

## Guía 2: Átomos Multielectrónicos

### A. Iones con dos electrones: ejemplos para He, H<sup>-</sup>, Li<sup>+</sup>, Be<sup>+2</sup>

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  $\Phi_{1s^2}$  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) Muestre que el valor de  $\xi$  que minimiza  $\langle E \rangle$  es  $\xi_0 = Z - 5/16$ , y halle el valor de  $\langle E \rangle_{1s^2}$  en ese caso.

2. Utilice la aproximación anterior  $\phi_{1s}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\xi_0^3}{\pi}} \exp(-\xi_0 r)$ , con  $\xi_0 = Z - 5/16$  para átomo de He.

a) Compare el valor que se obtiene para E<sub>1s</sub> con el valor experimental de E<sub>1s</sub><sup>2</sup> = -79.01 eV, y con el resultado Hartree-Fock E<sub>1s</sub><sup>2</sup> = -77.86 eV

b) Escriba la expresión de  $\phi_{1s}(r)$  y compárela gráficamente con los dos resultados Hartree-Fock de Bunge<sup>1</sup>. Compare los valores de  $\langle R \rangle$ ,  $\langle R^{**2} \rangle$ ,  $\langle 1/R \rangle$ ,  $\langle 1/R^{**2} \rangle$ .

HELIUM, Z=2 1s(2) 1S			
TOTAL ENERGY	KINETIC ENERGY	POTENTIAL ENERGY	VIRIAL RATIO
-2.861679993	2.861681613	-5.723361606	-1.999999434
RHOat0 = 22.593709 Kato cusp = 1.999972			
1s			
ORB.ENERGY	-0.917955		
$\langle R \rangle$	0.927272	$\langle R^{**2} \rangle$	1.184820
$\langle 1/R \rangle$	1.687283	$\langle 1/R^{**2} \rangle$	5.995503
1S	1.4595	1.347900	
3S	5.3244	-0.001613	
2S	2.6298	-0.100506	
2S	1.7504	-0.270779	

Las funciones radiales de Bunge son combinaciones de orbitales de Slater de la siguiente forma:

$$\phi_{1s}^{Bunge}(r) = [1.3479 S_{1s}(1.4595, r) - 0.001613 S_{3s}(5.3244, r) - 0.1005 S_{2s}(2.6298, r) - 0.27078 S_{2s}(1.7504, r)] Y_0^0$$

Donde  $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$  y las funciones de Slater son  $S_{n_p}(\xi, r) = \frac{(2\xi)^{n_p+1/2}}{\sqrt{(2n_p)!}} r^{n_p-1} e^{-\xi r}$ .

<sup>1</sup> 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).

**3.** 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. Utilice 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?

**4.** 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 (en a.u.) 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!

**5.** 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  $-1/r$

**a)** Obtenga la energía del estado 2s4p del He y la longitud de onda de la radiación ultravioleta absorbida

**b)** Si el He 2s4p decae en un proceso Auger a  $He^+(1s)$  y un electrón libre. Encuentre la velocidad del electrón emitido.

**6.** (Optativo) Una función conveniente para describir el estado fundamental del  $H^-$  es la de Chandrasekhar,

dada por  $\Phi_{1s^2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{4\pi} N (e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\beta r_1 - \alpha r_2}) \chi_{00}$ , donde  $N = 0.3948$ ,  $\alpha = 1.039$ ,  $\beta = 0.283$ , y

$\chi_{00} = [\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2] / \sqrt{2}$  es la función de spin (antisimétrica). Muestre  $\Phi_{1s^2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  está normalizada a 1 y

que el valor medio de la energía es  $\langle E \rangle = \langle \Phi_{1s^2} | H | \Phi_{1s^2} \rangle = -0.514$  a.u., con lo cual predice un  $H^-$  estable con  $I_p > 0$ , aunque todavía lejos del valor experimental  $E_{1s^2} = -0.528$  a.u.

Nota: Al final de la guía se incluyen algunas integrales de interés. Puede hacerse analíticamente o con algún programa de matemática para cálculo y gráficos.

## B. Hartree-Fock

**Recordemos:** Los electrones son indistinguibles. Tenemos que construir estados de N electrones tales que dado un operador  $\hat{O}$ , el valor del observable  $\langle \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) | \hat{O} | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle$  no cambie si se permutan dos electrones:  $\langle \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) | \hat{O} | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle = \langle \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) | \hat{P}^* \hat{O} \hat{P} | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle$ , con  $\hat{P}$  operador de permutación.

Los estados de N partículas tienen paridad definida:

$$\hat{P} | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle = \pm | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle \quad (+1 \rightarrow \text{bosones}; -1 \rightarrow \text{fermiones})$$

El operador de antisimetrización  $\hat{A} = (\sqrt{N!})^{-1} \sum (-1)^p \hat{P}$ , permite construir funciones antisimétricas de N fermiones  $\hat{A} | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle$  a partir las funciones  $| \chi_i \rangle$  de una partícula.

Puede demostrarse que:

i) si  $\{ | \chi_i \rangle \}$  es una base ortonormal entonces el conjunto  $\{ \hat{A} | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle \}$  también es una base ortonormal.

ii) dado el Hamiltoniano de N fermiones  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} g(i,j)$ , el operador de antisimetrización conmuta con el hamiltoniano:  $[\hat{H}_1, \hat{A}]$  y  $[\hat{H}_2, \hat{A}]$ ; y si los estados  $\{ | \chi_i \rangle \}$  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  $\hat{A} | \chi_\alpha(1), \dots, \chi_\nu(N) \rangle$  tiene el mismo autovalor.

**7.** 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  $^1S$ .

**8.** Dados los estados  $|\phi_a\rangle$  y  $|\phi_b\rangle$  y las funciones de spin  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  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. Chequee que es una base ortonormal. Identifique la simetría espacial y de spin, y relaciónelas 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.

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

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla_r^2 + V_{HF}(r) \right] u_{1s}(r) = E_{1s} u_{1s}(r),$$

donde el potencial Hartree-Fock es  $V_{HF}(r) = -\frac{2}{r} + \int |u_{1s}(r')|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$ .

**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. Pueden reducirse a un solo determinante 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  $M_S=1$ .

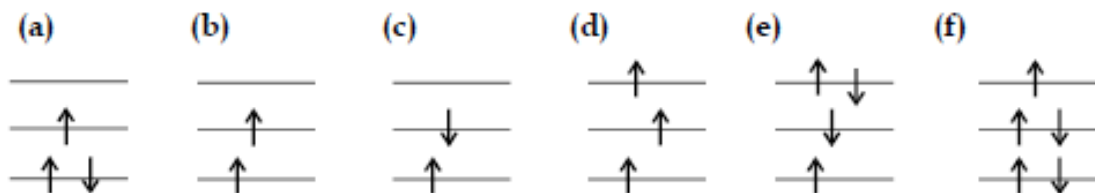
**11.** Dado el  $Li^+$  (1s,2p), represente los posibles estados  $^3P$  y  $^1P$ .

**a)** 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  $S_z$ . Exprese las funciones antisimétricas correspondientes (factorice la parte radial y de spin).

**b)** Exprese las energías totales de cada configuración. Compare estos valores y decida cual configuración es la menor energía.

**c)** Escriba las ecuaciones de Hartree-Fock para los orbitales  $u_{1s}(r)$  y  $u_{2p}(r)$  en la configuración  $^3P$ , con  $M_S=-1$ .

**12.** Calcule la energía de los siguientes estados por simple inspección asumiendo que son estados monodeterminantales (pueden expresarse por un solo determinante de Slater). Considere las contribuciones I (electrón independiente), J (e-e directo) y K (e-e de exchange) .



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

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?

## C. Muchos electrones: Configuraciones, Tabla Periódica

Para los próximos problemas tenga en cuenta los **Anexos 1 a 5**. Tome en cuenta el diagrama de Moeller (Anexo 3) y la regla de Hund para los términos  $^{2s+1}L_J$ .

- 13.** Haga una lista de los términos  $^{2s+1}L$  posibles de las configuraciones de  $j$  electrones  $np^j$ , con  $j=2,3,4,5,6$ . Revise y justifique los resultados del Anexo 1.
- 14.** Haga una lista de los términos  $^{2s+1}L$  posibles configuraciones de 2 electrones:  $ns-n's$ ;  $ns-n'p$ ,  $nd^2$ . Revise y justifique los resultados del Anexo 1
- 15.** Analice los elementos de los grupos IA, VIIA de la Tabla Periódica y los gases nobles (vea Anexo 2). Escriba la configuración electrónica, haga un esquema de los valores de spin y exprese  $^{2s+1}L_J$ . Compare los resultados con las tablas del Anexo 4. ¿Qué conclusiones puede señalar?
- 16.** Los grupos IIIA a VIIA representan el llenado de la capa p que se completa para los gases nobles. Exprese el término  $^{2s+1}L_J$  y compare los resultados con las tablas del Anexo 4.
- 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. ¿Por qué están aparte en la tabla periódica? 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.** 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](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.

### Anexo 1. Posibles términos para las configuraciones $nl^k$

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

## Anexo 2. Tabla Periódica de Elementos y Potenciales de Ionización

Tabla

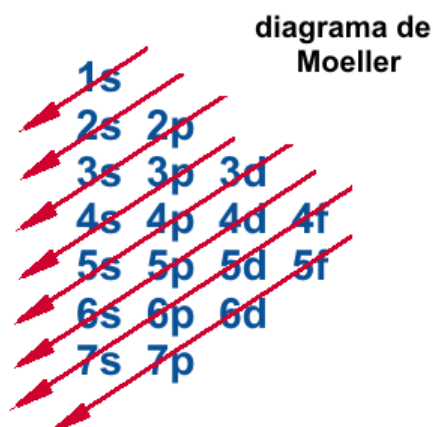
Period	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIIIB	VIIIB	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	Noble gases	
1	1 H 1.008																2 He 4.003	
2	3 Li 6.939	4 Be 9.012										5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.183	
3	11 Na 22.990	12 Mg 24.312										13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	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 <sup>†</sup> 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 <sup>†</sup> 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
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 (253)	103 Lr (257)

†  
Actinides

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

Z	Element	Electronic configuration <sup>†</sup>	Term <sup>†</sup>	Ionisation potential (eV)
52	Te tellurium	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	9.01
53	I iodine	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>5</sup>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	10.45
54	Xe xenon	[Kr]5s <sup>2</sup> 4d <sup>10</sup> 5p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	12.13
55	Cs cesium	[Xe]6s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	3.89
56	Ba barium	[Xe]6s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	5.21
57	La lanthanum	[Xe]6s <sup>2</sup> 5d	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	5.58
58	Ce cerium	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f5d)	( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> )	5.47
59	Pr praseodymium	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f <sup>3</sup> )	( <sup>4</sup> I <sub>9/2</sub> )	5.42
60	Nd neodymium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>4</sup>	<sup>5</sup> I <sub>4</sub>	5.49
61	Pm promethium	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f <sup>5</sup> )	( <sup>6</sup> H <sub>5/2</sub> )	5.55
62	Sm samarium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>6</sup>	<sup>7</sup> F <sub>0</sub>	5.63
63	Eu europium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>7</sup>	<sup>8</sup> S <sub>7/2</sub>	5.67
64	Gd gadolinium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>7</sup> 5d	<sup>9</sup> D <sub>2</sub>	6.14
65	Tb terbium	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f <sup>9</sup> )	( <sup>6</sup> H <sub>15/2</sub> )	5.85
66	Dy dysprosium	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f <sup>10</sup> )	( <sup>7</sup> I <sub>8</sub> )	5.93
67	Ho holmium	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f <sup>11</sup> )	( <sup>4</sup> I <sub>15/2</sub> )	6.02
68	Er erbium	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f <sup>12</sup> )	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> )	6.10
69	Tm thulium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>13</sup>	<sup>2</sup> F <sub>7/2</sub>	6.18
70	Yb ytterbium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	6.25
71	Lu lutetium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	5.43
72	Hf hafnium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>	7.0
73	Ta tantalum	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup>	<sup>4</sup> F <sub>3/2</sub>	7.89
74	W tungsten	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup>	<sup>5</sup> D <sub>0</sub>	7.98
75	Re rhenium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup>	<sup>6</sup> S <sub>5/2</sub>	7.88
76	Os osmium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup>	<sup>5</sup> D <sub>4</sub>	8.7
77	Ir iridium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup>	( <sup>4</sup> F <sub>9/2</sub> )	9.1
78	Pt platinum	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup>	<sup>3</sup> D <sub>3</sub>	9.0
79	Au gold	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup>	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	9.23
80	Hg mercury	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	10.44
81	Tl thallium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	6.11
82	Pb lead	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	7.42
83	Bi bismuth	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>3</sup>	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>	7.29
84	Po polonium	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	8.42
85	At astatine	[Xe](6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>5</sup> )	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	9.5
86	Rn radon	[Xe]6s <sup>2</sup> 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	10.75
87	Fr francium	[Rn]7s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	4.0
88	Ra radium	[Rn]7s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	5.28
89	Ac actinium	[Rn]7s <sup>2</sup> 6d	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	6.9
90	Th thorium	[Rn]7s <sup>2</sup> 6d <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>	
91	Pa protactinium	[Rn](7s <sup>2</sup> 5f <sup>2</sup> 6d)	( <sup>4</sup> K <sub>11/2</sub> )	
92	U uranium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>3</sup> 6d	<sup>5</sup> L <sub>6</sub>	4.0
93	Np neptunium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>4</sup> 6d	<sup>6</sup> L <sub>11/2</sub>	
94	Pu plutonium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>6</sup>	<sup>7</sup> F <sub>0</sub>	5.8
95	Am americium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>7</sup>	<sup>8</sup> S <sub>7/2</sub>	6.0
96	Cm curium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>7</sup> 6d	<sup>9</sup> D <sub>2</sub>	
97	Bk berkelium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>8</sup> 6d	<sup>8</sup> H <sub>17/2</sub>	
98	Cf californium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>10</sup>	<sup>5</sup> I <sub>8</sub>	
99	Es einsteinium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>11</sup>	( <sup>4</sup> I <sub>15/2</sub> )	
100	Fm fermium	[Rn](7s <sup>2</sup> 5f <sup>12</sup> )	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> )	
101	Md mendelevium	[Rn](7s <sup>2</sup> 5f <sup>13</sup> )	( <sup>2</sup> F <sub>7/2</sub> )	
102	No nobelium	[Rn](7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> )	( <sup>1</sup> S <sub>0</sub> )	
103	Lw lawrencium	[Rn]7s <sup>2</sup> 5f <sup>14</sup> 6d	( <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub> )	

<sup>†</sup> Configurations and terms in parentheses are estimated.



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

