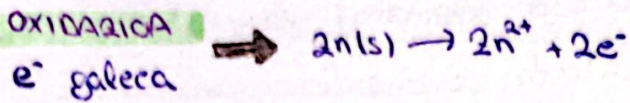


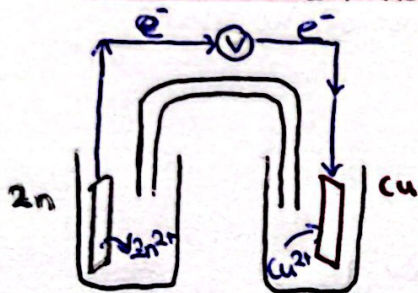
KIMIKA 4.gaila

ERREDOX SISTEMAK

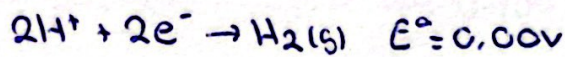
PRINTZIPIO OROKORRA



ZELULA ELEKTROKIMIKOA



ERREDUKZIO POTENTIAL ESTANDARRA



- Baldintza estandarrek: B.N.

$T = 298K$ $[] = 1M$ $p = 1atm$

$E^\circ > 0$: ESPONTANEOA

$E^\circ < 0$: EZ ESPONTANEOA

$E^\circ_{zel} = E^\circ_{erredukzio} - E^\circ_{oxidazio}$

E° , ΔG° , K ERLAZIOA

$\Delta G^\circ = -nFE^\circ$

F : Faraday konstantea (96485,3 C/mol)
 n : transferitzen diren e^- mol kop

Erreaktiba eta produktuk B.N.

$K > 1$: espen (\rightarrow)

$K < 1$: ez espen (\leftarrow)

$\Delta G^\circ = -RT \ln K$

$\Delta G^\circ = -2,3RT \log K$

$\Delta G^\circ < 0$: espontaneoa

$\Delta G^\circ > 0$: ez-espontaneoa

$R = 8,3145 \text{ mol} \cdot K$

T : temperatura (Kelvin)

$E^\circ = \frac{2,3RT}{nF} \cdot \log K$

BALDINTZA Estandarra

Espesie ionikoak non ur-disoluzioetan, kontzentrazio $\neq 1M$ eta gas presioa $\neq 1\text{atm}$.

NERST EKUAZIOA

$$E = E^{\circ} - \frac{0,059}{n} \log Q$$

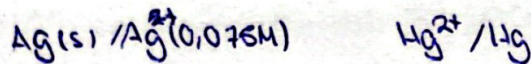
E : elektrodo potentzial ez-estandarra

E° : elektrodo potentzial estandarra

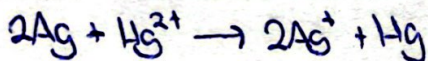
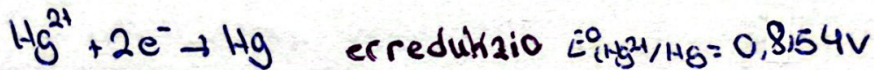
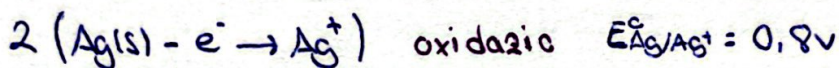
Q : aktibitate-koefizientea

$$Q = \frac{[A_{er}]^{n_2} [B_{ox}]^{n_1}}{[A_{ox}]^{n_2} [B_{er}]^{n_1}}$$

Adibidea: zelularen erreakzioa espontaneoki gertatuko da?



1. Erreakzioa idatzi eta balantzea



$E^{\circ} = 0,854 - 0,8 = 0,054V$

2. Kalkulatu E , baldintza ez estandarretan.

Espontaneoa izango zen hasiera baldintzak balitu ($1M$); izan ere $E^{\circ} > 0 \rightarrow$ ESPONTANEOA !

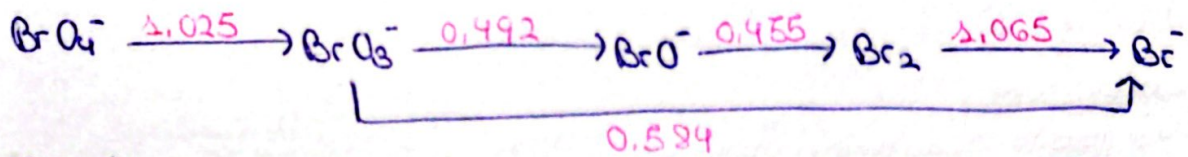
$E = E^{\circ} - \frac{0,059}{n} \log Q \rightarrow E = 0,054 - \frac{0,059}{2} \log \frac{[Ag^+]^2}{[Hg^{2+}]}$

$\ln x = 2,3 \log x$

$E = 0,054 - \frac{0,059}{2} \log \frac{0,075^2}{0,85} = 0,118V$

$E > 0$, ESPONTANEOA

LATIMER DIAGRAMAK



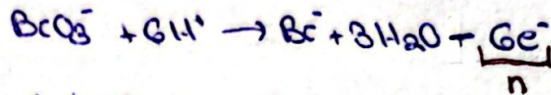
Elementu baten potentzial estandarrek oxidazio-egoerarekiko baita ingurunearekiko (azidoa edo basikoa) adierazi.

Erredukzio potentzialak ez dira gehigarriak.

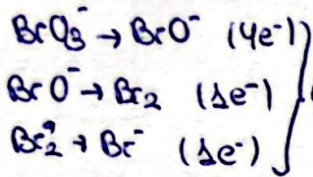
$$E^{\circ} = \frac{\sum (n_i E_i^{\circ})}{\sum n_i}$$

Nola kalkulatu?

n: transferitutako e-



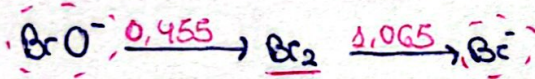
Espezie desberdinen arteko e- transferentzia kalkulatu



$$E^{\circ} = \frac{4 \cdot 0.492 + 1 \cdot 0.455 + 1 \cdot 1.065}{6} = 0.409\text{V}$$

DISMUTAZIOA

Espezie baten estuineko E° balioa ~~bera~~ ezkerrekoa baino handiagoa denean espezie horiek dismutazioa jasaten.



$$E^{\circ} = 1.065 - 0.455 = 0.61\text{V} > 0$$

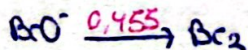
Kasu batzutan, E° pH-arekiko independentea izango da; prozesuan ez dutelako parte hartzen H^+ / OH^- ioiek.

- BrO^- non da oxidatzailegarra, ingurune azido edo basikoan?

AZIDOAN



BASIKOAN



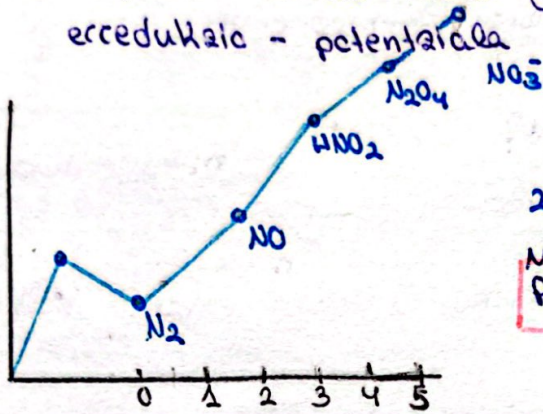
↳ Ingurune azidoan erredukzioa espontaneocor da, (jenera handiagoa, O₂K urrunago). Beraz, oxidatzaile hobeez ingurune azidoan.

FROST DIAGRAMA

Elementu egonkor edo ez-egonkor baten oxidazio-egonkor identifikatu.

IDEIA OROKORRAK

- Egonkorragoak diagraman beheago
- Bi espezieen arteko maldak gero eta handiago izan, bikotearen erredukzio - potentziala handiagoa.



1. $N_2 \rightarrow NO$ Lotimerecelik atara

2. transgerituta e^- garaituan

MALDA

Pasibagaa denean, oxi potentzial \uparrow

N: oxidazio-egonkor

$$maldak = \frac{N_2 \cdot E_2 - N_1 \cdot E_1}{N_2 - N_1} = E_{2-1}^0$$

KINIKA 5. gaia

MEKANIKA KUANTIKOAREN OINARRIAK

1. BOHR-en EREDU PLANETARIOA

Elektrioiek nukleoaren inguruan orbitatu, baina baimendutako orbita batzuetan Plancken konstantearekiko proportzionala den energia espeziatuta batekin. Deginitutako orbita horiek energia-geruza edo energia-maila gisa altxatu. Maila horiek n zenbaki kuantikoa ($n=1, 2, 3, \dots$), Energia-mailen eredu horiek esan nahi duen, elektrioiek baimendutako orbita batetik bestera salto eginez irabaz edo gal dezaketeela energia.

2. PLANCK-en TEORIA KUANTIKOA

Bere proposamena: Atomoek eta molekulek bakarrik igotzi edo xugatu ahal dute energia kantitate zehatzetan, kuantu tenegia minimoetan edo bere multiploetan.

KUANTUA: "Irradiatze elektromagnetiko eran igotzen edo xugotzen den energia kantitate minimoa"

$$E = nh\nu$$

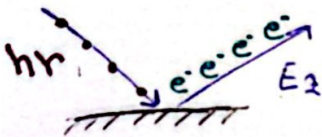
$$h: \text{Planck-en konstantea, } 6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

3. EFEKTU FOTOELEKTRIKOA

1903. urtean Albert Einstein.

"Metalek, ν edo grekuentzia minimoa argipean, elektrioiek askatu" Argiaren intentsitatea handia bada goki gehiago izango ditu, baina goki hauen energia ez bada atariko baino handiagoa ez da elektrioiek eraraito.

Aitailik, grekuentzia handiko argi-izpia erabiliz gero elektrioiek eze, energia handiagoa. Intentsitatea handiagoa bada energia ez da handituko baina bai sortutako e^- kopurua, goki gehiago baitaude.



$$E = E_0 + E_2$$

$$E = h\nu$$

$$E_0 = h\nu_0$$

$$E_2 = h\nu - h\nu_0 = h(\nu - \nu_0)$$

4. HEISENBERG-en ZIURGABETASUNAREN PRINTZIPIOA

E_2 dago modurik elektroiaren orbita zehazteko beharrezkoa.

Zenbait magnitude elkarren artean osagarriak, hau da:

neurria \rightarrow zehaztasun $e_2 \rightarrow$ ZIURGABETASUNA

$$\Delta x \cdot \Delta y \geq \frac{h}{4\pi}$$

ATOMO HIDROGENOIDIAK

1. SCHÖDINGER EKUAZIOA

Eredu mekanikuantikoaren oinarria. Elektroiaren existentzia suposatzen den uhin-guntziaren existentzia suposatzen da. Ondorioz, ez daude orbitak, orbitalak baizik. Uhin honek eta bere ekuazioak atomoan bertan e^- -ren partaia definitu.

$$H\psi = E\psi$$

non:

$$H = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V$$

ener. potentzial

$$V = \frac{e^2}{r} \quad \text{edo} \quad \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

bera:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{e^2}{r} \right] \psi = E\psi$$

$H \rightarrow$ eragile Hamiltonarra / energia zinetikoa

$E \rightarrow$ sistemaren energia osoa

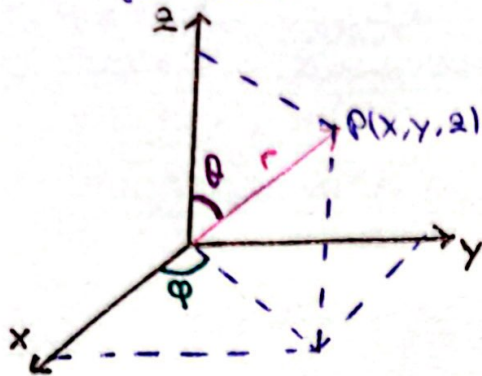
$\psi \rightarrow$ uhin-guntzia (n-zen menpekoa)

Atomo baten prob. adierazten du,
Vede energia potentzialaren gaita zertan

2. UHIN FUNTZIOAK

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Kasu partikular batzutan $\rightarrow e^-$ hidrogeno atomoaren barruan



Koordenatu polarak:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot A(\theta, \varphi)$$

- \rightarrow elektroiaren uhin-guntziak
- \rightarrow guntziak erradialak
- \rightarrow guntziak angeluarak

E_2 datu (guntziak): berezko esanahi fisikoa. Beraien karratuak e^- duen atomoa aurkitzeko probabilitatearen, P , ebalazioa.

Banaketa erradialaren guntzia; $4\pi r^2 R^2(r)$ erradio e^- aurkitzeko P nukleotik distantzia baten, orbitalaren lamainaren arabera (n).

Banaketa angeluarren guntzia; $A^2(\theta, \varphi)$
 e^- aurkitzeko θ , θ eta φ angeluetiko edozein dis. orbitalen itxura.

3. KUANTU-ZENBAKIAK

Hiru kuantu zenbaki:

$$\psi(\theta, r, \varphi) = \psi(n, l, m)$$

- $n \rightarrow$ nagusia
- $l \rightarrow$ azimutala
- $m \rightarrow$ magnetikoa

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

$$l = (n-1)$$

$$m = (-l) \dots (-l+1)$$

Orbitala; n, l, m definitu

Elektronia; n, l, m, s definitu \rightarrow spinaren ku. z.

KIMIA 5.gia

ATOMO POLIELEKTRONIKOAK

1. KARGA NUKLEAR ERAGINKORRA

Nukleotik kanpokoagira e⁻cekimo duen erakarpen erreala.

$$\Psi_{osoa} = \Psi_1 + \Psi_2$$



Pantailatzea; Baruko e⁻gatik karga nuklearraren murrizketa da eta karga nuklear eraginkorra sarracozten du. $1s$ orbitalak, $2s$ eta $3s$ pantailatu, eta $2s$ orbitalak $3s$ pantailatu.

2 ENERJIA MAILA

$$E = -R \frac{Z^2}{n^2} \rightarrow Ze \ g(n,l) \rightarrow E \ g(n,l) \quad n \text{ eta } l \text{ berrak egerak degeneratuak.}$$

Degenerazioa; kuantu-mailetako energiaren berdina izatea

Adib: Li atomoa; $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ EZ DEGENERATUA

Fe " ; " $3p_x, 3p_y, 3p_z$ DEGENERATUA

n eta ml mendekoa da; adib $\rightarrow Fe \ n=2 \ ml=1$

ml desberdina, degenerazioa ekidin $\rightarrow Li \ n=2 \ ml=0$ eta $ml=1$
 \uparrow s \uparrow p

TAULA PERIODIKOA

1. ANTOLAKETA

ELEMENTU METALIKOAK

Subs ez molekular, paketatze trinkoa eta blura metalikoak. Beru eta elektrizitate eroaleak. Erreduzitaileak.
1 eta 2 taldekoak,

E2-METALIKOAK

Egitura molekular edo ez molekular, izatea kobalentea mailatuta
Elektronen negatiboak eta oxidatzaileak.

→ Elementu-mota eta sailkapen periodikoa
4 elementu-mota, konfigurazio elektronikaren arabera.

GAS UOGLE (18. taldea)

Gerua elektronikoa beteta.



ELEMENTU ADIERAZGARRIAK

Kanpoko gerua partzialki beteta.

→ Metal alkalinoak (1. taldea)

e^- galtzeko joera → kationi monobalentea eratzen E^+
 ns^1

→ Metal alkalinoak (2. taldea)

e^- galtzeko joera → kationi dibalentea eratzen E^{2+}
 ns^2

→ Halogenoak (17. taldea)

e^- irabazteko joera → anionik monobalentea
 $ns^2 np^5$

→ Halogeno/Anjionenak (16. taldea)

e^- irabazteko joera → anionik dibalentea
 $ns^2 np^4$

→ Nitrogenoideak (15. taldea)

$3e^-$ irabazteko joera → anionik dibalentea
 $ns^2 np^3$ → 3 blura kobalente eratu

→ Karbonoideak (14. taldea)

4 blura kobalente
 $ns^2 np^2$

→ Berriak (13. taldea)

e^- galdua → kationik tribalente
 $ns^2 np^1$ → 3 blura kobalente

TRANSIZIO ELEMENTUAK

d geruza partzialki beteta

$$3-12 \text{ taldeak } (n-1)d^4 ns^2 \text{ tik } (n-1)d^{10} ns^2 \text{ -era}$$

BARNE TRANSIZIO ELEMENTUAK

Azken hiru geruak partzialki beteta

$$(n-2)f^{1-14} (n-1)d^4 ns^2 \text{ (kasu askotan); } (n-1)d^4 e^- \rightarrow 4f \text{ pasatu}$$

PERIODOAK (ilarak) \rightarrow

TALDEAK (zutabeak) \downarrow

2. BALENTZIA ELEKTROIAK

Kanpo e^- dirak.

Talde bereko elementuek b.e. kop. bera, antzeta jacea kimikoa

3. PROPIETATE PERIODIKOAK

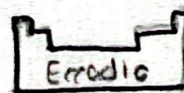
B.e. erraz galdtu \rightarrow Ionizazio-energia

B.e. erraz irabazi \rightarrow Aginitate-elektrokoa

KARGA NUKLEAR EFETIBOA Z_e

Talde batean gaitik behera nukleotik gero eta urrunago daudenez, balentzia e^- sentitzean duten erakarpena gero eta txikiagoa.

Periodoan, ezkerretik eskuinaldera b.e. sentitzean duten erakarpena handiagoa



ERRADIO ATOMIKOA

Periodoetan Z_e handiagoa, erakarpen nuklear handiagoa, erradio txikiagoa

Taldeetan, n handitu \Rightarrow erradiora \uparrow , e^- aldapenak \uparrow eta e^- hedatzen hedatu

\rightarrow Anioiak; Z_e kte, baina e^- gehiago, ondorioz aldapen handiagoa eta erradio \uparrow

\rightarrow Katioiak; e^- gutxiago, hodi elektronikoa uskurtu, erradiora \downarrow

IONIZAZIO ENERGIA (IE)

Atomo gaseoso batean e^- bat erausteko beharrezko energia minimoa, $i_1 + b_i$ hurbiltuz.

IE_n , IE -ren balioek n balioarekin gero egin.

Periodoetan, eskuinaldera \uparrow

Taldeetan, behera txikituz



KIMIKA 6. gaia

LOTURA KOBALENTEAK

E2-METAL + E2-METAL

e⁻ bikoteak partekatuz. Atomo batek dirarik eta beste gehien osatzen joera.

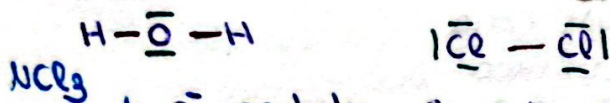
1. LEWIS EGITURAK

ZORTZIKOTEAREN ARAUA

Atomoak saiatu zortzikotea lotzen, e⁻ bikote partekatuz.

ns²np⁶ lotzea. Balentzia-elektroiak jakiteko = taldea - ΔO

Ex: 13. taldea; b-e⁻ = 13 - ΔO = 3e⁻



1. e⁻ zenbaki; 5u + 3 · 7e = 26e⁻ → 13 e⁻ bikote

2. atomo zentrala; Nitrogenoa Cl-C-N-Cl

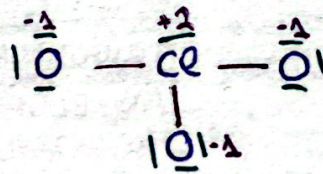
3. e⁻ bikote soberan: Cl-C-N-Cl

MARGA FORMALA

Atomo bakoitzaren karga, atomoak berdin partekatuta badaude

MARGA FORMALA = b-e⁻ kop - e⁻ ez partekatuta → 1/2 partekatutak

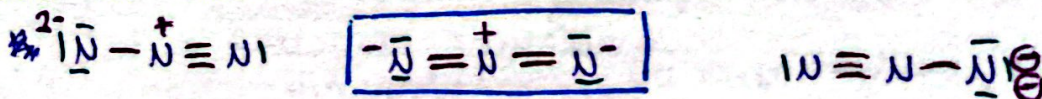
<chem>ClO3</chem>	Cl	O
e ⁻ atomoak	+7	+6
e ⁻ ez-parte	-2	-6
1/2 e ⁻ parte	-3	-1
K.F. =	+2	-1



zoritx hurbilen
K.F. txikiena duen
egitura egkiena

ERRISONANTZIA

Batzuetan, Lewis egitura bat baino gehiago, zortzikotearen araua bete ez azen.



K.F. txikiena duena

Simetrikoa

Karga (-) atomo elektonegatiboenaren gainean

Karga (+) atomo gutxiaren elektonegatiboa.

2. BGEBBA METODOA

Atomo zentralaren inguruko e^- bitxeteen banaketa espazialak egonkortasunaren aldea sartarazten du.

Molekulen GEOMETRIA aurresango du. Idealena, egonkerena, ahaliak eta aldarapen indar trinkiena.

BEK = bitxete ez konpartituak

BK = bitxete konpartituak

Aldarapenak: $BEK-BEK > BEK-BK > BK-BK$

GEO ELEKTRONIKOA

Atomo zentralaren inguruan dauden e^- bitxeteak

e^- bitxete kop

geometria

2

AB_2 = LINEALA

3

AB_3 = TRIGONAL LAUA

4

AB_4 = TETRAEDRIKOA

5

AB_5 = BIPIRAMIDE TRIGONALA

6

AB_6 = OKTAEDRIKOA

GEO MOLEKULARRA

$AX_x E_e$

A: atomo zentrala

E: bitxete bakartiak

X: lotutako atomak

e: bitxete bakarti kop (BEK)

x: bitxete partekatu kop (BK)

e^- $AX_x E_e$ mota

geometria

$AX_2 E_4$ / $AX_2 E_3$

LINEALA

$AX_2 E_6$ / $AX_2 E_2$

ANGELUARRA

$AX_3 E_6$

TRIGONALA

$AX_3 E_8$

PIRAMIDE TRIGONALA

$AX_3 E_2$

T-FORMA

$AX_4 E_8$

TETRAEDRIKOA

$AX_4 E_{10}$

TET. DISTORTSIONATUA

$AX_4 E_2$

KARRATU LAUA

$AX_5 E_{10}$

BIPIRAMIDE TRIGONALA

$AX_6 E_{12}$

PIRAMIDE KARRATUA

$AX_6 E_{12}$

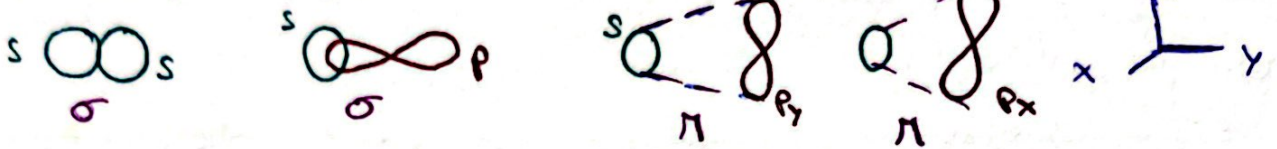
OKTAEDRIKOA

3. VALENTZIA - LOTURAREN TEORIA

Walter H Heitler eta Fritz W London (1927): uhin-ekuazio bat deginitu zuten H₂-ren molekularako, Schrödingerren ekuazioa aplikatuz. Sistema behar bezala ordenatzen duen uhin-funtzio bat bilatu, energiaren ekuazioan sartu eta nukleoen arteko distantzia (r) baliokidetzarako ebatzi.

Energia minimoa gogorari dagokion distantzia, oreka distantzia edo lotura distantzia da. Energia minimoa = **lotura-energia**

Gainezarpenera orbitalen artean: s eta p



Gainezarpeneraren arabera bi lotura mota:

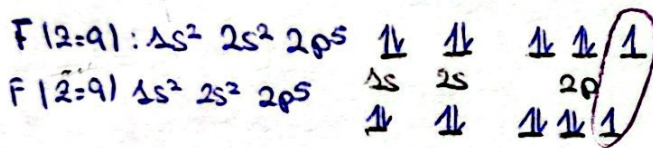
σ loturak

- Gainezarpenera frontala
- Lotura sinpleak
- s-s / s-p_z / p_z-p_z

π loturak

- Albedo gainezarpenera, ez zuzena
- Lotura anizkoitzak
- Aurretik σ lotura sartu
- p_x-p_x / p_y-p_y
- Lotura norantzarerikiko perpendikularrak

F₂



Lotura σ |F - F|

~~HIBRIDAZIOA~~

PROMOTIO ELEKTRONIKOA

Orbital atomiko batean parekatuta dauden elektrorik ezizitu erara pasa, haietarik bat hutsik dagoen energia handiagoako orbitalera pasatuz.

Prozesu endotermikoa [E=] 1s² 2s² 2p⁴ 2p¹ → 1s² 2s¹ 2p³ 2p² 2p¹



HIBRIDAZIOA

Orbital atomikoen konbinaketan datza. Konbinatzen diren O.A. kop eta lortutako O.H.-renak berdinak. Orbital hibride guztiak elkarren baliogarriak, jatorriko O.A.-ren germa eta orientazio denberdinarekin.

Molekularen geometria e partekatuen eta ez-partekatuen arteko elkarrekiko gaitzespenak ematen dute. Hibridazioak lotura anizkoitzaren luzeraren eragin.

HIBRIDAZIOA	BANAKETA ESPAZIAL
sp	LINEAL AB ₂
sp ²	TRIGONAL LAUA AB ₃
sp ³	TETRAEDRIKO AB ₄
sp ³ d	KABONTU LAUA

sp ³ d	BIPIRAMIDE TRIGONAL AB ₅
sp ³ d ²	OKTAEDRIKO AB ₆

4. ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

'Mullik-en ustez, bi atomo hurbiltzean, eremu elektronikok berrantolatzen dira eta mol. osaren mendeko energia-maila berriak sortu; hau da, orbital atomikok konbinatu eta desagertu, orbital molekular (OM) berriak sortzeko, orbital kopuru beza. Konbinatzen diren OA-ek bete behar baldintzak: - Simetria beza - Energia berekoak - Gainezarpen max/min, naira handia

Orbital lotzaile: $\psi_+ = \psi_A + \psi_B$

Orbital antilotzaile $\psi_- = \psi_A - \psi_B$

OM NOTAK

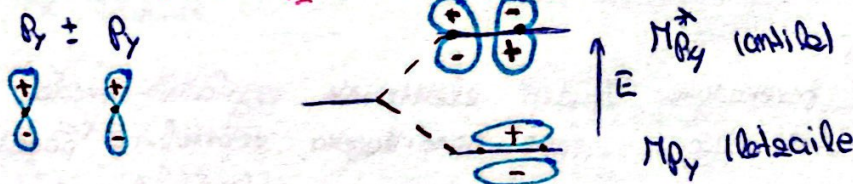
a) σ orbital molekularrak s orbital atomikoen eratuak



b) σ orbital molekularrak p_z orbital atomikoen eratuak



c) M.O.M. p_x eta p_z O.A. eratuak



LOTURA ORDENA: e⁻ lotzaile - e⁻ antilotzaile 2

MOLEKULA DIATOMIKO HOMONUKLEARRAK

s/p orbitalek onkarrean energia-alde txikia dute. Energia-aldea oso txikia denean, atomo bakartzaren s eta p nahastu \rightarrow O.M. eratu. Energia-aldea handiagoa, ea dira elkarretan nahasten, eta O.M.-ak seilik s edo bakarrak p nahasteagatik eratu.

Diagramak

MOLEKULA DIATOMIKO HETERONUKLEARRAK

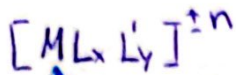
Orbital atomikok desberdinak eta konbinatuta linealetan elkarren desberdina. Nahastetaren koefizienteak gertu:

$$\psi_+ = \psi_A + \lambda \psi_B \quad \text{O.M. LOTZAILA}$$

$$\psi_- = \psi_A - \lambda \psi_B$$

KIMIKA 7. gaia

KOORDINAZIO KONPOSATUAK



↑
n: s² m-d² x: 2 → 9

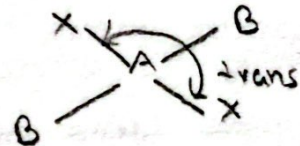
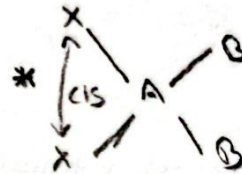
1. GEOMETRIA

ML₂ → LINEALA; ez-ohitua. 10 d¹⁰

ML₃ → TRIGONAL; ez-ohitua. gas nobleak

ML₄ → TETRAEDRIKOA; d⁵ eta d¹⁰
 → KARRATU-LAUA; d⁸

ML₆ → OKTAEDETRIKOA; ohituenak;



2 ISOMEROAK

Formula bera baina atomen kokapen desberdina

EGITURA ISOMEROAK

Atomen arteko lotura desberdina

Lectura-isomeroak → metal-ligando lotura desberdinekin

Ionizazio-isomeroak → disoluzioan ico desberdinetan sorrerazten dituzte

ESTEREOISOMEROAK

Atomen arteko loturak berdinetan baina banaketan espaziala ez

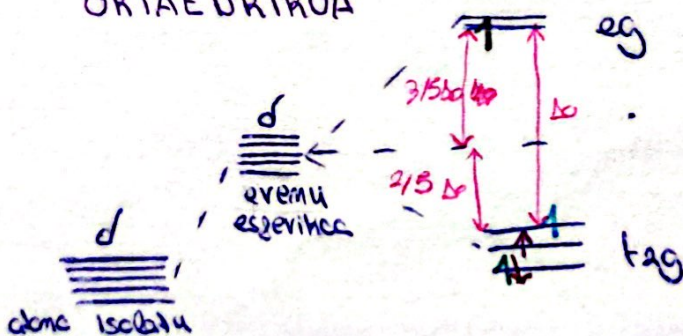
Geometria-isomeroak → cis/trans *

Isomero optikoa → ispilu-irudia (enantiomeroak)

3. KRISTAL-EREMUAREN TEORIA

EGOKORTASUNA: karratu-laua > oktaedrikoa > tetraedrikoa

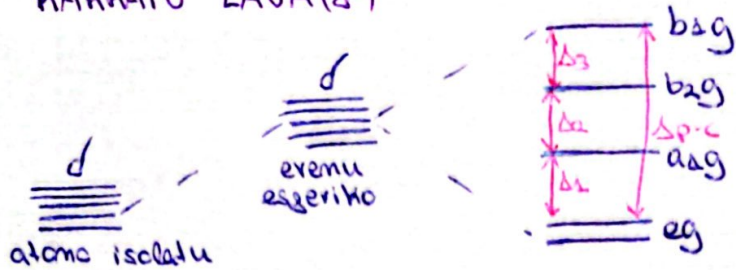
OKTAEDETRIKOA



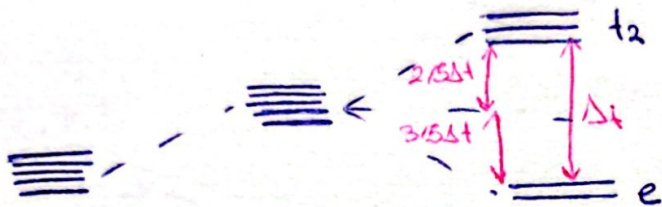
$d^1 \rightarrow t_{2g}^1$: KEE = $-2/5 \Delta_o$ bider
 $d^2 \rightarrow t_{2g}^2$; " = $2x - 2/5 \Delta_o$
 $d^3 \rightarrow t_{2g}^3$; " = $3 \cdot -2/5 \Delta_o$
 $d^4 \rightarrow t_{2g}^3 e_g^1$ " = $4 \cdot -2/5 \Delta_o + 1 \cdot \Delta_o$
 $d^5 \rightarrow t_{2g}^3 e_g^2$ " = $3(-2/5 \Delta_o) + (3/5 \Delta_o)$

spin ↓
 2e⁻ despare
 spin ↑

KARRATU LAUA (d^3)



TETRAEDRIKOA



KEEE (Krisal-eremuaren egonkortze energia)

Ligandoa eremu ahulekoa $\rightarrow \Delta_o$ txikia \rightarrow SPIN ALTUA

Ligandoa eremu sendoa $\rightarrow \Delta_o$ handia \rightarrow SPIN BAXUA

$\Delta \uparrow \rightarrow$ ENERGIA \downarrow

PARAMAGNETIKO = e^- parekatu gabeak

DIAMAGNETIKO = e^- guztiak parekatuak

ARIKETAK

① Geo oktaedrikoa, d orbitalen banaketaren ondoren egntkr. irabazi?

$$t_{2g}^2 \text{ KEEE} = 2(-2/5 \Delta_0) = -4/5 \Delta_0 \quad \text{egntkrtasuna irabazi}$$

$$t_{2g}^3 e_g^1 \text{ KEEE} = 3(-2/5 \Delta_0) + 3/5 \Delta_0 = -3/5 \Delta_0 \quad "$$

$$t_{2g}^3 e_g^2 \text{ KEEE} = 3(-2/5 \Delta_0) + 2(3/5 \Delta_0) = 0 \quad E_2 \text{ egntkrtasuna irabazi}$$

$$t_{2g}^6 e_g^2 \text{ KEEE} = 6(-2/5 \Delta_0) + 2(3/5 \Delta_0) = -6/5 \Delta_0 \quad \text{egntkrtasuna irabazi}$$

$$t_{2g}^6 e_g^3 \text{ KEEE} = 6(-2/5 \Delta_0) + 3(3/5 \Delta_0) = -3/5 \Delta_0 \quad "$$

② Egia edo gezurra

a) $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ konplexurako $\Delta_0 < A$, beraz spin altukoa ($\text{Mn}^{3+} [E] 3d^4$)

→ $t_{2g}^3 e_g^1$ izango da, ~~no~~ spin altukoa izateko, beraz $\Delta_0 < A$

b) $[\text{Mn}(\text{CN})_6]^{3-}$ konplexua spin altukoa

→ GEZURRA; estekatzailerak eremu sendotua da → spin baxua,

beraz → t_{2g}^4

③ Parekatu gabeko e^- kop.

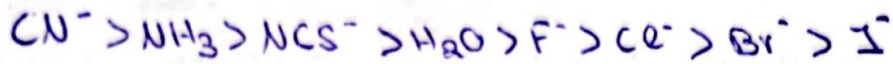
$[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{4-}$ $\text{Cr}^{2+} [E] 3d^4$ CN eremu sendo → spin baxua

→ t_{2g}^4 , 2 e^- parekatugabe

$[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ H_2O eremu ahul

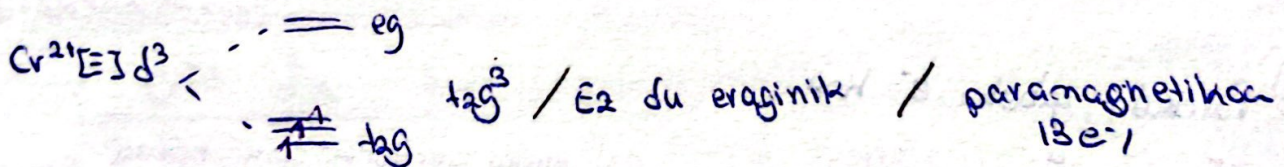
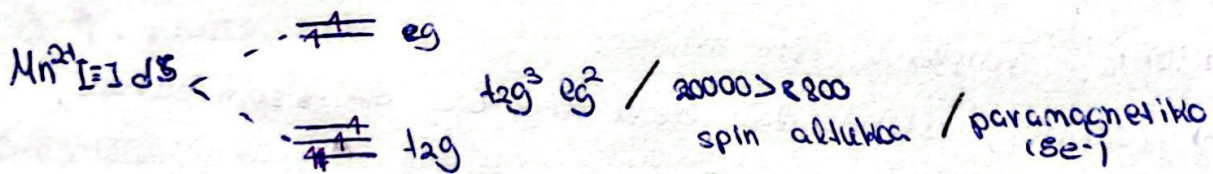
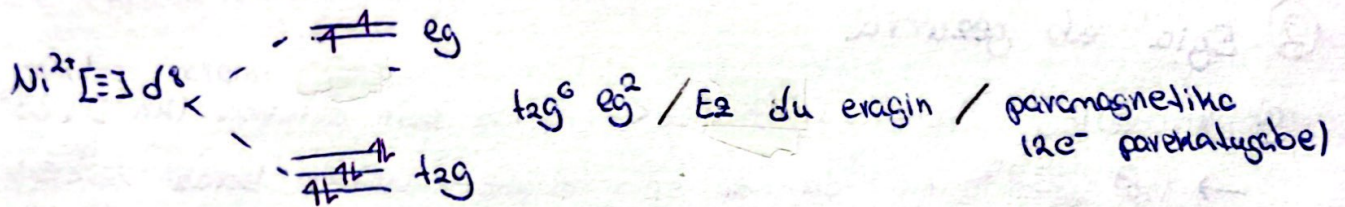
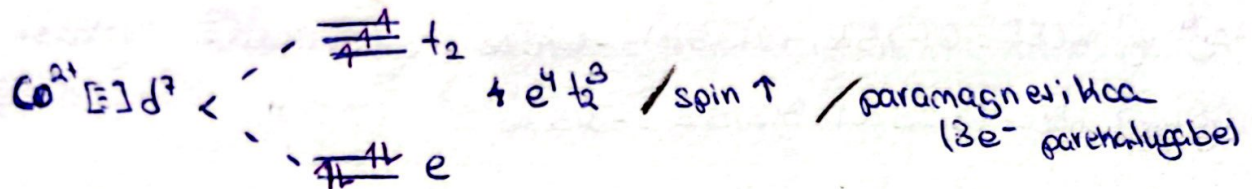
$t_{2g}^3 e_g^1$, 4 e^- parekatugabe, spin altua

4) Ligandak d orbitalen energi-maila degeneratuak banatzen duten ahalmen beharerraren arabera ordenatu.



Seyida espektrokimikoa

b) Aholatuak energia; $P \approx 20000$, zein spin \uparrow eta zein spin \downarrow .
zein paramagnetiko



GOMETRIAK

LOTURA KOP

MOLEK

ELEK

Lotura Kop	Molek	Elek
1	AX	A-X
2	AX ₂ AXE	A-X-X α = 180°
3	AB ₃ AX ₂ E	A-X-X α = 120°
4	AB ₄ AXE ₂	A-X-X α < 180°

Lotura Kop	Molek	Elek
4	AB ₄	A-X-X-X-X α = 109,5°
3	AX ₃ E	A-X-X-X α = 107°
2	AX ₂ E ₂	A-X-X α = 106°
1	AXE ₃	A-X-X-X

LINEAL

LINEAL

LINEAL

LINEAL

LINEAL

TRIGONAL LAUA

TRIGONAL LAUA

ANGELUARRA

TRIGONAL LAUA

LINEALA

TETRAEDRIKO

TETRAEDRIKO

PIRAMIDE

TRIGONALA

ANGELUARRA

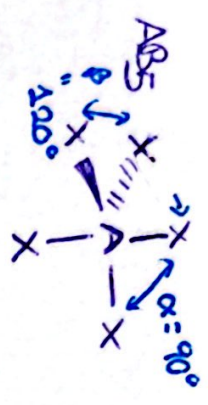
LINEALA

LGT KOP.

MOLEK

ELEK

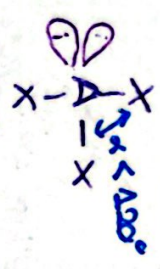
5



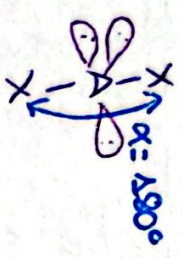
BIPIRAMIDE
TRIGONAL



AX_3E_2



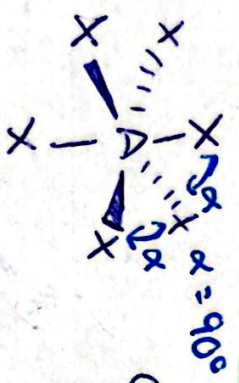
AX_2E_3



BIPIRAMIDE
TRIGONALA

6

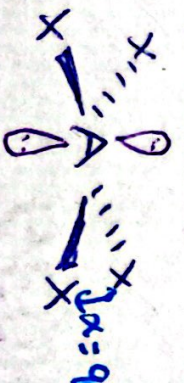
AB_6



AX_5E



AX_4E_2



OKTAEDRIKOP

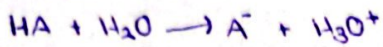
KIMIKA 3. gaia

AZIDO BASE

pH KALKULUA

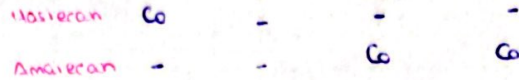
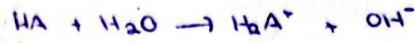
1. AZIDOTASUN KONSTANTEA

Acido sendak



$$pH = -\log[H_3O^+] = -\log C_0$$

Base sendak

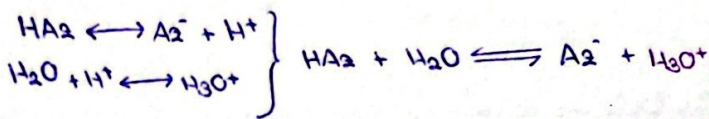


$$pOH = -\log[OH^-] = -\log C_0$$

$$pH = 14 - pOH = 14 + \log C_0$$

2. AZIDOTASUN KONSTANTEA ETA MASA/KARGA BALANTZAK

Acido ahula



M.B. = masa balantzea

K.B. = karga balantzea

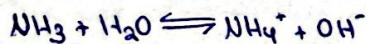
M.B. $\rightarrow C_{HA_2} = [HA_2] + [A_2^-]$ Acido ahula denez ez delako aske disoziatzen

K.B. $\rightarrow [A_2^-] = [H_3O^+]$ HA_2 denez pH acidoa da

$$K_a = \frac{[A_2^-][H_3O^+]}{[HA_2]} \rightarrow K_a = \frac{[H_3O^+]^2}{C_{HA_2}}$$

$$[H_3O^+] = \sqrt{K_a \cdot C_{HA_2}}$$

Base ahula



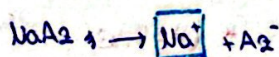
M.B. $\rightarrow C_{NH_3} = [NH_3] + [NH_4^+]$

K.B. $\rightarrow [OH^-] = [NH_4^+]$

$$K_b = \frac{[NH_4^+][OH^-]}{[NH_3]} = \frac{[OH^-]^2}{C_{NH_3}}$$

$$[OH^-] = \sqrt{K_b \cdot C_{NH_3}}$$

Peabqito ahula anionikoa: A_2^-



Ez acidoa (NaOH base sendacoen konjugaetua)

M.B. $\rightarrow C_{A_2^-} = [A_2^-] + [HA_2]$

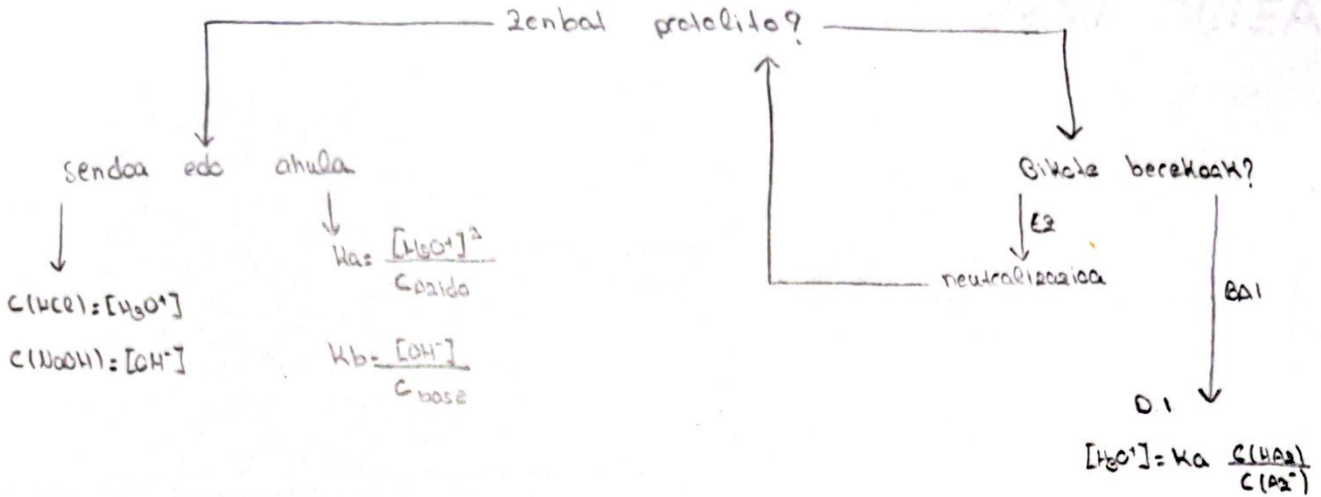
K.B. $\rightarrow [A_2^-] + [OH^-] = [H_3O^+] + [Na^+]$

K.B. $\rightarrow [A_2^-] + [OH^-] = [H_3O^+] + [HA_2] + [A_2^-]$

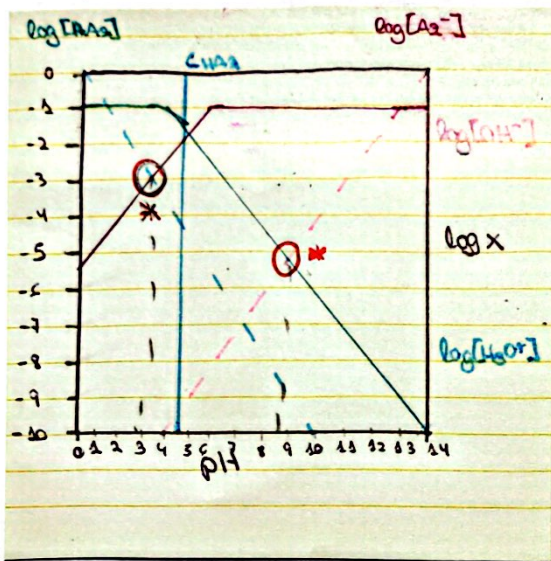
K.B. $\rightarrow [OH^-] = [H_3O^+] + [HA_2]$

$$[OH^-] \approx [HA_2] \rightarrow K_b = \frac{[HA_2][OH^-]}{[A_2^-]} \rightarrow K_b = \frac{[OH^-]^2}{C_{A_2^-}} \rightarrow [OH^-] = \sqrt{K_b \cdot C_{A_2^-}}$$

JARRAITZEKO PROZEDURA



3. pH DIGRAMA



Zerikariko?

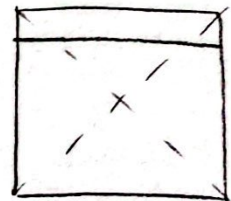
- pH-a ezagutzeko
- pH ezagutzeko
- Indikatzailea (Co) aukeratzeko
- Disoluzio indagarzaile erabiltzeko pH tartea bilatzeko

Nola kalkulatu pH-a diagramen bidez?

PROTOLITO AZIDO SENDOA

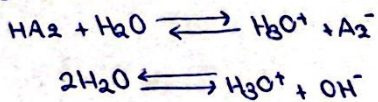


MB: $C_{HCl} = [Cl^-] + [HCl] \approx [Cl^-]$
 KB: $[H_3O^+] = [Cl^-]$; $pH = -\log[Cl^-]$



PROTOLITO AZIDO AHULA

Bi azekak kontuan hartu:



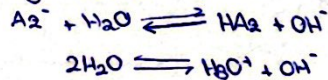
KB: $[H_3O^+] = [OH^-] + [A_2^-]$

-OH⁻ mesprezatu
 $[H_3O^+] = [A_2^-]$

* pH = 2.83

PROTOLITO BASIKO AHULA

Hurrengo azekak kontuan:



-Balantze protonikoa → $[H_3O^+] + [HA_2] = [OH^-]$

-H₃O⁺ mesprezatu → $[HA_2] = [OH^-]$

* pH = 9.83

4. DISOLUZIO INDARGETZAILAK

Disoluzio batean honako bi osagai-taluen izatea gero 0.1.

1. Azido edo base ahula
2. Azido/base konjugatua

Baldintzak:

- Bi espezieen kontzentrazioaren arteko erlazioa; parekoa; $0,1 < C_{HA} / C_{A^-} < 10$
- Kontzentrazioak nahiko handiak ($0,1 M < 1$): $C_{HA} / K_a > 10$ eta $C_{A^-} / K_a > 10$
- Bere indargetze-gaitasuna edo eraginkortasuna, kontzentrazioarekin batera handitu.

$$pH = pK_a + \log \frac{C_{base}}{C_{azido}}$$

$$[H_3O^+] = K_a \frac{C_{HA}}{C_{A^-}}$$