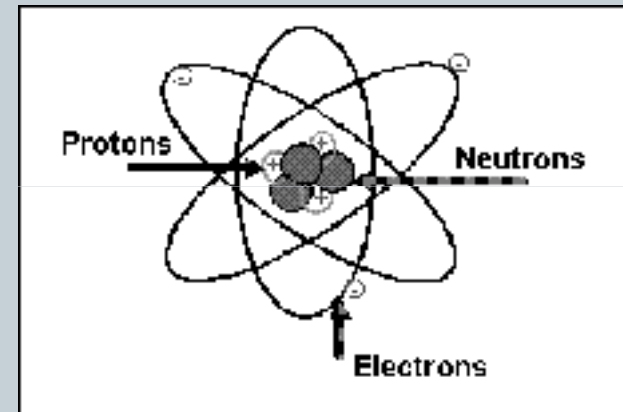


1. Gaia: Egitura Atomikoa

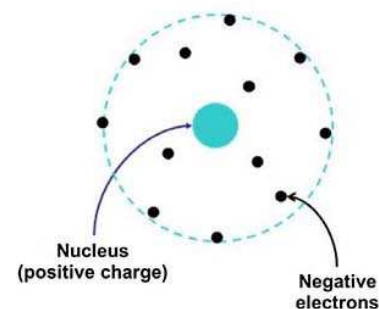
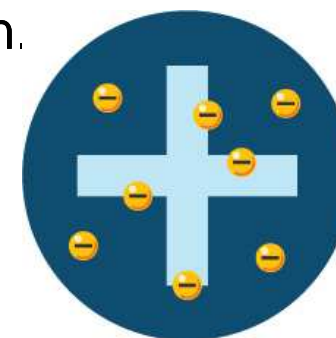
- Sarrera
- Eredu atomikoak
- Oinarrizko partikulak
- Egitura Elektronikoa: Eredu mekanokuantikoa
- Orbital atomikoak
- Oinarrizko partikula
- Isotopoak



1.1. SARRERA

Hasteko, historia apur bat...

- Democrito K.a. V mendean: Atomoa-banaezina
- 1808 J. Dalton: Teoria Atomikoa
 - Elementuak atomoz osaturik – berdinak/ezberdinak
 - Konposatuak elementu ezberdinen atomoz osaturik
 - Erreakzio kimiko batek ez du atomoa deusezten
- 1886 Goldstein fisikari alemaniarrek protoia eriden zuen.
- 1897 J. J. Thomson :
 - Elektroiaren aurkikuntza esperimentala.
 - Thomson-en eredu atomikoa
- 1909 E. Rutherford-en Ereditu Atomikoa

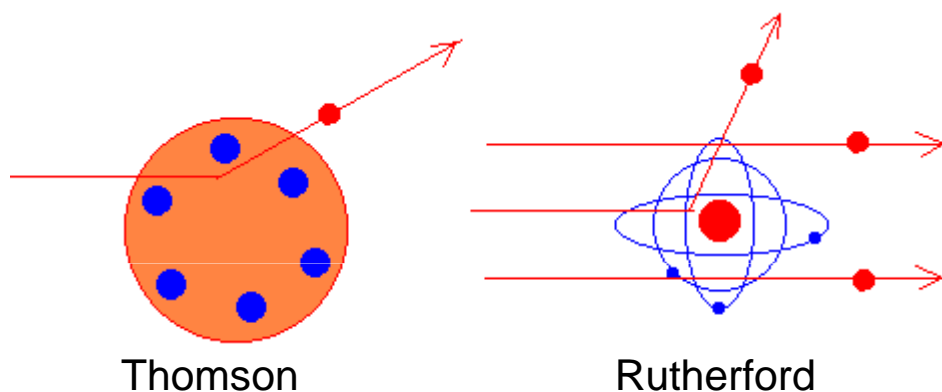
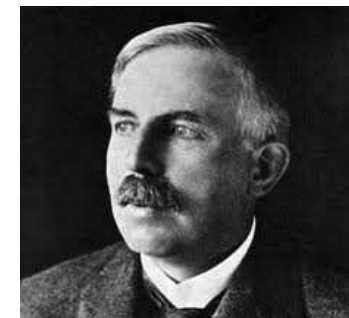


- E. Rutherford et al., 1909-1911.

- m_{p+} 1840 aldiz $>$ m_{e-}

-Urrezko geruzaren experimentua:

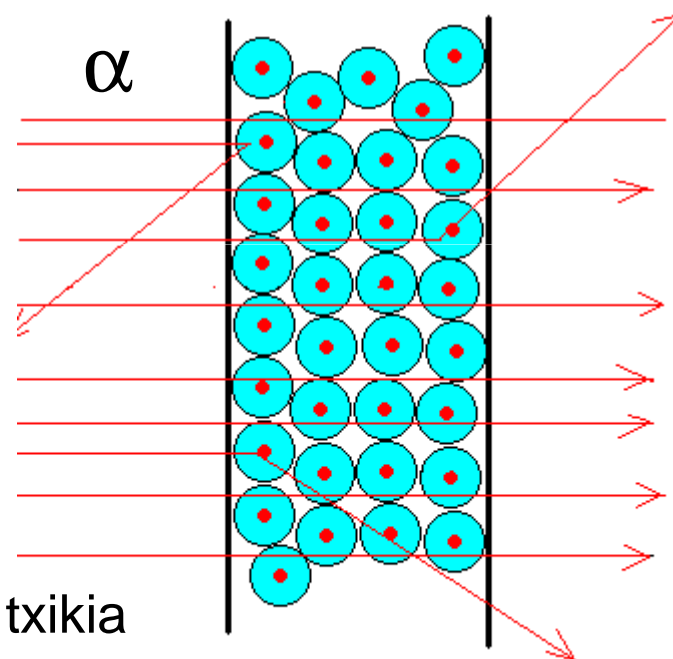
Rutherford vs. Thomson – Eredua atomikoak



Thomson

Rutherford

Emaitza:



Rutherford eredua gailendu zen.

Atomoa: Hodei elektronikoa eta nukleoa.

Nukleoa: Dentsitate handikoa, positiboa eta txikia
(%0.01 diametroa; % 99 masa)

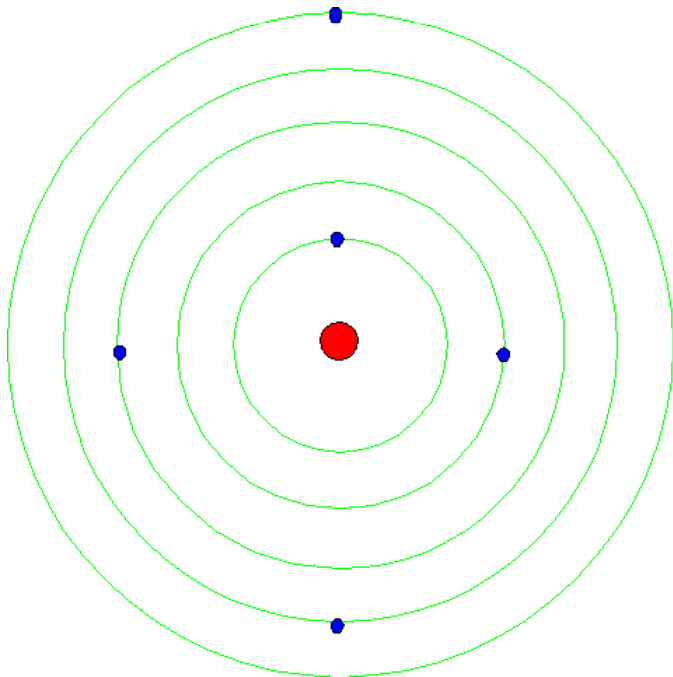
- Chadwick 1932: neutroia.
- Atomoaren eredua mekanokuantikoak...

Atomoaren eredua (Rutherford)

Nukleoa eta elektroien arteko indarra
erakarpenekoa da (zeinu kontrako kargak).



Eguzki sistema moduko bat: elektroiak orbitetan egingo zuten bira nukleoaren inguruan. Orbita hauek edozein tamaina (erradio) izan dezakete: zenbat eta elektroia urrunago egon nukleotik orduan eta energia altuagoa.



$$F_{\text{zentr}} = m \frac{v^2}{r} \quad F_{\text{elek}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_N Z_{e^-}}{r^2}$$

Orbita zirkularretan:

$$F_{\text{zentr}} = F_{\text{elek}} \longrightarrow v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_N Z_{e^-}}{m_{e^-} r}}$$

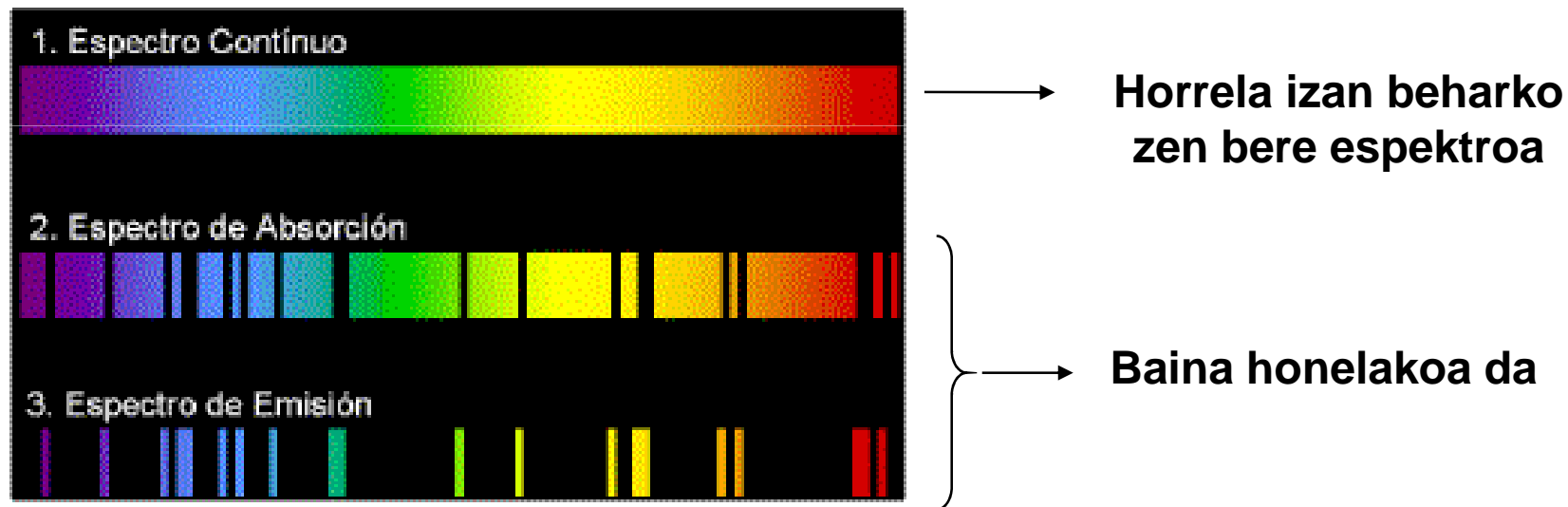
Elektroiaren energia: edozein balio har dezake

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_N Z_{e^-}}{r} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{Z_N Z_{e^-}}{r}$$

Atomoaren eredua (Rutherford)

Bere aurkako zantzuak:

- Elektroiak orbita batetik bestera igarotzen duenean, energia absorbatu edo igorriko du => **Espektro atomikoa**. Orbita guztiak posible direnez edozein energiako fotoiak xurgatu ala igorri ditzake. Baina hau ez da horrela izaten: zenbait energia zehatzeko fotoiak baino ezin ditu igorri edo xurgatu.



- Fisikak dioenez azeleratutako edozein partikula kargatua erradiazio elektromagnetikoa (fotoiak) igortzen du, energia galduz bera. Honen arabera biratzen dauden elektroiak beraien energia zinetikoa galtzen joango ziren nukleoan erori arte.

ESPEKTRO ATOMIKOAK

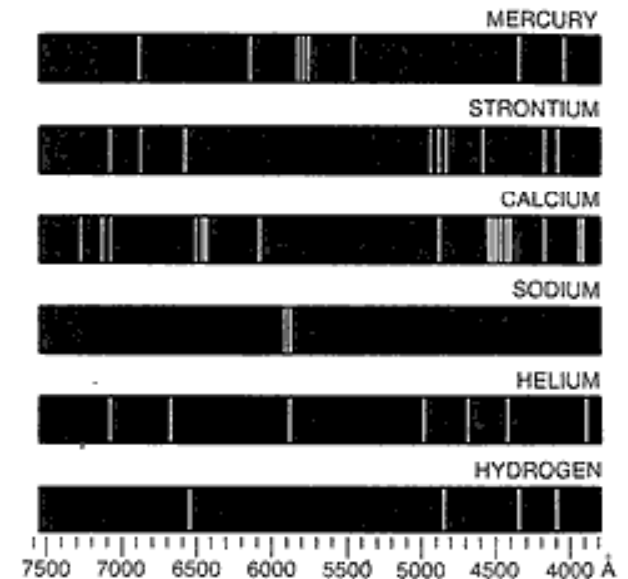
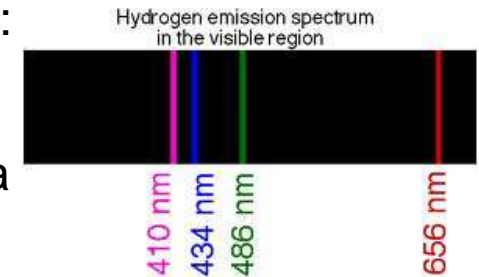
XX. Mendeko hasieran ondo ezagunak ziren espektro atomikoak:

- Gas egoeran dagoen atomo bat kitzikatuz, jatorrizko egoerara bueltatzeko E igorriko du eem bezala λ zehatz batzuetan.
- ν jakineko erradiazioak jasoz => **Espektro atomikoa**
- **H atomoak** espektro sinpleena agertzen du
- Lege esperimentalak: Balmer-en Ekuazioa

$$1/\lambda = \bar{\nu} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

($R = 109677.58 \text{ cm}^{-1}$ Rydberg-en konstantea)

- Igorpena ez-jarraia; E kuantifikaturik; λ edo ν jakin batzuetan bakarrik.



N. Bohr-ek oinarri hauek izango zituen gogoan bere eredu atomikoa eraikitzeko

BOHR-en EREDU ATOMIKOA H-ATOMORAKO



1913. Borh-en eredu atomikoa ondoko printzipioetan oinarriturik:

1) Mekanika klasikoa: e⁻a nukleoraen inguruan orbitatzen du. Erradio jakin batzuetako orbitak bakarrik baimenduta egongo dira.

$$F_Z = F_e \Rightarrow E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{Zk_e e^2}{r} = -\frac{Zk_e e^2}{2r}$$

2) Arau kuantikoa: aimendutako orbitetan e⁻aren momentu angeluarra:

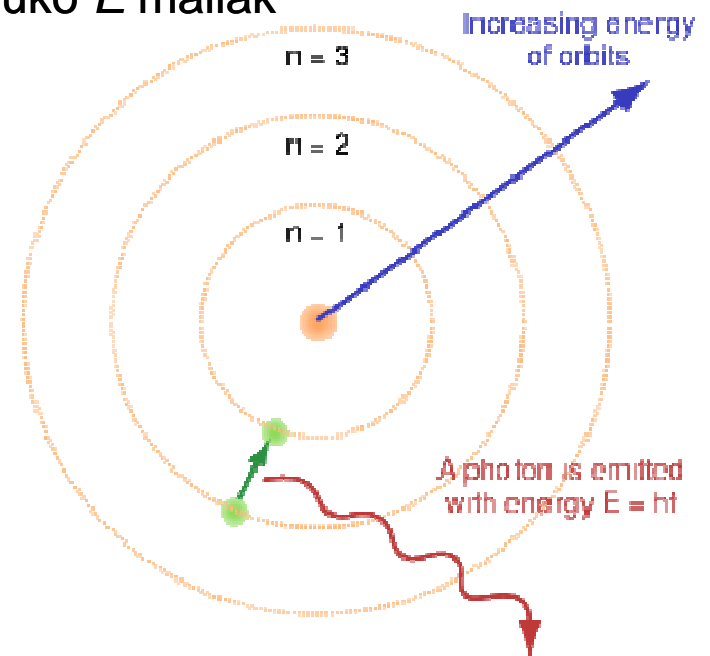
$$mvr = nh/2\pi = nh \Rightarrow E = -\frac{Zk_e e^2}{2r_n} = -\frac{Z^2(k_e e^2)^2 m_e}{2\hbar^2 n^2} \approx \frac{-13.6Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

non, “n” zbkia kuantiko nagusia den eta nukleo inguruko E mailak definitzen dituen. $n = 1, 2, 3, \dots$

3) e⁻a orbita batetik bestera jauzi egitean E igorri / xurgatuko du $h\nu$ (kuanto osoa).

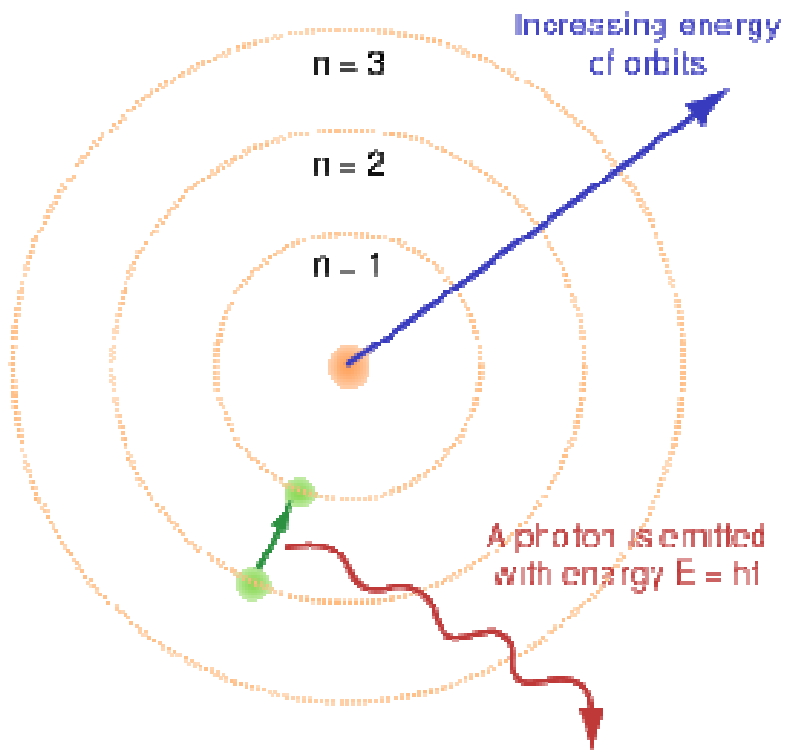
$$E_{n2} - E_{n1} = h\nu = h\{K[(1/n_2^2) - (1/n_1^2)]\},$$

non $K = -13.6 \text{ eV}$ den.



BOHR-en EREDU ATOMIKOA

- Eredu honen bidez, Bohr-ek e⁻-aren orbitaren erradioa eta E kalkulatu zituen espektroskopia atomikoatik ondorioztatutako legearekin bat etorriz. (Oharra: H –rako nahiko ondo doitzen bazen ere, beste atomoatarako nabarmenki huts egiten duen).



Arazoak:

- Ez du azaltzen zergatik orbita gutxi batzuk baino ez diren posible
- Fisikaren arabera biraka dabilen edozein partikula kargatu erradiazio elektromagnetikoa igortzen du, energia galtzen du beraz. Horrela elektroiak nukleoan erortzen amaituko lukete, baina ez da horrela gertatzen.

1.2. EGITURA ELEKTRONIKOA

ATOMOAREN EREDU MEKANOKUANTIKOAK

TEORIA KUANTIKOAREN HASTAPENAK – OINARRIZKO KONTZEPTUAK

ARGIA

UHINGIA

Argia erradiazio elektromagnetiko gisa ulertzen da, non uhina elkarrekiko elkartzut diren eremu magnetiko eta elektriko batek osatzen duten.

Maiztasuna (ν): Ziklo kopurua denbora unitateko ($\text{Hz}=\text{s}^{-1}$)

Uhin-luzera (λ): bi maxismoen arteko distantzia

$$\nu = c/\lambda = c\bar{\nu}$$

Zer azaltzen du? Optika, difrakzioa,...



TEORIA GORPUZKULARRA

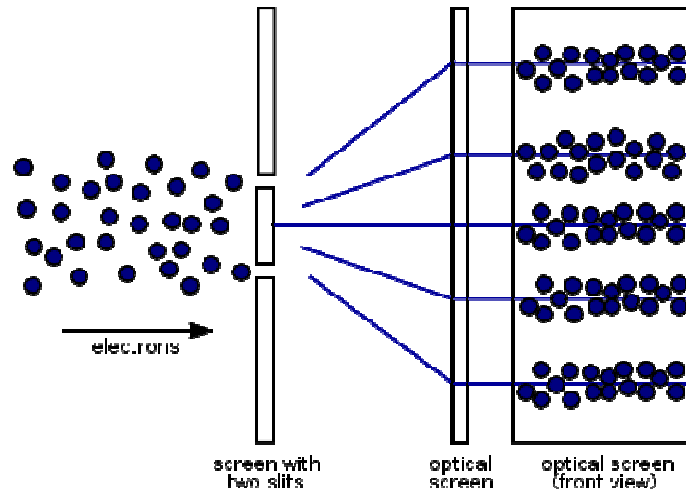
1905. Einstein-ek garatua Planck-en lana oinarritzat harturik:

Argia fotoiez osaturik dago. Fotoi bakoitzaren $E = h\nu$, beraz izpi-sorta bat n fotoiez osaturik badago bere energia $E = nh\nu$ izango da. h : Planck-en konstantea da ($6.623 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$).

Zer azaltzen du? Efektu fotoelektrikoa, absortzio atomikoa...

UHINGORPUTZ DUALITASUNA

- **De Broglie:** argiak uhin/partikula propietatea erakusten duen bezala, e⁻-ak eta beste partikulek ere propietate bera erakus dezakete.



- *Laser difrakzioa*

- *Uhin-gorputz dualtasuna*

ZIURGABETASUN PRINTZIPIOA

- **Heisenberg:** Ezin da aldi berean partikula baten posizioa eta higidura-kantitatea jakin (mekanika kuantikoaren oinarri bat).

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

ATOMOAREN EREDU MEKANOKUANTIKOA

- Schrödinger-en ekuazioa elektroien izaera ondulatorioaz baliatzen da atomoaren egitura elektronikoa eraikitzeko. Berton elektroia, uhin geldikorra bezala hartuz gero, nola zehaztu non kokatuta dagoen?

- Orbita kontzeptutik orbital kontzeptura pasatu zen. Elektroien posizioa finkatzea ez da posible, beraz, elektroia aurkitzeko probabilitateaz mintzatzen da eta horretarako uhin-funtzioak (adierazpen matematikoak) erabiltzen dira.

- Schrödinger-en ekuazioaren arabera:

$$H\psi = E\psi$$

non, ψ elektroia definitzen duen uhin funtzioa den, H eragile Hamiltondarra den eta E energia den.

- Atomoaren elektroia bakoitzarako ψ bat dago. Baina ψ hori Schrödinger-en ekuazioaren emaitza izan behar da.

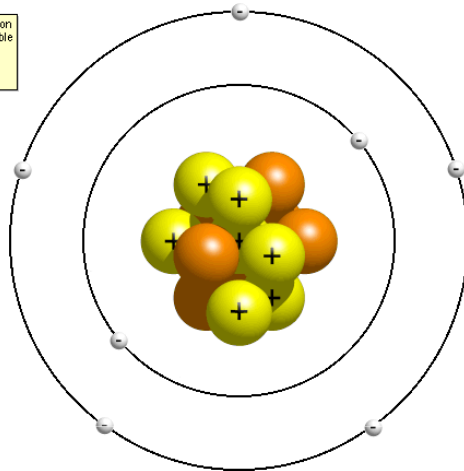
- Adibidez:

$$X^2 + 5X + 3 = 0 \Rightarrow \text{bi emaitza ditu, } X = -0.697 \text{ eta } -4.3$$

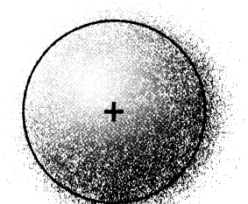
- $H\psi = E\psi$, zenbait ψ -ren emaitzak

- **“Orbital atomikoa”**: nukleoaren inguruko espazioaren eskualdea da, non energia jakineko elektroiei bat aurkitzeko probabilitate handia dagoen.

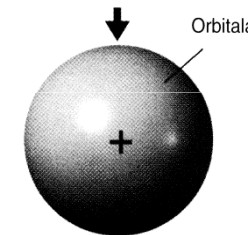
Nitrogen's Electron
Configuration Table
 $1s^2$
 $2s^2 2p^3$



Bohr-ren eredua => **Orbitak**



Barnean elektroia aurkitzeko
%90eko probabilitatea du gaina-
zal esferiko honek.



Eredu mekano-kuantikoa => **Orbitalak**

1. *oharra*: orbitala definitzen duen uhin-funtzioak izaera ondulatorioa izanik, ibilbide zehatzak aurreratea ezinezkoa da.
2. *oharra*: Scrödingerren ekuazioa H atomorako (atomo monoelektroniko baterako) ebaztu egin zen lehendabizi. Atomo polielektronikoentzat aldiz...

Uhin-funtzioa ebatzi ondoren, emaitza posibleak lau parametroen menpe daude:

n, l, m_l (eta m_s) => **Zenbaki kuantikoak**

n, l, m_l => orbitala zehazten du eta m_s => elektroaren spina

Zenbaki kuantiko nagusia (n): energi maila adierazten du eta orbitalaren **tamainarekin** erlazionatuta dago.

$n = 1, 2, 3, \dots$ (edozein balio oso eta posibo)

Zenbaki kuantiko orbitala edo momentu

angeluarra (l): orbitalaren **formarekin** erlazionatuta dago.

$l = 0, \dots, n-1$ (horien arteko balio osoak)

Izen propioa izaten du orbital forma bakoitzak:

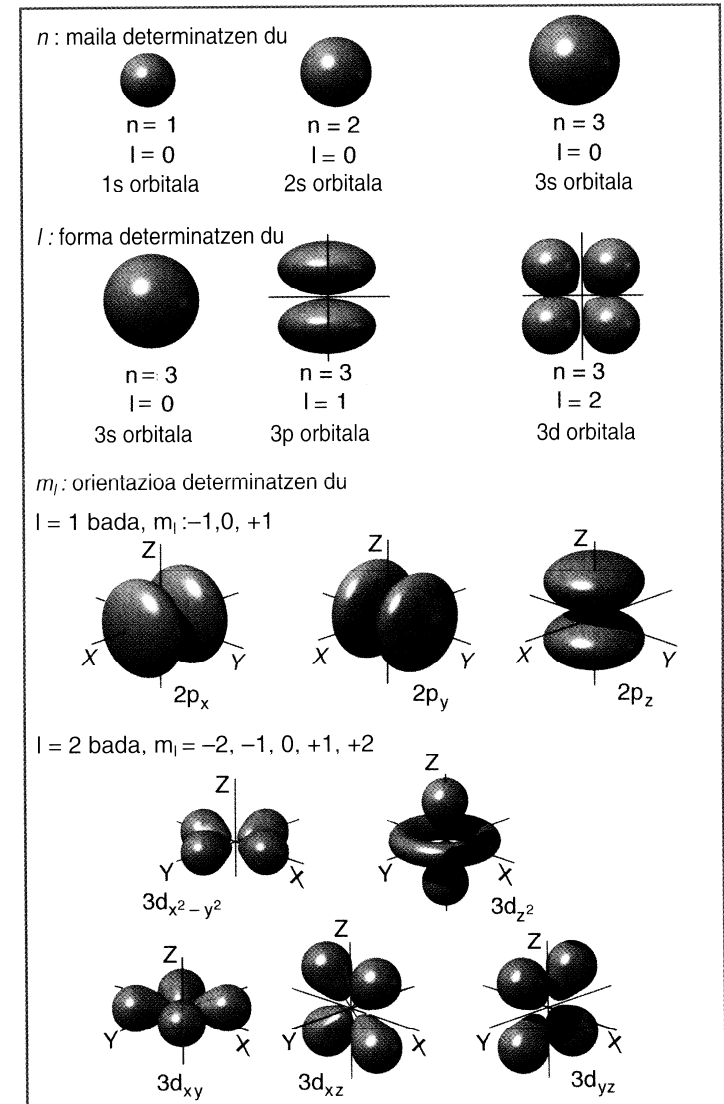
s $\rightarrow l = 0$; **p** $\rightarrow l = 1$; **d** $\rightarrow l = 2$; **f** $\rightarrow l = 3$;...

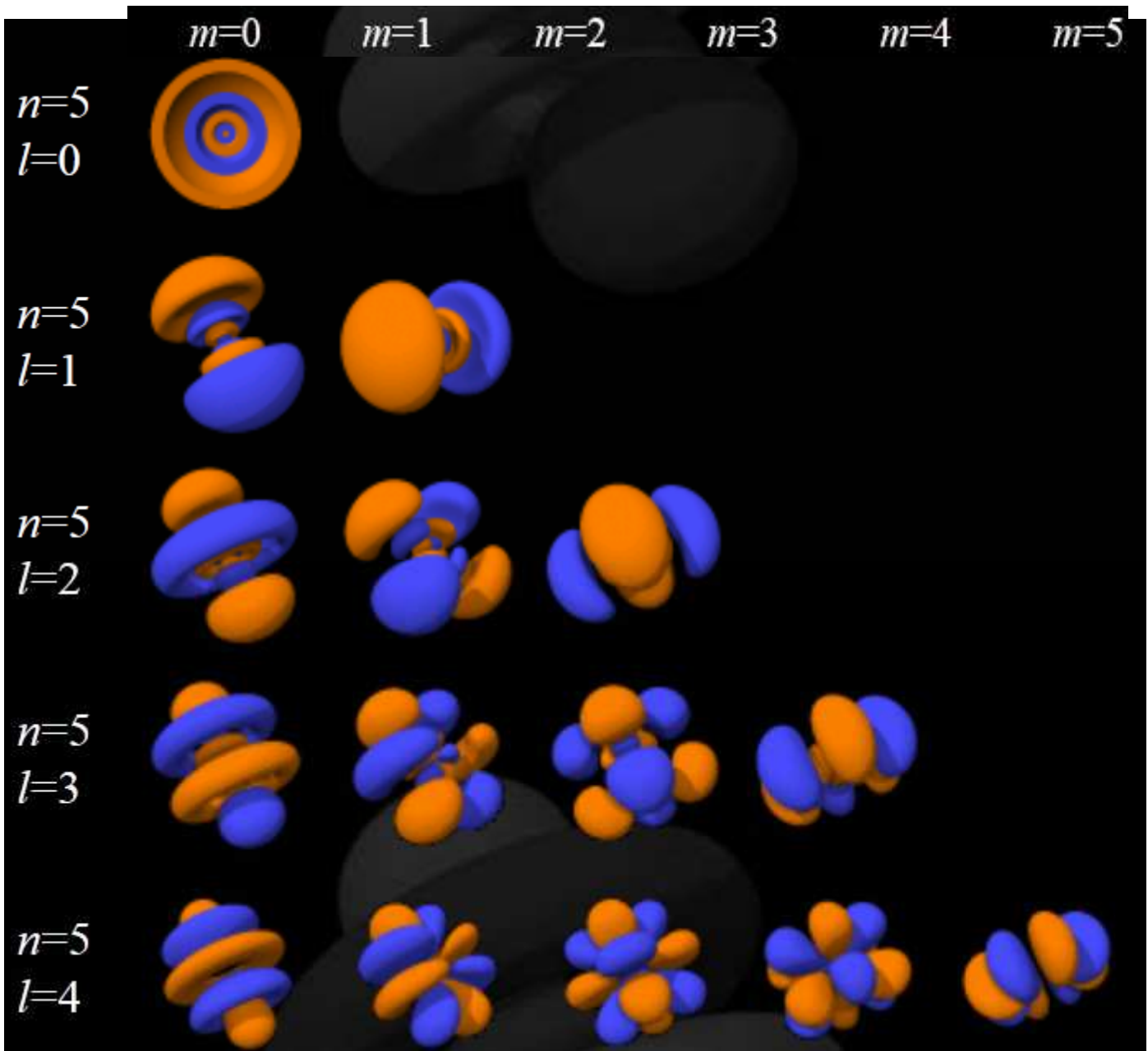
Zenbaki kuantiko magnetikoa (m_l): orbitalaren **orientazioarekin** erlazionatuta.

$m_l = +l, \dots, -1$ (horien arteko balio osoak)

Spinaren zenbaki kuantikoa (m_s): Ondoko bi balioak baino ezin ditu izan:

$m_s = +1/2, -1/2$





Orbitalen irudiak eta 3D softwarea

ATOMO POLIEKTRONIKOAK: Konfigurazio elektronikoak

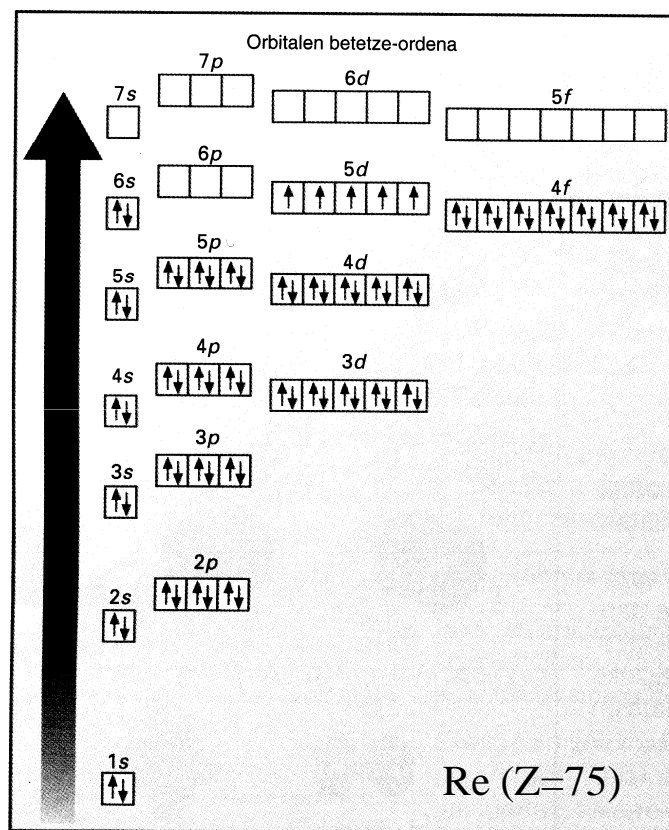
Hortaz, Energi maila batetan, elektroi kopuru maximoena $2n^2$ izango da (ad. $n = 3 \Rightarrow 18$ elektroi).

Orbitalen eta elektrolen determinazioa mailen arabera									
Energi maila (n)	1	2	3	4					
Orbitalen kopuru osoa (n^2)	1	4	9	16					
Orbital-motak (s, p, d, f)	s	s p	s p d	s p d f					
Mota bakoitzeko orbital-kopurua	1	1 3	1 3 5	1 3 5 7					
Orbitalen izena	1s	2s 2p	3s 3p 3d	4s 4p 4d 4f					
Orbitaletako elektroi-kopuru maximoa	2	2 6	2 6 10	2 6 10 14					
Mailetakoe elektroi-kopuru maximoa ($2n^2$)	2	8	18	32					

Pauli-ren esklusio-printzipioa: Atomo bereko bi elektroik ezin ditzakete lau zenbaki kuantikoak berdinak izan. \Rightarrow orbital bakoitzean bi elektroi soilik ($m_s = +1/2$ eta $-1/2$; spin antiparaleloak).

Hund-en araua (anizkoitz maximoko printzipioa): Orbital endekatuetan (energia berdinekoak) e^- -ak kokatzeko aukera bat baino gehiago egotekotan, konfigurazio edo egoera egonkorrena lortzeko, parekatu gabeko e^- -en kopurua maximoa izango da guztiek m_s -ren balio bera hartuz (spin paraleloak). Adibidez, karbonoaren konfigurazioa hau da: $[\text{He}] 2S^2 2P_x^1 2P_y^1$.

Eraikuntza araua edo Aufbau printzipioa: Funtsezko konfigurazio elektronikoa lortzeko, elektroiak banan-banan orbital eskuragarrietan eta energiaren ordena hazkorrean jarri behar dira.



Orbitalak energi ordena hazkorrean:

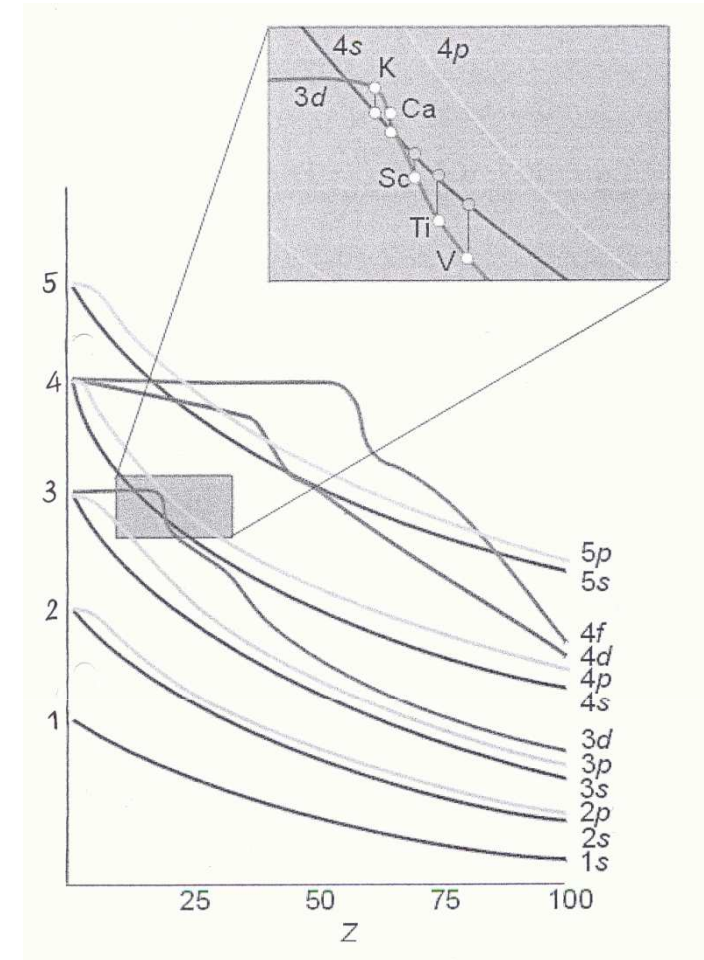
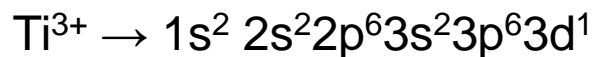
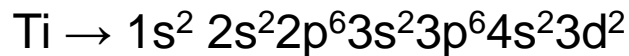
1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p ...

n \ l	0	1	2	3	4	5	6	7
1	1s							
2	2s	2p						
3	3s	3p	3d					
4	4s	4p	4d	4f				
5	5s	5p	5d	5f	5g			
6	6s	6p	6d	6f	6g	6h		
7	7s	7p	7d	7f	7g	7h	7i	
8	8s	8p	8d	8f	8g	8h	8i	8j

•**Katioi eta anioien konfigurazio elektronikoa:** katioiak eta anioiak eratzeko elektroiak kendu edo gehitu behar dira. Askotan, elektroiak galtzean edo irabaztean eratutako ioiek gas geldoen egitura lortzen dute eta honek egonkortasuna erakartzen die.

- **Salbuespenak:** hauek erdibeteta edo guztiz beteta dauden maileekin erlazionatuta egoten dira. Adibidez, Cr ($Z = 24$) eta Cu ($Z = 29$) atomoen konfigurazioak ez dira esperotakoak.

$Z < 20$ duten atomoetan, 4s orbitalaren energia 3d-arena baino txikiagoa den bitartean, $Z > 20$ duten kasuetan, ordena aldatzen da eta energia altuagoa 4s orbitalek dute. Hau dela eta, katioiak eratzean, n handiena duten orbitaletatik joaten dira elektroiak.

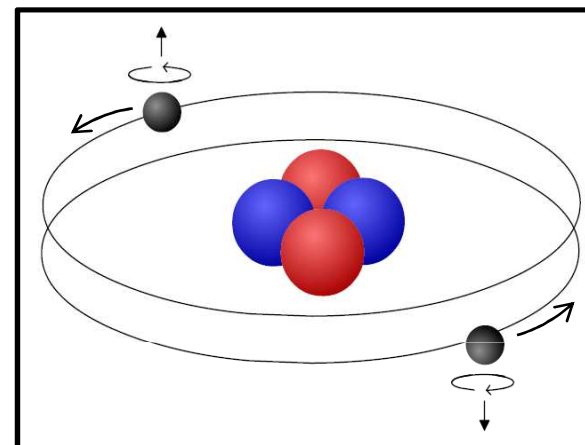


- Zergatik p orbitalen energia s orbitalena baino altuagoa da? S orbitalen dentsitatea nukleoaren inguruan kokatzen da, p orbitalak, berriz, sakabanatuago daude, hau da, s orbitalen sarkortasuna handiagoa da, p orbitalena baino. Honen ondorioz, s orbitaletan dauden elektroiek nukleoa hobeto babestuko dute eta atomoa egonkorragoa izango da.

PARAMAGNETISMOA ETA DIAMAGNETISMOA

- Indar magnetikoak kargen mugimendutik sortzen dira.
- Atomoan, elektroiek bi momentu magnetiko mota sortzen dituzte:

Dipolo magnetikoen iturriak:



- **Spin-momentua**, elektroien biraketa berarekiko ($m_s \pm 1/2$).
- **Momentu orbitala**, zenbait orbitaletako elektroiek nukleoren inguruan biratzerakoan.

- Atomo baten momentu magnetiko osoa, spin momentu eta momentu orbital guztien batura izango da.
- Hortaz, maila batean e- guztiak parekatuta badaude, momentu magnetiko guztiak elkar ezerezten dira => ez dago momentu magnetiko osorik.
- **Atomo diamagnetikoetan** elektroien guztiak parekatuta daude eta kanpo eremu magnetiko batek alboratzen ditu. **Paramagnetikoek** aldiz, parekatu gabeko elektroien iturriak dituzte eta kanpo eremu magnetiko batek erarriko lituzke.

1.3. OINARRIZKO PARTIKULAK

- XX. mendeko 30. hamarkadarako elektroia, protoia, neutroia eta neutrinoa.

	masa	karga
Elektroia	$9.109 \cdot 10^{-31}$ Kg 0.00055 mau	$-1.602 \cdot 10^{-19}$ C
Protoia	$1.6725 \cdot 10^{-27}$ Kg 1.00728 mau	$1.602 \cdot 10^{-19}$ C
Neutroia	$1.6748 \cdot 10^{-27}$ Kg 1.00866 mau	0 C

- Fisika nuklearrari esker, 50. eta 60. hamarkadetan 100 partikula elemental inguru ezagunak ziren.
- Garai haietan, Quark partikulen ereduak sortu ziren. Erelu honen arabera materia (eta hortaz, atomoak) bi partikula azpiatomiko motaz osatuta daude: *Quark eta Leptoia* (...eta *Bosoia*). Este baterako,
 - Protoia = up + up + down = +1
 - Neutroia = up + down + down = 0

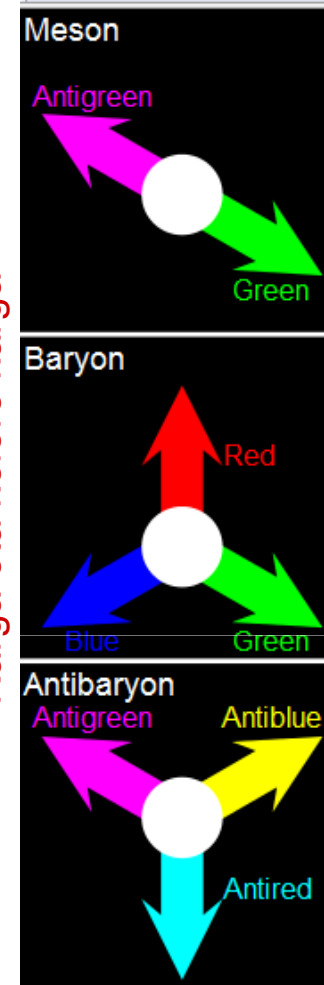
Baina hor ez da bukatzen...gaur egun: “Partikulen fisikaren eredu estandarra”

Three Generations of Matter (Fermions)

	I	II	III	
mass →	2,4 MeV	1,27 GeV	171,2 GeV	0
charge →	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	0
spin →	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
name →	u up	c charm	t top	γ photon
	4,8 MeV	104 MeV	4,2 GeV	0
	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	d down	s strange	b bottom	g gluon
	<2,2 eV	<0,17 MeV	<15,5 MeV	91,2 GeV
	0	0	0	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	ν_e electron neutrino	ν_μ muon neutrino	ν_τ tau neutrino	Z^0 weak force
	0,511 MeV	105,7 MeV	1,777 GeV	80,4 GeV
	-1	-1	-1	± 1
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	e electron	μ muon	τ Tau	W^\pm weak force

Quarks (I, II, III)
Leptons ($\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau, e, \mu, \tau$)
Bosons (Forces) (γ, g, Z^0, W^\pm)

• Hadroiak



Protoia: uud

Antiprotoia: $\bar{u}\bar{u}\bar{d}$

- Hadroiak**
- Barioia: 3Q (Adez. neutroia, protoia)
 - Mesoia: Q+AQ (Adez. kaioi)
 - Antibarioia: 3AQ (Adez. antiprotoia)

Hidrogeno (H): protoi(+) eta electroi(-)

Antihidrógeno (\bar{H}): antiprotoia(-) y positroia(+)

Otros: antideuterio, antihelio-3, antihelio-4

Antimateria (ej. positroiak, antineutrinoak...) eratzen duten iturri naturalak badira ere: desintegrazioak, izpi kosmikoak, ekaitzak...

1.4. ISOTOPOAK

Atomo neutrotan elektroi eta protoi kopurua berdina dira. Propietate kimikoak atomoen elektrojekin zuzenki erlazionatuta daude.

Isotopoak: protoi kopuru (Z) berdina baina neutroi kopuru (N) dituzte. Hortaz, propietate kimiko berdinak baina masa atomiko desberdinak.

Zenbaki atomikoa (Z): protoi kopurua (elementua zehazten du)

Zenbaki masikoa (A): neutroi + protoi kopurua (isotopoaren masarekin erlazionatuta dago)

Isotopoak izendatzeko:

Notazio isotopikoa: $\begin{matrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{Z} \end{matrix} \mathbf{X}$ $\left. \begin{array}{l} \text{X = elementuaren sinbolaria} \\ \text{Z = p (finkoa)} \\ \text{A = p + n} \end{array} \right\} \text{ loturik doaz}$

Adibideak: ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{13}_6\text{C}$, ${}^{14}_6\text{C}$, ${}^1_1\text{H}$, ${}^2_1\text{H}$, ${}^3_1\text{H}$
↑ ↑
Deuterio (D) Tritio (T)

Isotopoak izendatzeko beste modu batzuk: ${}^{14}_6\text{C} \equiv {}^{14}\text{C} \equiv \text{C-14}$