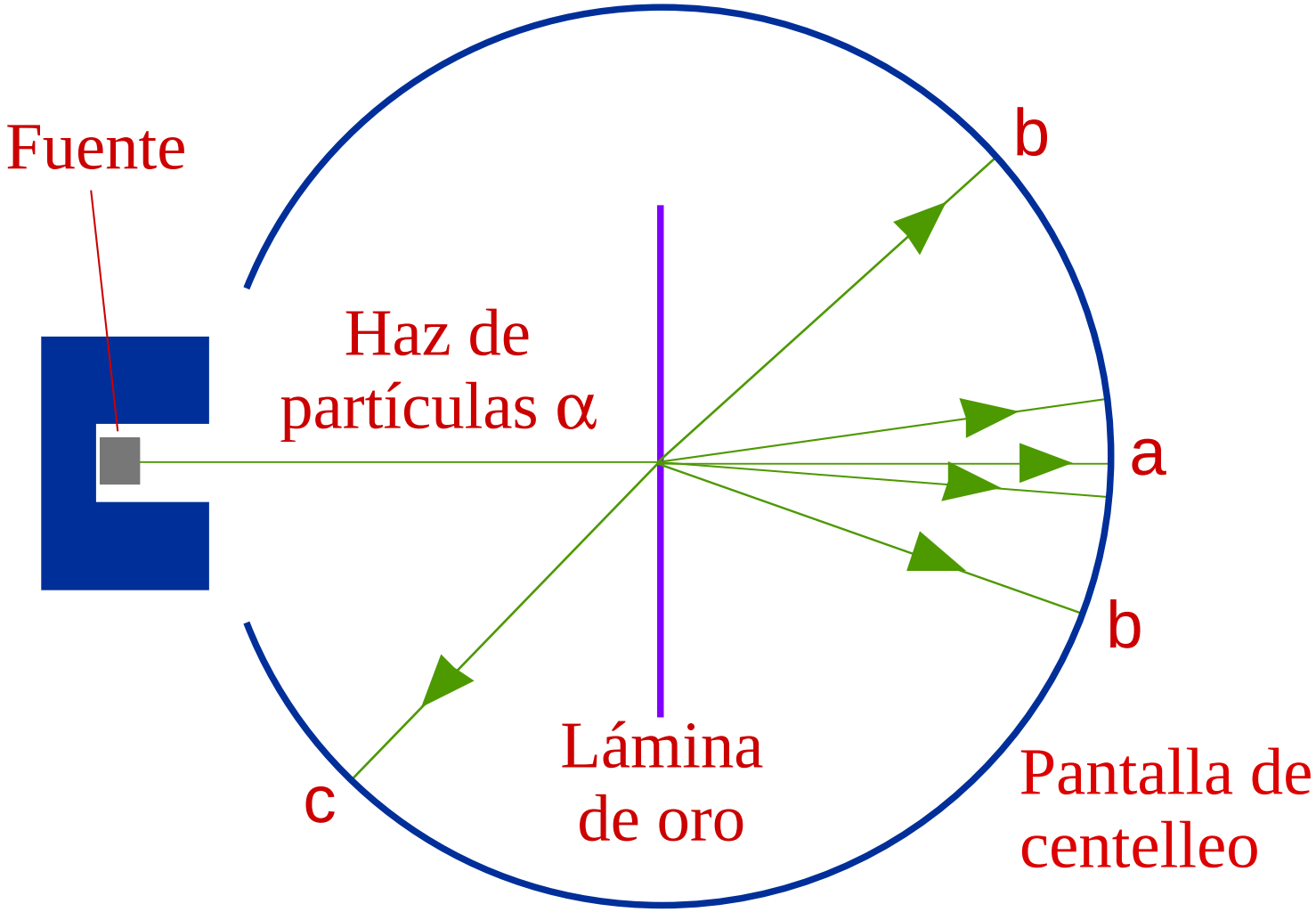
Tabla 1.1. Las partículas subatómicas

Nombre	*Símbolo*	*Masa*	*Carga*	*Descubrimiento*
protón	p	$1{,}673\ 10^{-27}$ kg	$+1{,}602\ 10^{-19}$ C	Goldstein, 1886
electrón	e	$9{,}109\ 10^{-31}$ kg	$-1{,}602\ 10^{-19}$ C	Thomson, 1897
neutrón	n	$1{,}675\ 10^{-27}$ kg		Chadwick, 1932


Fuente
Haz de
partículas α
b
a
b
c
Lámina
de oro
Pantalla de
centelleo

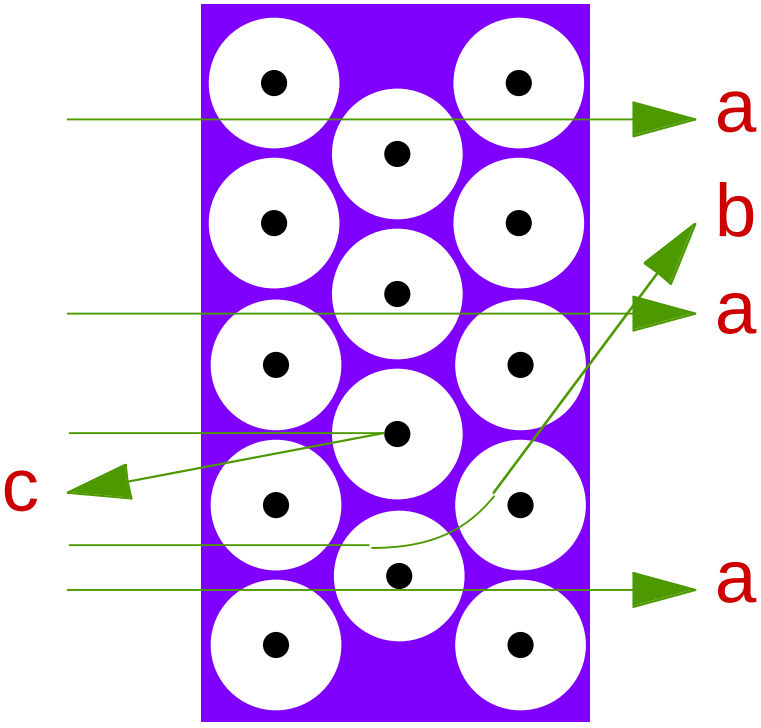
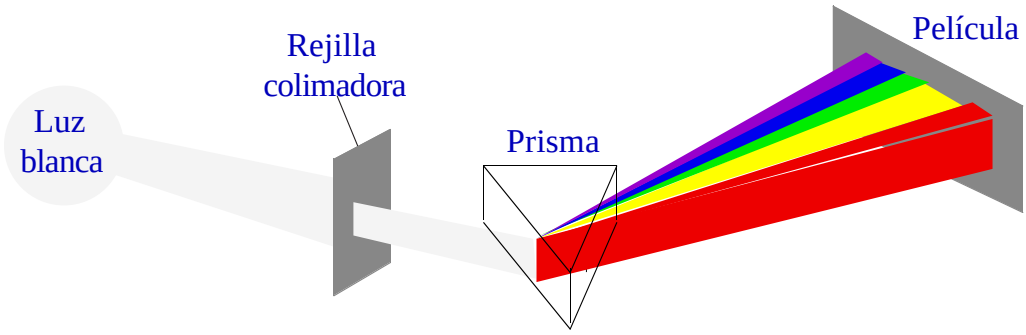

a
b
a
c
a

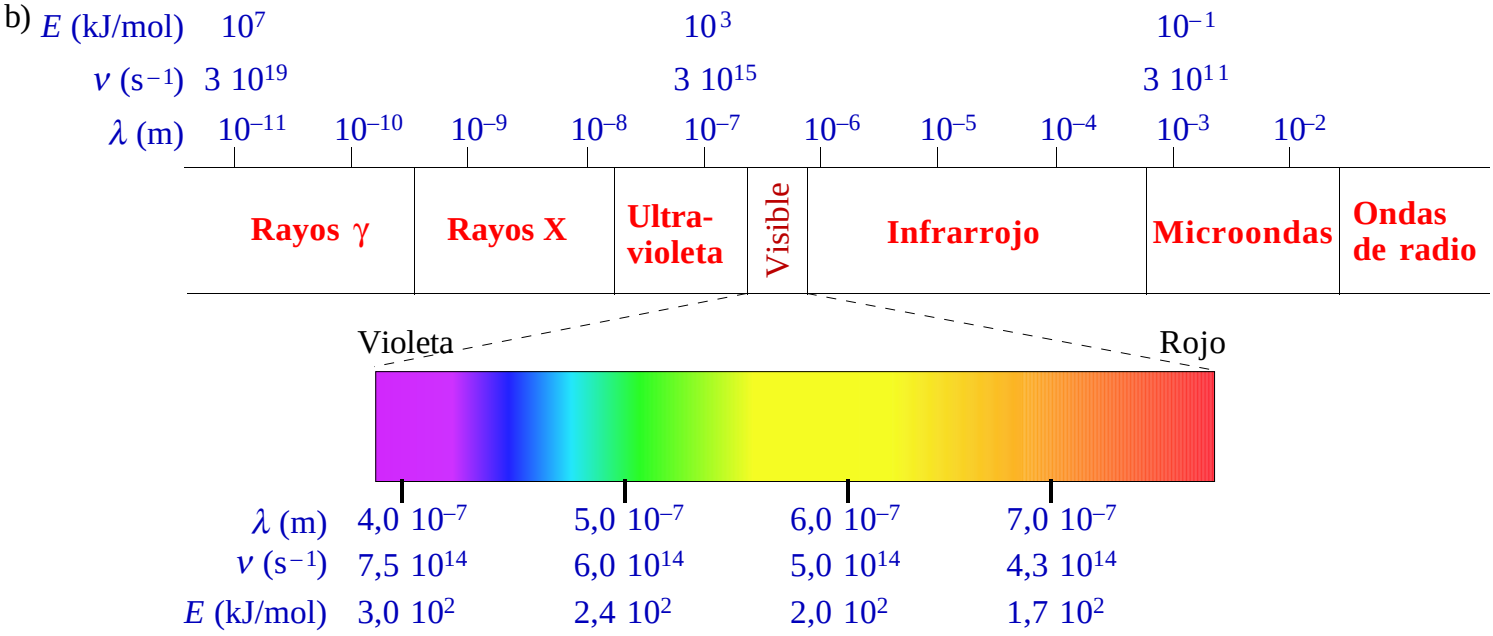
Tabla 1.2. Algunos elementos con varios isótopos

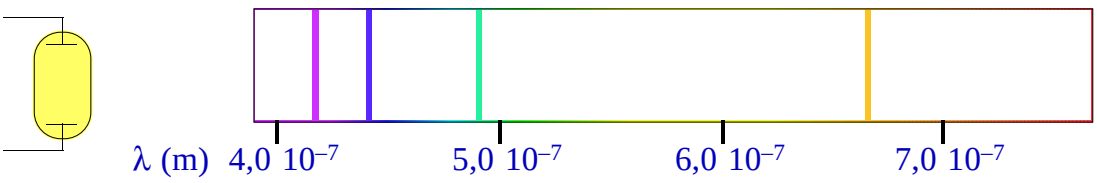
Nombre	*Símbolo*	*Número atómico (Z)*	*Número neutrónico (N)*	*Número másico (A)*	*Masa*	*Abundancia natural, %*
Hidrógeno–1	^{1}H	1	0	1	$1{,}674\ 10^{-24}$ g, 1,008 u	99,985
Deuterio	^{2}H o D	1	1	2	$3{,}344\ 10^{-24}$ g, 2,014 u	0,015
Tritio	^{3}H o T	1	2	3	$1{,}674\ 10^{-24}$ g, 3,016 u	muy inestable
Carbono–12	^{12}C	6	6	12	$1{,}9926\ 10^{-23}$ g, 12 u exactas	98,90
Carbono–13	^{13}C	6	7	13	$2{,}159\ 10^{-23}$ g, 13,00 u	1,10
Cloro–35	^{35}Cl	17	18	35	$5{,}807\ 10^{-23}$ g, 34,97 u	75,77
Cloro–37	^{37}Cl	17	20	37	$6{,}138\ 10^{-23}$ g, 36,97 u	24,23
Uranio–235	^{235}U	92	143	235	$3{,}902\ 10^{-22}$ g, 235,0 u	0,72
Uranio–238	^{238}U	92	146	238	$3{,}953\ 10^{-22}$ g, 238,05 u	99,27

a)

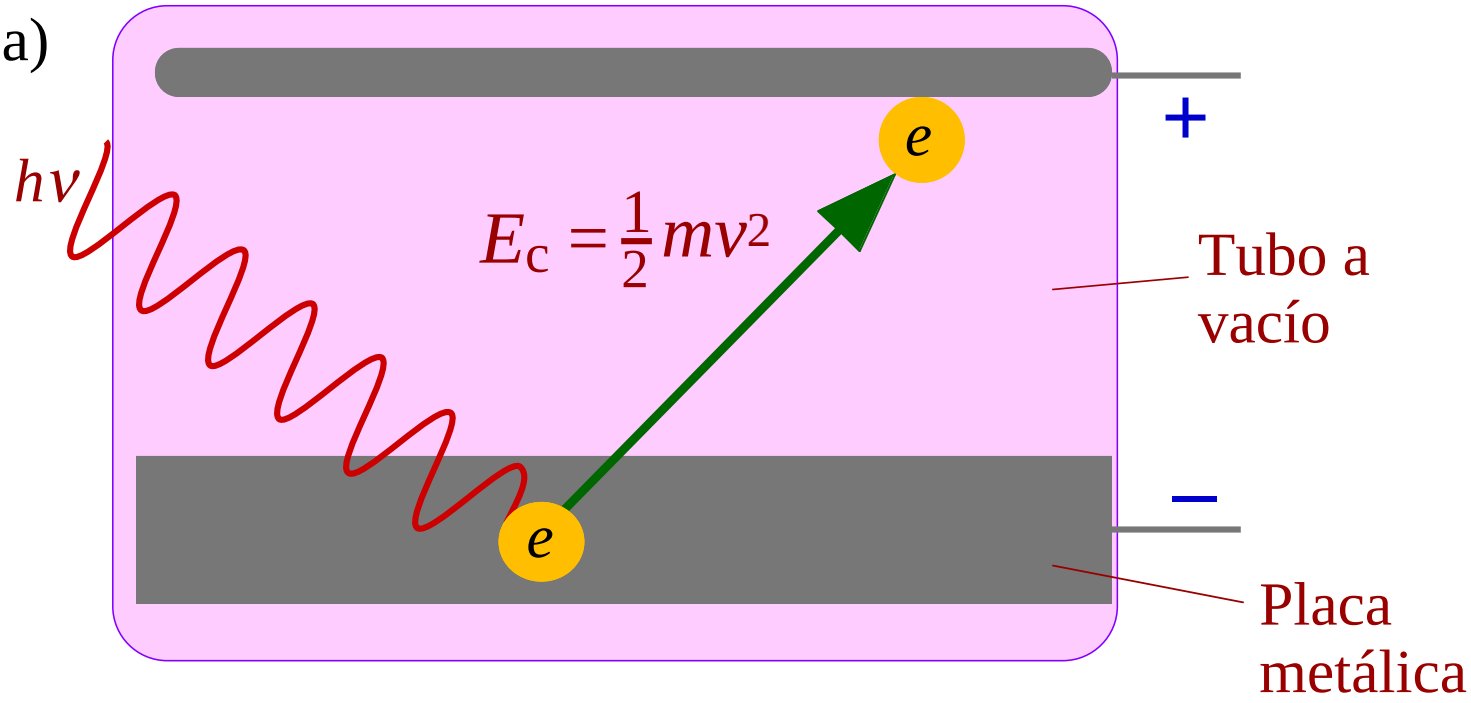

Película
Rejilla
colimadora
Luz
blanca
Prisma

b)

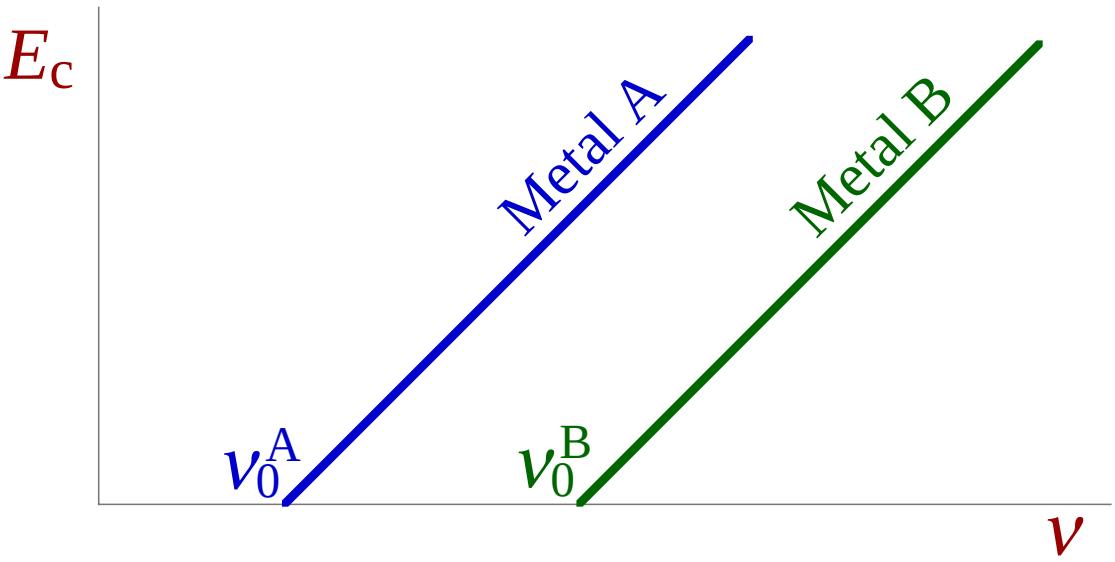

E (kJ/mol) 10^7 10^3 10^−1
ν (s^−1) 3 10^19 3 10^15 3 10^11
λ (m) 10^−11 10^−10 10^−9 10^−8 10^−7 10^−6 10^−5 10^−4 10^−3 10^−2
Rayos γ
Rayos X
Ultra-violeta
Visible
Infrarrojo
Microondas
Ondas de radio
Violeta
Rojo
λ (m) 4,0 10^−7 5,0 10^−7 6,0 10^−7 7,0 10^−7
ν (s^−1) 7,5 10^14 6,0 10^14 5,0 10^14 4,3 10^14
E (kJ/mol) 3,0 10^2 2,4 10^2 2,0 10^2 1,7 10^2

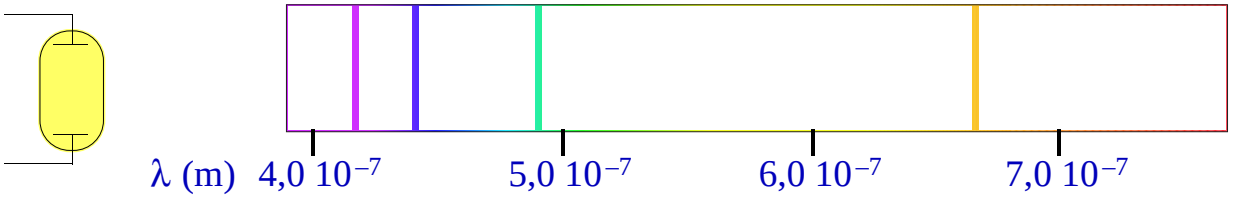

λ (m) 4,0 10^−7 5,0 10^−7 6,0 10^−7 7,0 10^−7

a)


hν
e
$E_c = \frac{1}{2}mv^2$
+
Tubo a vacío
e
−
Placa metálica

b)

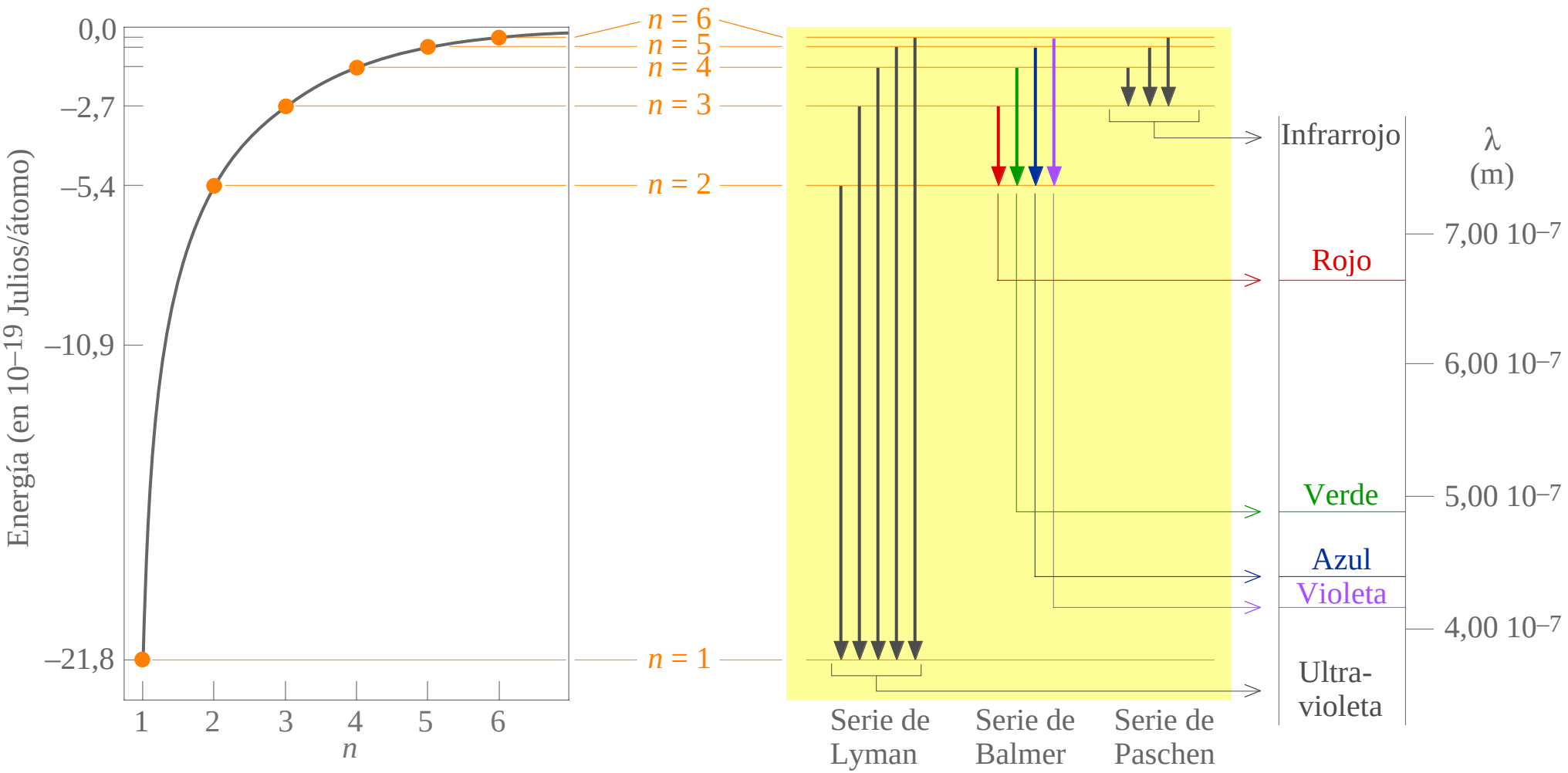

E_c
Metal A
Metal B
ν_0^A
ν_0^B
ν



$$\nu = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

R_H = 3,29 10^{15} s^{-1} (constante de Rydberg)

Serie de **Lyman**	$n_1 = 1$	n_2 = 2, 3, 4, 5…	Serie de **Brackett**	$n_1 = 4$	n_2 = 5, 6, 7, 8…
Serie de **Balmer**	$n_1 = 2$	n_2 = 3, 4, 5, 6…	Serie de **Pfund**	$n_1 = 5$	n_2 = 6, 7, 8, 9…
Serie de **Pashen**	$n_1 = 3$	n_2 = 4, 5, 6, 7…			


0,0
–2,7
–5,4
–10,9
–21,8
Energía (en 10–19 Julios/átomo)
1
2
3
4
5
6
n
n = 6
n = 5
n = 4
n = 3
n = 2
n = 1
Infrarrojo
Rojo
Verde
Azul
Violeta
Ultra-
violeta
λ
(m)
7,00 10–7
6,00 10–7
5,00 10–7
4,00 10–7
Serie de
Lyman
Serie de
Balmer
Serie de
Paschen

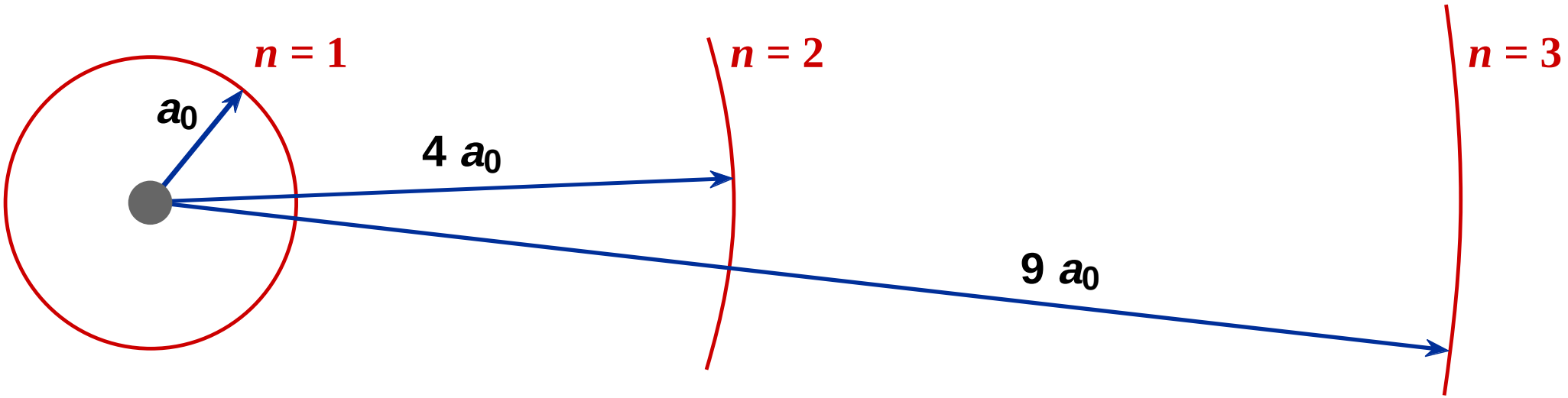

n = 1
n = 2
n = 3
a0
4 a0
9 a0

Tabla 1.3. Números cuánticos del átomo de hidrógeno

Nombre	***Símbolo***	***Valores***	***Nombre de conjunto***	***Sinónimos***	***Describe***
principal	n	1, 2, 3,…	nivel o capa	*K* (*n* = 1), *L* (2), *M* (3), *N* (4), etc	tamaño y energía orbital
azimutal*	l	0,…,*n*–1	subnivel o subcapa	*s* (*l* = 0), *p* (1), *d* (2), *f* (3), etc	forma del orbital
magnético orbital	m_l	+*l*,…,–*l*	orbital** de una subcapa		orientación del orbital
de espín	s	$^1/_2$			espín del electrón
magnético de espín	m_s	$\pm^1/_2$			orientación del espín

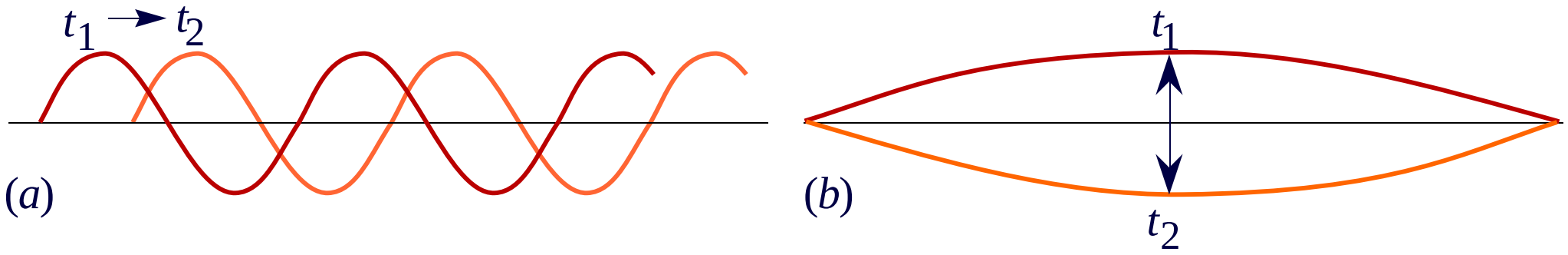
*También llamado momento angular orbital; ***órbita* en el lenguaje de Bohr, *orbital* en el de la mecánica cuántica.

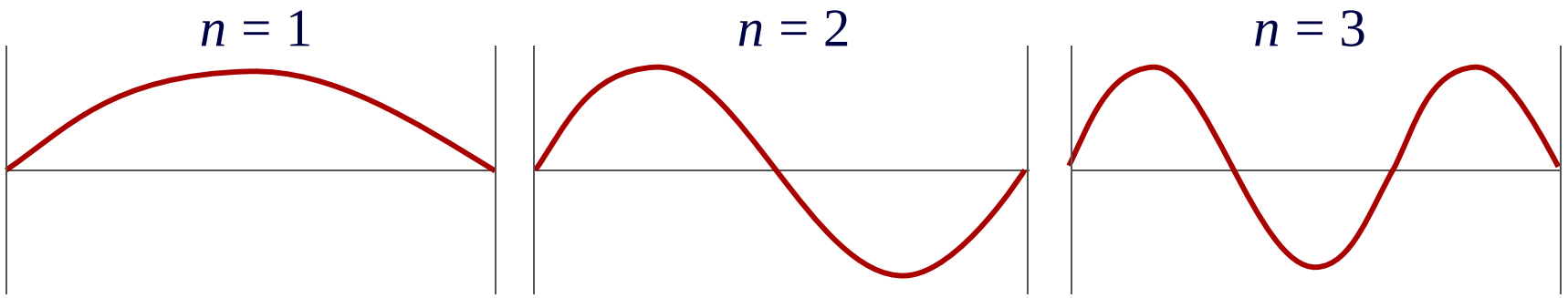
Tabla 1.4. Longitudes de onda de partículas

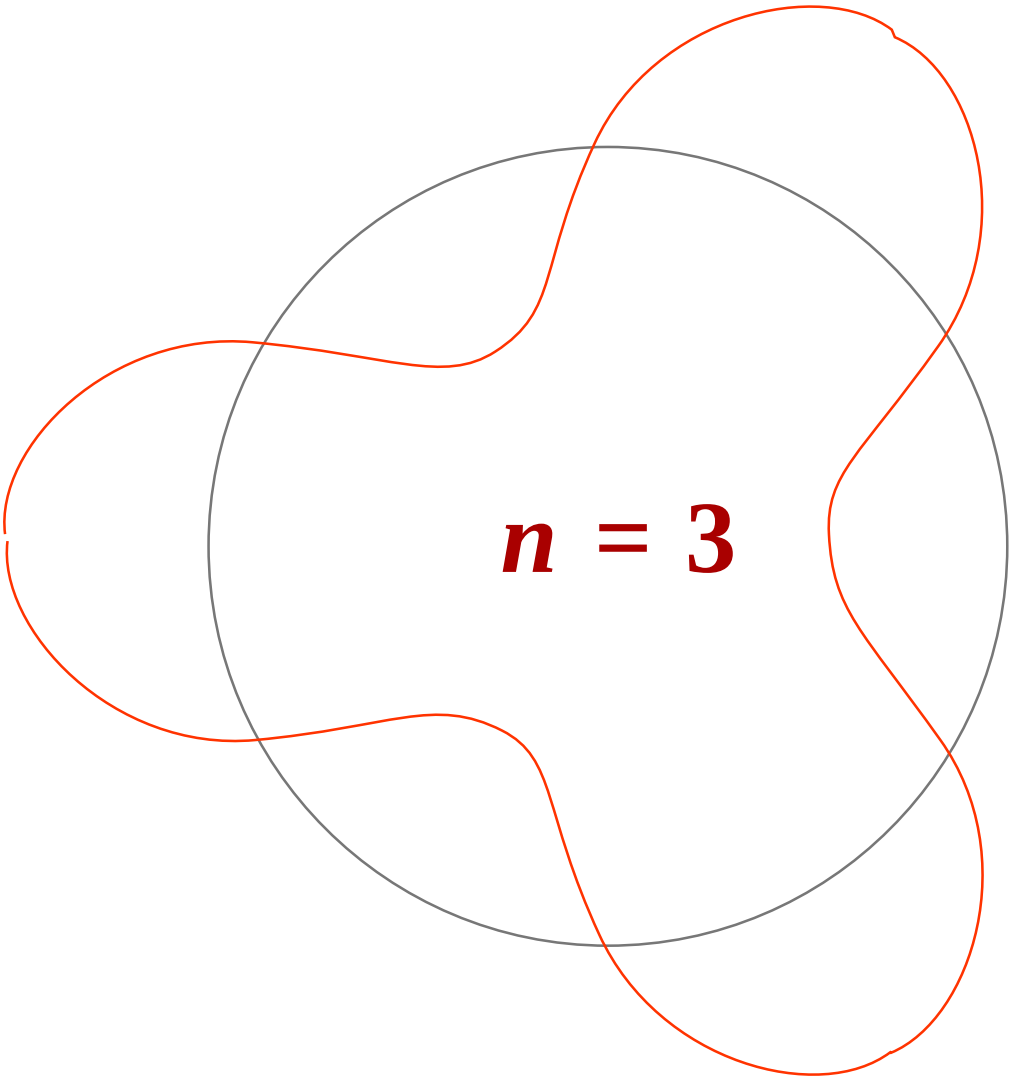
Partícula	*Masa (kg)*	*Velocidad (m s^{-1})*	*Longitud de onda (Å)*
Electrón libre gaseoso (300 K)	$9{,}11\ 10^{-31}$	$1{,}17\ 10^{5}$	63
Electrón libre gaseoso ($200\ 10^{3}$ K)	$9{,}11\ 10^{-31}$	$3{,}00\ 10^{6}$	2,4
Electrón del átomo de H (n = 1)	$9{,}11\ 10^{-31}$	$2{,}19\ 10^{6}$	3,3
Átomo de He gaseoso (300 K)	$6{,}64\ 10^{-27}$	1370	0,73
Pelota de Béisbol	0,10	20	$3{,}3\ 10^{-24}$

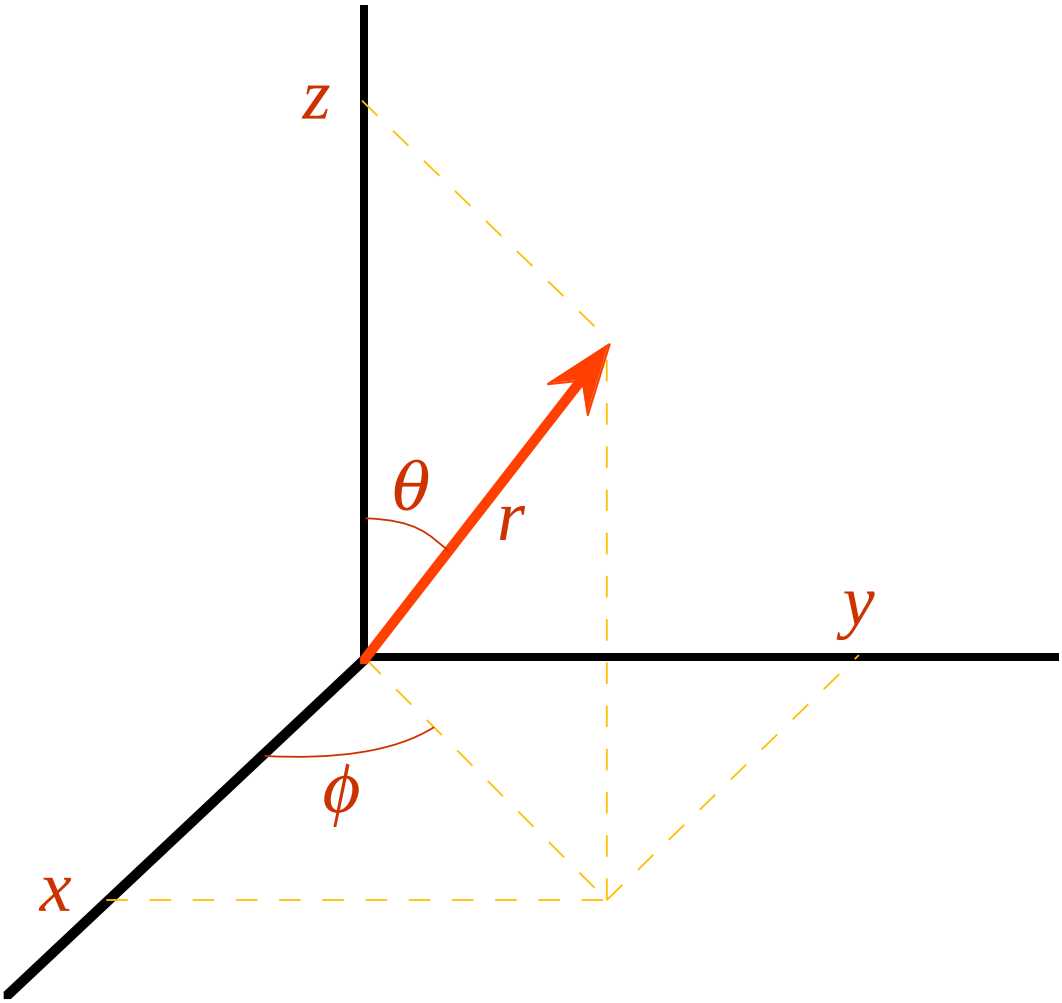
Ejemplo. Imprecisión mínima en la posición de partículas cuya imprecisión en la velocidad es del 1%

Partícula	*Masa (kg)*	*Velocidad (m s^{-1})*	*Imprecisión mínima en la posición (m)*
Automóvil	1000	28 (100 km/h)	10^{-37}
Electrón del átomo de H (*n* = 1)	$9{,}11\ 10^{-31}$	$2{,}19\ 10^{6}$	$26\ 10^{-10}$ (26 Å, el radio de Bohr es 0,529 Å)


t_1
t_2
(a)
t_1
(b)
t_2


$n = 1$
$n = 2$
$n = 3$


n = 3



(x, y, z) coordenadas cartesianas

(r, θ, ϕ) coordenadas polares

$$z = r\cos\theta \qquad r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$x = r\,\text{sen}\,\theta\cos\phi \qquad \theta = \arccos(z/r)$$

$$y = r\,\text{sen}\,\theta\,\text{sen}\,\phi \qquad \phi = \text{arctg}(y/x)$$

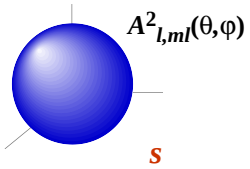
Tabla 1.5. Funciones radiales $R_{n,l}(r)$ normalizadas para átomos o iones monoelectrónicos*

Orbital	*n*	*l*	$R_{n,l}$ =	*Constante*	×	*Polinomio*	×	*Exponencial*
1*s*	1	0	$R_{1,0}$	$2Z^{3/2}$		1		e^{-Zr}
2*s*	2	0	$R_{2,1}$	$\frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{2}}$		$(2 - Zr)$		$e^{-Zr/2}$
2*p*	2	1	$R_{2,0}$	$\frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{6}}$		Zr		$e^{-Zr/2}$
3*s*	3	0	$R_{3,0}$	$\frac{2Z^{3/2}}{81\sqrt{3}}$		$(27 - Zr + Z^2r^2)$		$e^{-Zr/3}$
3*p*	3	1	$R_{3,1}$	$\frac{4Z^{3/2}}{81\sqrt{6}}$		$(6Zr - Z^2r^2)$		$e^{-Zr/3}$
3*d*	3	2	$R_{3,2}$	$\frac{4Z^{3/2}}{81\sqrt{30}}$		Z^2r^2		$e^{-Zr/3}$
4*s*	4	0	$R_{4,0}$	$\frac{Z^{3/2}}{768}$		$(192 - 144Zr + 24Z^2r^2 - Z^3r^3)$		$e^{-Zr/4}$
4*p*	4	1	$R_{4,1}$	$\frac{Z^{3/2}}{256\sqrt{15}}$		$(80Zr - 20Z^2r^2 + Z^3r^3)$		$e^{-Zr/4}$
4*d*	4	2	$R_{4,2}$	$\frac{Z^{3/2}}{768\sqrt{5}}$		$(12Z^2r^2 - Z^3r^3)$		$e^{-Zr/4}$
4*f*	4	3	$R_{4,3}$	$\frac{Z^{3/2}}{768\sqrt{35}}$		Z^3r^3		$e^{-Zr/4}$
	n	*l*	$R_{n,l} = \sum_{x=l}^{n-1}$	N_x		r^x		$e^{-Zr/n}$

* Las funciones se dan en base al sistema de unidades atómicas (es decir, r en unidades de a_0).

Parte Angular

a)



Parte Radial

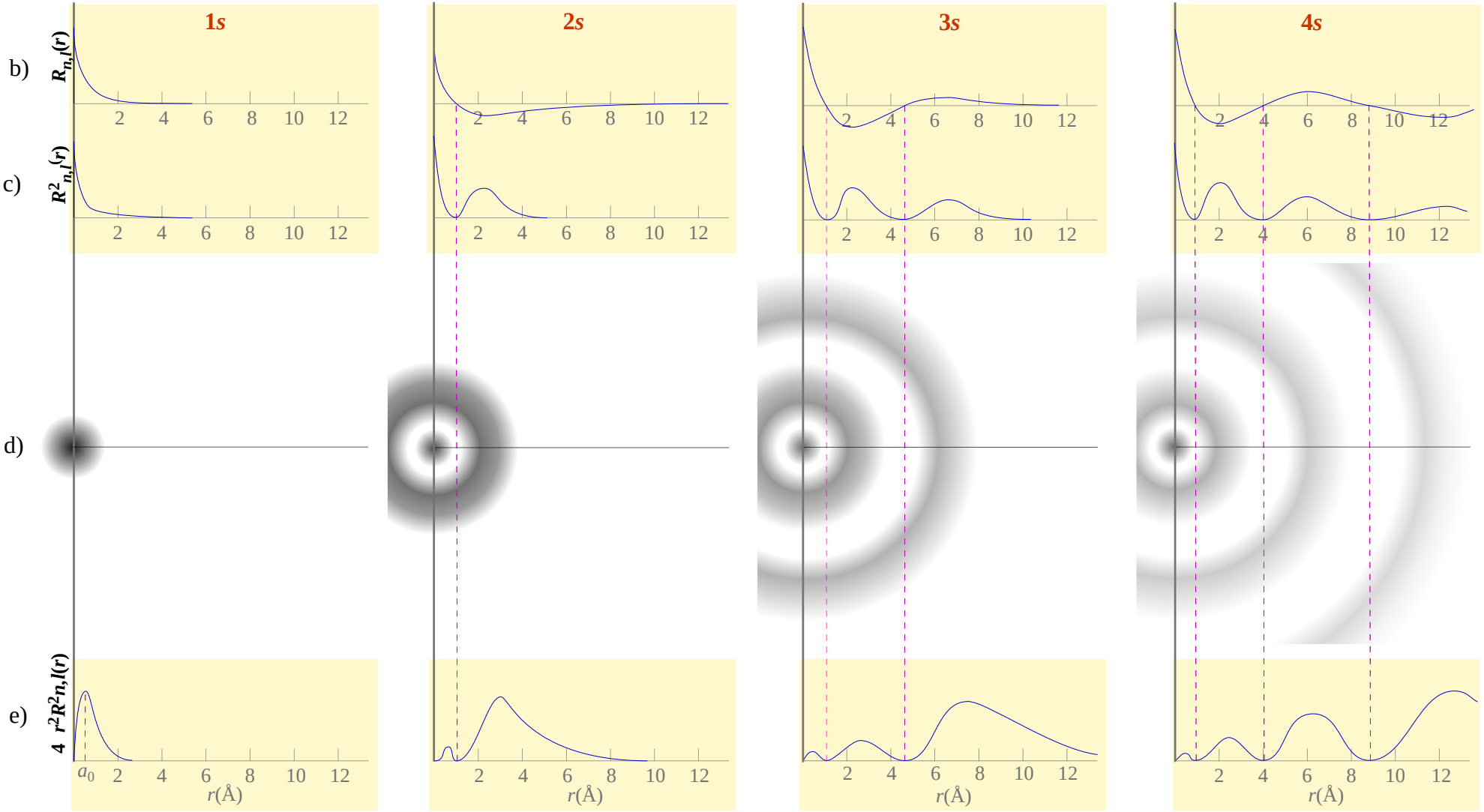
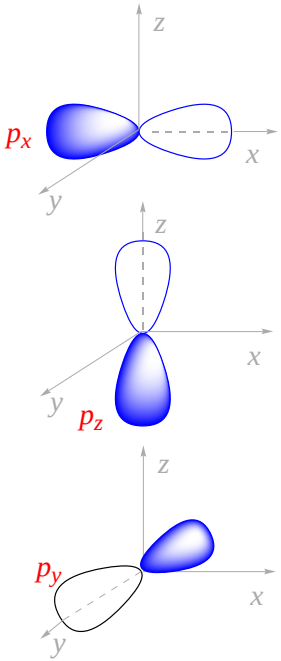


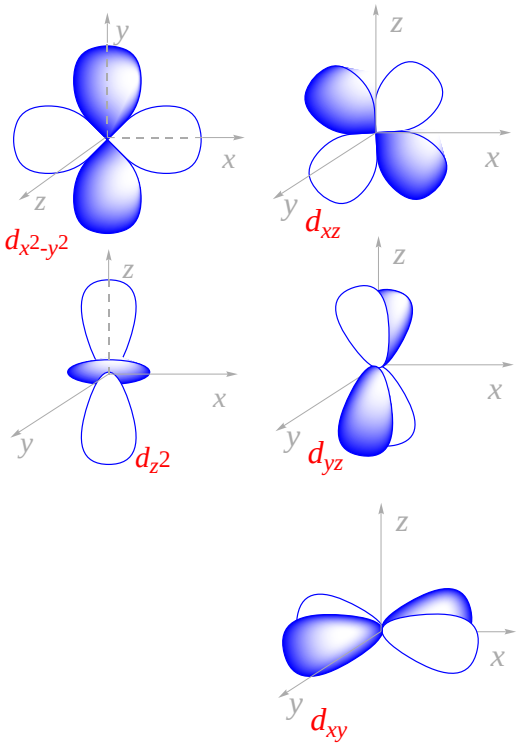
Tabla 1.6. Funciones angulares $A_{l,ml}$ normalizadas para átomos o iones monoelectrónicos

Orbital	$A_{l,ml}(\theta, \phi)$*	$A_{l,ml}(x, y, z)$**
s	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
p_z	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} (z/r)$
p_x	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \operatorname{sen}\theta \cos\phi$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} (x/r)$
p_y	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} (y/r)$
d_{z^2}	$\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$	$\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} [(2z^2 - x^2 - y^2)/r^2]$
d_{zx}	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta \operatorname{sen}\theta \cos\phi$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} (zx/r^2)$
d_{zy}	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} (zy/r^2)$
$d_{x^2-y^2}$	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \operatorname{sen}^2\theta (2\cos^2\phi - 1)$	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} [(x^2 - y^2)/r^2]$
d_{xy}	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \operatorname{sen}^2\theta \operatorname{sen}\phi \cos\phi$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} (xy/r^2)$
f_{z^3}	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}} (5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}} [(2z^3 - 3x^2z - 3y^2z)/r^3]$
f_{z^2x}	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}} (5\cos^2\theta - 1) \operatorname{sen}\theta \cos\phi$	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}} [(4z^2x - x^3 - y^2x)/r^3]$
f_{z^2y}	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}} (5\cos^2\theta - 1) \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi$	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}} [(4z^2y - x^2y - y^3)/r^3]$
$f_{z(x^2-y^2)}$	$\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{\pi}} \cos\theta \operatorname{sen}^2\theta (2\cos^2\phi - 1)$	$\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{\pi}} [z(x^2 - y^2)/r^3]$
f_{zxy}	$\frac{\sqrt{105}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta \operatorname{sen}^2\theta \cos\phi \operatorname{sen}\phi$	$\frac{\sqrt{105}}{2\sqrt{\pi}} (zxy/r^3)$
f_{x^3}	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}} \operatorname{sen}^3\theta (4\cos^3\phi - 3\cos\phi)$	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}} [(x^3 - 3xy^2)/r^3]$
f_{y^3}	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}} \operatorname{sen}^3\theta (3\operatorname{sen}\phi - 4\operatorname{sen}^3\phi)$	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}} [(-y^3 + 3x^2y)/r^3]$

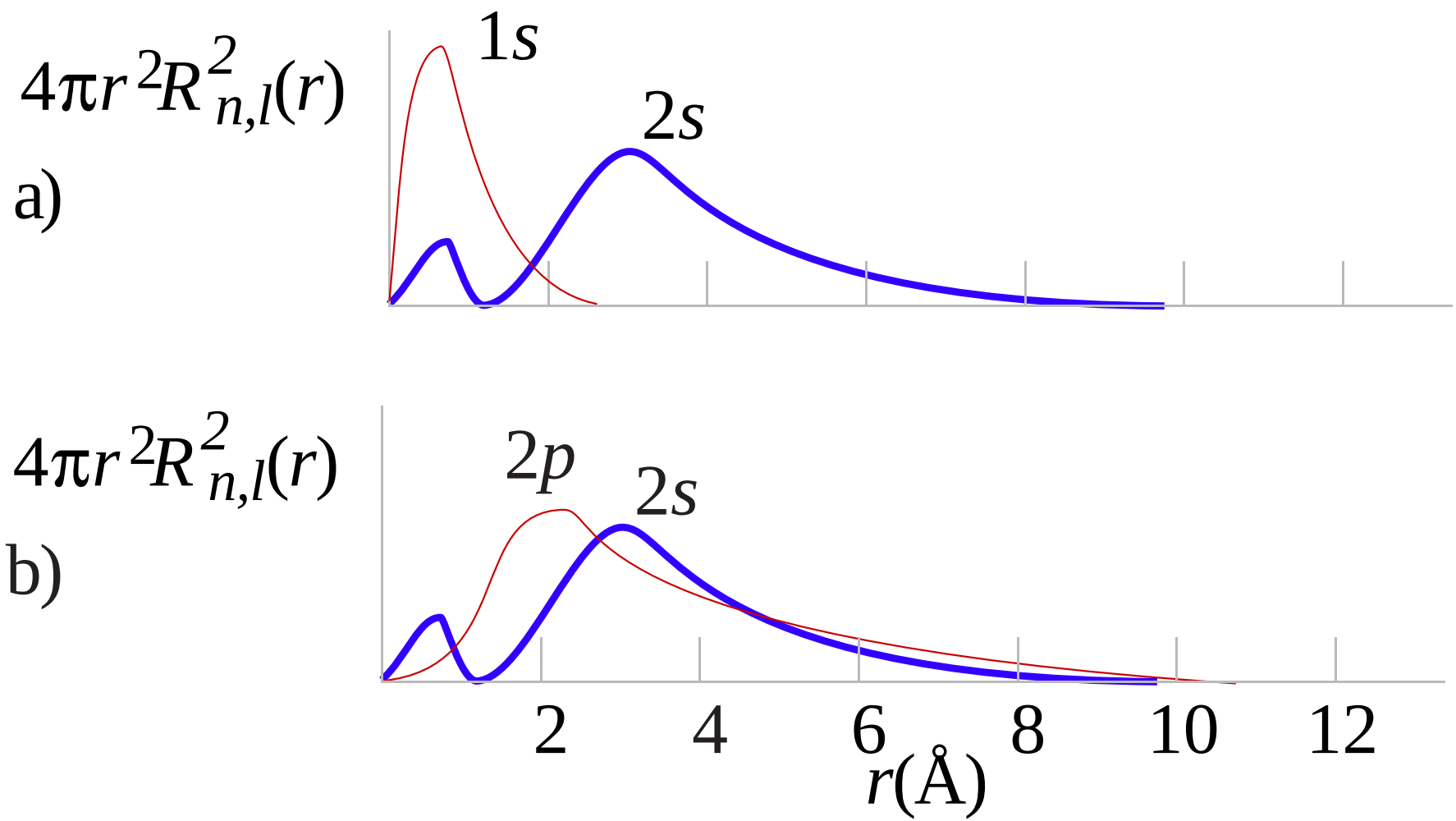
* Funciones en el sistema de coordenadas polares esféricas. ** Funciones en el sistema de coordenadas cartesiano.

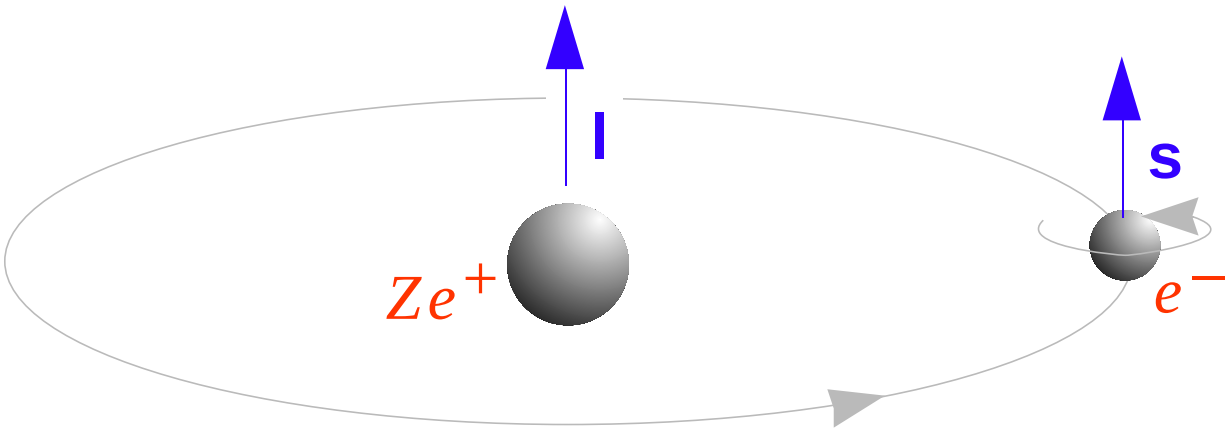
Parte Angular

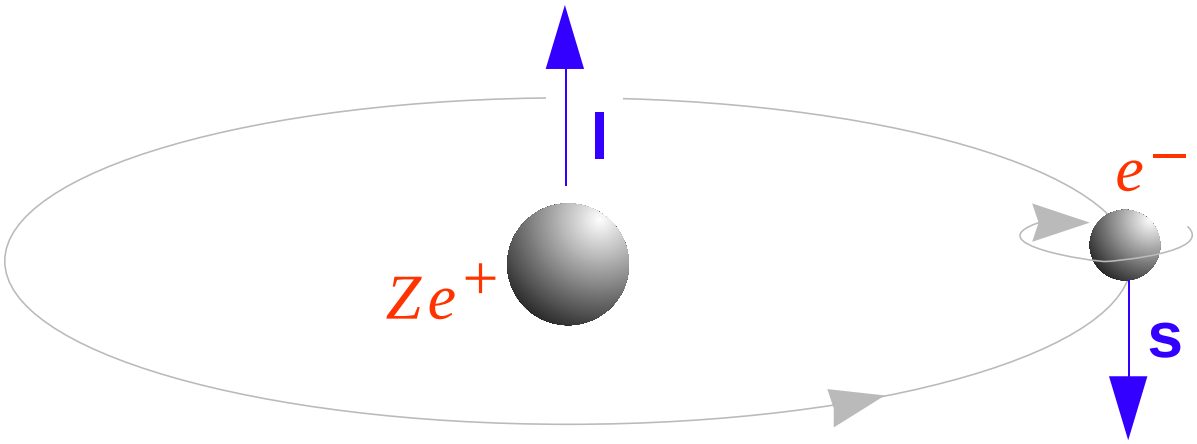


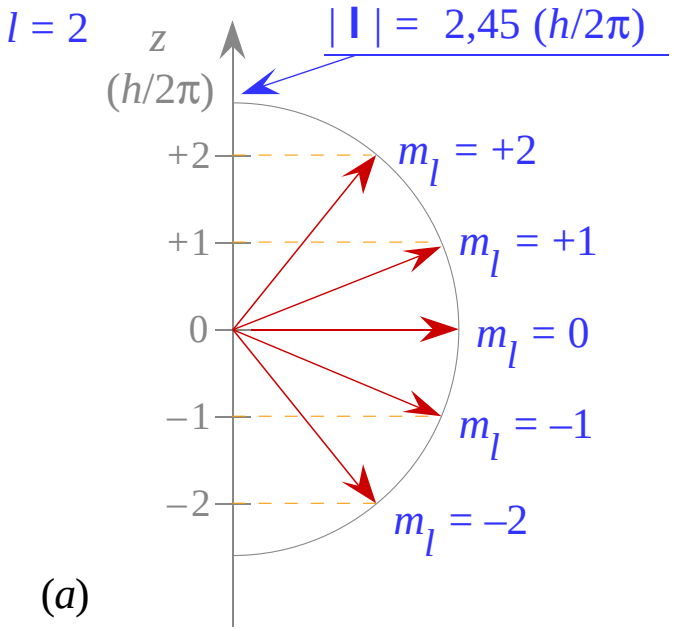


Parte Radial

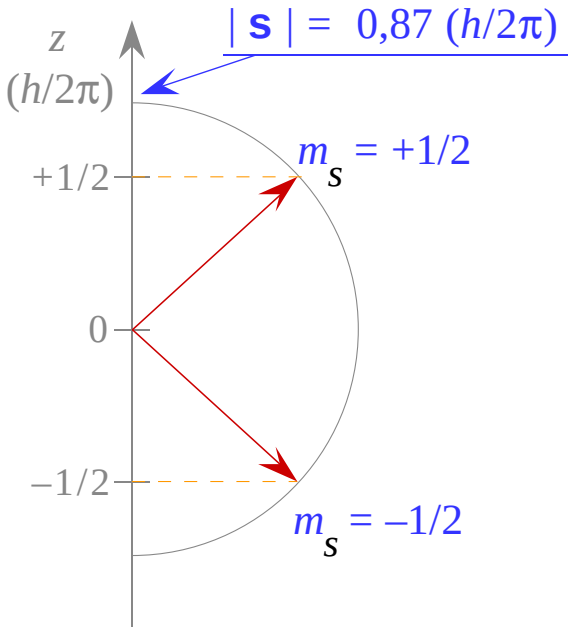

$4\pi r^2 R^2_{n,l}(r)$
a)
1s
2s
$4\pi r^2 R^2_{n,l}(r)$
b)
2p
2s
2
4
6
8
10
12
r(Å)


I
S
Ze^+
e^-

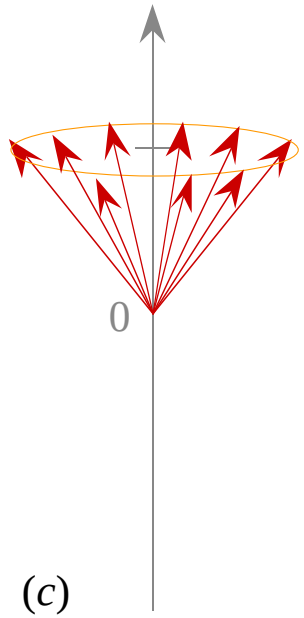

I
e^-
Ze^+
S


l = 2
z
(h/2π)
| l | = 2,45 (h/2π)
+2
+1
0
−1
−2
m_l = +2
m_l = +1
m_l = 0
m_l = −1
m_l = −2

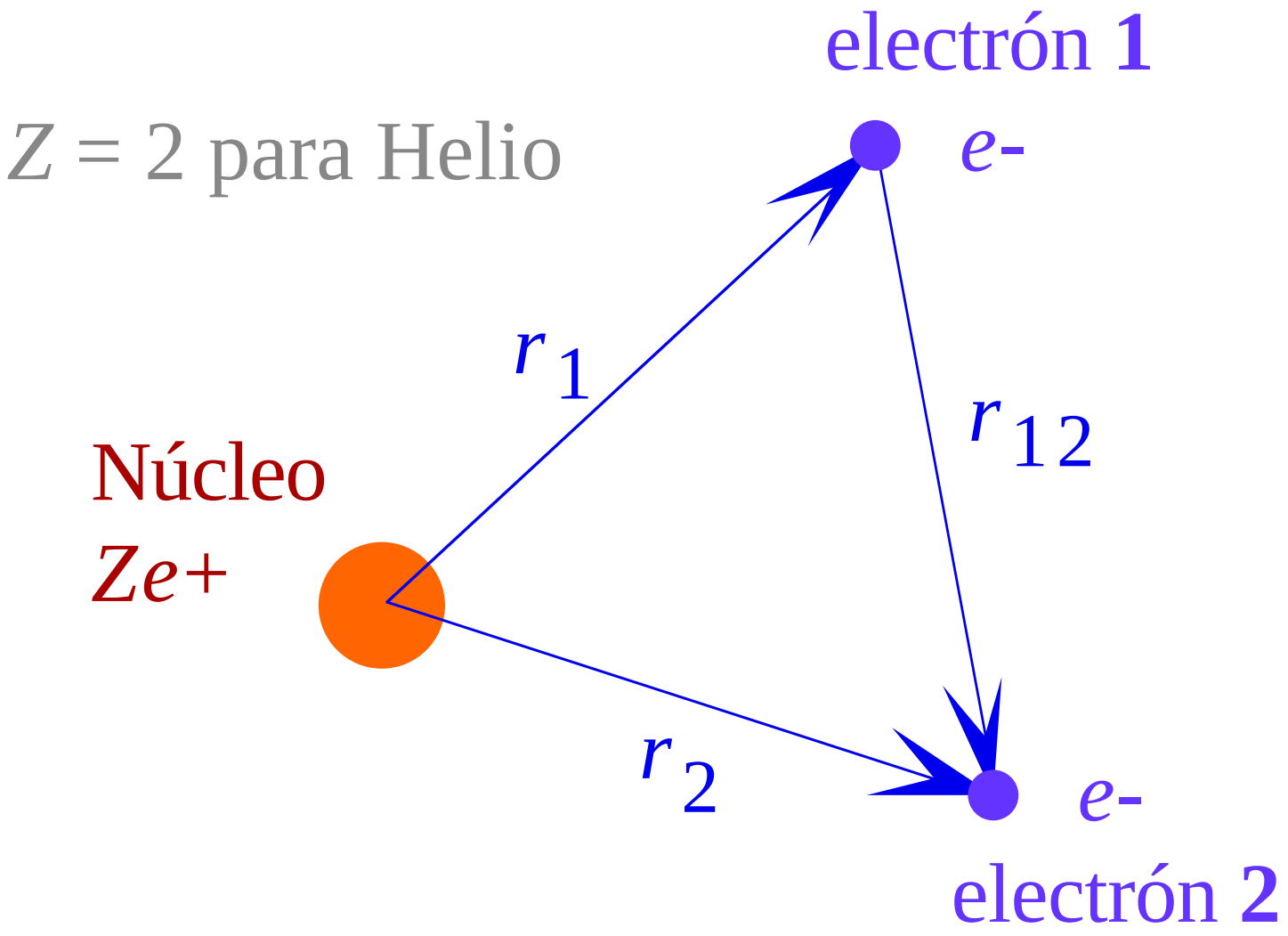
(*a*)


z
(h/2π)
| s | = 0,87 (h/2π)
+1/2
0
−1/2
m_s = +1/2
m_s = −1/2

(*b*)


0

(*c*)


electrón **1**
Z = 2 para Helio
e-
r_1
r_{12}
Núcleo
Ze+
r_2
e-
electrón **2**

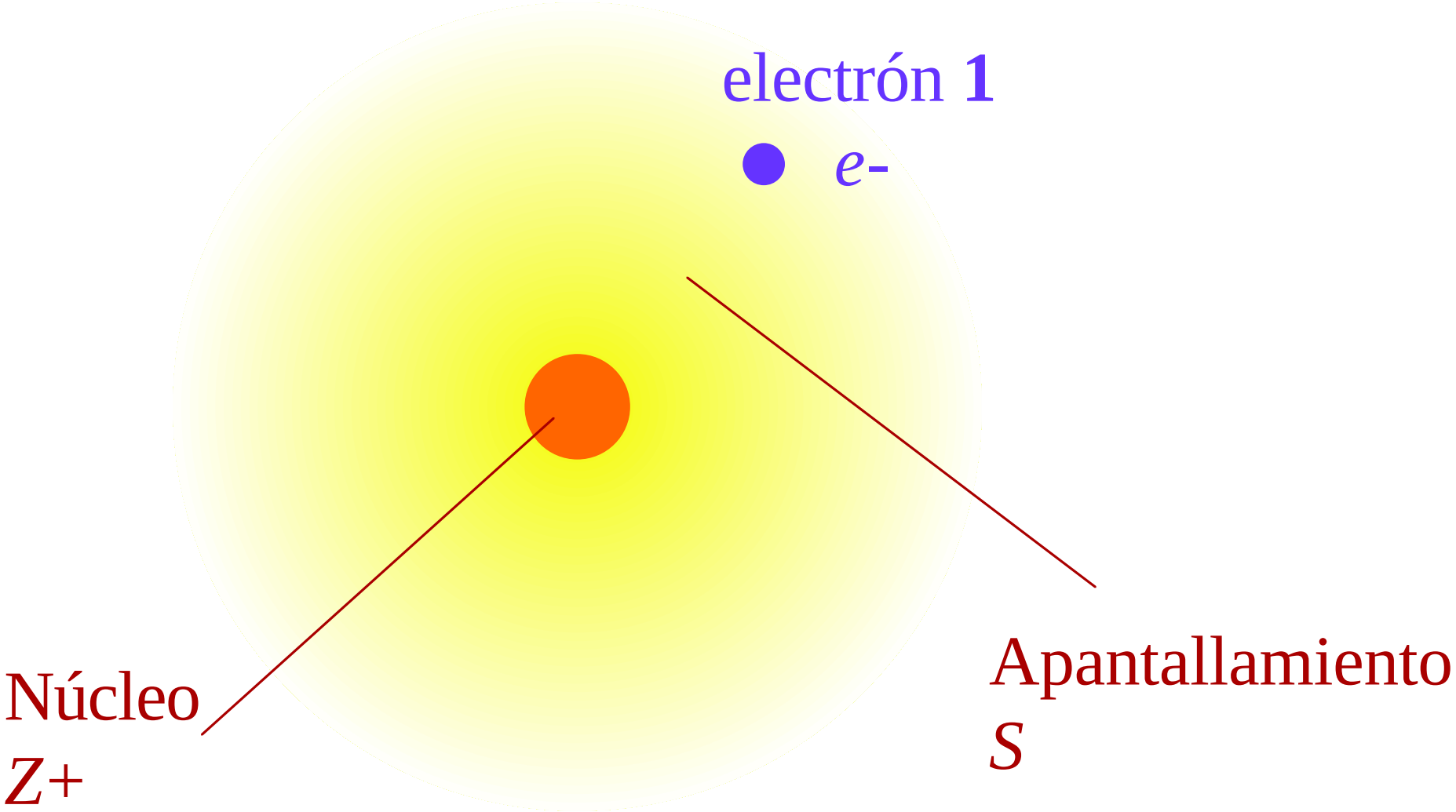
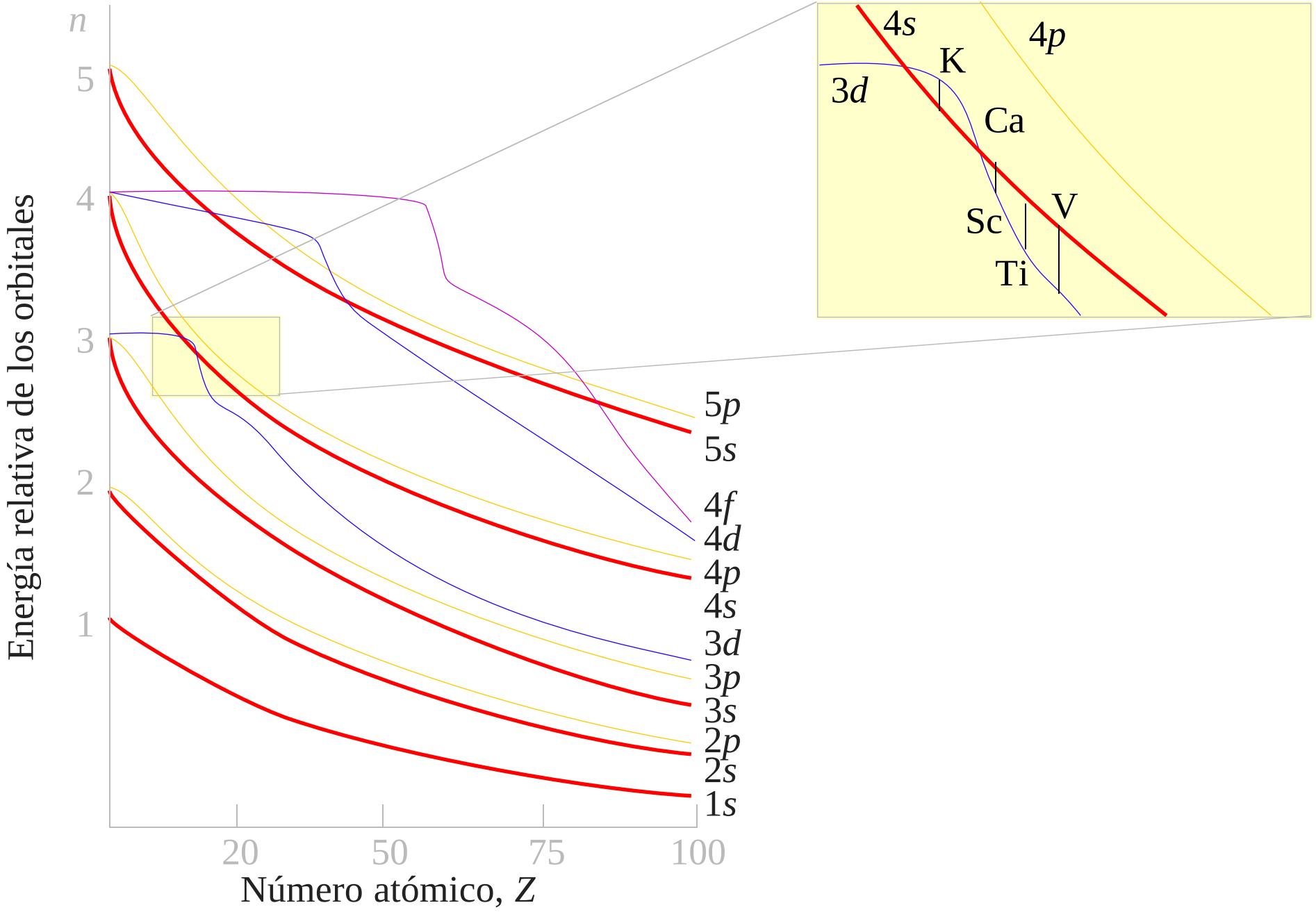

electrón **1**
e-
Núcleo
Z+
Apantallamiento
S

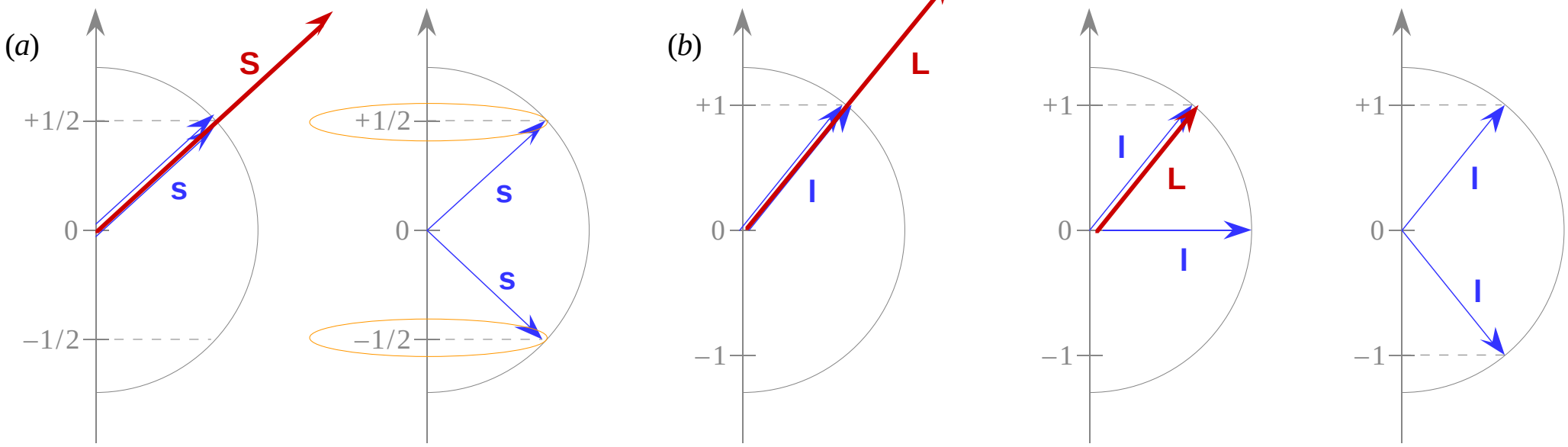
Tabla 1.7 (parcial). Cargas Nucleares Efectivas de los elementos del 1 al 36

Elemento	*1s*	*2s*	*2p*	*3s*	*3p*	*4s*
H	**1,000**					
He	**1,688**					
Li	2,691	**1,279**				
Be	3,685	**1,912**				
B	4,680	2,576	**2,421**			
C	5,673	3,217	**3,136**			
N	6,665	3,847	**3,834**			
O	7,658	4,492	**4,453**			
F	8,650	5,128	**5,100**			
Ne	9,642	5,758	**5,758**			
Na	10,626	6,571	6,802	**2,507**		
Mg	11,619	7,392	7,826	**3,308**		
Al	12,591	8,214	8,963	4,117	**4,066**	
Si	13,575	9,020	9,945	4,903	**4,285**	
P	14,558	9,825	10,961	5,642	**4,886**	
S	15,541	10,629	11,977	6,367	**5,482**	
Cl	16,524	11,430	12,993	7,068	**6,116**	
Ar	17,508	12,230	14,008	7,757	**6,764**	
K	18,490	13,006	15,027	8,680	7,726	**3,495**

Tabla 1.8. Energías calculadas para el helio en su estado fundamental a partir de funciones de onda aproximadas

	Tipo de función de onda	*Energía (en eV)*
1	Producto de orbitales del He^+ (aprox. orbital)	–74,83
2	Producto de orbitales con Z^* fijada por el método SCF	–77,48
3	Producto de funciones más apropiado	–77,870917
4	Función no orbitalaria de Pekeris (combinación lineal de 1078 términos)	–79,00946912
	Valor experimental ($I_1 + I_2$)	**–79,014**


n
5
4
3
2
1
Energía relativa de los orbitales
5p
5s
4f
4d
4p
4s
3d
3p
3s
2p
2s
1s
20
50
75
100
Número atómico, Z
4s
4p
K
3d
Ca
Sc
V
Ti



$s = 1/2$
$S = 1$
$M_S = +1, 0, -1$

$s = 1/2$
$S = 0$
$M_S = 0$

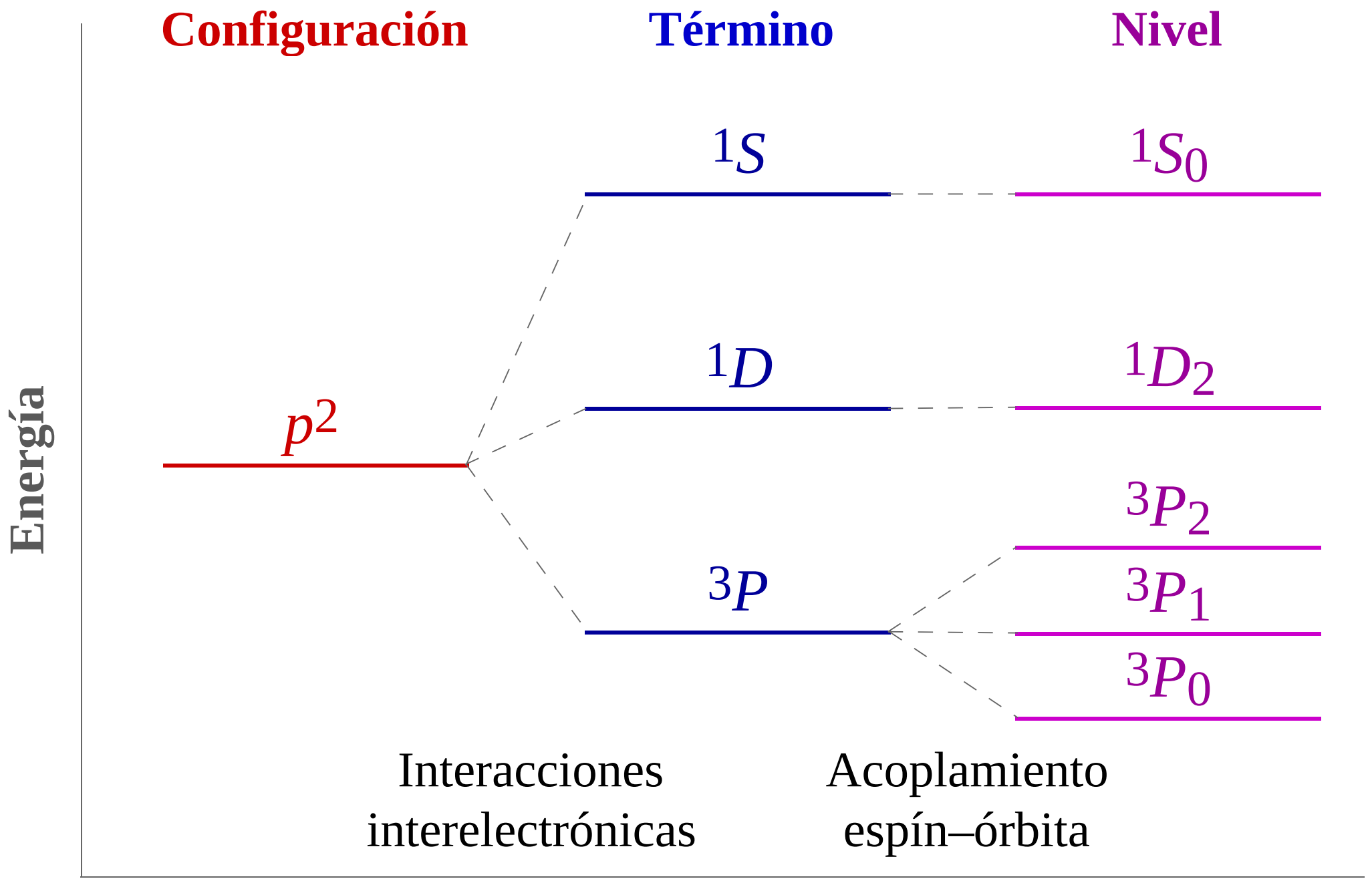
$l = 1$
$L = 2$
$M_L = +2, +1, 0, -1, -2$

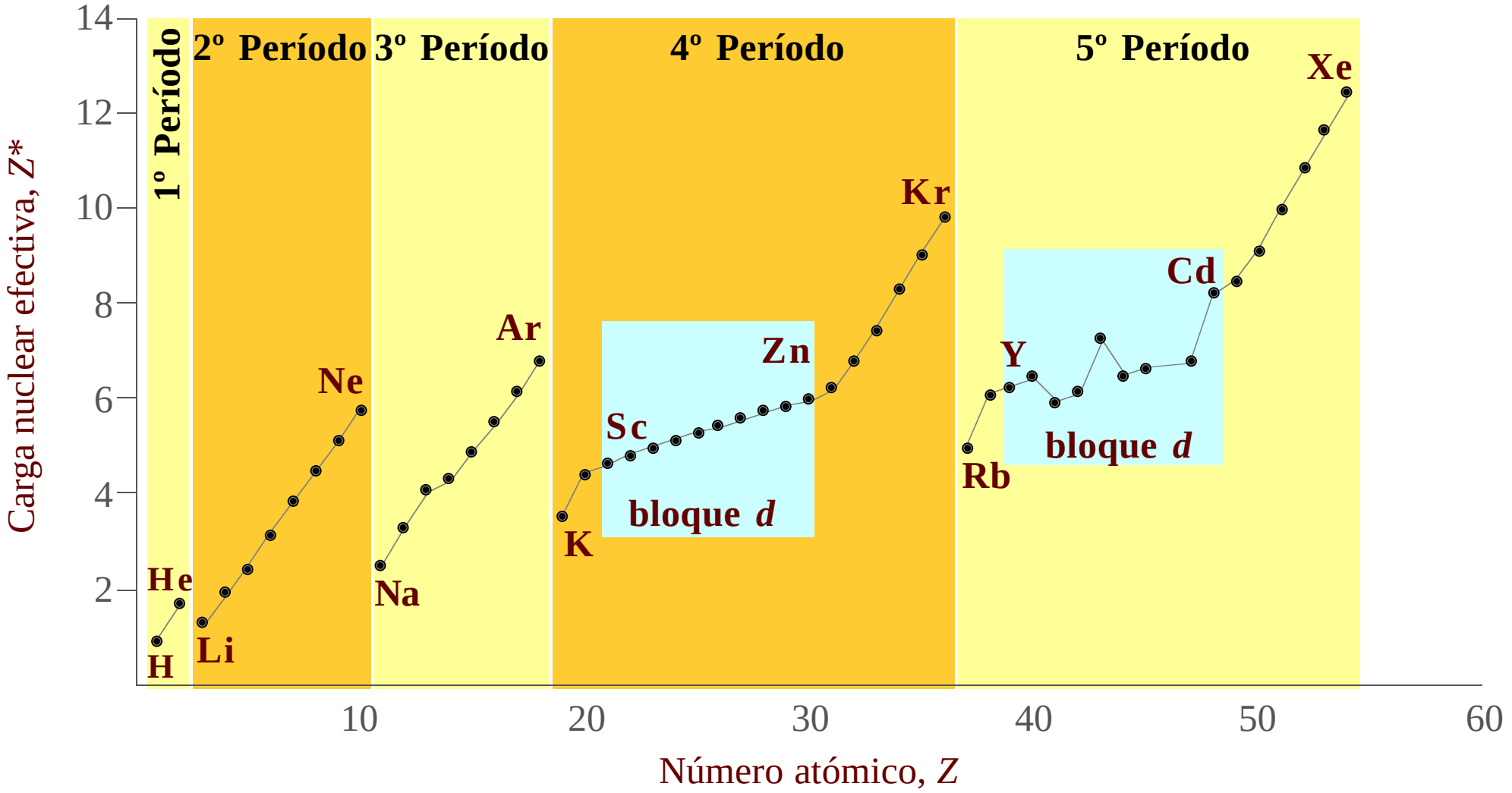
$l = 1$
$L = 1$
$M_L = +1, 0, -1$

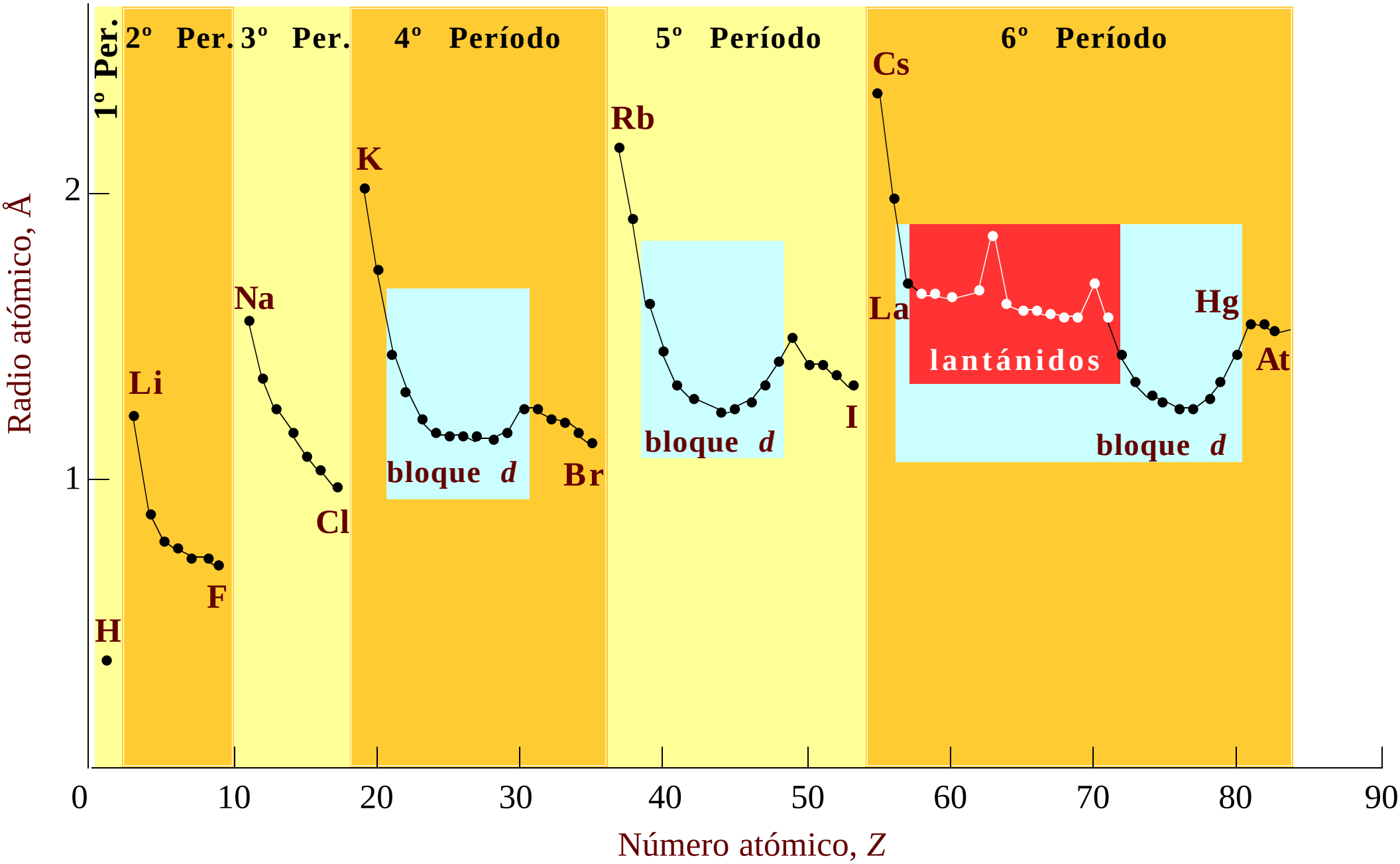
$l = 1$
$L = 0$
$M_L = 0$

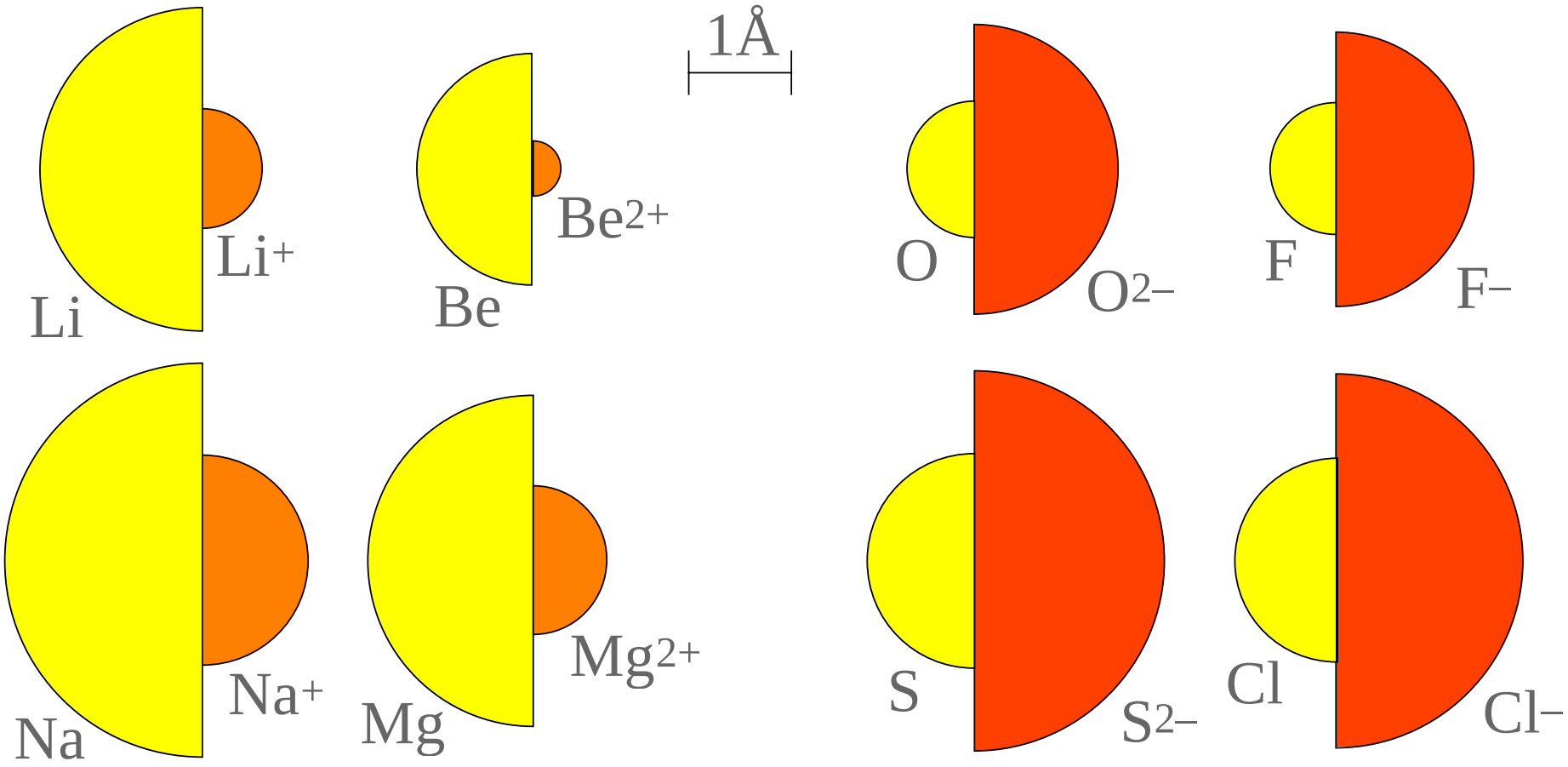
Tabla 1.10. Términos Russell–Saunders para algunas configuraciones

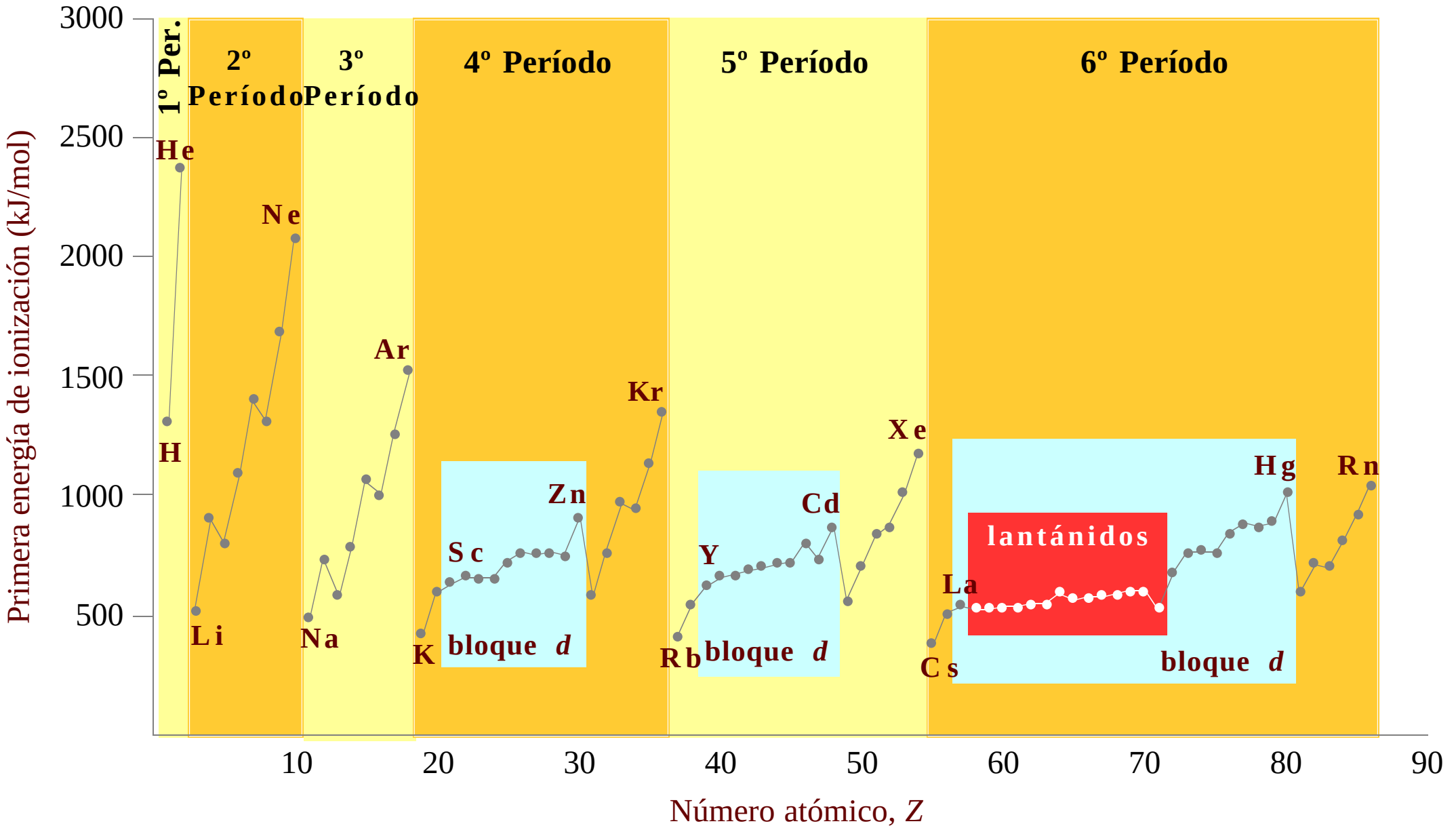
Configuración	*Términos*	*Término fundamental*
s^1	^2S	^2S
s^2	^1S	^1S
p^1 y p^5	^2P	^2P
p^2 y p^4	^1S, ^1D, ^3P	^3P
p^3	^2P, ^2D, ^4S	^4S
p^6	^1S	^1S
d^1 y d^9	^2D	^2D
d^2 y d^8	^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F	^3F
d^3 y d^7	^2P, $^2D(2)$, ^2F, ^2G, ^2H, ^4P, ^4F	^4F
d^4 y d^6	$^1S(2)$, $^1D(2)$, ^1F, $^1G(2)$, ^1I, $^3P(2)$, ^3D, $^3F(2)$, ^3G, ^3H, ^5D	^5D
d^5	^2S, ^2P, $^2D(3)$, $^2F(2)$, ^1I, $^2G(2)$, ^3H, ^2I, ^4P, ^4D, ^4F, ^4G, ^6S	^6S

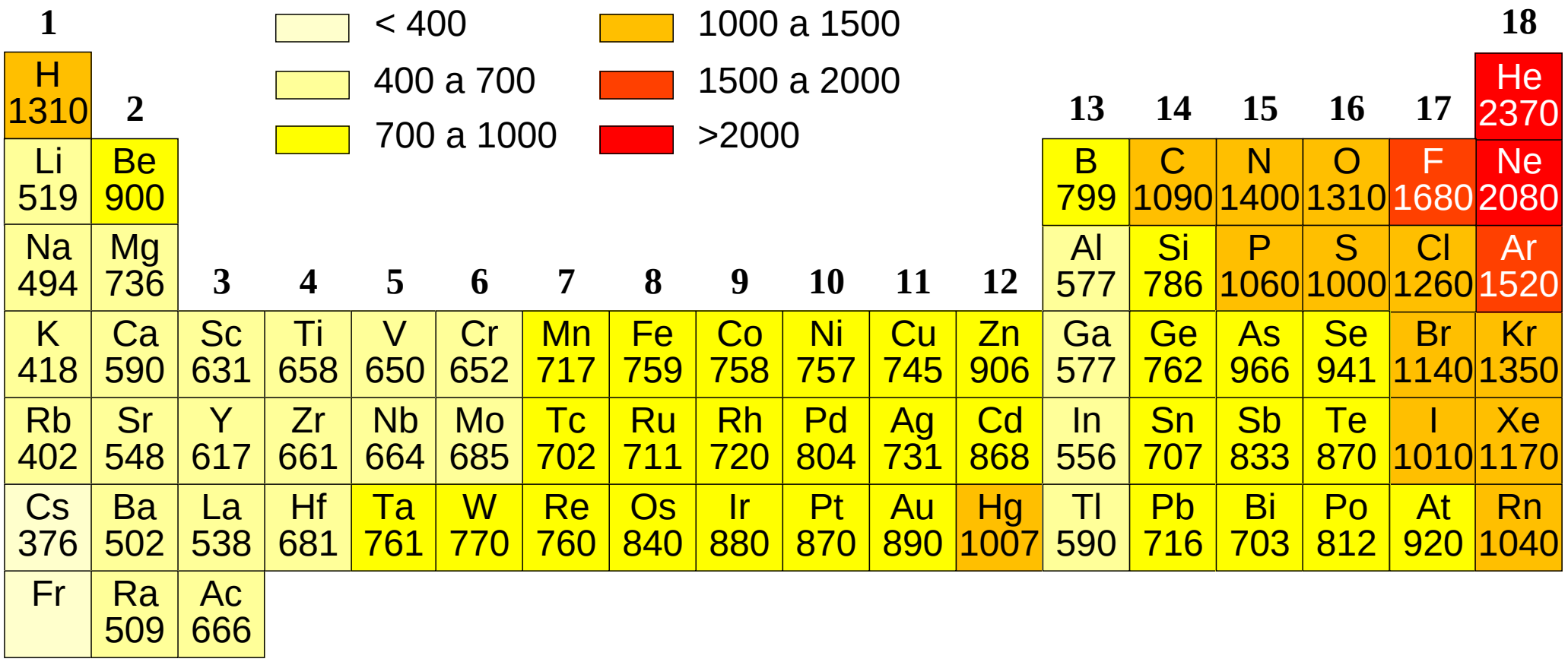

Configuración
Término
Nivel
Energía
p^2
^1S
^1D
^3P
$^1S_0$
$^1D_2$
$^3P_2$
$^3P_1$
$^3P_0$
Interacciones interelectrónicas
Acoplamiento espín–órbita


1º Período
2º Período
3º Período
4º Período
5º Período
H
He
Li
Ne
Na
Ar
K
Sc
Zn
Kr
Rb
Y
Cd
Xe
bloque d
bloque d
14
12
10
8
6
4
2
10
20
30
40
50
60
Carga nuclear efectiva, Z*
Número atómico, Z


1º Per.
2º Per.
3º Per.
4º Período
5º Período
6º Período
Radio atómico, Å
Número atómico, Z
H
Li
F
Na
Cl
K
Br
Rb
I
Cs
La
lantánidos
Hg
At
bloque d
bloque d
bloque d
0
10
20
30
40
50
60
70
80
90
1
2


1Å
Li
Li+
Be
Be2+
O
O2–
F
F–
Na
Na+
Mg
Mg2+
S
S2–
Cl
Cl–


Primera energía de ionización (kJ/mol)
3000
2500
2000
1500
1000
500
10
20
30
40
50
60
70
80
90
Número atómico, Z
1º Per.
2º Período
3º Período
4º Período
5º Período
6º Período
He
H
Li
Ne
Na
Ar
K
Sc
Zn
bloque d
Kr
Rb
Y
Cd
bloque d
Xe
Cs
La
lantánidos
bloque d
Hg
Rn


< 400
400 a 700
700 a 1000
1000 a 1500
1500 a 2000
>2000
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
H 1310
He 2370
Li 519
Be 900
B 799
C 1090
N 1400
O 1310
F 1680
Ne 2080
Na 494
Mg 736
Al 577
Si 786
P 1060
S 1000
Cl 1260
Ar 1520
K 418
Ca 590
Sc 631
Ti 658
V 650
Cr 652
Mn 717
Fe 759
Co 758
Ni 757
Cu 745
Zn 906
Ga 577
Ge 762
As 966
Se 941
Br 1140
Kr 1350
Rb 402
Sr 548
Y 617
Zr 661
Nb 664
Mo 685
Tc 702
Ru 711
Rh 720
Pd 804
Ag 731
Cd 868
In 556
Sn 707
Sb 833
Te 870
I 1010
Xe 1170
Cs 376
Ba 502
La 538
Hf 681
Ta 761
W 770
Re 760
Os 840
Ir 880
Pt 870
Au 890
Hg 1007
Tl 590
Pb 716
Bi 703
Po 812
At 920
Rn 1040
Fr
Ra 509
Ac 666

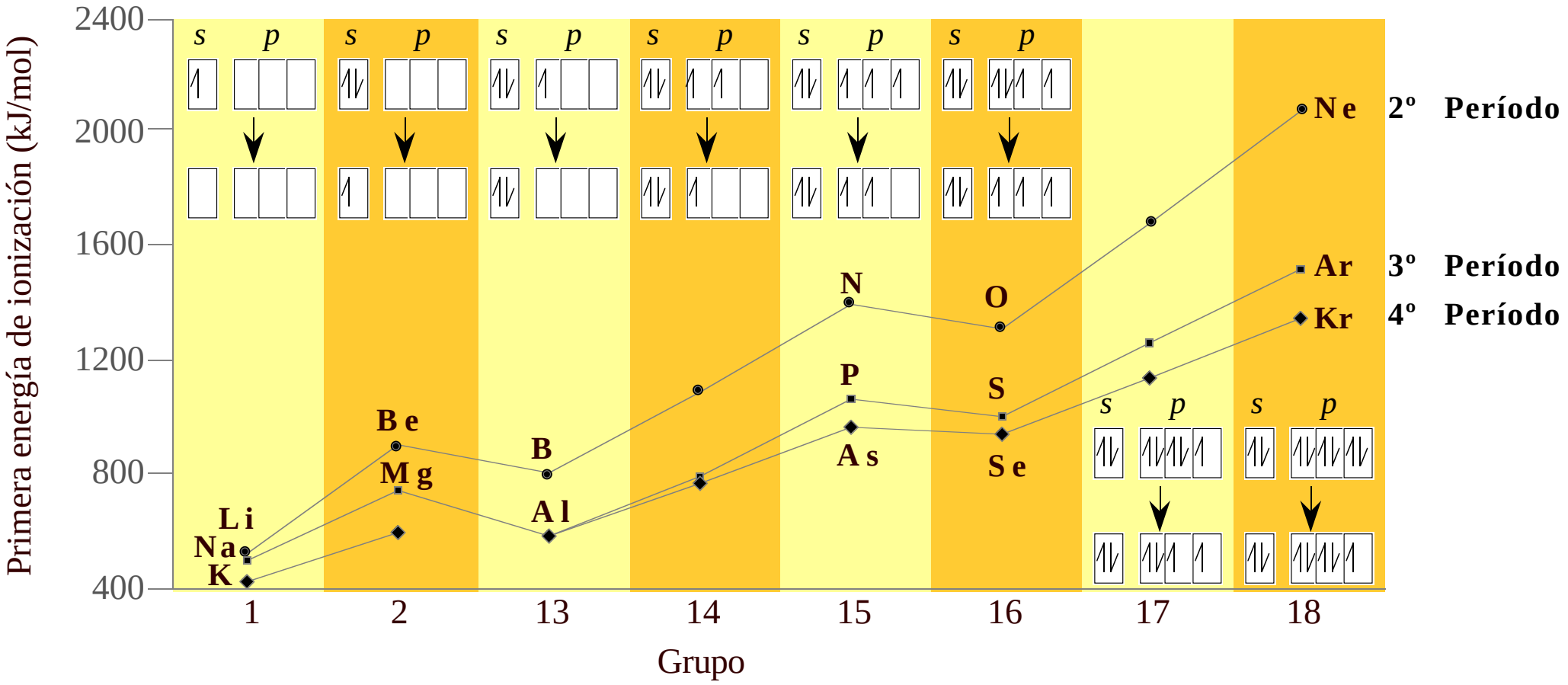
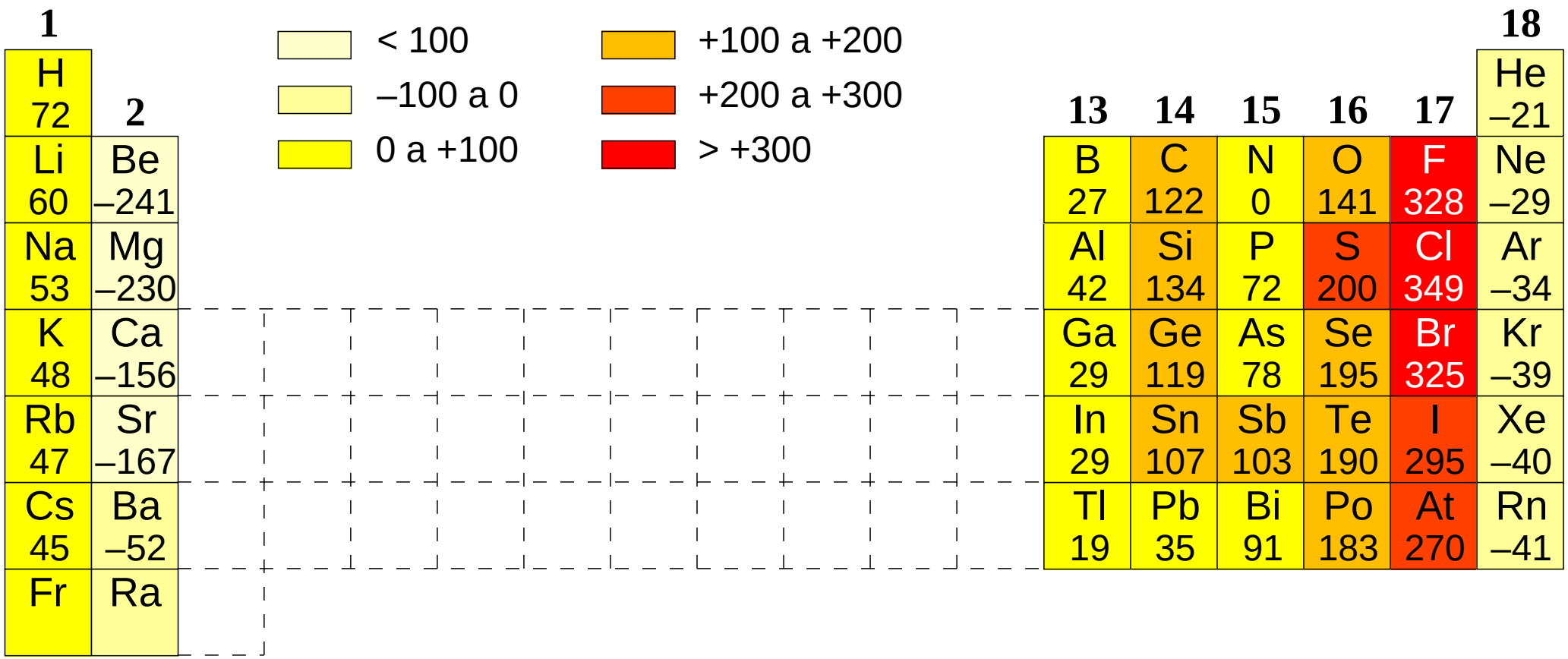

Primera energía de ionización (kJ/mol)
2400
2000
1600
1200
800
400
1
2
13
14
15
16
17
18
Grupo
s
p
Li
Na
K
Be
Mg
B
Al
N
P
As
O
S
Se
Ne
Ar
Kr
2º Período
3º Período
4º Período

Tabla 1.11. Energías de ionización de los elementos del 2 al 5

Elemento	*Primera*	*Segunda*	*Tercera*	*Cuarta*
He	2372 kJ mol^{-1}			
Li	519 kJ mol^{-1}	7300 kJ mol^{-1}		
Be	900 kJ mol^{-1}	1760 kJ mol^{-1}	14800 kJ mol^{-1}	
B	799 kJ mol^{-1}	2420 kJ mol^{-1}	3660 kJ mol^{-1}	25000 kJ mol^{-1}


1
2
13
14
15
16
17
18
< 100
–100 a 0
0 a +100
+100 a +200
+200 a +300
> +300
H 72
He –21
Li 60
Be –241
B 27
C 122
N 0
O 141
F 328
Ne –29
Na 53
Mg –230
Al 42
Si 134
P 72
S 200
Cl 349
Ar –34
K 48
Ca –156
Ga 29
Ge 119
As 78
Se 195
Br 325
Kr –39
Rb 47
Sr –167
In 29
Sn 107
Sb 103
Te 190
I 295
Xe –40
Cs 45
Ba –52
Tl 19
Pb 35
Bi 91
Po 183
At 270
Rn –41
Fr
Ra