

ATOMOAREN EGITURA

SARRERA: Errepasoa, "Eredu atomikoak historian" bideoa ikusiaz (11 min).

Thomson, Rutherford eta Bohr-en ereduak errepasatzen dira batez ere. Eredu mekano kuantikorako sarreratxoa ere egiten du. Orbital atomikoen marrazkiak azaltzen dira eta konfigurazio elektronikoa ere aipatzen du. Teoria kuantikoaren hastapena ere ematen du (Gaur egungo atomoa).

Dagoeneko ikusi dugu nola XIX. mendearen erdialdetik hasita, atomoaren inguruan egindako saiakerak eta aurkikuntzak ugarituz joan zirela, hasierako ustezko atomoaren eredu osatzen zihoazelarik.

Rutherforden ereduak argi utzi zuen **atomoa nukleo batez eta geruza elektronikoz** eratu zegoela.

N. Bohr fisikari daniarrak aldiz 1913an **eredu atomiko** berri bat proposatu zuen. Eredu atomiko honek e^- bakarra duten espezieentzat esplikatzen du oso ondo, eta gero portaera hori beste atomoetara zabaltzen du. Eredua ideia hauetan oinarritzen da:

- **Atomoaren** bamean **energia kuantizatuta** dago. Honek esan nahi du e^- -a soilik egon daitekeela **posizio** edo kokaleku **egonkor batzuetan nukleoaren inguruan**, eta **posizio horiei energia-kantitate zehatzak** dagozkiela.
- **Elektroiak orbita zirkularrak** egiten ditu **nukleoaren inguruan**. **Orbita** horietako **bakoitza energia maila bati** dagokio, **ordena gorakorrean**, eta **n** zenbaki arrunt batekin elkarturik dago ($n = 1, 2, 3, \dots$)
- e^- -a **energia maila batetik bestera** pasatzen denean, **energia xurgatu edo igorri** egiten da.

Bohr-en ereduak arrakasta handia lortu zuen arren, laster, fisikaren adar berri batean izandako aurrerapen batek gainditu egin zuen: *Mekanika kuantiko edo mekanika ondulatorioak*:

Bohr-en ereduaren mugak: Bohr-en ereduak ez zuen azaltzen zergatik dagoen kuantizaturik orbita atomikoen energia, ezta zergatik errepikatzen ziren periodikoki elementuen propietate batzuk:

Sommerfeld-en zuzenketa:

Bohr-en ikasle alemaniarrak haren postulatuak pixka bat aldatu zituen:

- **n** zenbaki kuantiko nagusiak **energia-maila adierazten** duela ontzat hartuta, **energia maila bakoitzean e^- -ek** egiten dituzten **orbitak zirkularrak zein eliptikoak** izan daitezke. **Orbita eliptiko hauek gainera eszentrikotasun ezberdina izan dezakete**. Hau, **zenbaki kuantiko sekundarioak, l**, (zenbaki kuantiko azimutala ere esaten zaio), zehazten du, eta **n** maila kuantiko **bakoitzaren azpimaila energetikoa** adierazten du.
- **Maila bakoitzean dagoen azpimaila energetikoen kopurua, n**, zenbaki kuantiko nagusiaren balioari **dagokiona da**. Hau da:
 - $n = 1$ bada, azpimaila bat dago
 - $n = 2$ bada, 2 azpimaila

- $n = 3$ bada, 3 azpimaila
- Zenbaki kuantiko sekundarioak izan ditzakeen balioak 0-tik $(n-1)$ -erainokoak dira. Lehenengo azpimaila energetikoa ($l=0$) orbita zirkular bati dagokio; gainerako azpimailak eszentrikotasun gorakorreko orbita eliptikoei dagozkie.

Zeemann-en zuzenketa:

Orbiten orientazioa espazioan eta erreferentzia-plano bati dagokionez duten inklinazioa ezberdinak dira. Hauxe beste zenbaki kuantiko batek zehazten du, **zenbaki kuantiko magnetikoak, m** , alegia. Bere balioak $-l$ eta l bitarteko zenbaki oso guztiak dira, 0-a barne.

Elektroiaren "spina":

Elektroiek nukleoaren inguruan bira egiteaz gain, bere buruaren inguruan ere bira egiten dute. Horrela e^- -ak iman oso txiki baten antzera jokatuko luke, ipar eta hego poloekin. e^- -ak duen jokabide magnetiko horri **spin** deritzo.

2 biraketa norantza posibleetako bati $\frac{1}{2}$ zenbakia ematen zaio eta besteari $-\frac{1}{2}$. Zenbaki kuantiko honi **spin zenbaki kuantikoa** deitzen zaio.

Bere aurrekoak bezala, Bohr-en teoria ere iraungipenak markatuta zetorren, eta gaur egun historia izatetik baino haratago ez doa. De Broglie, Heisenberg, Schrödinger eta beste batzuen ideietan oinarritutako ikusmolde berriek atomo guztiz desberdin baten ereduak sortu dute: *Uhin-mekanikaren atomoa*.

Ezinezkoa da zientziaren alor honen etorkizuna aurretik jakitea. Ikerketa zientifikorako baliabideen aurrerapenarekin, teknologia berriak eta beste alorretako ekarpenak direla medio, behar bada ehun urte barruko ereduak eta gaur egungoak oso desberdinak izango dira, eta gaur egun kontzeptu oso sakon eta aurreratutzat dauzkagunak, xume eta akastunak irudituko zaizkigu.

ENERGI EGOEREN ALDERDI ESPAZIALA

e^- -a aurkitzeko probabilitate maximoak dauden eremuari orbital esaten zaio, zenbaki kuantiko nagusiaren, n -ren, araberako energia du, zenbaki kuantiko azimutalaren, l -ren araberako forma du eta zenbaki kuantiko magnetikoaren, m , araberako orientazioa espazioan.

- **Orbitalaren bolumena eta energia** zenbat eta handiagoa da n orduan eta handiagoa izan.
- **Orbitalaren forma** zenbat eta konplexuagoa da l zenbat eta handiagoa izan.
- **Orbitalaren orientazioa**, m ren arabera da. Honen balioaren arabera orientazio bat edo beste izango du orbitalak.

Orbitalen forma eta orientazioa garrantzitsuak dira atomoen arteko lotura azaltzeko.

ZENBAKI KUANTIKOAK (ORAIN ARTEKOAREN LABURPENA).

Zenbaki kuantikoek e^- -k atomoan duten portaera deskribatzen dute, informazio hauek emanez:

- **Zenbaki kuantiko nagusia, n :** Zein den energia maila. Edozein balio oso eta positibo izan dezake: 1, 2, 3... Orduan eta zenbaki handiagoa, orduan eta nukleotik urrutigo eta energia gehiago.
- **Zenbaki kuantiko sekundarioa, l :** Zer forma duen orbitalak, 0 eta $(n-1)$ zenbakien artekoa balio oso guztiak hartuz biak barne.
 - $n=1$ bada $\Rightarrow l=0$
 - $n=2$ bada $\Rightarrow l=0$ edo 1
 - $n=3$ bada $\Rightarrow l=0, 1$ edo 2
 -

Historikoki l zenbakiaren 0, 1, 2, 3 eta 4 zenbakiak s, p, d eta f hizkien bitartez adierazi izan dira.

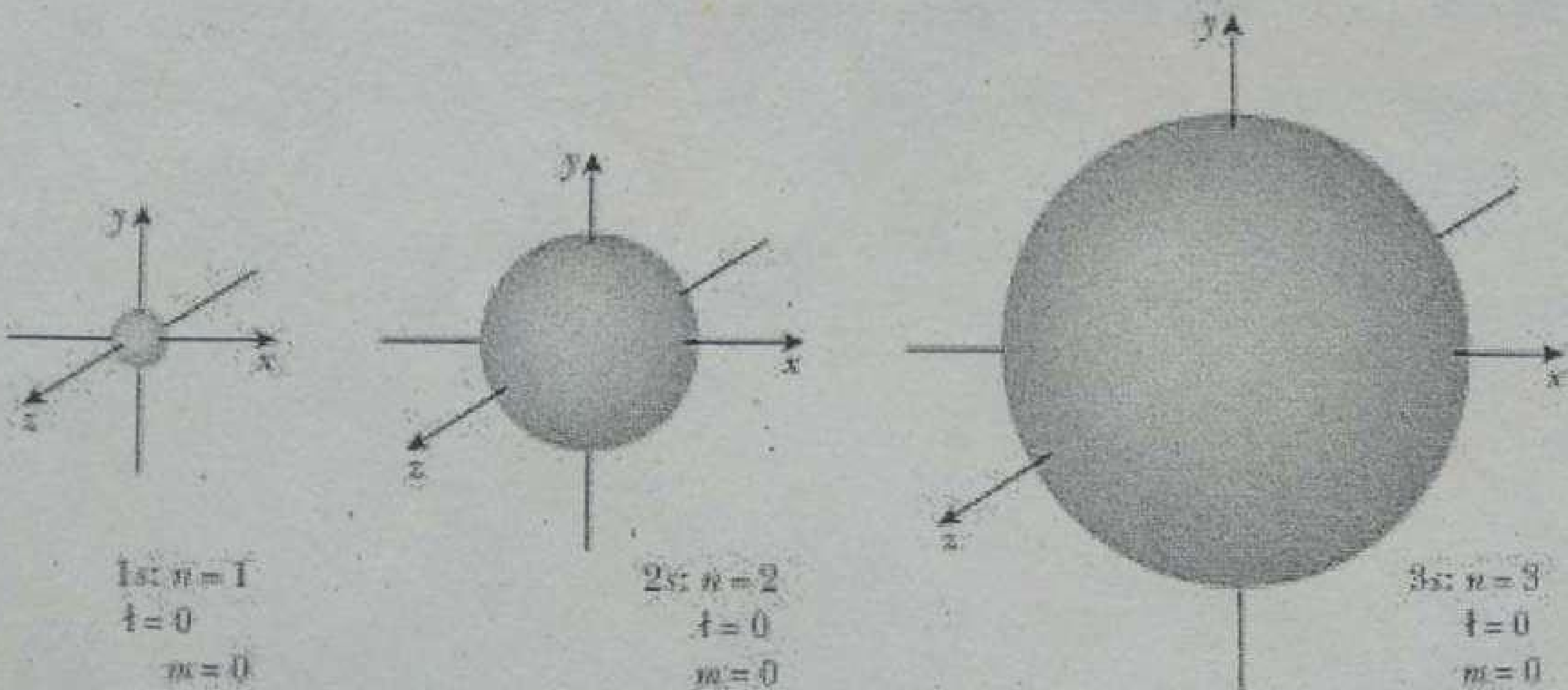
- **Zenbaki kuantiko magnetikoa, m :** Nola dagoen orientaturik orbitala espazioan. l eta $-l$ bitarteko zenbaki oso guztiak hartzen ditu 0-a barne.
 - $l=0$ bada (s orbitala) $\Rightarrow m=0$
 - $l=1$ bada (p orbitala) $\Rightarrow m=-1, 0$ edo 1
 - $l=2$ bada (d orbitala) $\Rightarrow m=-2, -1, 0, 1$ edo 2
- **Elektroiaren spinaren zenbaki kuantiko magnetikoa, s :** Balio horren arabera, elektroia paraleloki edo antiparaleloki lerrokatuko da kanpoko eremu magnetikoarekiko. Balioa $\frac{1}{2}$ edo $-\frac{1}{2}$ izan daiteke. Elektroien s zenbaki kuantikoa berbera denean, esaten da elektroiei horiek spin paraleloak dituztela.

n quantum zenbakiaren arabera egon daitezkeen orbitalak eta horien izenak.

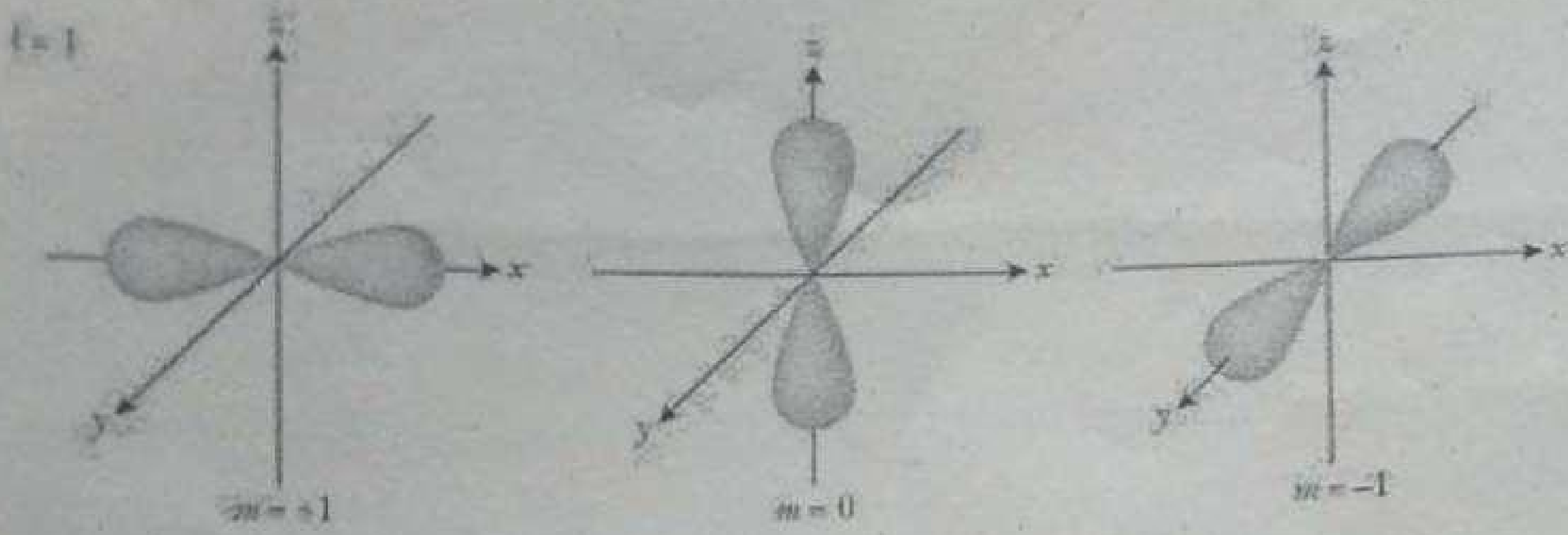
n	l	Orbitala	m	Orbital kopurua
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
2	1	2p	-1, 0, +1	3
3	0	3s	0	1
3	1	3p	-1, 0, +1	3
3	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5
4	0	4s	0	1
4	1	4p	-1, 0, +1	3
4	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7

ORBITAL ATOMIKOEN FORMA

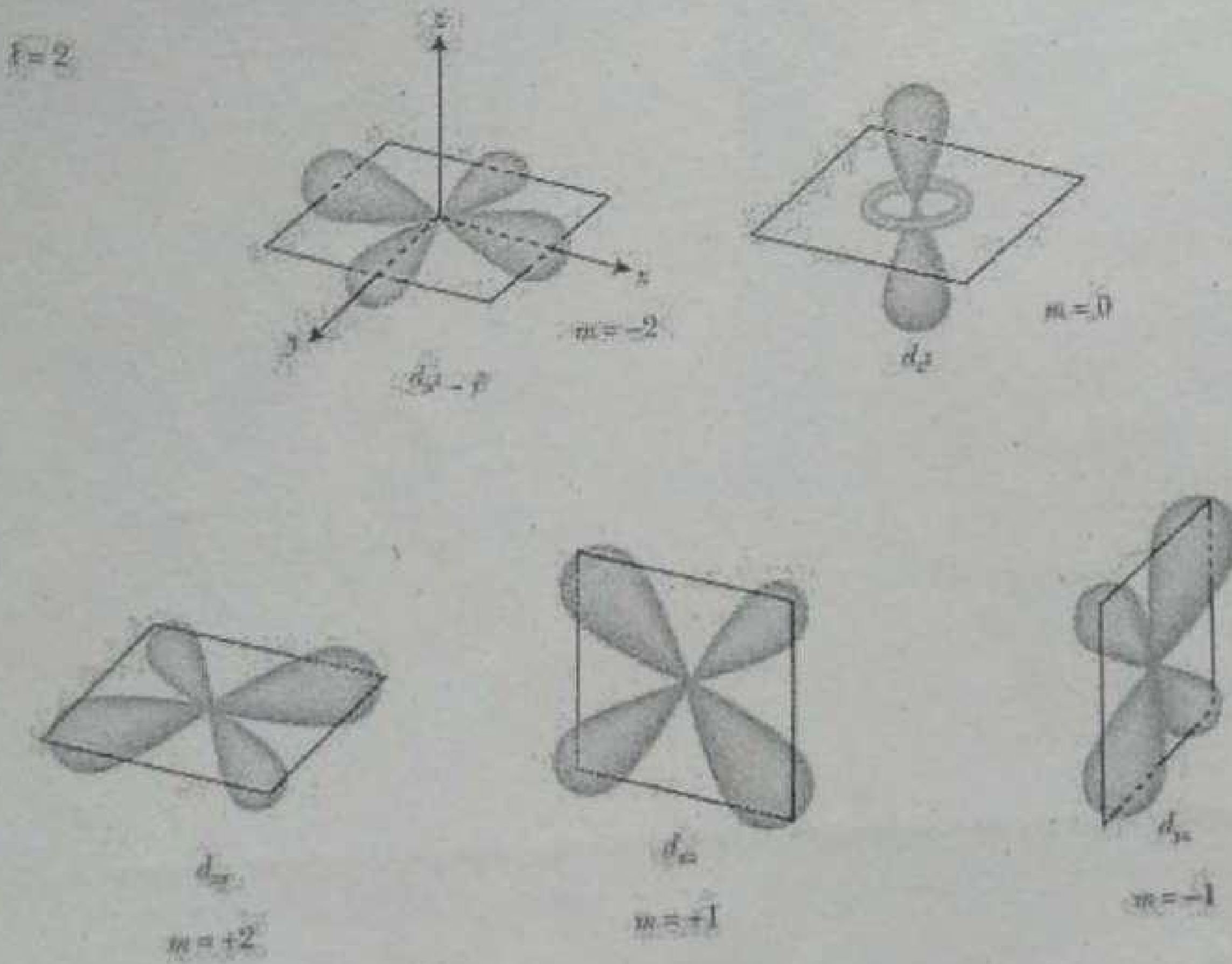
S orbitalak: Esferikoak. Orientazio bakarra



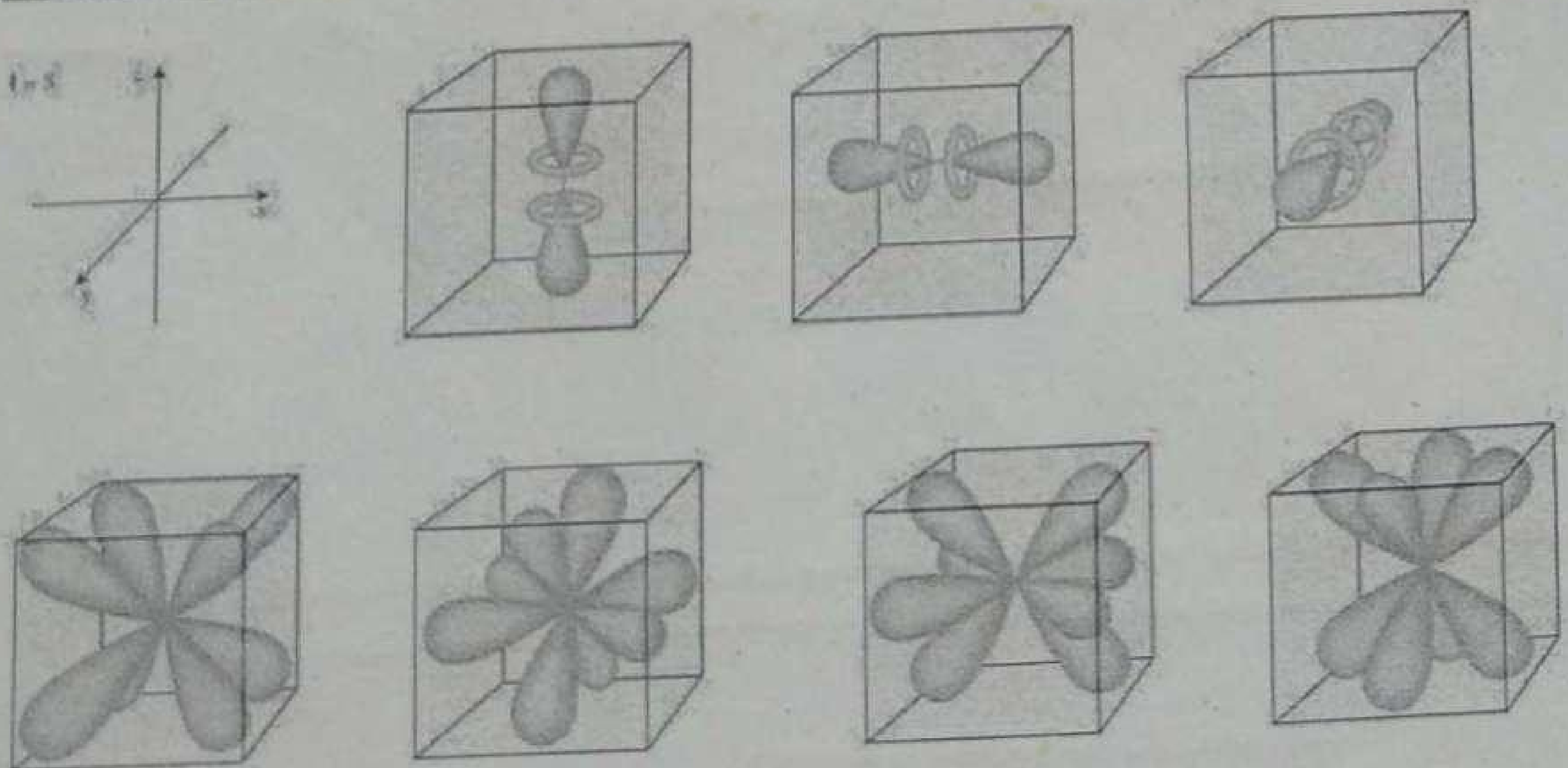
P orbitalak: Bieliptikoak. 3 orientazio posible espazioaren hiru norabideetan



d orbitalak: 5 orientazio.



f orbitalak: 7 orientazio posible

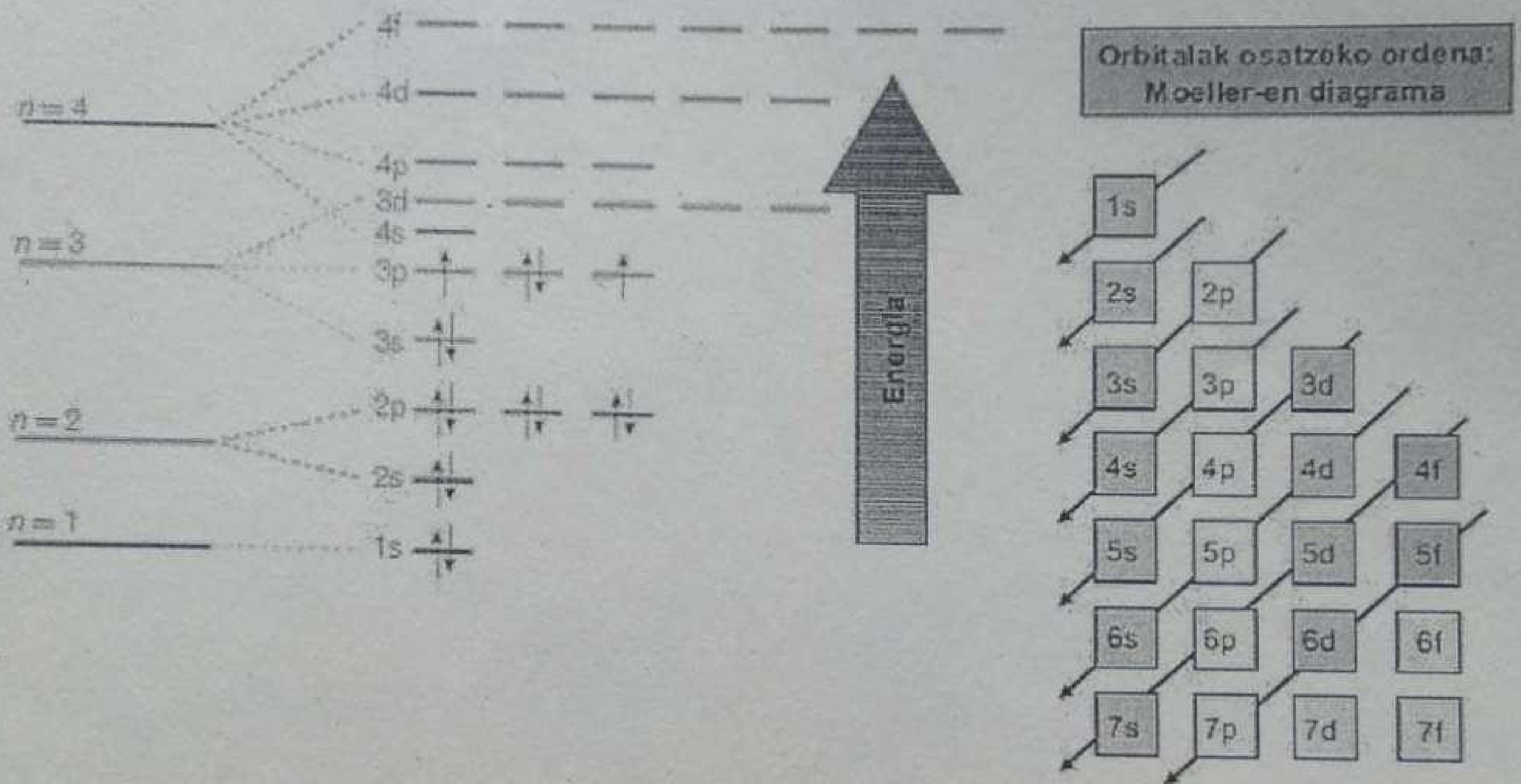


KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOAK

Energiaren erregela:

e^- -ak arau hau aplikatuz erenergia gutxienetik handienerako ordenean kokatuz joaten dira

Nukleoaren inguruan dauden orbitalak, elektroiez, zein ordenetan betetzen diren adierazten du. Energia gutxienetik handienera, ondoko diagraman adierazten den eran egiten da ("erregela mnemoteknikoa"):



1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d,

Pauli-ren esklusio printzipioa:

3 zenbaki kuantikoek (n , l , m) zehazten dute orbital bat, eta aldiz, e^- bat 4 zenbaki kuantikoek zehazten dute.

1925 urtean Pauli fisikari austriarrak, geruzetan atomoek duten banaketari buruzko muga garrantzitsu bat ezarri zuen: **Pauli-ren esklusio printzipioa:**

Atomo jakin batean 2 e^- ezin dira egoera kuantiko berean egon

Edo bestela esanda:

Elektroi baten egoera definitzen duten lau zenbaki kuantikoei esleitzen zaizkien balio-taldeak desberdina izan behar du atomo bakoitzaren e^- bakoitzarentzat.

Orbital berean gehienez aurkako spinak dituzten 2 e^- soilik egon daitezke ondorioz. Kasu horretan e^- -ak parekaturik daudela esaten da.

⇒ Taulan ikusi orbital mota bakoitzean egon daiteken e^- kopurua eta maila bakoitzeko e^- kopurua: ←

Honen arabera, **s** orbitaletan 2 e^- , **p** orbitaletan 6 e^- , **d** orbitaletan 10 e^- eta **f** orbitaletan 14 e^- sartzen dira.

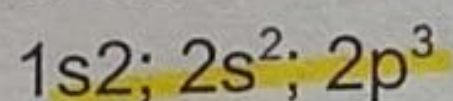
ATOMOEN EGITURA ELEKTRONIKOA

Elementu baten propietate fisikoen zati handi bat eta propietate kimiko guztiak beren atomoen geruza elektronikoaren mende daude, beraz, oso garrantzitsua da e^- -ak atomoaren azalean banatuta dauden modua ezagutzea.

o egitura elektroniko zuzena lor dezakegu ia kasu guztietan.

Hund-en printzipioa:

Har dezagun Nitrogenoaren ($Z=7$) egitura elektronikoa hurrengoa dela:



Honek zera adierazten du:

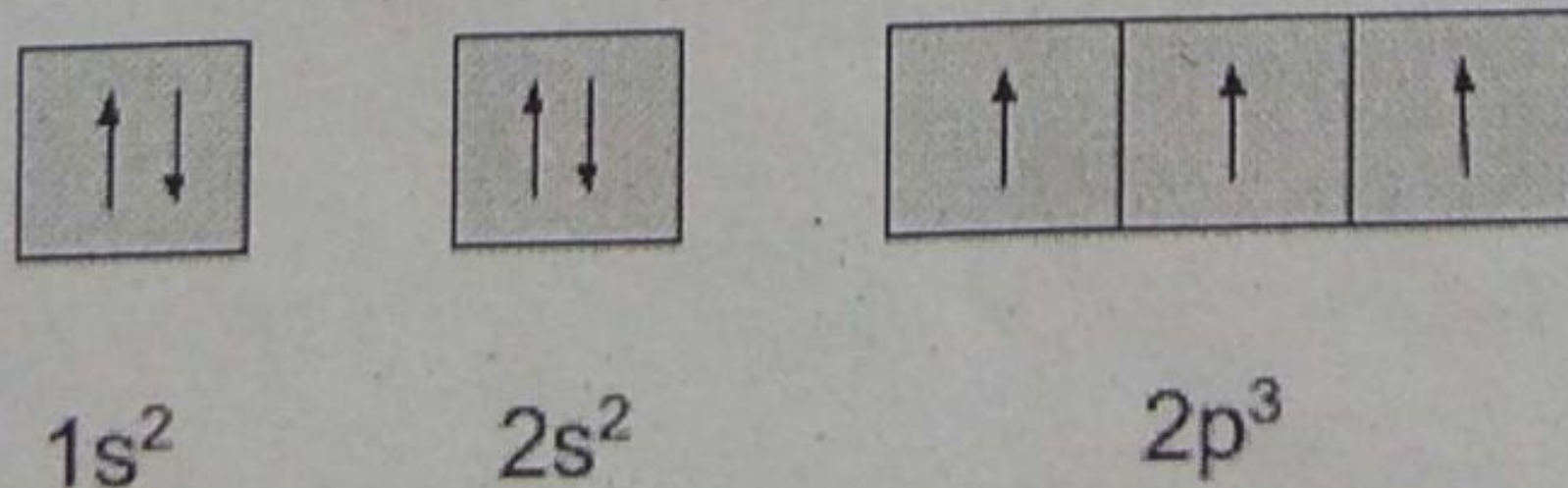
- Lehenengo maila energetikoan ($n=1$) 2 e^- daude s orbital batean
- Bigarren maila energetikoan ($n=2$) 2 e^- daude s orbital batean eta 3 e^- p orbitalean.

Baina nola banatzen dira 3 e^- horiek 2. mailan izan daitezkeen hiru p orbitaletan? Orbital bakoitzean bana? Bi orbital batean eta bat beste batean? Erantzuna **gehienezko anizkoitasunaren edo Hund-en printzipioaren bidez lortzen da:**

Elektroiek, azpimaila bat betetzean, ahalik eta orbital-kopuru handienean banatu beharko dute (gehienezko anizkoitasuna edo **gehienezko desparekatzea**) eta haien spinak paraleloak izateko moduan.

Kasu hauetan baliagarria izaten da "kaxa-diagrama" notazioa erabiltzea. Haien barnean e^- -a litzatekeena **gezi bertikal** batekin adierazten da. Geziaren norantzak spina adierazten du (gorantz = $\frac{1}{2}$ eta beherantz = $-\frac{1}{2}$)

Lehenengo nitrogenoaren adibidearentzat esaterako:



→ Elementu paramagnetikoa
 e^- desparekatuta
inonaren eraginaren erantzun

Diamagnetikoa.

e^- ar parekatuta

inonaren eraginaren erantzun