

Guía 2: Átomos multielectrónicos

A. Átomos con dos electrones: el ejemplo de Helio y H⁻

1. Escriba el Hamiltoniano de un átomo formado por un núcleo de carga Z y dos electrones. Se propone como solución para el estado fundamental a $\Phi_{1s^2}(q_1, q_2) = \phi_{1s}(\vec{r}_1) \phi_{1s}(\vec{r}_2) \chi_{00}$ con $\phi_{1s}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\xi^3}{\pi}} \exp(-\xi r)$

y $\chi_{00} = [\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2] / \sqrt{2}$ la función de spin (antisimétrica, como corresponde a fermiones, de manera que verifica Principio de exclusión de Pauli)

a) Verifique que Φ_{1s^2} está normalizada

b) Demuestre que $\langle E \rangle = \langle \Phi_{1s^2} | H | \Phi_{1s^2} \rangle = \xi^2 - 2\xi Z + \frac{5}{8}\xi$

c) Halle el valor de ξ que minimiza $\langle E \rangle$ y el valor de $\langle E \rangle_{1s^2}$ en ese caso. Este valor de $\xi = \xi_0$ puede pensarse como la carga del núcleo apantallada por el otro electrón.

2. Utilizando la aproximación del problema anterior

a) Halle el valor de ξ para el átomo de He y la energía. Compare con el valor exacto de $E_{1s^2} = -79.01$ eV.

b) Escriba la expresión de $\phi_{1s}(r)$ para un electrón del He. Compárela gráficamente con los dos resultados Hartree-Fock más usados en atómica: el de Bunge¹ $\phi_{1s}^{Bunge}(r)$ y el de Clementi-Roetti² $\phi_{1s}^{CR}(r)$ donde las funciones espaciales son combinaciones de orbitales de Slater de la siguiente forma:

$$\phi_{1s}^{Bunge}(r) = 1.3479 S_{1s}(1.4595, r) - 0.001613 S_{3s}(5.3244, r) - 0.1005 S_{2s}(2.6298, r) - 0.27078 S_{2s}(1.7504, r)$$

$$\phi_{1s}^{CR}(r) = 0.76838 S_{1s}(1.41714, r) + 0.22346 S_{1s}(2.37682, r) + 0.04082 S_{1s}(4.39628, r) - 0.00994 S_{1s}(6.52699, r) + 0.0023 S_{1s}(7.94252, r)$$

donde las funciones de Slater son $S_{nl}(\xi, r) = \frac{(2\xi)^{n+1/2}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi r}$, y la energía total es $E_{1s^2} = -77.86$ eV.

c) Verifique si las funciones aproximadas del He (la hallada en a), la de Bunge y la de Clementi-Roetti) verifican la condición de Kato.

3. Sea el átomo de He en el estado excitado 1s2s. Escriba las posibles configuraciones e identifíquelas con la notación ^{2s+1}L , donde s y L son el spin y el momento angular del sistema de dos electrones. Por ejemplo el triplete 3S o el singlete 1S .

4. Considere el caso del H⁻, núcleo de H y dos electrones ligados. Se sabe que este ion es estable con un valor experimental $E_{1s^2} = -0.528$ a.u. Repita el método variacional simple del problema 1 y muestre que se obtiene una carga apantallada $\xi_0 = 0.6875$ a.u. Obtenga E_{1s^2} de H⁻ en esta aproximación y compárela con la energía del 1s del H neutro y con el valor de E_{1s^2} experimental ¿Qué conclusiones saca?

¹ Bunge et al, *Rootaahn-Hartree-Fock ground state atomic wave functions, Slater-type orbital expansions and expectation values for Z=2-54*. Atomic Data and Nuclear Data Tables **53**, 113-162 (1993).

² Clementi y Roetti, *Rootaahn-Hartree-Fock atomic wave functions, Basis Functions and Their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and Ionized Atoms, Z hasta 54*. Atomic Data and Nuclear Data Tables **14**, 177-478 (1974).

5. Se define el potencial de ionización como la mínima energía que hay que entregar para pasar de tener N electrones ligados a tener N-1. Por ejemplo en el caso del He esto es $I_p = E_{1s}(He^+) - E_{1s}^2(He)$. Los potenciales de ionización para algunos iones con dos electrones son:

| ion | H ⁺ | He | Li ⁺ | Be ⁺² |
|-----------------------------|----------------|-------|-----------------|------------------|
| I_p (a.u.) | 0.028 | 0.904 | 2.780 | 5.660 |

Halle los valores que se obtienen con el modelo variacional a primer orden del problema 1. La diferencia fundamental está en H⁺ para el cual I_p da negativa!

6. Una función conveniente para describir el estado fundamental del H⁺ es la de Chandrasekhar, dada por $\Phi_{1s^2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{4\pi} N (e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\beta r_1 - \alpha r_2})$ con $N=0.3948$, $\alpha=1.039$ y $\beta=0.283$. Muestre que esta función está normalizada a 1 y que el valor medio de la energía es -0.514 a.u., con lo cual predice un H⁺ estable con I_p>0, aunque todavía lejos del valor experimental. Al final de la guía se incluyen algunas integrales de interés. Puede hacerse analíticamente o con algún programa de matemática para cálculo y gráficos.

7. Un átomo de He es excitado del estado fundamental al 2s4p por absorción de luz ultravioleta. Asumiendo que el electrón 2s se mueve en el campo coulombiano sin apantallar del núcleo y que el electrón 4p en el potencial apantallado -1/r

- Obtenga la energía del estado 2s4p del He y la longitud de onda de la radiación ultravioleta absorbida
- Si el He 2s4p decae en un proceso Auger a He⁺(1s) y un electrón libre. Encuentre la velocidad del electrón emitido.

B. Hartree-Fock

Recordemos:

El operador de antisimetrización \hat{A} , definido como $\hat{A} = (\sqrt{N!})^{-1} \sum (-1)^p \hat{P}$, con \hat{P} operador de permutación, permite construir funciones antisimétricas de N fermiones $A|\chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N)\rangle$ a partir las funciones $|\chi_i\rangle$ de una partícula. Puede demostrarse que si $\{|\chi_i\rangle\}$ es una base ortonormal entonces el conjunto $\{A|\chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N)\}$ también es una base ortonormal. Otra notación para $A|\chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N)\rangle$ es como determinante de Slater.

Dado el Hamiltoniano de N fermiones $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} g(i,j)$. Puede demostrarse que

i) que el operador de antisimetrización conmuta con el hamiltoniano: $[\hat{H}_1, \hat{A}]$ y $[\hat{H}_2, \hat{A}]$

ii) que si $\{|\chi_i\rangle\}$ verifican que $\hat{h}(i)|\chi_\alpha(i)\rangle = e_\alpha|\chi_\alpha(i)\rangle$ entonces $|\Phi(1, \dots, N)\rangle = |\chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N)\rangle$ es una

autofunción de $\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i)$ con autovalor $E = \sum_{\alpha} e_{\alpha}$, y que el determinante de Slater $A|\chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N)\rangle$ tiene el mismo autovalor

7'. Dadas las funciones espaciales $\phi_a(\vec{r})$ y $\phi_b(\vec{r})$ y las funciones de spin α y β (ortonormales) pueden construirse funciones antisimétricas para el sistema de 2 electrones donde queden factorizadas la parte espacial y de spin

a) Escriba todas las combinaciones posibles. ¿Cuántas son? Construya una base de funciones antisimétricas $\Phi_i(q_1, q_2)$ (donde estamos representando con q a la dependencia espacial y de spin).

Chequee que es una base ortonormal. Identifique la simetría espacial y de spin y relacionelas con el valor de S y M_s .

b) Expresé el Hamiltoniano no relativista de un átomo con dos electrones. Calcule la energía media para cada uno de los estados de dos electrones señalados antes. Muestre que si bien el Hamiltoniano depende sólo de la variable espacial (y no del spin), la energía media sí lo hace!

8. Muestre que las ecuaciones de Hartree-Fock y de Hartree coinciden para el estado fundamental del He coinciden y son

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_r^2 + V_{HF}(r) \right] u_{1s}(r) = E_{1s} u_{1s}(r), \text{ donde el potencial Hartree-Fock } V_{HF}(r) \text{ es}$$

$$V_{HF} = -\frac{2}{r} + \int |u_{1s}(r')|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$$

9. Usando la solución radial de Byron y Joachain para el He neutro: $u_{1s}(r) = (4\pi)^{-1/2} (A e^{-\alpha r} + B e^{-\beta r})$, con $A=2.60505$, $B=2.08144$, $\alpha=1.41$, $\beta=2.61$, evalúe y grafique el potencial de Hartree-Fock $V_{HF}(r)$.

Chequee que el potencial hallado cumple $\lim_{r \rightarrow 0} (rV_{HF}) = -2$ y $\lim_{r \rightarrow \infty} (rV_{HF}) = -1$. Interprete los resultados

en términos del apantallamiento de la carga nuclear. Ayuda: puede desarrollarse $|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1}$ armónicos

esféricos $\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{(2l+1)} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^{m*}(\hat{r}) Y_l^m(\hat{r}')$. Al final de la guía se incluyen algunas integrales de

interés. Puede hacerse analíticamente o con algún programa de matemática para cálculo y gráficos.

10. Dado el estado excitado del He (1s,2s) cuya configuración es 3S ,

a) represente en un esquema los 3 estados posibles, construya las funciones antisimétricas de 2 partículas donde quede factorizada la parte radial y de spin. Escriba las funciones en la forma de determinantes de Slater

b) obtenga el par de ecuaciones Hartree-Fock acopladas para los orbitales espaciales $u_{1s}(r)$ y $u_{2s}(r)$ para el caso $M_s=1$.

10'. Para el hamiltoniano del He (independiente de spines electrónicos) $\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \frac{1}{r_{12}}$, exprese

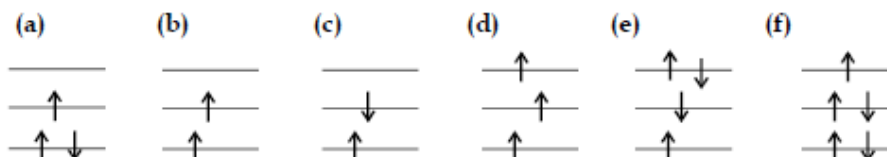
$E = \langle \hat{H} \rangle$ para el $1s^2$, y para el 1s,2s (triplete y singlete). Cuál de los estados excitados 1s2s es el de menor energía?

10''. Dado el Li^+ (1s,2p) represente los posibles estados 3P y 1P . Halle la degeneración de cada uno. Relacione la simetría de intercambio de la parte espacial y de spin con los autovalores de spin S^2 y Sz. Para el caso 1P exprese las funciones antisimétricas correspondientes (factorice la parte radial y de spin). Escriba las ecuaciones de Hartree-Fock para los orbitales $u_{1s}(r)$ y $u_{2p}(r)$ para el caso 1P .

10''. Exprese la energía total Hartree-Fock para los siguientes estados. Calculela por simple inspección, es decir en término de las contribuciones I (electrón independiente), J (e-e directo) y K (e-e de exchange) considerando con cuidado signos y en qué casos alguna de ellas se cancela

$$E_{TOTAL} = \sum_{\alpha} I_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} J_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} K_{\alpha\beta},$$

donde $I_{\alpha} = \langle \alpha | -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z}{r} | \alpha \rangle$; $J_{\alpha\beta} = \langle \alpha\beta | \frac{1}{r_{12}} | \alpha\beta \rangle$; $K_{\alpha\beta} = \langle \alpha\beta | \frac{1}{r_{12}} | \beta\alpha \rangle$



Compare las energías de las configuraciones (b) y (c). ¿A que se debe la diferencia? ¿Son iguales en la parte espacial?

C. Muchos electrones: Configuraciones, Tabla Periódica

Para los próximos problemas tenga en cuenta los **Anexos 1 a 5**

- 11.** Haga una lista de los términos $^{2s+1}L_J$ posibles de las configuraciones electrónicas: np^j , con $j=2,3,4,5,6$. Revise y justifique los resultados del Anexo 1
- 12.** Haga una lista de los términos $^{2s+1}L_J$ posibles configuraciones electrónicas: $ns n' s$; $ns n' p$, nd^2 . Revise y justifique los resultados del Anexo 1
- 13.** Analice los elementos de los grupos IA, VIIA de la Tabla Periódica y los gases nobles (vea Anexo 2). Tomando en cuenta el diagrama de Moeller (Anexo 3) y la regla de Hund escriba la configuración electrónica, haga un esquema de los valores de spin y exprese el término $^{2s+1}L_J$. Compare los resultados con las tablas del Anexo 4. Señale en que casos no hay coincidencia entre lo teórico y el resultado experimental. Revise la posición de estos elementos en la figura del Anexo 4. ¿Qué conclusiones puede señalar.
- 14.** Compare los elementos del grupo IIA y IIB de la Tabla Periódica. Tomando en cuenta el diagrama de Moeller (Anexo 3) y la regla de Hund escriba la configuración electrónica y exprese el término $^{2s+1}L_J$. Compare los resultados con las tablas del Anexo 4. Señale en que casos no hay coincidencia entre lo teórico y el resultado experimental.
- 15.** Los grupos IIIA a VIIA representan el llenado de la capa p que se completa para los gases nobles. Tomando en cuenta el diagrama de Moeller (Anexo 3) y la regla de Hund escriba la configuración electrónica y exprese el término $^{2s+1}L_J$. Compare los resultados con las tablas del Anexo 4. Señale en que casos no hay coincidencia entre lo teórico y el resultado experimental.
- 16.** Tomando en cuenta el diagrama de Moeller (Anexo 3) para el llenado de subcapas y la regla de Hund escriba la configuración electrónica y exprese el término $^{2s+1}L_J$ para los elementos $20 < Z < 31$. Compare con la tabla del Anexo 4. Señale características de los elementos de máximo spin.

17. Compare las configuraciones electrónicas del La y Hf dadas en la tabla del Anexo 4. Considere si se sigue el llenado de capas de Moeller o la regla de Hund. En base a esto cuál sería la configuración de los elementos 104 y 105

18. Explique las configuraciones electrónicas de Lantánidos. Use regla de Moeller (Anexo 3) y de Hund para dar configuraciones espaciales y de spin ¿Por qué están aparte en la tabla periódica? Compare con los resultados experimentales de la tabla del anexo 4. Ubique estos elementos en la figura del Anexo 5 e interprete la mezcla de estados f-d en relación a la figura de potenciales de ionización.

19. Use Moeller y la regla de Hund para dar las configuraciones espaciales y de spin de los 14 Actinidos. Compare con los resultados experimentales de la tabla del anexo 4. Ubique estos elementos en la figura del Anexo 5 e interprete la mezcla de estados f-d en relación a la figura de potenciales de ionización. ¿Cómo se relaciona la configuración electrónica del Lr (elemento 103) con Rf y Db (104 y 105).

20. El resultado HF para Cromo de Clementi-Roetti da 12 posibles configuraciones con energías muy similares (en http://users.df.uba.ar/mclaudia/e3/Cromo_HF_CR.pdf), con diferencias en el quinto dígito significativo. Haga un esquema de las configuraciones que propone este autor. Compare estas diferencias en energía con la energía térmica kT. Investigue en qué estado se halla el cromo en la naturaleza

Integrales de interés

$$\int d\vec{r} d\vec{u} \frac{e^{-ar-bu}}{|\vec{r}-\vec{u}|} = 32\pi^2 \frac{a^2 + 3ab + b^2}{a^2b^2(a+b)^3}$$

$$\int d\vec{r} \frac{e^{-ar}}{|\vec{r}-\vec{u}|} = \frac{4\pi}{ua^3} \{2(1 - e^{-au}) - au e^{-au}\}$$

Anexo 1. Posibles términos para las configuraciones nl^k

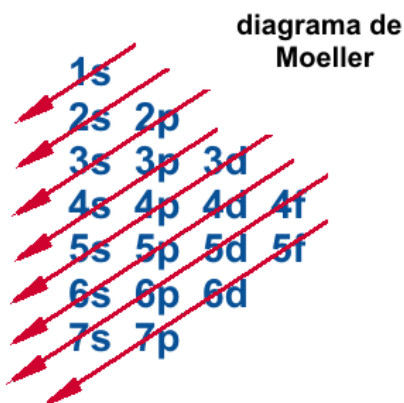
| Configuration | | | | | |
|---------------|--------|-------------------------------------|---------------------------|------|----------------------|
| ns | | 2S | | | |
| ns^2 | 1S | | | | |
| np | np^5 | 2P | | | |
| np^2 | np^4 | $^1S, ^1D$ | 3P | | 4S |
| np^3 | | $^2P, ^2D$ | | | |
| np^6 | 1S | | | | |
| nd | nd^9 | 2D | | | |
| nd^2 | nd^8 | $^1S, ^1D, ^1G$ | $^3P, ^3F$ | | $^4P, ^4F$ |
| nd^3 | nd^7 | $^2P, ^2D, ^2F, ^2G, ^2H$ | | | |
| nd^4 | nd^6 | $^1S, ^1D, ^1F, ^1G, ^1I$ | $^3P, ^3D, ^3F, ^3G, ^3H$ | | 1D |
| | | | 4 | 2 | |
| nd^5 | | $^2S, ^2P, ^2D, ^2F, ^2G, ^2H, ^2I$ | | | $^4P, ^4D, ^4F, ^4G$ |
| | | | 3 | 2 | 2 |
| nd^{10} | 1S | | | | 6S |

Anexo 2. Tabla Periódica de Elementos y Potenciales de Ionización

| Period | IA | IIA | IIIB | IVB | VB | VIB | VIIIB | VIIIB | VIIIB | IB | IIB | IIIA | IVA | VA | VIA | VIIA | Noble gases | |
|--------|--------------------|--------------------|---------------------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 1 | 1 H 1.008 | | | | | | | | | | | | | | | | 2 He 4.003 | |
| 2 | 3 Li 6.939 | 4 Be 9.012 | | | | | | | | | | 5 B 10.811 | 6 C 12.011 | 7 N 14.007 | 8 O 15.999 | 9 F 18.998 | 10 Ne 20.183 | |
| 3 | 11 Na 22.990 | 12 Mg 24.312 | | | | | | | | | | 13 Al 26.982 | 14 Si 28.086 | 15 P 30.974 | 16 S 32.064 | 17 Cl 35.453 | 18 Ar 39.948 | |
| 4 | 19 K 39.102 | 20 Ca 40.08 | 21 Sc 44.956 | 22 Ti 47.90 | 23 V 50.942 | 24 Cr 51.996 | 25 Mn 54.938 | 26 Fe 55.847 | 27 Co 58.933 | 28 Ni 58.71 | 29 Cu 63.54 | 30 Zn 65.37 | 31 Ga 69.72 | 32 Ge 72.59 | 33 As 74.922 | 34 Se 78.96 | 35 Br 79.909 | 36 Kr 83.80 |
| 5 | 37 Rb 85.47 | 38 Sr 87.62 | 39 Y 88.905 | 40 Zr 91.22 | 41 Nb 92.906 | 42 Mo 95.94 | 43 Tc (99) | 44 Ru 101.07 | 45 Rh 102.91 | 46 Pd 106.4 | 47 Ag 107.87 | 48 Cd 112.40 | 49 In 114.82 | 50 Sn 118.69 | 51 Sb 121.75 | 52 Te 127.60 | 53 I 126.90 | 54 Xe 131.30 |
| 6 | 55 Cs 132.91 | 56 Ba 137.34 | 57 [†] La 138.91 | 72 Hf 178.49 | 73 Ta 180.95 | 74 W 183.85 | 75 Re 186.2 | 76 Os 190.2 | 77 Ir 192.2 | 78 Pt 195.09 | 79 Au 196.97 | 80 Hg 200.59 | 81 Tl 204.37 | 82 Pb 207.19 | 83 Bi 208.98 | 84 Po (210) | 85 At (210) | 86 Rn (222) |
| 7 | 87 Fr (223) | 88 Ra (226) | 89 [†] Ac (227) | 104 | 105 | | | | | | | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | | | | | |
|------------------|--------------------|--------------------|--------------------|-------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| † Lanthanides | 58 Ce 140.12 | 59 Pr 140.91 | 60 Nd 144.24 | 61 Pm (145) | 62 Sm 150.35 | 63 Eu 151.96 | 64 Gd 157.25 | 65 Tb 158.92 | 66 Dy 162.50 | 67 Ho 164.93 | 68 Er 167.26 | 69 Tm 168.93 | 70 Yb 173.04 | 71 Lu 174.97 |
| † Actinides | 90 Th 232.04 | 91 Pa (231) | 92 U 238.03 | 93 Np (237) | 94 Pu (242) | 95 Am (243) | 96 Cm (247) | 97 Bk (249) | 98 Cf (251) | 99 Es (254) | 100 Fm (253) | 101 Md (256) | 102 No (259) | 103 Lr (262) |

Anexo 3. Diagrama de Moeller



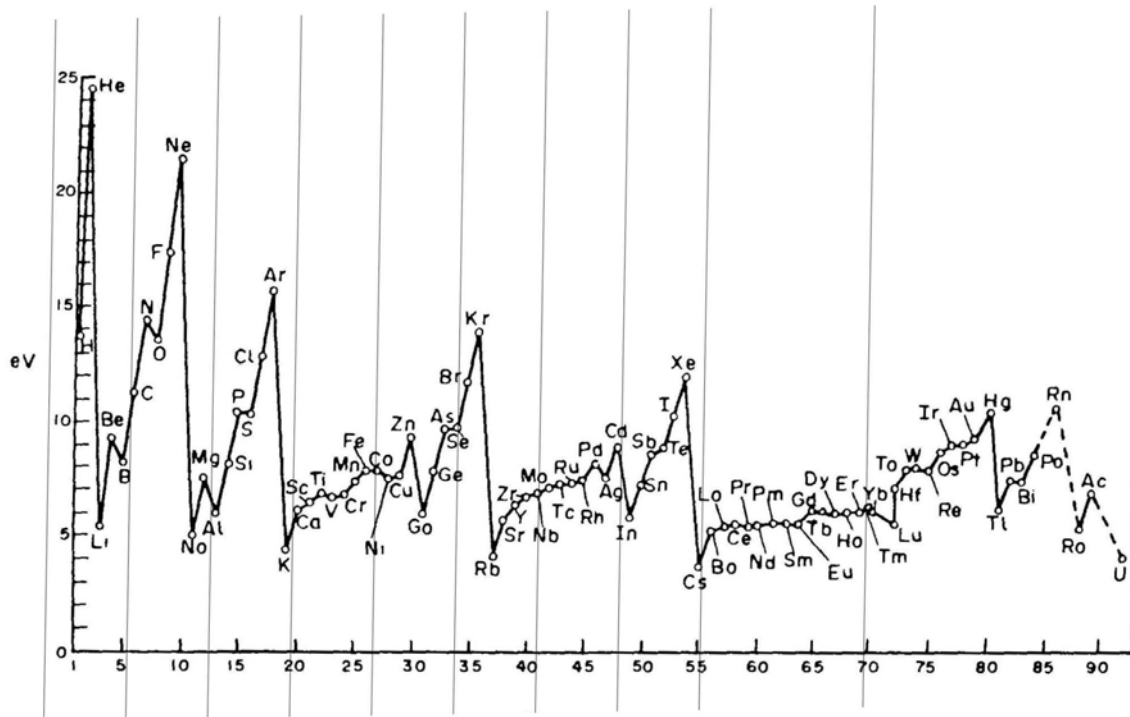
Anexo 4. Configuración electrónica, término y potencial de ionización de los distintos átomos en su estado fundamental (fuente Brandstein y Joachain)

| Z | Element | Electronic configuration† | Term† | Ionisation potential (eV) |
|----|---------------|--|-------------|---------------------------|
| 1 | H hydrogen | 1s | $^2S_{1/2}$ | 13.60 |
| 2 | He helium | 1s ² | 1S_0 | 24.59 |
| 3 | Li lithium | [He]2s | $^2S_{1/2}$ | 5.39 |
| 4 | Be beryllium | [He]2s ² | 1S_0 | 9.32 |
| 5 | B boron | [He]2s ² 2p | $^2P_{1/2}$ | 8.30 |
| 6 | C carbon | [He]2s ² 2p ² | 3P_0 | 11.26 |
| 7 | N nitrogen | [He]2s ² 2p ³ | $^4S_{3/2}$ | 14.53 |
| 8 | O oxygen | [He]2s ² 2p ⁴ | 3P_2 | 13.62 |
| 9 | F fluorine | [He]2s ² 2p ⁵ | $^2P_{3/2}$ | 17.42 |
| 10 | Ne neon | [He]2s ² 2p ⁶ | 1S_0 | 21.56 |
| 11 | Na sodium | [Ne]3s | $^2S_{1/2}$ | 5.14 |
| 12 | Mg magnesium | [Ne]3s ² | 1S_0 | 7.65 |
| 13 | Al aluminium | [Ne]3s ² 3p | $^2P_{1/2}$ | 5.99 |
| 14 | Si silicon | [Ne]3s ² 3p ² | 3P_0 | 8.15 |
| 15 | P phosphorus | [Ne]3s ² 3p ³ | $^4S_{3/2}$ | 10.49 |
| 16 | S sulphur | [Ne]3s ² 3p ⁴ | 3P_2 | 10.36 |
| 17 | Cl chlorine | [Ne]3s ² 3p ⁵ | $^2P_{3/2}$ | 12.97 |
| 18 | Ar argon | [Ne]3s ² 3p ⁶ | 1S_0 | 15.76 |
| 19 | K potassium | [Ar]4s | $^2S_{1/2}$ | 4.34 |
| 20 | Ca calcium | [Ar]4s ² | 1S_0 | 6.11 |
| 21 | Sc scandium | [Ar]4s ² 3d | $^2D_{3/2}$ | 6.54 |
| 22 | Ti titanium | [Ar]4s ² 3d ² | 3F_2 | 6.82 |
| 23 | V vanadium | [Ar]4s ² 3d ³ | $^4F_{3/2}$ | 6.74 |
| 24 | Cr chromium | [Ar]4s3d ⁵ | 7S_3 | 6.77 |
| 25 | Mn manganese | [Ar]4s ² 3d ⁵ | $^6S_{5/2}$ | 7.44 |
| 26 | Fe iron | [Ar]4s ² 3d ⁶ | 5D_4 | 7.87 |
| 27 | Co cobalt | [Ar]4s ² 3d ⁷ | $^4F_{9/2}$ | 7.86 |
| 28 | Ni nickel | [Ar]4s ² 3d ⁸ | 3F_4 | 7.64 |
| 29 | Cu copper | [Ar]4s3d ¹⁰ | $^2S_{1/2}$ | 7.73 |
| 30 | Zn zinc | [Ar]4s ² 3d ¹⁰ | 1S_0 | 9.39 |
| 31 | Ga gallium | [Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p | $^2P_{1/2}$ | 6.00 |
| 32 | Ge germanium | [Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ² | 3P_0 | 7.90 |
| 33 | As arsenic | [Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ³ | $^4S_{3/2}$ | 9.81 |
| 34 | Se selenium | [Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴ | 3P_2 | 9.75 |
| 35 | Br bromine | [Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵ | $^2P_{3/2}$ | 11.81 |
| 36 | Kr krypton | [Ar]4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶ | 1S_0 | 14.00 |
| 37 | Rb rubidium | [Kr]5s | $^2S_{1/2}$ | 4.18 |
| 38 | Sr strontium | [Kr]5s ² | 1S_0 | 5.70 |
| 39 | Y yttrium | [Kr]5s ² 4d | $^2D_{3/2}$ | 6.38 |
| 40 | Zr zirconium | [Kr]5s ² 4d ² | 3F_2 | 6.84 |
| 41 | Nb niobium | [Kr]5s4d ⁴ | $^6D_{1/2}$ | 6.88 |
| 42 | Mo molybdenum | [Kr]5s4d ⁵ | 7S_3 | 7.10 |
| 43 | Tc technetium | [Kr]5s ² 4d ⁵ | $^6S_{5/2}$ | 7.28 |
| 44 | Ru ruthenium | [Kr]5s4d ⁷ | 5F_5 | 7.37 |
| 45 | Rh rhodium | [Kr]5s4d ⁸ | $^4F_{9/2}$ | 7.46 |
| 46 | Pd palladium | [Kr]4d ¹⁰ | 1S_0 | 8.34 |
| 47 | Ag silver | [Kr]5s4d ¹⁰ | $^2S_{1/2}$ | 7.58 |
| 48 | Cd cadmium | [Kr]5s ² 4d ¹⁰ | 1S_0 | 8.99 |
| 49 | In indium | [Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p | $^2P_{1/2}$ | 5.79 |
| 50 | Sn tin | [Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ² | 3P_0 | 7.34 |
| 51 | Sb antimony | [Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ³ | $^4S_{3/2}$ | 8.64 |

| <i>Z</i> | <i>Element</i> | <i>Electronic configuration†</i> | <i>Term†</i> | <i>Ionisation potential (eV)</i> |
|----------|-----------------|--|------------------------------------|----------------------------------|
| 52 | Te tellurium | [Kr]5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁴ | ³ P ₂ | 9.01 |
| 53 | I iodine | [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 cesium | [Xe]6s | ² S _{1/2} | 3.89 |
| 56 | Ba barium | [Xe]6s ² | ¹ S ₀ | 5.21 |
| 57 | La lanthanum | [Xe]6s ² 5d | ² D _{3/2} | 5.58 |
| 58 | Ce cerium | [Xe](6s ² 4f5d) | (¹ G ₄) | 5.47 |
| 59 | Pr praseodymium | [Xe](6s ² 4f ³) | (⁴ I _{9/2}) | 5.42 |
| 60 | Nd neodymium | [Xe]6s ² 4f ⁴ | ⁵ L ₄ | 5.49 |
| 61 | Pm promethium | [Xe](6s ² 4f ⁵) | (⁶ H _{5/2}) | 5.55 |
| 62 | Sm samarium | [Xe]6s ² 4f ⁶ | ⁷ F ₀ | 5.63 |
| 63 | Eu europium | [Xe]6s ² 4f ⁷ | ⁸ S _{7/2} | 5.67 |
| 64 | Gd gadolinium | [Xe]6s ² 4f ⁷ 5d | ⁹ D ₂ | 6.14 |
| 65 | Tb terbium | [Xe](6s ² 4f ⁹) | ⁶ H _{15/2} | 5.85 |
| 66 | Dy dysprosium | [Xe](6s ² 4f ¹⁰) | (⁵ I ₈) | 5.93 |
| 67 | Ho holmium | [Xe](6s ² 4f ¹¹) | (⁴ I _{15/2}) | 6.02 |
| 68 | Er erbium | [Xe](6s ² 4f ¹²) | (³ H ₆) | 6.10 |
| 69 | Tm thulium | [Xe]6s ² 4f ¹³ | ² F _{7/2} | 6.18 |
| 70 | Yb ytterbium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ | ¹ S ₀ | 6.25 |
| 71 | Lu lutetium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d | ² D _{3/2} | 5.43 |
| 72 | Hf hafnium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ² | ³ F ₂ | 7.0 |
| 73 | Ta tantalum | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ³ | ⁴ F _{3/2} | 7.89 |
| 74 | W tungsten | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁴ | ⁵ D ₀ | 7.98 |
| 75 | Re rhenium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁵ | ⁶ S _{5/2} | 7.88 |
| 76 | Os osmium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁶ | ⁵ D ₄ | 8.7 |
| 77 | Ir iridium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁷ | (⁴ F _{9/2}) | 9.1 |
| 78 | Pt platinum | [Xe]6s4f ¹⁴ 5d ⁹ | ³ D ₃ | 9.0 |
| 79 | Au gold | [Xe]6s4f ¹⁴ 5d ¹⁰ | ² S _{1/2} | 9.23 |
| 80 | Hg mercury | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ | ¹ S ₀ | 10.44 |
| 81 | Tl thallium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p | ² P _{1/2} | 6.11 |
| 82 | Pb lead | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ² | ³ P ₀ | 7.42 |
| 83 | Bi bismuth | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ³ | ⁴ S _{3/2} | 7.29 |
| 84 | Po polonium | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁴ | ³ P ₂ | 8.42 |
| 85 | At astatine | [Xe](6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁵) | ² P _{3/2} | 9.5 |
| 86 | Rn radon | [Xe]6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁶ | ¹ S ₀ | 10.75 |
| 87 | Fr francium | [Rn]7s | ² S _{1/2} | 4.0 |
| 88 | Ra radium | [Rn]7s ² | ¹ S ₀ | 5.28 |
| 89 | Ac actinium | [Rn]7s ² 6d | ² D _{3/2} | 6.9 |
| 90 | Th thorium | [Rn]7s ² 6d ² | ³ F ₂ | |
| 91 | Pa protactinium | [Rn](7s ² 5f ² 6d) | (⁴ K _{11/2}) | |
| 92 | U uranium | [Rn]7s ² 5f ³ 6d | ⁵ L ₆ | 4.0 |
| 93 | Np neptunium | [Rn]7s ² 5f ⁴ 6d | ⁶ L _{11/2} | |
| 94 | Pu plutonium | [Rn]7s ² 5f ⁶ | ⁷ F ₀ | 5.8 |
| 95 | Am americium | [Rn]7s ² 5f ⁷ | ⁸ S _{7/2} | 6.0 |
| 96 | Cm curium | [Rn]7s ² 5f ⁷ 6d | ⁹ D ₂ | |
| 97 | Bk berkelium | [Rn]7s ² 5f ⁸ 6d | ⁸ H _{17/2} | |
| 98 | Cf californium | [Rn]7s ² 5f ¹⁰ | ⁵ I ₈ | |
| 99 | Es einsteinium | [Rn]7s ² 5f ¹¹ | ⁴ I _{15/2} | |
| 100 | Fm fermium | [Rn](7s ² 5f ¹²) | (³ H ₆) | |
| 101 | Md mendelevium | [Rn](7s ² 5f ¹³) | (² F _{7/2}) | |
| 102 | No nobelium | [Rn](7s ² 5f ¹⁴) | (¹ S ₀) | |
| 103 | Lw lawrencium | [Rn]7s ² 5f ¹⁴ 6d | (² D _{3/2}) | |

† Configurations and terms in parentheses are estimated.

Anexo 5. Grafico de Potencial de ionización en función de Z



Anexo 6. Algunos links de interés

✚ Tabla de Bunge, <http://users.df.uba.ar/mclaudia/e3/bunge.txt>

✚ configuración spin up and down <http://www.educaplus.org/play-73-Configuraci%C3%B3n-electr%C3%B3nica.html>

✚ algunos átomos <http://www.colorado.edu/physics/2000/applets/a2.html>