

Átomos Multielectrónicos

Pedro Velarde

Departamento de Ingeniería Energética
Instituto de Fusión Nuclear
Universidad Politécnica de Madrid

4 de mayo de 2017



Átomos Multielectrónicos

- ▶ Para estudiar un átomo con varios electrónicos tenemos resolver la ecuación de Schrödinger para varias partículas, con un total de $N + 1$ (N electrones y un núcleo) coordenadas espaciales y espín.
- ▶ Una primera aproximación es suponer el CM en el núcleo, ya que se tiene una relación de masas $Am_n/Zm_e \gg 1$, mucho más pesado que los N electrones.
- ▶ Con esta hipótesis, nos queda resolver

$$H\psi(1, 2, \dots, N) = E\psi(1, 2, \dots, N) \quad (1)$$

con

$$\begin{aligned} H &= \sum_k (T(k) + V_N(r_k)) + \sum_{k>j} V(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|) \\ T(k) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k \\ V_N(r_k) &= -\frac{Zq^2}{r_k} \\ V(r) &= \frac{q^2}{r} \end{aligned}$$

- ▶ Para cada estado del átomo que encontremos resolviendo (1) tenemos que antisimetrizar ψ , dado que los electrones son fermiones, y se aplica el principio de exclusión de Pauli.
- ▶ Es precisamente la exclusión lo que confiere la estructura de capas al átomo.



Átomos Multielectrónicos

- ▶ Estudiaremos el átomo en aproximaciones sucesivas, desde el modelo más simple de partículas independientes al modelo de Hartree-Fock.
- ▶ Todos ellos se aplican a otros sistemas físicos tales como los electrones de un metal o los neutrones y protones en el núcleo.
- ▶ Al principio intentaremos obtener algo de información sobre la energía total de un átomo multielectrónico aplicando directamente lo aprendido en las lecciones del Átomo de Hidrógeno y de Partículas idénticas.
- ▶ Acto seguido se introducirá el concepto de campo medio que se utilizará en el resto de la lección (y siguientes) y que tanto éxito ha tenido en física atómica, de estado sólido y nuclear.



Modelo de Capas de Bohr

- ▶ La forma más sencilla de estudiar el átomo es suponer que los electrones del mismo no interactúan entre si. En este caso cada uno de los electrones ve el núcleo de carga Z exclusivamente, formando un átomo hidrogenoide.
- ▶ La energía del estado fundamental de este átomo sería

$$E_0 = NE(Z) = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2NZ^2$$

- ▶ para un átomo neutro $N = Z$ y la energía del estado fundamental se escalaría como $E \sim Z^3$, muy superior a la medida experimentalmente.
- ▶ Un refinamiento inmediato de este modelo es aplicar el principio de exclusión de Pauli a los electrones del átomo. En este caso sólo puede haber un electrón en cada capa (n, l, m_l, m_s) , y por lo tanto a medida que crece N los electrones van ocupando los niveles superiores (menos ligados) de energía.
- ▶ Esto provoca que la energía total del átomo en el estado fundamental sea considerablemente inferior al escalado Z^3 . En concreto, la energía del estado fundamental del átomo sería

$$N = 2 + 8 + \dots$$

$$E_0 = 2E_{1s} + 8E_{2s} + \dots$$

donde hemos usado el hecho de que la energía de los niveles de un átomo hidrogenoide sólo depende de n .



Modelo de Capas de Bohr (cont)

- ▶ Para poder estimar mejor E_0 supondremos que los átomos que tratamos tienen las capas llenas, siendo la energía del resto de los átomos valores intermedios de los ya calculados. De esta forma, si m es el número cuántico principal de la última capa llena, se verifica

$$N = \sum_{n=1}^m g_n$$

$$E_0 = \sum_{n=1}^m g_n E_n$$

donde g_n es la degeneración de cada capa, que en el caso del átomo hidrogenoide se verifica $g_n = 2n^2$.

- ▶ Para aproximar las sumas anteriores utilizamos la aproximación para m grande

$$\sum_{n=1}^m f(n) \approx \int_0^m f(x) dx$$



Modelo de Capas de Bohr (cont)

- ▶ Desde luego m no es un número grande ($m \leq 6$), pero la fórmula anterior sigue dando buenos resultados. Utilizando esta aproximación tenemos

$$N \approx \frac{2}{3}m^3$$

$$E_0 = - \sum_{n=1}^m 2R_y Z^2 = -2R_y m Z^2$$

- ▶ Eliminando m obtenemos

$$E_0 \approx - \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{3}} 2R_y N^{\frac{1}{3}} 3Z^2$$



- ▶ Para un átomo neutro $N = Z$ y el escalado de energía es $E_0 \sim Z^{\frac{7}{3}}$. Este escalado coincide con el experimental.
- ▶ Para átomos sin capas llenas se puede hallar por métodos parecidos que el escalado es el mismo, variando sólo la constante de multiplicación.
- ▶ Por lo tanto la mera aplicación del Principio de Exclusión permite calcular la energía total del átomo dando el escalado correcto.
- ▶ Aun así el valor concreto de la energía sigue siendo muy superior al real.
- ▶ Una mejora clara del modelo anterior, y aun tratable por los mismos métodos, sería incluir la influencia del resto de los electrones en la carga real que ven cada uno de ellos.
- ▶ Esto equivale a tener en cuenta el apantallamiento de carga de los electrones de las capas más profundas (cercanas al núcleo).
- ▶ Por ejemplo, en este modelo el *He* tiene dos electrones en la capa 1 y no hay apantallamiento, es decir, ambos electrones ven un núcleo de carga Z .
- ▶ El *Li* tiene dos electrones en la capa 1 y uno en la 2. El electrón en la capa 2 ya no ve la carga íntegra del núcleo, sino un valor más bajo, que supondremos $Z - 2$, ya que consideramos que el apantallamiento de los dos electrones internos (capa 1) es completo.



- ▶ Conviene señalar que esto no es del todo cierto, por cuanto el apantallamiento casi nunca es completo, especialmente si el electrón apantallado tiene un momento cinético orbital elevado.
- ▶ De todas formas, el apantallamiento total es una aproximación no excesivamente mala.
- ▶ En este caso la carga efectiva que ve un electrón en la capa m es

$$Z^*(m) = Z - \sum_{p=1}^{m-1} 2p^2 \approx Z - \frac{2}{3}(m-1)^3$$

y el número de electrones N y energía total E_0 serán

$$\begin{aligned} N &= \sum_{n=1}^m 2n^2 \\ E_0 &= - \sum_{n=1}^m 2n^2 R_y \left(\frac{Z^*(n)}{n} \right)^2 = - \sum_{n=1}^m 2R_y \left(Z - \frac{2}{3}(n-1)^3 \right)^2 \\ &\approx - \sum_{n=1}^m 2R_y \left(Z - \frac{2}{3}n^3 \right)^2 \approx -2R_y \left(Z^2 m - \frac{1}{3}Zm^4 + \frac{4}{63}m^7 \right) \\ &= -2 \left(\frac{3}{2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{9}{14} Z^{\frac{7}{3}} R_y = -20,02 Z^{\frac{7}{3}} \text{ eV} \end{aligned}$$



- ▶ Este número es muy cercano al calculado con teorías más elaboradas tales como las de Thomas-Fermi ($20,93Z^{\frac{7}{3}}$ eV).
- ▶ El escalado es el correcto y la energía es un 35 % mayor que la obtenida sin efecto de apantallamiento, como cabría esperar dado que el apantallamiento reduce la carga vista por los electrones de las capas más externas.
- ▶ Por lo tanto es el principio de exclusión el responsable del escalado con el número atómico de la energía del estado fundamental, y las correcciones restantes afinan el valor de dicha energía aproximándola al real.
- ▶ Dada la simplicidad del modelo considerado, es algo sorprendente el valor de energía tan aproximado. Esto nos motiva para intentar refinar el modelo a fin de mejorar los valores obtenidos.
- ▶ A pesar de haber comenzado suponiendo que los electrones no interactúan entre si (partículas independientes) al final hemos introducido sutilmente un tipo de interacción entre ellos vía el apantallamiento.
- ▶ Esta influencia de unos electrones en otros aun conserva una propiedad que simplifica extraordinariamente los cálculos, el utilizar un campo central.
- ▶ Esto se manifiesta en el hecho de que los electrones interactúan entre si modificando el valor potencial central, pero manteniendo la dependencia única de r de dicho potencial.



Valor medio de un operador

- ▶ Consideramos un sistema de N fermiones (o bosones cambiando A por S) con un ket estado

$$\psi(q_1, \dots, q_N) = \sqrt{N!} A \phi_{\alpha_1}(q_1) \dots \phi_{\alpha_N}(q_N)$$

con $q_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$, con $\sigma_i = \pm 1/2$ la variable de espín, y las funciones propias monopartícula $\phi_{\alpha_1}(q_1) = \phi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{r}_1) \chi_{m_1}$, con $\phi_{\mathbf{p}_1}$ las funciones propias del operador cantidad de movimiento.

- ▶ Consideremos un operador sobre estados de las N partículas

$$F^{(N)} = \sum_k F(k)$$

donde $F(k) \equiv F^{(1)}(q_k)$ es un observable que actúa sobre la partícula k , dejando el resto igual

- ▶ Por ejemplo, para 2 partículas tenemos, por ejemplo

$$F^{(2)} = \mathbf{R}_1 \times \mathbf{P}_1 + \mathbf{R}_2 \times \mathbf{P}_2$$

con $F(k) = \mathbf{R}_k \times \mathbf{P}_k$



Valor medio de un operador

- Puede demostrarse con facilidad que

$$\langle F^{(N)} \rangle = \langle \Psi | F^{(N)} | \Psi \rangle = \sum_k \langle \alpha_k | F | \alpha_k \rangle \quad (2)$$

- Es decir, el valor medio de un operador de N partículas, suma de operadores monopartícula, puede obtenerse directamente como la suma de los valores medios de cada operador monopartícula.
- Entonces, aplicando (2) y suponiendo que F no depende del espín

$$\begin{aligned} \langle F^{(N)} \rangle &= \sum_{\sigma} \int d^3 \mathbf{r} \langle \mathbf{r}_1 | F | \mathbf{r}_1 \rangle = \\ &= 2 \int d^3 \mathbf{r} \langle \mathbf{r} | F | \mathbf{r} \rangle = 2 \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p} \langle \mathbf{r} | F | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \end{aligned}$$

con

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = \phi_p(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\hbar^{-1} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}}$$



Valor medio de un operador

- ▶ Si $F(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ está ordenado, con el operador \mathbf{R} a la izquierda de \mathbf{P} , propiedad que verifica H, L^2 , etc. tenemos que

$$\begin{aligned}\langle F^{(N)} \rangle &= 2 \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle F \langle \mathbf{r}, \mathbf{p} \rangle = \\ &= 2 \int \frac{d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}}{h^3} F \langle \mathbf{r}, \mathbf{p} \rangle\end{aligned}\quad (3)$$

donde $F \langle \mathbf{r}, \mathbf{p} \rangle$ es la función obtenida de la sustitución formal de \mathbf{R} por el vector \mathbf{r} y \mathbf{P} por el vector \mathbf{p} en el operador $F(\mathbf{R}, \mathbf{P})$.

- ▶ Los operadores F más interesantes son operador número de partículas

$$F = I \Rightarrow N = F^{(N)} = \sum I$$

Operador energía cinética $F = P^2/2M$

Operador energía potencial $F = V(|\mathbf{R}|)$



Densidad de Partículas y Energía Cinética

- ▶ Para estos casos tenemos aplicando (3)

$$N = \langle N \rangle = 2 \int \frac{d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p}}{h^3} = \frac{8\pi}{3h^3} \int d^3 \mathbf{r} p_f^3$$

por lo que la densidad numérica de fermiones es

$$n = \frac{8\pi}{3h^3} p_f^3 \quad (4)$$

- ▶ De forma semejante tenemos

$$T = \left\langle \sum P_i^2 / 2M \right\rangle = 2 \int \frac{d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p}}{2mh^3} p^2 = \int d^3 \mathbf{r} \frac{8\pi}{10mh^3} p_f^5 \quad (5)$$

$$V = \left\langle \sum V(|\mathbf{R}_i|) \right\rangle = 2 \int d^3 \mathbf{r} V(r) \frac{4\pi}{3h^3} p_f^3 = \int n V d^3 \mathbf{r} \quad (6)$$

y relacionando (4) y (5) tenemos la densidad de energía cinética

$$t = \frac{8\pi}{10mh^3} p_f^5 = \frac{8\pi h^2}{10m} \frac{3}{8\pi} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3} n^{5/3} = C n^{5/3}$$

$$\text{con } C = \frac{3h^2}{10m} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}$$



- ▶ P. Hohenberg y W. Kohn demostraron en 1964 y 1982, y de forma asombrosamente sencilla, que el estado fundamental de un sistema siempre puede expresarse como función única de la densidad local de partículas. Este resultado anima a expresar la energía total de una configuración de fermiones de la forma

$$E = E[n] = T[n] + V_{ei}[n] + V_{ee}[n]$$

- ▶ Utilizando los resultados del apartado anterior tenemos que

$$E = \int C n^{5/3} d^3 \mathbf{r} - Z q^2 \int \frac{n(r)}{r} d^3 \mathbf{r} + \frac{1}{2} q^2 \int \frac{n(\mathbf{r}_1) n(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3 r, d^3 r$$



Método de Thomas-Fermi

- ▶ La idea es encontrar la densidad n que genera un extremo en E . Si no imponemos más restricciones obtendríamos que $n = 0$ sería una solución al problema, solución carente de utilidad. Pero puesto que el número de partículas (electrones en nuestro caso) se ha de conservar, se verifica la restricción sobre n de $N = \int n d^3 \mathbf{r} = \text{constante}$. Para imponer esta condición introducimos el multiplicador de lagrange μ a fin de minimizar el funcional G definido por

$$G = E - \mu N, \text{ es decir } \frac{\delta G}{\delta n} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{\delta t}{\delta n} + V_{ei}(r) + q^2 \int \frac{n(\xi)}{|\mathbf{r} - \xi|} d^3 = \mu \quad (7)$$

- ▶ Después de alguna manipulación algebraica se obtiene

$$\frac{\delta t}{\delta n} = \frac{5}{3} C n^{2/3}$$
$$q^2 \int \frac{n d^3 \xi}{|\mathbf{r} - \xi|} = \frac{4\pi q^2}{r} \int_0^r \xi^2 n d\xi + 4\pi q^2 \int_r^\infty \xi n d\xi$$



Método de Thomas-Fermi

- ▶ Multiplicando (7) por r y derivando de nuevo tenemos

$$5/3C \frac{d}{dr}(rn^{2/3}) + 4\pi q^2 \int_r^\infty \xi n d\xi = \mu$$

y volviendo a derivar para eliminar μ :

$$5/3C \frac{d^2}{dr^2}(rn^{2/3}) = 4\pi q^2 n \quad (8)$$

- ▶ A fin de escribir la ecuación anterior en forma adimensional más conveniente, realizamos las sustituciones

$$5/3C r n^{2/3} = Z q^2 \chi(x)$$

$$r = bx$$

con

$$b = \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} a_0 Z^{-1/3} = 0,8853 a_0 Z^{-1/3}$$

siendo $a_0 = \frac{mq^2}{\hbar^2}$ radio de Bohr ($\simeq 0,5\text{\AA}$) y $q^2 = e^2$ en CGS ó $q^2 = e^2/4\pi\epsilon_0$ en SI.



Método de Thomas-Fermi

- ▶ Con estas definiciones tenemos que (8) da lugar a

$$x^{1/2}\chi'' = \chi^{3/2} \quad (9)$$

llamada ecuación de Thomas-Fermi para un átomo. Las condiciones de contorno las extraemos de (7) y de la condición suplementaria $N = \int nd^3\mathbf{r}$. En efecto de (7) tenemos que

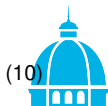
$$\frac{\delta t}{\delta n} + V = \mu \text{ con } V = V_{ei} + V_{ee}$$

por lo que $\chi = \frac{5/3Cn^{2/3}}{(Zq^2/r)} = \frac{\mu - V}{(Zq^2/r)} = \frac{\mu - V}{(\mu - V)_{r=0}}$ ya que el potencial ha de tender a $-Zq^2/r$ cuando nos acercamos al núcleo ($r \rightarrow 0$). Por lo tanto $\chi(0) = 1$. Por otra parte, si x_0 es el punto donde $\chi(x_0) = 0$, entonces

$$\begin{aligned} N &= \int nd^3r = 4\pi b^3 \int_0^{x_0} x^2 dx \left(\frac{Zq^2}{5/3Cb} \right)^{3/2} \frac{1}{x^{3/2}} \chi^{3/2} = \\ &= Z \int_0^{x_0} x\chi''(x) dx = Z(x_0\chi'(x_0) + 1) \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$x_0\chi'(x_0) = \frac{N - Z}{Z} = \frac{N}{Z} - 1$$



Propiedades de la Densidad

- ▶ Pero como $\chi(x) \geq 0$ de (9) se tiene $\chi''(x) \geq 0$, es decir, de curvatura de signo constante. Por lo tanto la $\chi'(x_0)$ ha de ser negativa (ver figura siguiente) y de (10) obtenemos $N/Z \leq 1$, es decir, existe solución a (9) sólo si $N \leq Z$, siendo $N = Z$ para $x_0 = \infty$

- ▶ Problemas con la ecuación de Thomas-Fermi

1. Se tiene $n \approx \frac{1}{r^{3/2}}$ cerca del origen, ya que $n \approx \frac{\chi^{3/2}}{r^{3/2}} \rightarrow \frac{1}{r^{3/2}}$, por lo tanto la densidad en el origen es infinita, resultado sin realidad física.
2. Si buscamos soluciones a (9) de la forma $\chi = \frac{a}{x^\alpha}$ entonces

$$x^{1/2} \alpha(\alpha + 1) \frac{a}{x^{\alpha+2}} = \frac{a^{3/2}}{x^{3/2\alpha}} \text{ de donde } \alpha + 2 - 1/2 = 3/2\alpha \Rightarrow \alpha = 3 \text{ y}$$

$a = 12^2 = 144 \Rightarrow \chi(x) = \frac{144}{x^3}$ es una solución de (9) sin verificar que $\chi(0) = 1$, es decir, es una solución asintótica para $x \rightarrow \infty$.

- ▶ Además $V(r) = -\frac{Zq^2}{r} \chi(x) \rightarrow \frac{1}{r^4}$ cuando $r \rightarrow \infty$ que no es una solución válida para un potencial esféricamente apantallado (esperamos $V \rightarrow e^{-r/r_0}/r$).



Validez de la ecuación de Thomas-Fermi

- ▶ Por lo tanto la ecuación de Thomas-Fermi sólo es válida en el rango intermedio de $x \gg 0$ y x no muy elevado (ver figura).
- c) El potencial de TF es el potencial producido por todos los electrones del átomo. Si se quiere utilizar como potencial central en la ecuación de Schrödinger, hay que deducir el potencial que actúa sobre un electrón debido al resto de los electrones. Este potencial ha de verificar que cuando $r \rightarrow 0$, $V_{\text{ef}}(r) \rightarrow -q^2/r$. No es fácil obtener dicho potencial, así que en la práctica se toma

$$V_{\text{ef}} = \begin{cases} -Zq^2/r\chi(r/b) & \text{si } V_{\text{ef}} < -q^2/r \\ -q^2/r & \text{resto} \end{cases} \quad (11)$$

- ▶ Una aproximación de χ adecuada en muchos casos es

$$\chi(x) = (1 + 0,02747x^{1/2} + 1,243x - 0,1486x^{3/2} + \\ + 0,2302x^2 + 0,007298x^{5/2} + 0,006944x^3)^{-1}$$

(Latter, 1955). Esta expresión es la más utilizada en los códigos de cálculo.



Solución aproximada de la ecuación de Schrödinger

- ▶ Con el potencial [8] tenemos la Ecuación de Schrödinger para un electrón:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{nlm} + V_{\text{ef}}(r)\psi_{nlm} = E_{nl}\psi_{nlm} \quad (12)$$

(ahora E depende de n y l al no ser el potencial V_{ef} estrictamente coulombiano).

- ▶ Encontrada la solución de (12) tenemos que

$$\psi_{\text{átomo}} = \sqrt{N!}A\psi_{n_1\ell_1\mu_1}(r_1\sigma_1)\dots\psi_{n_N\ell_N\mu_N}(r_N,\sigma_N)$$

ó combinación lineal de dichos estados. Los niveles obtenidos de esta forma se acerca bastante a los experimentales (ver gráficas).



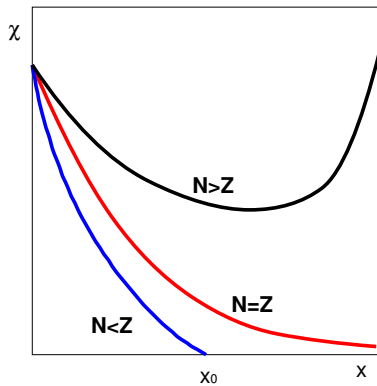


Figura 1: Soluciones posibles de la ecuación de TF para distintas condiciones de contorno



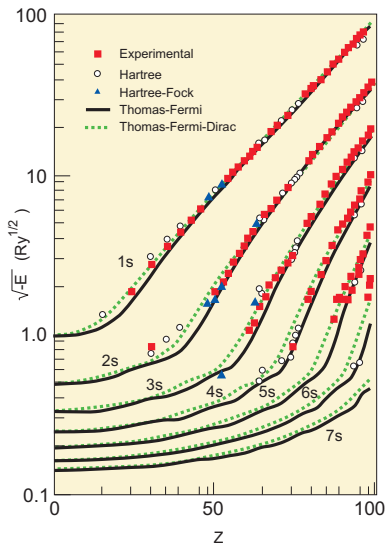


Figura 2: Energía de los niveles calculadas con el potencial de Thomas-Fermi. Estados s



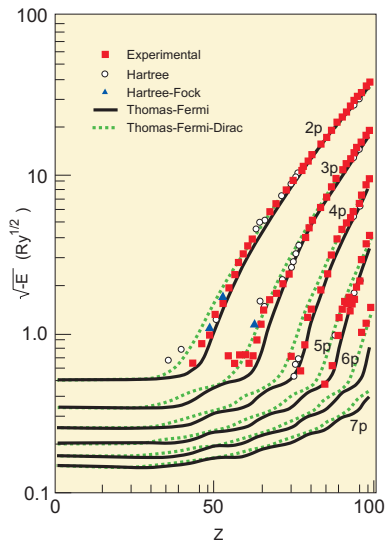


Figura 3: Energía de los niveles calculadas con el potencial de Thomas-Fermi. Estados p



Tabla periódica de elementos, con el llenado de niveles y potencial de ionización

Z	Símbolo	Elemento	Configuración electrónica	Término [†]	Potencial de ionización (eV)
1	H	hidrógeno	1s	$2S_{1/2}$	13.60
2	He	helio	1s ²	$1S_0$	24.69
3	Li	litio	[He]2s	$2S_{1/2}$	5.39
4	Be	berilio	[He]2s ²	$1S_0$	9.32
5	B	boro	[He]2s ² 2p	$2P_{1/2}$	8.30
6	C	carbono	[He]2s ² 2p ²	$3P_0$	11.26
7	N	nitrógeno	[He]2s ² 2p ³	$4S_{3/2}$	14.53
8	O	oxígeno	[He]2s ² 2p ⁴	$3P_2$	13.62
9	F	flúor	[He]2s ² 2p ⁵	$2P_{3/2}$	17.42
10	Ne	neon	[He]2s ² 2p ⁶	$1S_0$	21.56
11	Na	sodio	[Ne]3s	$2S_{1/2}$	5.14
12	Mg	magnesio	[Ne]3s ²	$1S_0$	7.65
13	Al	aluminio	[Ne]3s ² 3p	$2P_{1/2}$	5.99
14	Si	silicio	[Ne]3s ² 3p ²	$3P_0$	8.15
15	P	fósforo	[Ne]3s ² 3p ³	$4S_{3/2}$	10.49



Z	Símbolo	Elemento	Configuración electrónica	Término [†]	Potencial de ionización (eV)
16	S	azufre	[Ne]3s ² 3p ⁴	³ P ₂	10.36
17	Cl	cloro	[Ne]3s ² 3p ⁵	² P _{3/2}	12.97
18	Ar	argon	[Ne]3s ² 3p ⁶	¹ S ₀	15.76
19	K	potasio	[Ar]4s	² S _{1/2}	4.34
20	Ca	calcio	[Ar]4s ²	¹ S ₀	6.11
21	Sc	escandio	[Ar]4s ² 3d	² D _{3/2}	6.54
22	Ti	titanio	[Ar]4s ² 3d ²	³ F ₂	6.82
23	V	vanadio	[Ar]4s ² 3d ³	⁴ F _{3/2}	6.74
24	Cr	cromo	[Ar]4s3d ⁵	⁷ S ₃	6.77
25	Mn	manganeso	[Ar]4s ² 3d ⁵	⁶ S _{5/2}	7.44
26	Fe	hierro	[Ar]4s ² 3d ⁶	⁵ D ₄	7.87
27	Co	cobalto	[Ar]4s ² 3d ⁷	⁴ F _{9/2}	7.86
28	Ni	níquel	[Ar]4s ² 3d ⁸	³ F ₄	7.64
29	Cu	cobre	[Ar]4s3d ¹⁰	² S _{1/2}	7.73
30	Zn	zinc	[Ar]4s ² 3d ¹⁰	¹ S ₀	9.39
31	Ga	galio	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p	² P _{1/2}	6.00
32	Ge	germanio	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ²	³ P ₀	7.90
33	As	arsénico	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ³	⁴ S _{3/2}	9.81
34	Se	selenio	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴	³ P ₂	9.75
35	Br	bromo	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵	² P _{3/2}	11.81



Z	Símbolo	Elemento	Configuración electrónica	Término [†]	Potencial de ionización (eV)
36	Kr	kripton	[Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶	¹ S ₀	14.00
37	Rb	rubidio	[Kr]5s	² S _{1/2}	4.18
38	Sr	estroncio	[Kr]5s ²	¹ S ₀	5.70
39	Y	ytrio	[Kr]5s ² 4d	² D _{3/2}	6.38
40	Zr	zirconio	[Kr]5s ² 4d ²	³ F ₂	6.84
41	Nb	niobio	[Kr]5s4d ⁴	⁶ D _{1/2}	6.88
42	Mo	molibdeno	[Kr]5s4d ⁵	⁷ S ₃	7.10
43	Tc	tecnecio	[Kr]5s ² 4d ⁵	⁶ S _{5/2}	7.28
44	Ru	rutenio	[Kr]5s4d ⁷	⁵ F ₅	7.37
45	Rh	rodio	[Kr]5s4d ⁸	⁴ F _{9/2}	7.46
46	Pd	paladio	[Kr]4d ¹⁰	¹ S ₀	8.34
47	Ag	plata	[Kr]5s4d ¹⁰	² S _{1/2}	7.58
48	Cd	cadmio	[Kr]5s ² 4d ¹⁰	¹ S ₀	8.99
49	In	indio	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p	² P _{1/2}	5.79
50	Sn	estaño	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ²	³ P ₀	7.34
51	Sb	antimonio	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ³	⁴ S _{3/2}	8.64
52	Te	teluro	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁴	³ P ₂	9.01
53	I	yodo	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁵	² P _{3/2}	10.45
54	Xe	xenon	[Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁶	¹ S ₀	12.13
55	Cs	cesio	[Xe]6s	² S _{1/2}	3.89
56	Ba	bario	[Xe]6s ²	¹ S ₀	5.21



Z	Símbolo	Elemento	Configuración electrónica	Término [†]	Potencial de ionización (eV)
57	La	lantano	[Xe]6s ² 5d	² D _{3/2}	5.58
58	Ce	cerio	[Xe](6s ² 4f5d)	(¹ G ₄)	5.47
59	Pr	praseodimio	[Xe](6s ² 4f ³)	(⁴ I _{9/2})	5.42
60	Nd	neodimio	[Xe]6s ² 4f ⁴	⁵ I ₄	5.49
61	Pm	prometio	[Xe]6s ² 4f ⁵	(⁶ H _{5/2})	5.55
62	Sm	samario	[Xe]6s ² 4f ⁶	⁷ F ₀	5.63
63	Eu	europio	[Xe]6s ² 4f ⁷	⁸ S _{7/2}	5.67
64	Gd	gadolinio	[Xe]6s ² 4f ⁷ 5d	⁹ D ₂	6.14
65	Tb	terbio	[Xe](6s ² 4f ⁹)	⁶ H _{15/2}	5.85
66	Dy	disprosio	[Xe](6s ² 4f ¹⁰)	(⁵ I ₈)	5.93
67	Ho	holmio	[Xe](6s ² 4f ¹¹)	(⁴ I _{15/2})	6.02
68	Er	erbio	[Xe](6s ² 4f ¹²)	(³ H ₆)	6.10
69	Tm	talio	[Xe]6s ² 4f ¹³	² F _{7/2}	6.18
70	Yb	yterbio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴	¹ S ₀	6.25
71	Lu	lutecio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d	² D _{3/2}	5.43
72	Hf	hafnio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ²	² F ₂	7.0
73	Ta	tántalo	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ³	⁴ F _{3/2}	7.89
74	W	tungsteno	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁴	⁵ D ₀	7.98
75	Re	rhenio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁵	⁶ S _{5/2}	7.88
76	Os	osmio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁶	⁵ D ₄	8.7
77	Ir	iridio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁷	(⁴ F _{9/2})	9.1



Z	Símbolo	Elemento	Configuración electrónica	Término [†]	Potencial de ionización (eV)
78	Pt	platino	[Xe]6s4f ¹⁴ 5d ⁹	³ D ₃	9.0
79	Au	oro	[Xe]6s4f ¹⁴ 5d ⁹	² S _{1/2}	9.23
80	Hg	mercurio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰	¹ S ₀	10.44
81	Tl	talio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p	² P _{1/2}	6.11
82	Pb	plomo	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ²	³ P ₀	7.42
83	Bi	bismuto	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ³	⁴ S _{3/2}	7.29
84	Po	polonio	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁴	³ P ₂	8.42
85	At	astato	[Xe](6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁵)	² P _{3/2}	9.5
86	Rn	radón	[Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁶	¹ S ₀	10.75
87	Fr	francio	[Rn]7s	² S _{1/2}	4.0
88	Ra	radio	[Rn]7s ²	¹ S ₀	5.28
89	Ac	actinio	[Rn]7s ² 6d	² D _{3/2}	6.9
90	Th	torio	[Rn]7s ² 6d ²	³ F ₂	
91	Pa	protactinio	[Rn](7s ² 5f ² 6d)	(⁴ K _{11/2})	
92	U	uranio	[Rn]7s ² 5f ³ 6d	⁵ L ₆	4.0
93	Np	neptunio	[Rn]7s ² 5f ⁴ 6d	⁶ L _{11/2}	
94	Pu	plutonio	[Rn]7s ² 5f ⁶	⁷ F ₀	5.08
95	Am	americio	[Rn]7s ² 5f ⁷	⁸ S _{7/2}	6.0
96	Cm	curio	[Rn]7s ² 5f ⁷ 6d	⁹ D ₂	
97	Bk	berkelio	[Rn]7s ² 5f ⁸ 6d	⁸ H _{17/2}	
98	Cf	californio	[Rn]7s ² 5f ¹⁰	⁵ I ₈	



<i>Z</i>	<i>Símbolo</i>	<i>Elemento</i>	<i>Configuración electrónica</i>	<i>Término</i> [†]	<i>Potencial de ionización (eV)</i>
99	Es	einsteinio	[Rn]7s ² 5f ¹¹	⁴ I _{15/2}	
100	Fm	fermio	[Rn](7s ² 5f ¹²)	(³ H ₆)	
101	Md	mendelevio	[Rn](7s ² 5f ¹³)	(² F _{7/2})	
102	No	nobelio	[Rn](7s ² 5f ¹⁴)	(¹ S ₀)	
103	Lw	laurencio	[Rn](7s ² 5f ¹² 6d)	² D _{3/2}	



La Tabla Periódica de Elementos

- ▶ Según se van llenando capas, se forman átomos cuyo potencial medio es de la forma

$$V \propto \frac{Z^{*2}}{r^n}$$

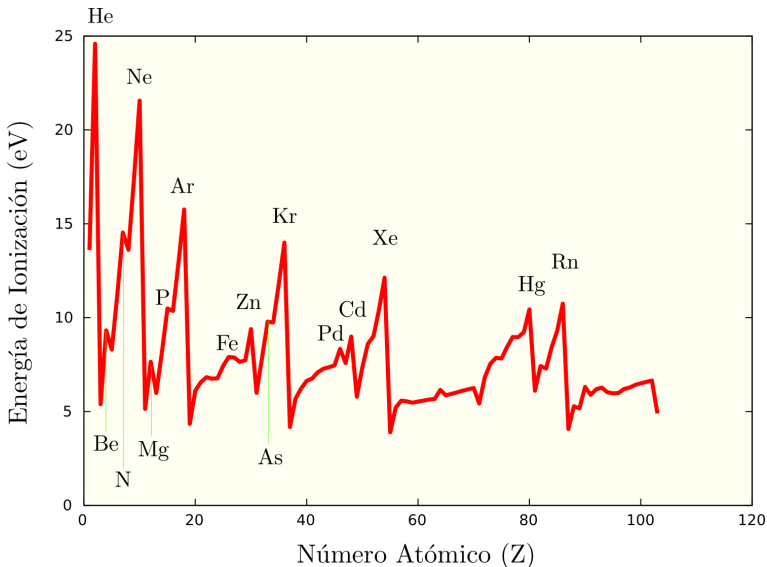
con $n \neq 1$, que da lugar a niveles de energía que dependen de los números cuánticos n y ℓ . Los electrones con $\ell = 0$ son los que llegan más al interior de la coraza de electrones, aumentando su energía de ligadura, y por lo tanto son estos niveles los que se ocupan antes.

- ▶ El desdoblamiento de los niveles con ℓ hace que a medida que llenamos capas, algunas subcapas (distintos ℓ) se crucen en energía. Así, el nivel $4s$ tiene menor energía que el $3d$ y se llenará antes. Esto se resume en una regla empírica de llenado con $n + \ell$ menor, y para iguales valores, con n menor
- ▶ Configuraciones del tipo $nd^x(n+1)s^2$ y $nd^{x+1}(n+1)s$ ocurren para $n = 3, 4, 5$, estos forman los elementos de transición llamados grupos del Oro, Paladio y Platino. Cuando se ionizan tienden a perder el electrón s , dejando la capa d incompleta, lo que da lugar a su comportamiento paramagnético.
- ▶ Un llenado similar lo forman las tierras raras, con secuencias $4f^x 5s^2 5p^6 6s^2$ o $4f^{x-1} 5s^2 5p^6 5d 6s^2$, o los Actínidos, con el llenado de la capa $5f$.
- ▶ Todos los gases nobles completan las capas np^6 , con el siguiente estado excitado $np^5(n+1)s$.

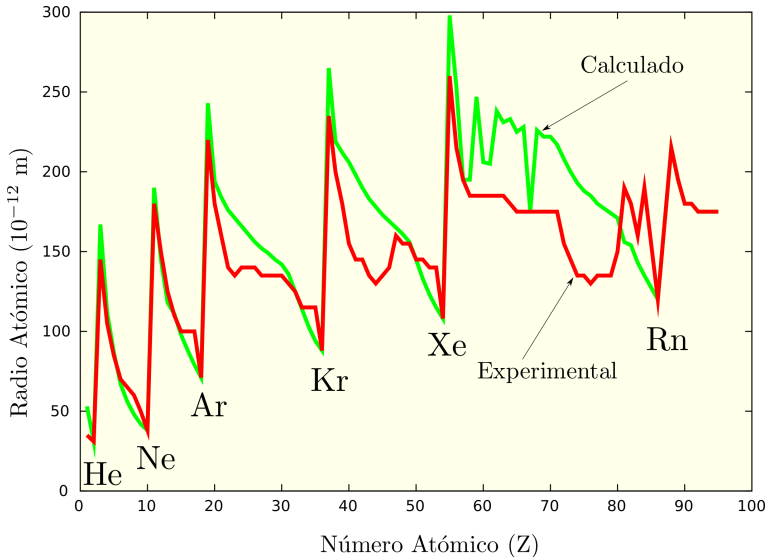


Energía de Ionización

Definimos energía de ionización del primaria como la mínima energía necesaria para llevar a un electrón del átomo al continuo.



Variación del radio atómico

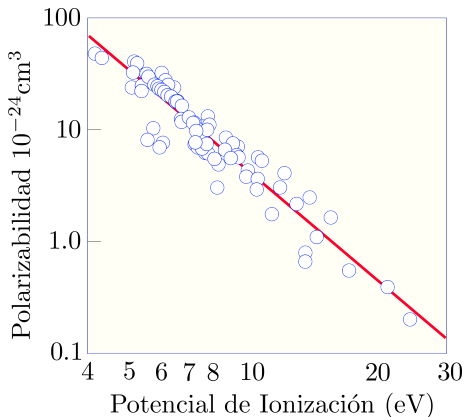


Correlación entre propiedades eléctricas y ionización

Por ejemplo, la polarizabilidad γ , que relaciona el campo eléctrico con el momento dipolar \mathbf{P} , se puede calcular como

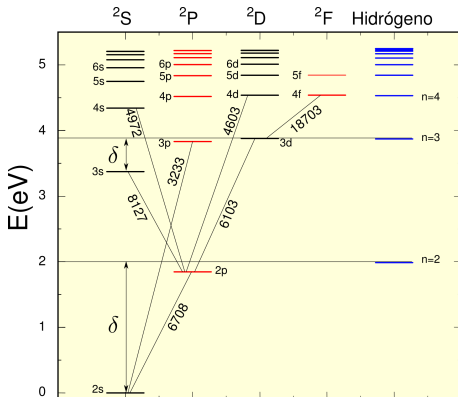
$$\gamma = \sum_j \frac{e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_j^2}$$

donde la suma se extiende a todas las frecuencias de oscilación asociadas a los electrones de las capas más externas.



Diagramas de Grotrian: Caso del Li

Estos diagramas dibujan los niveles de energía para distintos valores de L y permiten visualizar las transiciones posibles.



Espectro visible

En el visible el espectro es habitualmente mas complejo a medida que aumenta el número atómico

