ/mol)	418,8	589,8	633,1	658,8	650,9	652,9	717,3	762,5	760,4	737,1	745,5	906,4	578,8	762	947,0	941,0	1139,9	1350,8
R_{cov}(pm)	203	176	170	160	153	139	139	132	126	124	132	122	122	120	119	120	120	116
r (pm) (orb.val)	230	183,9	171,6	162,2	154,4	162,9	141,9	136,6	131,9	127,6	137,4	120,0	140,0	119,8	106,6	96,8	89,2	82,9
Zef, (orb.val)	3,50	4,40	4,63	4,82	4,98	5,13	5,28	5,43	5,58	5,71	5,84	5,97	6,22	6,78	7,45	8,29	9,03	9,77
A(kJ/mol)	48,4	2,37	18,1	7,6	50,6	64,3	0	15,7	63,7	112	118,4	0	28,9	119	78	195,0	324,6	0

a) Represente los valores de la Zef de su orbital de valencia más externo (calculada mediante el método del Campo Autoconsistente de HF) en función del número del grupo al que pertenecen. Represente, también en función del número del grupo a que pertenece el elemento y en la misma figura anterior, los valores de la Zef de dichos orbitales calculados por el método aproximado de Slater. Discuta las similitudes y las diferencias entre ambos conjuntos de valores y discuta la utilidad de las aproximaciones de Slater.

b) Calcule, con los valores de Zef de la tabla y utilizando el método de la aproximación orbital, el valor de la energía del orbital de valencia más externo de todos los elementos del periodo cuarto. Utilice para ello un valor de $R=1{,}097373\ 10^{7}\ m^{-1}$. Represente estos resultados obtenidos en función del número del grupo al que pertenecen. Represente en la misma gráfica los valores experimentales de los potenciales de ionización de los elementos que se dan en la tabla. Discuta las similitudes y las diferencias entre ambos conjuntos de valores.

c) Calcule, mediante el método de la aproximación orbital, los valores de la energía del orbital de valencia más externo (primer potencial de ionización) a partir de los valores de Zef determinados con la aproximación de Slater. Represente los resultados obtenidos en la misma representación gráfica del apartado b) anterior. Discuta el grado de validez de las aproximaciones realizadas.

d) Represente el valor de A, afinidad electrónica, en función del número del grupo al que pertenece el elemento. Discuta la variación de esta afinidad electrónica en función de la configuración electrónica del elemento neutro y de la del anión correspondiente.
e) Represente para la misma variable que en los casos anteriores, el valor del radio covalente del elemento que se da en la tabla. En la misma figura represente también el radio del orbital de valencia más externo que se da en la tabla (determinado con una buena metodología teórica). Haga una estimación del radio medio del orbital de valencia más externo, de acuerdo a la fórmula obtenida en la aproximación orbital. Represéntela también en la misma figura y discuta las similitudes y diferencias con las anteriores representaciones. Saque conclusiones en relación al grado de validez de las aproximaciones realizadas.