

# ESPEZIE EZ-ORGANIKOEN FORMULAZIOA ETA NOMENKLATURA

eman ta zabal zazu



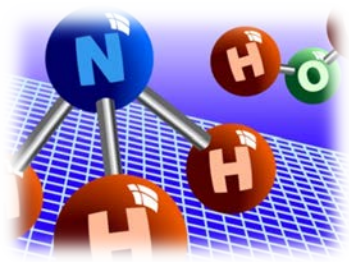
Universidad  
del País Vasco

Euskal Herriko  
Unibertsitatea

KIMIKA OROKORRA  
ETA EZ-ORGANIKOA

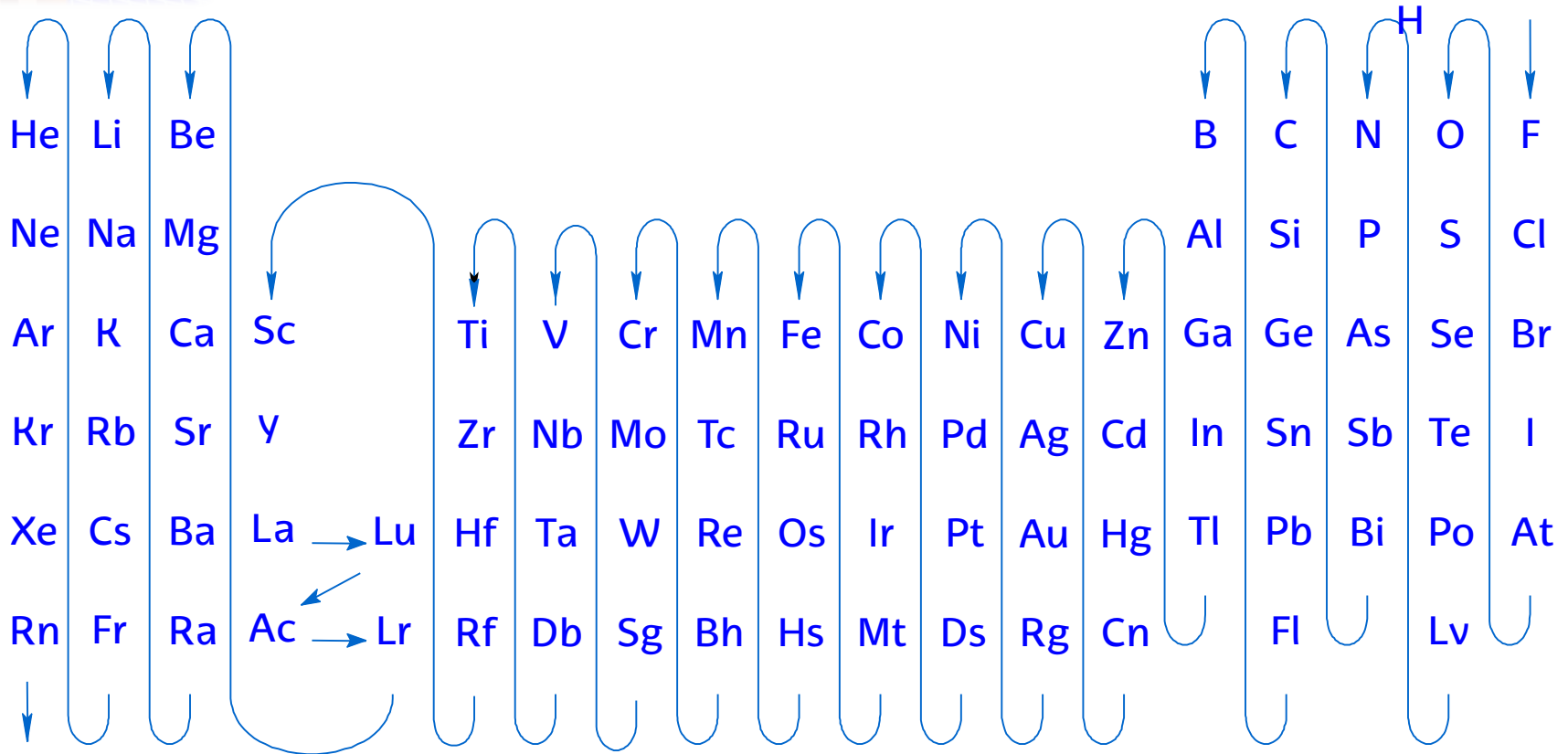






# Konposizio-nomenklatura.

## Konposatu bitarrak. Elementuen segida



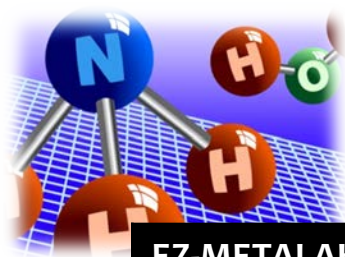
- Adibideak

- GaAs galio artseniuro

- CO<sub>2</sub> karbono dioxido

- H<sub>2</sub>O ura

- NH<sub>3</sub> amoniako

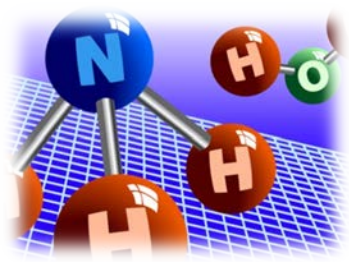


## ELEMENTUEN OXIDAZIO-ZENBAKIA

EZ-METALAK			
Elementuak	Sinboloak	OZ	
Hidrogenoa	H	-I	1
Fluorua	F	-I	
Kloroa	Cl		
Bromoa	Br	-I	I,III,V,VII
Iodoa	I		
Oxigenoa	O	-II	
Sufrea	S		
Selenioa	Se	-II	II,IV,VI
Telurioa	Te		
Nitrogenoa	N	-III	I,II,III,IV,V
Fosforoa	P	-III	I,III,V
Artsenikoa	As		
Antimonioa	Sb	-III	III,V
Boroa	B	-III	III
Bismutoa	Bi		III,V
Karbonoa	C	-IV	II,IV
Silizioa	Si		IV

METALAK		
Elementuak	Sinboloak	OZ
M. Alkalinoak	Li, Na, K, Rb, Cs, Fr	
Zilarra	Ag	I
Amonioa	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	
M. Lurralkalinoak	Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra	
Zinka	Zn	II
Kadmioa	Cd	
Kobrea	Cu	I, II
Merkurioa	Hg	
Aluminioa	Al	III
Urrea	Au	I, III
Burdina	Fe	
Kobaltoa	Co	II,III
Nikela	Ni	
Eztainua	Sn	
Beruna	Pb	
Platinoa	Pt	II,IV
Iridioa	Ir	
Kromoa	Cr	II,III,IV,V,VI
Manganesoa	Mn	II,III,IV,V,VI, VII





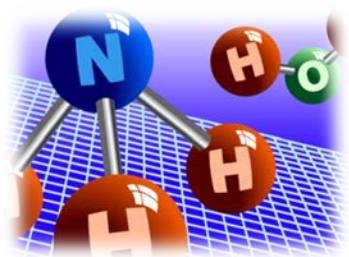
# OXIDAZIO-ZENBAKIA KARGA-ZENBAKIA

## Oxidazio-zenbakia

- Atomo batek konposatu bat eratzean beste atomo batzuekin galdu, irabazi edo erabiltzen dituen elektroiekin erlazionatzen da.
- Positiboa zein negatiboa izan daiteke eta zenbaki erromatarrez adierazten da

## Karga-zenbakia

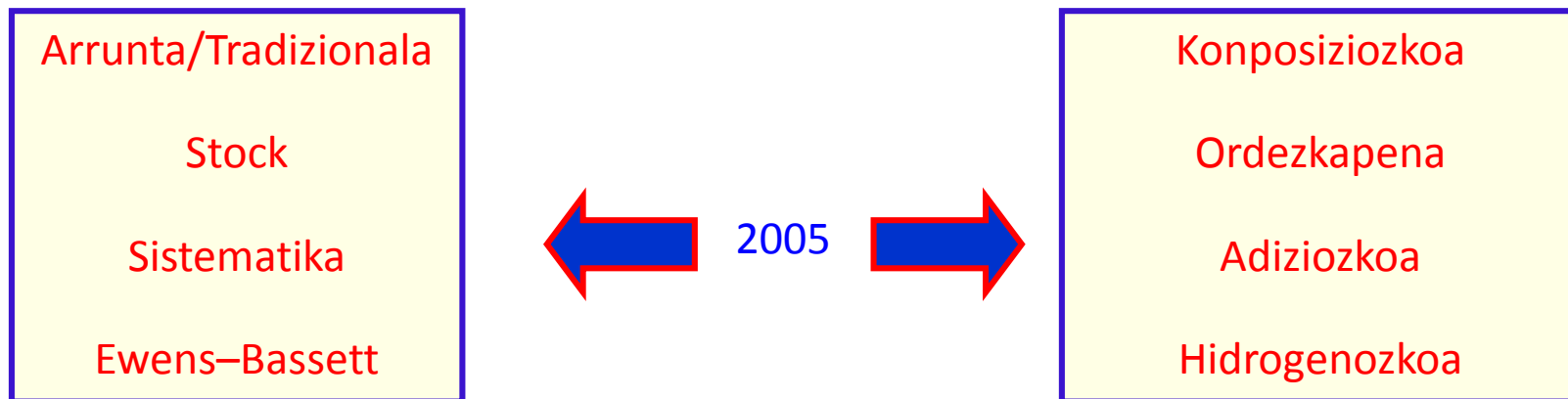
- Karga ionikoa adierazten du
- Positiboa zein negatiboa izan daiteke eta zenbaki arabiarrez adierazten da



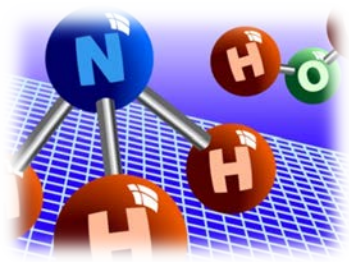
# NOMENKLATURA MOTAK

## IUPAC

*Kimika Puru eta Aplikatuko Nazioarteko Batasuna*  
*International Union of Pure and Applied Chemistry*  
*Unión Internacional de Química Pura y Aplicada*



- ✓ IUPACen Liburu Gorria
- ✓ Nomenclature of Inorganic Chemistry-IUPAC. Recommendations 2005
- ✓ Kimika Ez-organikoaren Nomenklaturarako Gida laburra



# NOMENKLATURA MOTAK

- **Arrunta edo traditzionala:**

- atzizkiak eta aurrizkiak
- zenbakirik ez

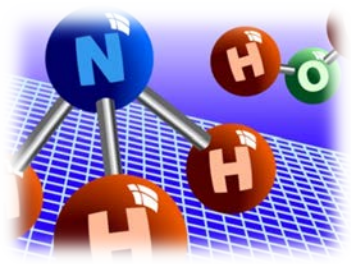
Oxidazio-zenbakia kopurua	4	3	2
	Hipo-    - oso - oso - iko Per-      - iko	Hipo-    - oso - oso - iko	- oso - iko

- **Stock:**

- Oxidazio-zenbakiak adierazteko zenbaki erromatarak

- **Sistematikoa:**

- Proporziotan eta oxidazio egoeratan oinarritua
- Aurrizki biderkatzaileak erabiltzen ditu



# NOMENKLATURA MOTAK

- **Adibidez:**

- FeO

- Oxido ferroso                      Arrunta
    - Burdina (II) oxido                Stock
    - Burdina monoxido                Sistematikoa

- Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

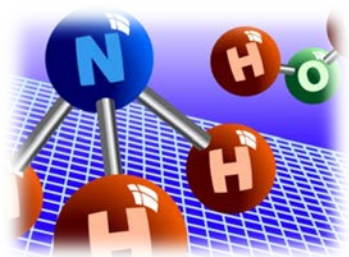
- Oxido ferriko                      Arrunta
    - Burdina (III) oxido                Stock
    - Diburdina trioxido                Sistematikoa

- **Izenean:**

- **Katioia-Anioia** (adibidez: sodio kloruro, kaltzio nitrato)

- **Formulan:**

- **Katioia-Anioia** (adibidez: NaCl, LiNO<sub>3</sub>)

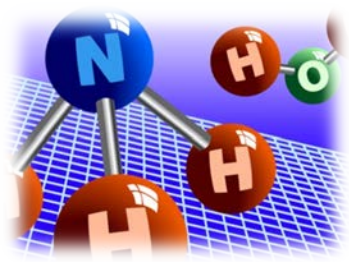


# AURRIZKI BIDERKATZAILEAK

- Bi motakoak dira
  - Espezie sinplekoak
  - Espezie korapilatsukoak
    - (aurrizki grekoak eta kakoen artean)

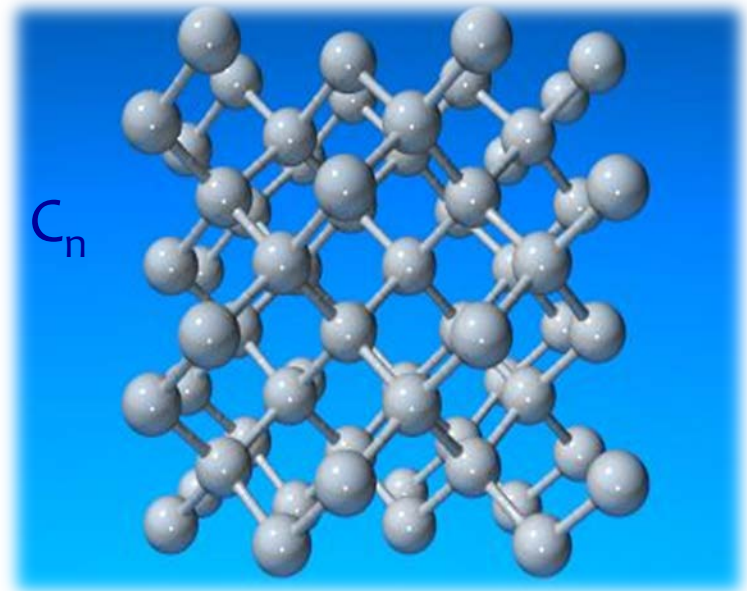
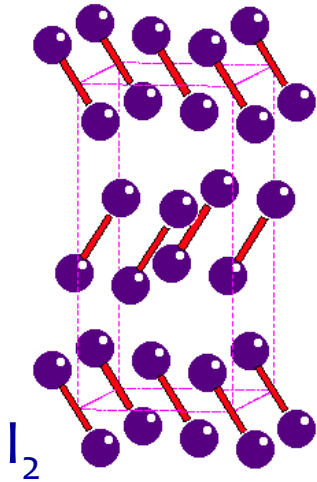
Kop.	sinple	korapilatsua	Kop.	sinple	korapilatsua
2	di	bis	8	octa	octakis
3	tri	tris	9	nona	nonakis
4	tetra	tetrakis	10	deca	decakis
5	penta	pentakis	11	undeca	undecakis
6	hexa	hexakis	12	dodeca	dodecakis
7	hepta	heptakis	20	icosa	icosakis

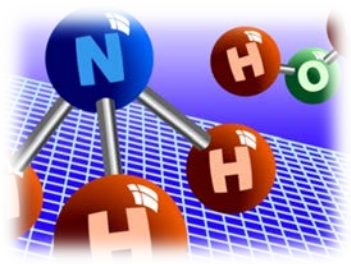




# SUSTANTZIA SINPLEAK

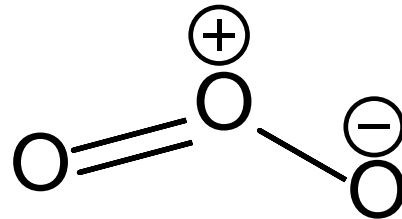
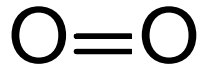
- Elementu mota bakarrez osatutako sustantziak: gaseosoak ( $O_2$ ) eta solidoak ( $I_2, S_8$ )
- Egoera fisikoaren arabera:
  - Gaseosak:  $O_2$
  - Likidoak:  $Br_2$
  - Solido molekularrak ( $S_8, I_2$ ) edo kobalente (diamante,  $C_n$ )



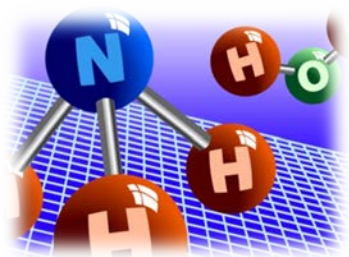


# SUSTANTZIA SINPLEAK

- Forma **alotropiko** desberdinak daude
- ALOTROPIA: hainbat elementu kimikoren propietate bat da, zeinaren bidez egitura molekular desberdinetan egon daitezkeen.  
Adibidea:  $O_2$  eta  $O_3$

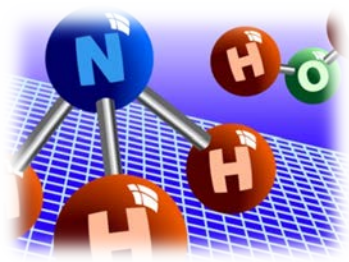


- Forma kristalina desberdinak dituztenak *Polimorfoak* dira



# SUSTANTZIA SINPLEAK

SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	ARRUNTA
(mono)oxigeno	O	oxigeno atomiko
dioxigeno	O <sub>2</sub>	oxigeno (molekularra)
trioxigeno	O <sub>3</sub>	ozono
tetrafosforo	P <sub>4</sub>	fosforo zuria
diiodo	I <sub>2</sub>	iodo
ziklo-oktasufre	S <sub>8</sub>	sufre
ziklo-oktadekasufre	S <sub>18</sub>	sufre



# HIDROGENOAREN KONPOSATU BITARRAK

Bi elementuren elkarketak

- Hidrogenoa beste elementu batzuekin konbinatzen da.
- Bi motakoak:

**1. Hidrogenoa + metalak → hidruro metalikoak (1-15 taldeetako metalak)**

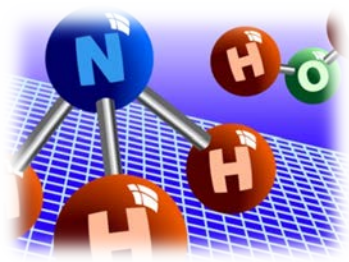


- » Hidruro ferroso                      Arrunta
- » Burdin (II) hidruro                  Stock
- » Burdin dihidruro                    Sistematika

**2. Hidrogenoa + ez-metalak → hidruro ez-metalikoak edo hidrogeno-haluroak**

**2.a. hidrazidoak (azidoak, H<sup>+</sup>):** O, S, Se, Te, F, Cl, Br, I elementuekin  
(16-17 taldeetakoak)

**2.b. hidruro arruntak,** H-a baino elektropositiboagoak diren elementuekin (13-15 taldeetakoak): B, C, Si, Ge, N, P, As

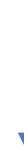


# HIDROGENOAREN KONPOSATU BITARRAK

- Hidrogenoa + ez-metalak → hidrogeno-haluroak

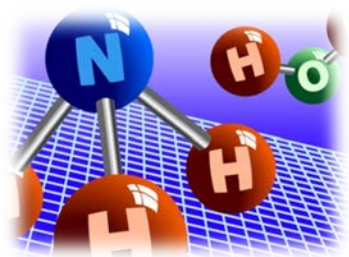
2.a. hidrazidoak: O, S, Se, Te, F, Cl, Br, I elementuekin

GAS EGOERA	FORMULA	DISOLUZIOA
Hidrogeno kloruro	HCl	azido klorhidriko
dihidrogeno sulfuro	H <sub>2</sub> S	azido sulfhidriko



Izen hauek ez daude onartuta IUPACen azken arauen arabera baina bere erabilera oso hedatua dago eta jarraitzen dira erabiltzen



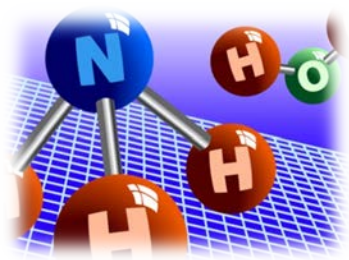


# HIDROGENOAREN KONPOSATU BITARRAK

- **HIDRUROAK:** Hidrogenoa + ez-metalak (H baino elektropositiboagoak)

2.b. hidruro arruntak: B, C, Si, Ge, N, P, As

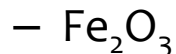
NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	FORMULA	IZEN ARRUNTAK
nitrogeno trihidruoa	$\text{NH}_3$	Amoniako
fosforo trihidruoa	$\text{PH}_3$	Fosfanoa
arseniko trihidruoa	$\text{AsH}_3$	Artsanoa
antimonio trihidruoa	$\text{SbH}_3$	Estibano
karbono tetrahidruoa	$\text{CH}_4$	Metanoa
germanio tetrahidruoa	$\text{GeH}_4$	Germanoa
silizio tetrahidruoa	$\text{SiH}_4$	Silanoa
boro trihidruoa	$\text{BH}_3$	Boranoa



# OXIGENOAREN KONPOSATU BITARRAK

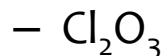
- **OXIDOAK:** oxigenoaren konbinazio bitarrak  
Oxigenoa beste elementu guztiekin elkartzen da

- Oxigenoa + metalak → **Oxido basikoak**



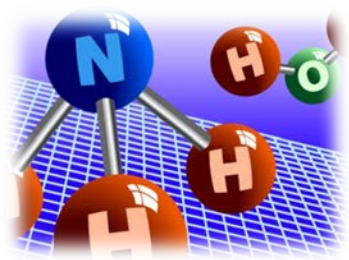
- » Oxido ferriko                      Arrunta
- » Burdina (III) oxido              Stock
- » Diburdina trioxido              Sistematikoa

- Oxigenoa + ez-metalak → **Oxido azidoak**



- » Anhidrido kloroso                Arrunta
- » Kloro (III) oxido                Stock
- » Dikloro trioxido                Sistematikoa

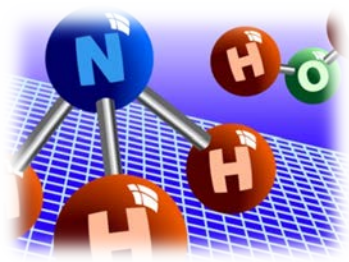
IUPACen arabera “anhidrido “ hitza baztertuta dago, baina oso lagungarria da oxido basikoak eta azidoak bereizteko



# OXIGENOAREN KONPOSATU BITARRAK

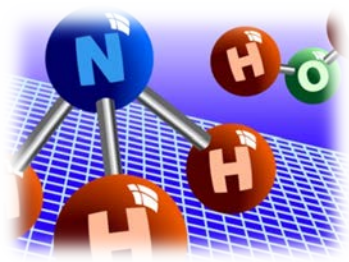
- BEREZIA  $\rightarrow$  N + O

Oxidazio-zenbakia	Formula	Izena
I	$N_2O$	Anhidrido hiponitroso Oxido nitroso
II	NO	Oxido nitriko Nitrogeno(II) oxido <b>Nitrogeno monoxido</b>
III	$N_2O_3$	Anhidrido nitroso Nitrogeno(III) oxido <b>Dinitrogeno trioxido</b>
IV	$NO_2$	Nitrogeno(IV) oxido <b>Nitrogeno dioxido</b>
IV	$N_2O_4$	<b>Dinitrogeno tetraoxido</b>
V	$N_2O_5$	Anhidrido nitriko Nitrogeno(V) oxido <b>Dinitrogeno pentaoxido</b>



# OXIGENOAREN KONPOSATU BITARRAK

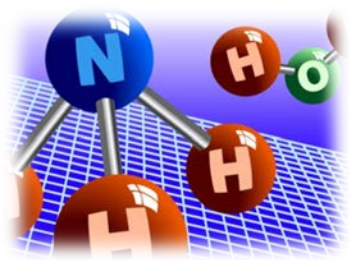
- **PEROXIDOAK:** peroxidoetan oxigenoak **-1** ekin jarduten du ( $O_2^{2-}$ ) (1., 2., 11. eta 12. taldekoak)
  - $H_2O_2$ 
    - » Hidrogeno peroxido Arrunta
    - » Dihidrogeno dioxido Sistematikoa
- **SUPEROXIDOAK:** metalak **+1** eta **+2** oxidazio-egoeratan egoten dira batik bat ( $O_2^-$ ) (1, 2 eta 12. taldekoak)
  - $NaO_2$  sodio superoxido Sistematikoa
  - $Ca(O_2)_2 / CaO_4$  : kaltzio superoxido Sistematikoa
- **OZONIDOAK:** Metalak **+1** oxidazio-egoeran ( $O_3^-$ ) ( $K^+$ ,  $Rb^+$ ,  $Cs^+$  eta  $NH_4^+$ )
  - $NaO_3$  sodio ozonido Sistematika



# KONPOSATU HIRUTARRAK

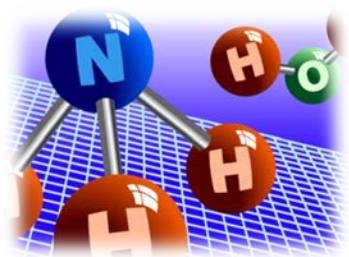
- **HIDROXIDOAK:**  $\text{OH}^- + \text{M}^{n+} \rightarrow \text{M}(\text{OH})_n$ 
    - $\text{Fe}(\text{OH})_3$ 
      - » Hidroxido ferriko Arrunta
      - » Burdina(III) hidroxido                      Stock
      - » Burdina trihidroxido                      Sistematikoa/konposiziozkoa
  
  - **OXIDO eta HIDROXIDO ANIZKOITZAK:** metal bat baino gehiago dituzte
    - $\text{MgTiO}_3$ 
      - » Oxido magnesiko titanikoa                      Arrunta
      - » Magnesio(II) eta titanio (IV) oxido bikoitza                      Stock
      - » Magnesio(II) titanio(IV) oxido
      - » Magnesio(2+) titanio(4+) oxido
      - » magnesio titanio trioxido
  
  - $\text{Na}_2\text{Ba}(\text{OH})_4$ 
    - » Hidroxido bariko sodiko                      Arrunta
    - » Bario(II) eta sodio(I) hidroxido                      Stock (alfabetikoki)
    - » Disodio bario tetrahidroxido
- } konposizio-nomenklatura
- konposizio-nomenklatura(elementuen segidaren arabera)





# KONPOSATU HIRUTARRAK

- **OXOAZIDOAK:** hidrogenoa + ez-metala + oxigenoa
  - Oxigenoa duten azido ez-organikoak dira
  - Formula orokorra:  $H_aX_bO_c$
- Sailkapena
  1. MONOHIDRATATUAK EDO SINPLEAK
  2. POLIHIDRATATUAK
  3. ISOPOLIAZIDOAK EDO POLIOXOAZIDOAK
  4. PEROXOAZIDOAK
  5. TIOAZIDOAK
  6. HALOGENOAZIDOAK



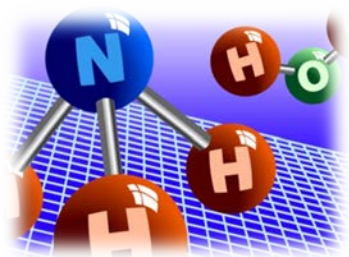
# KONPOSATU HIRUTARRAK

## 1. OXOAZIDO MONOHIDRATATUAK EDO SINPLEAK:



Izena: azido + anhidridoaren izena

NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	NOMENKLATURA ARRUNTA
azido monoxoklorikoa(I) hidrogeno monoxokloratoa (I)	HClO	azido hipoklorosoa
azido dioxoklorikoa(III) hidrogeno dioxokloratoa (III)	HClO <sub>2</sub>	azido klorosoa
azido trioxoklorikoa(V) hidrogeno trioxokloratoa (V)	HClO <sub>3</sub>	azido klorikoa
azido tetraoxoklorikoa(VII) Hidrogeno tetraoxokloratoa (VII)	HClO <sub>4</sub>	azido perklorikoa



# KONPOSATU HIRUTARRAK

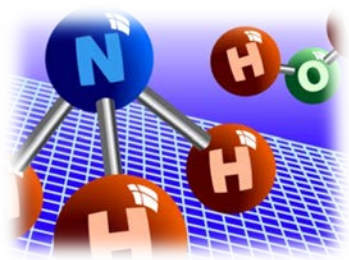
## 2. OXOAZIDO POLIHIDRATATUAK

anhidridoa +  $n\text{H}_2\text{O} \rightarrow$  oxoazidoa

Izena: azido + aurrizkia + anhidridoaren izena

oxidazio-egoera bakoitia: B(+3), Al(+3), P(+3, +5), As(+3, +5), Sb(+3, +5)

NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	NOMENKLATURA ARRUNTA
Azido trioxofosforikoa (V) Hidrogeno trioxofosfatoa (V)	$\text{P}_2\text{O}_5 + 1\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HPO}_3$	Azido <b>meta</b> fosforikoa
Azido heptaoxodifosforikoa (V) Hidrogeno heptaoxodifosfatoa (V)	$\text{P}_2\text{O}_5 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$	Azido <b>piro</b> fosforikoa Azido difosforikoa
Azido tetraoxofosforikoa (V) Hidrogeno tetraoxofosfatoa (V)	$\text{P}_2\text{O}_5 + 3\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{PO}_4$	Azido ( <b>orto</b> )fosforikoa



# KONPOSATU HIRUTARRAK

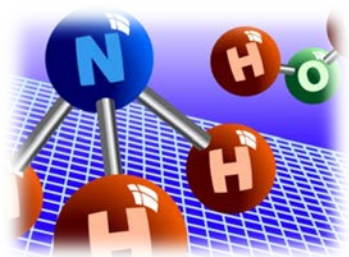
## 2. OXOAZIDO POLIHIDRATATUAK

anhidridoak +  $n\text{H}_2\text{O} \rightarrow$  oxoazidoak (sinplifikatua)

oxidazio-egoera bikoitia denean: Si (+4), Ge(+2,+4), Sn(+2, +4)

NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	NOMENKLATURA ARRUNTA
<p>Azido trioxosilizikoa (IV)                      Hidrogeno trioxosilikatoa (IV)</p>	$\text{SiO}_2 + 1\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SiO}_3$	<p>Azido <b>metasilizikoa</b></p>
<p>Azido tetraoxosilizikoa (IV)                      Hidrogeno tetraoxosilikatoa (IV)</p>	$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_4\text{SiO}_4$	<p>Azido (<b>orto</b>)silizikoa</p>

Kasu honetan “*piro*” deribatua “*di*” deribatua da



# KONPOSATU HIRUTARRAK

## 3. ISOPOLIAZIDOAK (diazidoak, tetrazidoak)

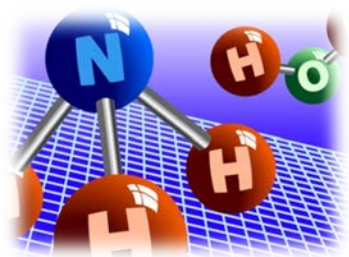
$n$  anhidridoa + 1  $H_2O \rightarrow$  oxoazidoa

$n$  azido -  $(n-1) H_2O \rightarrow$  oxoazidoa

**Piroazido guztiak** isopoliazidoak dira, **diazidoak** baitira

NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	NOMENKLATURA ARRUNTA
<p>Azido heptaoxodikromiko (VI) Hidrogeno heptaxodikromato (VI)</p>	$2CrO_3 + 1H_2O \rightarrow H_2Cr_2O_7$	<p>Azido dikromikoa Azido pirokromikoa</p>
<p>Azido heptaoxotetraboriko (III) Hidrogeno heptaxotetraborato (III)</p>	$2B_2O_3 + 1H_2O \rightarrow H_2B_4O_7$	<p>Azido tetraborikoa</p>





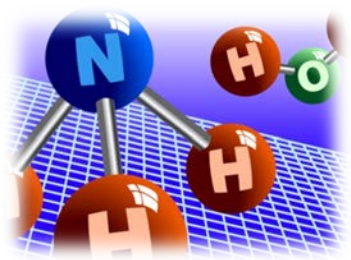
# KONPOSATU HIRUTARRAK

4. **PEROXOAZIDOAK:**  $O^{2-}$  anioiaren ordez,  $O_2^{2-}$  taldea dute

NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	NOMENKLATURA ARRUNTA
Az. dioxomonoper(oxo)nitriko (V) Hidr.dioxomonoper(oxo)nitrato (V)	$HNO_4$	azido pernitriko azido peroxonitriko

5. **TIOAZIDOAK:** zenbait  $O^{2-}$  anioiaren ordez,  $S^{2-}$  taldea dute

NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	NOMENKLATURA ARRUNTA
Azido dioxomonotiokarboniko (IV) Hidrogeno dioxomonotiokarbonato (IV)	$H_2CO_2S$	azido tiokarboniko
Azido monoxoditiokarboniko (IV) Hidrogenomonoxoditiokarbonato (IV)	$H_2COS_2$	azido ditiokarboniko
Azido tritiokarboniko (IV) Hidrogeno tritiokarbonato (IV)	$H_2CS_3$	azido tritiokarboniko edo sulfokarboniko



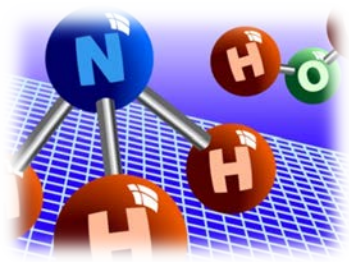
# KONPOSATU HIRUTARRAK

**6. HALOGENOAZIDOAK:**  $O^{2-}$  anioia ordez, bi  $X^-$  talde dauzkate

( $X=F, Cl, Br, I$ )

Orokorrean guztiak ordezkatzen dira.

NOMENKLATURA SISTEMATIKOA	ESPEZIEA	NOMENKLATURA ARRUNTA
<p>Azido hexafluorosiliziko(IV) Hidrogeno hexafluorosilikato(IV)</p>	<p><math>H_2SiF_6</math></p>	<p>Azido fluorometasiliziko</p>
<p>Azido oktakloroklorosulfuriko(VI) Hidrogeno oktaklorosultato(VI)</p>	<p><math>H_2SCl_8</math></p>	<p>Azido klorosulfuriko</p>



# KONPOSATU HIRUTARRAK

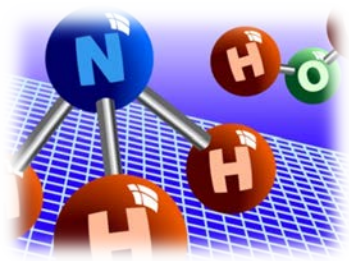
Metal anfoteroa: KROMO

$\text{CrO} \Rightarrow$  Metalikoa/ basikoa

$\text{Cr}_2\text{O}_3 \Rightarrow$  Anfoteroa

$\text{CrO}_3 \Rightarrow$  Ez - metalikoa/ azidoa

+2	$\text{CrO}$	Oxido kromoso
+3	$\text{Cr}_2\text{O}_3$ <u>Azidoak</u>	Oxido kromikoa edo anhidrido kromoso
	$\text{Cr}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{HCrO}_2$	Azido metakromoso
	$\text{Cr}_2\text{O}_3 + 2 \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_4\text{CrO}_3$	Azido (orto)kromoso
+6	$\text{Cr}_2\text{O}_6 \rightarrow \text{CrO}_3$ <u>Azidoak</u>	Anhidrido kromiko
	$\text{CrO}_3 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_2\text{CrO}_4$	Azido Kromiko
	$2 \text{CrO}_3 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$	Azido Dikromiko
	$2\text{H}_2\text{CrO}_4 - \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$	Azido Dikromiko



# KONPOSATU HIRUTARRAK

Metal anfoteroa: MANGANESOA

$\text{MnO}, \text{Mn}_2\text{O}_3 \Rightarrow$  Metalikoa/basikoa

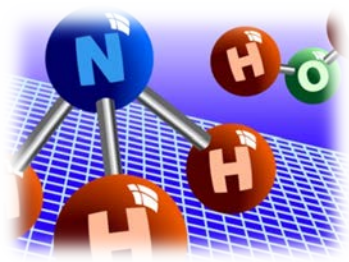
$\text{MnO}_2 \Rightarrow$  Anfoteroa

$\text{MnO}_3, \text{Mn}_2\text{O}_7 \Rightarrow$  Ez-metalikoa/ azidoa

2	$\text{MnO}$	Oxido Manganoso
+3	$\text{Mn}_2\text{O}_3$	Oxido Manganikoa
+4	$\text{MnO}_2$ <u>Azidoa</u>	Manganeso dioxido o anhidrido manganoso
	$\text{MnO}_2 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_2\text{MnO}_3$	Azido manganoso

+6	$\text{Mn}_2\text{O}_6 \rightarrow \text{MnO}_3$ <u>Azidoa</u>	Anhidridoa manganiko
	$\text{MnO}_3 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_2\text{MnO}_4$	Azido manganiko

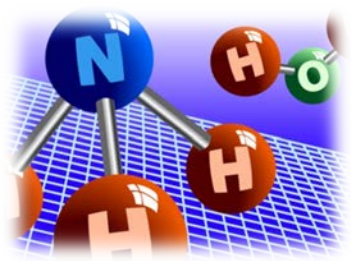
+7	$\text{Mn}_2\text{O}_7$ <u>Azidoa</u>	Anhidrido permanganiko
	$\text{Mn}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_2\text{Mn}_2\text{O}_8 \Rightarrow \text{HMnO}_4$	Azido permanganiko



# Adizio-nomenklatura. Oxoazidoak eta oxoanioiak

Oxoazidoetan hainbat taldetako elementuek duten oxidazio-zenbakia

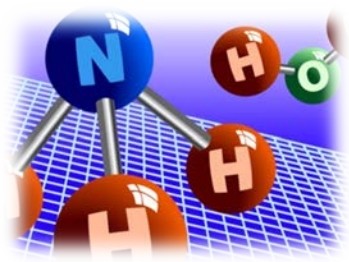
Taldea	Elementua	Oxidazio-zenbakia
6	Cr	VI
7	Mn	VI, VII
13	B	III
14	C, Si	II, IV
15	N	I, II, V
	P, As, Sb	III, V
16	S, Se, Te	IV, VI
17	Cl, Br, I	I, III, V, VII



# Adizio-nomenklatura. Oxoazidoak eta oxoanioiak

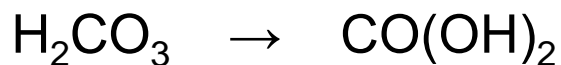
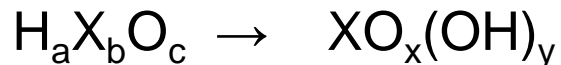
## Oxoazidoak

- Formula orokorra:  $H_aX_bO_c$
- Nomenklatura honen arabera konposatuak atomo zentral batez eta estekatzailez osatutako entitatetzat jotzen dira
- Erabiltzen da bai azido ez-organikoetan bai koordinazio-konposatuetan
- Lewisen egitura ezagutzea beharrezkoa da:  $X_aH_bO_c(OH)_d$ 
  - X atomo zentral
  - H hidruro
  - O oxido
  - OH hidroxido
- Hidroxido ( $OH^-$ ) eta oxido ( $O^{2-}$ ) estekatzaileak idatziko dira, ordena alfabetikoan, X elementuaren izenaren aurrean. Estekatzaileen proportzioak zehazteko, aurrizki biderkatzaileak erabiliko dira.



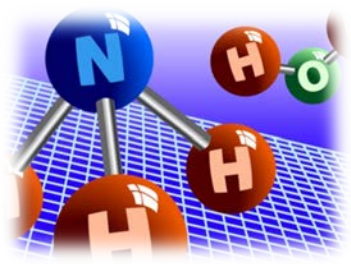
# Adizio-nomenklatura. Oxoazidoak eta oxoanioiak

Adibideak



Dihidroxidooxidokarbono

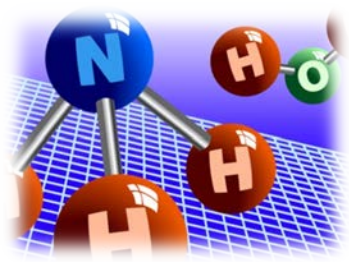
Formula	Egitura-formula	Izen arrunta	Adizio-izena
$H_3PO_4$	$P(O)(OH)_3$	azido (orto)fosforiko	Trihidroxidooxidofosforo
$H_2PO_4^-$	$P(O)_2(OH)_2$	dihidrogenofosfato	Dihidroxidodioxidofosfato(1-)



# Adizio-nomenklatura. Oxoazidoak eta oxoanioiak

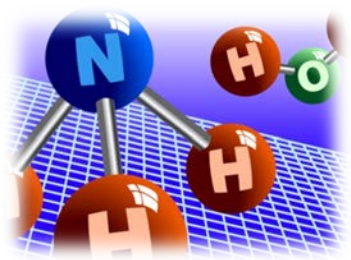
Formula	Egitura-formula	Izen arrunta	Adizio-izena
$\text{H}_3\text{PO}_4$			
$\text{H}_2\text{PO}_4^-$			
$\text{H}_2\text{SO}_4$			
$\text{HSO}_4^-$			
$\text{SO}_4^{2-}$			
$\text{HSO}_3^-$			
$\text{SO}_3^{2-}$			
$\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$			
$\text{HCO}_3^-$			





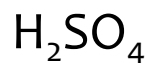
# Adizio-nomenklatura. Oxoazidoak eta oxoanioiak

Formula	Egitura-formula	Izen arrunta	Adizio-izena
$\text{H}_3\text{PO}_4$	$\text{P}(\text{O})(\text{OH})_3$	azido (orto)fosforiko	Trihidroxidooxidofosforo
$\text{H}_2\text{PO}_4^-$	$\text{P}(\text{O})_2(\text{OH})_2$	dihidrogenofosfato	Dihidroxidodioxidofosfato(1-)
$\text{H}_2\text{SO}_4$	$\text{SO}_2(\text{OH})_2$	azido sulfuriko	dihidroxidodioxidosufre
$\text{HSO}_4^-$	$[\text{SO}_3(\text{OH})]^-$	hidrogenosulfato	hidroxidotrioxidosulfato(1-)
$\text{SO}_4^{2-}$		sulfato	tetraoxidosulfato(2-)
$\text{HSO}_3^-$	$[\text{SO}_2(\text{OH})]^-$	hidrogenosulfito	hidroxidodioxidosulfato(1-)
$\text{SO}_3^{2-}$		sulfito	trioxidosulfato(2-)
$\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$	$(\text{OH})\text{O}_2\text{SOSO}_2(\text{OH})$	Azido disulfuriko	$\mu$ -oxido-bis(hidroxidodioxidosufre)
$\text{HCO}_3^-$	$[\text{CO}_2(\text{OH})]^-$	hidrogenokarbonato bikarbonato	hidroxidodioxidokarbonato(1-)



# Hidrogeno-nomenklatura. Oxoazidoak eta oxoanioiak

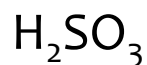
- “hidrogeno “ hitza izenaren gainerako parteari lotuta eta hutsunik gabe aurrean agerzen da
  - Hidrogeno eta oxigeno atomoen kopurua aurrizki biderkatzailez adierazten da
  - Espeziearen alde anionikoaren izena barne-hartze ikurren artean doa.
  - Karga-zenbakiaz egituraren karga netoa adierazten da, espezie neutroetan izan ezik



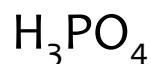
dihidrogeno(tetraoxidosulfato)



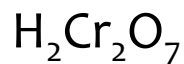
hidrogeno(tetraoxidosulfato)(1-)



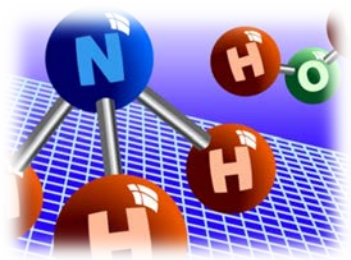
dihidrogeno(trioxidosulfato)



trihidrogeno(tetraoxidofosfato)

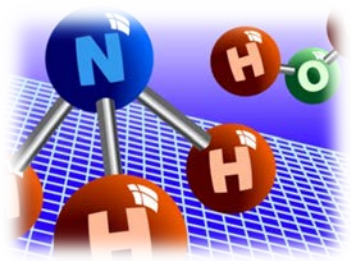


dihidrogeno(heptaoxidokromato)



# IOIAK - Katioiak

- Karga duten atomoak edo atomo-taldeak dira
  - Katioiak: karga positiboa ( $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{NH}_4^+$ )
  - Anioiak: karga negatiboa ( $\text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ )
- **Katioi monoatomikoak:**
  - $\text{Fe}^{3+}$   
burdina(3+) katioi
  
  - $\text{H}^+$   
hidrogeno(1+), hidroi
- **Katioi poliatomikoak:**
  - Homopoliatomikoak
  - oxigenodun konposatu bitarretatik eratorriak
  - Hidruro bitarretatik eratorriak



# IOIAK - Katioiak

- **Katioi homopoliatomikoak:** Ewens–Bassett-en sistema erabiltzen da

$\text{Hg}_2^{2+}$	dimerkurio (2+) ioi
$\text{O}_2^+$	dioxigeno (1+) ioi
$\text{H}_3^+$	trihidrogeno(1+) ioi
$\text{S}_4^{2+}$	tetrasufre(2+) ioi

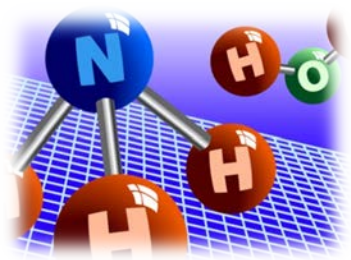
- **Oxigenodun konposatu bitarretatik eratorriak**

$\text{UO}_2^+$	dioxouranio (V) katioia
$\text{SO}_2^{2+}$	dioxosufre (VI) katioia

- **Hidruro bitarretatik eratorriak**

hidruroa +  $\text{H}^+ \rightarrow$  -onio

$\text{H}_3\text{O}^+$	Oxonio
$\text{NH}_4^+$	Amonio
$\text{PH}_4^+$	Fosfanio



# IOIAK - Anioiak

- **Anioi monoatomikoak**

- Hidrazidoa –  $H^+$  → -uro

- $Cl^-$  kloruro / kloruro(1-)

- $S^{2-}$  sulfuro/ sulfuro(2-)

- **Anioi poliatomikoak**

- Oxoazidoetatik eratorriak: azidoaren  $H^+$  -a galtzen dute

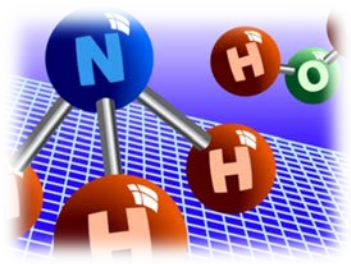
- Bereziak

- $MnO_4^-$  permanganato / tetraoxidomanganato(1-)

- $MnO_4^{2-}$  manganato/ tetraoxidomanganato(2-)

- $CrO_4^{2-}$  kromato / tetraoxidokromato(2-)

- $Cr_2O_7^{2-}$  dikromato /  $\mu$ -oxido-bis(trioxidokromato)(2-)



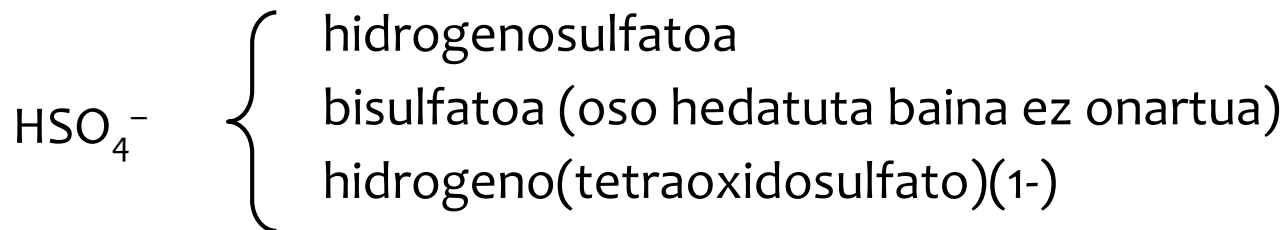
# IOIAK - Anioiak

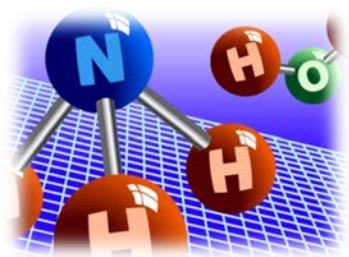
- Oxoazidoetatik eratorriak: azidoaren  $H^+$  -a galtzen dute  
Bere izenak jatorrizko azidotik datoz

## Azido anioia

-iko	-ato	$H_2SO_4 \rightarrow SO_4^{2-}$	sulfato anioia / tetraoxidosulfato(2-)
-oso	-ito	$H_2SO_3 \rightarrow SO_3^{2-}$	sulfitoa anioia / trioxosulfato(IV)

- Anioi azidoak: azidoak ez du galtzen hidrogeno azido guztiak

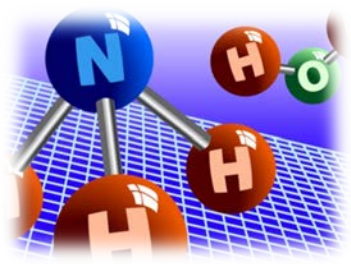




# IOIAK - Anioiak

- Anioi bereziak:
  - Hidruoetatik eratorriak

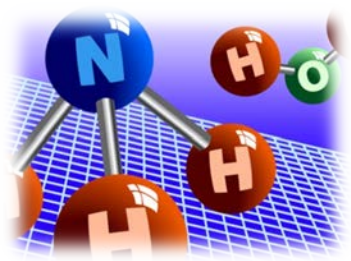
$O^{2-}$	Oxido	$NH_2^-$	Amiduro	$C_2^{2-}$	Acetiluro
$O_2^{2-}$	Peroxido	$NH^2-$	Imiduro	$CN^-$	Zianuro
$O_2^-$	Superoxido	$N^{3-}$	Nitruro	$OCN^-$	Zianato
$O_3^-$	Ozonido	$N_3^-$	Azida	$SCN^-$	Tiozianato
$OH^-$	Hidroxido	$HO_2^-$	Hidrogenoperoxido	$S_n^{2-}$	Polisulfuro
$N_2H_3^-$	Hidraziduro	$NHOH^-$	Hidroxilamiduro		



# GATZAK

- **GATZAK:** katioia eta anioien arteko konbinaketa
- Mota desberdinak:
  1. NEUTROAK
  2. AZIDOAK
  3. BASIKOAK
  4. ANIZKOITZAK





# GATZAK

## 1. GATZ NEUTROAK: anioi neutroekin

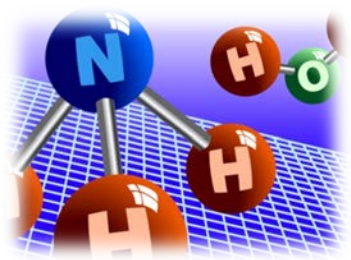
### 1.1. BITARRAK

$\text{FeCl}_2$             burdina(II) kloruro  
                      burdina(2+) kloruro  
                      burdina dikloruro

### 1.2. HIRUTARRAK

$\text{FeCO}_3$             burdina(II) karbonato  
                      burdina(2+) trioxidokarbonato(2-)  
                      burdina trioxidokarbonato

$\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2$         kobalto(II) fosfato  
                      kobalto(II) tetraoxidofosfato(III)  
                      kobalto(2+) tetraoxidofosfato(3-)  
                      trikobalto bis(tetraoxidofosfato)



# GATZAK

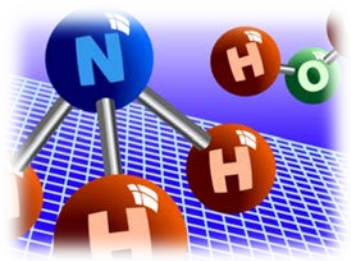
## 1. GATZ NEUTROAK: anioi neutroekin

### 1.2. HIRUTARRAK

$\text{KClO}_4$  potasio perklorato  
potasio tetraoxidoklorato(1-)

$\text{Zn}_3(\text{PO}_4)_2$  zink fostato  
trizink bis(tetraoxidofostato)  
zink tetraoxidofostato(3-)

$\text{Co}_2(\text{SO}_4)_3$  kobalto(III) sulfato  
kobalto(3+) tetraoxidosulfato(2-)  
dikobalto tris( tetraoxidosulfato)



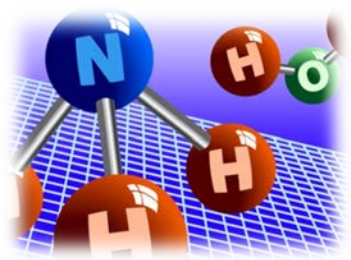
# GATZAK

## 2. GATZ AZIDOAK: anioi azidoekin

$\text{NaHCO}_3$  sodio bikarbonatoa/sodio hidrogenokarbonato  
sodio hidrogenotrioxokarbonato(IV)  
sodio hidrogenotrioxokarbonato(1-)

$\text{Cr}(\text{HSO}_3)_3$  kromo(III) sulfito azidoa  
kromo(III) hidrogenotrioxosulfatoa (IV)

$\text{Al}_2(\text{HPO}_4)_3$  aluminio hidrogenofosfato  
aluminio hidrogenotrioxokarbonato(II)  
aluminio hidrogenotrioxokarbonato(2-)  
dialuminio tris(hidrogenotetraoxidofosfato)



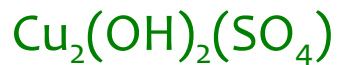
# GATZAK

## 3. GATZ BASIKOAK: OH<sup>-</sup> taldeak dauzkate



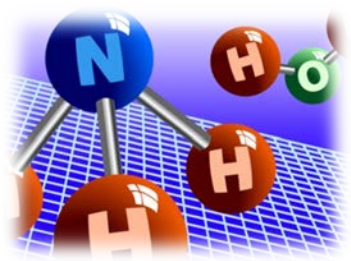
**kobre(II) hidroxido kloruro**

kobre monohidroxikloruro



**kobre(II) dihidroxido tetraoxosulfatoa(VI)**

dikobre dihidroxi[tetraoxosulfatoa(VI)]



# GATZAK

4. **GATZ ANIZKOITZAK:** anioi edo katioi bat baino gehiago dituzte.

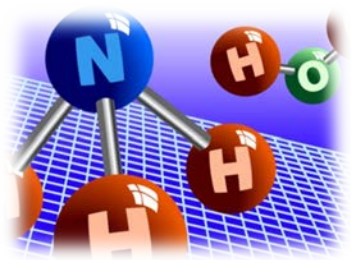
Alfabetikoki izendatzen dira. Formulan elementuen segidari jarraituz kokatzen dira

$(\text{NH}_4)_2\text{BrCl}$       diamonio bromuro kloruro

$\text{CaKBr}(\text{SO}_4)$       kaltzio eta potasio bromuro sulfatoa

$\text{KMgF}_3$             magnesio eta potasio trifluoruro

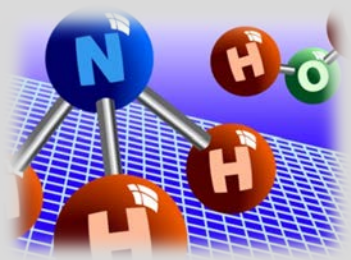
$\text{NaMgCl}_3$           magnesio eta sodio trikloruro



# GATZAK

Formulazio buruzko web-horriak

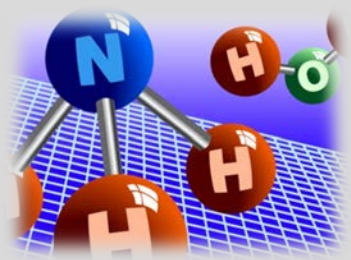
- <http://www.eis.uva.es/~qgintro/nomen/nomen.html>
- [http://www.alonsoformula.com/inorganica/formulas\\_01.htm](http://www.alonsoformula.com/inorganica/formulas_01.htm)
- [http://www.alonsoformula.com/organica/exercicio\\_1.htm](http://www.alonsoformula.com/organica/exercicio_1.htm)
- <http://www.100ciaquimica.net/fororg/ejer.htm>
  
- eGelan duzue test-modukoa praktikatzeko proba bat



# IUPACen arauak 2005

IUPAC: Kimika puru eta aplikatutako nazioarteko batasunaren ingelesez akronimoa

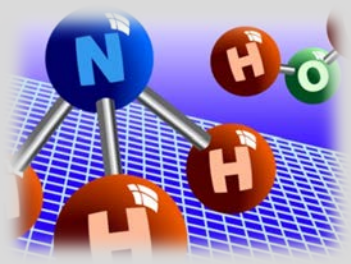
- Konposizio-nomenklatura (estekiometrikoa)
- Ordezkapen-nomenklatura
- Adizio-nomenklatura



# Konposizio-nomenklatura

- Ioi, molekula edo konposatuaren konposizioari buruzko informazioa ematen du
- Aurreko nomenklatura sistematikoaren antza du
- Osagaien proportzioa adierazten du: nola?
  - **Aurrizkiak** erabiltzen ditu
  - Ioien **karga-zenbakiak**: izenaren ostean, parentesi artean , zenbaki **arabiarrez** eta hutsunerik utzi gabe, jarraian baita kargaren ikurra ere adieraziz
  - Ioien **oxidazio-zenbakia**: zenbaki **erromatarrez** eta bakarrik negatiboa bada zenbakiaren aurrean kargaren zeinuaren ikurra
- Oso erabilia da, H duen konposatuetarako baita O dutenean ere.
  - Hidruroak , oxidoak eta hidroxidoak





# Konposizio-nomenklatura.

## Konposatu bitarrak. Elementuen segida

- Estekiometrikoki izendatzen dira:
  - **Elementuen segida** erabiltzen da elementuen lehentasun-ordena bat ezartzeko.
  - Formulan

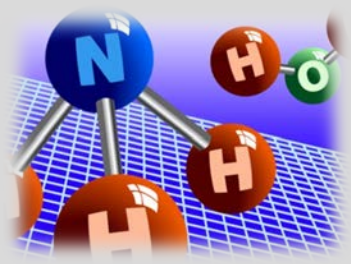
$AB$

A: elektropositiboa dena

B: elektronegatiboa dena

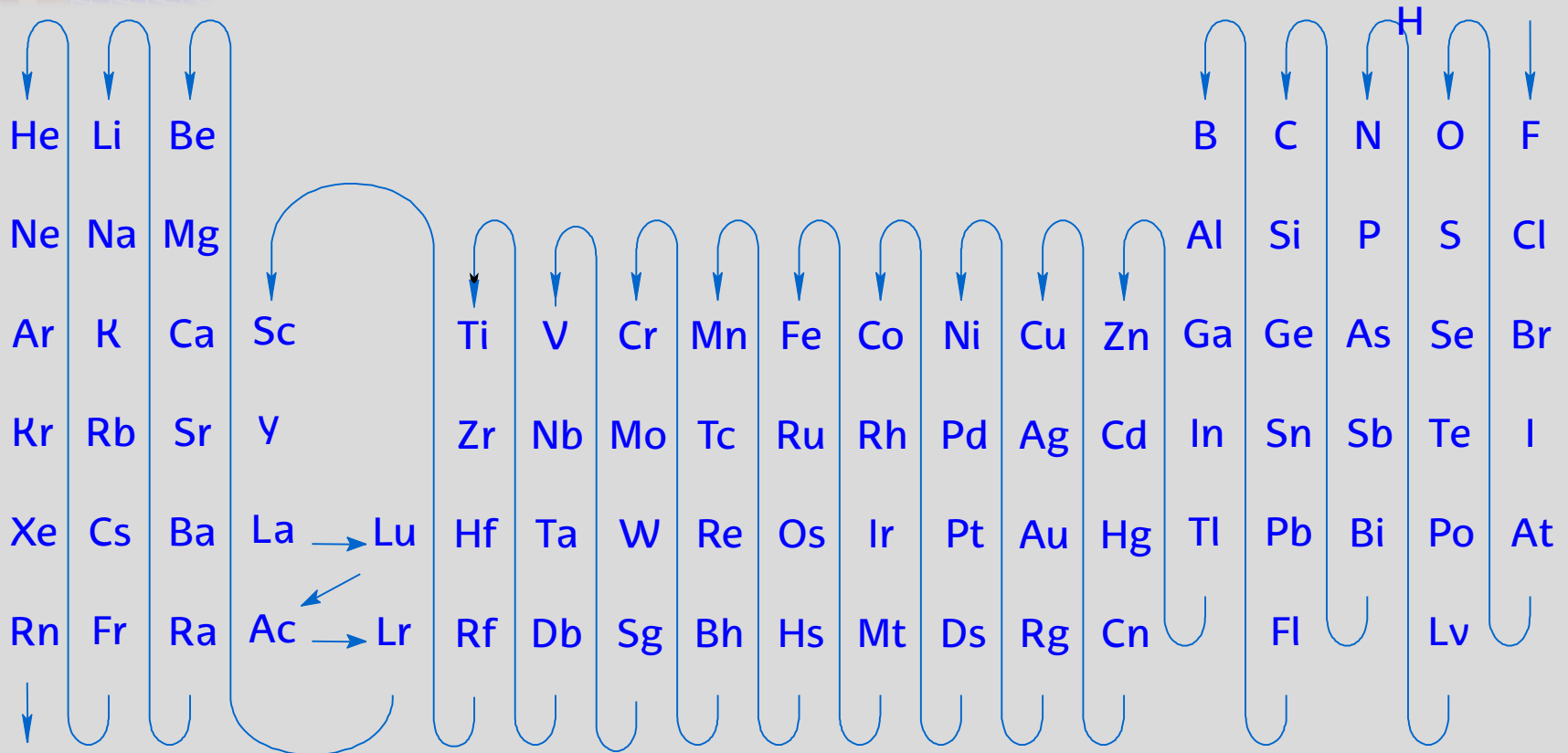
- Izenean  
Elementuaren segidaren gezia jarraituz lehenengo agertzen den elementua *anioi* izendatuko dugu eta “uro” atzikia esleituko zaio. Beraz idatziko da elektropositiboaren izenaren atzean, bien artean husune bat utziz





# Konposizio-nomenklatura.

## Konposatu bitarrak. Elementuen segida



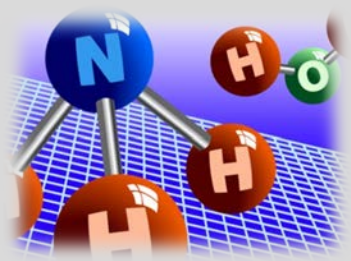
- Adibideak

- GaAs galio artseniuro

- CO<sub>2</sub> karbono dioxido

- H<sub>2</sub>O ura

- NH<sub>3</sub> amoniako



# Konposizio-nomenklatura

- **Sustantzia homoatomikoak**

- O monoxigeno

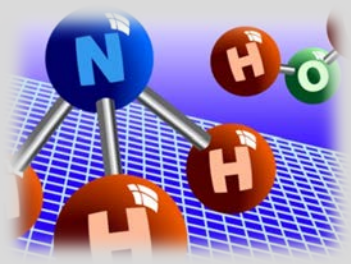
- O<sub>2</sub> dioxigeno

- O<sub>3</sub> trioxigeno

- **Hidruro metalikoak**

- FeH<sub>2</sub> burdina dihidruro, burdina(2+) hidruro, burdina(II) hidruro

- CuH<sub>2</sub> kobre dihidruro, kobre (2+) hidruro, kobre(II) hidruro



# Konposizio-nomenklatura

- **Hidruro ez- metalikoak**

$\text{BH}_3$  boro trihidruro

$\text{SiH}_4$  silizio tetrahidruro

$\text{NH}_3$  nitrogeno trihidruro

$\text{N}_2\text{H}_4$  dinitrogeno tetrahidruro

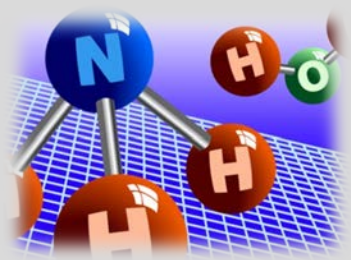
$\text{PH}_3$  fosforo trihidruro

$\text{H}_2\text{O}$  dihidrogeno oxido

$\text{H}_2\text{S}$  dihidrogeno sulfuro

$\text{HCl}$  hidrogeno kloruro

$\text{HBr}$  hidrogeno bromuro



# Konposizio-nomenklatura

- **Oxido metalikoak**

$\text{Fe}_2\text{O}_3$  diburdina trioxido, burdin (3+) oxido, burdina(III) oxido

$\text{Cu}_2\text{O}$  dikobre monóxido, kobre(2+) oxido, kobre(II) oxido

- **Oxido ez-metalikoak**

$\text{NO}$  nitrogeno monoxido, nitrogeno(II) oxido

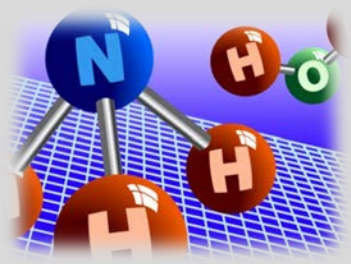
$\text{N}_2\text{O}_3$  dinitrogeno trioxido, nitrogeno(III) oxido

$\text{SO}_3$  sufre trioxido, sufre(VI) oxido

$\text{OCl}_2$  oxigeno dikloruro

$\text{O}_7\text{Cl}_2$  heptaoxido dikloruro

} Haluro bezala



# Konposizio-nomenklatura

- **Peroxidoak**

$\text{H}_2\text{O}_2$  dihidrogeno dioxido, hidrogeno peroxido

$\text{Li}_2\text{O}_2$  dilitio dioxido, litio peroxido, dilitio dioxido(2-)

$\text{HgO}_2$  merkurio dioxido, merkurio(2+) dioxido, merkurio(II) peroxido

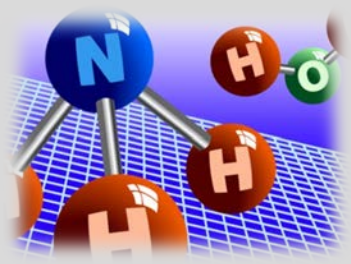
- **Superoxidoak**

$\text{NaO}_2$  sodio dioxido, sodio dioxido(1-), sodio superoxido

$\text{BaO}_4$  bario bis(dioxido), bario dioxido(1-), bario superoxido

- **Ozonidoak**

$\text{KO}_3$  potasio trioxido, potasio trioxido(1-), potasio ozonido



# Konposizio-nomenklatura

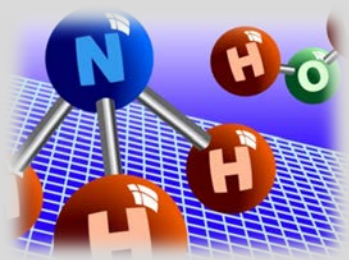
- **Hidroxidoak**

KOH potasio hidroxido

Ba(OH)<sub>2</sub> bario hidroxido, bario dihidroxido

Co(OH)<sub>3</sub> kobalto trihidroxido, kobalto(3+) hidroxido, kobalto(III) hidroxido





# Ordezkapen-nomenklatura

- Kimika organikoan askotan erabiltzen da
- Ez-organikoan ia bakarrik hidruroentzat eta beraien deribatuak

BH <sub>3</sub>	borano	CH <sub>4</sub>	metano	NH <sub>3</sub>	azano	H <sub>2</sub> O	oxidano	HF	fluorano
AlH <sub>3</sub>	alumano	SiH <sub>4</sub>	silano	PH <sub>3</sub>	fosfano	H <sub>2</sub> S	sulfano	HCl	klorano
GaH <sub>3</sub>	galano	GeH <sub>4</sub>	germano	AsH <sub>3</sub>	artsano	H <sub>2</sub> Se	selano	HBr	bromano
InH <sub>3</sub>	indigano	SnH <sub>4</sub>	estannano	SbH <sub>3</sub>	estibano	H <sub>2</sub> Te	telano	HI	iodano
TlH <sub>3</sub>	talano	SPb <sub>4</sub>	plumbano	BiH <sub>3</sub>	bismutano	H <sub>2</sub> Po	polano	HAt	astatano

- Hidruroen deribatuak
  - HOOH            dioxidano    hidrogeno peroxido (izen onartua)
  - H<sub>2</sub>NNH<sub>2</sub>        diazano        hidrazina (izen onartua)

# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

eman ta zabal zazu

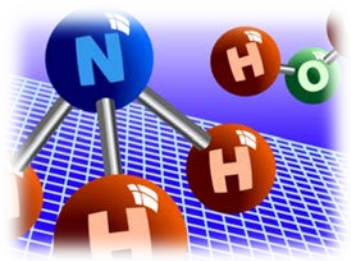


Universidad  
del País Vasco

Euskal Herriko  
Unibertsitatea

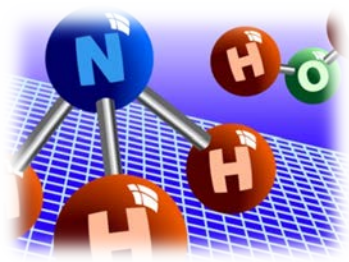
KIMIKA OROKORRA  
ETA EZORGANIKOA





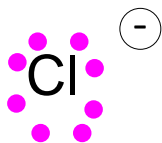
# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

- Koordinazio - konposatuak  $[ML_xL'_y]^n$  espezie kimikoak dira non:
  - M atomo zentrala da
    - Atomo bakarra: mononuklearrak
    - Atomo bat baino gehiago: polinuklearrak
  - L eta L' ligandoak edo estekatzaileak dira
  - n negatiboa, positiboa zein zero izan daiteke
- *loi zentral* batez eta horri loturiko *estekatzaileez* osaturik daude
- Atomo zentralak eta hari lotutako estekatzaileek **koordinazio-esfera** osatzen dute

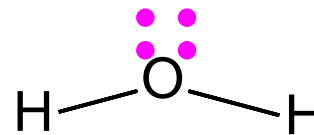


# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

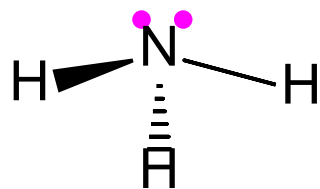
- Estelatzailen ezaugarriak:
  - Emateko libre dauden bikote-bakartiak dauzkate
  - Hauek erabiltzen dira atomo metalikoari dentsitate elektronikoa emateko
  - Honela koordinazio-konplexuak eratzen dira
  - Atomo emaleak: elektro-bikote dituztenak dira.



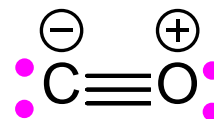
kloro ligandoa



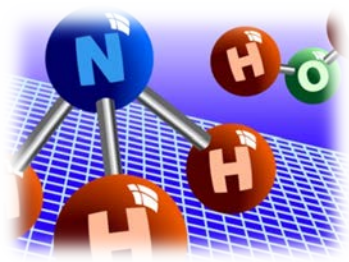
aqua ligandoa



ammino ligandoa

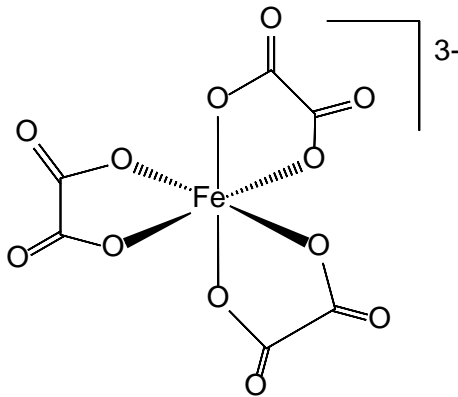


karbonil ligandoa

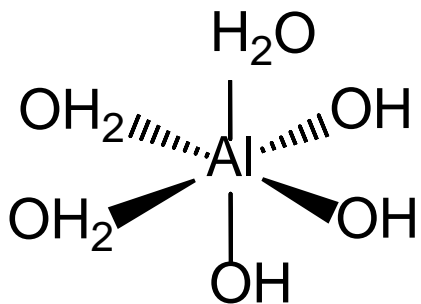


# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

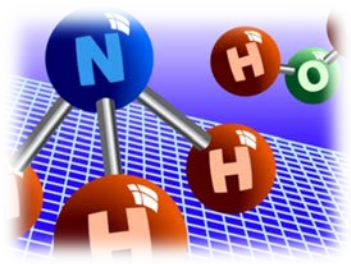
- **KOORDINAZIO-ZENBAKIA:** atomo zentralari lotzen zaizkion atomo lotzaileen kopurua, baita **balentzia sekundarioa** ere deritzona. Kasu askotan, atomo lotzaileak eta estekatzaileak bat daude, baina ez beti



Koordinazio-zenbakia: 6  
 Atomo lotzaileak: 6  
 Estekatzaile kopurua: 3

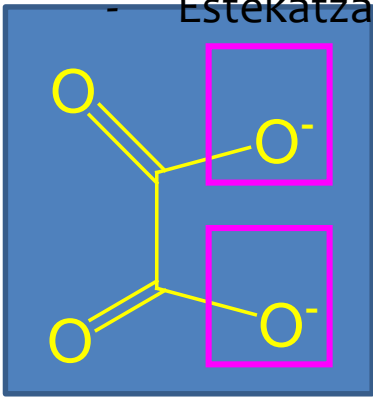


Koordinazio-zenbakia: 6  
 Atomo lotzaileak: 6  
 Estekatzaile kopurua: 6

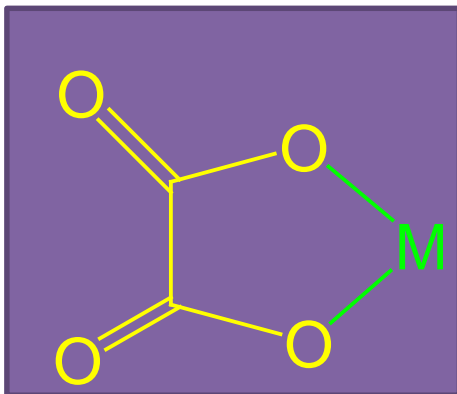


# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

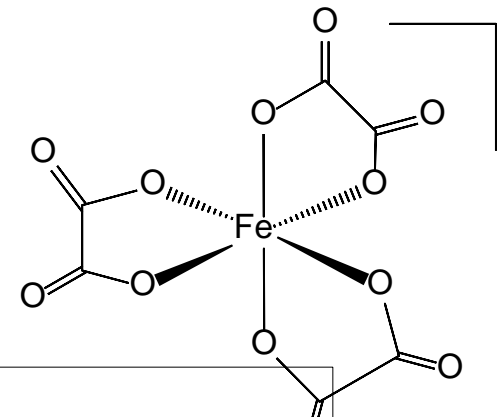
- Estekatzaileen sailkapena
  - Estekatzaile monohorzduna: atomo emaile bakarra
  - Estekatzaile polihorzduna: atomo emaile bat baino gehiago
  - Estekatzaile anbihorzduna: bi atomo emaile erabil daiteke ( $\text{NCS}^-$ )



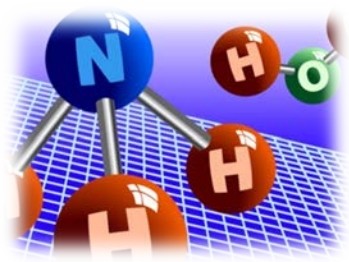
oxalato: ligando dihorzduna



kelatoa



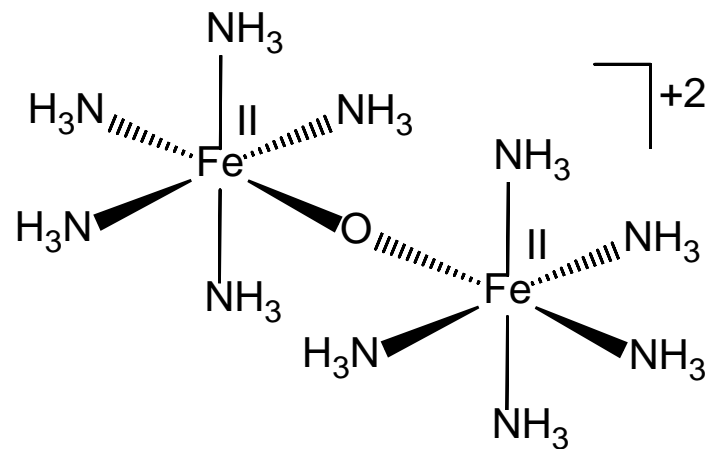
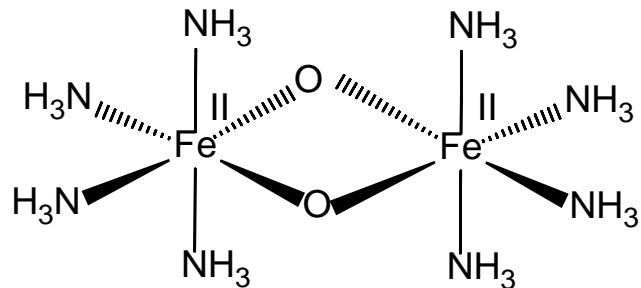
“chele”-tik jatorria du, grekoano matxarda esanahia duen hitza



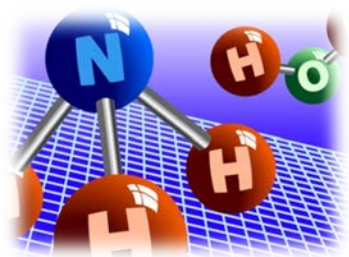
# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

Konplexuen sailkapena:

- Kargaren arabera: anionikoak, kationikoak eta neutroak
- Atomo metalikoen kopuruaren arabera
  - Mononuklearrak
  - Polinuklearrak
    - Estekatzaile zubien bidez
    - M-M lotura zuzenak izanik







# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

- Estekatzaile arruntenak

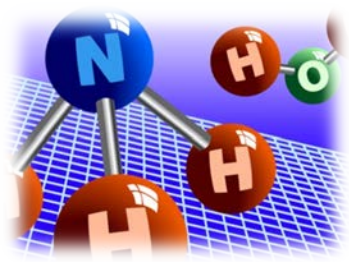
## Estekatzaile anionikoak( o-z amaituta)

F <sup>-</sup>	fluoro	O <sup>2-</sup>	oxo	N <sup>3-</sup>	nitruro	CN <sup>-</sup>	ziano
Cl <sup>-</sup>	kloro/kloruro	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	peroxo	N <sub>3</sub> <sup>-</sup>	azido	NC <sup>-</sup>	isoziano
Br <sup>-</sup>	bromo	OH <sup>-</sup>	hidroxo/hidroxido	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	nitro	OCN <sup>-</sup>	zianato
I <sup>-</sup>	iodo	SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	sulfito	ONO <sup>-</sup>	nitrito	NCO <sup>-</sup>	isozianato
ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	klorato	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	sulfato	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	nitrato	SCN <sup>-</sup>	tiozianato
		S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	tiosulfato			NCS <sup>-</sup>	isotiozianato
CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	karbonato	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	azetato	C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	oxalato		

## Estekatzaile neutroak

H <sub>2</sub> O	aqua	NH <sub>3</sub>	ammino	CO	karbonil
CS	tiokarbonilo	NO	nitrosil		



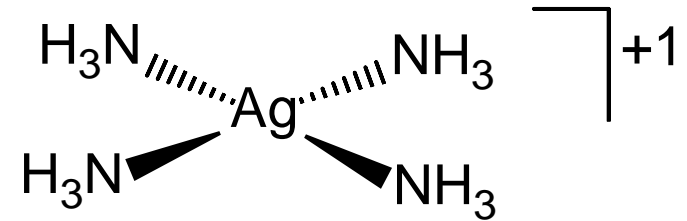


# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

## Adibide batzuk

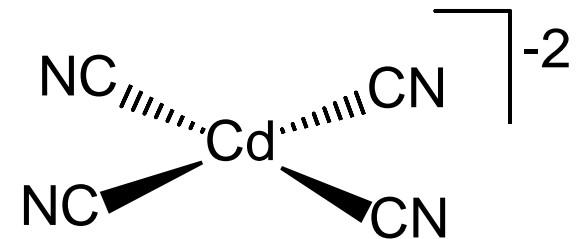
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}$  koordinazio-konposatua

$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_4]^+$  katioi konplexua den

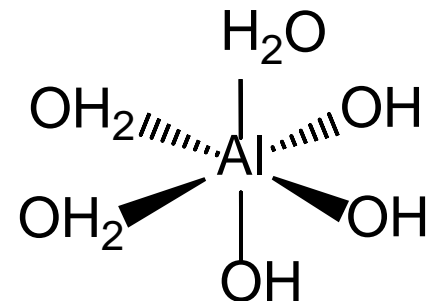


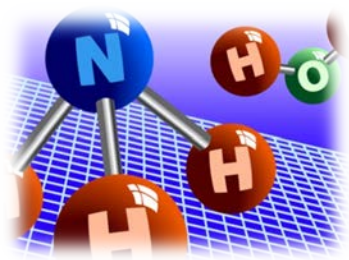
$\text{Na}_2[\text{Cd}(\text{CN})_4]$  koordinazio-konposatua

$[\text{Cd}(\text{CN})_4]^{2-}$  anioi konplexua den



$[\text{Al}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})_3]$  koordinazio-konposatua neutroa





# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

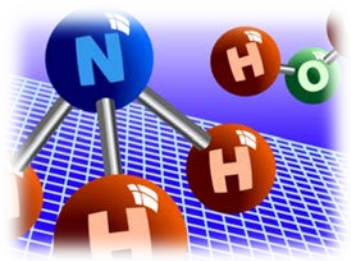
## KONPLEXU MONONUKLEARRAK

### FORMULA KIMIKOA



Ez ahaztu  
kortxeteak

- Metala lehenengoa idatzi behar da
- Jarraian estekatzaileak alfabeto-ordenan kokatzen dira.
- Bi estekatzaileen ikurrak letra berdinez hasten badira, kokatzeko hurrengoa kontuan hartu behar da:
  - . Ikurra letra bakarrekoa baldin bada bi letrakoarena baino lehenago kokatu behar da.
  - . Ikurrak bi letra izanez gero alfabeto-ordenari jarraituz kokatu behar da
- Adibideak:
  - .  $Cl^-$  estekatzailea CO delakoa baino lehen doa
  - .  $CN^-$  estekatzailea CO estekatzailea baino lehen delakoa baino lehen doa

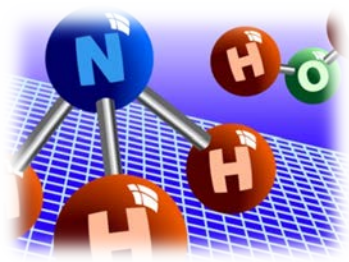


# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

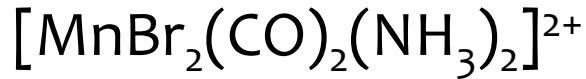
## KONPLEXU MONONUKLEARRAK

### IZENA

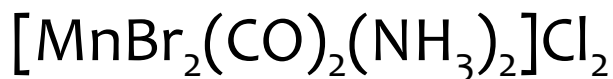
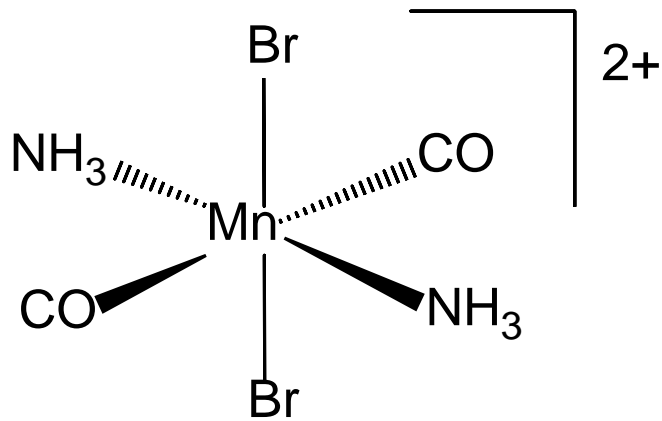
- Lehenengo katioia eta gero anioia (konposatu guztietan bezala)
- Katioia edo anioia konplexua izatekotan:  
Lehenengo estekatzailak alfabeto-ordenan eta aurrizkiak(di, tri,..) erabiliz
- Jarraian metalak aipatzen dira:
  - Konplexu negatiboetan: metala -ATO atzizkia
  - Konplexu positiboetan eta neutroetan: ez dago atzizkirik
  - Oxidazio-zenbaki aldakorra badu adierazi behar da zenbaki erromatarrez hutsunerik gabe eta izenari jarraituz
- Elementuaren latindar erroa erabiltzen da (ferrato, argentato, aurato, kuprato, estannato, plumbato)



# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK



diamminodibromodikarbonilmanganeso(IV) ioia



diamminodibromodikarbonilmanganeso(IV) kloruroa

Aurrizki grekoak:

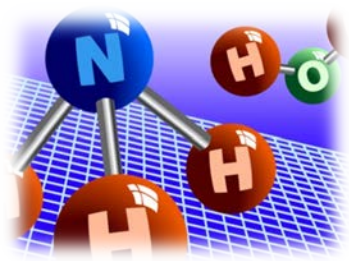
Bis, Tris, Tetrakis.. NOIZ?

- Ligandoez berez aurrizkiren bat izanez gero
- konplexuak direnean
- Parentesi artean idazten direnean

Adibidez:

bis(etilendiammino)

bis(oxalato)

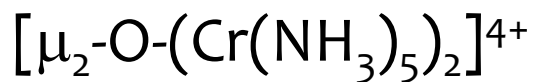


# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

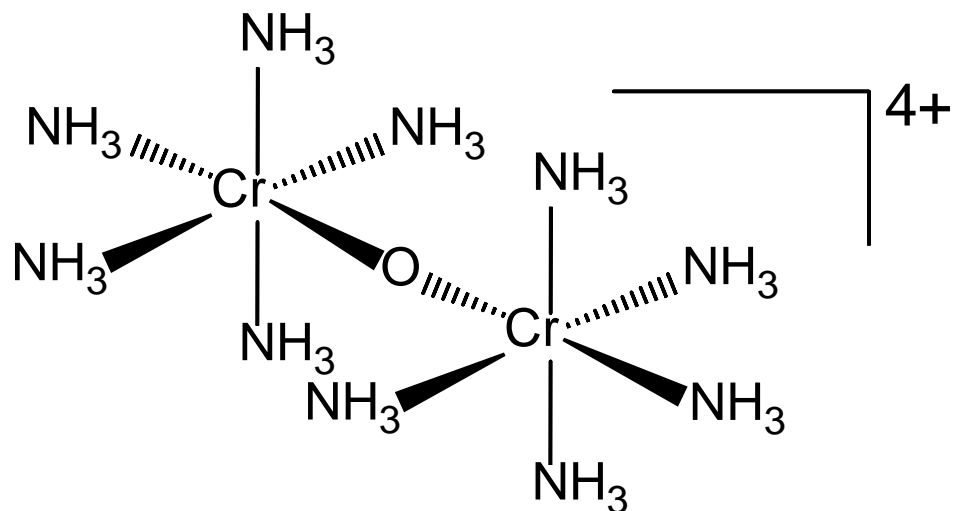
## KONPLEXU POLINUKLEARRAK

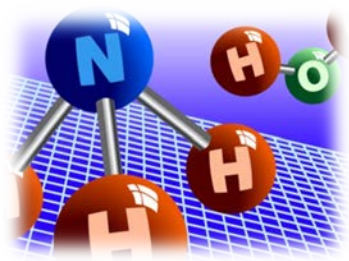
Arau berdina  $\mu_n$ -ikurra erabilirik, non  $n$ , ligando horren bidez konektaturik dauden atomo metalikoen kopurua den.

Normalean,  $n=2$  denean ez da jartzen



$\mu_2$ -oxo-bis[pentaamminokromo(III)]





# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

- **Konplexu anionikoak:** M-ato

$[\text{Pt}(\text{NCS})_6]^{2-}$  hexaisotiozianatoplatinato(IV) anioa

$[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$  bis(tiosulfato)argentato(I) anioa

$[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$  tris(oxalato)burdinato(III) anioa

- **Konplexu kationikoak**

$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$  diamminozilar(I) katioa

$[\text{PdNOBr}(\text{NH}_3)_4]^{3+}$  tetraamminobromonitrosilpaladio(IV) katioa

$[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]^+$  tetraamminodiklorokobalto(III) katioa

- **Konplexu neutroak**

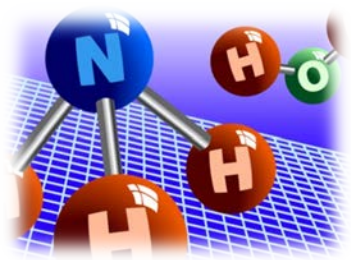
$[\text{Ni}(\text{CO})_4]$  tetrakarbonilnikel(o)

- **Gatz konplexuak:**

$\text{K}_3[\text{MoF}_2(\text{CN})_6]$  potasio hexazianodifluoromolibdato(V)

$[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$  tetraamminodikloroplatino(IV) sulfato

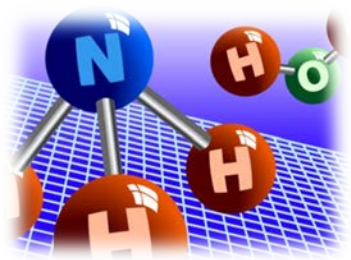
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]_2[\text{Co}(\text{ONO})_5(\text{NH}_3)]$   
diamminozilar(I) amminopentanitritokobaltato(III)



# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

Koordinazio-konposatuen formulazioa praktikatzeko...

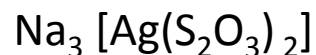
- . Sodio bis(tiosulfato)argentatoa
- . Amonio hexaisotiozianatoplatinato(IV)
- . Potasio hidroxotetranitronitrosilferrato(III)
- . Diamminodikloroplatino(II)
- . Tetraamminokobre(II) nitratoa



# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

Koordinazio-konposatuen formulazioa praktikatzeko...

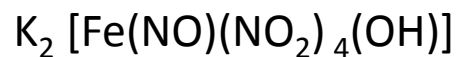
Sodio bis(tiosulfato)argentatoa



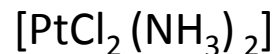
Amonio hexaisotiozianatoplatinato(IV)



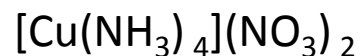
Potasio hidroxotetranitronitrosilferrato(III)



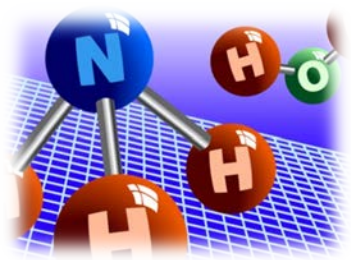
Diamminodikloroplatino(II)



Tetraamminokobre(II) nitratoa

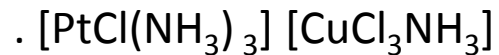
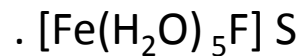
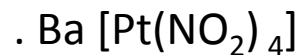
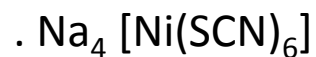


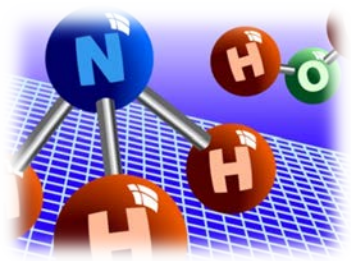




# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

Koordinazio-konposatuen formulazioa praktikatzeko...





# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

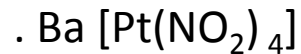
Koordinazio-konposatuen formulazioa praktikatzeko...



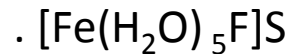
Sodio hexatiozianatoniccolato(II)



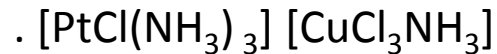
Aluminio diaminotetratiozianatokromato(II)



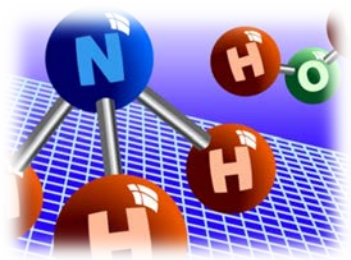
Bario tetranitroplatino(II)



Fluoropentaaqua burdina(III) sulfuroa



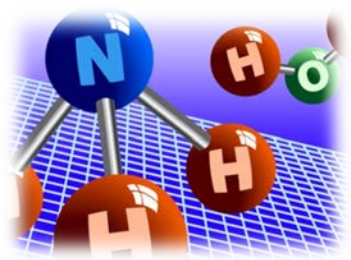
Triamminokloroplatino(II) aminotriklorokuprato(II)



# KONPOSATU EZ-ORGANIKOAK

Konposatu ez-organikoen nomenklatura gogoratzeko...

- . Anhidrido kromikoa
- . Azido diartsenikoa/ piroartsenikoa
- . Bisulfuro ferrosoa
- . Sodio peroxodisulfatoa
- . Kobalto(III) dihidroxokloruroa



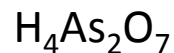
# KONPOSATU EZ-ORGANIKOAK

Konposatu ez-organikoen nomenklatura gogoratzeko...

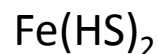
. Anhidrido kromikoa



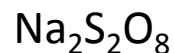
. Azido diartsenikoa



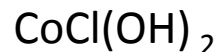
. Bisulfuro ferrosoa

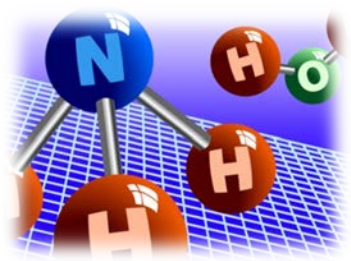


. Sodio peroxodisulfatoa



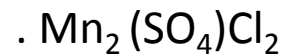
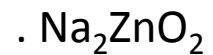
. Kobalto(III) dihidroxokloruroa

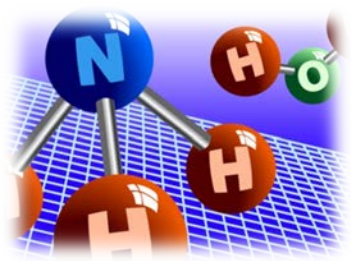




# KONPOSATU EZ-ORGANIKOAK

Konposatu ez-organikoen nomenklatura gogoratzeko...





# KONPOSATU EZ-ORGANIKOAK

Konposatu ez-organikoen nomenklatura gogoratzeko...



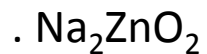
Estrontzio peroxidoa



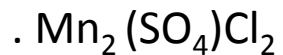
Azido ditiofosforikoa



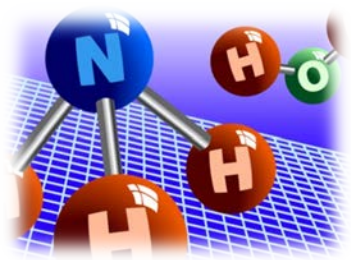
Kaltzio manganatoa



Sodio zinkatoa



Manganeso (II) klorurosulfato



# KOORDINAZIO-KONPOSATUAK

Bereizteko...

- .  $\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$   
Kromo(III) kloruro hexahidratatua
- .  $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6] \text{Cl}_3$   
Hexaaquakromo(III) kloruro
- .  $\text{CrCl}_3$   
Kromo(III) kloruro anhidro

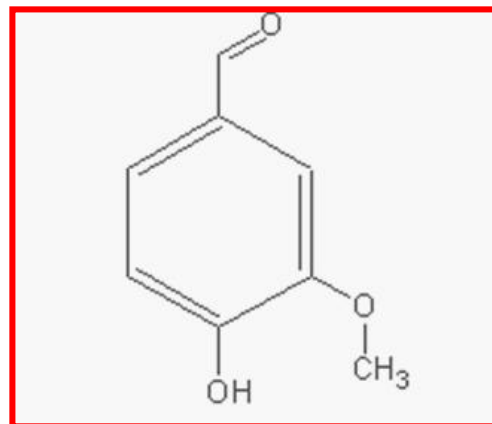
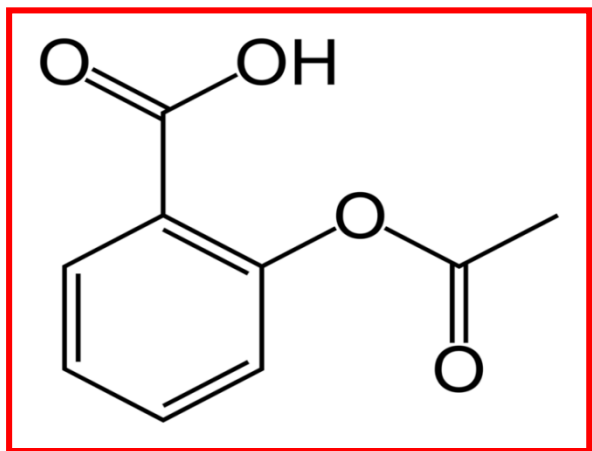
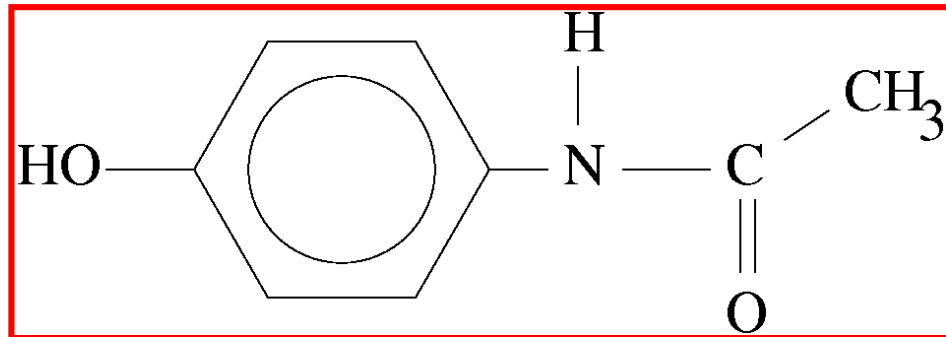
# FORMULAZIO eta NOMENKLATURA KIMIKOA

**SAILA: Kimika Ezorganikoa**





# KONPOSATU ORGANIKOEN FORMULAZIO eta NOMENKLATURA



# NOMENKLATURA MOTAK

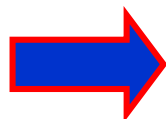
IUPAC

***Kimika Puru eta Aplikatuko Nazioarteko Batasuna***  
***International Union of Pure and Applied Chemistry***  
***Unión Internacional de Química Pura y Aplicada***

Ordezkapenakoa

Erradikofuntzionala

2013.urtean



- ✓ IUPACen Liburu Urdina
- ✓ Nomenclature of Organic Chemistry-IUPAC. Recommendations and preferred names 2013.

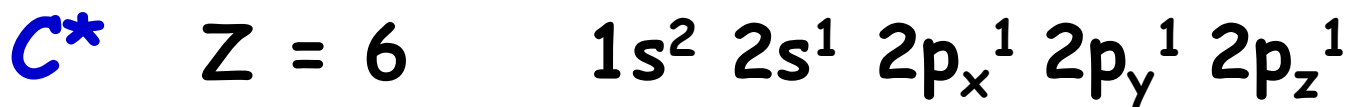
**Kimika Organikoa:** Karbonoaren konposatuak aztergai dituen kimikaren atala

**C - C** loturak dituzten konposatuak

**H, N, O** atomoak      **S, P** eta Halogeno atomoak

- Ezagutzen diren substantzia kimikoen %95a baino gehiago
- Bizitzaren arduradunak diren substantziak: Azido nukleikoak, Bitaminak, Proteinak, Entzimak, Lipidoak...
- 10 Miloi konposatu baino gehiago...

# KARBONO ATOMOA



Lau Lotura eratzeko gai

Balentzia 4

ELKARREN ARTEAN  
LOTZEKO  
AHALMENA



KATEAK  
ERATUZ

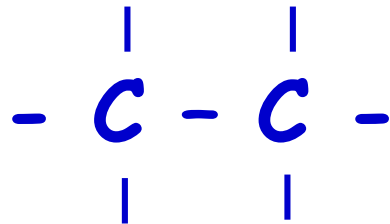
# LOTURA MOTAK

1. Lotura Sinplea  $\longrightarrow$  ASETUTAKO LOTURA

2. Lotura Bikoitza

3. Lotura Hirukoitza

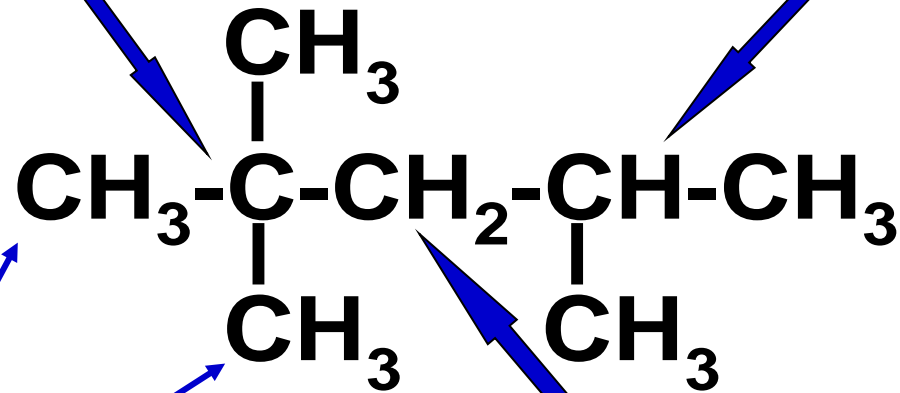
ASETUGABEKO LOTURAK



# KARBONO ATOMOAK

Kuaternarioa

Tertziarioa



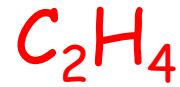
Primarioa

Sekundarioa

# FORMULA MOTAK

## Formula Molekularra

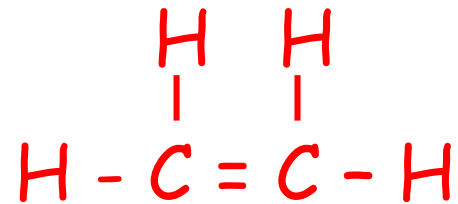
- Kondentsatutakoa



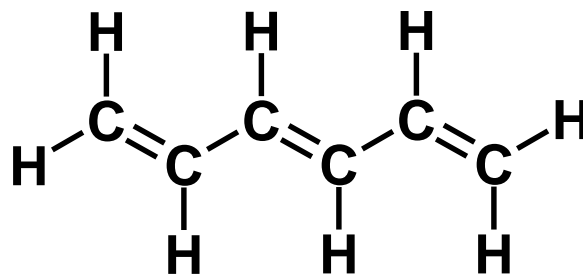
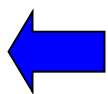
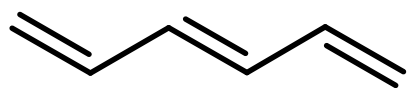
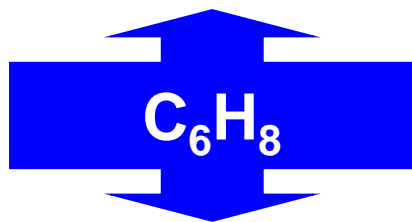
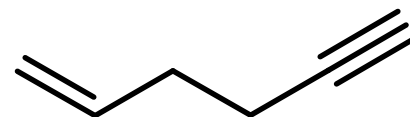
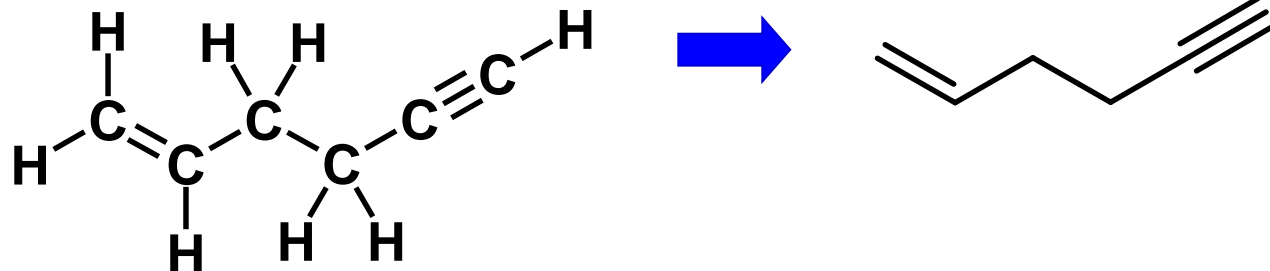
- Erdigaratua



- Garatutakoa



- Sinplifikatutakoa edo zig-zag

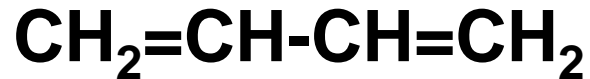




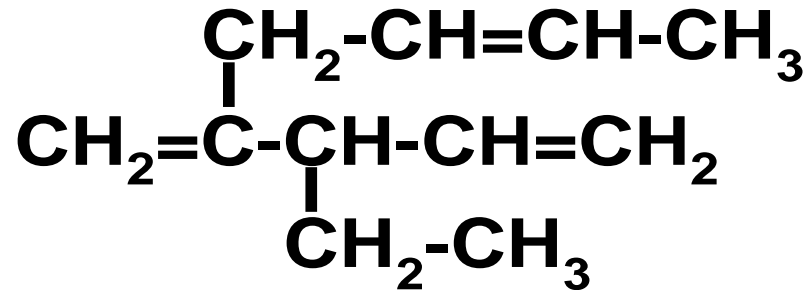
# KATE MOTAK

- AZIKLIKOAK edo IREKIAK

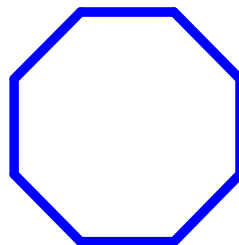
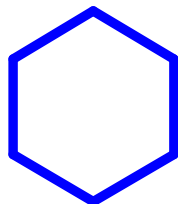
- Linealak



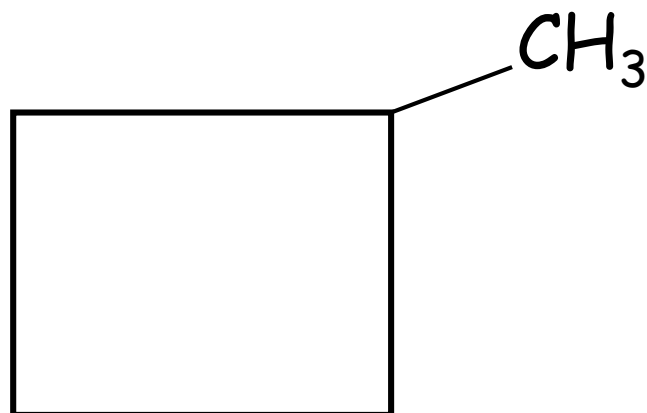
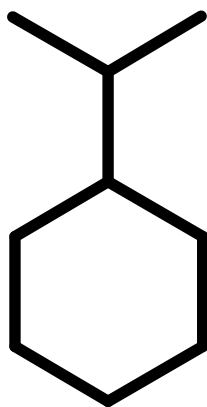
- Adarkatuak



- ZIKLOAK edo ITXIAK



• Adarkatuak



# KONPOSATU ORGANIKOEN NOMENKLATURA

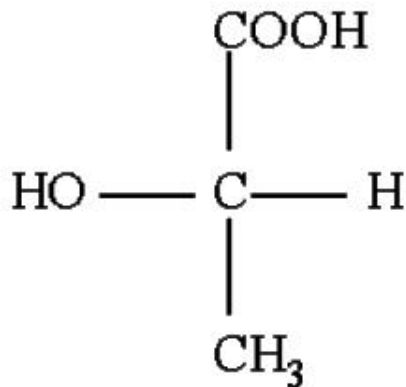
## 1. ARRUNTA



Azido Formikoa



Naftaleno



Azido laktiko

## 2. SISTEMATIKOA (IUPAC Sistema)

- **Aurrizkiak**: 2. mailako funtzio-taldeak edota beste taldeak, kate nagusian non dauden adierazten du, zenbaki lekutzaileak erabiliaz
- **Erroak** (Oinarrizko zatiak): Kate-nagusiko karbono-atomo kopurua adierazten du
- **Atzizkiak**: Molekulan dagoen funtzio-talde nagusia adierazten du

3 - metilbutanal

# HIDROKARBUROAK: SAILKAPENA



Aromatikoak

Monoziklikoak

**BENTZENOA**

Poliziklikoak

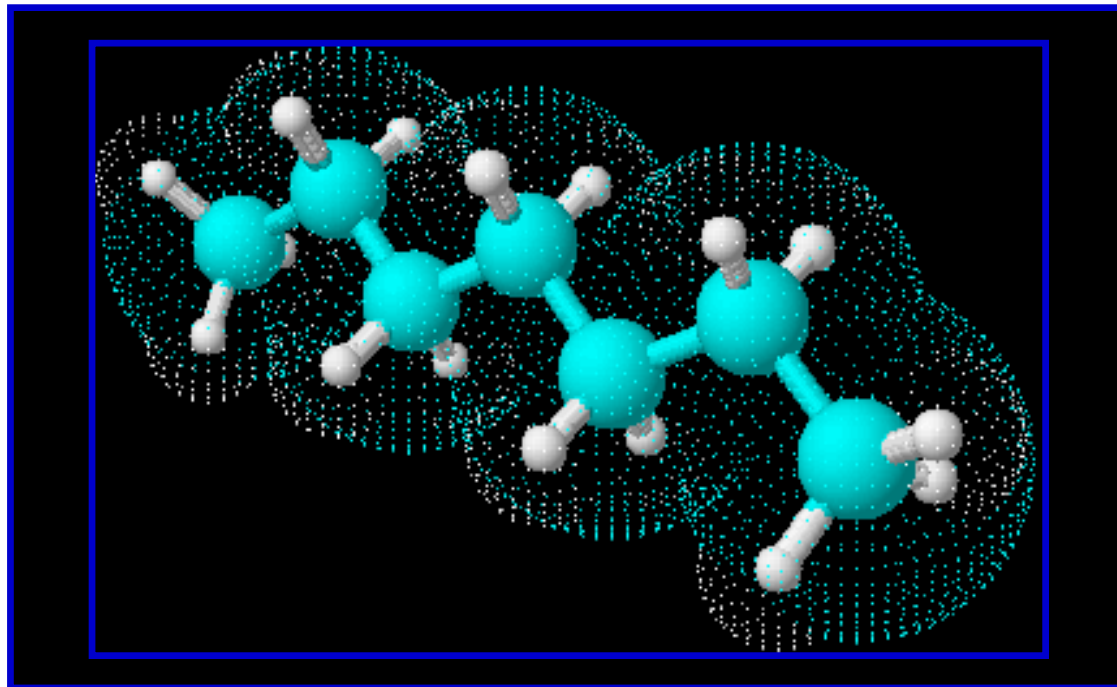
Isolatutakoak

Kondentsatutakoak

# HIDROKARBURUOK: NOMENKLATURA

Hidrokarburo Alifatiko Aziklikoak:

**ALKANOAK**



# - ALKANO Ez Adarkatuak

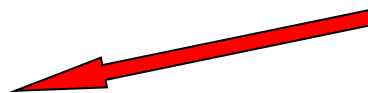
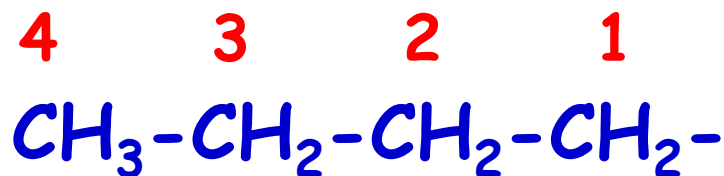
Izena: C atomo kopurua adierazten duen ZENBAKIZKO aurrizkia eta -ANO atzizkia

Penta + - ANO  Pentano

1 Metano	7 Heptano	13 Tridekano	19 Nonadekano
2 Etano	8 Oktano	14 Tetradekano	20 Ikosano
3 Propano	9 Nonano	15 Pentadekano	30 Triakontano
4 Butano	10 Dekano	16 Hexadekano	
5 Pentano	11 Undekano	17 Heptadekano	
6 Hexano	12 Dodekano	18 Oktadekano	



## - ALKIL Erradikalak



**Zenbakikuntza:** 1  
zenbakia lotura  
askedun C

**Izena:**

**-ANO    →    -ILO    →    -IL**

**Butano    →    Butilo    →    Butil**

**Erradikalaren  
izena**

**Ordezkatzaile  
izena**

**Erradikala**

**Izen Sistematikoa**

**Izen Arrunta**



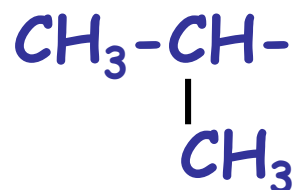
metilo



etilo

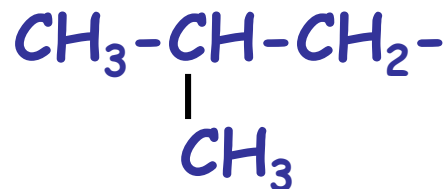


propilo



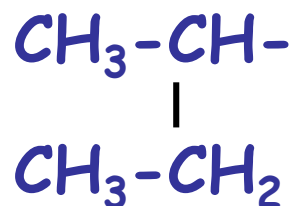
1-metiletilo

**Isopropil(iPr)**



2-metilpropilo

**Isobutil(iBu)**



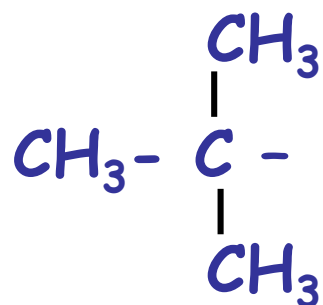
1-metilpropilo

**sek-butyl(s-Bu)**

Erradikala

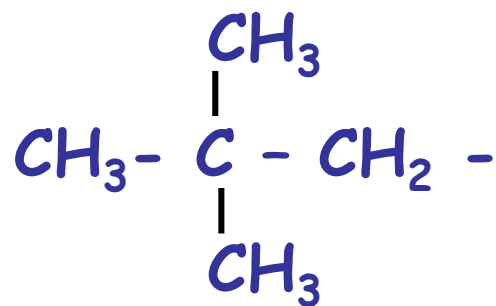
Izen Sistematikoa

Izen Arrunta



1,1-dimetiletil

tert-butil(t-Bu)



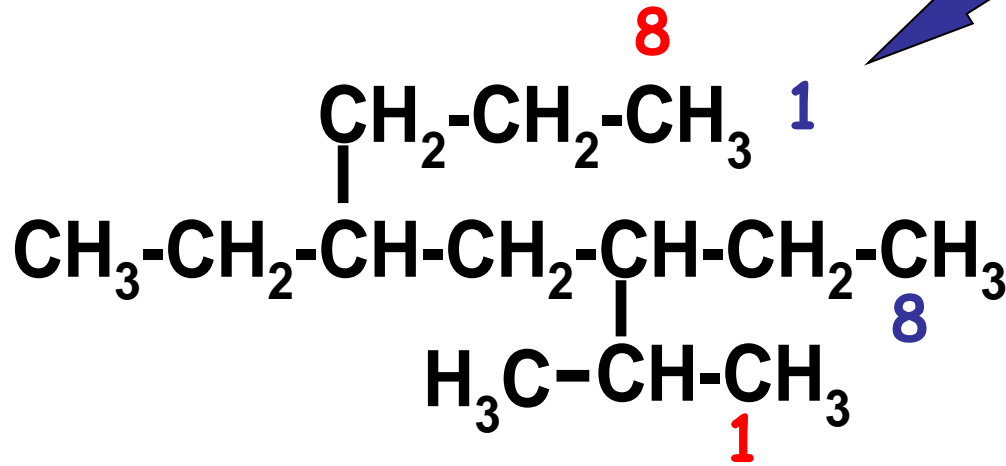
2,2-dimetilpropilo

Neopentil



b) Alboko kate gehien dituenak

Alboko  
2 kate

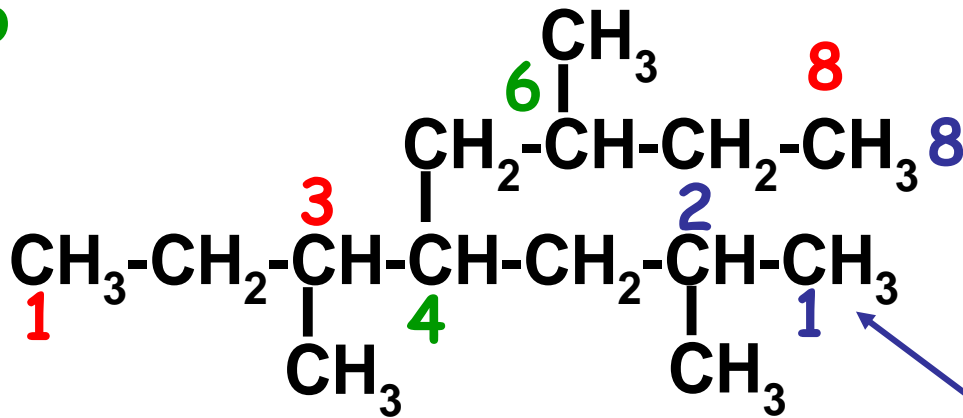


Alboko 3  
kate: Kate  
NAGUSIA

# c) Alboko kateen lekutzaile baxuenak dituenak

8 Karbono  
ordezkatzaileak

3,4,6



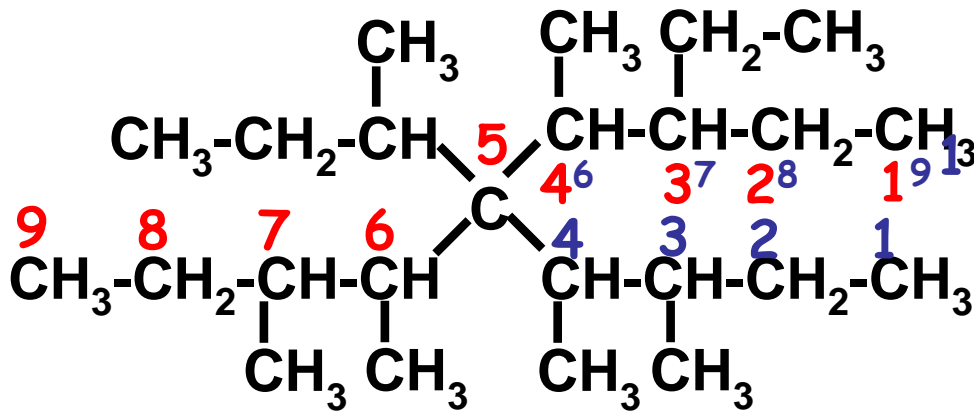
8 Karbono  
ordezkatzaileak

2,4,6

Kate Nagusia

d) Alboko kate txikienetan, C atomo gehien dituenak

Karbonoak: 9  
 alboko kateak: 6  
 lekutzaileak: 3,4 5,5,6,7  
 alboko kateetako C ak:  
 1,1,1,2,4,6  
**KATE NAGUSIA**



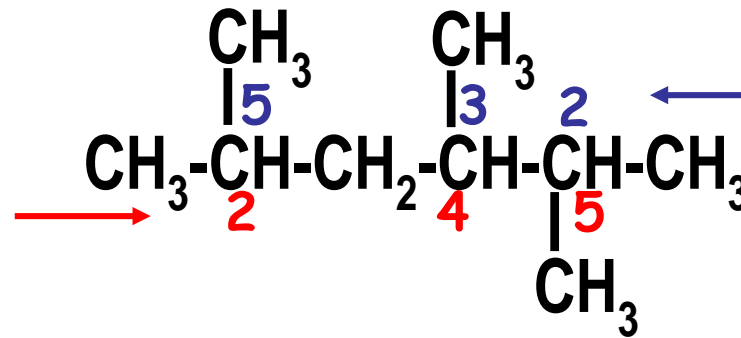
Karbonoak: 9  
 alboko kateak: 6  
 lekutzaileak: 3,4 5,5,6,7  
 alboko kateetako C ak:  
 1,1,1,1,4,7

e) Alboko kateetan, erramifikazio gutxien duena

## 2. ZENBAKIKUNTZA

a) Ordezkatzailei zenbaki baxuenak egokitzen zaie

2,4,5  
Zenbakikuntza  
okerra



2,3,5 Zenbakikuntza  
zuzena

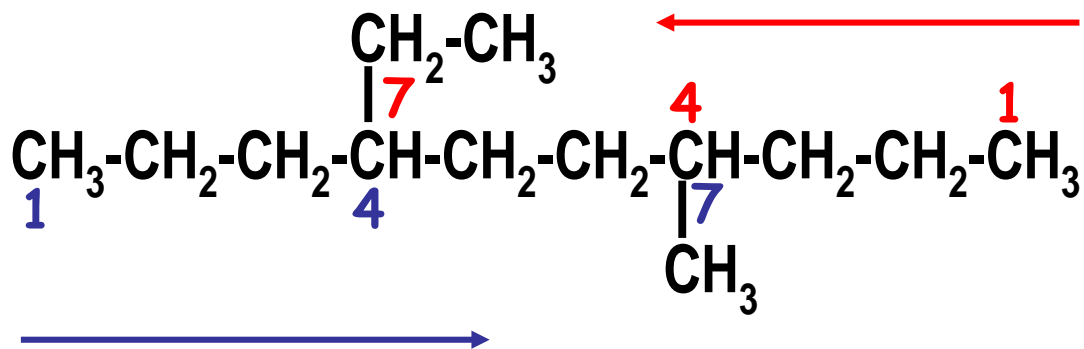
KATE NAGUSIA



b) Zenbaki baxuenak, alfabetikoki ordenatutako ordezkatzailerai egokitzen zaie

4-metil-7-etil

Zenbakikuntza OKERRA



4-etil-7-metil

Zenbakikuntza ZUZENA

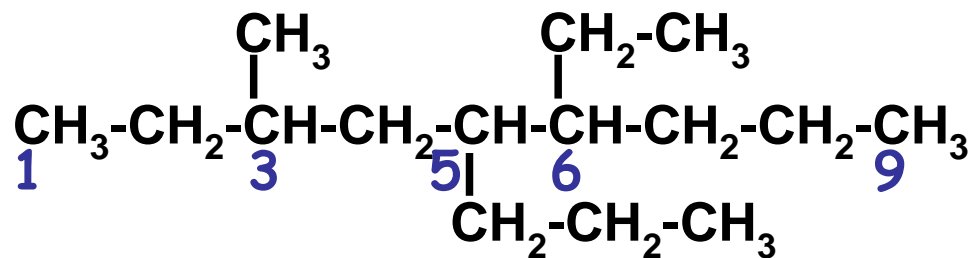
### 3. IZENA

Lekutzaileak-Ordezkatzaileak+Alkanoaren Izena

(Alboko kateak)

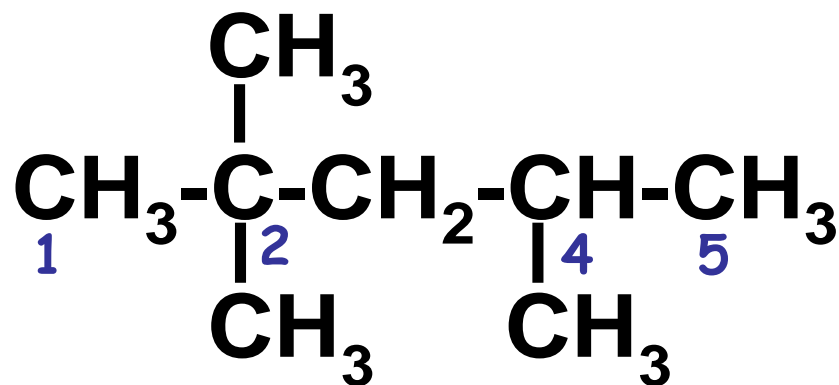
(Kate Nagusia)

a) Lehendabizi, alfabetikoki ordenatutako ordezkatzaileen izenak beraien lokatzaileekin, marratxo bat tartekatuz



6-etil-3-metil-5-propilnonano

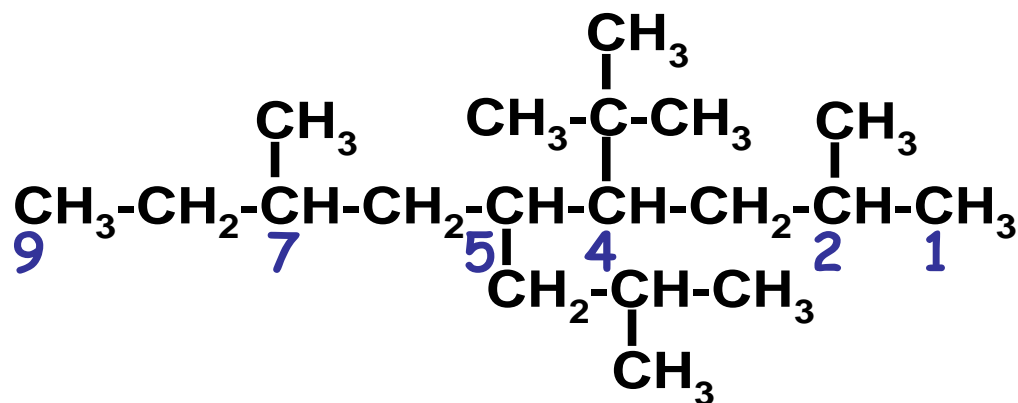
b) Molekulan ordezkatzaille bera, bitan, hirutan, lautan..., agertzen bada, **di, tri, tetra**,..., aurrizkiak jartzen dira



**2,2,4-Trimetilpentano**

c) Di, tri, tetra,..., eta n-,sec- eta tert-, aurrizkiak, ez dira kontutan hartzen orden alfabetikoa aplikatzerakoan

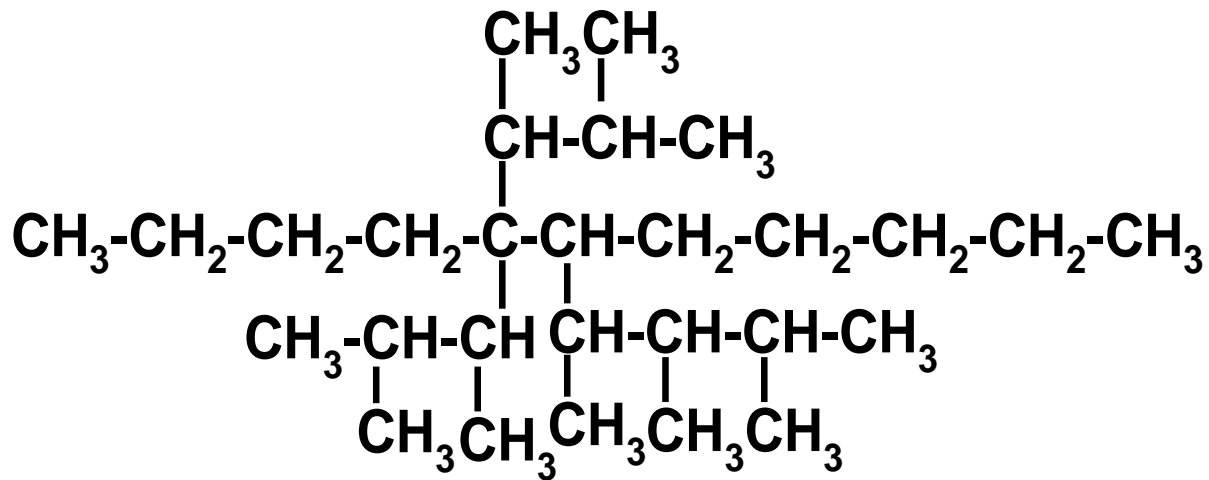
d) Iso, neo eta ziklo aurrizkiak, alfabetikoki ordenatzen dira eta marratxo gabe idazten dira



*4-tert-butil-5-isobutil-2,7-dimetilnonano*

e) Adarkatutako ordezkatzailak (ordezkatzaila konplexuak) izendatzeko, arau berdinak jarraitzen dira.

Behin baino gehiagoetan agertzen badira, **bis**, **tris**, **tetrakis**, **pentakis**, ..., aurrizkiak erabiltzen dira (orden alfabetikotik kanpo)

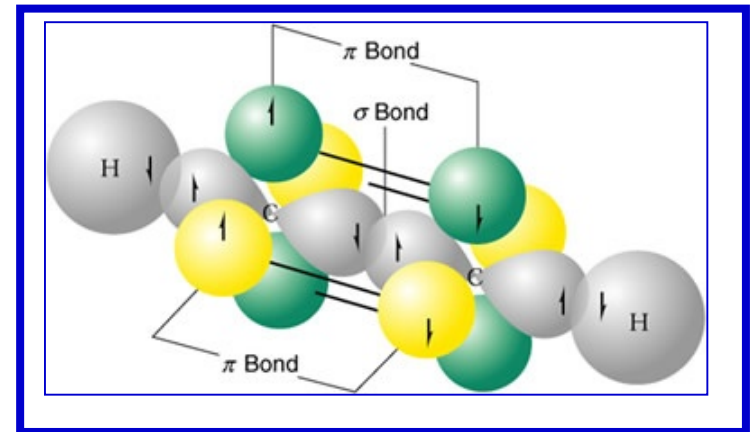
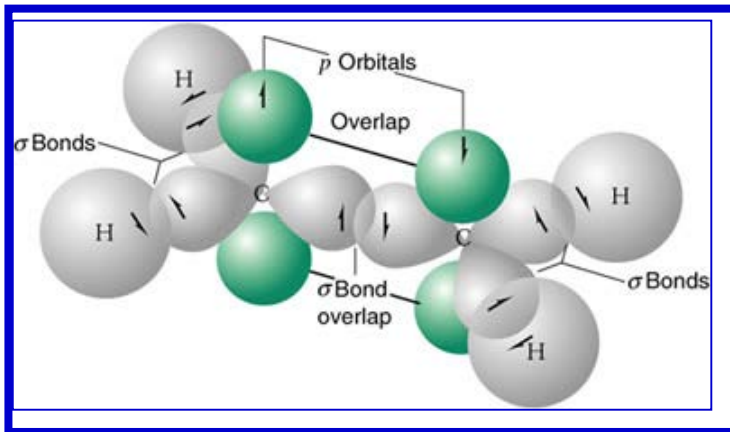




# HIDROKARBURUOK: NOMENKLATURA

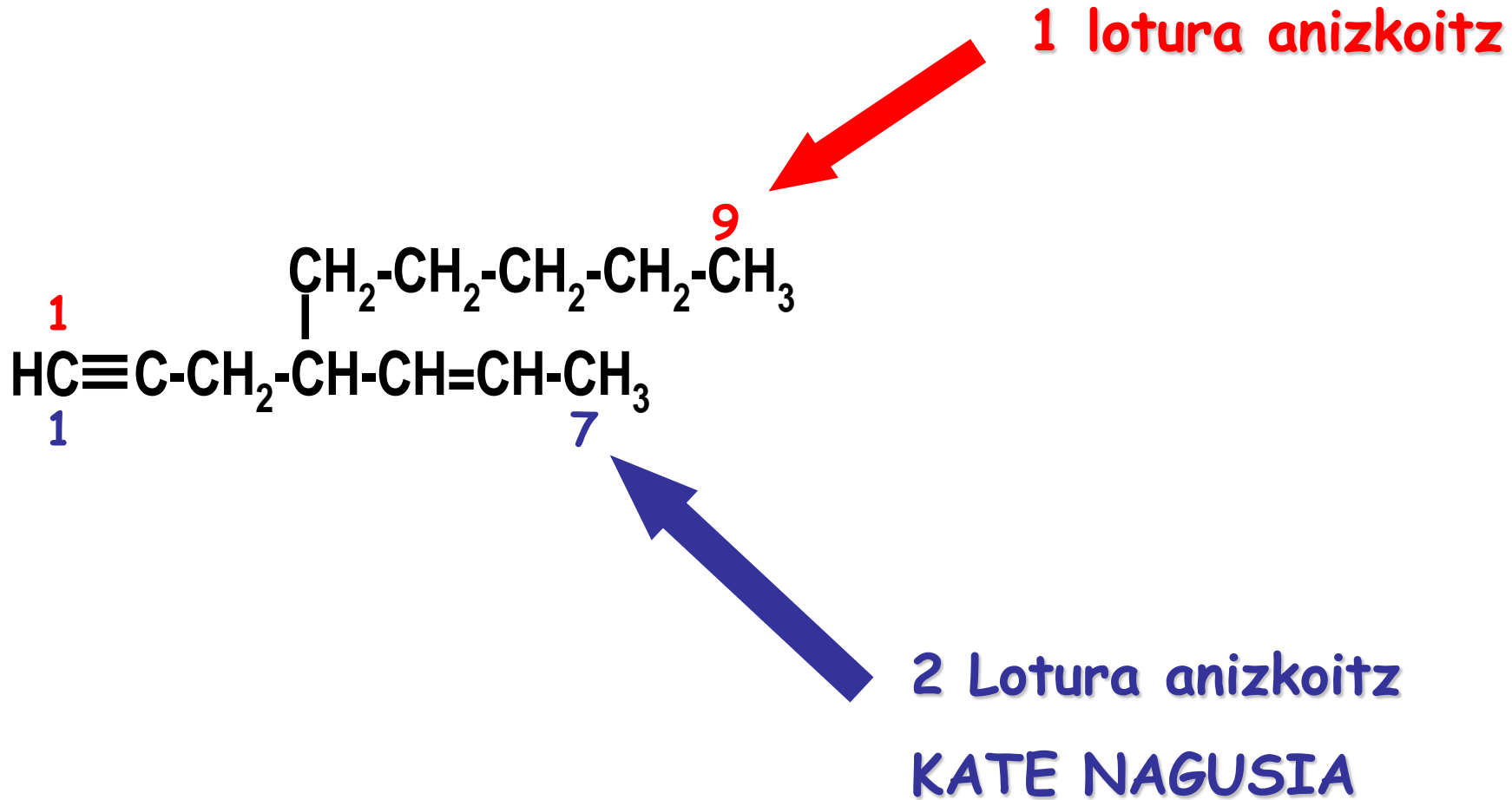
Hidrokarburo Alifatiko Aziklikoak:

**ALKENO eta ALKINOAK**



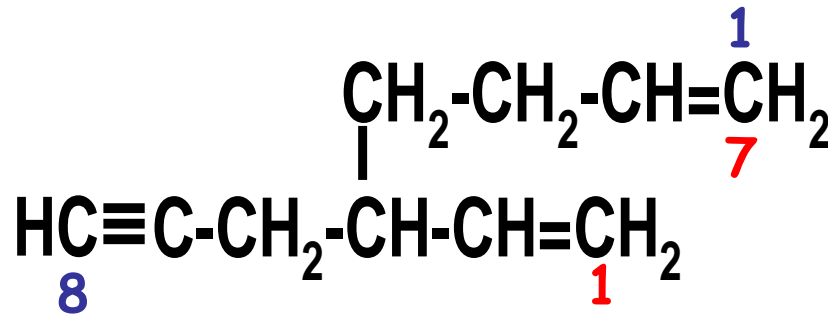
# 1. KATE NAGUSIAREN AUKERAKETA

a) Lotura anizkoitz gehiago dituen





## b) Luzeena

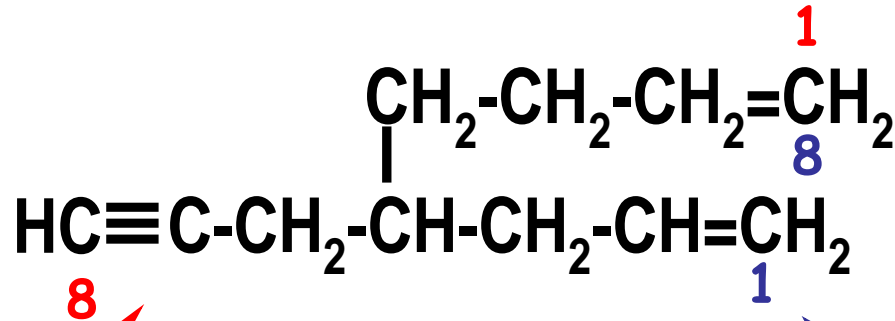


2 Lotura anizkoitz  
8 Karbono

**KATE NAGUSIA**

2 Lotura anizkoitz  
7 Karbono

### c) Lotura bikoitz gehien dituena



2 Lotura anizkoitz

8 Karbono

1, bikoitza 1, hirukoitza

2 Lotura anizkoitz

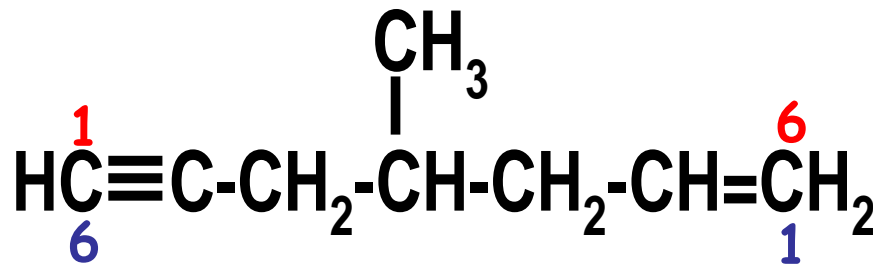
8 Karbono

2 bikoitz

KATE NAGUSIA

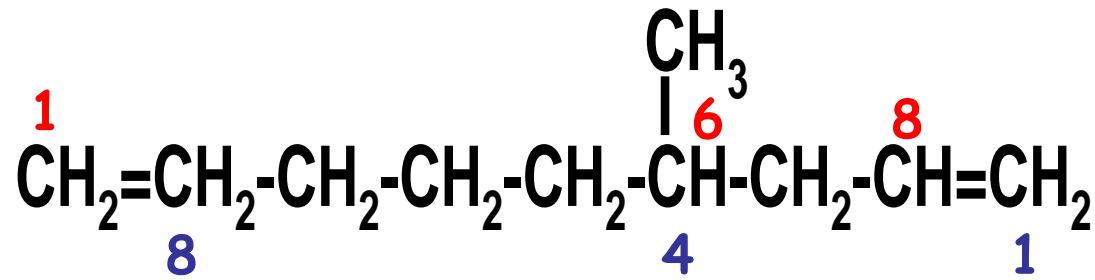
## 2. ZENBAKIKUNTZA

a) Zenbaki baxuenak, lotura anizkoitzei.  
Berdintasunaren aurrean, lotura bikoitzek  
lehentasuna dute



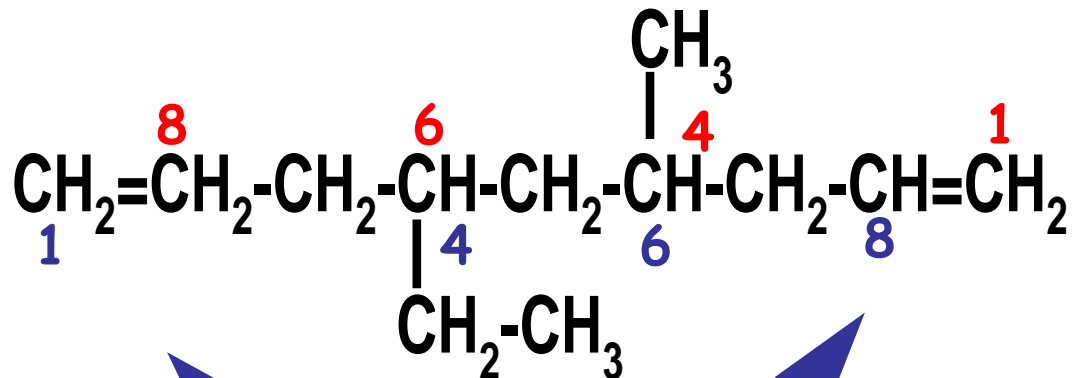
ZENBAKIKUNTZA  
ZUZENA

## b) Zenbaki baxuenak, ordezkatzaileri



ZENBAKIKUNTZA  
ZUZENA

c) Zenbaki baxuenak, alfabetikoki ordenatutako ordezkatzaileri

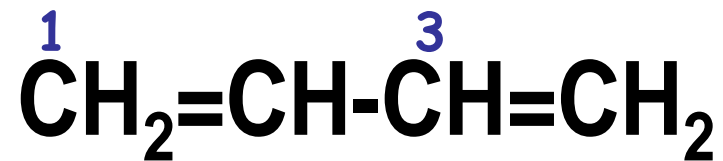


ZENBAKIKUNTZA  
ZUZENA

Etil, Metil aurretik



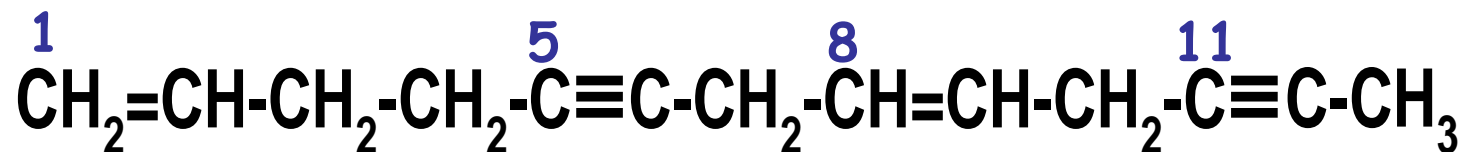
b) Hainbat lotura anizkoitz, zenbaki lokatzaileez adierazten dira. -Eno bukaera, **-adieno**, **-atrieno**,...,bukaeraz aldatzen da eta -ino, **-adiino**, **-atriino**,..., bukaeraz



Buta-1,3-dien

**1,3-butadieno**

c) Lotura bikoitz eta hirukoitz: Lehenengo -eno atzizkia eta ondoren -ino

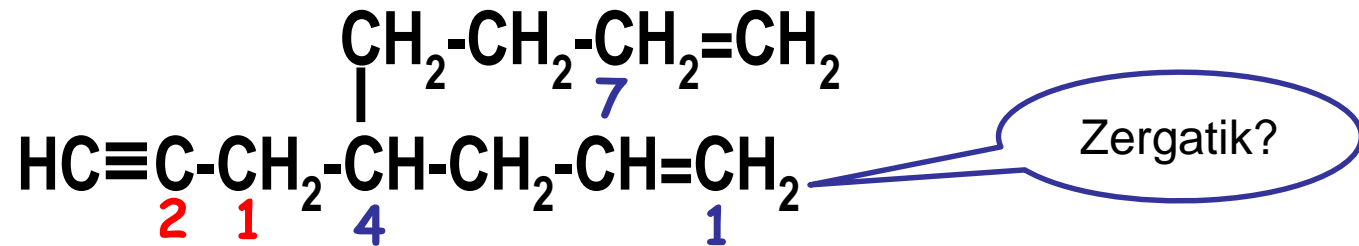


Trideka-1,8-dien-5,11-diino

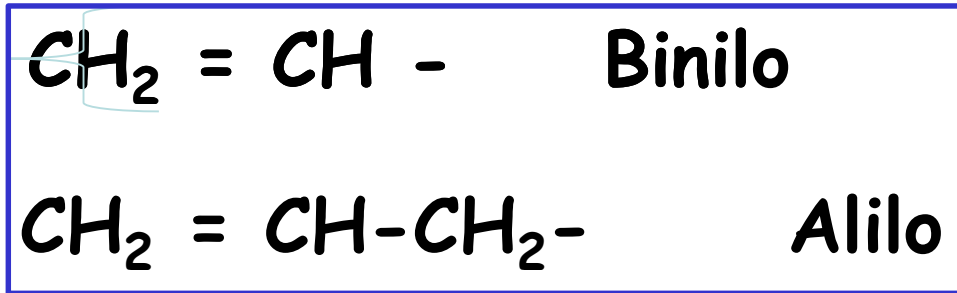


d) Erradikal monobalenteak: -"eno", -"enilo"z aldatzen da eta -"ino", -"inilo"z.

Erradikalaren 1 C, kate nagusiari lotutakoa da



4-(2-propinil)-okta-1,7-dieno



e) Erradikal di edo tribalenteak:asetutako erradikalaren -"o" bukaera, **-ideno** edo **-idino** bukaeraz aldatzen da

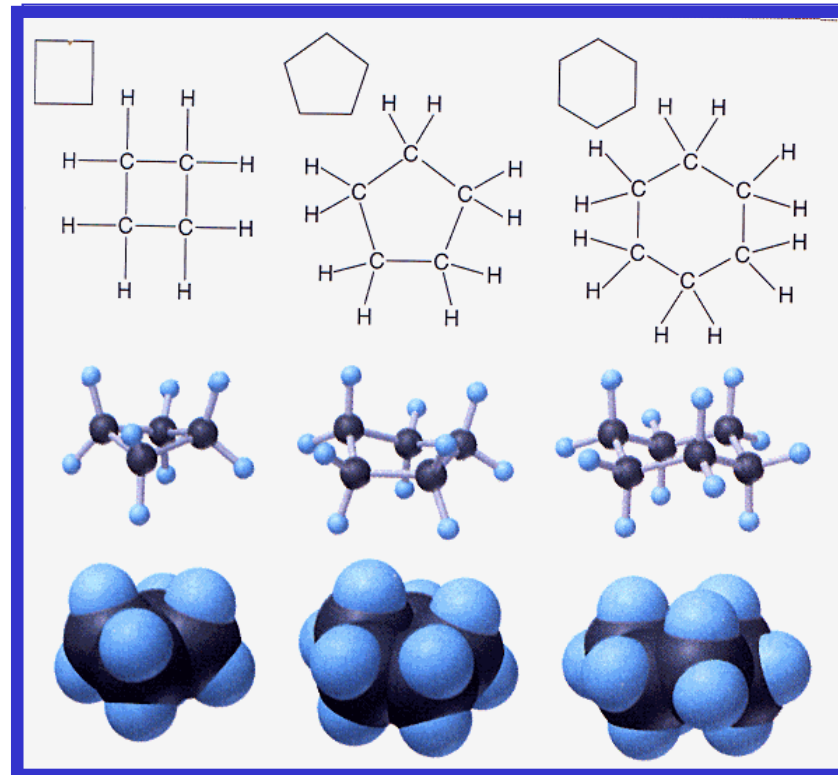
$\text{CH}_2 =$  Metilo  $\rightarrow$  Metildieno  $\rightarrow$  Metildien

$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{C} \equiv$  Propildiino

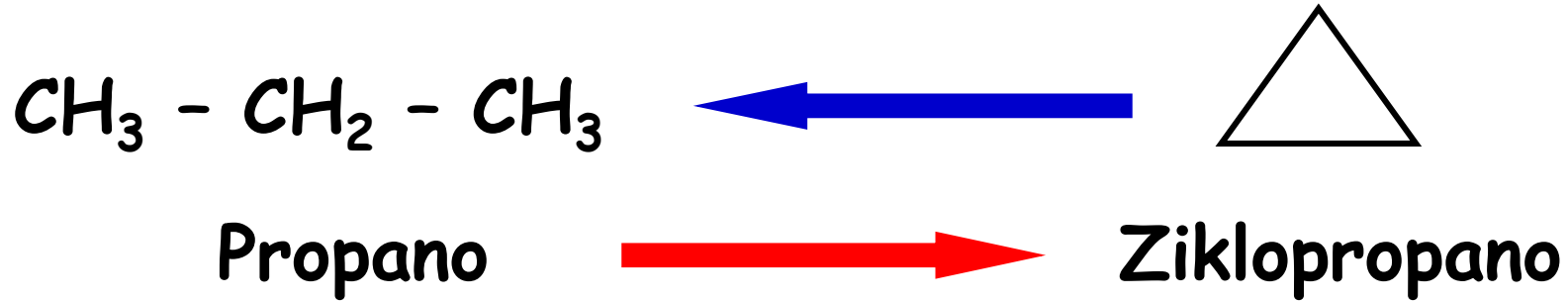
# HIDROKARBURUOK: NOMENKLATURA

Hidrokarburo Alifatiko Ziklikoak:

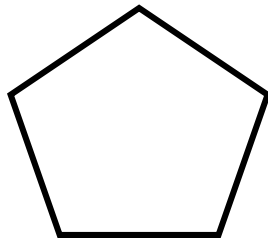
**ZIKLOALKANO, ZIKLOALKENO eta  
ZIKLOALKINOAK**



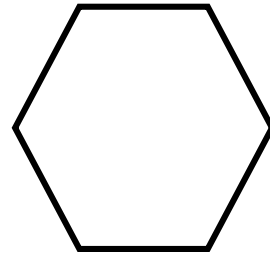
a) Karbono atomo kopuru berdineko alkanoaren izenari **"ZIKLO"**- aurrizkia jartzen zaio



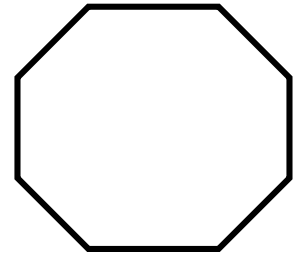
Ziklobutano



Ziklopentano

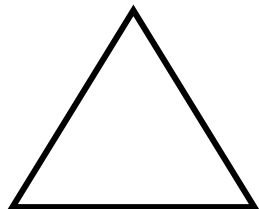


Ziklohexano

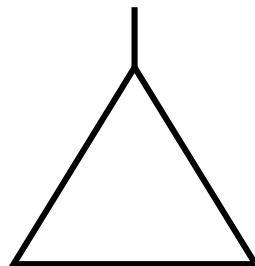


Ziklooktano

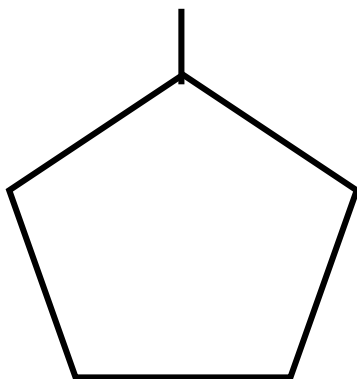
b) Erradikalak, -ano, -ilo bukaeraz aldatzen izendatzen dira



Zikloprop**ano**

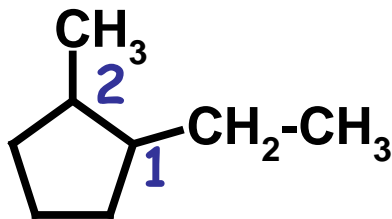


Zikloprop**ilo**

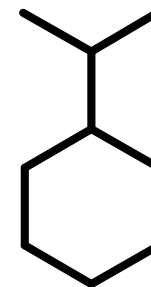


Ziklopent**ilo**

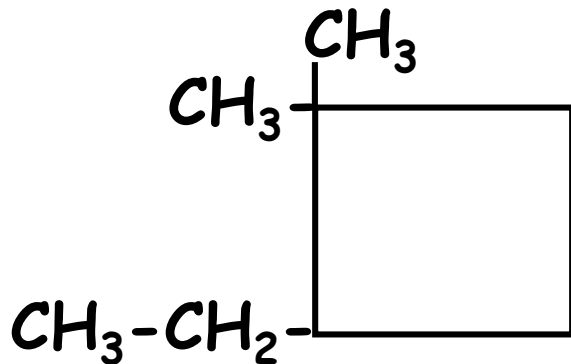
c) Ordezkatutako Zikloalkanoak: Alkanoentzat jarraitzen diren arau berberak jarraitzen dira. Ordezkatzaile bakarra izanik, ez da beharrezkoa lokatzalea erabiltzea



1-etil-2-metilziklopentano

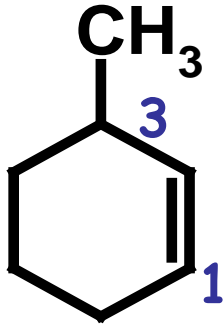


Isopropilziklohexano

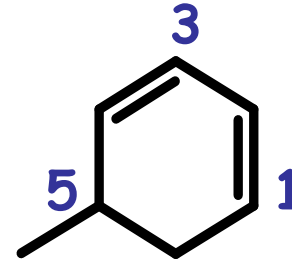


1-etil-2,2-dimetilziklobutano

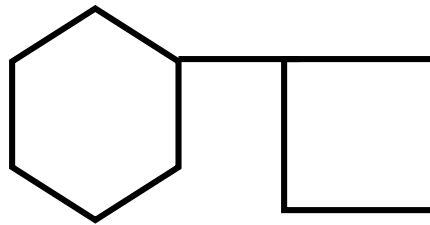
d) Ordezkatutako Zikloalkeno eta Zikloalkinoak:  
Alkeno eta alkinoentzat jarraitzen diren arauak



3-metiliziklohexeno



5-metiliziklohexa-1,3-dieno

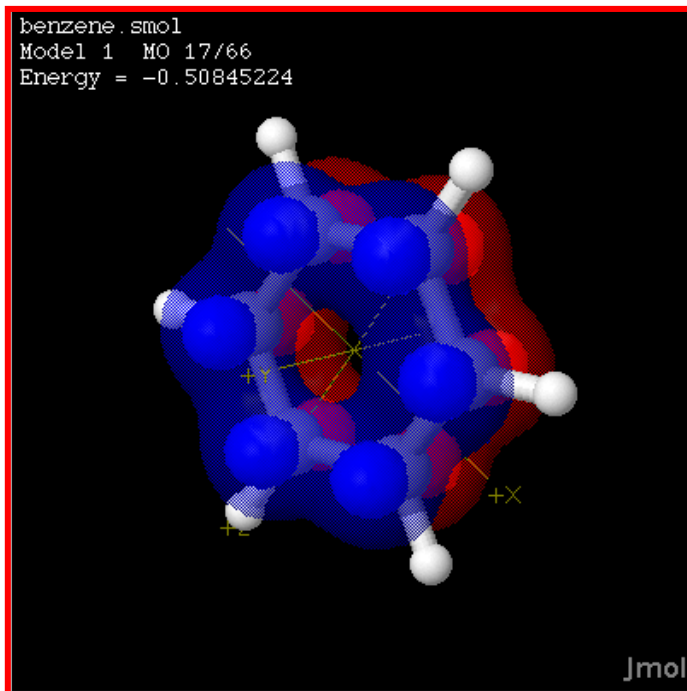


Ziklobutilziklohexano

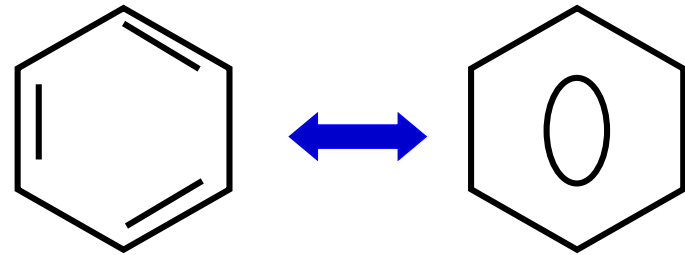
# HIDROKARBURUAK: NOMENKLATURA

Hidrokarburo Aromatikoak: (Izen generikoa: **ARENO**)

Egitura zikliko eta ahalik eta lotura bikoitz konjokatu gehien dituzten konposatuak dira



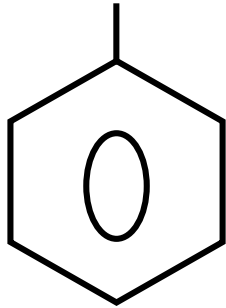
Konposatu adierazgarriena:  
**BENTZENOA C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>**



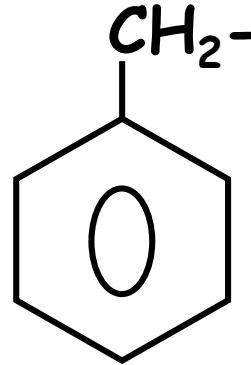
**Ziklohexa-1,3,5-trieno**



# Erradikalak: ARILO Erradikalak



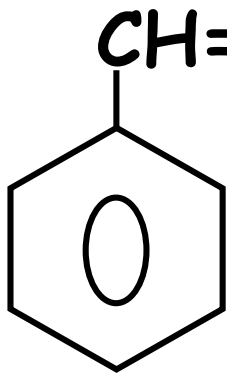
Fenilo



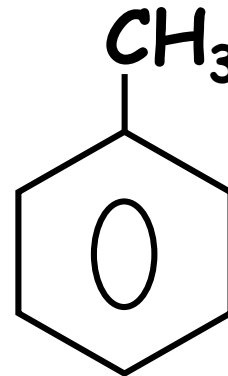
Bentzilo (Fenilmetiloa)

## IZENA

Lokatzaileak - Ordezkatzaileak + Bentzeno



Etenilbentzeno  
Binilbentzeno  
ESTIRENO

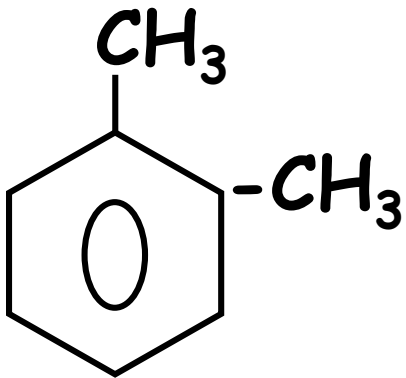


Metilbentzeno  
TOLUENO

Ordezkatzaile bakarra → Lokatzailerik EZ

## Bi ordezkatzaile:

Posizio Erlatiboak	{	1,2 lokatzaileak	ORTO ( <i>o</i> -)
		1,3 lokatzaileak	META ( <i>m</i> -)
		1,4 lokatzaileak	PARA ( <i>p</i> -)



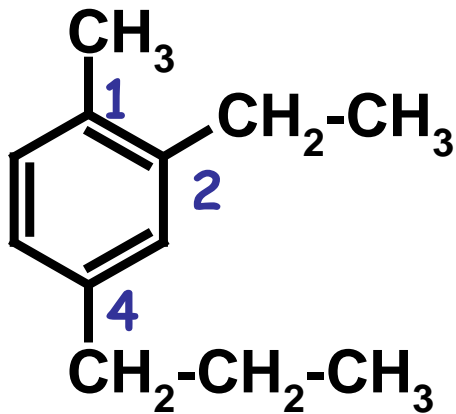
*o*-dimetilbentzeno

*o*-xileno

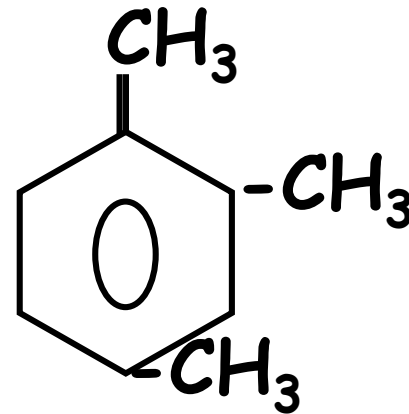
Ordezkatzaile gehiago:

**ZENBAKIKUNTZA:**

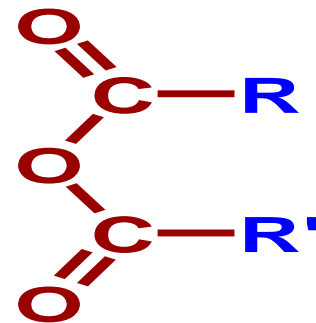
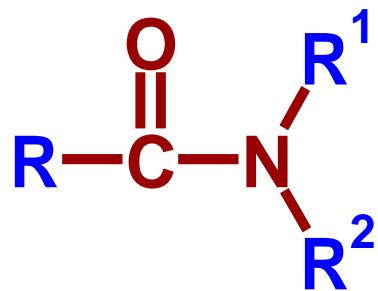
Ordezkatzaileei, ahalik eta lokatzaile baxuenak egokitzen zaie



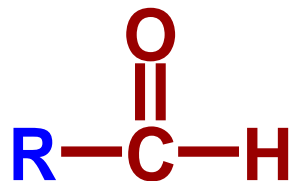
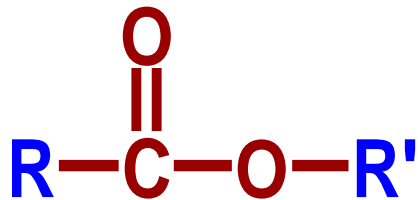
**2-etil-1-metil-4-propilbentzeno**



**1,2,3-trimetilbentzeno**



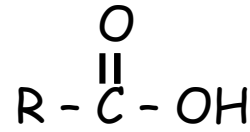
# FUNTZIO ORGANIKOAK



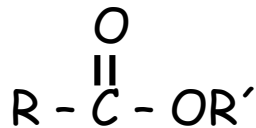
1. Anioak

2. Katioak

3. Azido Karboxilkoak



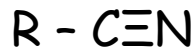
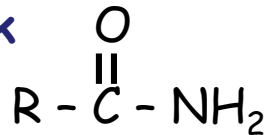
4. Anhidridoak



5. Esterrak

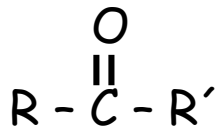
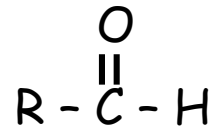
6. Azil Haluroak

7. Amidak



8. Nitriloak

9. Aldehidoak



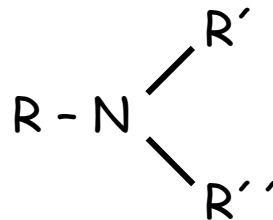
10. Zetonak

11. Alkoholak



12. Tiolak

13. Aminak



14. Eterrak

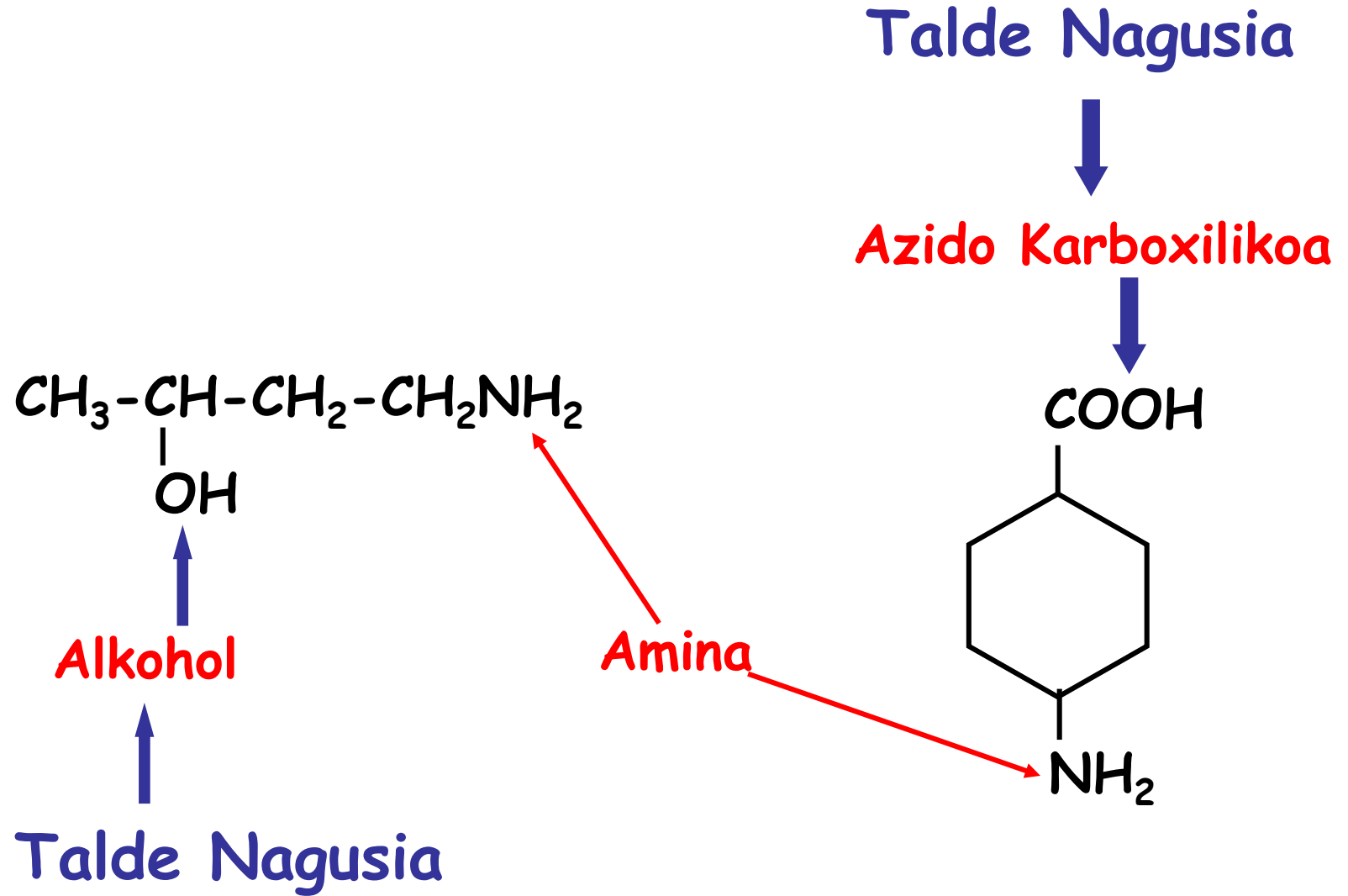


15. Deribatu halogenatuak = Nitroderibatuak



Talde funtzionalen lehentasun-ordena

# 1. Funtzio Talde Nagusiaren Aukeraketa: aurreko zerrendan gorago agertzen dena



## 2. Kate Nagusiaren Aukeraketa:

- a) Talde nagusia kopuru handiagoenetan edukitzen duena
- b) Lotura anizkoitz gehien dituenak
- c) Luzeena
- d) Lotura bikoitz gehien dituenak
- e) Funtzio taldeen lekutzaileak, baxuenak dituenak
- f) Lotura anizkoitzen lekutzaileak, baxuenak dituenak
- g) Lotura bikoitzen lekutzaileak, baxuenak dituenak
- h) Ordezkatzaile kopuru handienekoa
- i) Ordezkatzaileen lokatzaile baxuenekoa
- j) Lehen aldiz (orden alfabetikoa) aipatzen den ordezkatzailea kopuru handiagoan duenak
- k) Lehen aldiz (orden alfabetikoa) aipatzen den ordezkatzailearen lokatzaileak baxuenak dituenak

### 3. Kate Nagusiaren Zenbakikuntza:

Zenbakikuntza egiterakoan, lekutzaile baxuenak izan behar dira:

1. Funtzio talde nagusienak

2. Lotura anizkoitzenak

Berdintasunaren aurrean, lotura bikoitzeak lehentasuna dute

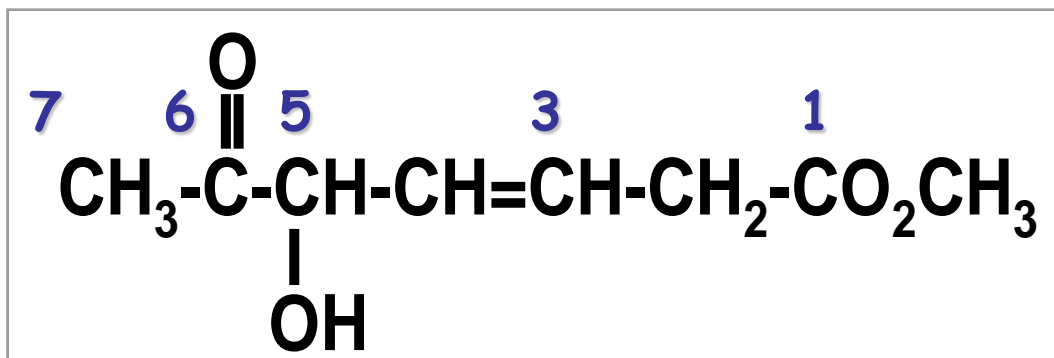
3. Ordezkatzaileak

4. Alfabetikoki ordenatutako ordezkatzaileak



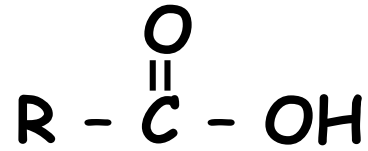
## 4. Izena:

Lokatzaileak-Ordezkatzaileen aurrizkiak+Erroa (C kopurua)  
+lokatazaileak-asegabetasunen atzizkia+funtzio nagusiaren  
atzizkia



Metil 5-hidroxi-6-oxo-hept-3-enoato

# Azido Karboxilikoa



a)  $-COOH$  taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa denean

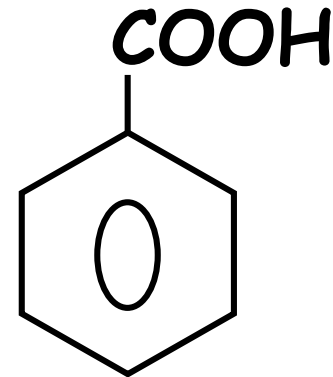
**Azido alkanoiko**  $CH_3 - COOH$  Azido etanoiko  
azido azetiko

b)  $-COOH$  taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa ez denean

**Azido alkanokarboxilikoa**

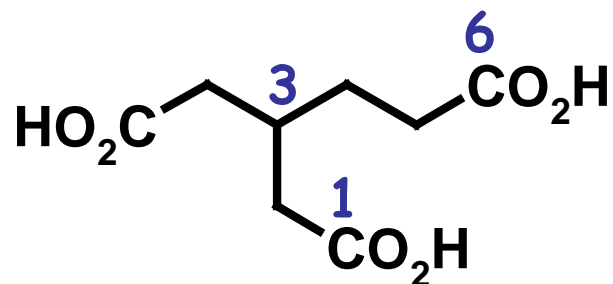
Azido bentzenokarboxilikoa  
Azido bentzoikoa

~~Azido bentzenoikoa~~

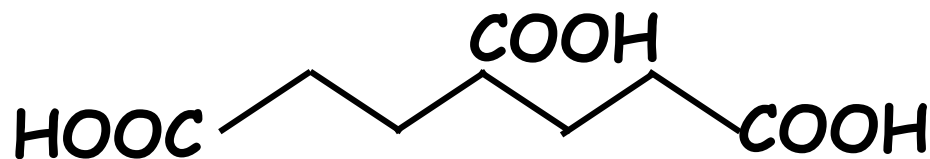


b)  $-COOH$  taldea nagusia ez denean

**Karboxi** - aurrizkia



Azido 3-(karboximetil)hexanodioiko



Azido 4-karboxiheptanodioiko

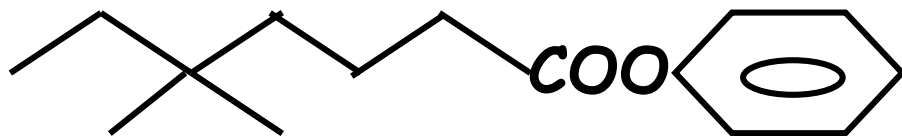
Azido 1,3,5-pentanotrikarboxiliko



a) Taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa denean

R' **Alkil** eradikal bezala + jatorrizko azidoaren izena "oiko" bukaeraren ordean "oato" atzizkia jarriaz

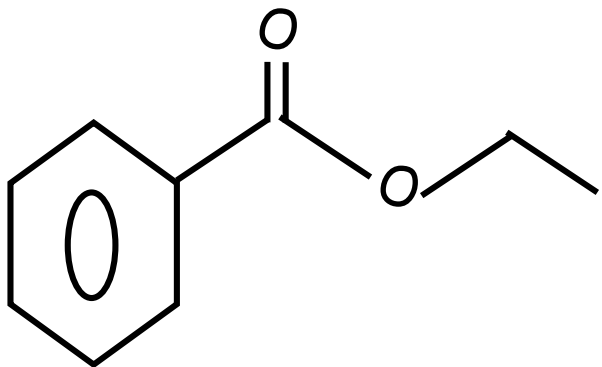
$CH_3 - COOCH_3$  Metil etanoato  
Metil azetato



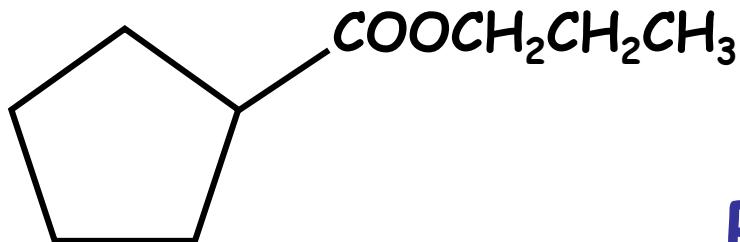
Fenil 5,5-dimetil heptanoato

b) Taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa ez denean

R' Alkil eradikal bezela + -karboxilato atzizkia



Etil bentzenokarboxilatoa  
Etil bentzoatoa



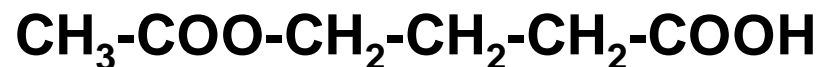
Propil ziklopentakarboxilato

c) Taldea nagusia ez denean, kate nagusiari bi eratan lotu daiteke:



**Alkoxikarbonil** aurrizkia

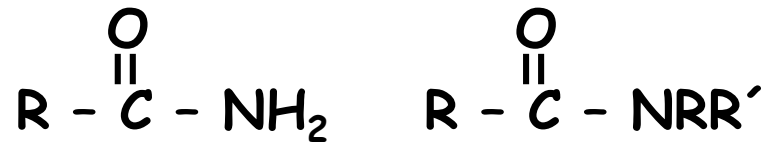
**Aziloxi** aurrizkia



Azido metoxikarbonilbutanoiko

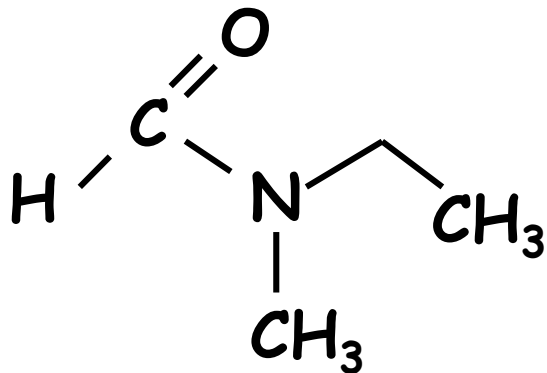
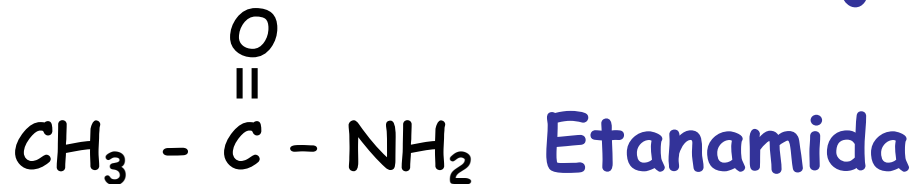
Azido etanoiloxibutanoiko

# Amidak



a) Taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa denean

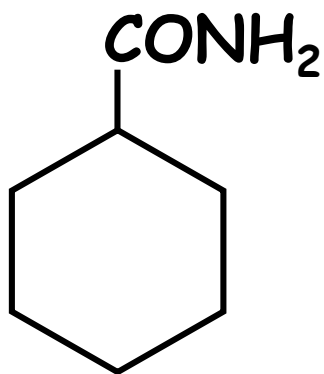
**N** - ordezkatzailak + azidoaren izena -oiko atzizkiaren ordezkatzailak jarriaz



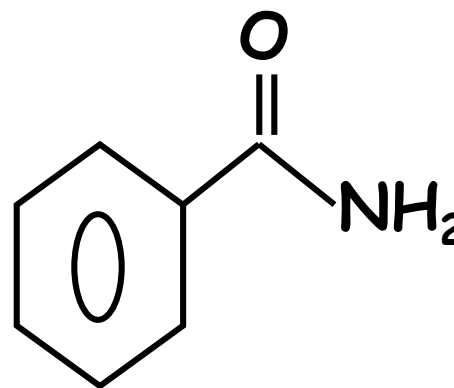
N-etil-N-metilmetanamida

b) Taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa ez denean

**N** - ordezkatzailak + azidoaren izena -oiko atzizkiaren ordezkari **-karboxamida** atzizkia



Ziklohexanokarboxamida



Benzenokarboxamida  
Benzamida



c) Taldea nagusia ez denean, kate nagusiari bi eratan lotu daitezke:



Karbamoil- aurrizkia

Nitrogeno atomotik  
alkanamido- aurrizkia  
azilamino- aurrizkia



Azido karbamoiletanoikoa  
Azido karbamoilazetikoak

# Nitriloak



a) Taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa denean

Hidrokarburoaren izena + -nitriloa

Alkil erradikalaren izena + zianuroa

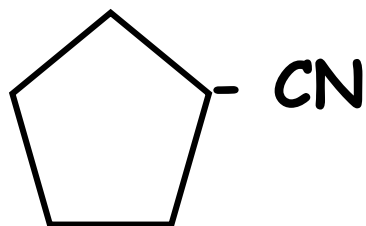


Propanonitrilo

Etil zianuroa HCN-aren deribatua

b) Taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa ez denean

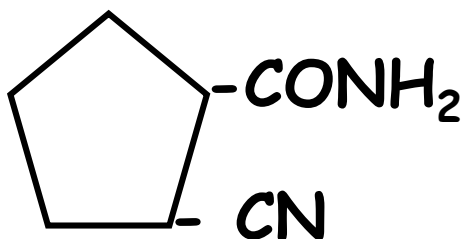
Hidrokarburoaren izena + **-karbonitrilo**



**Ziklopentanokarbonitrilo**

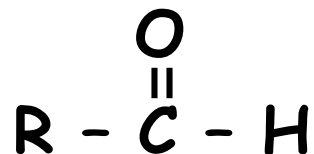
c) Taldea nagusia ez denean **-ziano** aurrizkia

$\text{NC} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{COOH}$  **Azido 3-zianopropanoikoa**



**2-zianoziklopentanokarboxamida**

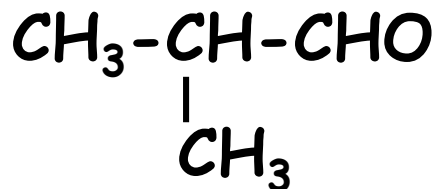
# Aldehidoak



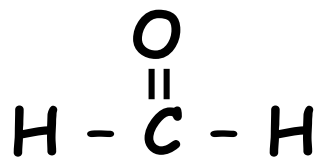
a) Taldea nagusia eta Ca Kate nagusikoa denean

**-al** atzizkia

Lokatzaileak-ordezkatzaileak + hidrokarburoaren izena  
(-o) + **-al** bukaera



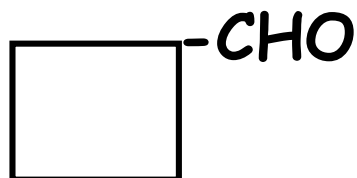
2-metilpropanal  
Isobutanal



Metanal  
Formaldehido

b) Taldea nagusia eta C a Kate nagusikoa ez denean **-karbaldehido** atzizkia

hidrokarburoaren izena **-karbaldehido** bukaera

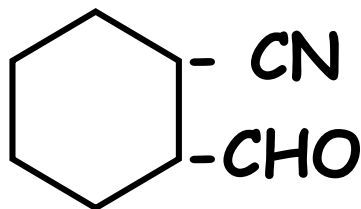


Ziklobutanokarbaldehido

c) Taldea **nagusia ez** denean, eta C a kate nagusikoa **Oxo-** aurrizkia

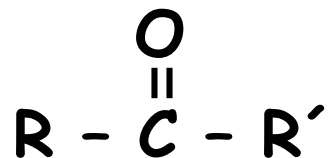
$\text{OHC} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{COOH}$  Azido 4-oxobutanoiko

d) Taldea **nagusia ez** denean, eta **C a kate nagusikoa ez** denean **Formil-** aurrizkia



2-formilziklokexanokarbonitrilo

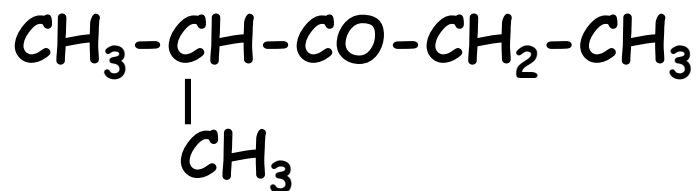
# Zetonak



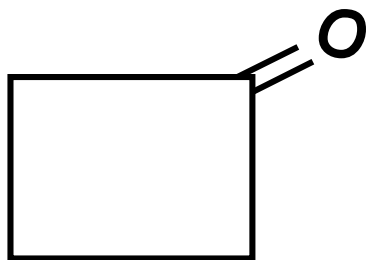
a) Taldea nagusia denean:

## 1. **-ona** atzizkia

hidrokarburoaren izena (-o) + lokatzailea + **-ona**  
bukaera

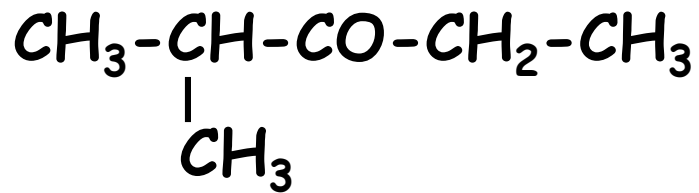


2-metilpentan-3-ona



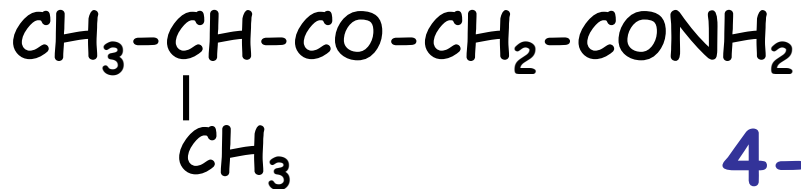
Ziklobutanona

## 2. Alkil alkil zetona

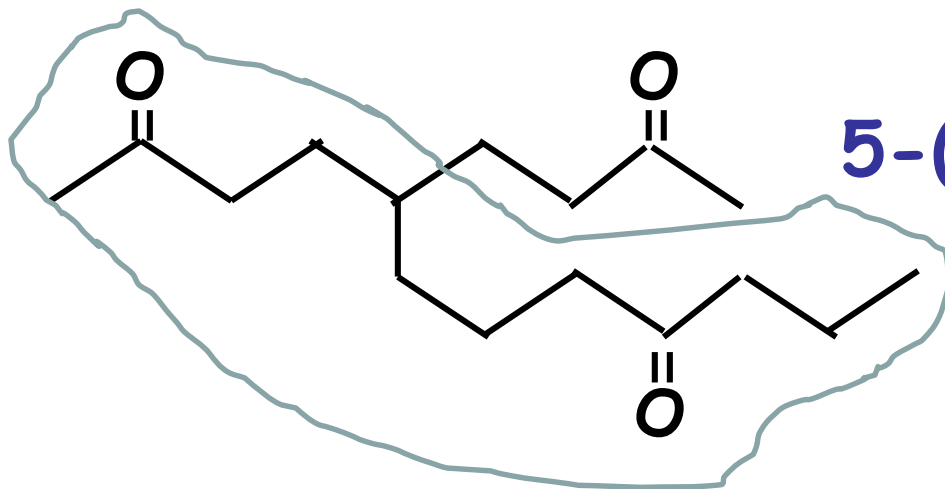


Etil isopropil zetona

b) Taldea nagusia ez denean: **-Oxo** aurrizkia



4-metil-3-oxopentanamida



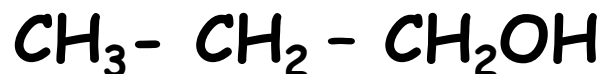
5-(3-oxobutil)dodeka-2,9-diona

# Alkoholak

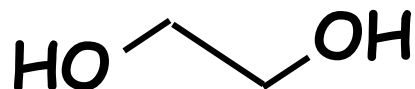


a) Taldea nagusia denean: **-ol** atzizkia

hidrokarburoaren izena (-o) + lokatzailea + **-ol** bukaera

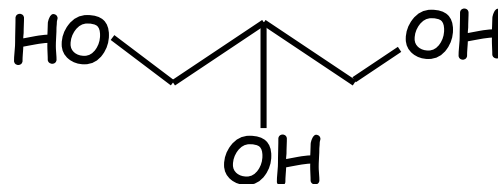


Propan-1-ol



Etano-1,2-diol

Etilenglikol

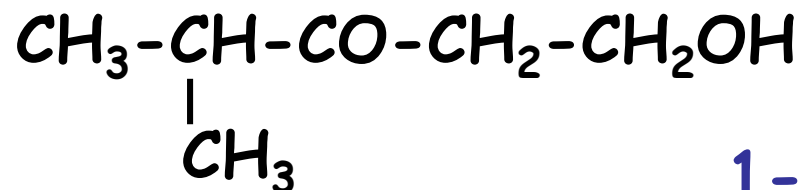


Propano-1,2,3-triol

Glizerol



b) Taldea nagusia ez denean: **-Hidroxi** aurrizkia



1-hidroxi-4-metilpentan-3-ona



Alkohol metilikoa \*



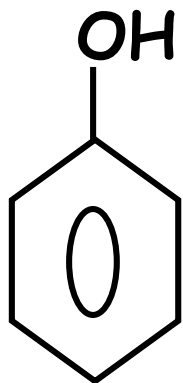
Alkohol etilikoa\*

\* Ez gomendatuak

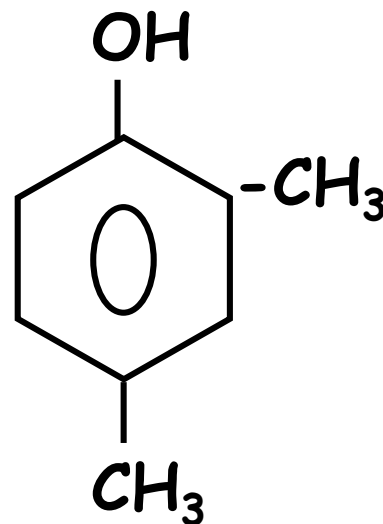
# Fenolak



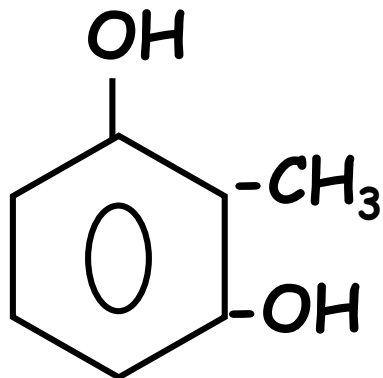
OH taldea, ziklo aromatikoezin lotuta duten konposatuak dira



Fenol  
Bentzenol

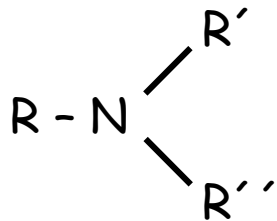


2,4-dimetilfenol



2-metilbentzeno-1,4-diol

# Aminak

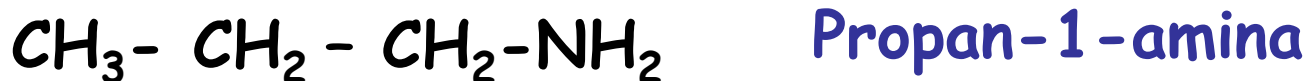


a) Taldea nagusia denean: **-amina** atzizkia

1. hidrokarburoaren izena (-o) + **-amina** bukaera

2. erradikalaren izena (-o) + **-amina** bukaera

- Amina Primarioak  $RNH_2$

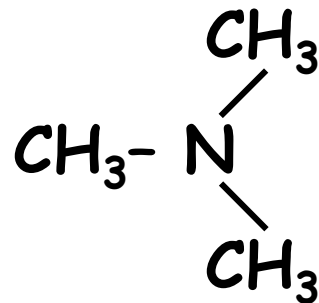


Propilamina

- Amina Sekundario  $R_2NH$  eta Tertziarioak  $R_3H$

• Ordezkatzaile berdinak

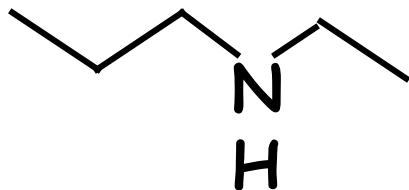
Trimetilamina



## • Ordezkatzaile ezberdinak

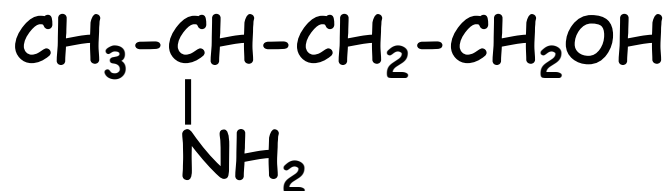
Amina primario nagusiaren, N-ordezkatzaileak bezela

Ordezkatzaile guztiak aipatuz



N-etilpropan-1-amina  
(etil)(propil)amina

b) Taldea nagusia ez denean: **amino-** aurrizkia



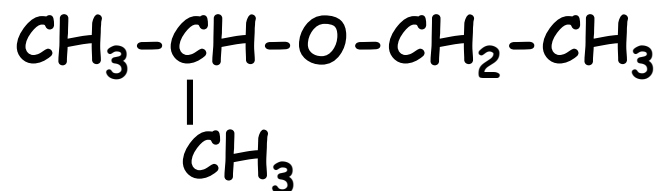
3-aminobutan-1-ol

# Eterrak

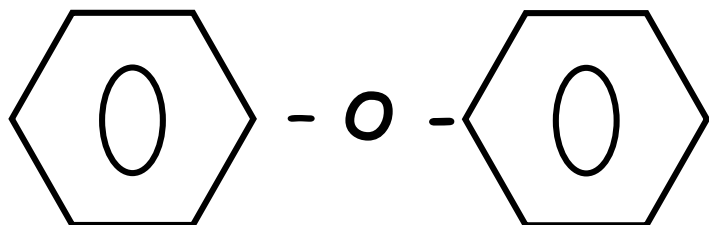


a) Taldea nagusia denean: **alkil alkil eter**

1 Erradikala + 2 erradikala + eter



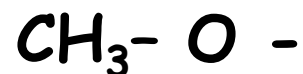
Etil isopropil eter



Difenil eter

b) Taldea nagusia ez denean: 1. **alkoxi**alkano

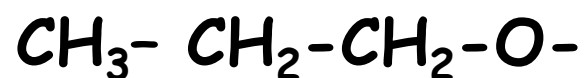
R-O-, taldearekin loturiko R'ri ematen zaio lehentasuna,  
R-O- egitura ordezkatzaille gisa izendatuz



Metiloxi edo Metoxi



Etiloxi edo Etoxi



Propiloxi edo Propoxi



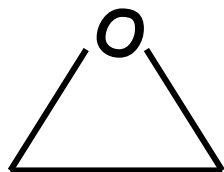
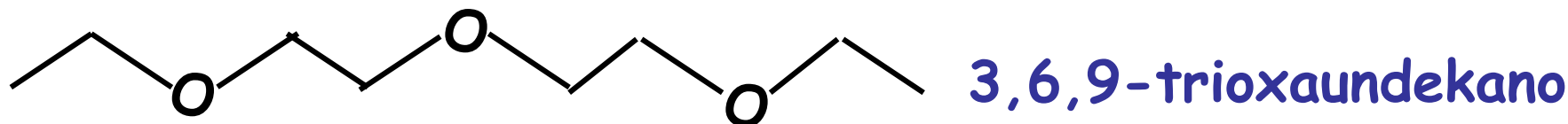
1-**etoxi**pentano

Etil pentil eter

## 2. - Oxa aurrizkia

Polieterak eta eter ziklikoak izendatzeko

Eterra hidrokarburo baten deribatua bezela hartzen da.  $-CH_2-$  taldearen ordeztuz  $-O-$ , taldea izanik. Talde hauen posizioa **-oxa** aurrizkiaz adierazten da



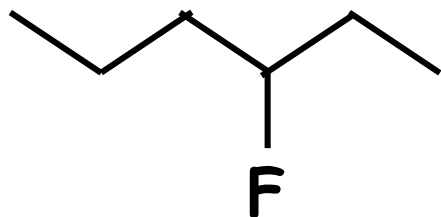
oxaziklopropano

# Deribatu Halogenatuak

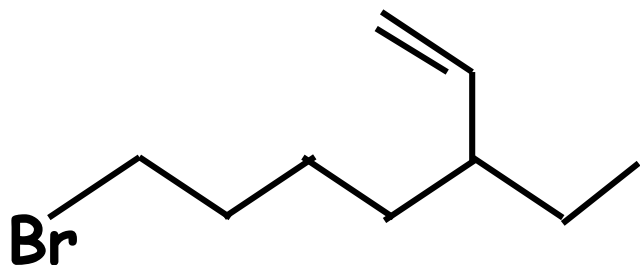
R - X

**1. Halo-** (fluoro-, kloro-, bromo-, iodo-)  
aurrizkiak + dagozkien lokatzaileak +  
hidrokarburoaren izena

Erradikaleen arauak jarraitzen dituzte, orden  
alfabetikoa barne



3-fluorohexano



7-bromo-3-etilhept-1-eno



Molekula baten hidrogeno guztiak, halogenoz ordezkaturata badaude, **Per-** aurrizkia erabiltzen da



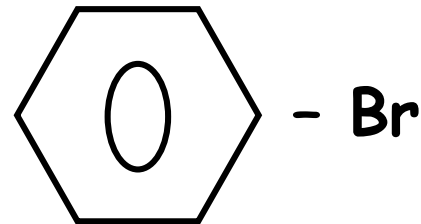
Izen arruntak:



## 2. Alkil edo alil haluro bezela



Etil kloruro



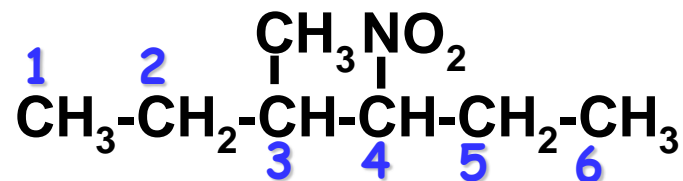
Fenil bromuro

# Nitroderibatuak

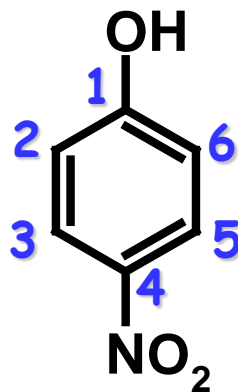


## Nitro- aurrizkia

Erradikaleen arauak jarraitzen dituzte, orden alfabetikoa barne



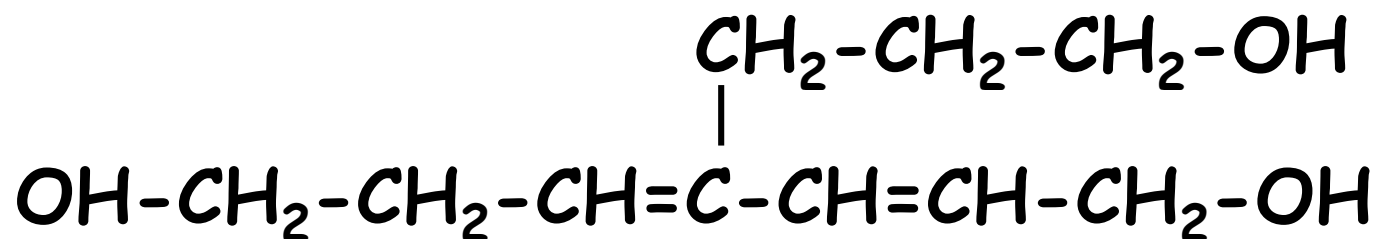
3-Metil-4-nitrohexano



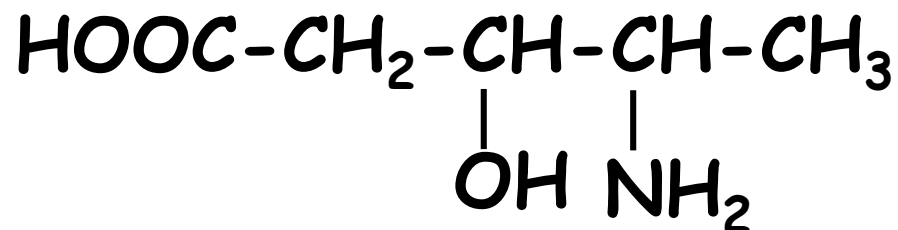
4-Nitrofenol  
*p*-Nitrofenol

# Izenak nagusitasunaren arabera

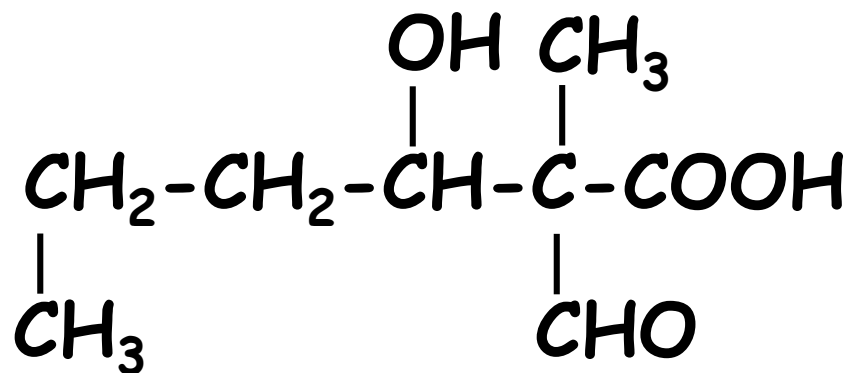
Funtzioa	nagusia	nagusia beste kate batean	ez nagusia
Azido Karboxilikoak	-OIKO	-KARBOXILIKO	KARBOXI-
Esterrak	-OATO	-KARBOXILATO	ALKOXIKARBONIL -
Amidak	-AMIDA	-KARBOXAMIDA	KARBAMOIL-
Nitriloak	-NITRILO	-KARBONITRILO	-ZIANO
Aldehidoak	-AL	-KARBALDEHIDO	-OXO /-FORMIL (ez nagusia eta beste katean)
Zetonak	-ONA	-	-OXO
Alkoholak	-OL	-	-HIDROXI
Aminak	-AMINA	-	AMINO-



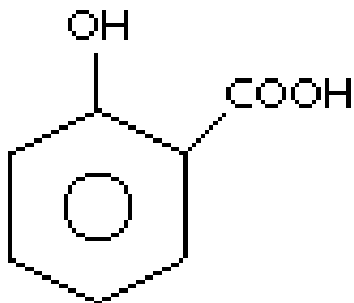
4-(3-hidroxiopropil)hept-2,4-dien-1,7-diol



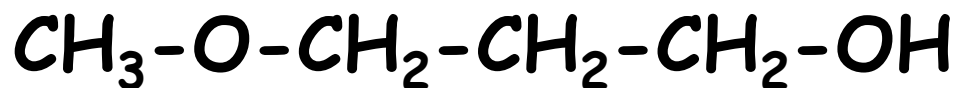
Azido 4-amino-3-hidroxi pentanoiko



Azido 2-formil-3-hidroxi-2-metil hexanoiko



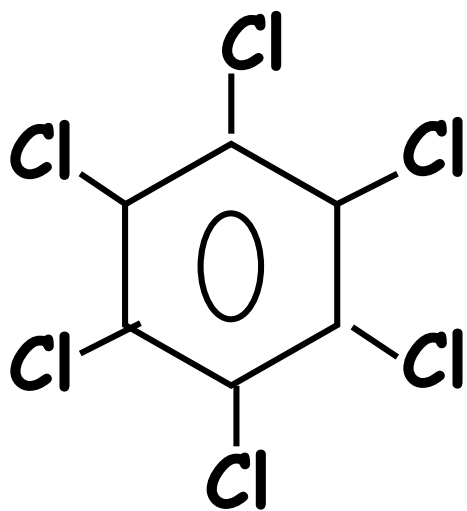
Azido 2-hidroxi benzoikoa



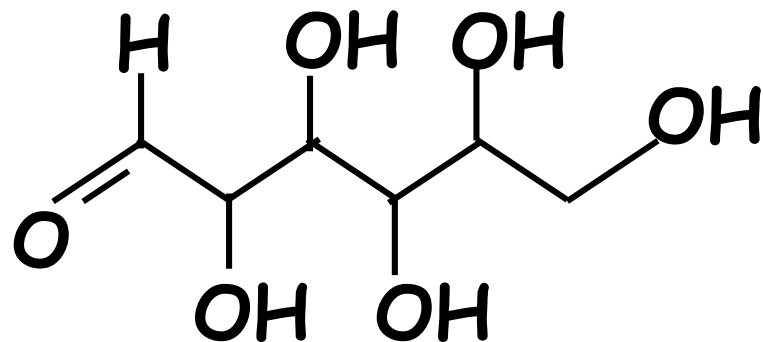
3-metoxi-1-propanola



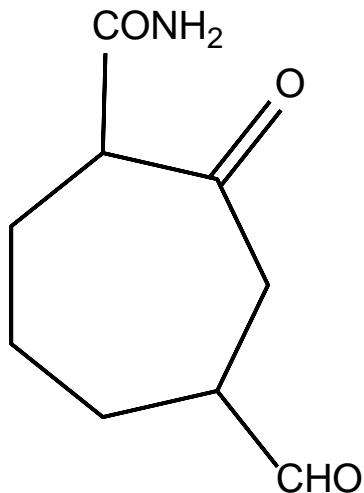
3-en-1-inilpentil zianuroa



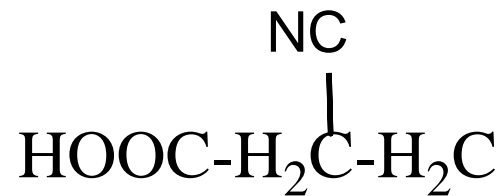
perklorobentzenoa



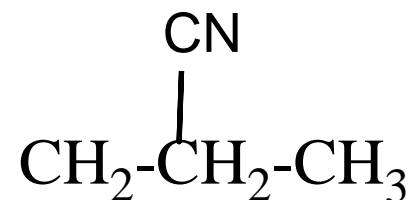
2,3,4,5,6-pentahidroxi hexanal



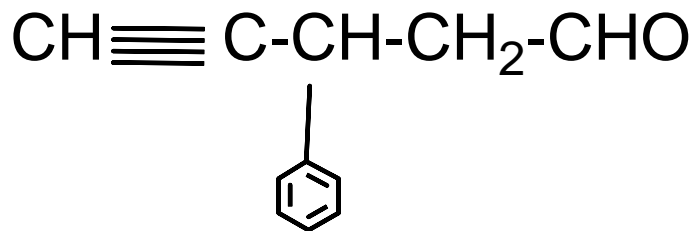
4-formil-2-oxozikloheptano-1-karboxamida



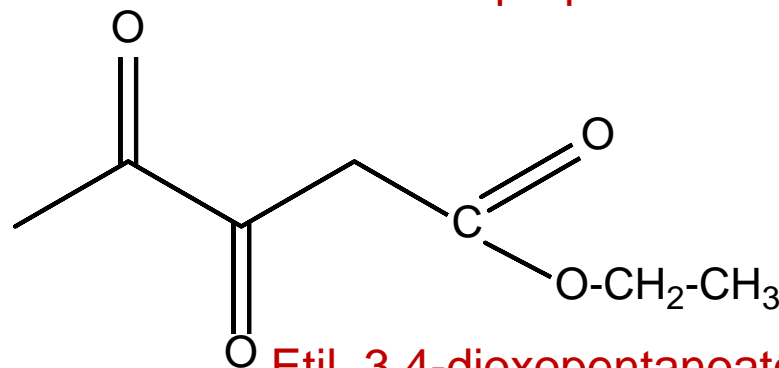
azido 2-zianopropanoikoa



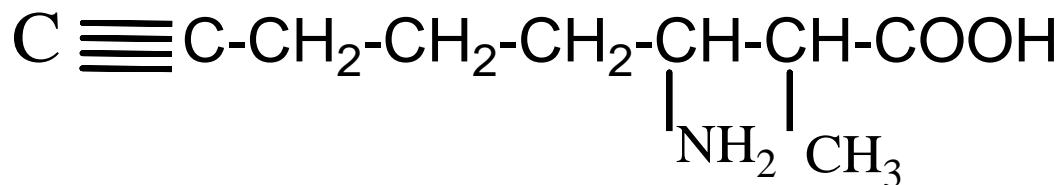
isobutanonitriloa  
isopropil zianuroa



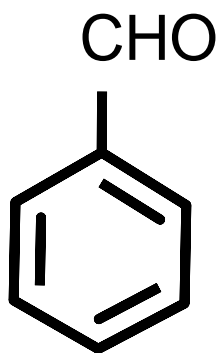
3-fenil-pent-4-inal



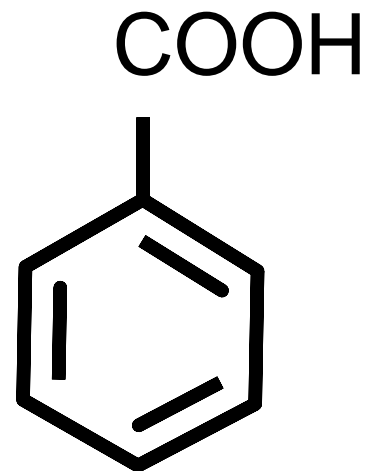
Etil 3,4-dioxopentanoato



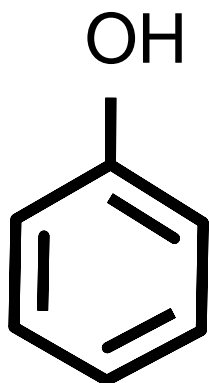
Azido 3-amino-2-metilokt-7-inoikoa



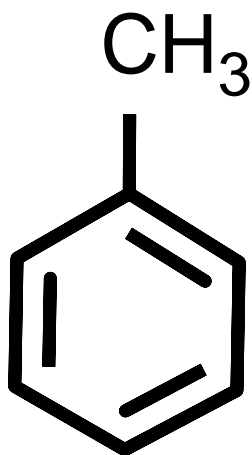
benzaldehidoa



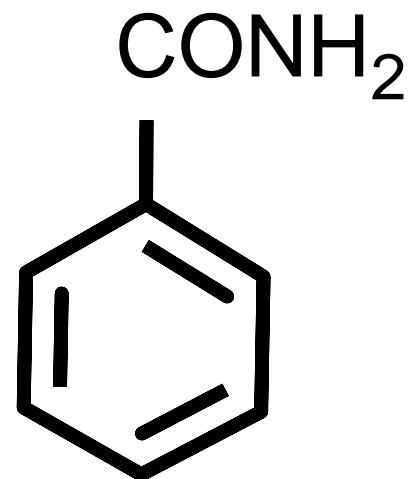
Azido bentzoikoa edo  
bentzeno karboxilikoa



fenola edo  
hidroxibentzenoa



tolueno edo  
metilbentzeno



bentzamida



Universidad del País Vasco Euskal Herriko Unibertsitatea



## 02.GAIA:

# ATOMOAK, MOLEKULAK , DISOLUZIOAK

Farmaziako graduaren 1.maila  
Kimika Orokorra eta Ez-organikoa



# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 1. Atomoa

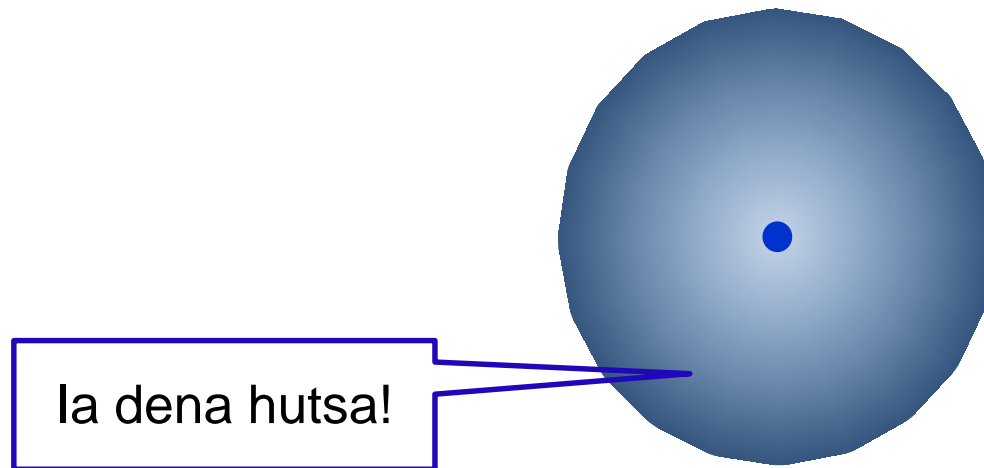
- Materiaren osagai nagusia da
- Rutherford (1911):
  - Masaren kantitaterik handiena oso txikia den zonalde batean kontzentratuta dago, nukleoa deritzona
- Nukleo honetan karga positiboa, protoiak, eta neutroiak, kargarik gabekoak daude
- Nukleoaren inguruan, karga negatiboa, elektroiak, kopuru berberan daude
- Elementu baten atomo bakoitzak protoi kopurua berezkoa du, beste elementuekiko desberdina

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 1. Atomoa

Nukleoa: diámetroa  $10^{-13}$  cm, karga: + Z

Azala: diámetroa  $10^{-8}$  cm karga: - Z



# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 1. Atomoa

- . Zenbaki atomikoa (Z) : protoi-kopurua
- . Masa-zenbakia (A) : protoi-kopurua + neutroi-kopurua
- . Neutroi-kopurua: A-Z
- . Elementuen jokaera kimikoa kanpoko elektroien menpe daude

		Karga elektrikoa		Masa	
		SI (C)	Atomikoa	NS (kg)	Atomikoa(u)
Nukleoa	Protoia	$+1,602 \times 10^{-19}$	+1	$1,672 \times 10^{-27}$	1,0073
	Neutroia	0	0	$1,675 \times 10^{-27}$	1,0087
Azala	Elektroia	$-1,602 \times 10^{-19}$	-1	$9,109 \times 10^{-31}$	0,0005468

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 1. Atomoa

. Elementu kimikoen atomo guztiek

- Z berbera dute
- Protoi eta elektroikopuru berbera dituzte

. Atomo baten adierazpena :

- E: ikurra
- A: masa-zenbakia
- Z: zenbaki atomikoa



# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 2. Isotopoak (nukleidoak eta nuklidoak)

. Z berbera eta A desberdina

Atomo baten masa ez dago bat masa zenbakiarekin(A)

$$A = p(\text{protoiak}) + n(\text{neutroiak})$$

.Partikula hauek biltzean masaren kantitate txikiren bat energia bihurtzen da → Energia nuklearra

$$E = mc^2$$

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 2. Isotopoak

.Masa isotopikoak

Isotopo baten masa kalkulatzeko konbenioz unitate bat aukeratu da:

Karbono-12-ren masak hamabigarren zatia, eta elementuaren masa unitate honekin konparatu da

. Masa-zenbakiak osoak dira, baina masa isotopikoak ez, noski Karbono-12 -rena izan ezik

- Bai masa atomikoa bai masa isotopikoa umaz neurtzen da

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 2. Masa atomikoak

. Elementu baten masa atomikoa masa isotopikoen batezbesteko ponderatua da, elementuaren isotopoen ugaritasuna kontuan izanik

Karbonoa


98,892%  $^{12}\text{C}$  12,00000 u

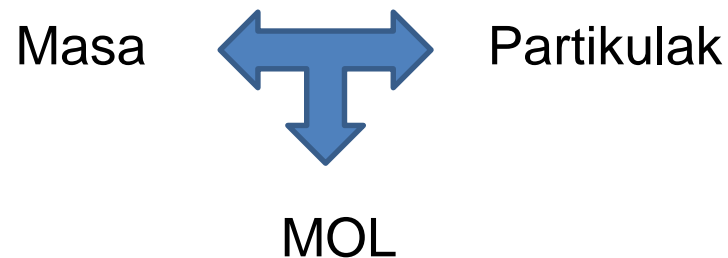
1,108%  $^{13}\text{C}$  13,00335 u.

$$\text{masa atómica} = \frac{12 \times 98,892 + 13,00335 \times 1,108}{100} = 12,011 \text{ u}$$

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 3. Mol-kontzeptua

- NOLA ZENBATU ATOMOAK ?  masa kontzeptua



-Nazioarteko sisteman, sustantziaren kantitatea partikula kopuruekiko erabilitako magnitudea da

*“Sustantzia-kantitatea da zein 12g C-12-elementuan dauden atomo-kopurua bera duena”*



# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 3. Mol-kontzeptua

ZEIN DA ATOMO-KOPURU HAU?

Avogadro konstantea:

$$N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Avogadro-zenbakia: mol bateko oinarrizko osagaiak. Mol gaseoso batek duen **molekula-kopurua** edo **atomo-kopurua** adierazten duen zenbakia

$$N_A = 6,022 \times 10^{23}$$

## Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

### 4. Masa Molekularra, Formula-Masa eta Masa Molarra (M)

- **Masa molekularra:** molekula baten masa, masa atomikoak gehituta kalkulaturik eta **umaz** adierazten da
- **Formula-masa:** formula unitate baten masa (konposatu ionikoetan) eta **umaz** adierazten da
- **Masa molarra:** mol baten masa, zein molekula-mol batena, zein atomo-mol batena izan daiteke. Hau da, beti mol baten masa, atomo batena edo molekula batena eta **gramoz** adierazten da

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 5. mol-kopurua eta baliokide-kopurua

$$\text{mol-kopurua} = \frac{\text{gramo-kopurua}}{\text{masamolarra}}$$

$$\text{Bk-kopurua} = \frac{\text{gramo-kopurua}}{\text{Bk-pisua}}$$

$$\text{Bk-pisua} = \frac{\text{masa molarra}}{\text{balentzia}}$$

$$\text{Bk-kopurua} = (\text{mol-kopurua}) \cdot \text{balentzia}$$

## Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

### 5. mol-kopurua eta baliokide-kopurua

$$\text{Baliokide - kopurua} = (\text{mol-kopurua}) \cdot \text{balentzia}$$

#### Balentzia azido-base erreakzioetan

- . Azidoarentzat : H-kopurua
- . Basearentzat: OH-kopurua
- . Gatzarentzat: ioiek elkartrukutzen duten karga-kopurua

#### Balentzia erredox erreakzioetan

- . Errreduktoreak galduko elektroikopurua
- . Oxidatzaileak hartuko elektroikopurua

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 6. Formula Molekularra eta Enpirikoa

### Formula Molekularra

Molekularen **konposizioa**  
adierazten du:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$

### Formula Enpirikoa

Molekulan atomoen **proporzioa**  
ematen du:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $(\text{HO})_2$

- . Formula Molekularra n aldiz enpiriko delakoa da  $\text{F.M.} = (\text{F.E.})n$
- . Orokorrean berdinak dira ( $n=1$ ) baina gerta daiteke desberdina izatea.

Formula Molekularra	Formula Enpirikoa
$\text{H}_2\text{O}$	$\text{H}_2\text{O}$
$\text{H}_2\text{O}_2$	$(\text{HO})_n$
$\text{H}_2\text{SO}_4$	$\text{H}_2\text{SO}_4$
$\text{C}_6\text{H}_6$	$(\text{CH})_6$
$\text{C}_2\text{H}_6$	$(\text{CH}_3)_2$

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 7. Disoluzioak

- . Erreaktiboak disolbatuta egoteak izugarrizko eragina du :
  - . Erreakzioari azkarra izatea uzten dio
  - . Ez dira oso tenperatura altuak behar
  - . Erreaktiboen arteko kontaktua hobetzen du
- . Disoluzioa
  - . Bi sustantzia edo gehiagoren arteko nahasketa homogeneoa da
  - . Beti disolbatzaile bat eta solutu bat edo gehiago daude
  - . Disolbatzailea: kantitaterik handienez dagoena da eta disoluzioaren egoera fisikoa finkatzen du
  - . Solutuak: gainontzeko sustantziak dira

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 7. Disoluzioak

Sailkapena

- . Egoera fisikoaren arabera:
  - . Gaseosoak
  - . Likidoak
  - . Solidoak
- . Osagaien arabera:
  - . Bitarrak
  - . Hirutarrak
  - . Lautarrak

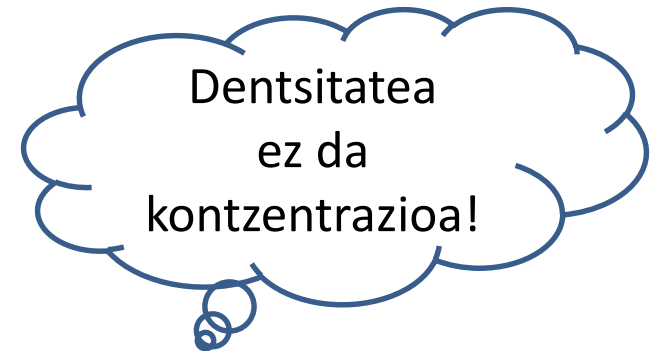


## 7. Disoluzioen kontzentrazioa

. “*Disoluzio edo disolbatzaile baten kantitatean disolbatuta dagoen solutuaren kantitateari kontzentrazioa deritzo*”

Kontzentrazioa adierazteko ohiko unitateak

- Masa/bolumena – ehunekobestea
- Gramo litroko, g/L
- Miloiko edo Biloiko parteak, ppm edo bpm, hurrenez hurren
- Frakzio molarra
- Molaritatea, M
- Molalitatea, m
- Normalitatea, N





## Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

### 7. Disoluzioaren kontzentrazioa: Ehunekobestea eta g/L

#### . **Masa-ehunekobestea**

Solutuaren gramoak 100 gramo disoluziotan disolbatuak

. Industria kimikoan erabiltzen da.

$$\% \text{ masa} = \frac{\text{solutu} - \text{gramoak}}{\text{disoluzio} - \text{gramoak}} \times 100$$

#### . **Bolumen-ehunekobestea**

Solutuaren bolumen-unitateak 100 bolumen-unitatetan disolbatuak

. Likidoekin erabilgarria.

$$\% \text{ bolumena} = \frac{\text{solutu} - \text{mL}}{\text{disoluzio} - \text{mL}} \times 100$$

## Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

### 7. Disoluzioaren kontzentrazioa: Ehunekobestea eta g/L

#### . *Masa / bolumena ehunekobestea*

Solutuaren gramoak 100 mL disoluzioko

#### . Medikuntza eta Farmazia arloan

$$\% \textit{masa - bolumena} = \frac{\textit{solutu - gramoak}}{\textit{disoluzio - mL}} \times 100$$

#### . *Gramo litroko*

$$\textit{g / L} = \frac{\textit{solutu - gramoak}}{\textit{disoluzio - L}}$$

## Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

### 7. Disoluzioaren kontzentrazioa: ppm, bpm

Oso kontzentrazio txikiak

. **Miloiko parteak, ppm**

$$ppm = \frac{mg - solutu}{disoluzio - L}$$

. **Biloiko parteak, ppb**

$$ppb = \frac{\mu g - solutu}{disoluzio - L}$$



Komenigarria da ppm eta beste unitate batzuen arteko erlazioa jakitea.

## Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

### 7. Disoluzioaren kontzentrazioa: frakzio eta ehuneko molarra

#### . Frakzio Molarra ( $\chi$ )

Zatidura bat da, osagai baten mol-kopurua zati disoluzioan daude mol-kopuru totala

$$\chi_i = \frac{\text{"i" osagaiaren molak}}{\text{mol kopuru}}$$

- . Osagai guztien  $\chi_i$  batuketa 1 da
- . Ehuneko Molarra: frakzio molarra bider ehun

## Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

### 7. Disoluzioaren kontzentrazioa: M, m, N

#### . Molaritatea

$$M = \frac{\textit{solutu-molak}}{\textit{disoluzio-litroak}}$$

#### . Molalitatea

$$m = \frac{\textit{solutu - molak}}{\textit{disolbatzaile - kilogramoak}}$$

#### . Normalitatea

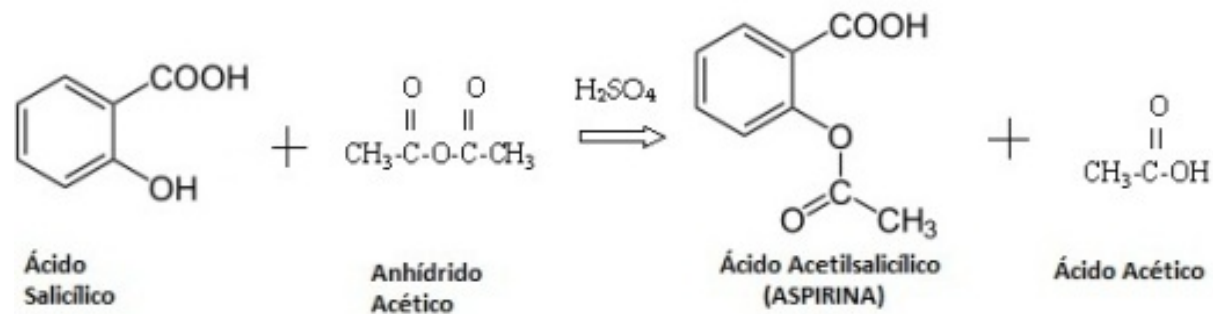
$$N = \frac{\textit{solutu - baliokideak}}{\textit{disolbatzaile - litroak}}$$

$$N = M \cdot \textit{balentzia}$$

# Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak

## 8. Estekiometria

. Erreakzio gerta dadin osagai bakoitzaren beharrezkoak diren kantitate erlatiboak eta minimoak determinatzen duena da.



Hasierako molak	2 mol	3 mol	????	
Erreakzioan	2 mol	2 mol	2 mol	2 mol
Amaieran	-	1 mol	2 mol	2 mol

Erreaktibo mugatzailea: azido salizikoa

Gehiegizko erreaktiboak: anhídrido azetikoak

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

1. Kalkulatu Litioren masa atomikoa honako bi isotopo hauez osatuta dagoela kontuan izanik:  ${}^6\text{Li}$ (6,02 u) eta  ${}^7\text{Li}$ (7,02u). Hauek dira bakoitzaren ugaritasuna, hurrenez hurren: 7,42% eta 92,48%.

-----

$$\text{Li} - \text{masa atomikoa} = \frac{(6,02 \cdot 7,42) + (7,02 \cdot 92,48)}{100} = 6,938 \text{ uma}$$

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

2. Sufrea hiru isotopoz osatuta dago. Honako hauek dira dagozkion masa eta ugaritasun erlatiboa :
- $^{32}\text{S}$ , %95,( 31,97 u),  $^{33}\text{S}$ , %0,8 (32,97 u) eta  $^{34}\text{S}$ , %4,2 (33,97u).  
Zenbat S-atomoak daude S- gramo batean?

$$S - \text{masa atomikoa} = \frac{(31,91 \cdot 95) + (32,97 \cdot 0,8) + 33,97 \cdot 4,2}{100} = 32,062 \text{ uma}$$

$$1g \frac{1 \text{ mol } S}{32,062} \frac{N_A \text{ S-atomo}}{1 \text{ mol } S} = 1,87 \cdot 10^{22} \text{ S-atomo}$$



Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

3. Cobre(II) nitrato-zko 2,51 mol ditugu. Kalkulatu:

a) Cu eta O atomo –kopurua

b) N eta O atomo-molak

c) Cu-gramoak

$$a) \quad 2,51 \text{ mol Cu(NO}_3)_2 \frac{1 \text{ at - mol Cu}}{1 \text{ mol Cu(NO}_3)_2} \frac{N_A \text{ Cu - atomo}}{1 \text{ at - mol Cu}} = 1,51 \cdot 10^{24} \text{ Cu - atomo}$$

$$2,51 \text{ mol Cu(NO}_3)_2 \frac{6 \text{ at - mol O}}{1 \text{ mol Cu(NO}_3)_2} \frac{N_A \text{ O - atomo}}{1 \text{ at - mol Cu}} = 9,07 \cdot 10^{24} \text{ O - atomo}$$

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

3. Cobre(II) nitrato-zko 2,51 mol ditugu. Kalkulatu:

- a) Cu eta O atomo –kopurua
- b) N eta O atomo-molak
- c) Cu-gramoak

b) 
$$2,51 \text{ mol Cu(NO}_3)_2 \frac{2 \text{ at - mol N}}{1 \text{ mol Cu(NO}_3)_2} = 5,01 \text{ N - ren mol - atomo}$$

$$2,51 \text{ mol Cu(NO}_3)_2 \frac{6 \text{ at - mol O}}{1 \text{ mol Cu(NO}_3)_2} = 15,05 \text{ O - ren mol - atomo}$$

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

3. Cobre(II) nitrato-zko 2,51 mol ditugu. Kalkulatu:

a) Cu eta O atomo –kopurua

b) N eta O atomo-molak

c) Cu-gramoak

c)

$$2,51 \text{ mol Cu(NO}_3)_2 \frac{187 \text{ g Cu(NO}_3)_2}{1 \text{ mol Cu(NO}_3)_2} \cdot \frac{63 \text{ g Cu}}{187 \text{ g Cu(NO}_3)_2} = 158,13 \text{ g Cu}$$

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

4. Kalkulatu 57,35 gramo nitrogenu molekulan-tan dauden hurrengo kantitateak:

- a) atomo-molak
- b) molekula-molak
- c) atomoak
- d) molekulak

a)

$$57,35 \text{ g } N_2 \frac{1 \text{ mol } N_2}{28 \text{ g } N_2} \cdot \frac{2 \text{ mol-atomo } N}{1 \text{ mol } N_2} = 4,09 \text{ N-ren mol-atomo}$$

b)

$$57,35 \text{ g } N_2 \frac{1 \text{ mol } N_2}{28 \text{ g } N_2} = 2,05 \text{ molekula-mol}$$

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
**ARIKETAK**

4. Kalkulatu 57,35 gramo nitrogenu molekulan-tan dauden hurrengo kantitateak:

- a) atomo-molak
- b) molekula-molak
- c) atomoak
- d) molekulak

c)

$$57,35 \text{ g } N_2 \frac{1 \text{ mol } N_2 N_A \text{ } N_2\text{-molekula } 2 \text{ } N\text{-atomo}}{28 \text{ g } N_2 \quad 1 \text{ mol } N_2 \quad 1 \text{ } N_2\text{-molekula}} = 2,46 \cdot 10^{24} \text{ } N\text{-atomo}$$

d)

$$57,35 \text{ g } N_2 \frac{1 \text{ mol } N_2 N_A \text{ } N_2\text{-molekula}}{28 \text{ g } N_2 \quad 1 \text{ mol } N_2} = 1,23 \cdot 10^{24} \text{ } N_2\text{-mol}$$

Atomoak, molekulak , disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

5. 1,23 g duen NaCl-zko lagin bat uretan disolbatzen da, disoluzioaren bolumena 100 mL izan arte. Zein da disoluzioaren kontzentrazio molarra?

Masa atomikoak: Na: 22,90; O: 15,999; H: 1,0079

$$M = \frac{1,23}{\frac{(23 + 35,5)}{[0,1 L]}} = 0,21 M$$

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
ARIKETAK

6. 0,126 M den NaOH disoluzio bat hartuta, zenbat bolumena diluitu behar da 500 mL arte, kontzentrazio berria  $1,45 \cdot 10^{-2}$  M izan dadin?

$$1,45 \cdot 10^{-2} \text{ M} = \frac{x}{0,5 \text{ L}} \quad x = 7,25 \cdot 10^{-3} \text{ molak}$$

$$0,126 \text{ M} = \frac{7,25 \cdot 10^{-3}}{x} \quad x = 57,5 \text{ mL}$$

edo:

$$0,5 \text{ L} \frac{1,45 \cdot 10^{-2} \text{ mol}}{1 \text{ L}} \frac{1 \text{ L d.}}{0,126 \text{ mol}} = 57,5 \text{ mL d.}$$

Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
**ARIKETAK**

7. Pisutan % 35,01 den eta  $1,38 \text{ g/cm}^3$  dentsitatea duen NaOH disoluzioa dugu. Kalkulatu disoluzioaren M, m, N, eta frakzio molarra.

Masa atomikoak: Na: 22,90; O: 15,999; H: 1,0079

$$\frac{35,01 \text{ g NaOH}}{100 \text{ g d.}} \cdot \frac{1,38 \text{ g d.}}{1 \text{ mL d.}} \cdot \frac{1000 \text{ mL d.}}{1 \text{ L d.}} \cdot \frac{1 \text{ mol g d.}}{40 \text{ g d.}} = 12,1 \text{ M} = 12,1 \text{ N}$$

100 g disoluzioa: 35,01 g solutu eta 64,99 g disolbatzilea

$$\chi = \frac{\frac{35,01}{40}}{\frac{35,01}{40} + \frac{64,99}{18}} = 0,18 \quad m = \frac{\frac{35,01 \text{ g}}{40 \text{ g}} \cdot 1 \text{ mol}}{64,99 \cdot 10^{-3} \text{ Kg disolbatzaile}} = 13,46 \text{ m}$$



Atomoak, molekulak, disoluzioak: kontzentrazioaren unitateak.  
**ARIKETAK**

8. 12 molarra den eta  $1,38 \text{ g/cm}^3$  dentsitatea duen NaOH disoluzioa dugu. Kalkulatu disoluzioaren kontzentrazioa ehunekobeste pisutan, m-tan, N-tan, eta frakzio molarretan.

Masa atomikoak: Na: 22,90; O: 15,999; H: 1,0079

$$\frac{12 \text{ mol NaOH}}{1 \text{ L d.}} \cdot \frac{0,001 \text{ L d.}}{1,38 \text{ g d.}} \cdot \frac{40 \text{ g NaOH}}{1 \text{ mol NaOH}} \cdot 100 = \% 34,78$$

$$N = M \cdot \text{balentzia} = 12 \text{ N}$$

$$x = \frac{\frac{34,78}{40}}{\frac{34,78}{40} + \frac{65,22}{18}} = 0,193$$

$$m = \frac{\frac{34,78 \text{ g}}{40 \text{ g}} \cdot 1 \text{ mol}}{65,22 \cdot 10^{-3} \text{ Kg disolbatzaile}} = 13,31 \text{ m}$$

# 03.GAIA

## AZIDO-BASE SISTEMAK

Farmaziako graduaren 1.maila  
Kimika Orokorra eta Ez-organikoa  
2019/20 kurtsoa

# TEMA 03. AZIDO-BASE SISTEMAK

## AURKIBIDE OROKORRA

- 1. Sarrera**
- 2. Teoriak**
- 3. pH-ren kalkuluak**
- 4. Disoluzio indargetzaileak**

03.GAIA

**03.1.SARRERA**

# HASI BAINO LEHEN.....

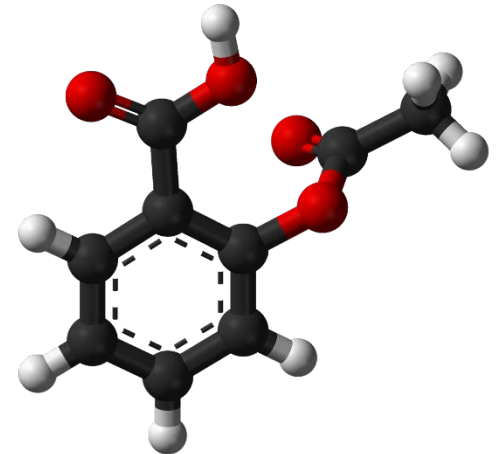
## 1. AZIDO, ZER DA AZIDO?

Karbonato ioia?

## 1. ZER DAGO AZIDO GUZTIETAN?

## 2. INPORTANTEA DA AZIDOTASUNA FARMAZIA ARLOAN?

Esan ahal da gure organismo erreakzio gehienak azido-base motakoak direla



# GALDERATXOAK

## ADIBIDEZ.....

. Buffer-sistemak:

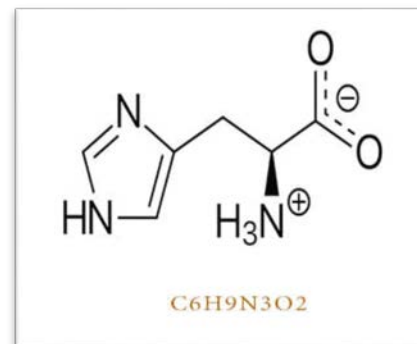
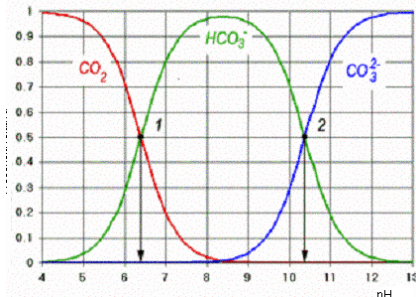
. sistema  $\text{H}_3\text{PO}_4 / \text{H}_2\text{PO}_4^- / \text{HPO}_4^{2-} / \text{PO}_4^{3-}$ , gernuan, hezurretan, plasman

. sistema  $\text{H}_2\text{CO}_3 / \text{CO}_3^{2-}$

. Hemoglobina, histidina

. Plasman  $\text{Ca}^{2+}$  askearen kontzentrazioa pH-arekiko menpekoa da.

Alkalinoa izatekotan behera joaten da  $\text{Ca}^{2+}$  -ren kontzentrazioa



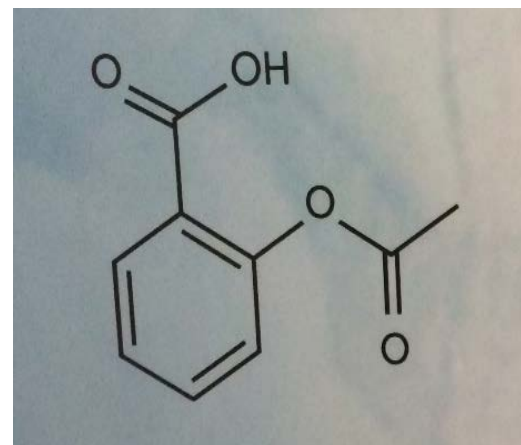
Histidina

Farmaziako graduarentzat garrantzi handiko gaia da

- Azidoen kontrako medikamentuen garapena: karbonatoak, hidrogenokarbonatoak eta hidroxidoak, nagusiki.
- Organismoaren barruko buffer-disoluzioak: hemoglobina, histidina, fosfatodiazidoa.
- Prozesu biologikoetan partekatzen duten espezie azidoak: sodio katioia, potasio katioa, eta abar, nerbio-bultzada eta truke ionikoen arduradunak.

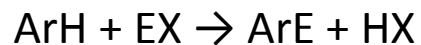


Aspirinen ontzia 1920.urtekoa



Felix Hoffmannek Bayer enpresako kimikari alemaniarra, azido azetilsalizilikoak prestatu zuen. 1899.urtean aspirina izenaz patentatu zuen, buruko mina, hagineta mina eta erreumatismoaren kontrako farmako gisa.

**azido saliziliko** (edo azido 2-hidroxibentzoiko)





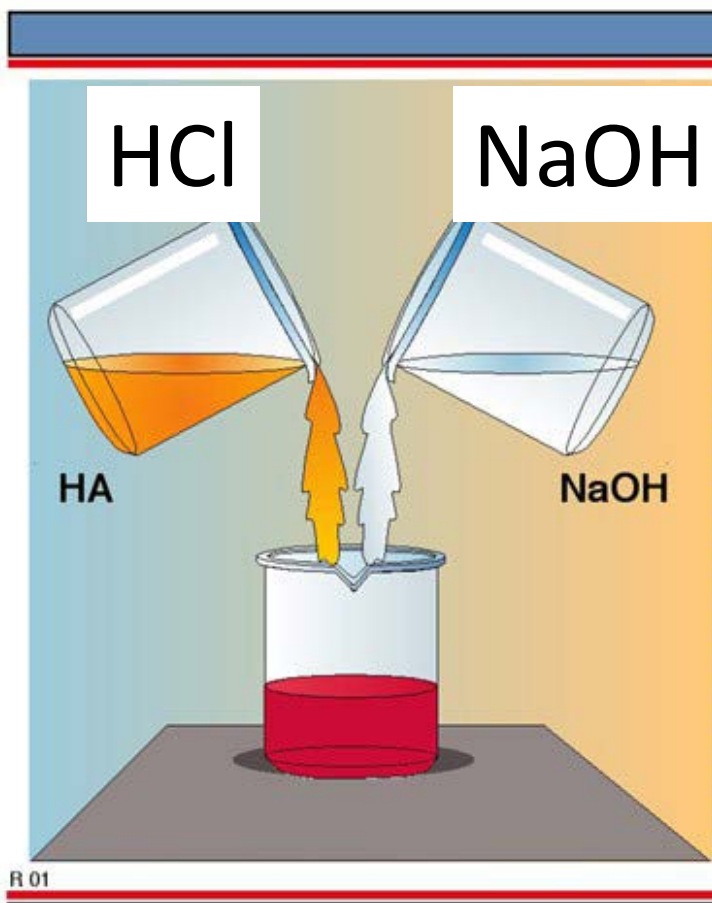
- Kimikan nahitaezkoak diren azidotasunaren eta basikotasunaren kontzeptuak aspalditik definituta daude
- Dagoeneko XIII. mendean azido mineralak aipatuta agertzen dira zenbait idazlanetan
- Azidoak eta baseak diren konposatu batzuk ezagutzen zituzten.



Alkimisten laborategia  
Pragako teknika-museotik aterata

- . “aceite de vitriolo” ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ )
- . “agua fuerte” ( $\text{HNO}_3$ )
- . “ácido muriático” ( $\text{HCl}$ )
- . “agua regia” ( $\text{HCl}/\text{HNO}_3$ )(1:3)
- . “agua viva” ( $\text{EtOH}$ )

- 1890.urtean baino lehenago zientzialariek azido edo base den jakiteko dastatu egin zuten!
- Azidoak garratzak dira eta baseak mikatzak
- Ez du ematen osasungarria izatea, ezta?



### 1.egoera

HCl 0,1 M 200 mL

NaOH 0,2 M 100 mL

### 2.Egoera

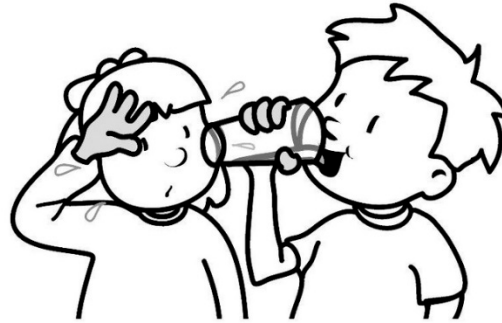
HCl 0,5 M 200 mL

NaOH 0,2 M 100 m

### 3. Egoera

HCl 0,1 M 200 mL

NaOH 0,5 M 100 mL



2.Egoera

3.Egoera



1.Egoera

03.GAIA

**03.2.TEORIAK**

- 1743. urtean A. Lavoisierrek azido guztien osagaia O zela pentsatu zuen Handik honen izena: *Oxígeno* hitzak azidoen sortzailea esanahia du
- H. Davyk ondorioztatu zuen:
  - . 1810 urtean: hidrogenoa osagai azidotzailea zela
  - . 1814 urtean: azidotasuna hainbat elementuetako konbinaketa berezi bati esleitu zion
- Hamarkada batzuk pasa ondoren lehen teoriak proposatu zituzten

- Hurrengoak dira teoria hauek kronologikoki ordenatuta:
  - Antoine Lavoisier (1743)
  - Humpry Davy (1810)
  - Svante Arrhenius (1884)
  - Franklin (1914)
  - Johanes Brönsted eta Thomas Lowry (1923)
  - Gilbert Newton Lewis (1923)
  - H. Lux-Flood (1940)
  - R. G. Pearson (1963)

Nagusiki hiru teoría hauek aztertzen dira

- Antoine Lavoisier (1743)
- Humpry Davy (1810)
- **Svante Arrhenius (1884)**
- Franklin (1914)
- **Johanes Brönsted eta Thomas Lowry (1923)**
- **Gilbert Newton Lewis (1923)**
- H. Lux-Flood (1940)
- R. G. Pearson (1963)



- **Svante Arrhenius (1884)**

**Azidoa da.....**

**Basea da...**

- **Johanes Brönsted eta Thomas Lowry (1923)**

**Azidoa da.....**

**Basea da....**

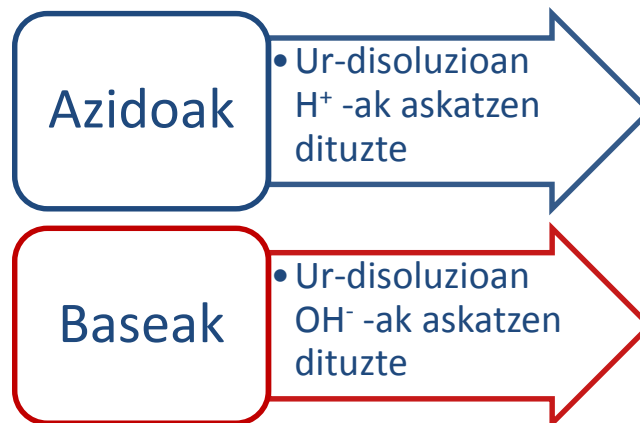
- **Gilbert Newton Lewis (1923)**

**Azidoa da..**

**Basea da...**

## Hastapenak: Arrenihusen teoria

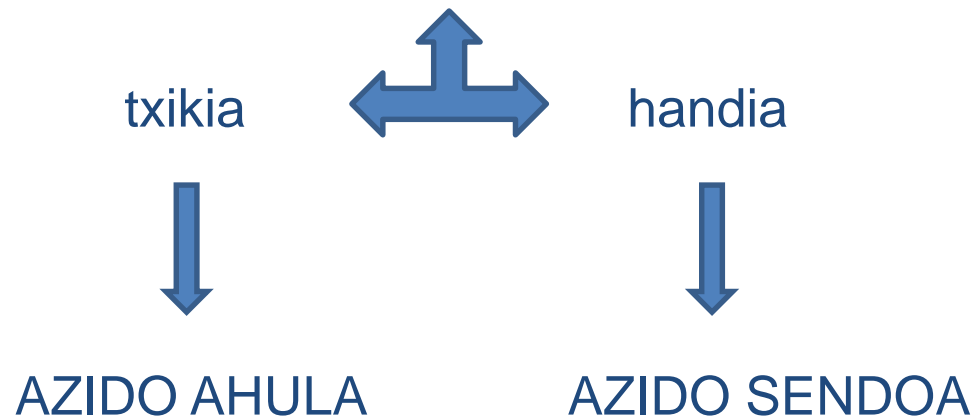
- Svante Arrhenius kimikari suitzarrak garatu zuen
- Azidoak funtsean protoi-emaeleak direla konturatu zen
- Azido guztiak hidrogenoz osatuta daude
- Elektrolito-disoziazioaren teoriarin oinarritzen da, **protoia edo hidrogenioia,  $H^+$** , elektrolito berezitzat hartuta



## Hastapenak: Arrheniusen teoria

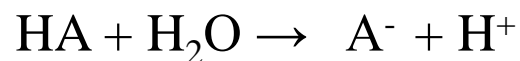
- Azidoak funtsean protoi-emaileak direla konturatu ziren
- Disoziazio-maila desberdina izan daiteke

### DISOZIAZIOA



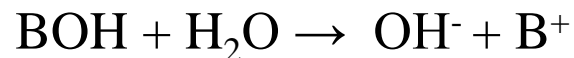
## Hastapenak: Arrhenius-en teoria

Azidoak, HA: protoiak askatzen dituzten sustantziak dira.

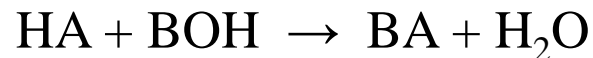


Zergatik deitzen da protoia?

Baseak , B(OH): hidroxilo taldeak askatzen dituztenak dira.



Azidoek eta baseek elkarri neutralizatzen diote, gatza eta ura eratuz.



**NEUTRALIZAZIOA**

## Bronsted-Lowryren teoria

### Arrheniusen teoriaren kontrako arrazoiak

- Arrheniusen definiziotik kanpo geratzen diren sustantzia asko daude
- Sustantzia basikoa edo anfoteroa  $\text{OH}^-$  taldeak izan behar ditu
- $\text{NH}_3$  sustantziak base modura jokutzen du eta ez dauka hidroxilo talderik.
- Hamaika ioi izaera basiko gogorra dute nahiz eta  $\text{OH}^-$  talderik ez izan :  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{S}^{2-}$ ,  $\text{O}^{2-}$ , eta abar.
- Badaude azidoak ez diren sustantziak H-a izan arren:  $\text{NH}_3$

## Bronsted-Lowryren teoria

### Arrheniusen teoriaren kontrako arrazoiak

- Azido-base erreakzioak bakarrik uretan gerta daitekeela suposatzen du.
- Baita egoera solidoan ere suerta daiteke.
- Hidrogenioia/protoia  $H^+$  eran suposatzen du, baina ur inguruan benetako espeziea  $[H(H_2O)_n]^+$  da, erosotasunaz  $H_3O^+$  erabiltzen da.
- Kimikariok uretan gehien erabiltzen ditugun teoria Bronsted-Lowry-koa da.



**Honen arabera protoiak elkartrukatzen dira.**

## Bronsted-Lowryren teoria

- Azidoak: protoiak askatzen dituzten sustantziak dira, eta hori egitean base bihurtzen dira
  - Baseak: protoiak onartzen dituzten sustantziak dira, eta hori egitean azido bihurtzen dira.
- 
- Azidoak (a) eta baseak (b) orekan daude



## Bronsted-Lowryren teoria

- Azidoak (a) eta baseak (b) orekan daude



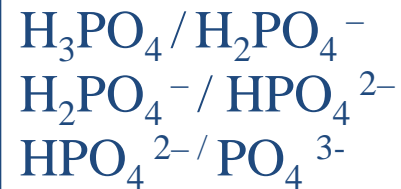
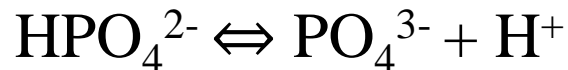
- Aurreko erreakzioan adierazi denez, a eta b **protolitoak** dira, a/b sistema konjokatua eratzen dutenak.

Protoien trukez  
harremanean dauden  
espezie kimikoak



## Bronsted-Lowryren teoria

- Bronsted-Lowry ur-disoluzioan gehien erabiltzen da
- Protoien trukez orekan dauden protolito guztiek sistema bat osatzen dute
- $\text{H}_3\text{PO}_4/\text{H}_2\text{PO}_4^-/\text{HPO}_4^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$  protolito-sistema



**Sistema konjokatuak**

## Bronsted-Lowryren teoria

- $H^+$  protoia espezie ezegonkorra denez, bi azido-base sistema beharrezkoak dira



Azido eta basearen  
arteko erreakzioa

protolisia

HCl/Cl<sup>-</sup> ( $a_1/b_1$ ) eta  
NH<sub>4</sub><sup>+</sup>/NH<sub>3</sub> ( $a_2/b_2$ )  
sistema  
konjokatuak dira



## Bronsted-Lowryren teoria

- Azido-base **orekako norantza espezieen azidotasunaren araberakoa da.** Izan ere, azidotasuna eta basikotasuna erlatiboak dira. Honela:



## Bronsted-Lowryren teoria

- Idea hau disolbatzailearen eraginarekin erlazionatuta dago
- Azidoen eta baseen sendotasuna urarenarekin konparazioz finka daiteke.
- Ura erreferentziako sustantzia



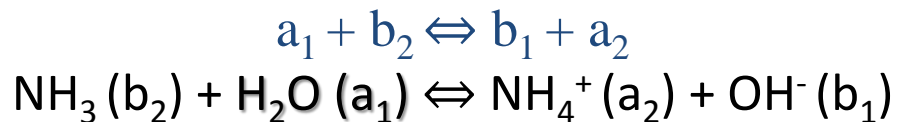
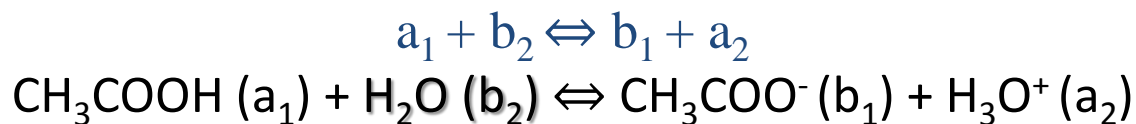
- disolbatzaileetako erabiliena
- molekula protoiduna
- portaera anfoteroa

- Hau dela eta, jarraian uraren azido-base jokaera aztertuko dugu Brønsted-Lowryren definizioaren arabera.

## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

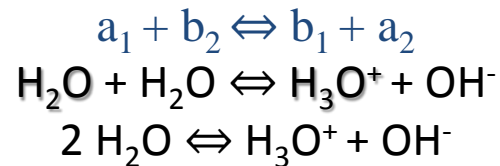
Ura konposatu anfoteroa da; alegia, azido eta base modura joka dezake. Ondoko erreakzioetan jokaera anfoteroaren bi adibide ikus daitezke:

- base gisa, azido azetikoaren aurrean
- azido gisa, amoniakoaren aurrean



## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

- Anfoteroa denez, urak AUTOPROTOLISIA egiten du



- Oreka honi dagokion konstanteari,  $K_w$ , **uraren autoprotolisiaren konstantea** edo **uraren biderkadura ionikoa** deritzo

- $P = 1 \text{ atm}$  eta  $T = 298 \text{ K}$  baldintzapean

$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+] \cdot [\text{OH}^-] = 10^{-14}$$

Baldintza  
guztietan ???

- Beraz, ur puruan hidroxilo eta oxonio ioien kontzentrazioa bera da: hots,

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = 10^{-7}$$

## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

- Uretan edozein protolito disolbatutakoan hidroxilo eta hidronio ioien kontzentrazioa ez da izango berbera:  $[H^3O^+] \neq [OH^-]$

- Protolito azidoaren eragina

$[H^3O^+] > 10^{-7}$  eta  $[OH^-] < 10^{-7}$ ,  $K_w$  konstanteak agintzen duen legez.

- Protolito basikoaren eragina

$[H^3O^+] < 10^{-7}$  eta  $[OH^-] > 10^{-7}$ ,  $K_w$  konstanteak agintzen duen legez.

## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

- Horrela

ur purutan  $\text{pH}=7$

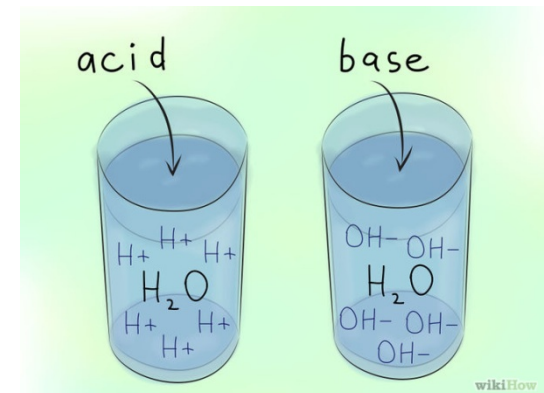
disoluzio azidoetan  $\text{pH}<7$  eta  $[\text{H}^3\text{O}^+] >10^{-7}$ ,  $[\text{OH}^-] <10^{-7}$

disoluzio basikoetan  $\text{pH}>7$  eta  $[\text{H}^3\text{O}^+] <10^{-7}$ ,  $[\text{OH}^-] >10^{-7}$

- Mugak daude?

Existitzen dira  $\text{pH}$  negatiboak:

karboranoa  $\text{pH}= -18$





## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

- Protolitoen ondorioz sorraraziko hidroxilo eta hidronio ioien kontzentrazioen aldaketa adierazteko, **Sørensenek** 1909.urtean proposatutako pH eskala erabiltzen da nagusiki

$$0 < \text{pH} < 14$$

$$\text{pH} = -\log[\text{H}_3\text{O}^+]$$

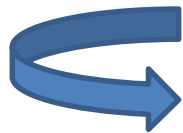
Jatorria?

- Ura erreferentziako disolbatzailea da
- Azidoak  $0 < \text{pH} < 7$                       Baseak  $7 < \text{pH} < 14$

Gas egoeran egindako pHren eskala absolutuak badaude

## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

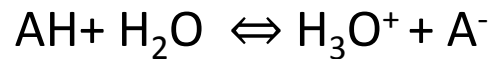
- Nola jakin ea protolito batek protoi ugari hartu edo askatu egiten duen?
- NOLA KUANTIFIKATU PROTOLITOEN SENDOTASUNA?



Konstantearen  
beharra

## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

- Protolito azidoa



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

$$pK_a = -\log K_a$$

- Protolito basikoa



$$K_b = \frac{[HA][OH^-]}{[A^-]}$$

$$pK_b = -\log K_b$$

K eta pK alderantziz  
proportzionalak dira

## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

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

$$K_a K_b = \frac{[H_3O^+][A^-][HA][OH^-]}{[AH][A^-]}$$

$$K_b = \frac{[HA][OH^-]}{[A^-]}$$

$$K_a K_b = [H^+][OH^-] = K_w = 10^{-14}$$


$$pK_a + pK_b = 14$$

## Bronsted-Lowryren teoria: uraren azido-base jokaera

- $K_w$ -k espezie konjokatuaren konstanteak erlazionatzen ditu.

$$K_a K_b = [H^+].[OH^-] = K_w = 10^{-14}$$

- Izan ere,  $K_a$  eta  $K_b$  arteko biderkadura kostantea da



Protolito azidoak azidotasuna handia izanez gero, dagokion protolito basiko konjokatuak basikotasun txikia izango du



espeziearen azidotasuna



konjokatuaren basikotasuna

## Bronsted-Lowryren teoria: beste eskala bat

- Aurreko pH-mugak (0-14) gainditzen duten eskala zehatzagoak, ere, badaude
- pH negatiboak erabiltzen dira



Azido oso sendoa:  $pK_a < -1,74$

Azido sendoa:  $-1,74 < pK_a < 4,5$

Azido ertaina:  $4,5 < pK_a < 9$

Azido ahula:  $9 < pK_a < 15,74$

Azido oso ahula:  $pK_a > 15,74$

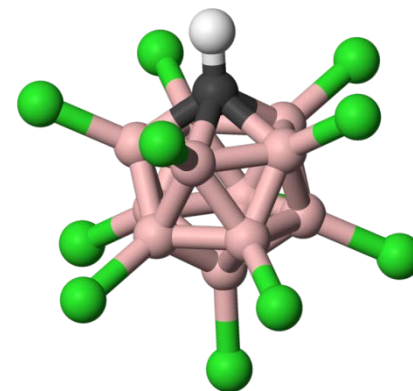
Mugak?

## Superazidoak

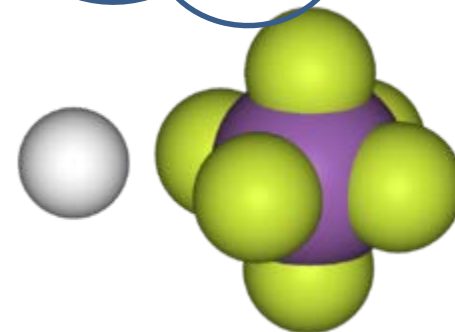
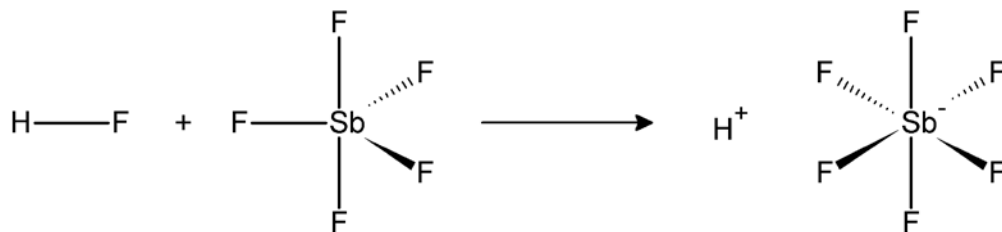
pH negatiboak:

- karboranoa  $\text{pH}/\text{H}_0 = -18$  . . .
- Azido fluoroantimonikoa
  - superazido sendoena,  $\text{pH} / \text{H}_0 = -31$
  - HF eta  $\text{SbF}_5$  konbinaketa

Hammet eskala



$2 \cdot 10^{19}$  aldiz azido sulfuriko, baino sendoagoa







Aurrerapenak: espezie ez azidoak eta ez basikoak: azidotasun  
beste eskala bat

Espezie ez azidoak / ez basikoak:

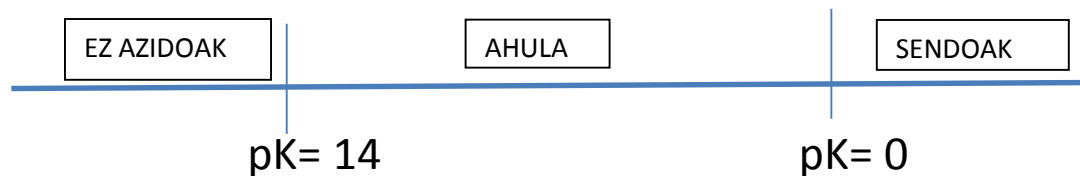
$K = 10^{-14}$  baino txikiagoak (pKa 14 baino handiagoak)

Espezie sendoak:

$K = 10^0$  baino handiagoak (pKa 0 baino txikiagoak)

Espezie ahulak:

$$10^{-14} < K < 10^0$$



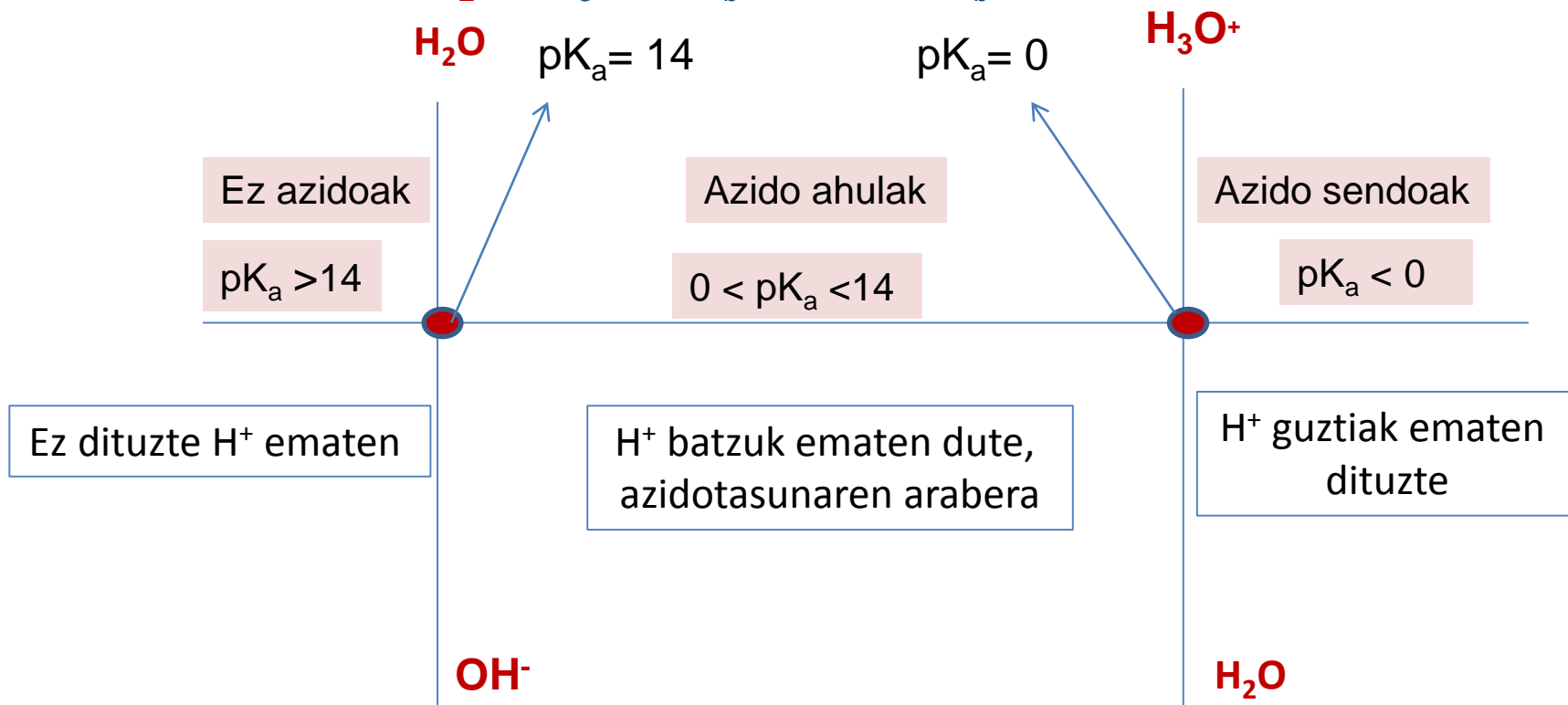
## Aurrerapenak: espezie ez-azidoak eta ez-basikoak

- Beste eskala batzuk sailkatzen dira indar azidoa/basikoa erreferentziako hurrengo baloreak kontsideratuz.
- Uraren protolitoen sistemak honako hauek ditugu



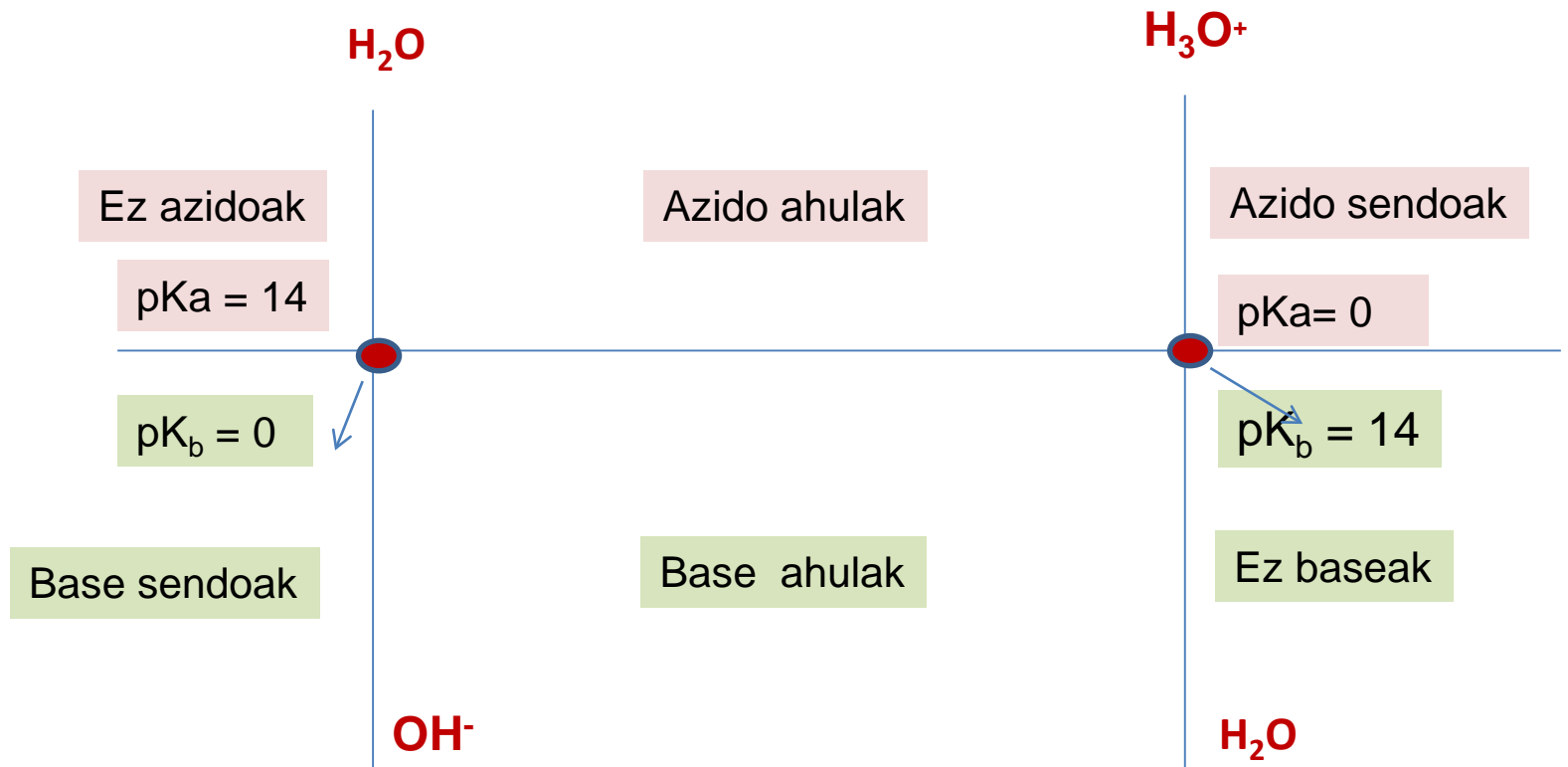
Azidotasuna:  $\text{H}_3\text{O}^+ / \text{H}_2\text{O} / \text{OH}^-$      $K_a = 10^{-14}$      $\text{p}K_a = 14$   
 $\text{H}_3\text{O}^+ / \text{H}_2\text{O} / \text{OH}^-$      $K_a = 10^0$      $\text{p}K_a = 0$

Basikotasuna:  $\text{OH}^- / \text{H}_2\text{O} / \text{H}_3\text{O}^+$      $K_b = 10^{-14}$      $\text{p}K_b = 14$   
 $\text{OH}^- / \text{H}_2\text{O} / \text{H}_3\text{O}^+$      $K_b = 10^0$      $\text{p}K_b = 0$



Azido sendoak:  $\text{HCl}$ ,  $\text{HNO}_3$   
Azido ahulak:  $\text{HAz}$ ,  $\text{NH}_4^+$   
Ez azidoak:  $\text{K}^+$ ,  $\text{Na}^+$

Base sendoak:  $\text{KOH}$ ,  $\text{NaOH}$   
Base ahula:  $\text{Az}^-$ ,  $\text{NH}_3$   
Ez baseak:  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$



## Lewisen teoria

- Bronsted-Lowryren teoria maiz erabiltzen da, batez ere ur-disoluzioan
- Zenbait kasutan ez da baliogarria
  - protoirik gabeko sustantziekin
  - $\text{BCl}_3$  molekuka kasu

- *Protoien trukea*  *Elektroi-bikoteen truke*



*Azidoa:elektroi-bikoteak onartzen dituen sustantzia da*

*Basea:elektroi-bikoteak askatzen dituen sustantzia da*

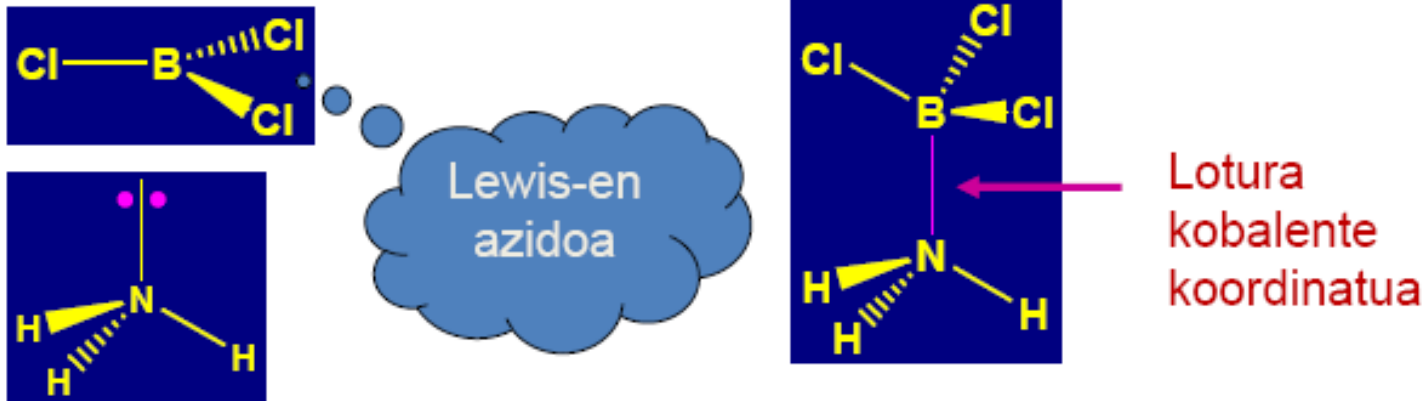
- *Neutralizazioa: baseen bikote elektronikoaren partekaketa*



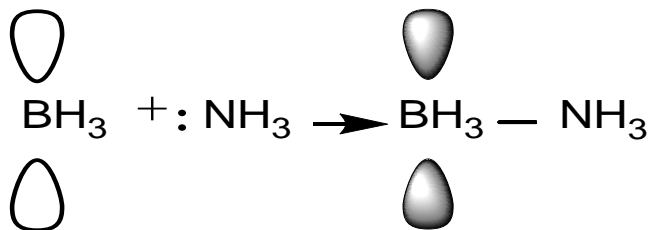
## Lewis-en teoria

*Azido bat elektroibikoteak onartzen dituen sustantzia da*

*Base bat elektroibikoteak askatzen dituen sustantzia da*

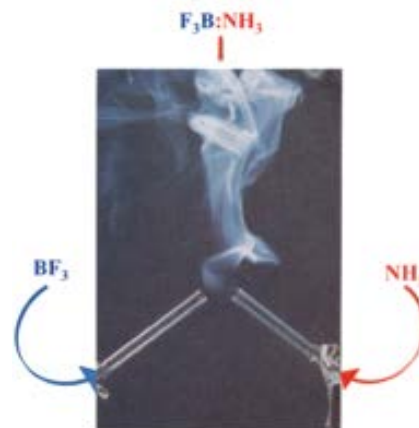


## 1.c. Aurrerapenak: Lewisen teoria



- Aduktoak eraten dira ( $A \leftarrow B$ ) non B eta A Lewisen basea eta azidoa dira, hurrenez hurren
- Lewisen arabera azidotasun-indarra osatutako konplexuen formazio-konstantearen menpe dago, hau da, osatzen den konplexuaren egonkortasunaren menpekoa da

Neutralizazioa

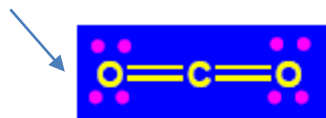


BF<sub>3</sub> eta NH<sub>3</sub> kolorgabeko gasak nahastean F<sub>3</sub>B:NH<sub>3</sub> konposatu berri bat eraten da, hauts zuria itxura duena. erref.: An. Quím., 114 (4), 2018, 241-248

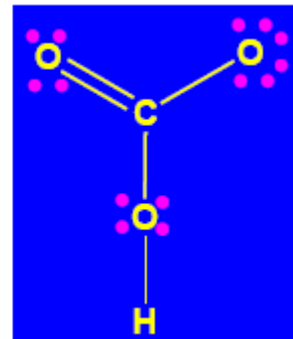
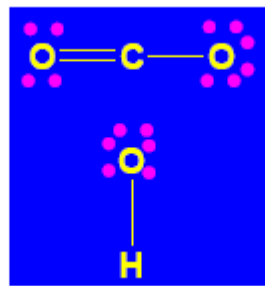
## Lewisen teoria

- Anhidridoek egiten duten hidroxiloen gehipena (non anhidridoak Lewisen azido modura jokutzen baitu eta hidroxiloak, Lewisen base modura)
- Adibidea: bikarbonato ioiaren sintesi-erreakzioa

Lewis azidoa



Lewis basea



Lewis azido izateko baldintzak:

- Orbital hutsak izatea
- Zortzikotearen araua ez betetzea
- Balentzia-geruza berrantolaketa



## Lewisen teoria

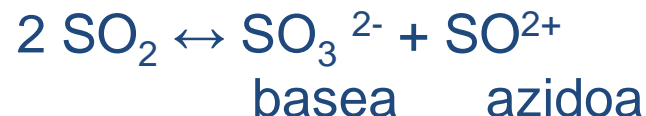
- Beharra baten ondorioz sortu zen:  
Nola azaldu azido-base erreakzioak protoiak egon ezean.
- Brönsted–Lowryrena baino mugatutagoa da baina azken honek azaltzen ez dituen gertaeren azalpena ahalbideratzen du
- Dena den, Lewisen teoria hedatzen saiatzean oztopo batzuk sortu ziren eta beste teoria batzuk garatu ziren.

## Franklin teoria

- E. C. Franklin (1912)
  - Ur disoluzioan gertatzen ez diren erreakzioak ikasten ditu
  - Brönsted-Lowryren antza du
- Disolbatzailea beti neurri berean disoziatuta dago
  - $\text{NH}_3$  ingurunean, protoidun disolbatzaile bat



- $\text{SO}_2$  inguruan, protoi gabeko disolbatzaile bat



## Franklin teoria

### Definitzen du

*Azidoa: disolbatzailearen katioa ekoizten duen sustantzia*

*Basea: disolbatzailearen anioia ekoizten duen sustantzia*

### Neutralizazioa

- Bi ioien arteko erreakzioa disolbatzailearen molekula bat eratuz
- Brönsted–Lowry teoriaren arabera uretan gertatzen denaren antzekoa da.

## H. Lux eta Flood teoria

- H. Luxed eta Floodek (1939) temperatura altuetan oxido likidoen azido-base sistemak aztertzen dituzte
- Definitzen du
  - *Azidoa:  $O^{2-}$  ioiak onartzeko gai den espeziea*
  - *Basea:  $O^{2-}$  ioiak ekoizteko gai den espeziea*



- CaO eta  $SiO_2$  arteko erreakzio Lux-Flooden azido-base erreakzio mota da



# Pearson Irizpideak

“Baño maria”

↶	⊖	⊙	⊕	▽	⊖	⊖	SM	♁	♂	♁	♀	☾	♂	♁	▽
⊖	♁	♂	♁	⊕	⊕	⊕	⊖	⊖	⊙	☾	♂	♁	♂	♁	▽
⊖	♁	♀	⊖	⊙	⊙	⊙	⊕	♂	☾	♀	PC	♀	♂	♂	⊖
▽	♀	♁	♂	⊖	⊖	⊖	⊖	♀	♁						
SM	☾	♂	▽		⊕		⊕	♁	♀						
	♂	☾	♂		♁			☾	♁						
			♀					♁	♁						
			☾					♂							
	⊙							⊙							

Zutabe bakoitzaren hasierako sustantzia behean daudenekin konbina daiteke: “afinitate-teoría”

- ↶ Esprits acides.
- ⊖ Acide du sel marin.
- ⊙ Acide nitreux.
- ♁ Acide vitriolique.
- ⊖ Sel alcali fixe.
- ♂ Sel alcali volatil.
- ▽ Terre absorbante.
- ♁ Substances metalliques.
- ♂ Mercure.
- ♁ Regule d'Antimoine.
- ⊙ Or.
- ☾ Argent.
- ♁ Cuivre.
- ♂ Fer.
- ♁ Plomb.
- ♁ Etain.
- ♁ Zinc.
- PC Pierre Calaminaire.
- ♁ Soufre mineral. [Principe.
- ♁ Principe huileux ou Soufre
- ⊕ Esprit de vinaigre.
- ▽ Eau.
- ⊖ Sel. [dents
- ▽ Esprit de vin et Esprits ar-

## Pearson Irizpideak

- Datu mineralografikoek egiaztatzen dutenez, estekatzaile batzuk nahiago dute hainbat ioi metalikok konplexu egonkorragoak eratzeko. Berez, ez da garatutako teoria.
- Aduktoen edo konplexuen egonkortasun erlatiboari buruzko informazioa luzatzen dute
- Kuantitatiboa ez izan arren konplexuen egonkortasuna azaltzeko oso baliogarriak dira eta horregatik koordinazio-kimika arloan askotan erabiltzen dira
- 1963.urtean behaketa batzuei esker, R. G. Pearstonek “gogorra” eta “biguna” terminoak proposatu zituen

## Pearson Irizpideak

### Espezie gogorra

- Lewisen azidoak
- Tamaina txikia
- Karga altua
- Polarizabilitate txikia

### Espezie biguna

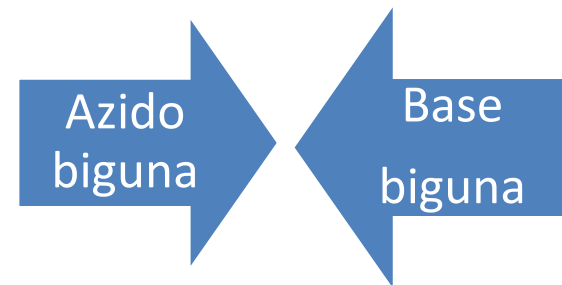
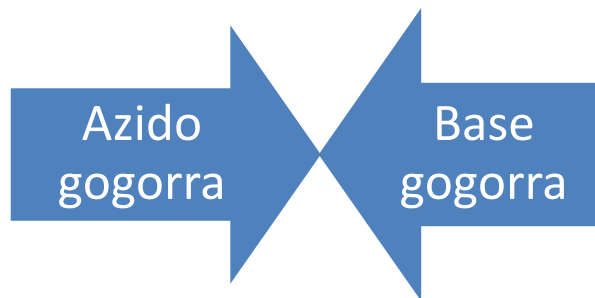
- Lewisen baseak
- Bolumen handia
- Karga txikia
- Polarizabilitate altua



## Pearson Irizpideak

*“Azido gogorrek base gogorrekiko afinitatea dute eta beraiekin biltzeko joera dute”*

*“Azido ahulek base ahulekiko afinitatea dute eta beraiekin biltzeko joera dute”*





# Pearson Irizpideak

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H															<b>BASE ERTAINAK</b>		He
Li	Be				<b>AZIDO GOGORRAK</b>							B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
							+3	+3		+2					<b>BASE BIGUNAK</b>		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge <sup>A</sup>	As	Se	Br	Kr
							+2	+2		+1							
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
								+3				+3	+4				
Cs	Ba	Ln	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi			Rn
								+1				+1	+2				
								+3		<b>AZIDO BIGUNAK</b>							
Fr	Ra	Ac								<b>AZIDO ERTAINAK</b>							

## Idea nagusiak

Ikusitako teoria hauek azido-base erreakzioak ingurune desberdinetan aurreratzeko aukera ematen digute

- Ur-ingurunean
  - Arrhenius
  - Brönsted-Lowry
- Ura ezik likidoa den edozein disolbatzailetan
  - Franklin
- Lan-temperaturan urtuta daudenak
  - Lux–Flood
- Koordinazio-konposatuak/aduktok
  - Lewis
  - Pearson-irizpideak

## Hitzen glosarioa

- Superazidoa:
- Neutralizazioa:
- Arrheniusen azidoa:
- Bronsted-Lowryren azidoa:
- Lewisen azidoa:
- Protolito-sistema:
- Pearsonen azido gogorra:
- Pearsonen azido leuna:

## Hitzen glosarioa

- **Superazidoa:** ohiz kanpoko azidotasuna duten espezieak. sulfurikoa % 100 baino 100 aldiz azidoagoa da. Beraiekin beste pH-eskala erabiltzen da.
- **Neutralizazioa:** Azido eta baseen arteko erreakzioa, baina hitza hainbat definizio barberatzen ditu, teoriaren arabera.
  - **Arrhenius:** protoia eta hidroxidoaren arteko erreakzioa da
  - **Bronsted-Lowry:** bi protolitoen arteko erreakzioa da
  - **Lewis:** adukto sorrarazten duen erreakzioa da
- **Arrheniusen azidoa:** uretan hidrogenioiak askatzen duen espeziea da

## Hitzen glosarioa

- **Bronsted-Lowryren azidoa:** hidrogenioak askatzen duen espezia
- **Lewisen azidoa:** dentsitate elektronikoa/elektroi-bikote onartzen dituen espeziea
- **Protolito-sistema:** protoien trukez erlazioan dauden espezie kimikoak. Bronsted-Lowryren azido eta base osatutako sistema
- **Pearsonen azido gogorra:** base gogorarekin biltzeko joera duen espezieak
- **Pearsonen azido leuna:** base leunarekin biltzeko joera duen espezieak

03.GAIA

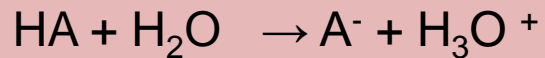
03.3. pH-ren KALKULUAK

# 1. Azidotasun konstanteak

## Protolito sendoak

Kasu honetan protolitoa **erabat disoziatuta** dago, bai azido bai basea izanik. **Azido-base oreka ez da suertatzen** eta oreka konstantea ez da planteatzen, baizik eta erreakzioa eskuinerantz erabat desplazatuta dagoela suposatzen da. Disoluzioaren pHa honela kalkulatuko dugu.

### AZIDO SENDOAK

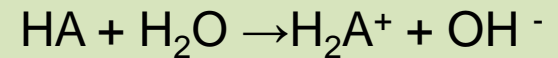


Hasieran  $C_0$

Amaieran -  $C_0$   $C_0$

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] = -\log C_0$$

### BASE SENDOAK



Hasieran  $C_0$

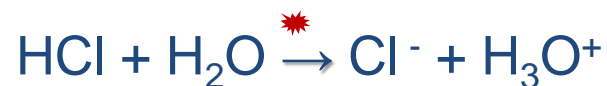
Amaieran -  $C_0$   $C_0$

$$\text{pOH} = -\log [\text{OH}^-] = -\log C_0$$

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \log C_0$$

Protolito sendoak  
Azido Klorhidrikoa

$c(\text{HCl})=1\text{M}$ ,  $V= 1\text{L}$



protolisia baino lehen 1 mol

protolisiaren ondoren 1 mol 1 mol

$c(\text{HCl}) = [\text{Cl}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] = 1\text{M}$

$\text{pH} = -\log(1) = 0$



Ez da oreka!



Protolito sendoak  
Sodio hidroxidoa

$c(\text{NaOH})=1\text{M}$ ,  $V= 1\text{L}$  dela



protolisia baino lehen      1 mol

protolisiaren ondoren      -      1 mol      1 mol

$$c(\text{NaOH}) = [\text{Na}^+] = [\text{OH}^-] = 1\text{M}$$

$$\text{pOH} = -\log(1) = 0 \rightarrow \text{pH} = 14$$

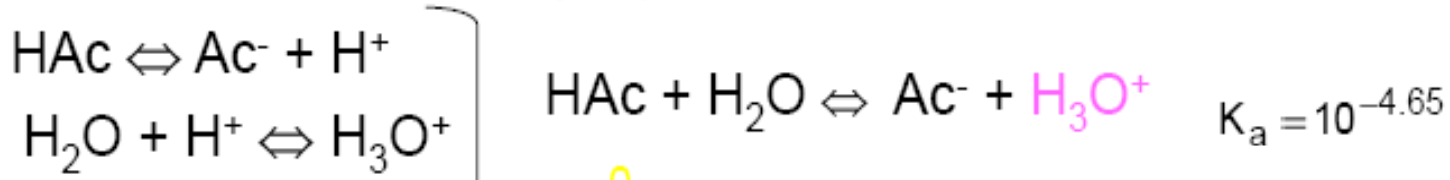


Ez da oreka!

## 2. Azidotasun konstanteak eta masa/karga balantzeak

### Protolito ahula neutro

Azido azetikoaren disoluzioa;  $c(\text{HAz})=0,1 \text{ M}$



MB:  $c(\text{HAc}) = [\text{HAc}] + [\text{Ac}^-]$

KB:  $[\text{Ac}^-] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+]$

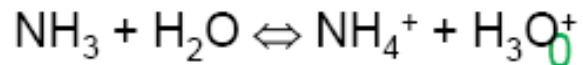
$[\text{Ac}^-] \approx [\text{H}_3\text{O}^+]$

$$K_a = \frac{[\text{Ac}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HAc}]} = 10^{-4.65} \longrightarrow K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c(\text{HAc})} = 10^{-4.65} \longrightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = \sqrt{K_a c_{\text{HA}}}$$

$c(\text{HAc}) \approx [\text{HAc}]$

## Protolito ahula neutro: NH<sub>3</sub>

Base ahulak: espezie neutroak



$$c(\text{NH}_3) = [\text{NH}_3] + [\text{NH}_4^+]$$

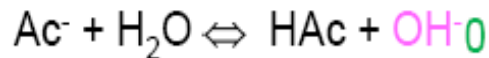
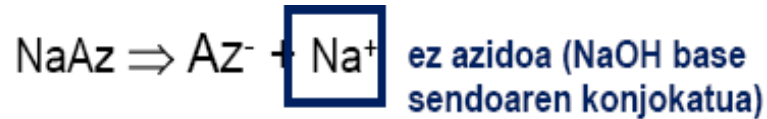
$$[\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{NH}_4^+]$$

$$K_b = 10^{-4.45} = \frac{[\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} \approx \frac{[\text{OH}^-]^2}{c(\text{NH}_3)}$$

$$[\text{OH}^-] = \sqrt{K_b c_b}$$

## Protolito ahula anioniko: Az<sup>-</sup>

NaAz disoluzioa;  $c(\text{NaAz})=0,1 \text{ M}$



$$c(\text{Az}^-) = c(\text{Na}^+)$$

$$K_b = 10^{-9,35}$$

$$\text{MB: } c(\text{Az}^-) = [\text{Az}^-] + [\text{HAz}]$$

$$\text{KB: } [\text{Ac}^-] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{Na}^+]$$

$$\text{KB: } [\text{Ac}^-] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{HAc}] + [\text{Az}^-]$$

$$\text{KB: } [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{HAc}]$$

---

$$[\text{OH}^-] \approx [\text{HAc}]$$

$$K_b = \frac{[\text{HAc}][\text{OH}^-]}{[\text{Ac}^-]} = 10^{-9,35}$$

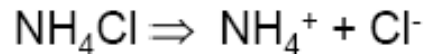
$$K_b = \frac{[\text{OH}^-]^2}{c(\text{Ac}^-)} = 10^{-9,35}$$

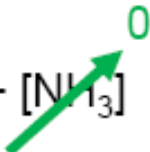
$$[\text{OH}^-] = \sqrt{K_b c_{\text{Az}^-}}$$

$$c(\text{Ac}^-) \approx [\text{Ac}^-]$$

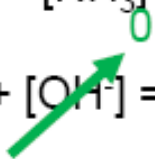
## Protolito ahula kationiko: NH<sub>4</sub><sup>+</sup>

azido ahulak: espezie kationikoak



$$c(\text{NH}_4^+) = [\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3]$$


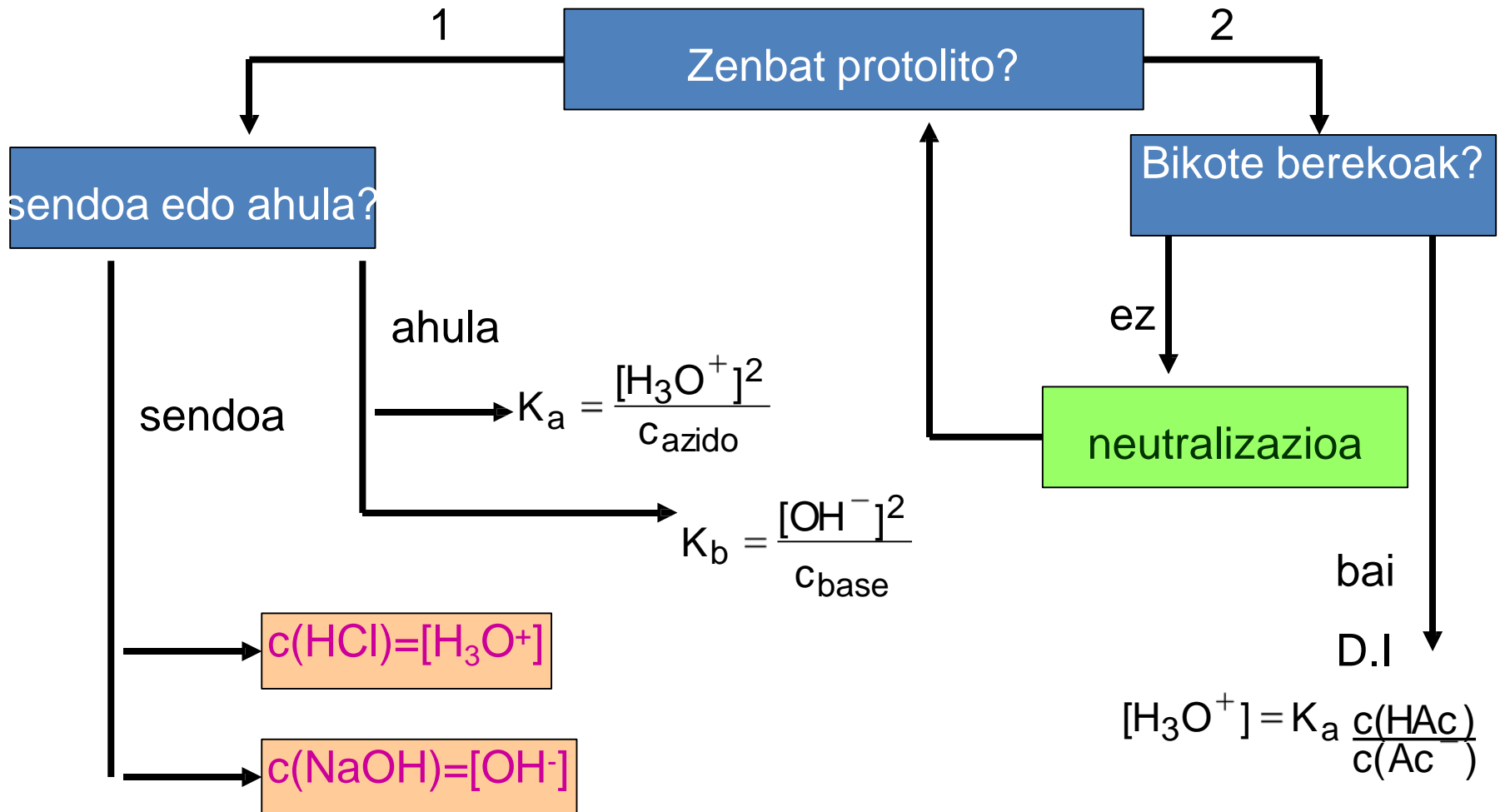
$$[\text{Cl}^-] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{NH}_4^+]$$

$$[\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{NH}_4^+]$$


$$[\text{NH}_3] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+]$$

$$K_a = \frac{[\text{NH}_3][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{NH}_4^+]} \approx \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c(\text{NH}_4^+)} = 10^{-9.55}$$

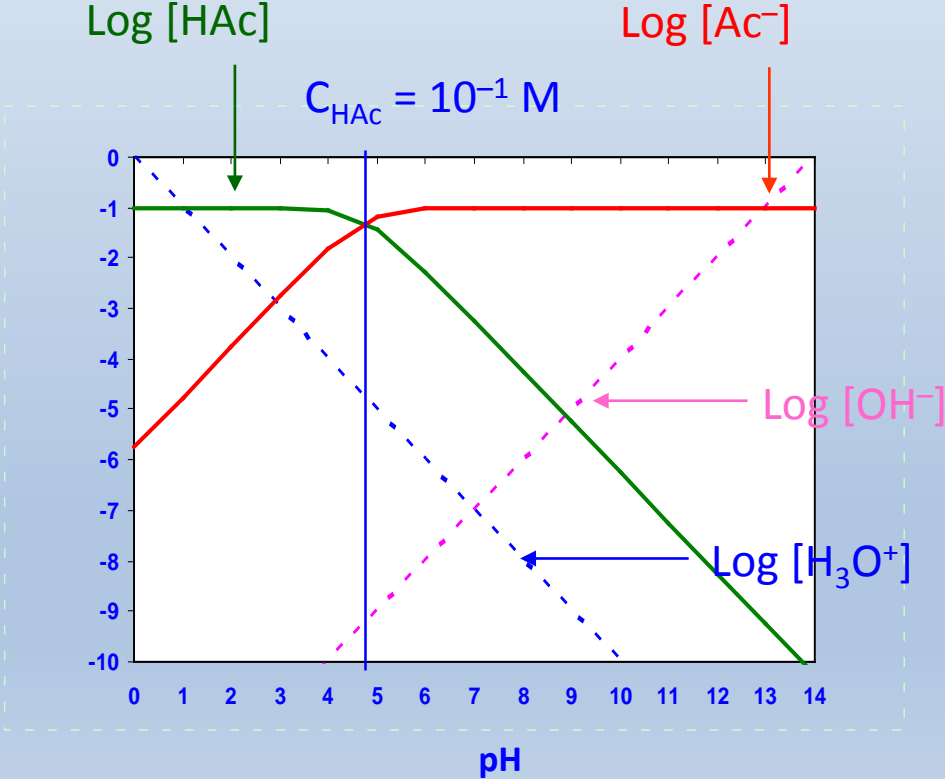
# Jarraitzeko prozedura



### 3. pH-diagramak

- pH-ren kalkuluekin aritzeko ohikoen eta erosoen metodorik konstanteen erabilpenarena izan ohi da. Horretaz aparte metodo grafiko bat, **pH diagramak edo diagrama logaritmikoak**, erabiliko ditugu
- Hori dela eta hurrengo 21 diapositiboetan pH-diagramaren eraketa aurkezten da, urdinaz, erraz bereizteko
- Diagrama hauetan protolito-sistemaren **espezie guztien kontzentrazio logaritmikoak** pH-ren aurrean adierazten dira

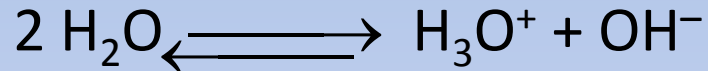
# pH-DIAGRAMAK/DIAGRAMA LOGARITMIKOAK





# pH-aren diagramak

- Kontzentrazioaren diagrama logaritmikoak
- Ura:  $\text{H}_2\text{O}$



$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+] [\text{OH}^-] = 10^{-14}$$

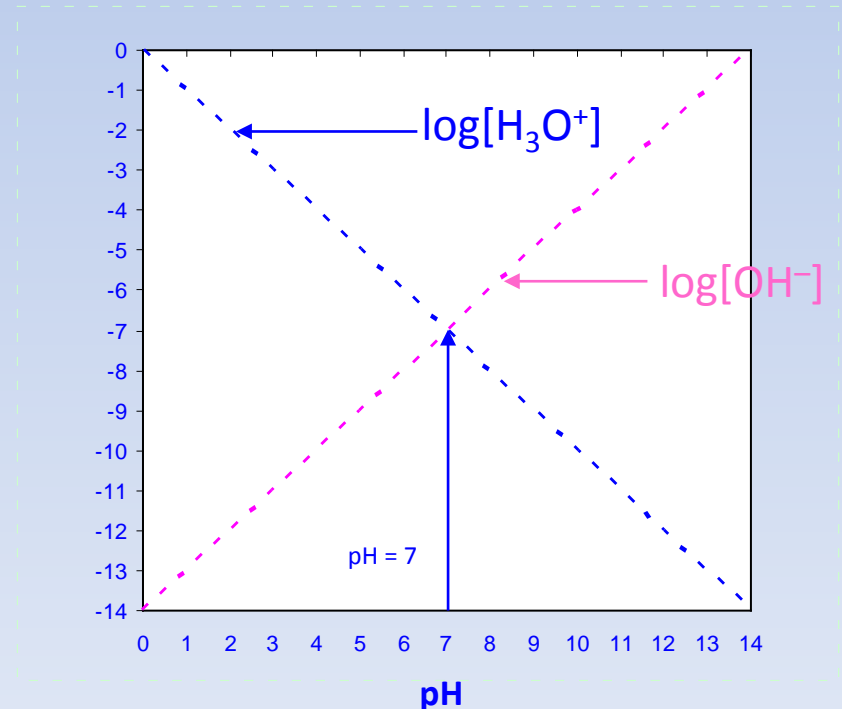
$$\log [\text{H}_3\text{O}^+] = -\text{pH}$$

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_w}{[\text{H}_3\text{O}^+]}$$

$$\log [\text{OH}^-] = \text{pH} - \text{p}K_w$$

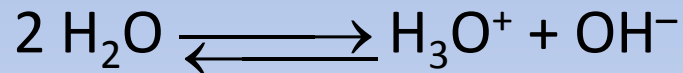
- Ur purutan

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = 10^{-7}$$



# pH-aren diagramak

- Protolito sendoa



- Masa balantzea

- $c_{\text{HCl}} = [\text{Cl}^-] + [\text{HCl}] \approx [\text{Cl}^-]$

- Lerro horizontala

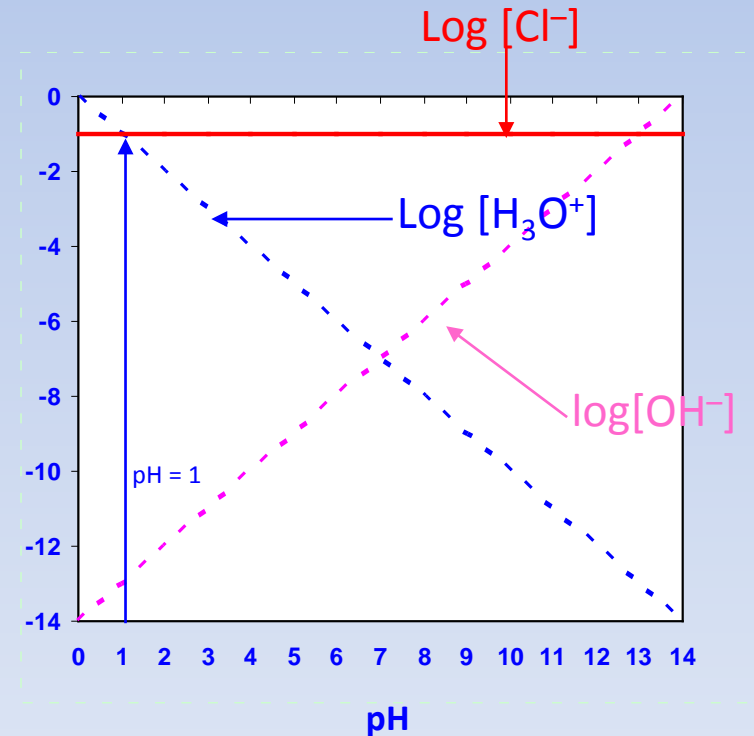
- pH-aren kalkulua

- Karga-balantzea

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{Cl}^-]$$

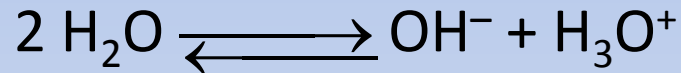
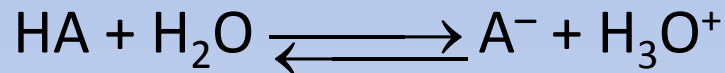
$$[\text{H}_3\text{O}^+] \approx [\text{Cl}^-]$$

$$\text{pH} = -\log [\text{Cl}^-]$$



# pH-aren diagramak

- Protolito ahula
  - Erreakzioak



$$K_a = \frac{[\text{A}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HA}]}$$

$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]$$

- Disoluzioan lau espezie daude: HA, A<sup>-</sup>, H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> y OH<sup>-</sup>
- Masa-balantzea

$$c_{\text{HA}} = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$$

- Karga-balantzea

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-]$$

# pH-aren diagramak

- $K_a$  -tik

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

- Masa-balantzetik

$$c_{HA} = [HA] + [A^-]$$

$$c_{HA} = [HA] + \frac{K_a [HA]}{[H_3O^+]} = [HA] \left( 1 + \frac{K_a}{[H_3O^+]} \right)$$

- Askatzen

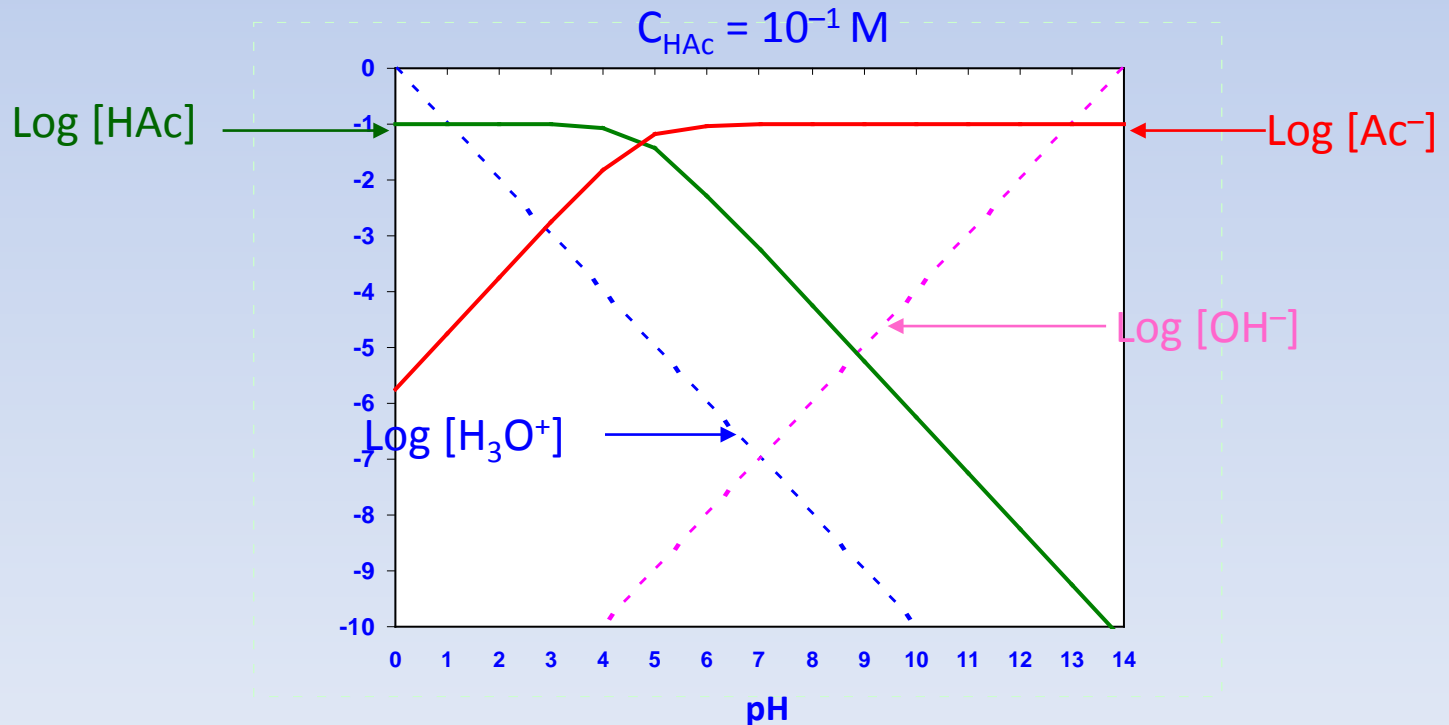
$$[HA] = \frac{[H_3O^+] c_{HA}}{K_a + [H_3O^+]}$$

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

# pH-aren diagramak

- Lortu ditugun ekuazioak grafikatur

$$[\text{HA}] = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] c_{\text{HA}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]}$$
$$[\text{A}^-] = \frac{K_a c_{\text{HA}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]}$$



# pH-aren diagramak

- Bi kurben arteko ebaki- puntuan

$$[\text{Ac}^-] = [\text{HAc}]$$

$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{Ac}^-]}{[\text{HAc}]}$$

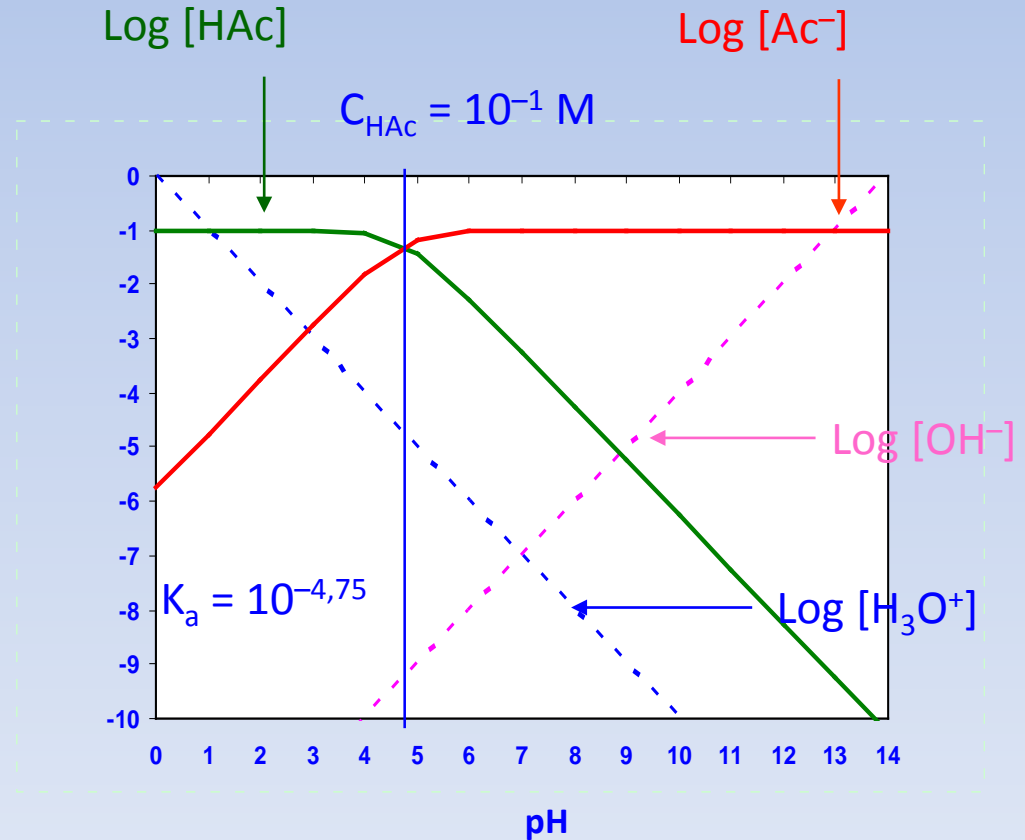
$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_a$$

$$\text{pH} = \text{p}K_a$$

Diagrama ikusita

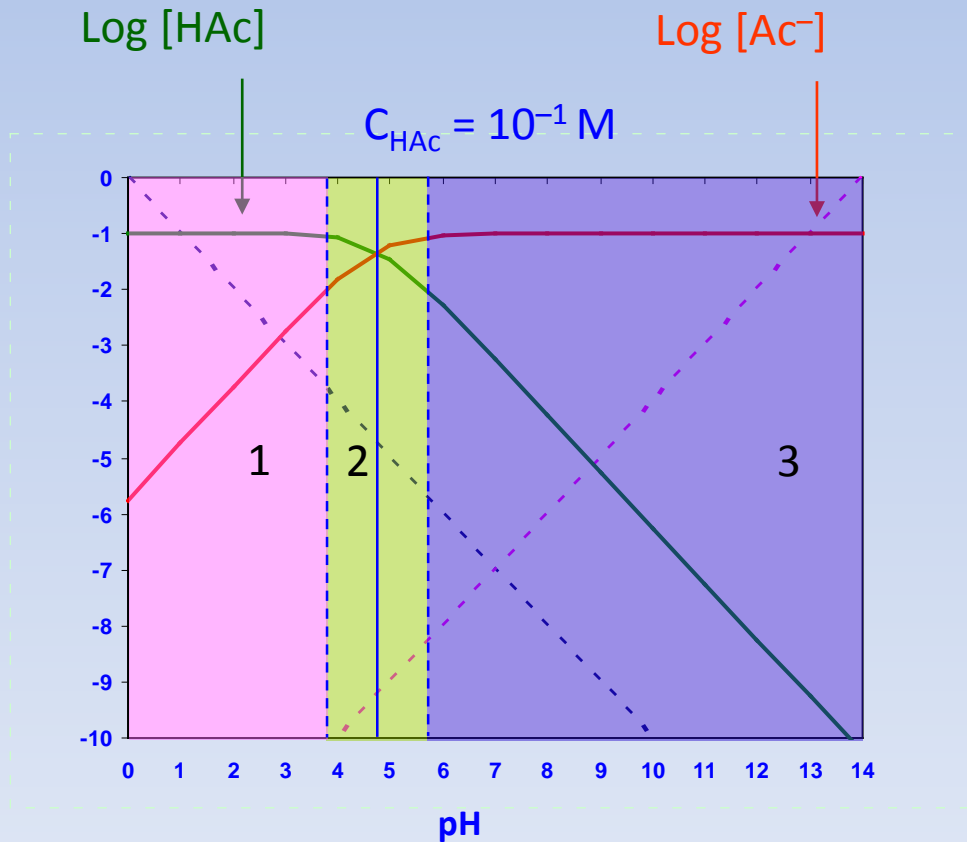


$\text{p}K_a$  ezaguna



# pH-aren diagramak

- Diagrama hiru zonaldeetan banatu ahal dugu



1.Zonaldea

$\text{pH} < \text{p}K_a - 1$

$-\log [\text{H}^+] < -\log K_a - \log 10$

$[\text{H}^+] > 10 K_a$

pH baxuak

3.Zonaldea

$\text{pH} > \text{p}K_a + 1$

$-\log [\text{H}^+] > -\log K_a - (-\log 10)$

$[\text{H}^+] < 0,1 K_a$

pH altuak

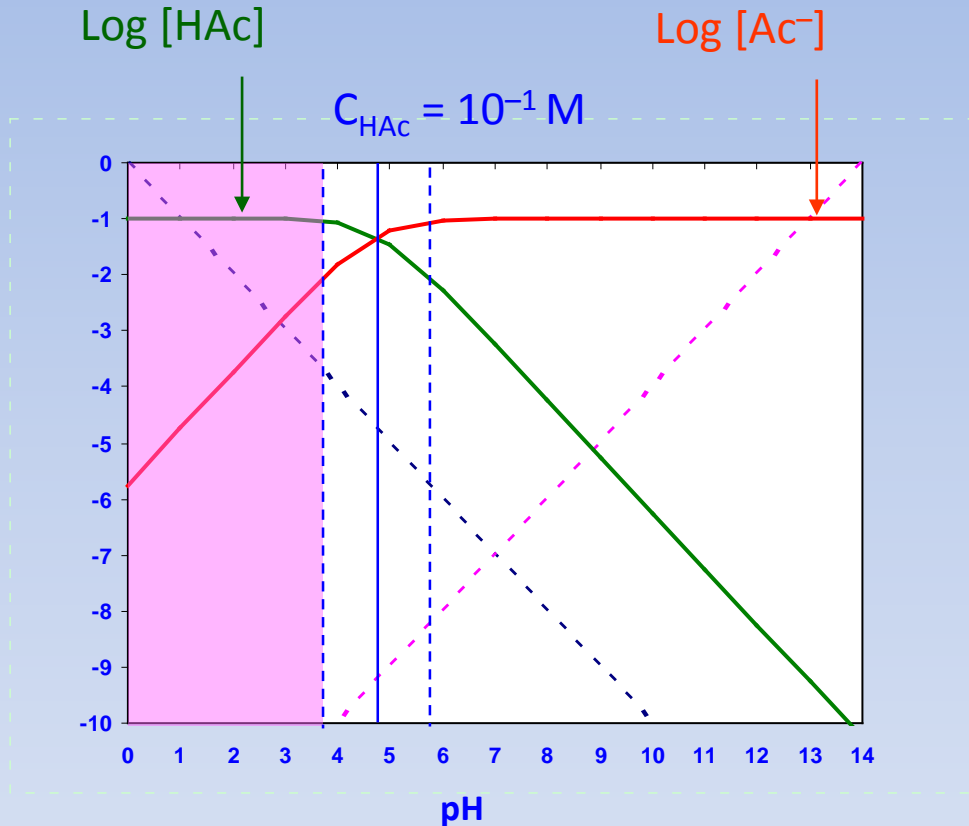
2.Zonaldea

$\text{p}K_a - 1 < \text{pH} < \text{p}K_a + 1$

$0,1 K_a < [\text{H}^+] < 10 K_a$

Tarteko pHak

# pH-aren diagramak



1. Zonaldea

$\text{pH} < \text{p}K_a - 1$

$[\text{H}_3\text{O}^+] > 10 K_a$

$$[\text{HAc}] = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] c_{\text{HAc}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]} \approx$$

$$\approx \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] c_{\text{HAc}}}{[\text{H}_3\text{O}^+]} = c_{\text{HAc}}$$

$$[\text{Ac}^-] = \frac{K_a c_{\text{HAc}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]} \approx \frac{K_a c_{\text{HAc}}}{[\text{H}_3\text{O}^+]}$$

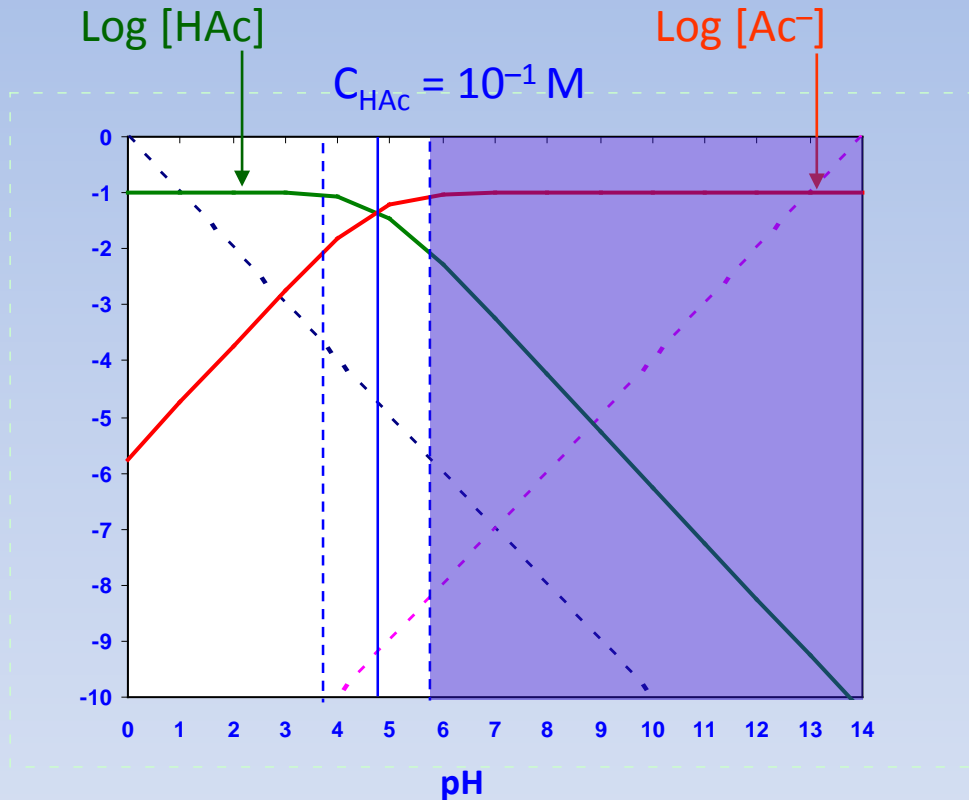
$\log [\text{Ac}^-] = \log (K_a c_{\text{HAc}}) + \text{pH}$

Malda 1 duen lerroa

Jatorrizko ordenatua =  $\log (K_a c_{\text{HAc}})$



# pH-aren diagramak



2. Zonaldea

$\text{pH} > \text{p}K_a + 1$

$[\text{H}^+] < 0,1 K_a$

$$[\text{HAc}] = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] c_{\text{HAc}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]} \approx$$

$$\approx \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] c_{\text{HAc}}}{K_a}$$

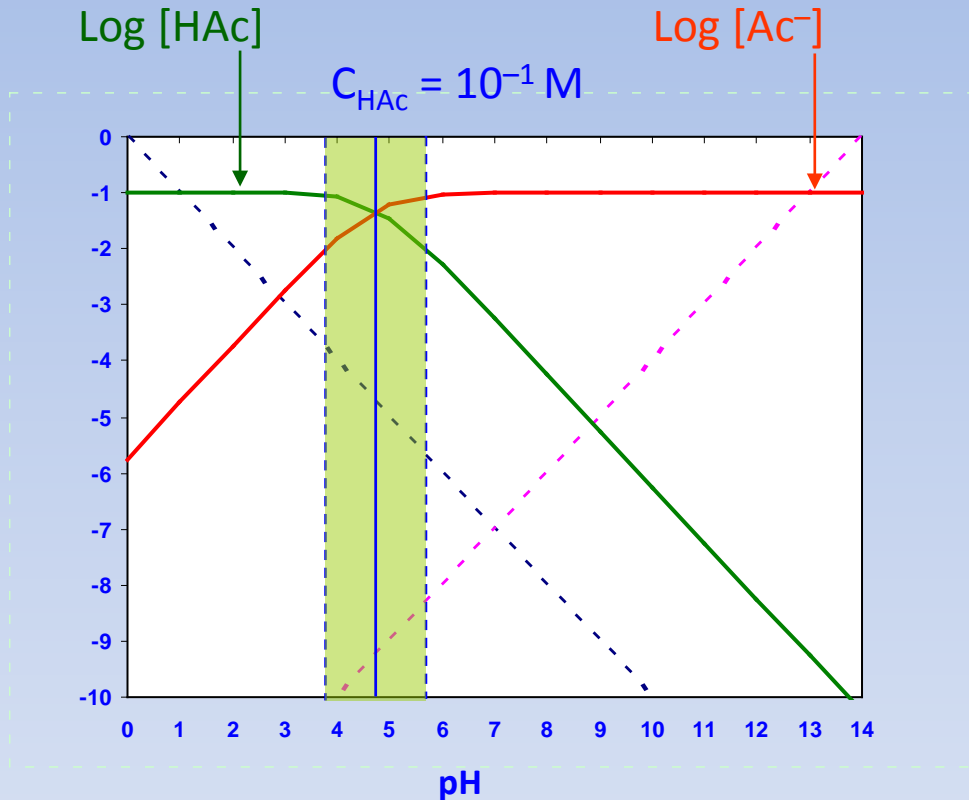
$$\log [\text{HAc}] = \log (c_{\text{HAc}}/K_a) - \text{pH}$$

Malda -1 duen lerroa

Jatorrizko ordenatua =  $\log (c_{\text{HAc}}/K_a)$

$$[\text{Ac}^-] = \frac{K_a c_{\text{HAc}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]} \approx \frac{K_a c_{\text{HAc}}}{K_a} = c_{\text{HAc}}$$

# pH-aren diagramak



## 3. Zonaldea

$$pK_a - 1 < \text{pH} < pK_a + 1$$

$$0,1 K_a < [\text{H}^+] < 10 K_a$$

- Erdiko puntuan

$$\text{pH} = \text{p}K_a \rightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = K_a$$

$$K_a + [\text{H}_3\text{O}^+] = 2 [\text{H}_3\text{O}^+]$$

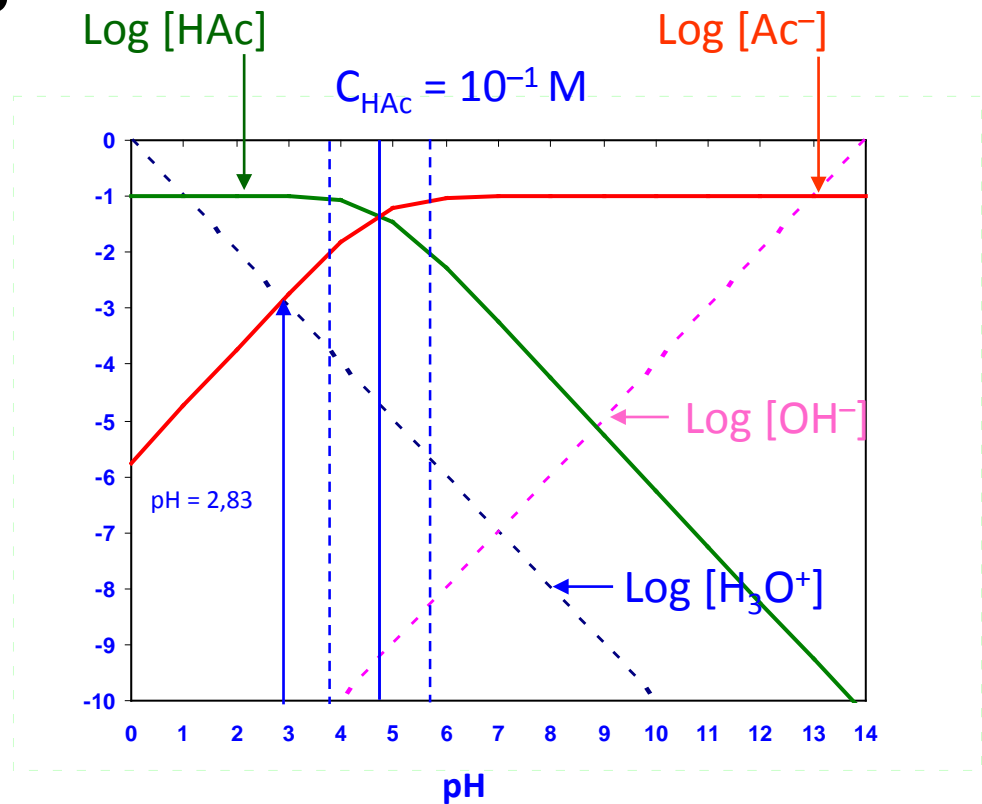
$$[\text{HAc}] = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] C_{\text{HAc}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]} = \frac{C_{\text{HAc}}}{2}$$

$$[\text{Ac}^-] = \frac{K_a C_{\text{HAc}}}{K_a + [\text{H}_3\text{O}^+]} = \frac{C_{\text{HAc}}}{2}$$

$$\log [\text{HAc}] = \log [\text{Ac}^-] = \log c_{\text{HAc}} - \log 2$$

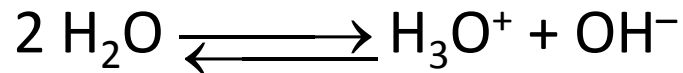
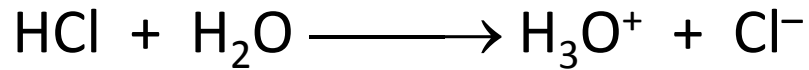
# pH-aren kalkulak

Nola kalkulatu pHa  
diagrama hauen bidez?



# pH-aren diagramak

- Protolito sendoa



- Masa balantzea

$$- c_{\text{HCl}} = [\text{Cl}^-] + [\text{HCl}] \approx [\text{Cl}^-]$$

– Lerro horizontala

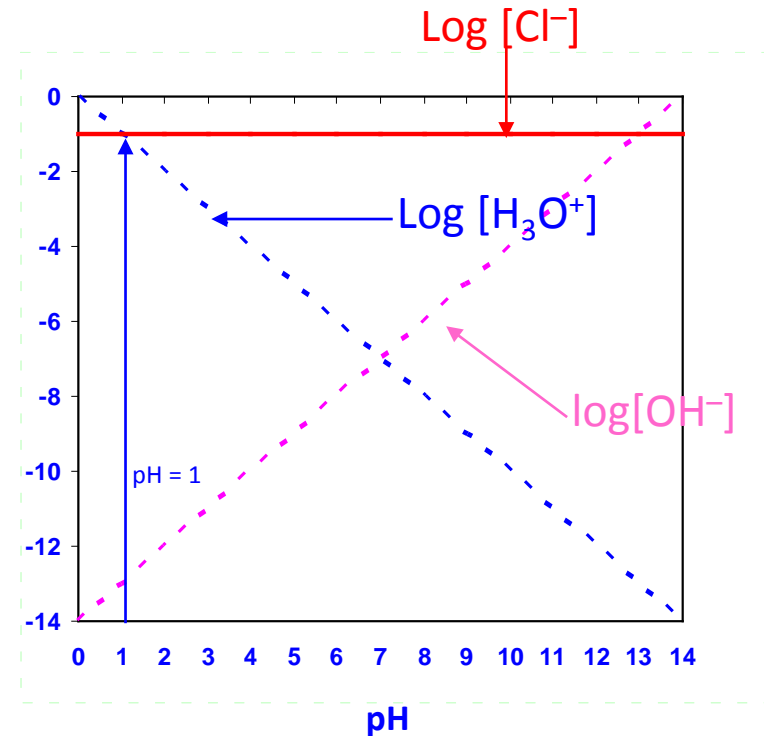
- pH-aren kalkulua

– Karga-balantzea

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{Cl}^-]$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] \approx [\text{Cl}^-]$$

$$\text{pH} = -\log [\text{Cl}^-]$$



## Azido ahula

### Erreakzioak

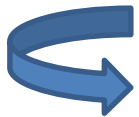


$$K_a = \frac{[\text{A}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HA}]}$$



$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+].[\text{OH}^-]$$

. Disoluzioan 4 espezie daude: HA, A<sup>-</sup>, H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> eta OH<sup>-</sup>



4 ekuazioen beharra

- K<sub>a</sub> eta K<sub>w</sub>
- Masa-balantzea  $c_{\text{HA}} = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$
- Karga-balantzea  $[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-]$
- Bi aukera: ekuazioen sistema ebatzi edo pH diagrama erabili

# pH-aren kalkulua: azido ahula

Azido ahula

Bi oreka kontuan hartu behar ditugu

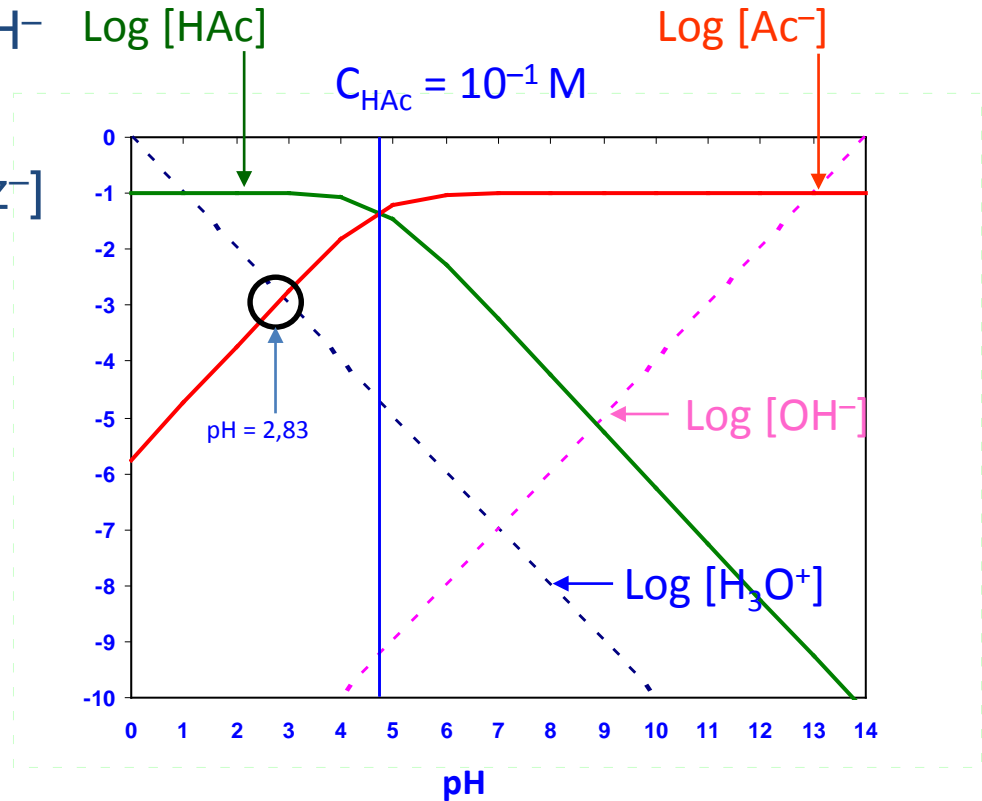


– Karga balantzea

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{Az}^-]$$

–  $\text{OH}^-$  mezprezatuta

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{Az}^-]$$



# pH-aren kalkulua: base ahula

Base ahula

Hurrengo orekak kontuan hartu behar ditugu

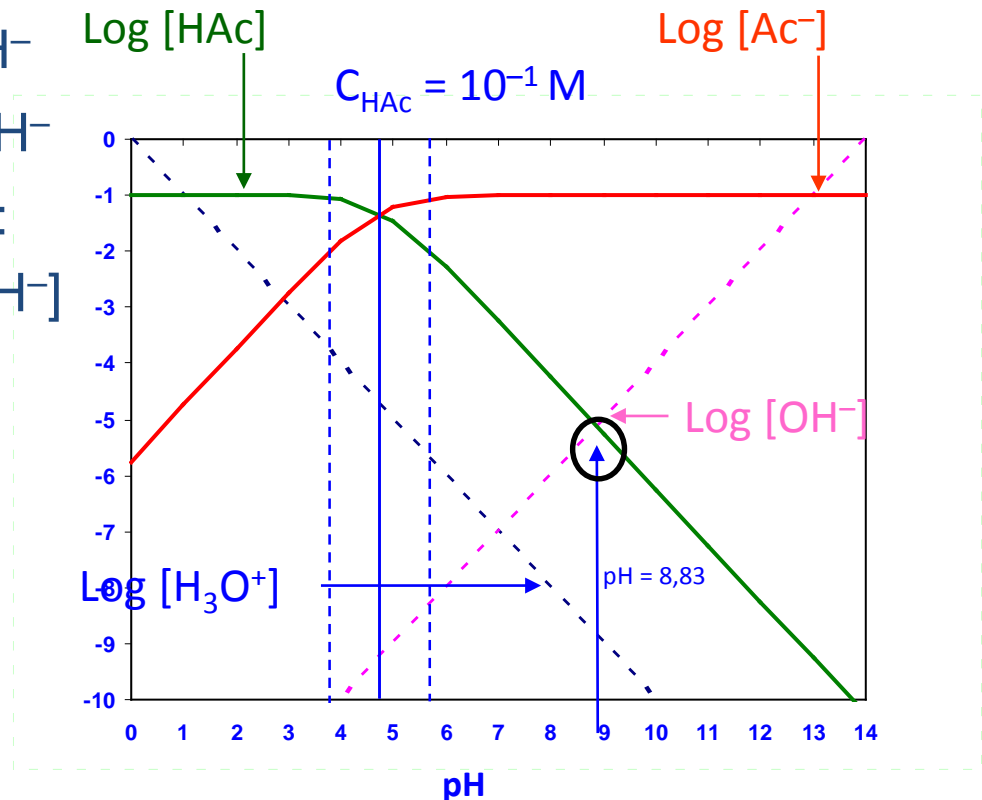


– Balantze protonikoak dio:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{HAc}] = [\text{OH}^-]$$

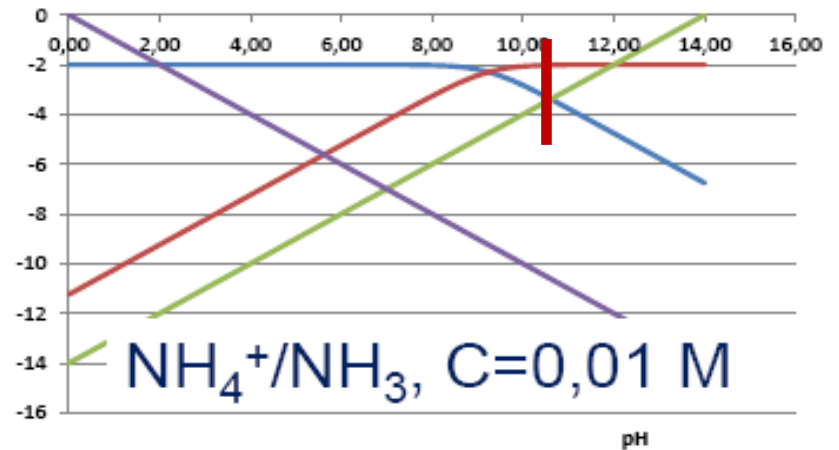
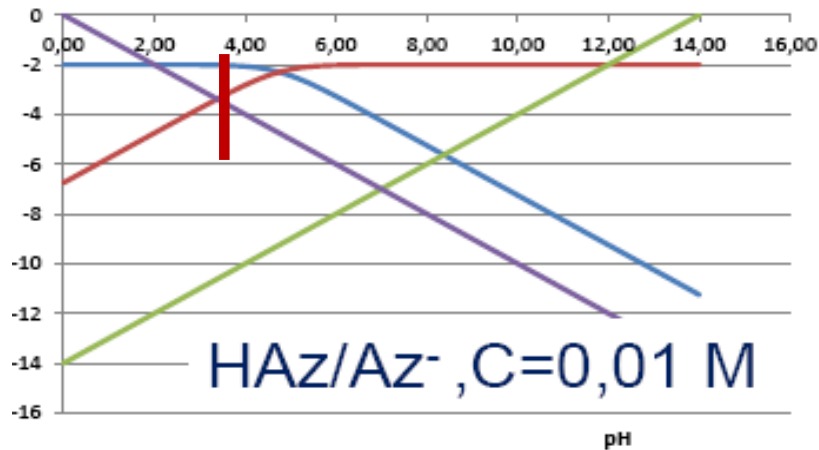
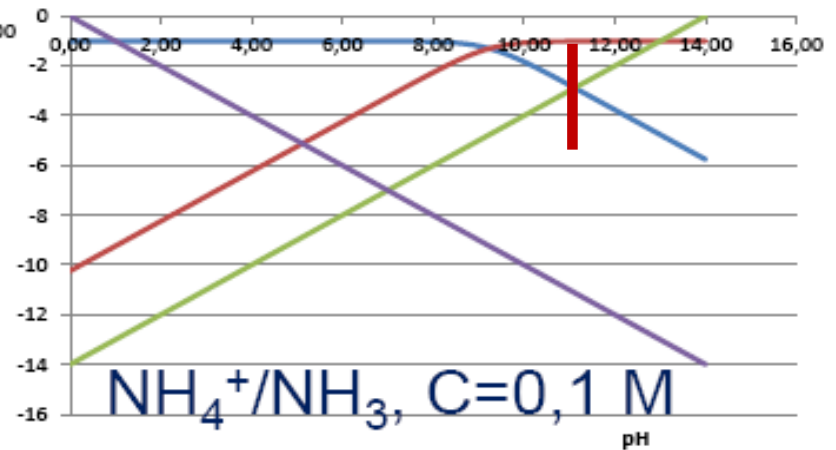
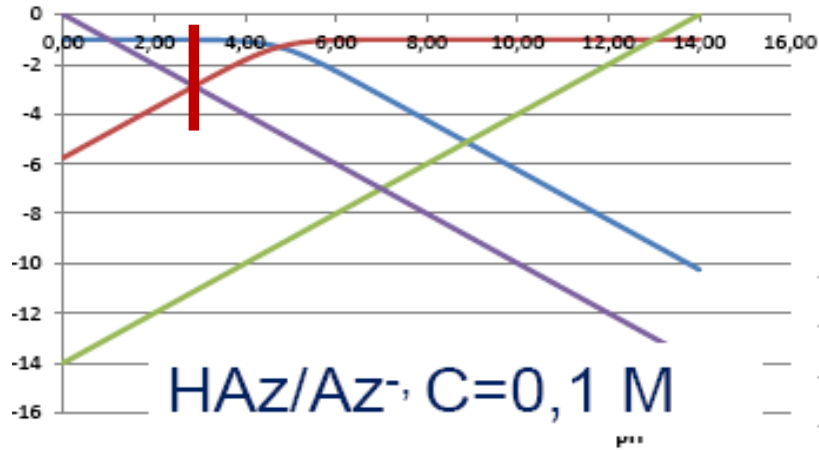
–  $\text{H}_3\text{O}^+$  mezprezatuta

$$[\text{HAc}] = [\text{OH}^-]$$



## Protolito ahula

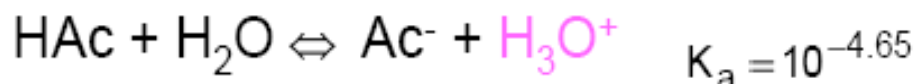
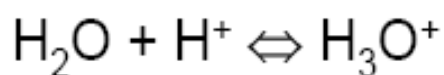
Diagramak kontzentrazioaren menpekoak dira eta lortutako pHaren baloreak desberdinak izango dira kontzentrazioekiko





## Protolito ahula:(HA)

Azido azetikoaren disoluzioa;  $c(\text{HAz})=0,1 \text{ M}$



MB:  $c(\text{HAc}) = [\text{HAc}] + [\text{Ac}^-]$

KB:  $[\text{Ac}^-] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+]$

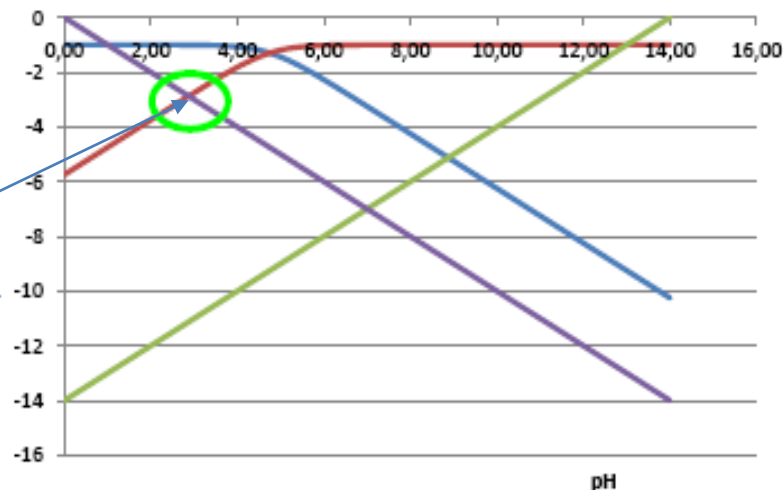
$[\text{Ac}^-] \approx [\text{H}_3\text{O}^+]$

$$K_a = \frac{[\text{Ac}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HAc}]} = 10^{-4.65}$$

$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c(\text{HAc})} = 10^{-4.65}$$

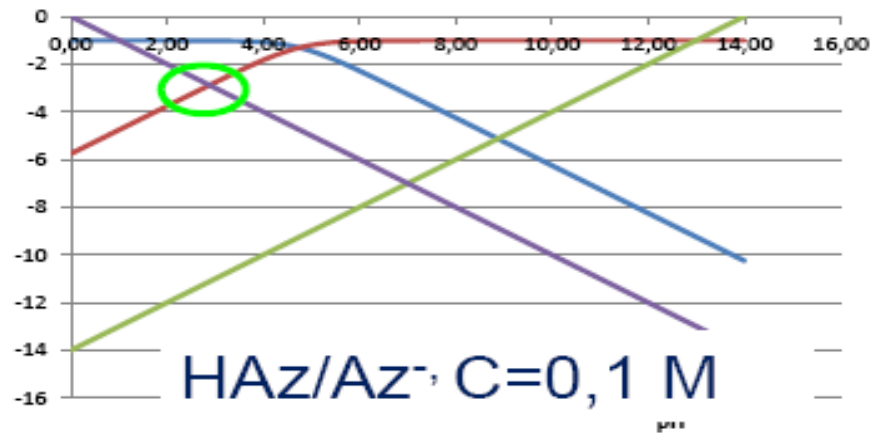
$c(\text{HAc}) \approx [\text{HAc}]$

Kalkuluak?  $\longrightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = \sqrt{K_a c_{\text{HA}}} = 1,5 \cdot 10^{-3}$   
 $\text{pH} = 2,83$

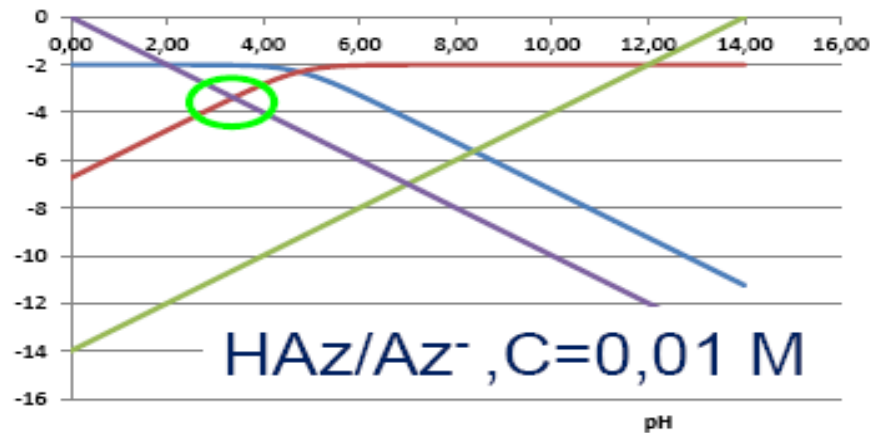


## Protolito ahula

### Azido azetikoaren disoluzioak



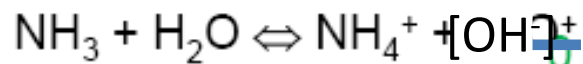
pH=2.83



pH=3.33

## Protolito ahula

Base ahulak: espezie neutroak



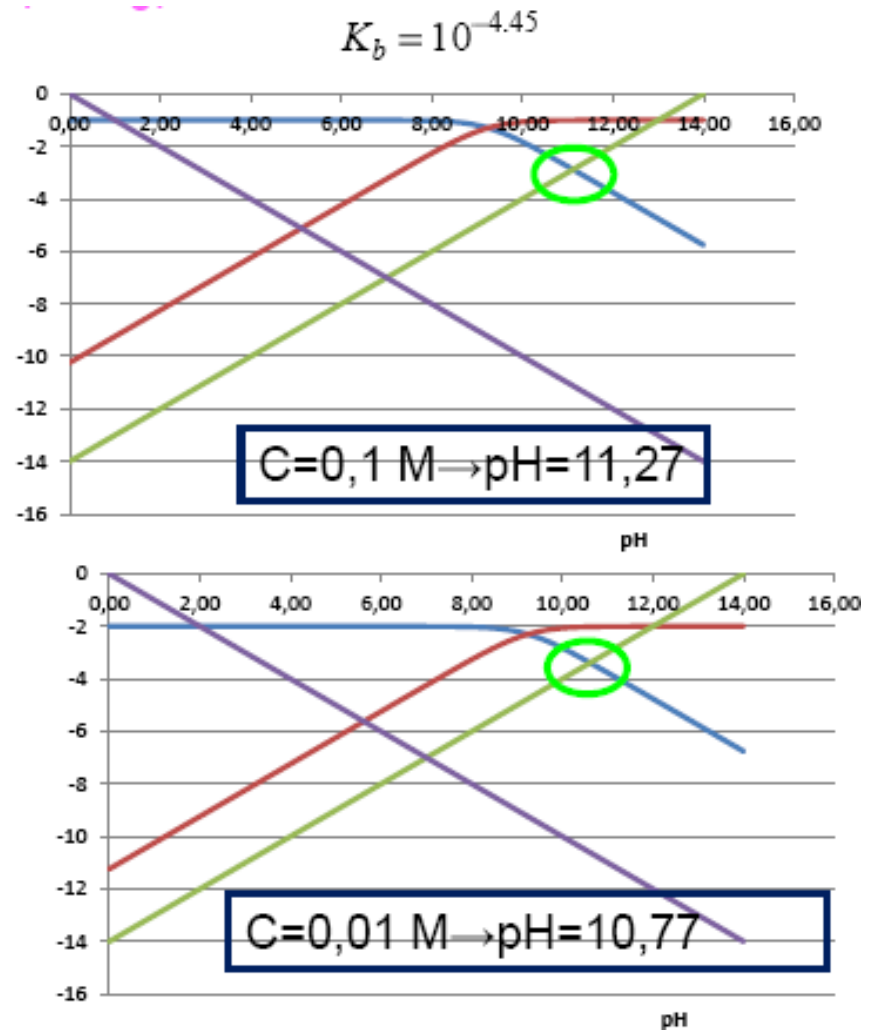
$$c(\text{NH}_3) = [\text{NH}_3] + [\text{NH}_4^+]$$

$$[\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{NH}_4^+]$$

$$K_b = 10^{-4.45} = \frac{[\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} \approx \frac{[\text{OH}^-]^2}{c(\text{NH}_3)}$$

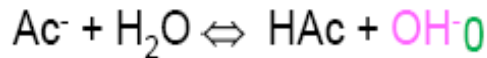
$$[\text{OH}^-] = \sqrt{K_b c_{\text{NH}_3}} = 1,88 \cdot 10^{-3}$$

$$\text{pH} = 11,27$$



## Protolito ahula

NaAz disoluzioa;  $c(\text{NaAz})=0,1 \text{ M}$



$$\text{MB: } c(\text{Az}^-) = [\text{Az}^-] + [\text{HAz}]$$

$$\text{KB: } [\text{Ac}^-] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{Na}^+]$$

$$\text{KB: } [\text{Ac}^-] + [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{HAc}] + [\text{Ac}^-]$$

$$\text{KB: } [\text{OH}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{HAc}]$$

$$[\text{OH}^-] \approx [\text{HAc}]$$

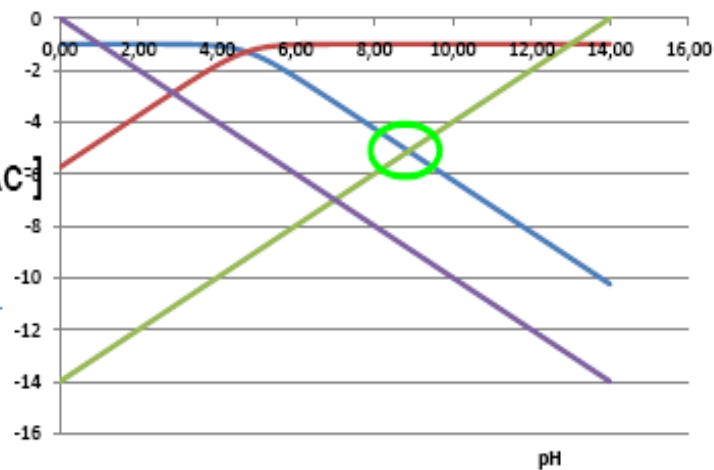
$$K_b = \frac{[\text{HAc}][\text{OH}^-]}{[\text{Ac}^-]} = 10^{-9.35} \quad \longrightarrow \quad K_b = \frac{[\text{OH}^-]^2}{c(\text{Ac}^-)} = 10^{-9.35}$$

$$c(\text{Ac}^-) \approx [\text{Ac}^-]$$



$$c(\text{Az}^-) = c(\text{Na}^+)$$

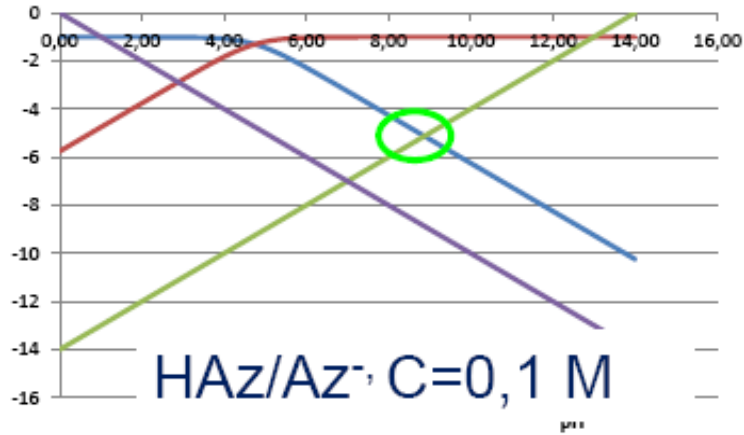
$$K_b = 10^{-9,35}$$



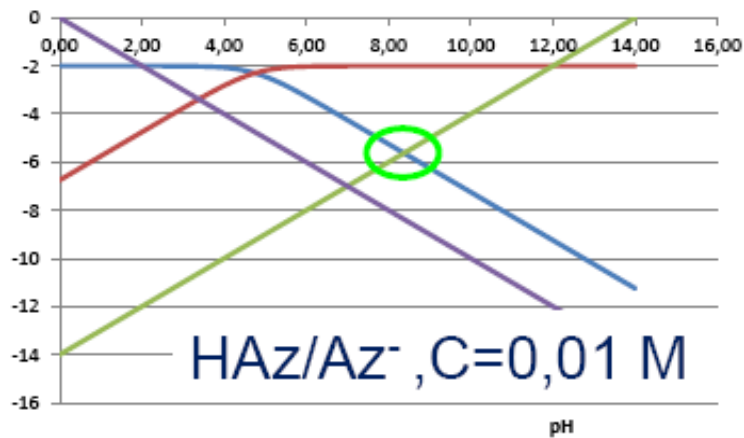
$$[\text{OH}^-] = \sqrt{K_b c_{\text{Ac}^-}}$$

## Protolito ahula

### Azetatoaren disoluzioak



pH=8,83



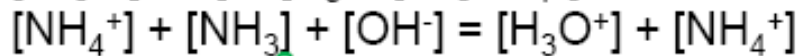
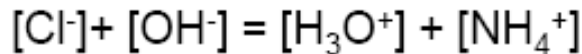
pH=8,33

## Protolito ahula

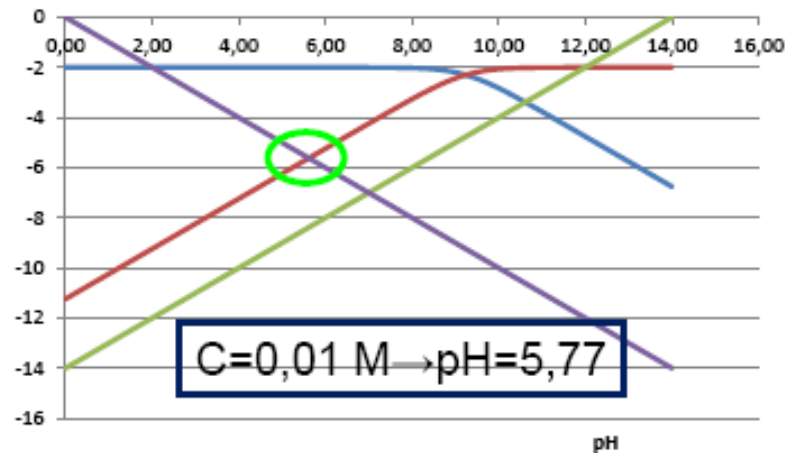
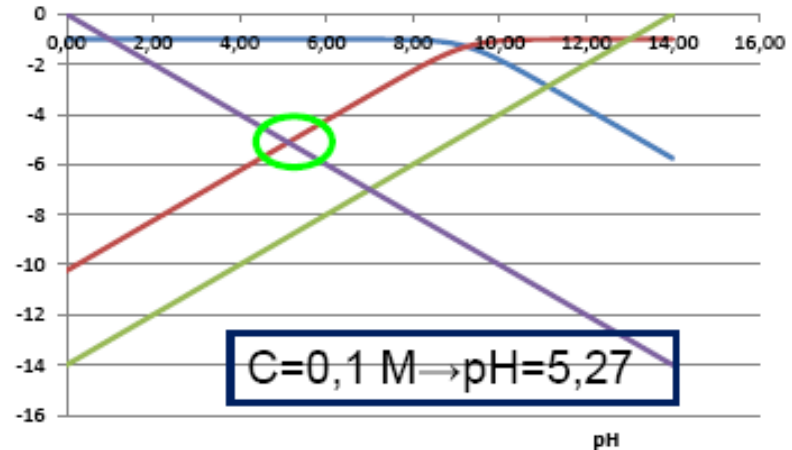
azido ahulak: espezie kationikoak



$$c(\text{NH}_4^+) = [\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3]$$



$$K_a = \frac{[\text{NH}_3][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{NH}_4^+]} \approx \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c(\text{NH}_4^+)} = 10^{-9.55}$$



03.GAIA

**03.4.DISOLUZIO INDARGETZAILEAK**

## Osagaiak

- Disoluzio batean honako bi osagai hauek izanez gero
  - azido edo base ahula
  - dagokion gatza / base konjokatuadisoluzio indargetzailea (D.I.) dugu.

## Baldintzak:

- Bi espezieren kontzentrazioaren arteko erlazioa:  $0,1 < C_{HA} / C_{A^-} < 10$
- Kontzentrazio handiak:  $C_{HA} / K > 10$  eta  $C_{A^-} / K > 10$

## Adibideak.





## Ezaugarriak

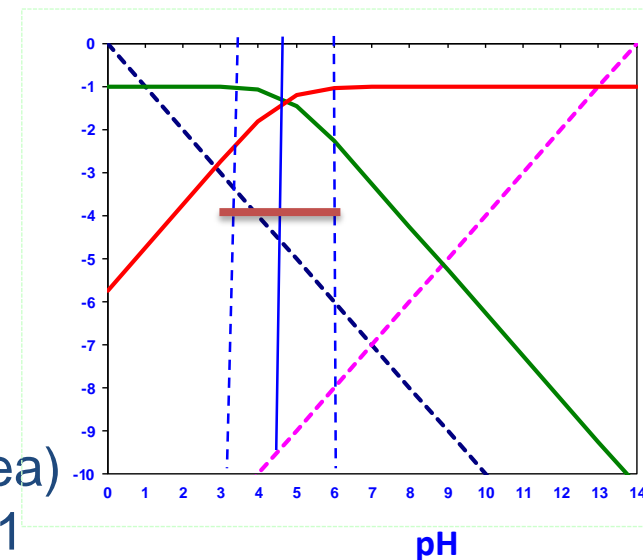
Aldaketak (diluitzean edo sustantzia baten gehiketa) jasan ondoren disoluzio hauen pHa konstantea dihardu

- Izan ere, disoluzio hauetan daude
  - espezie azido bat,  $\text{OH}^-$  taldearekin erreakzionatzeko
  - espezie basiko bat,  $\text{H}_3\text{O}^+$  espeziearekin erreakzionatzeko

Diagrametan 3. zonalde honetan betetzen da:

$$0,1 < C_{\text{HA}} / C_{\text{A}^-} < 10$$

Beraz, espezie honen DI bezala erabiltzeko pH tartea 3-6 da (— markan dagoen zonaldea)  
Orokorrean pH honetan :  $\text{pKa} - 1 < \text{pH} < \text{pKa} + 1$



## HAz/ NaAz sistema

Ikusiko ditugu gertatzen diren erreakzio guztiak

- HAz ahula denez hona hemen dagokion ionizazioa



- NaAz gatza erabat disoziatzen da



- $\text{Na}^+$  katioia ez azidoa da, ez du urarekin erreakzionatuko, hidroxilo taldeak hartzeko joera ez baitu.
- $\text{Az}^-$ , aldiz, base ahula da eta hidrolisia gertatuko da.



## HAz/ NaAz sistema

- Ematen du ez dela ezer gertatzen:



- Kalkuluak sinplifikatzen dira honako suposaketa bat egitean:
- Espezien kontzentrazioak handi samar baldin badira (>0.1M) azidoaren ionizazioa eta gatzaren hidrolisia meziprezagarriak dira. Honela, hasierako kontzentrazioak erabili ahal dugu oreka-kontzentrazioak izango balira bezala eta kalkuluak oso sinpleak geratzen dira.

## HAz/ NaAz sistema



- Kalkuluak sinplifikatzen dira honako suposaketa bat egitean:
- Onartzen da disoluzio honetako orekan:

$$[\text{HAz}] = c_{\text{HAz}} \quad \text{eta} \quad [\text{Az}^-] = c_{\text{NaAz}}$$

## HAz/ NaAz sistema

- Zergatik hasierakoa onargarria da?
- Honela argudiatu ahal dugu
- Disoluzioan [HAz] nondik dator?
  - a) Alde batetik eta nagusiki, hasierako azidotik (1)
  - a) Bestetik [Az<sup>-</sup>] jasandako hidrolisitik(3), oso gutxi, konstantearen baloreak ikusita, eta mesprezagarria. Beraz (3)orekatik sortutako [HAz] ez dugu kontuan hartuko.

$$[\text{HAz}] = c_{\text{HAz}}$$

## HAz/ NaAz sistema

- Zergatik hasierakoa onargarria da?
  - Honela argudiatu ahal dugu
  - Disoluzioan [Az<sup>-</sup>] nondik dator?
- a) Alde batetik, nagusiki gatzaren disoziazioetik (3)
- b) Bestetik azidoaren (1)orekatik oso gutxi, konstantearen baloreak ikusita, eta mesprezagarria. Beraz (1)orekatik sortutako [Az<sup>-</sup>] ez dugu kontuan hartuko.

$$[\text{Az}^-] = c_{\text{NaAz}}$$

## Kalkuluak

- Aurrekoa ikusita D.I. guztietarako esan daiteke:

$$K_a = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[AH]} \qquad [H_3O^+] = K_a \frac{[AH]}{[A^-]} = K_a \frac{c_{AH}}{c_{A^-}}$$

$$pH = pK_a + \log \frac{c_{A^-}}{c_{AH}}$$

Henderson-Hasselbachen  
ekuazioa

Baldintzak

$$\frac{c_{HA}}{K_a} > 10$$

$$\frac{c_{A^-}}{K_a} > 10$$

$$0,1 < \frac{c_{HA}}{c_{A^-}} < 10$$

## HAz/ NaAz sistema pH-diagramaren bidez

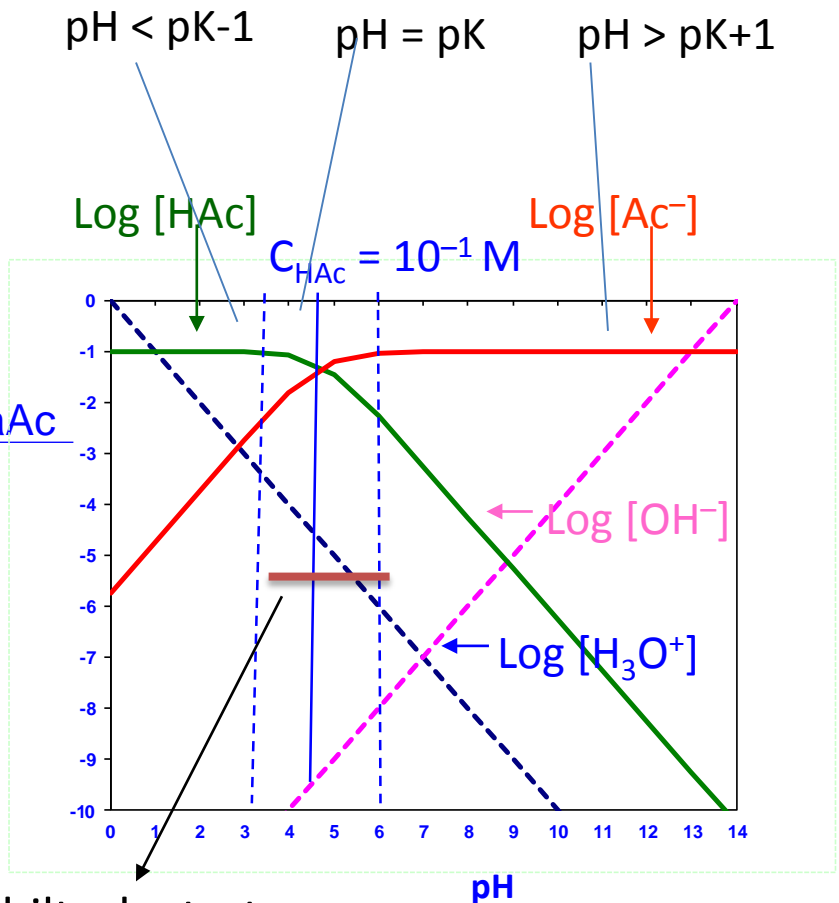
• Kontuan hartzeko erreakzioa:



$$[\text{Ac}^-] = C_{\text{NaAc}} \quad \text{eta} \quad [\text{HAc}] = C_{\text{HAc}}$$

$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{Ac}^-]}{[\text{HAc}]} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] C_{\text{NaAc}}}{C_{\text{HAc}}}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_a \frac{C_{\text{HAc}}}{C_{\text{NaAc}}}$$



Erabiltzeko tartea



## Ezaugarriak

- D.I. diluitzean, pHa konstantea dihardu

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_a \frac{(C_{\text{HAc}})_1}{(C_{\text{NaAc}})_1} = K_a \frac{(C_{\text{HAc}})_2}{(C_{\text{NaAc}})_2}$$

- Azido edo base kantitatea gehituz gero pHa konstantea dihardu

Jarraian konprobaketa egingo dugu

## Ezaugarriak

Zer gertatzen da 1L urari 1M den HCl disoluzioaren 1 mL gehitzean?

1 L H<sub>2</sub>O purua

pH = 7



1 M den HCl 1 mL gehituz gero



$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{Cl}^-] = c_{\text{HCl}}$$

pHa amaieran: pH = 3

## Ezaugarriak

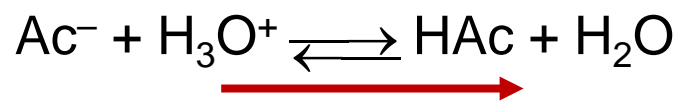
Zer gertatzen da HAc 1 M/NaAc 1 M 1L-ko disoluzio bati 1M den HCl 1 mL gehituz gero?

D.I.-ren pHa kalkulatu da.

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_a \frac{C_{\text{HAc}}}{C_{\text{NaAc}}} = 10^{-4,65} \frac{1}{1} = 10^{-4,65} \quad \text{pH} = 4,65$$

## Ezaugarriak

HCl 1 M 1 mL gehituz gero



$$c_{\text{Ac}^-} = \frac{0,999 \text{ mol}}{1,001 \text{ L}}$$

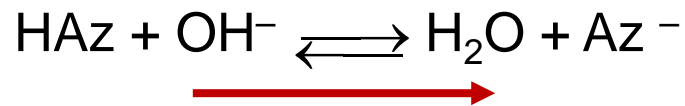
$$c_{\text{HAc}} = \frac{1,001 \text{ mol}}{1,001 \text{ L}}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-4,65} \frac{1,001}{0,999} = 10^{-4,6491}$$

$$\text{pH} = 4,6491$$

## Ezaugarriak

Zer gertatzen da HAc 1 M/NaAc 1 M 1L-ko disoluzio bati 1M den NaOH 1 mL gehituz gero?



$$C_{\text{HAc}} = \frac{0,999 \text{ mol}}{1,001 \text{ L}}$$

$$C_{\text{Ac}^-} = \frac{1,001 \text{ mol}}{1,001 \text{ L}}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-4,65} \frac{0,999}{1,001} = 10^{-4,6508}$$

$$\text{pH} = 4,6508$$

## Indikatzaileak

- $a \rightleftharpoons b + H^+$  azido-base sistemak dira
- a eta b protolitoek kolore desberdina daukate eta azido/base ahulak dira
- Tanta batzuk baino ez direlako erabiltzen, indikatzaileak ez du disoluzioaren pHa aldatzen.
- Kolore-aldaketari dagokion pH-tartea,  $pK_a$ -ren araberakoa izango da:  $pK_a - 1 < pH \text{ kolore-aldaketa} < pK_a + 1$

## Indikatzaileak

Kolore-aldaketari dagokion pH-tartea, pK<sub>a</sub>-ren araberakoa izango da

$$pK_a - 1 < \text{pH kolore-aldaketa} < pK_a + 1$$

Gizakion begiak bereizten du protolito bakoitzaren kolorea bere kontzentrazioa bestearena baino 10 aldiz handiagoan bada. Orduan honako orekatik abiatuta



## Indikatzaileak

- Honako orekatik abiatuta

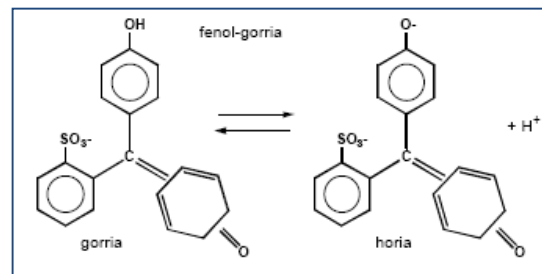


Behapenetako **hiru muga- egoera** suposa dezakegu

$[\text{HIn}] > 10 [\text{In}^-]$  **gorria** kolorea ikusgarria da

$[\text{In}^-] > 10 [\text{HIn}]$  **horia** kolorea ikusgarria da

$0,1 < [\text{HIn}] / [\text{In}^-] < 10$  **gorrixka** kolorea ikusgarria da





## Indikatzaileak

- Lehenbiziko muga

$[HIn] > 10 [In^-]$  **gorria** kolorea ikusgarria da

$$[H_3O^+] = K_a \cdot \frac{[HIn]}{[In^-]} = [H_3O^+] = K_a \cdot \frac{10[In^-]}{[In^-]} = 10 K_a \rightarrow pH = pK_a - 1$$

- Bigarren muga

$[In^-] > 10 [HIn]$  **horia** kolorea ikusgarria da

$$[H_3O^+] = K_a \cdot \frac{[HIn]}{[In^-]} = [H_3O^+] = K_a \cdot \frac{[HIn]}{10[In^-]} = \frac{1}{10} K_a \rightarrow pH = pK_a + 1$$

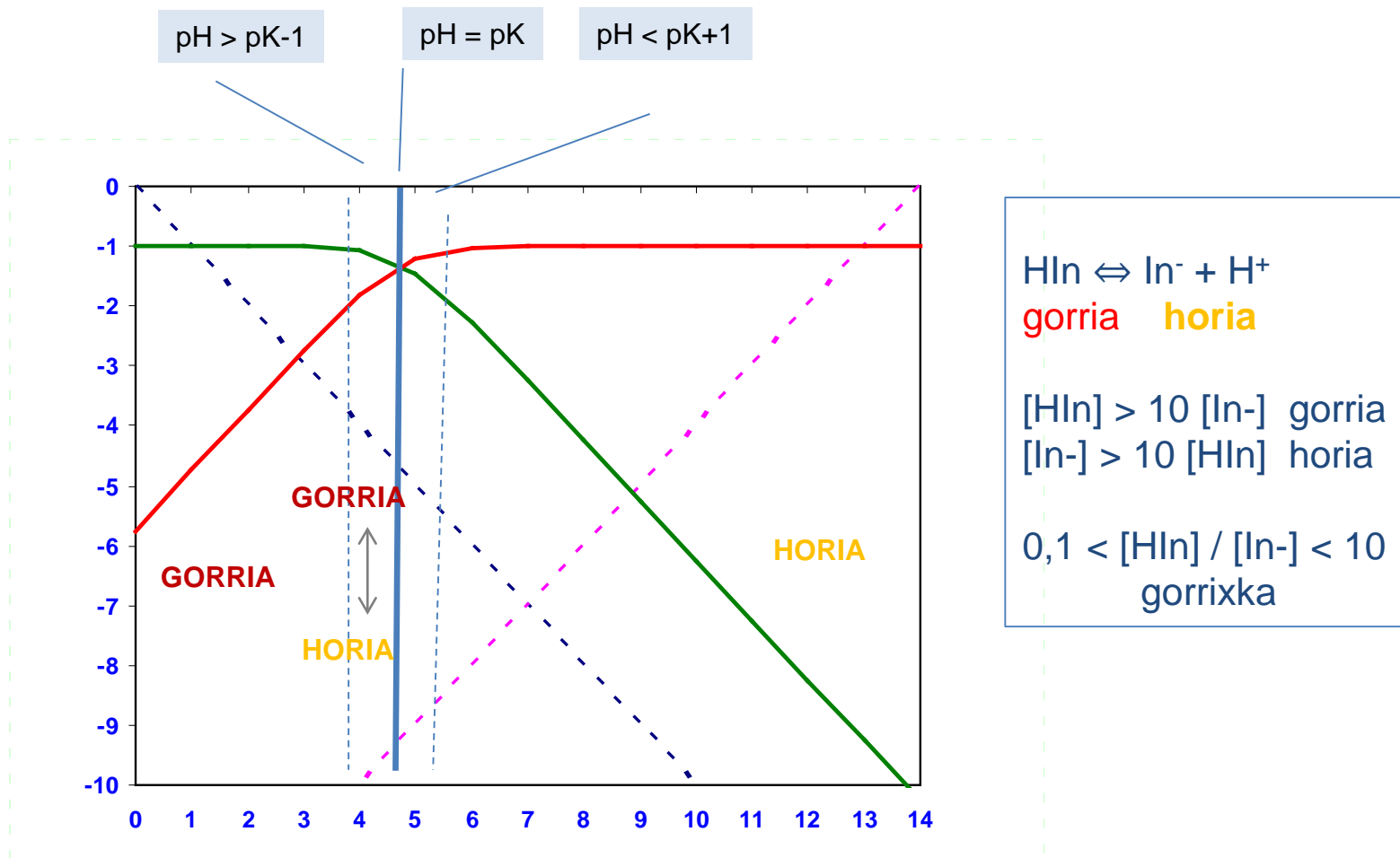
## Indikatzaileak

$0,1 < [\text{HIn}] / [\text{In}^-] < 10$  gorrixka kolorea ikusgarria da

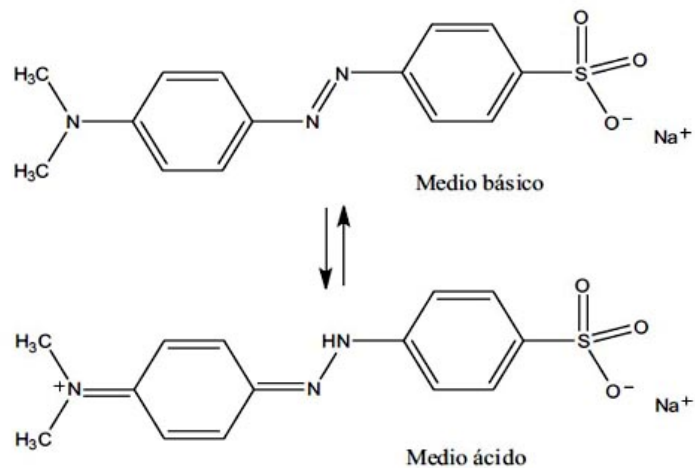
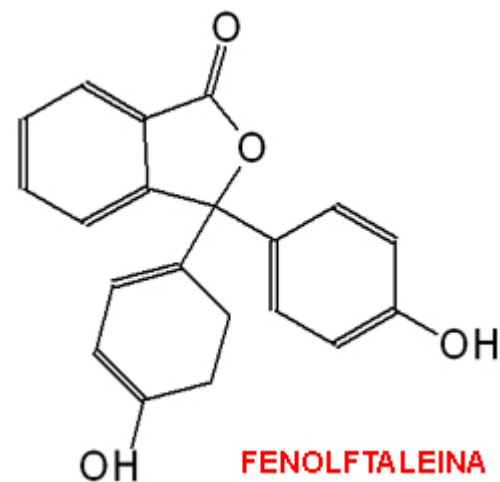
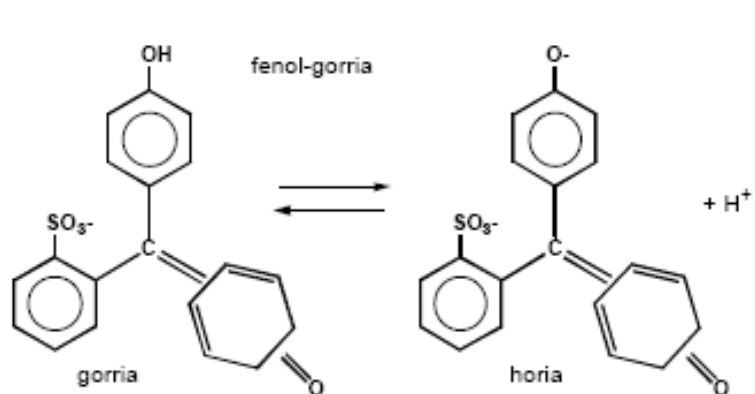
$$pK_a - 1 < pH < pK_a + 1$$

- Grafikoki ikus dezakegu

## 3.6. Indikatzaileak



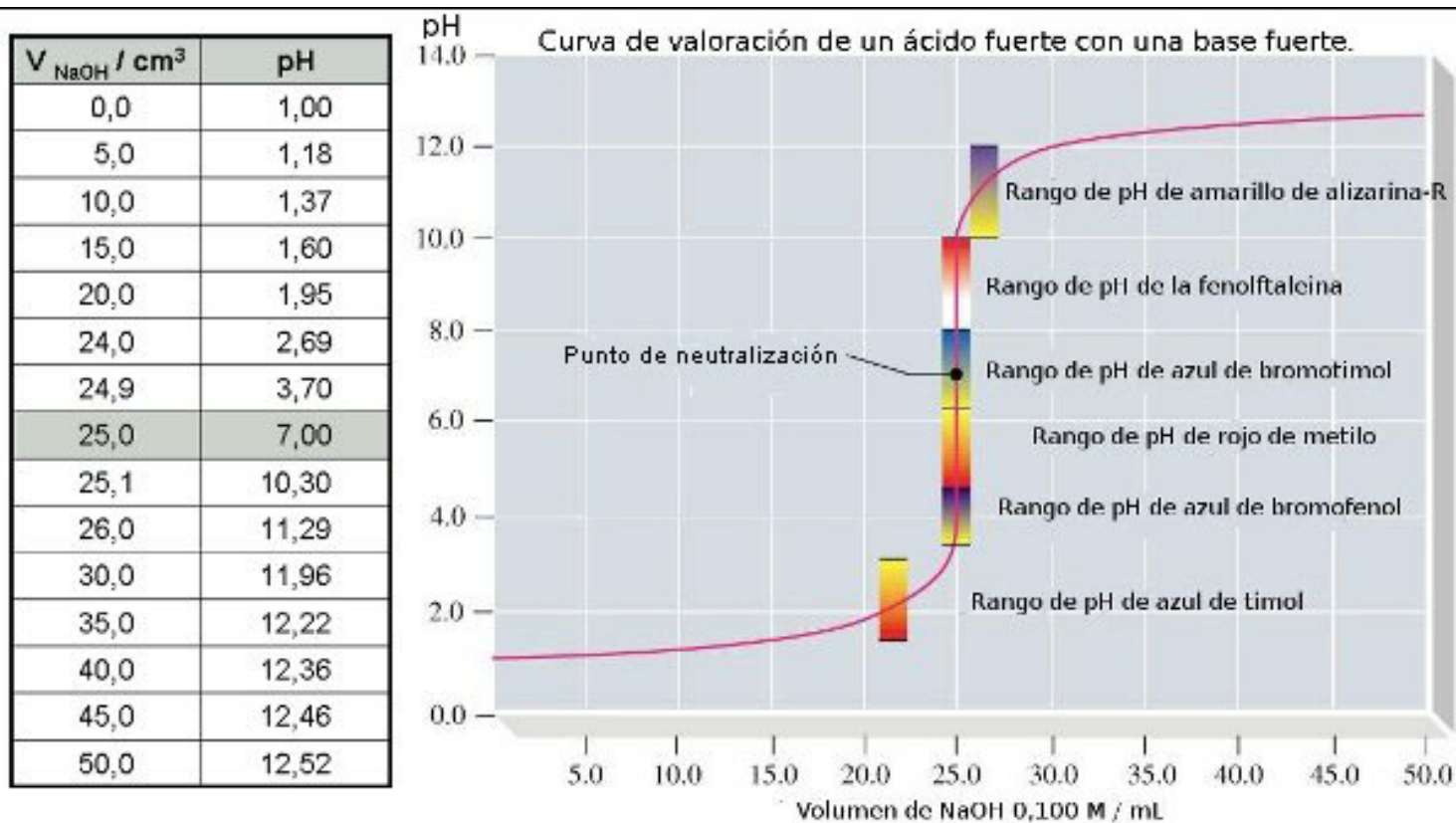
# Indikatzaileak



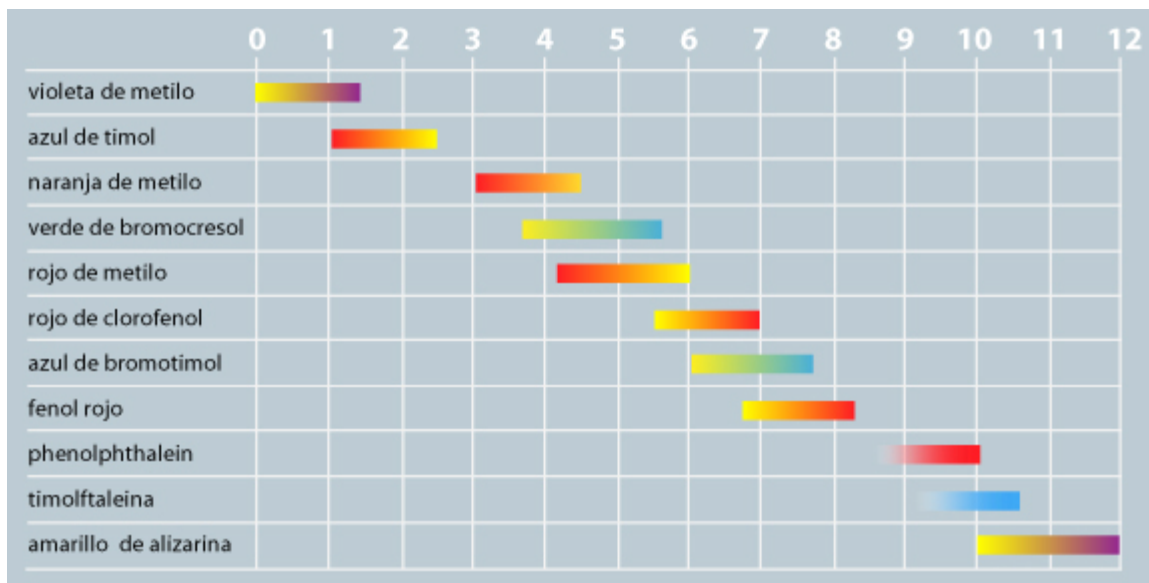
INDICADOR	COLOR ÁCIDO	COLOR BÁSICO	INTERVALO DE pH DE CAMBIO DE COLOR
Azul de timol	Rojo	Amarillo	1,2 - 2,8
Naranja de metilo	Rojo	Amarillo	3,2 - 4,4
Azul de bromofenol	Amarillo	Violeta	3,0 - 4,6
Rojo congo	Azul	Rojo	3,0 - 5,0
Rojo de metilo	Rojo	Amarillo	4,2 - 6,3
Azul de bromotimol	Amarillo	Azul	6,0 - 7,6
Tornasol	Rojo	Azul	6,0 - 8,0
Azul de timol	Amarillo	Azul	8,0 - 9,6
Fenolftaleina	Incoloro	Rosa	8,2 - 9,8
Amarillo de alizarina	Amarillo	Violeta	10,0 - 12,1

Figura 1. Estructura del Anaranjado de metilo en medio básico y en medio ácido

## Indikatzailak



## Indikatzaileak



## BIBLIOGRAFIA

1. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*; 11ª Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
2. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.: *Química General*. Ed: Pearson Education, 10ª Ed., Madrid, (2011)
3. Valenzuela, C.: *Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia*. Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)
4. Lothar Beyer: *Química Inorgánica*. Ed. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
5. Housecroft, C. E., A. Sharpe: *Química Inorgánica*. Ed. Pearson Prentice Hall, Madrid (2006)
6. Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)
7. M. Silva y J. Barbosa: *Equilibrios iónicos y sus aplicaciones analíticas*. Ed. Síntesis S.A., Madrid (2004)



Universidad del País Vasco Euskal Herriko Unibertsitatea



# 04.GAIA: ERREDOX SISTEMAK

Farmaziako graduaren 1.maila  
Kimika Orokorra eta Ez-organikoa



## **1. Oinarrizko kontzeptuen berrikuspena**

1.a: Deskribapena

1.b: Indar elektroeragilea, oreka eta  $\Delta G$

1.c: Elektrodo-potentzial ez estandarra. *Nernsten* ekuazioa

1.d: E eta oreka-konstantea

## **2. Erredox egonkortasuna**

2.a: Uraren erredox egonkortasuna pH-ren arabera

2.b: Oxidazioarekiko metalen egonkortasuna

2.c: Egonkortasuna dismutazioarekiko

### ***3. Elektrodo – potentzial formalak***

3.a: pH-aren eragina

3.b: Elektrodo-potentzial formalak eta disolgarritasuna

### ***4. Indarelektroeragilearen diagramak***

4.a : Latimer-diagramak

4.b: Boltio-baliokidearen edo Frost-en diagramak

# 1. OINARRIZKO KONTZEPTUEN BERRIKUSPENA

## 1. A. :DESKRIBAPENA



### 1. A. :DESKRIBAPENA

Lehenengo oxidazioa ?

- Lehenengo oxidazioa harpe-gizakiek eragin zuten, jakin gabe.
- Cu-zko harriak, malakita berdea, sukalde lanetan sutzarren ondoan ipini omen zuten, bat-batean egurra ikatz bihurtzean harriari “odola” zeriola nabaritzuz.
- Izan ere, harritik, likido gorrizka sortu zen, kobre urtuta, hain zuzen ere.
- Bertan gertatzen den erredukziozko erreakzioa da, ikatza erreduzizailea izanik.
- Izan daiteke metalak urtzeko lehen bidea.



### 1. A. :DESKRIBAPENA

➤ Erredox erreakzioetan sustantzien arteko **elektroien trukea gertatzen da eta, horren ondorioz, zenbait atomok beren oxidazio-egoera aldatzen dute.**

➤ Lewisen azido-base erreakzioetan elektro-bikoteak transferitzen dira basetik azidora baina honek ez du esan nahi horiek erredox erreakzioak direnik, oxidazio-egoeraren aldaketarik ez baitago.

➤ Erredox erreakzioak oso arruntak dira kimikan; esaterako, ur-purifikazioan eta izaki bizidunetan gertatzen diren makina bat erreakzio erredox motakoak dira.

- . Etanolaren oxidazioa azetaldehidoa emateko

- . Akzio-potentzialak: gihar-uzkurdura, ioi-truke....

- . Alkohol-testa

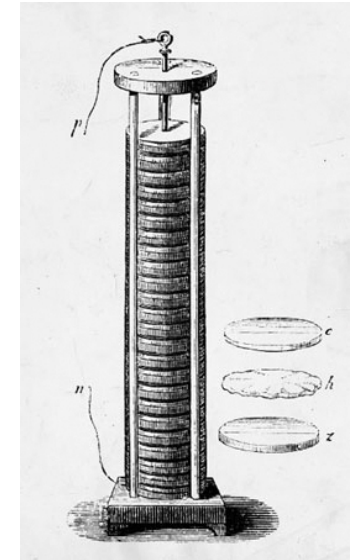
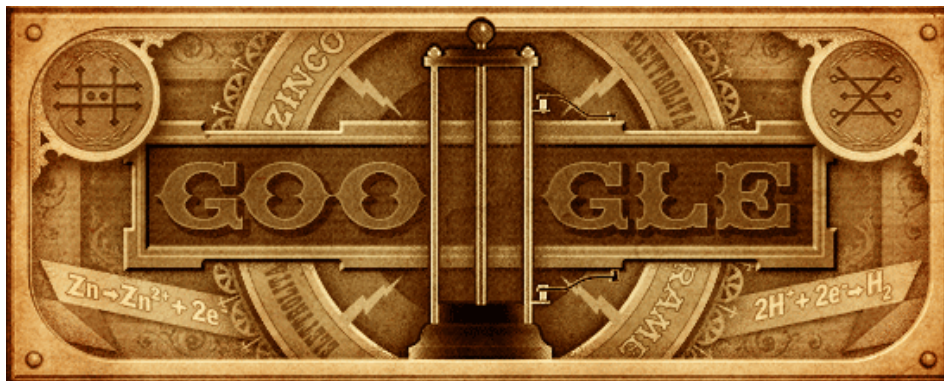
- . Arnasa egitean: O<sub>2</sub>-a CO<sub>2</sub>-ra erreduzitzen da, aldi berean Fe<sup>2+</sup>-a Fe<sup>3+</sup>-ra oxidatzen da (hemoglobinan)

➤ Erredox erreakzioak elektrokimika batera aztertzen dira, arlo honetako oinarria baitira.

## 1. A. :DESKRIBAPENA

## Elektrokimikaren jatorria

- Igelen giharrak bi metalekin ikutuz gero uzkurtzen ziren
- Alessandro Voltak estimulu elektriko hau bi metalen elkarrekintzari zor ziola pentsatu zuen



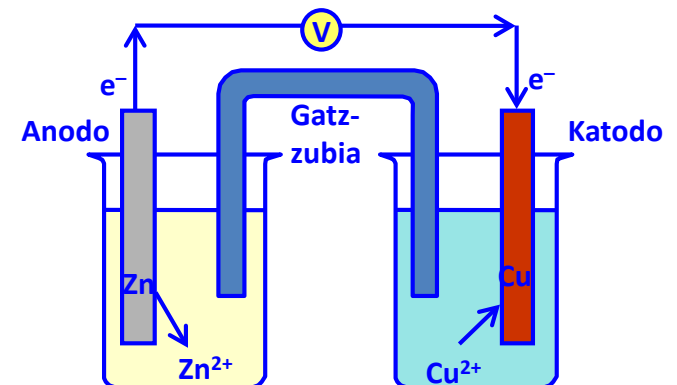
Lehen bateria kimika  
(1800)

A. Voltaren 270. jaiotze-urteurrenaren oroitzapenezko Google-ren logotipoa

## 1. A. :DESKRIBAPENA

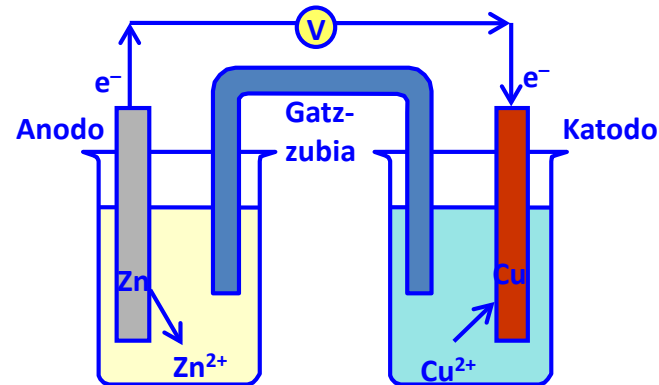
## Pila elektrokimika

- Erreakzio kimikoaren bidez elektrizitatea sorrarazten duen sistema da
- Osagaiak
  - . Bi elektrodo
  - . Bi ioiezko ur-disoluzio
  - . Gatz-zubi bat
  - . Zirkuitu elektriko bat

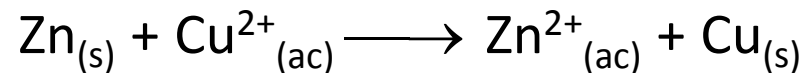




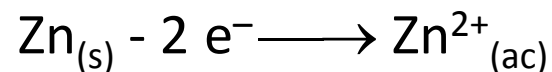
## 1. A. :DESKRIBAPENA



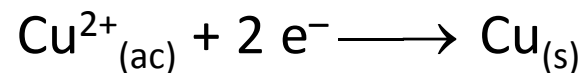
- Gertatzen den erreakzio



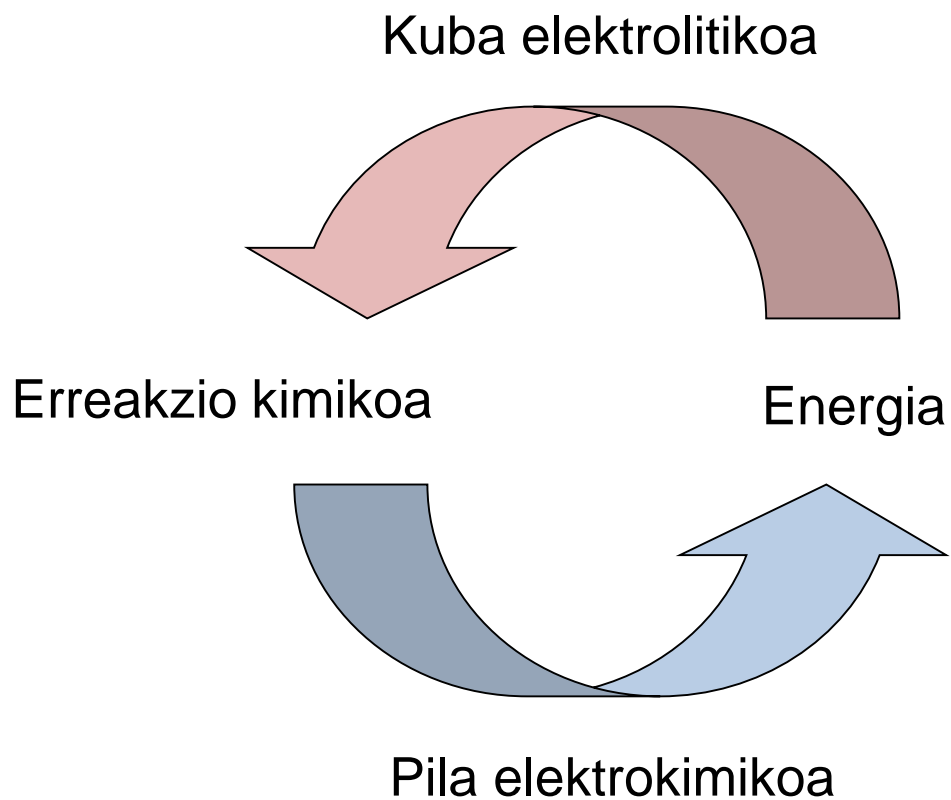
- Oxidazio: erreakzio: elektroien galera



- Erredukzio: elektroien harrapaketa



1. A. :DESKRIBAPENA



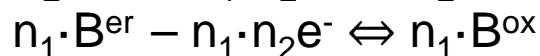
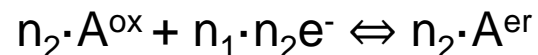
## 1. A. :DESKRIBAPENA

➤ Ikuspuntu teorikotik, azido-base erreakzioak bezala, erredox direlakoak bi erdi-erreakzioetan banatzen dira: erredukzioa eta oxidazioa

➤ Praktikan banaezinak diren erdi-erreakzio biak elkarrekiko mendekotasuna adierazten dute, aldi berean gertatzen baitira

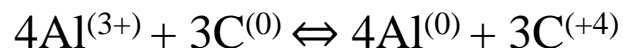
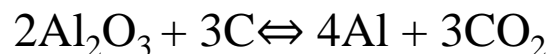


➤ Bi erdi-erreakzioak aldi berean gertatzen direnez, erredox erreakzioa doitzeko elkarrekin **trukatzen diren elektroien kopuruak bera** izan behar dela hartu behar da kontuan.



## 1. A. :DESKRIBAPENA

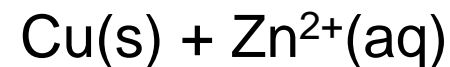
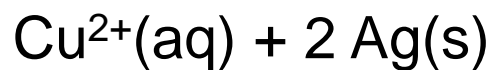
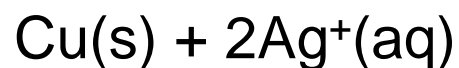
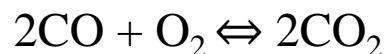
➤ Hurrengo erreakzioa aluminioaren ekoizpenari dagokio



Oxigenoak ez du aldatzen bere oxidazio-egoera, horregatik ez da agertzen erredox erreakzioan

## 1. A. :DESKRIBAPENA

➤ Ondoko erreakzioa ere, erredox motakoa da:



Ez dago  
erreakziorik



ELEKTRODOAK

erredukzioa

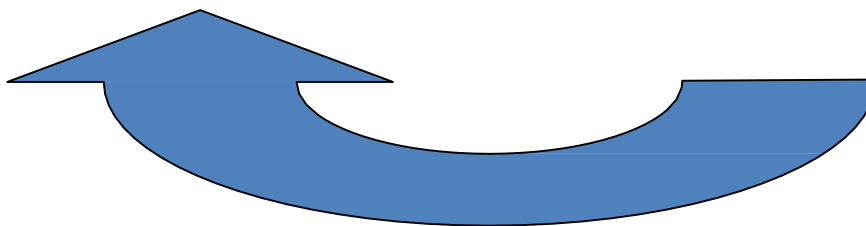


KATODOA

oxidazioa



ANODOA



ELEKTROIAK



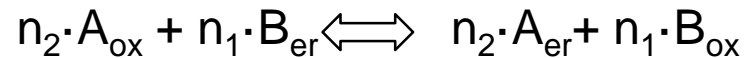
1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA  $\Delta G$ 

$E(A_{ox}/A_{er})$  elektrodo potentziala

$A_{ox}$  espeziak daukan erreduzitzeko ahalmena

$E(B_{ox}/B_{er})$  elektrodo potentziala

$B_{ox}$  espeziak daukan erreduzitzeko ahalmena



INDAR ELEKTROERAGILEA (E)



$$E = E(A_{ox}/A_{er}) - E(B_{ox}/B_{er})$$

edo

$$E = E(A_{ox}/A_{er}) + E(B_{er}/B_{ox})$$

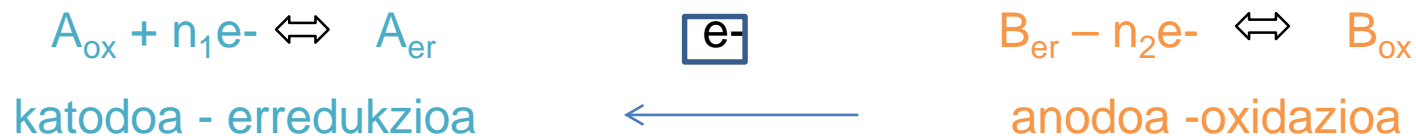
### 1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA $\Delta G$

- $E(A_{ox}/A_{er})$  eta  $E(B_{ox}/B_{er})$ : erredukziozko elektrodo-potentzialak  
 $E(B_{er}/B_{ox})$ : oxidaziozkoa elektrodo-potentzialak (egun ez erabiliak)
- Bi modu hauek erabil ditzakezue baina kontuz potentzialaren zeinuarekin.
- Taulan agertutako E-ren baloreak BETI erredukziozkoak dira eta oxidaziozkoat hartzeko zeinua aldatu behar dugu.
- Zertarako behar dugu indar elektroeragilea?



### 1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA $\Delta G$

- Erredox erreakzioetan elektroien garraioa neur daiteke, **E, indar elektroeragilearen bidez (i.e.e)**



- Nola kalkulatu E ?

Erreduzitzeko ahalmena konparatuz

**1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA  $\Delta G$** 

$A_{ox}$  espeziak daukan erreduzitzeko ahalmena

$B_{ox}$  espeziak daukan erreduzitzeko ahalmena

baino **HANDIAGO**a baldin bada...

**OREKA  $\rightarrow$**

$A_{ox}$  espeziak daukan erreduzitzeko ahalmena

$B_{ox}$  espeziak daukan erreduzitzeko ahalmena

baino **TXIKIAGO**a baldin bada...

**OREKA  $\leftarrow$**

### 1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA, OREKA ETA $\Delta G$

Erredox erreakzioetan elektroien garraioa neur daiteke **E**, indar elektroeragilearen bidez (i.e.e)



$$E(A_{ox}/A_{er}) > E(B_{ox}/B_{er}) \quad \text{OREKA} \rightarrow \quad V_1(\text{zuzena}) > V_2(\text{alderantzikoa})$$

$$E(A_{ox}/A_{er}) < E(B_{ox}/B_{er}) \quad \text{OREKA} \leftarrow \quad V_2(\text{zuzena}) > V_1(\text{alderantzikoa})$$

$$E(A_{ox}/A_{er}) = E(B_{ox}/B_{er}) \quad \text{OREKA} \leftrightarrow \quad V = V_1(\text{zuzena}) = V_2(\text{alderantzikoa})$$

Oreka-konstante

$$K_{\text{oreka}} = \frac{[A_{er}]^{n_2} [B_{ox}]^{n_1}}{[A_{ox}]^{n_2} [B_{er}]^{n_1}}$$

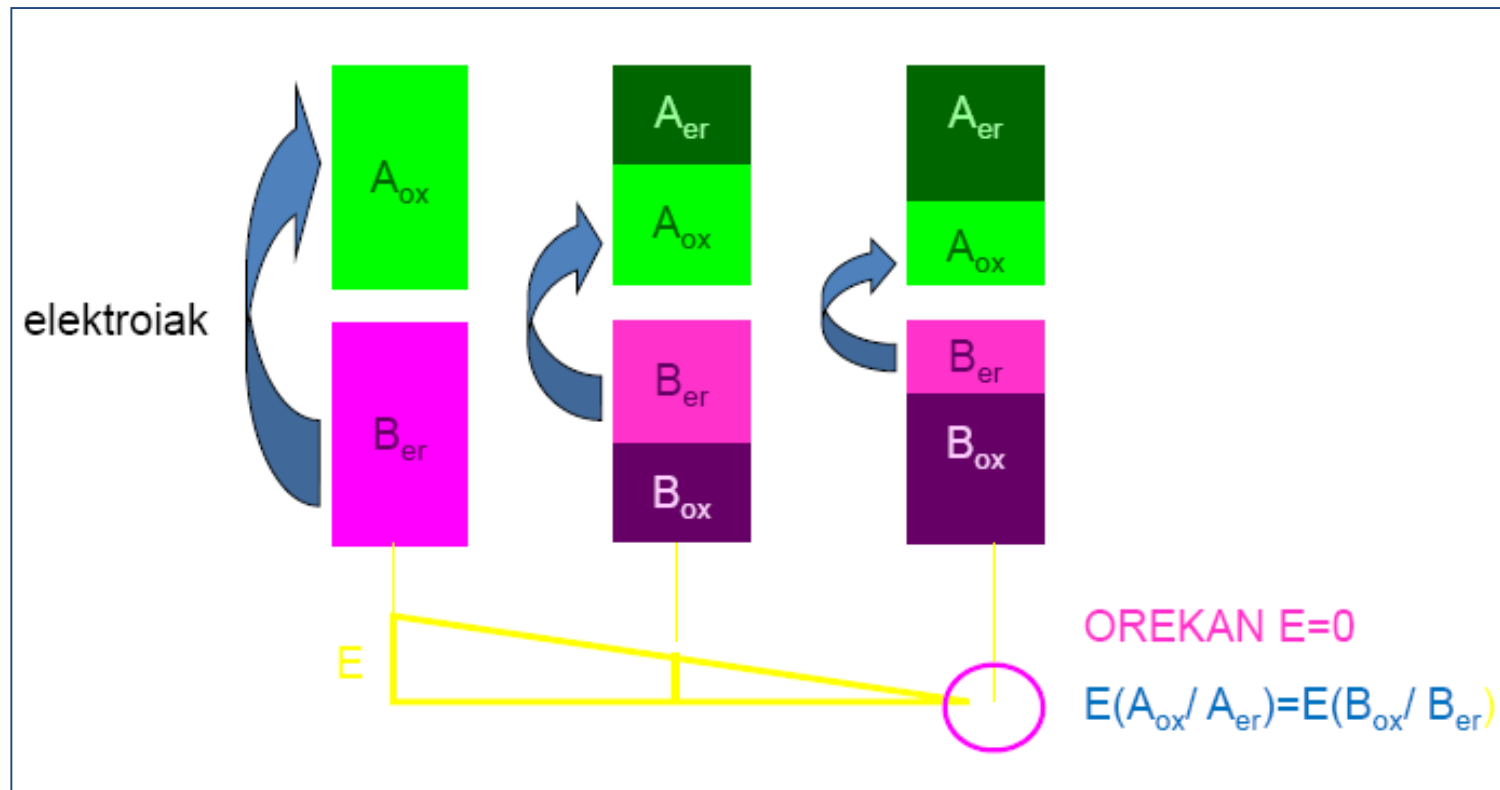
## 1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA $\Delta G$

### INDAR ELEKTROERAGILEA ETA OREKA

➤  $E(A_{ox} / A_{er}) > E(B_{ox} / B_{er})$  , orduan  $A_{ox}$  eta  $B_{er}$  ➔  $A_{er}$  eta  $B_{ox}$



- Erreakzioa gertatzen den heinean produktuak hasten dira eratzten
- Fe eta  $Fe^{II}$  espezieek erredox bikote bat osatzen dute eta kontzentrazio jakin batzuetan orekan egongo dira
- $H^+$  eta  $H_2$  espezieek erredox bikote bat osatzen dute eta kontzentrazio jakin batzuetan orekan egongo dira

**1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA  $\Delta G$** 

**1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA  $\Delta G$** 

- Ikuspuntu kimikotik, sistema bat orekan dagoenean energia askearen aldaketa nuloa da ,  $\Delta G=0$
- $\Delta G$  eta E parametroak harremanean daude
- Ondoko ekuazioa dugu  $\Delta G$  magnitude kimikoaren eta E magnitude elektrikoaren arteko erlazioa finkatzen duena

$$\Delta G = - nFE$$

non n trukutzen den elektroio-kopurua den eta F, Faraday-en konstantea ( $96500 \cdot C \text{ mol}^{-1}$ ).

$$\Delta G = - n F E$$

- . Kimikan orekako sistemaren  $\Delta G = 0$ 
  - . Prozesu espontaneotan  $\Delta G < 0$
  - . Prozesu ez-espontaneotan  $\Delta G > 0$
  
- . Elektrokimikan orekako sistemaren  $E = 0$ 
  - . Prozesu espontaneotan  $E > 0$
  - . Prozesu ez-espontaneotan  $E < 0$

**1. B: INDAR ELEKTROERAGILEA , OREKA ETA  $\Delta G$** 

*Faradayren konstantea elektroi-mol bati dagokion karga da:*

$$(F=e \cdot N=1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}=96485.31 \text{ C mol}^{-1} \approx 96500 \text{ C} \cdot \text{mol}^{-1}).$$

$\Delta G = n \cdot F \cdot E$  magnitudearen **unitateak:  $\text{J mol}^{-1}$**  → energia

Nondik?

$$\begin{aligned} 1\text{C} &= 1\text{A} \cdot \text{s} & (q &= I \cdot t) \\ 1\text{V} &= 1\text{J} \cdot \text{A}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} & (W &= q \cdot V \rightarrow V = W/q) \end{aligned}$$

$$\Delta G = \text{C (mol}^{-1}\text{)}(\text{V}) = (\text{A} \cdot \text{s}) (\text{mol}^{-1})(\text{J A}^{-1} \text{s}^{-1}) = \text{J mol}^{-1}$$



## 1. C: ELEKTRODO-POTENZIAL ESTANDARRA

➤  $E_{(A_{ox}/A_{er})}$  elektrodo potentzialak ondoko aldagaiekiko mendekotasuna adierazten du

- . Guztizko Kontzentrazioa
- . Temperatura
- . Presioa



- . Guztizko kontzentrazioa=1 M
- . Temperatura=25°C
- . Presioa=1 atm

➤ Baldintza estandarretan:

$E^{\circ}(A_{ox}/A_{er})$  elektrodo potentzial estandarra

IUPAC: Elektrodo potentzial estandarra edo normala,  $E^{\circ}$

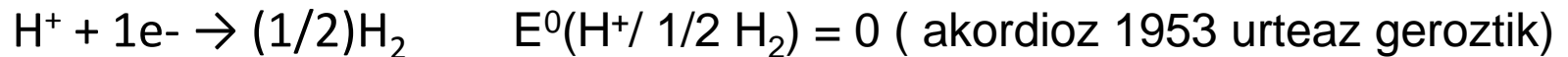
*“Erdi-gelaxka bateko erredukzio-erreakzioaren indar elektroeraginearen balioa”*

## 1. C: ELEKTRODO-POTENZIAL ESTANDARRA

- Nola determinatu espezie baten Elektrodo Potentzial Estandarra?

Azido-Base sistemetan bezala erreferentziako elektrodo-potentzial estandar finkatzen da eta konparazioz beste guztien baloreak determinatzen dira

- Honela hidrogenoaren elektrodo-potentzial estandarra definitzen da

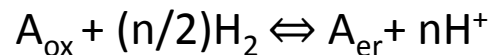
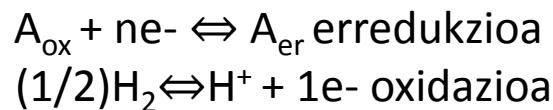


- $A_{\text{ox}} / A_{\text{er}}$  bikotearen sendotasuna  $\text{H}^+ / 1/2 \text{H}_2$  bikotearenarekin konparatzen da

## 1. C: ELEKTRODO-POTENZIAL ESTANDARRA

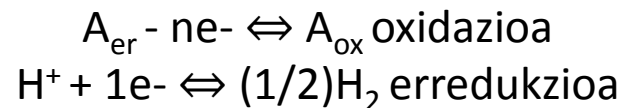
$A_{ox}/A_{er}$  bikotearen sendotasuna  $H^+/1/2H_2$  bikotearenarekin konparatzen da

$$E^0(A_{ox}/A_{er}) > E^0(H^+/1/2 H_2) = 0$$



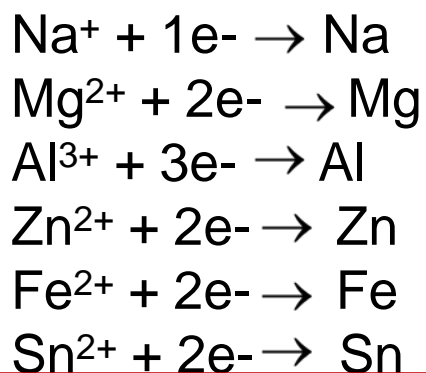
$$E = E^0(A_{ox}/A_{er}) - E^0(H^+/1/2 H_2) = E^0(A_{ox}/A_{er})$$

$$(E^0(A_{ox}/A_{er}) < E^0(H^+/1/2 H_2) = 0)$$



$$E = E^0(H^+/1/2 H_2) - E^0(A_{ox}/A_{er}) = -E^0(A_{ox}/A_{er})$$

Guzti hauek oxidatu ahal ditugu  
H<sup>+</sup> erabiliz



$$E^0 = -2.71 \text{ V}$$

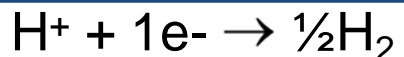
$$E^0 = -2.36 \text{ V}$$

$$E^0 = -1.66 \text{ V}$$

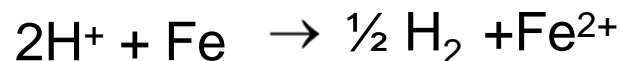
$$E^0 = -0.76 \text{ V}$$

$$E^0 = -0.41 \text{ V}$$

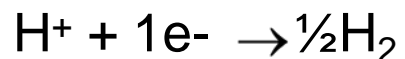
$$E^0 = -0.41 \text{ V}$$



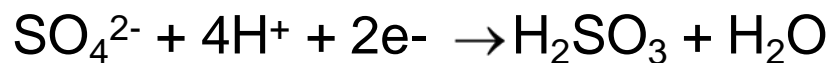
$$E^0 = 0.0 \text{ V}$$



Guzti hauek ezin ditugu oxidatu  
H<sup>+</sup> erabiliz



$$E^0 = 0.0 \text{ V}$$



$$E^0 = 0.20 \text{ V}$$



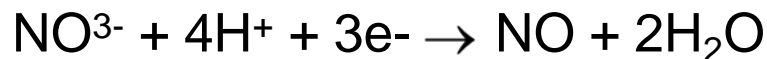
$$E^0 = 0.34 \text{ V}$$



$$E^0 = 0.80 \text{ V}$$



$$E^0 = 0.85 \text{ V}$$



$$E^0 = 0.96 \text{ V}$$



$$E^0 = 1.20 \text{ V}$$



$$E^0 = 1.69 \text{ V}$$



### 1. C: ELEKTRODO-POTENTZIAL EZ – ESTANDARRA. NERNSTEN EKUAZIOA

- Lan-baldintzetan espezieen kontzentrazioak ez du zertan  $[A]=1M$  izan behar eta, horregatik, komeni da elektrodo-potentzial ez-estandarrek kalkulatu ahal izatea
- Horretarako Nernsten ekuazioa garatu beharra dago, betiko erreakzioatik abiatuta
- Hau da, baldintza estandarretan elektrodo potentziala:  $E^\circ$
- Baina edozein baldintzetan:  $E$  ?????

## 1. C: ELEKTRODO-POTENTZIAL EZ – ESTANDARRA. NERNSTEN EKUAZIOA

➤ Termodinamikak dio:

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q, \text{ baina } \Delta G = -nFE \text{ eta } \Delta G^\circ = -nFE^\circ \text{ direnez:}$$

$$-nFE = -nFE^\circ + RT \ln Q$$

➤ Gai guztietan zati nF eraginez:

$$-E = -E^\circ + \frac{RT}{nF} \ln Q$$

➤ Zeinuak aldatuz:

$$E = E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln Q$$

$$\frac{R(J.mol^{-1}K^{-1})T(K)}{F(C.mol^{-1})} .2,3026 = 0,059V$$

➤  $\ln x = 2,3026 \log x$  denez eta konstanteen baloreak ordezkatzuz:

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

Nernsten  
ekuazioa

## 1. C: ELEKTRODO-POTENZIAL EZ – ESTANDARRA. NERNSTEN EKUAZIOA

➤ Baina zer da Q?

Gogoratu:

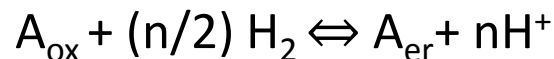


➤ Aktibitate-koefizientea, Q: une jakin batean dauden kontzentrazioen erlazioa

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

➤ Erredox-bikote batentzat, erreakzio honekin abiatuta, eta  $[H^+]^n = 1$

$$[P_{H_2}] = 1 \text{ atm}$$



$$Q = \frac{[A_{er}][H^+]^n}{[A_{ox}][P_{H_2}]^{\frac{n}{2}}} \longrightarrow Q = \frac{[A_{er}]}{[A_{ox}]}$$



## 1. C: ELEKTRODO-POTENZIAL EZ – ESTANDARRA. NERNSTEN EKUAZIOA

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

$$E = E^{\circ} - \frac{0,059}{n} \log \frac{[A_{er}]}{[A_{ox}]}$$

Elektrodo baterako

Baina zelula batentzat:

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

$$E = E^{\circ} - \frac{0,059}{n} \log \frac{[A_{er}]^{n_2} [B_{ox}]^{n_1}}{[A_{ox}]^{n_2} [B_{er}]^{n_1}}$$

Zelula baterako

## 1. C: ELEKTRODO-POTENZIAL EZ – ESTANDARRA. NERNSTEN EKUAZIOA

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

Nernsten ekuazioa

Zelula baterako

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

Elektrodo baterako

$$Q = \frac{[A_{er}]}{[A_{ox}]}$$

$$E = E^\circ - \frac{0,059}{n^*} \log \frac{[A_{er}]^{n_2} [B_{ox}]^{n_1}}{[A_{ox}]^{n_2} [B_{er}]^{n_1}}$$

$$E = E^\circ - \frac{0,059}{n} \log \frac{[A_{er}]}{[A_{ox}]}$$

 $n^*: n_1 \cdot n_2$

**1. C: ELEKTRODO-POTENZIAL EZ – ESTANDARRA. NERNSTEN EKUAZIOA**

Oreka-konstantea eta pila baten elektrodo-potentzialaren arteko erlazioa

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

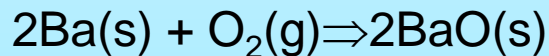
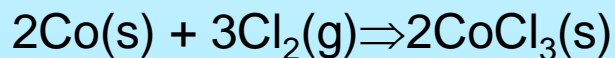
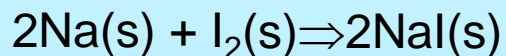
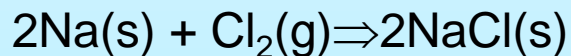
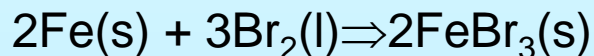
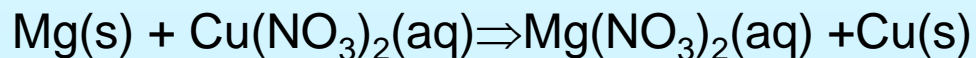
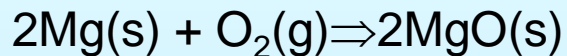
Orekan  $E = 0$  eta  $Q = K$

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

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

# Ariketa 1.Kontzeptuak lantzeko

Hurrengo erreakzioetan identifikatu oxidatzen eta erreduzitzen den elementua:



# Ariketa 2. Oreka-konstantea kalkulua

25 °C-tan uretan disolbaturiko burdina(III) ioiaren eta kobre metalikoaren arteko erreakzioaren oreka-konstantea,  $k_{or}$ , kalkulatu.



Datuak:  $E^0_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}} = + 0,771 \text{ V}$ ;  $E^0_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} = + 0,337 \text{ V}$

$$E^0 = \frac{0,059}{n} \log k_{or}$$

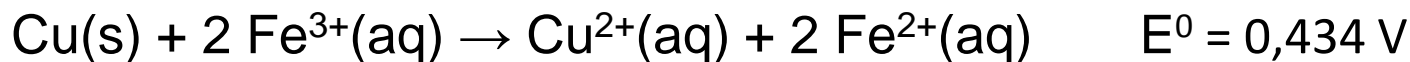
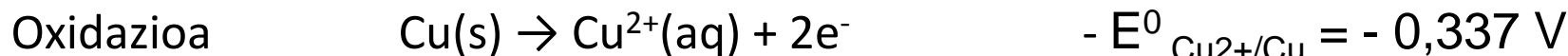
n: erreakzioan transferituriko elektroien molen kopurua (kalkulatzeko erdi-erreakzioak idazteak laguntzen digu)

# Ariketa 2. Oreka-konstantea kalkulak

25 °C-tan uretan disolbaturiko burdina(III) ioien eta kobre metalikoaren arteko erreakzioaren oreka-konstantea,  $k_{or}$ , kalkulatu.



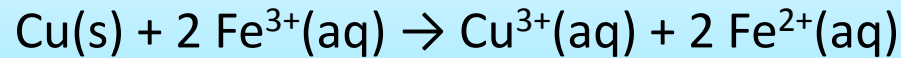
Datuak:  $E^0_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}} = + 0,771 \text{ V}$ ;  $E^0_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} = + 0,337 \text{ V}$



$E^0 = 0,434 \text{ V} > 0 \rightarrow$  erreakzioa espontaneo izango da

# Ariketa 2.Oreka-konstantea kalkulua

25 °C-tan uretan disolbaturiko burdina(III) ioien eta kobre metalikoaren arteko erreakzioaren oreka-konstantea,  $k_{or}$ , kalkulatu.



Datuak:  $E^0_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}} = +0,771 \text{ V}$ ;  $E^0_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} = +0,337 \text{ V}$

$k_{or}$  kalkulua

$$E^0_{\text{zel}} = 0,434 \text{ V} = (0,059/2) \cdot \log k_{or}$$

$$\text{Log } k_{or} = 14,71$$

$$k_{or} = 10^{14,71} = 5,15 \cdot 10^{14}$$



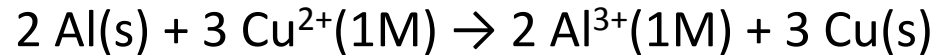
OSO  
HANDIA

# Ariketa 3.erreakzioaren espontaneotasuna aurreratego kalkulak

Uretan disolbaturiko  $\text{Cu}^{2+}(\text{aq})$  ioiak Al metalikoa desplazatuko du?

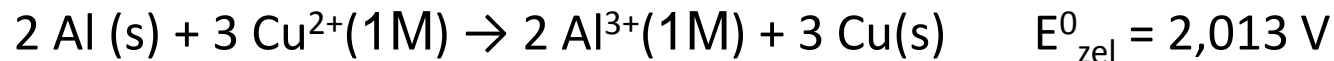


Datuak:  $E^0_{\text{Al}^{3+}/\text{Al}} = - 1,676 \text{ V}$  ;  $E^0_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} = + 0,337 \text{ V}$



Oxidazioa       $2 [\text{Al} (\text{s}) \rightarrow \text{Al}^{3+}(\text{1M}) + 3 \text{e}^-]$       -       $E^0_{\text{Al}^{3+}/\text{Al}} = 1,676 \text{ V}$

Erredukzioa       $3[\text{Cu}^{2+}(\text{1M}) + 2 \text{e}^- \rightarrow \text{Cu} (\text{s})]$        $E^0_{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} = 0,337 \text{ V}$



$E^0_{\text{zel}} = 2,013 \text{ V} > 0 \rightarrow$  erreakzioa espontaneo da, bai



## Eranskina: pH-arekiko potentzial estandarra

- Erredukzio potentzial estandarra,  $E^0$ , pH-arekiko menpekotasuna du hurrengo bi kasutan:erreakzioaren ingurunean
  - $H^+$  edo  $OH^-$  badaude
  - Hidroxido disolbaezinak sor ditzaketen ioi metalikoak badaude
- Beraz, horrelako kasuetan erreakzio ingurune desberdinetako potentzialak kalkulatu behar da
- Nernsten ekuazioaren baliatuz kalkula daiteke
- Azter dezagun pHak duen eragina

- Adibidez



- Nernsten ekuazioa aplikatuz gero

$$E = E^0_{\text{A}} - \frac{0,0592}{2} \log \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{ClO}_4^-][\text{H}^+]^2}$$

- Baldintza estandarretan  $\Rightarrow [ ] = 1 \Rightarrow 2^{\circ} \text{ gaia} = 0 \Rightarrow E = E^0_{\text{A}}$
- pH  $\neq 0$   $\Rightarrow [ ] = 1$  baina  $[\text{H}^+] \neq 1 \Rightarrow E \neq E^0_{\text{A}}$
- Beraz, Nernsten ekuazioan ordezkatzuz

$$E = 1,19 - \frac{0,0592}{2} \log \frac{1}{[\text{H}^+]^2} = 1,19 - 0,0592 \text{ pH}$$

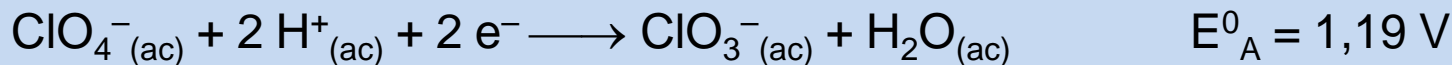
- $E^0$  ingurune basikoan,  $\text{pH} = 14$

$$E^0_{\text{B}} = 1,19 - 0,0592 (14) = 0,36 \text{ V}$$

- Beraz
  - $E^0_{\text{A}} = 1,19 \text{ V}$
  - $E^0_{\text{B}} = 0,36 \text{ V}$

Kontuan izateko:

- Le Chatelierren Printzipioaren arabera



**oxidatzailea izateko ahalmena handitzen da  $[\text{H}^+]$  handitzean**

## 2. ERREDOX EGONKORTASUNA

## 2.a. uraren erredox sistema

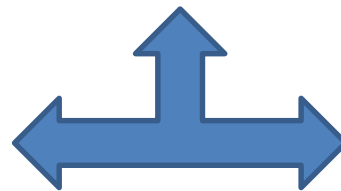
- Uretan erreakzioetan.... uraren funtzioa ikuslea besterik ez da?
- Edozein espezieak ura oxidatu edo erreduzitu egin ahal du eta honek uretan **espezieen egonkortasuna murrizten du**



Bien arteko ELKARREKINTZA

Erreakzioaren gertaera

Uraren egonkortasuna



Bikote erredoxaren egonkortasuna

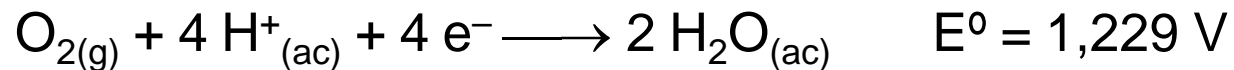
- Ikusiko dugu egonkortasuna pH-arekiko

## 2.a. uraren erredox sistema

Urak oxidatu edo erreduzitu egin dezakeen edozein espeziea ez da izango egonkorra uretan. Kontuan izan behar da:

*Uraren oxidazio prozesua (oxigenoaren erredukzio prozesua)*

Erreakzioa honakoa da



- Nernst-ekuazioa aplikatuz ,  $\text{pH} \neq 0$  ,

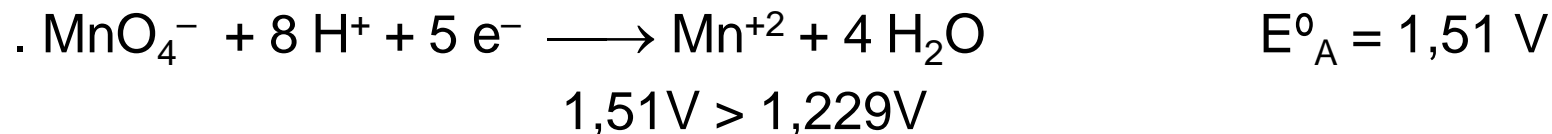
$$p(\text{O}_2)=1\text{atm} , [\text{H}_2\text{O}]= 1\text{M}$$

$$E = E^\circ - \frac{0,0592}{4} \log \frac{1}{[\text{H}^+]^4} = 1,229 - 0,0592 \text{ pH}$$

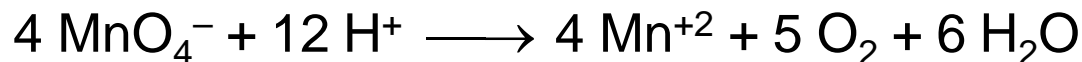
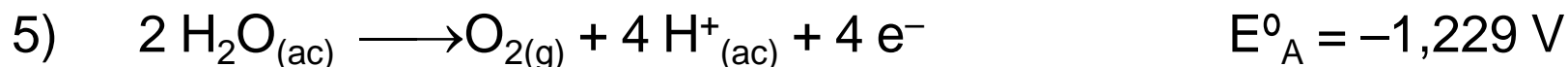
- Uretan edozein espeziea  $E > 1,229 - 0,0592\text{pH}$  izanez gero erreduzituko da, ura oxidatuz

## 2.a. uraren erredox sistema

Demagun  $\text{MnO}_4^-$ ,  $\text{pH} = 0$ ,  $[\text{H}^+] = 1$



$\cdot \text{MnO}_4^-$  ioiak  $\text{pH} = 0$  denean uretan erreduzituko da ura oxidatuz



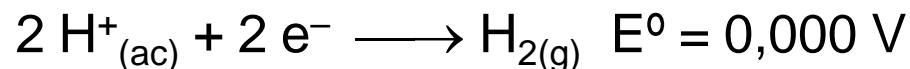
$$E^\circ_{\text{A}} = 1,51 - 1,229 = 0,281 \text{ V} > 0$$

$E^\circ > 0 \Rightarrow$  berezko erreakzioa baldintza estandarretan

## 2.a. uraren erredox sistema

### *Uraren erredukziozko prozesua*

. Erreakzioa honakoa da



. Nernsten ekuazioa aplikatuz,  $\text{pH} \neq 0$  ,  $p(\text{H}_2)=1 \text{ atm}$

$$E = E^0 - \frac{0,0592}{2} \log \frac{1}{[\text{H}^+]^2} = -0,0592 \text{ pH}$$

. Uretan edozein espeziea  $E < -0,0592 \text{ pH}$  izanez gero oxidatuko da, ura erreduzituz

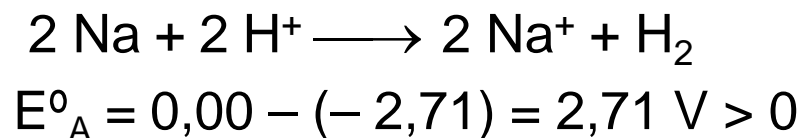


## 2.a. uraren erredox sistema

Demagun Na eta  $\text{pH} = 0$



$\text{Na}^+$  ioia  $\text{pH} = 0$  denean oxidatuko da, ura erreduzituz



$E^{\circ} > 0 \Rightarrow$  berezko erreakzio baldintza estandarretan

## 2.a. uraren erredox sistema. LABURBILDUZ.....

## Uraren oxidazioa

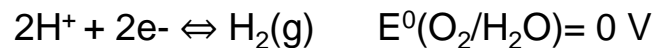


$$E(1/2\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}) = E^0(1/2 \text{O}_2/ \text{H}_2\text{O}) - \frac{0,059}{4} \log \frac{1}{[P_{\text{O}_2}] [\text{H}^+]^4}$$

$$p(\text{O}_2)=1\text{atm} , [\text{H}_2\text{O}]= 1\text{M}$$

$$E(\text{O}_2/ \text{H}_2\text{O}) = 1,23 - 0,059\text{pH}$$

## Uraren erredukzioa



$$E^0(\text{H}^+/\text{H}_2) = E(\text{H}^+/\text{H}_2) - \frac{0,059}{2} \log \frac{[P \text{H}_2]}{[\text{H}^+]^2}$$

$$p(\text{H}_2)=1 \text{ atm}$$

$$E(\text{H}^+/\text{H}_2) = - 0.059\text{pH}$$

$\text{H}_2 / \text{H}_2\text{O} (\text{H}^+) / \text{O}_2$   
sistema elektrolitikoa

## 2.a. uraren erredox sistema

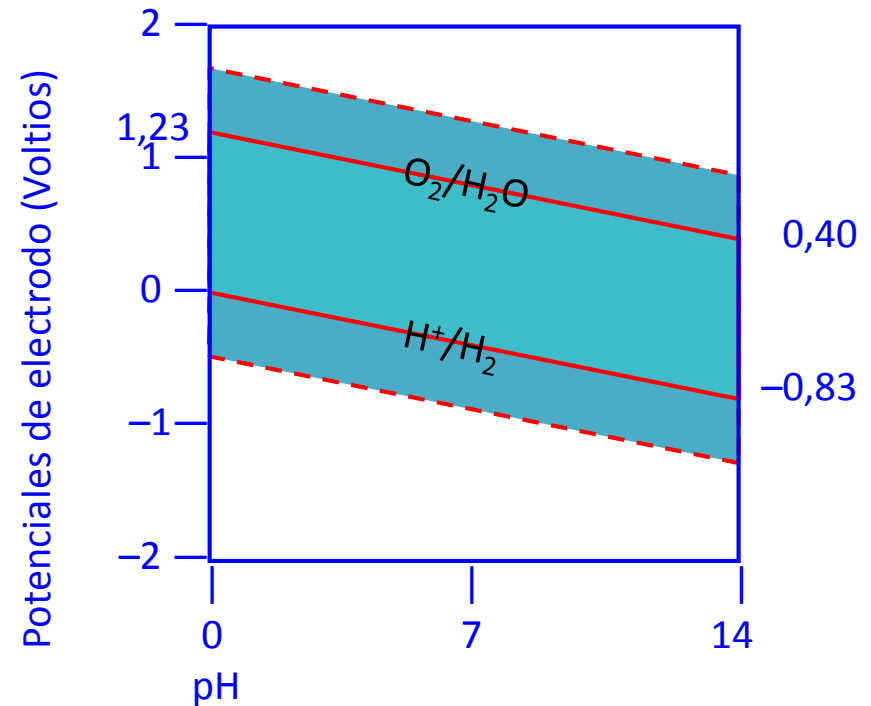
Ekuazioak grafikoki adierazita:

. Uraren oxidazioa

$$E = 1,229 - 0,0592 \text{ pH}$$

. Uraren erredukzioa

$$E = - 0,0592 \text{ pH}$$



*Edozein espeziek, pH jakin bateko E-ren balorea bi lerro hauen artean izan ezean, ez da izango egonkorra bi eratan, oxidatuta eta erreduzituta, bakarrik haietariko batean baizik*

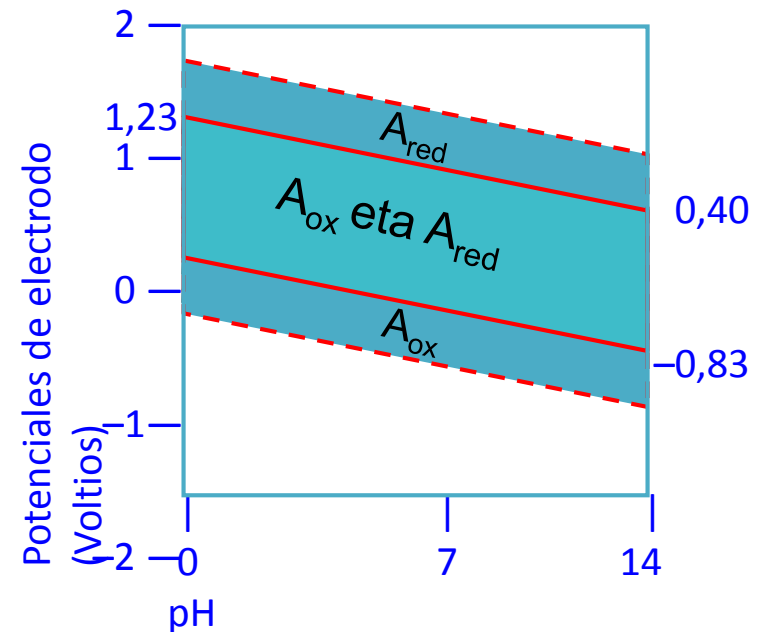
## 2.a. uraren erredox sistema

$$E_{(1/2 \text{ O}_2/\text{H}_2\text{O})} > E(\text{A}_{\text{ox}}/\text{A}_{\text{red}}) > E_{(\text{H}_2\text{O}/1/2\text{H}_2)}$$

$\text{A}_{\text{ox}}$  eta  $\text{A}_{\text{red}}$  egonkorak

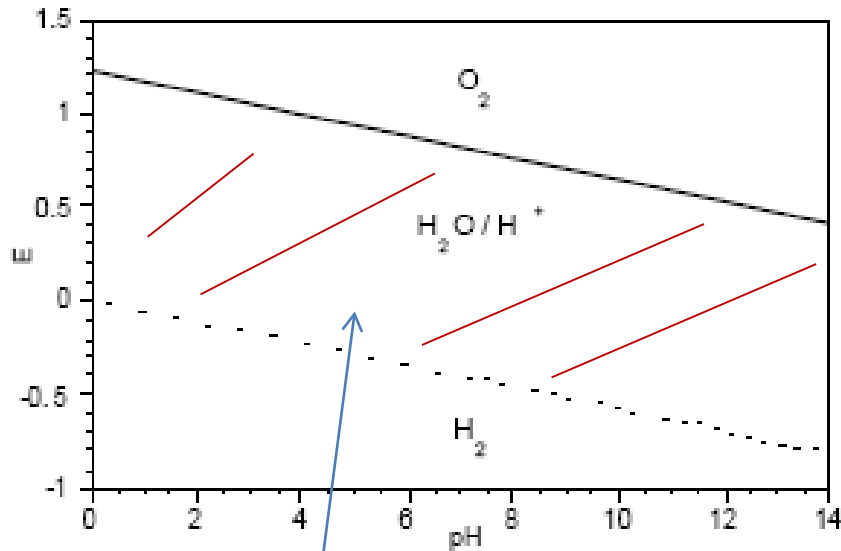
$$E_{(1/2 \text{ O}_2/\text{H}_2\text{O})} < E(\text{A}_{\text{ox}}/\text{A}_{\text{red}}) \quad \text{A}_{\text{red}} \text{ egonkorra}$$

$$E(\text{A}_{\text{ox}}/\text{A}_{\text{red}}) < E_{(\text{H}_2\text{O}/1/2\text{H}_2)} \quad \text{A}_{\text{ox}} \text{ egonkorra}$$



Lerro gorri jarraiak uraren egonkortasunaren mugak adierazten dira

## 2.a. uraren erredox sistema



Uraren oxidazioa muga

Uraren erredukzioa muga

Gogoratu  $Cr_2O_7^{2-} \leftrightarrow CrO_4^{2-}$

Erredox bikoteen egonkortasunaren zonaldea, pH-arekiko aldakorra

## 2.a. uraren erredox sistema

### ➤ Aurrekoa ikusita....

Nola da posiblea uretan permanganato espeziea ezegonkorra denez oxidatzaile gisa ur-inguruan erabiltzea????

Erreakzioaren zinetikoa, ere, kontuan hartu behar da.

➤ Erredukziozko erreakzioa oso motela bada luzaroan diraute uretan erabat erreduzitu barik eta ondorioz, erabili ahal dugu oxidatzaile modura.

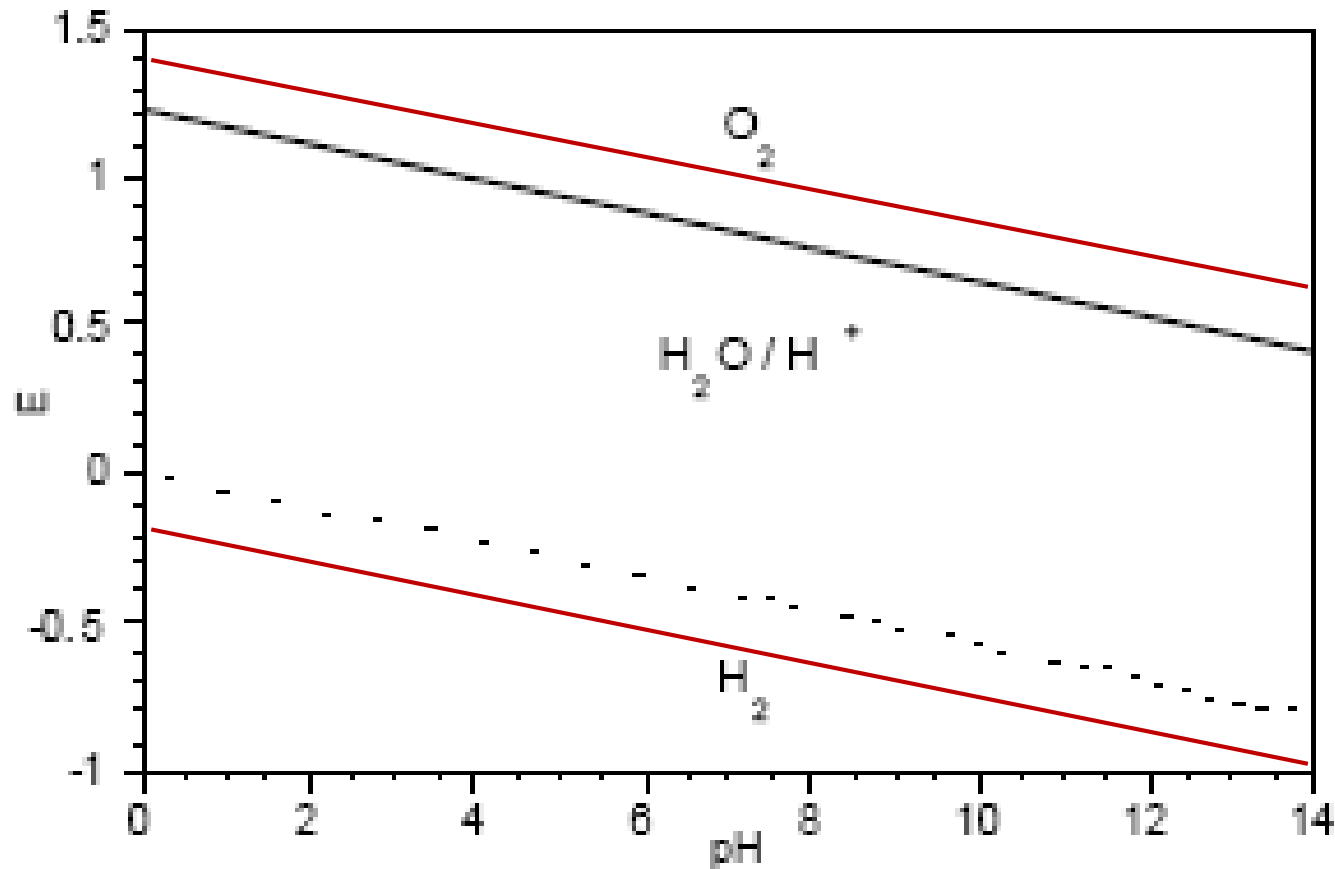
➤ Horregatik, praktikan, bai  $\text{MnO}_4^-$ , bai  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  uretan oxidatzailetzat ditugu, pH zero denean, nahiz eta honako hauek  $E^\circ$  izan:

$$E^\circ (\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} / \text{Cr}^{3+}) = 1.81 \text{ V} \quad (> 1.23 \text{ V})$$

$$E^\circ (\text{MnO}_4^- / \text{Mn}^{2+}) = 1.52 \text{ V} \quad (> 1.23 \text{ V})$$

➤ Uraren egonkortasuna ikusitako mugak 0,5 V gorantz eta beherantz hedatzen dira

## 2.a. uraren erredox sistema



Gogoratu  $Cr_2O_7^{2-} \leftrightarrow CrO_4^{2-}$

## 2.a. uraren erredox sistema

Uretan disoluzio batean eta  $\text{pH} = 0$  izanik,  $\text{SO}_4^{2-}$  ioiak ditugu.  $\text{ZnCl}_2(\text{s})$  gehituz gero posiblea izango da  $\text{Zn}(\text{SO}_4)$  eraketa?

Datuak:  $E^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,76 \text{ V}$

$E^\circ(\text{H}_2\text{O} / \frac{1}{2} \text{H}_2) = -0,059 \text{ pH}$

$E^\circ(\frac{1}{2} \text{O}_2 / \text{H}_2\text{O}) = 1.23 - 0.059 \text{ pH}$



## 2.b. Oxidazioarekiko metalen egonkortasuna

Metal ez-nobleak	$E^{\circ}$	Metal nobleak	$E^{\circ}$
$\text{Na}^+ + 1e^- \rightarrow \text{Na}$	-2.71 V	$\text{Cu}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Cu}$	0.34 V
$\text{Mg}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Mg}$	-2.36 V	$\text{Ag}^+ + 1e^- \rightarrow \text{Ag}$	0.80 V
$\text{Al}^{3+} + 3e^- \rightarrow \text{Al}$	-1.66 V	$\text{Hg}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Hg}$	0.85 V
$\text{Zn}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Zn}$	-0.76 V	$\text{Pt}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Pt}$	1.20 V
$\text{Fe}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Fe}$	-0.41 V	$\text{Au}^+ + 1e^- \rightarrow \text{Au}$	1.69 V
$\text{Sn}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Sn}$	-0.14 V		

Uretan disolbatzen dira  
( $\text{H}^+$  -ak oxidatuta):

**Ez nobleak**

Uretan ez dira disolbatzen  
( $\text{H}^+$ -ak ezin du oxidatu):

**nobleak**

## 2.b. Oxidazioarekiko metalen egonkortasuna

- Oso  $E^0$ -ren balore negatibo handia duen metal baten disoluzioak  $H_2$  sortarazi du
- Uretan disolbatuko dira, neurri handiagoan potentziala negatiboagoa den ahala: **metal eznoBLEAK**
- Salbuezpenak
  - . Oxido pasibatzaileak
  - . Anodizazio-prozesuak (Al eta Mg)

Metal eznoBLEAK	$E^0$
$Na^+ + 1e^- \rightarrow Na$	-2.71 V
$Mg^{2+} + 2e^- \rightarrow Mg$	-2.36 V
$Al^{3+} + 3e^- \rightarrow Al$	-1.66 V
$Zn^{2+} + 2e^- \rightarrow Zn$	-0.76 V
$Fe^{2+} + 2e^- \rightarrow Fe$	-0.41 V
$Sn^{2+} + 2e^- \rightarrow Sn$	-0.14 V

Hainbat metalen  
erredukziozko potentzialak

## 2.b. Oxidazioarekiko metalen egonkortasuna

- . Uretan ez dira oxidatzen: **metal nobleak**
- . Bakarrik *azido oxidatzaile* deritzonok oxidatzen dute
- . Uretan disolbatzeko azido nitrikoaren edo sulfurikoaren erasoak jasan behar dute

Metal nobleak	$E^{\circ}$
$\text{Cu}^{2+} + 2\text{e}^{-} \rightarrow \text{Cu}$	0.34 V
$\text{Ag}^{+} + 1\text{e}^{-} \rightarrow \text{Ag}$	0.80 V
$\text{Hg}^{2+} + 2\text{e}^{-} \rightarrow \text{Hg}$	0.85 V
$\text{Pt}^{2+} + 2\text{e}^{-} \rightarrow \text{Pt}$	1.20 V
$\text{Au}^{+} + 1\text{e}^{-} \rightarrow \text{Au}$	1.69 V

Hainbat metalen  
erredukziozko potentzialak

## 2.b. Oxidazioarekiko metalen egonkortasuna

- . Na-a oso azkar disolbatu egiten da uretan
- . Fe-a denbora gehiago behar du (zinetika motelagoa du)



Metales no nobles	$E^0$
$\text{Na}^+ + 1e^- \rightarrow \text{Na}$	-2.71 V
$\text{Fe}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Fe}$	-0.41 V

- . Aireak burdina oxidatzen du



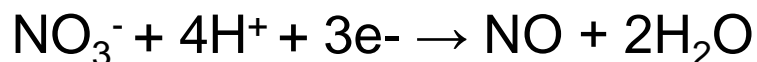
$\text{Fe}^{2+}$  ioia egonkorra da uretan baina oxigenoz joria den ingurune batean eta pH zero denean  $\text{Fe}^{3+}$  ioiara berezko oxidazioa jasatzen du

## 2.b. Oxidazioarekiko metalen egonkortasuna

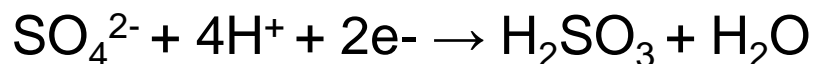
. Oxidazioa motelegia izanez gero areagotzeko azidoak erabiltzen dira:  $\text{HNO}_3$  eta  $\text{H}_2\text{SO}_4$

.  $\text{H}^+$ -z aparte oxidatzailea den anioi bat daukate: **azido oxidatzaileak**

Metales ez nobleak	$E^\circ(\text{V})$	Metal nobleak	$E^\circ(\text{V})$
$\text{Mg}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Mg}$	-2.36	$\text{Ag}^+ + 1\text{e}^- \rightarrow \text{Ag}$	0.80
$\text{Al}^{3+} + 3\text{e}^- \rightarrow \text{Al}$	-1.66	$\text{Hg}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Hg}$	0.85
$\text{Zn}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Zn}$	-0.76	$\text{Pt}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Pt}$	1.20
$\text{Fe}^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Fe}$	-0.41	$\text{Au}^+ + 1\text{e}^- \rightarrow \text{Au}$	1.69



$$E^\circ(\text{NO}_3^-/\text{NO}) = 0.96 \text{ V}$$

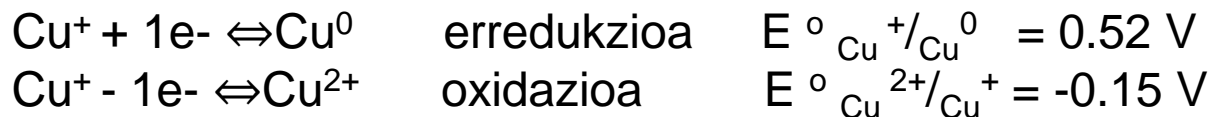


$$E^\circ(\text{SO}_4^{2-}/\text{H}_2\text{SO}_3) = 0.20 \text{ V}$$

## 2.c. Dismutazioarekiko egonkortasuna

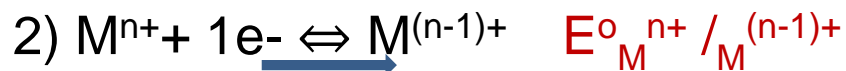
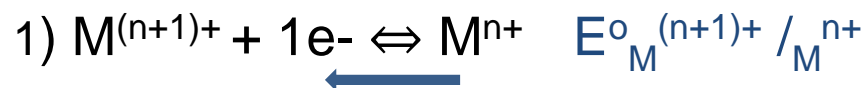
➤ Espezie batek aldi berean oxidazioa eta erredukzioa pairatzen duenean, dismutatu egiten da

➤ Cu-ren erredukzio potentzialak uraren egonkortasun zonaldearen barruan daude baina Cu(I) uretan ez da egonkorra dismutazioagatik



## 2.c. Dismutazioarekiko egonkortasuna

➤ Orokorrean,  $M^{(n+1)+} / M^{n+} / M^{(n-1)+}$



➤ Dismutazio espontaneo gerta dadin,  $E_M^{\circ n+ / M^{(n-1)+}} > E_M^{\circ (n+1)+ / M^{n+}}$

Honela 1) ← oxidazioa

2) → erredukzioa



## 2.c. Dismutazioarekiko egonkortasuna

Ariketa:  $\text{Fe}^{2+}$  ioiaren dismutazioa

a) Baldintza estandarretan  $\text{Fe}^{2+}$  dismutatzen da ?

Erredox espezieak:  $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}$

$$E^\circ_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}} = 0.77 \text{ V}$$

$$E^\circ_{\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}} = -0.41 \text{ V}$$

b)  $[\text{Fe}^{2+}] = 0,5 \text{ M}$  eta  $[\text{Fe}^{3+}] = 0,25 \text{ M}$  bada?

c)  $[\text{Fe}^{2+}] = 2 \text{ M}$  eta  $[\text{Fe}^{3+}] = 0,25 \text{ M}$  bada?

d)  $[\text{Fe}^{2+}] = 1 \text{ M}$  bada, zein izan behar da  $[\text{Fe}^{3+}]$  kontzentrazioa  $\text{Fe}^{2+}$  dismutatzeko ? Ondorio bat ateratzen duzu?



### 3. ELEKTRODO-POTENTZIAL FORMALAK

### 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK

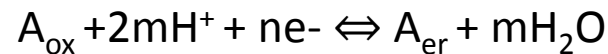
- Erreodox-erreakzioek, zenbait aldagairekiko mendekotasuna adierazten dute: pH-a, hauspeakinen formazioa eta abar.
- $E^0$ -ren balorea pH-arekiko menpekotasuna du ingurunean...
  - .  $H^+$  edo  $OH^-$  ioiak badaude
  - . Hidroxido disolbaezinak eratuz gero
- Oreka-mota desberdinak aldi berean gertatzen dira
- Ingurune desberdinetako potentzialak desberdinak izan daitezke

### 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK

- Potentzial berriak, **Elektrodo Potentzial formalak deritzenak**,  
Nernsten ekuazioa erabiliz kalkula daitezke
- Bi kasu ikasten dira:
  1. erredox prozesuaren doiketan  $H^+$  edo  $OH^-$  agertzen dira  
(pH-ren eragina)
  2. erredox prozesua hauspeatze-prozesuarekin batera  
gertatzen da ( $K_s$ -ren eragina)

## 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK

## ➤ pH-eragina



$$E_A = E_A^{\circ} + \frac{0.059}{n} \log \frac{[A_{\text{ox}}][\text{H}^+]^{2m}}{[A_{\text{er}}]}$$

$$E_A = E_A^{\circ} + \frac{0.059}{n} \log [\text{H}^+]^{2m} + \frac{0.059}{n} \log \frac{[A_{\text{ox}}]}{[A_{\text{er}}]}$$

$$E_A = E_A^{\circ} - \frac{2m \cdot 0.059}{n} \text{pH} + \frac{0.059}{n} \log \frac{[A_{\text{ox}}]}{[A_{\text{er}}]}$$



**$E_A^{\circ'}$  = elektrodo-potenzial formala**

$$E_A = E_A^{\circ'} + \frac{0.059}{n} \log \frac{[A_{\text{ox}}]}{[A_{\text{er}}]}$$

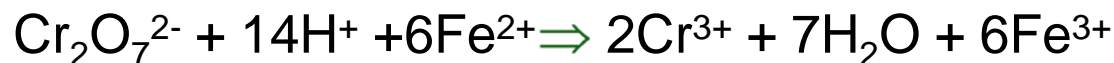
## 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK

Aplikazioa adibidea:

$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  dikromato ioiak zein pH tartean oxida dezake  $\text{Fe}^{2+}$  katioa ?

$$E^0_{\text{Cr}_2\text{O}_7/\text{Cr}^{3+}} = 1,33 \text{ V} \quad E^0_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}} = 0,77 \text{ V}$$

. pH=0 denean bi ioien arteko berezko erreakzioa hurrengoa da



. Edozein pH-tan zer gertatzen den jakiteko elektrodo potentzial formalak definitzen dira

pH-aren eragina bakarrik elektrodo honetan nabarigarria da



## 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK



Elektrodo honetarako potentzial formala kalkulatu dugu:

$$E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} / \text{Cr}^{3+}} = E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} / \text{Cr}^{3+}}^{\circ} + \frac{0.059}{6} \log \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}][\text{H}^+]^{14}}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$$

$$E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} / \text{Cr}^{3+}} = E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} / \text{Cr}^{3+}}^{\circ} + \frac{0.059}{6} \log[\text{H}^+]^{14} + \frac{0.059}{6} \log \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}]}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$$

$$E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} / \text{Cr}^{3+}} = E_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} / \text{Cr}^{3+}}^{\circ} - \frac{14 \cdot 0.059}{6} \text{pH} + \frac{0.059}{6} \log \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}]}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$$

$E^{\circ'}$  = elektrodo-potentzial formala

## 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK



$$E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} = E^{\circ}_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} - \frac{14 \cdot 0.059}{6} \text{pH} = 1.33 - 0.138 \cdot \text{pH}$$



Hau da konparatu behar dena espontaneotasuna jakiteko!!!!

$$E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} > E^{\circ}_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}$$

$$E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} < E^{\circ}_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}$$



## 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK



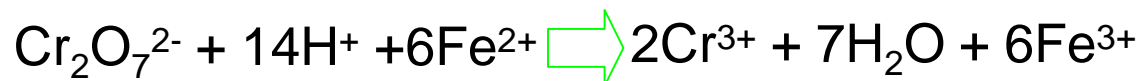
$$E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} = E^{\circ}_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} - \frac{14 \cdot 0.059}{6} \text{pH} = 1.33 - 0.138 \cdot \text{pH}$$



Hau da konparatu behar dena!!!!

$$E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} > E^{\circ}_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}$$

$$E'_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} < E^{\circ}_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}$$





### 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK

Beraz, aurrekoa ikusita,  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  dikromato ioiak zein pH tartean oxida dezake  $\text{Fe}^{2+}$  katioa ?

$$E^{0'}_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} < E^0_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}$$

$$1.33 - 0.138\text{pH} < 0.77$$

pH > 4.06,  $\text{Fe}^{3+}$  ioia erreduzitzen da

$$E^{0'}_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} > E^0_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}$$

$$1.33 - 0.138\text{pH} > 0.77$$

pH < 4.06,  $\text{Fe}^{2+}$  ioia oxidatzen da

$$E^{0'}_{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} = E^0_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}$$

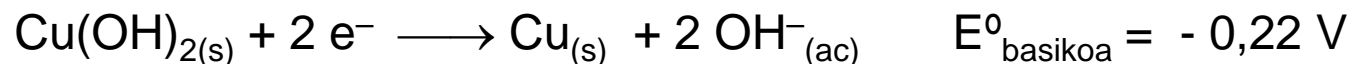
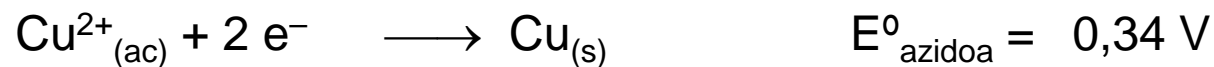
$$1.33 - 0.138\text{pH} = 0.77$$

pH = 4.06, oreka

### 3. ELEKTRODO-POTENZIAL FORMALAK

#### Disolbagarritasunaren eragina

- Disoluzioan dauden ioi metalikoek hidroxido disolbaezinak hauspearazten dutenean espezie baten potentziala alda daiteke
- Hauspeaketa honek ioiaren kontzentrazioan eragina izango du baita Nernsten ekuazioan ere
- Cu(II) espeziearentzat potentzial-taulan begiratzuz gero bi desberdinak aurkitu ditugu



#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (iee diagramak)

- $E^0$  erredukziozko potentzialak taulen bidez erabilgarriak ditugu
- Askotan ez dira onuragarriak



*ERREDOX PORTAERA ELEMENTU  
BATEN OXIDAZIO-EGOERA  
GUZTIETAN?*

- Hiru motakoak

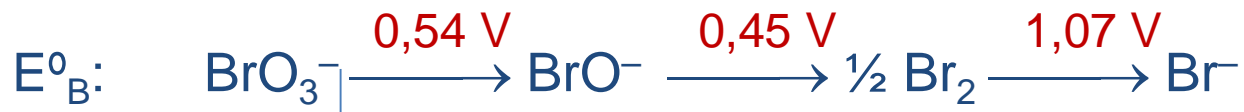
Latimer-diagramak

Frost- diagramak

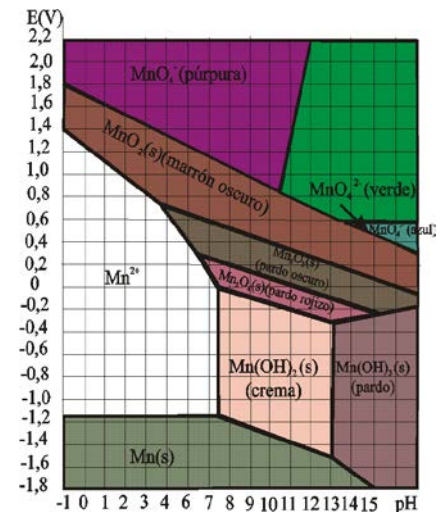
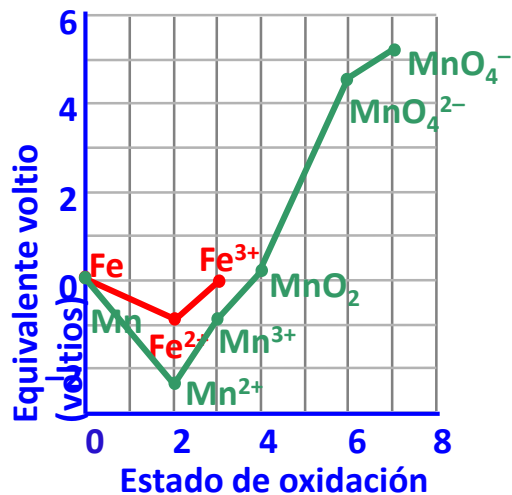
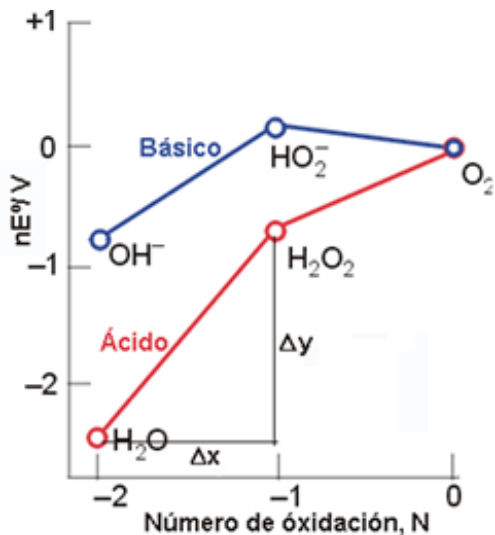
Porbaix-diagrama

## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (iee diagramak)

## . Diagramas de Latimer

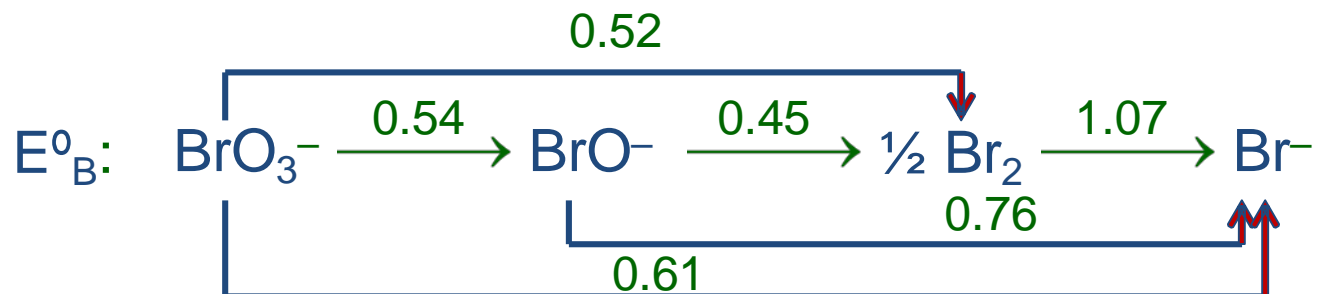
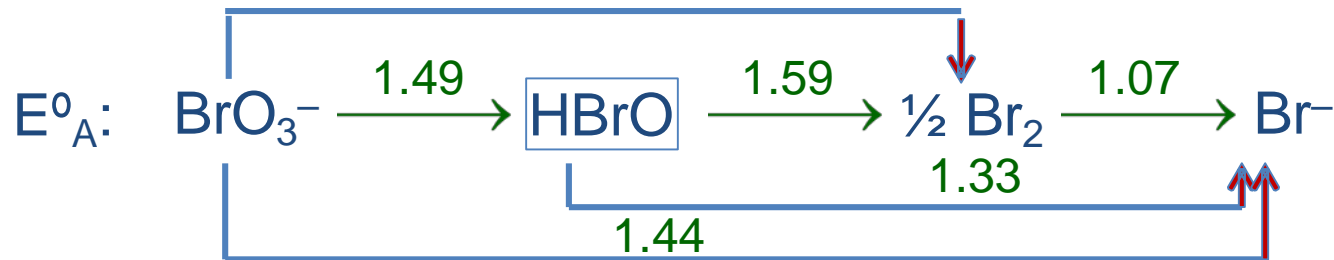


## . Diagramas de Frost y de Pourbaix



## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer- diagramak

- Elementu baten potentzial estandarrak oxidazio-egoerarekiko eta ingurunearekiko adierazten dira
- Ingurune azidoa eta basikoa bereizten dira
- Adibidez, boroaren diagramak



#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak

Diagrama hauetan erreakzioak era laburbilduta adierazita daude

Ondokoaren esangura

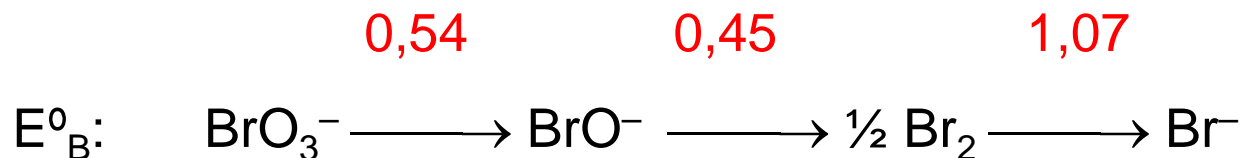


Hauxe da



#### 4..ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak

Oro har elkarren segidan doazen balioak baino ez dira ematen



Gainontzeko potentzialak kalkulatzeko kontuan hartu behar da:

- . Erredukzio potentzialak, E, ez dira gehigarriak
- .  $\Delta G$ -balioak, energia askea, edo Gibbsen energia bai direla gehigarriak
- . Beraz hauek erabiliz kalkuluak egin behar dira

## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak

Ondorengo ekuazioak erabili behar dira

$$\Delta G^{\circ} = \sum \Delta G_i^{\circ} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta G^{\circ} = -(\sum n_i) E^{\circ} F \\ \Delta G_i^{\circ} = -n_i E_i^{\circ} F \end{array} \right\} \quad -(\sum n_i) E^{\circ} F = -\sum (n_i E_i^{\circ}) F$$

Beraz:

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

non

$\Delta G_i^{\circ}$  = pauso bakiotzeko  $\Delta G^{\circ}$

$E_{i^{\circ}}$  = pauso bakoitzeko  $E^{\circ}$

$\Delta G^{\circ}$  = erdigelaxka osoaren  $\Delta G^{\circ}$

$E^{\circ}$  = erdigelaxka osoaren  $E^{\circ}$

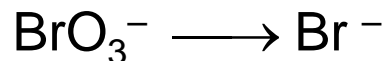
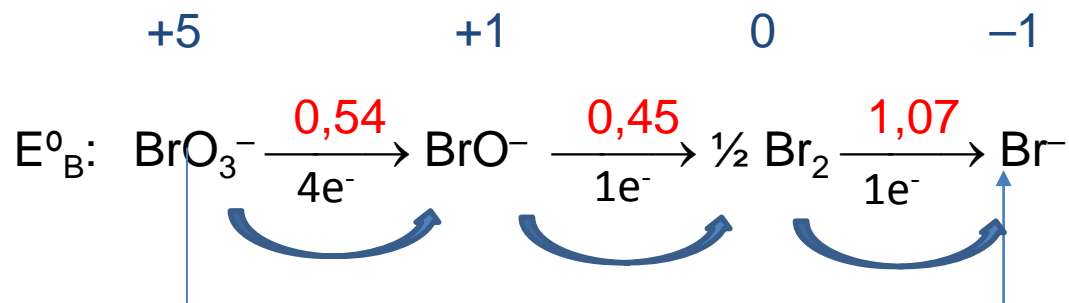
$n_i$  = erdigelaxka bakoitzean trukutzen diren elektroiak

$F$  = Faraday-konstantea



## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak

Adibidez

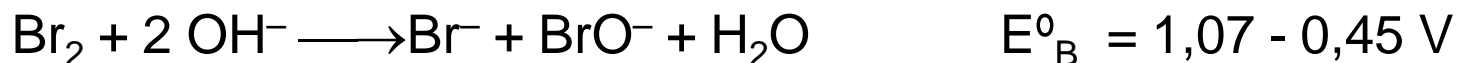
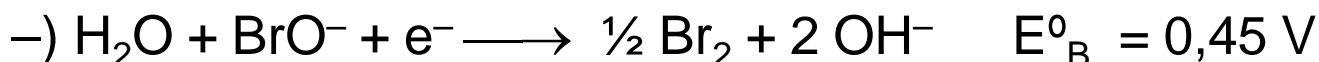
erdigelaxkaren  $E_B^0$  kalkulatzeko.....

$$E_B^0 = \frac{4(0,54) + 1(0,45) + 1(1,07)}{6} = 0,61$$

#### 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak

E-ren diagramatik abiatuta desproporzioa edo dismutazioaren gertaera ezagu dezakegu

$\text{Br}_2$  dismutatzen da  $\text{Br}^-$  eta  $\text{BrO}^-$  espezieetan:



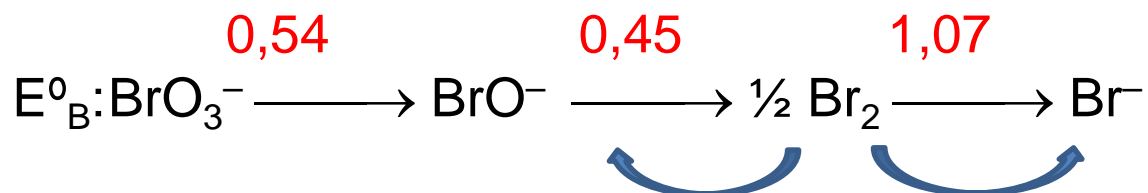
$E = 0,62 \text{ V} > 0 \Rightarrow$  berezko erreakzioa

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak

Oro har beti:

Noiz gertatuko da  
dismutazioa?

Espezie baten eskuineko  $E^0$  balioa ezkerrekoa baino handiagoa denean espezie honek dismutazioa jasango du



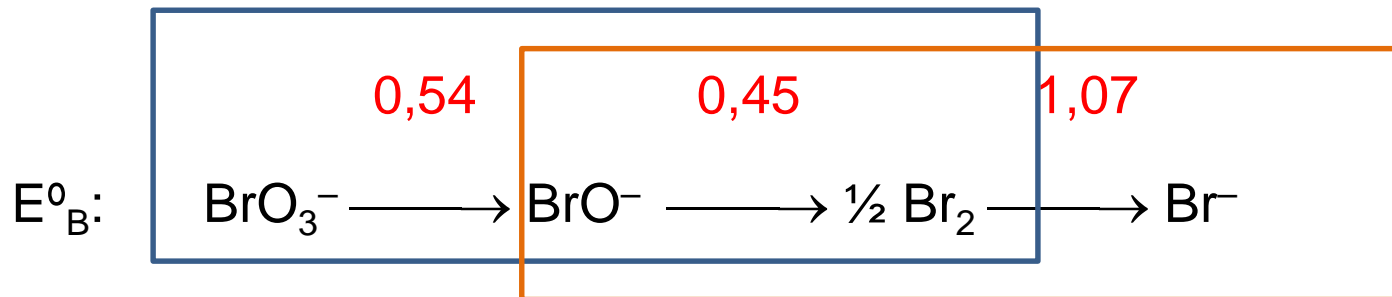
$\text{Br}_2$  dismutatzen da  $\text{Br}^-$  eta  $\text{BrO}^-$  espezieetan

$$E^0 = 1,07\text{V} - 0,45\text{V} = 0,62\text{V} > 0 \Rightarrow \text{berezko erreakzioa}$$

$\text{BrO}^-$  ez da dismutatzen da  $\text{Br}_2$  eta  $\text{BrO}_3^-$  espezieetan

$$E^0 = 0,45 - 0,54 = -0,09\text{V} < 0 \Rightarrow \text{ez berezko erreakzioa}$$

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak



Dismutazioa: 1,07 (eskumaldean) 0,45 baino handiagoa da

Dismutaziorik ez: 0,45(eskumaldean) 0,54 baino txikiagoa da

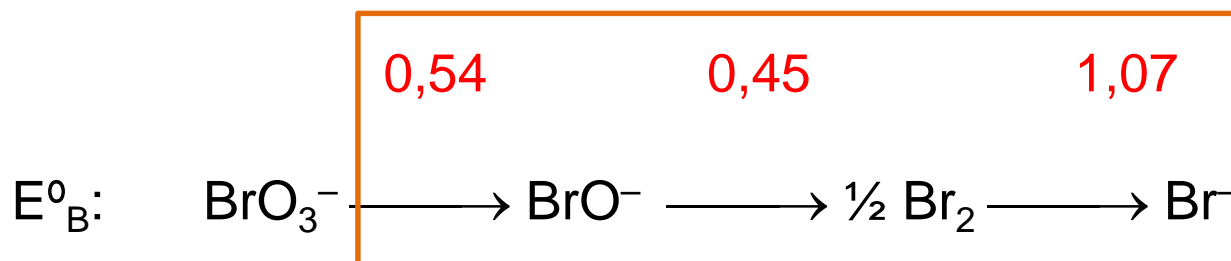
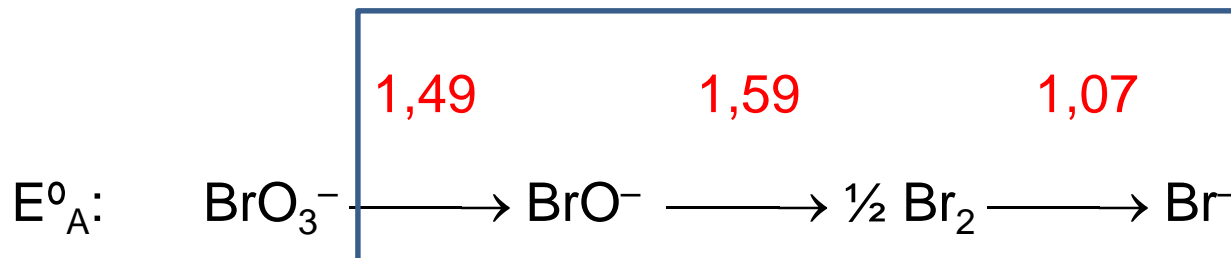
$\text{Br}_2$  dismutatzen da  $\text{Br}^-$  -tan eta  $\text{BrO}^-$  -tan

$$E^{\circ} = 1,07\text{V} - 0,45\text{V} = 0,62\text{ V} > 0 \Rightarrow \text{berezko erreakzioa}$$

$\text{BrO}^-$  ez da dismutatzen da  $\text{Br}_2$  -tan eta  $\text{BrO}_3^-$  -tan

$$E^{\circ} = 0,45 - 0,54 = -0,09\text{ V} < 0 \Rightarrow \text{ez berezko erreakzioa}$$

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak



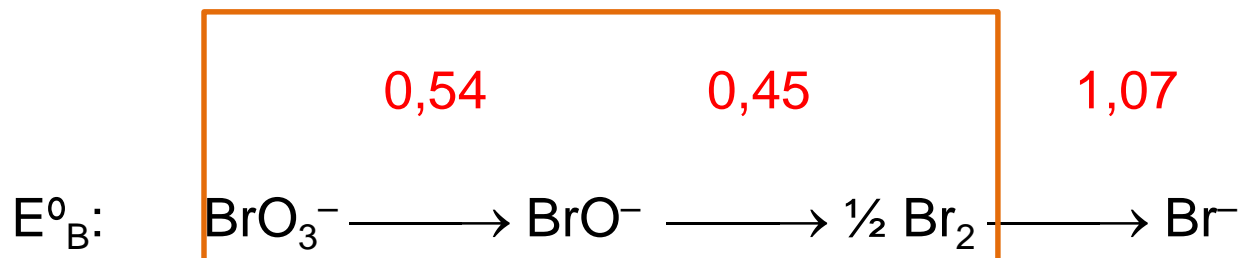
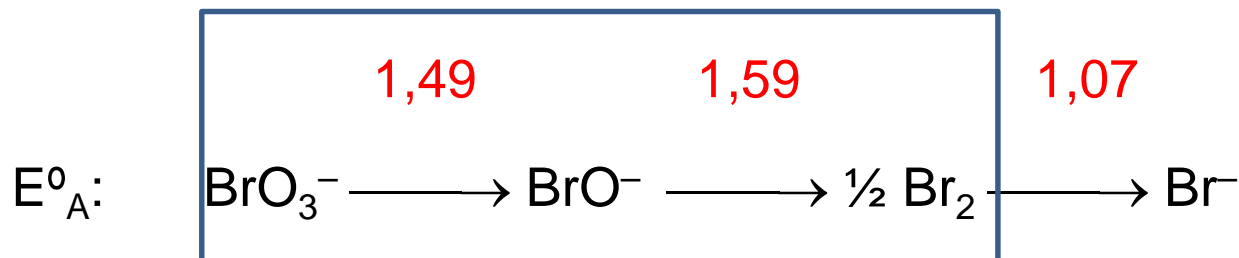
Zein ingurutan gertatuko da dismutazioa?

$\text{Br}_2$  espeziea: dismutaziorik ez, ingurune azidoan

$\text{Br}_2$  espeziea: dismutazioa bai, ingurune basikoan

$\text{Br}^-$  espeziearen erredukzioak ez du adierazten pH-rekiko mendekotasunik, prozesuan parte hartzen ez dutelako ez  $\text{OH}^-$  ez  $\text{H}^+$  ioiek

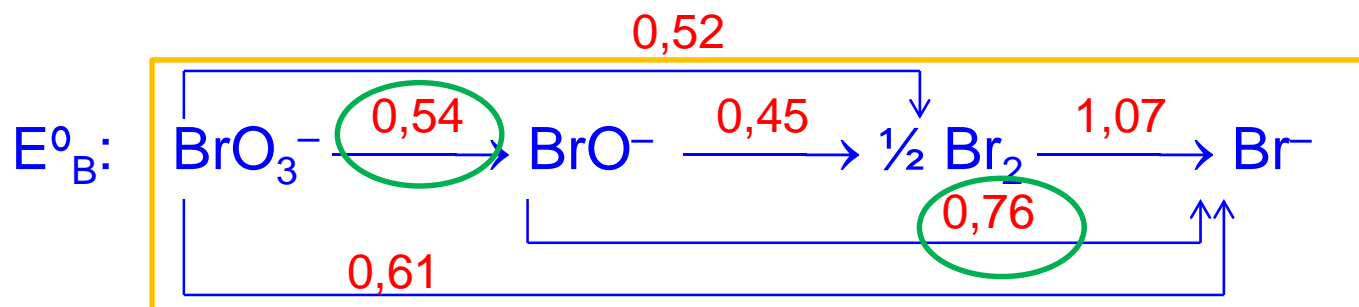
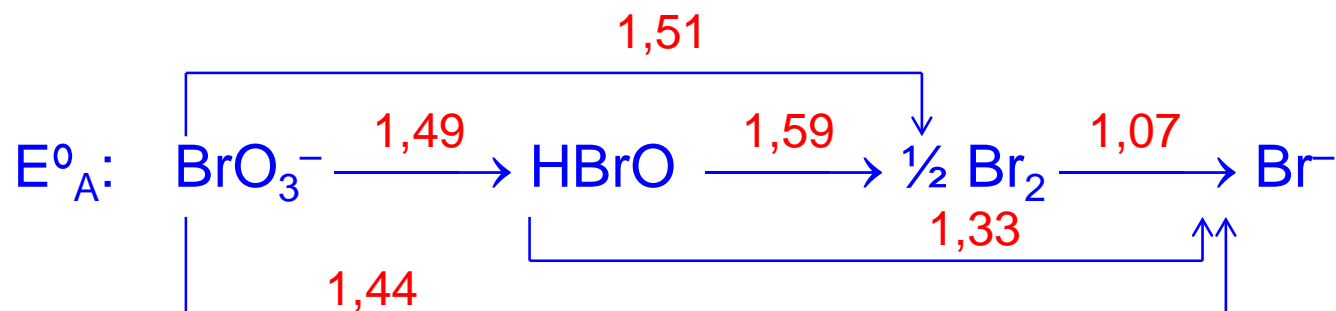
## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak



$\text{BrO}^-$  espeziea: dismutazioa bai,  $\text{Br}_2$  eta  $\text{BrO}_3^-$  espezieetan ,  
ingurune azidoan

$\text{BrO}^-$  espeziea: dismutazioarik ez, ingurune basikoan

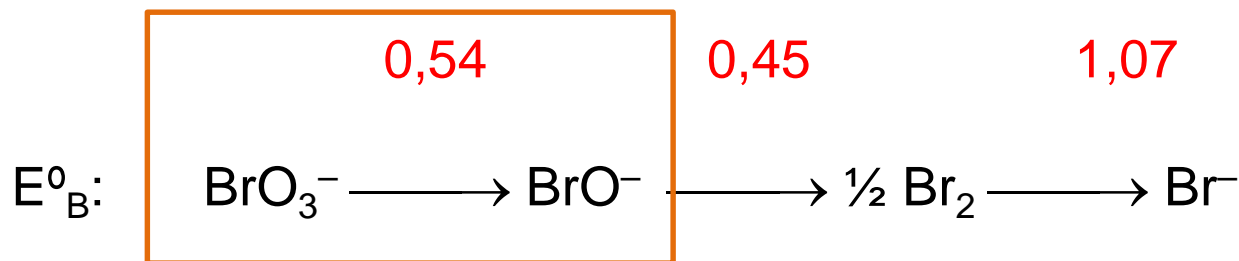
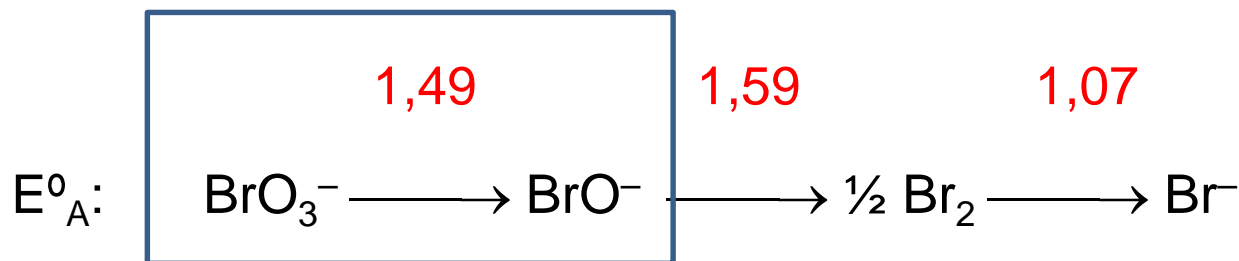
## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak



Ingurune basikoan  $\text{BrO}^-$  espeziea: dismutazioa bai,  $\text{Br}^-$  eta  $\text{BrO}_3^-$  espezieetan

Dismutazio hau ez da gertatzen ingurune azidoan

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak



Zein ingurutan  
izango da  
oxidatzaile  
hobeena da

Ikusten denez,  $\text{BrO}_3^-$  espezia oxidatzaile hobeagoa dela ingurune azidoan, basikoan baino



#### 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Latimer-diagramak

### GOGOAN IZATEKO....

- Aurrekoa aurreikuste termodinamikoak baino ez dira
- Prozesua zinetikaren kontrolpean badago, aurreikuste termodinamikoak ez dute zergatik bete behar
- Diagrama honetatik eskura dezakegu informazioa:
  - . Espontaneotasuna
  - . Ahalmen oxidatzailea
  - . Espezien egonkortasuna

1. Oinarriak	2. erredox egonkortasuna	3. Elektrodo formalak	4. Elektrodo - diagramak
--------------	--------------------------	-----------------------	--------------------------

#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost-diagramak

X elementu baten Frosten diagrama batean  $X(N)/X(0)$  bikote baten  $nE^\circ$  grafikutzen da N oxidazio-egoeraren aurrean.

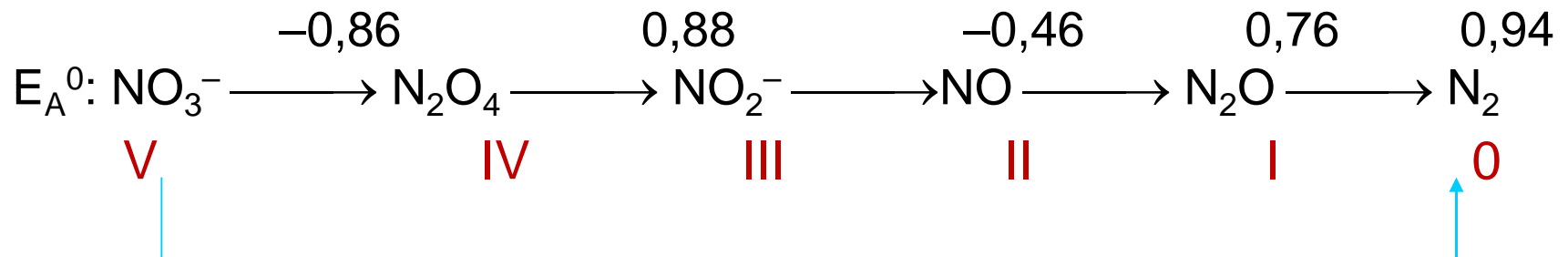
$X(N) / X(0)$  erredox bikotearen edo  $X(N)$  espeziea  $X(0)$  espezie bihurtzean dagoen  $\Delta G^\circ$  eta  $nE^\circ$  proportzionalak dira:  $\Delta G^\circ = -n E^\circ F$

N=oxidazio-egoera

n=trukatzen diren elektroien kopurua

Erreferentzia N=0 baldin bada, N=n

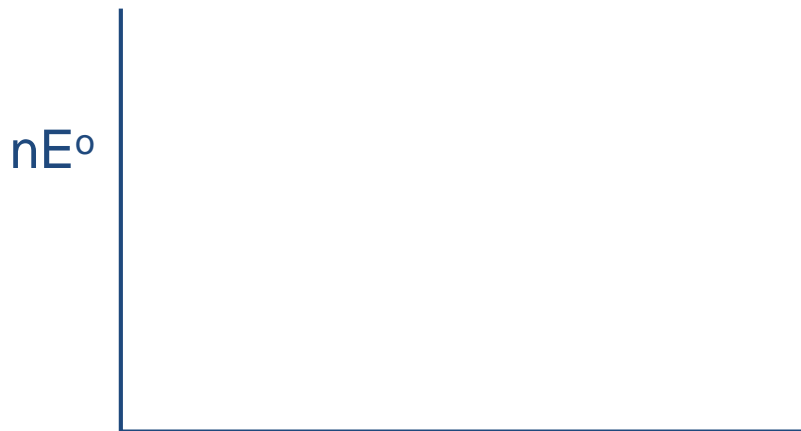
N=5  
n=5



#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost-diagramak

$nE^0$ : Boltio-baliokidea (E.V.):

*Espezie baten zero oxidazio-egoerarekiko erredukzio-potentziala eta espeziearen oxidazio-egoeraren(N) arteko biderkadura da*

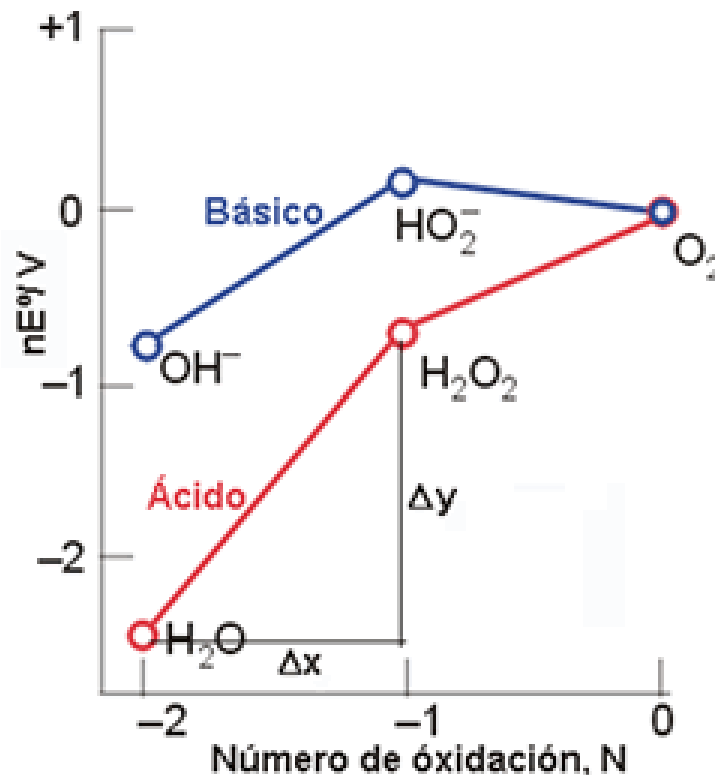
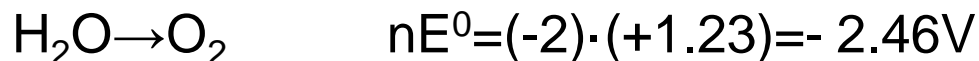
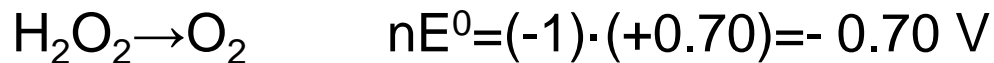
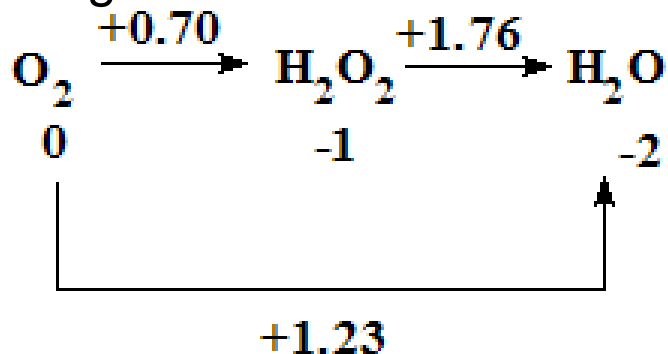


Oxidazio-egoera, ordena hazkorrean, N

Kontuan izan:  $-nE^0 = \Delta G^0 / F$

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

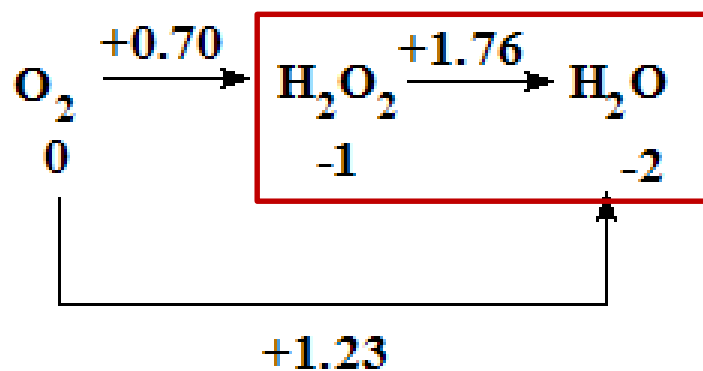
Frost diagrama baten eraikitzeko Latimer-diagramaz baliatu behar dugu



Oxigenoaren Latimer-en diagrama ingurune azidoan

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

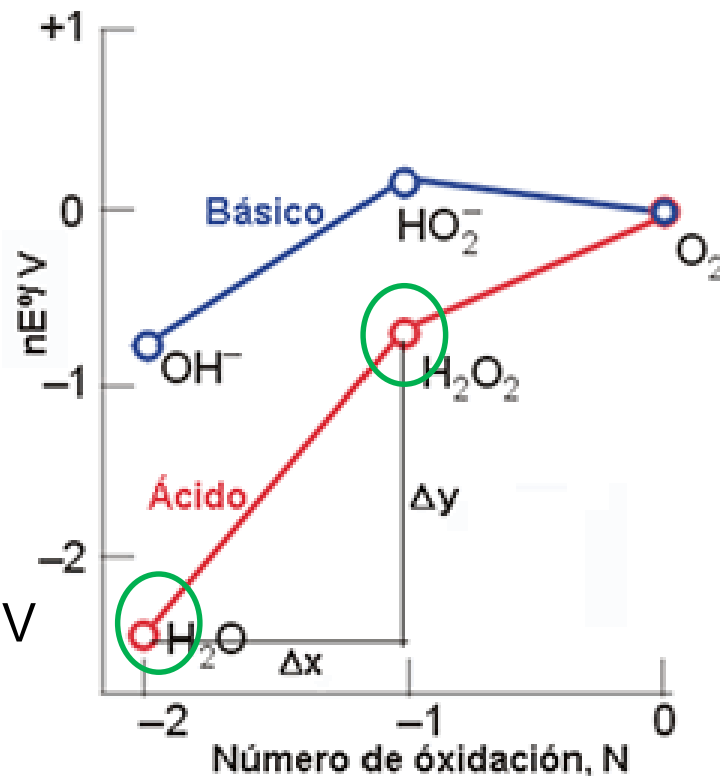
Egiazta dezagun...



$$\Delta y = nE^\circ N - nE^\circ N = -2.46 - (-0.70) = -1.76 \text{ V}$$

$$\Delta x = -2 - (-1) = -1$$

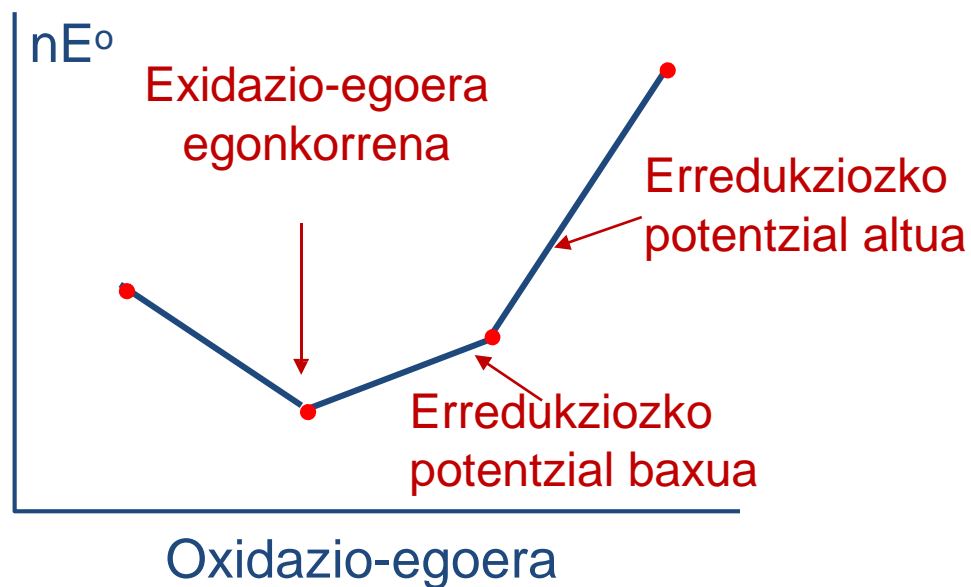
$$m = \Delta y / \Delta x = (-1.76 / -1) = +1.76 \text{ V}$$



#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

Oso erabilgarriak dira informazioa oso azkar eskura baititzakegu: erreakzioaren espontaneotasua

↓  
Egonkortasun termodinamikoa

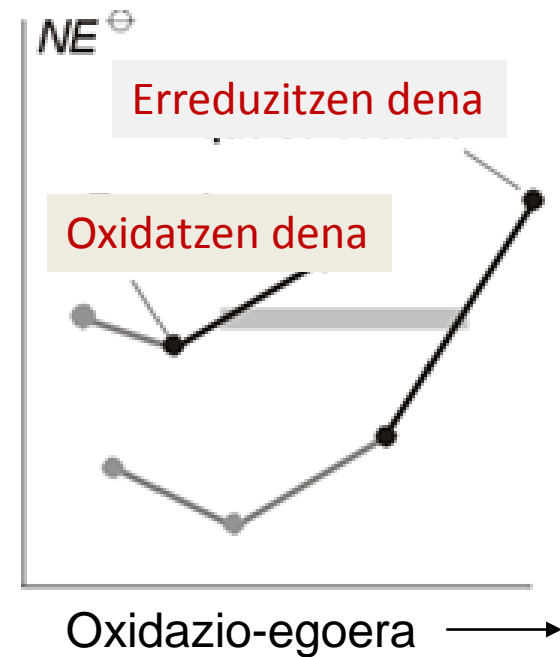


$$nE^\circ = -\Delta G^\circ / F$$

#### 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak):Frost-diagramak

Oso erabilgarriak dira informazioa oso azkar eskura baititzakegu: erreakzioaren espontaneotasua

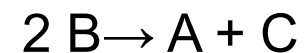
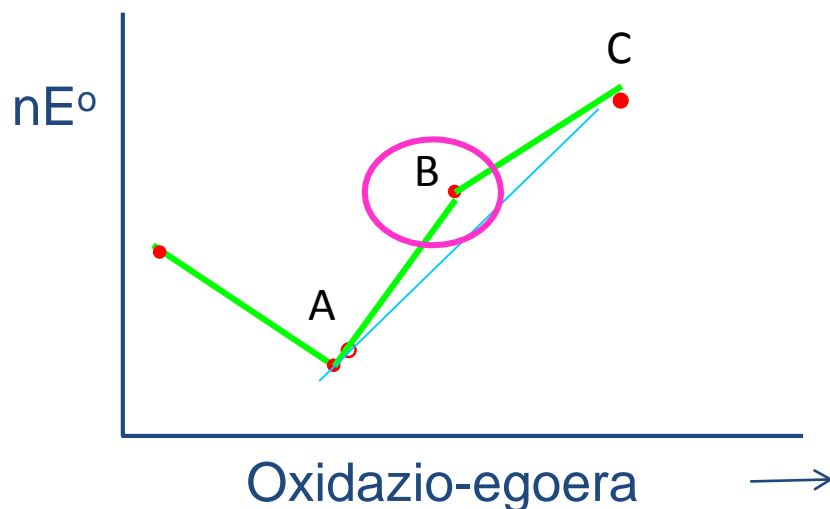
- Espezie oxidatzailea malda handiena duena da, bera erreduzitzen baita
- Espezie erreduktorea malda txikiena duena da, bera oxidatzen baita



#### 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak):Frost-diagramak

Erreakzioaren espontaneotasuna: dismutazioa edo desproporzioa

Espezie bat kokatuta baldin badago aldameneko bi espezien arteko lerroaren gainetik dismutatu egingo da



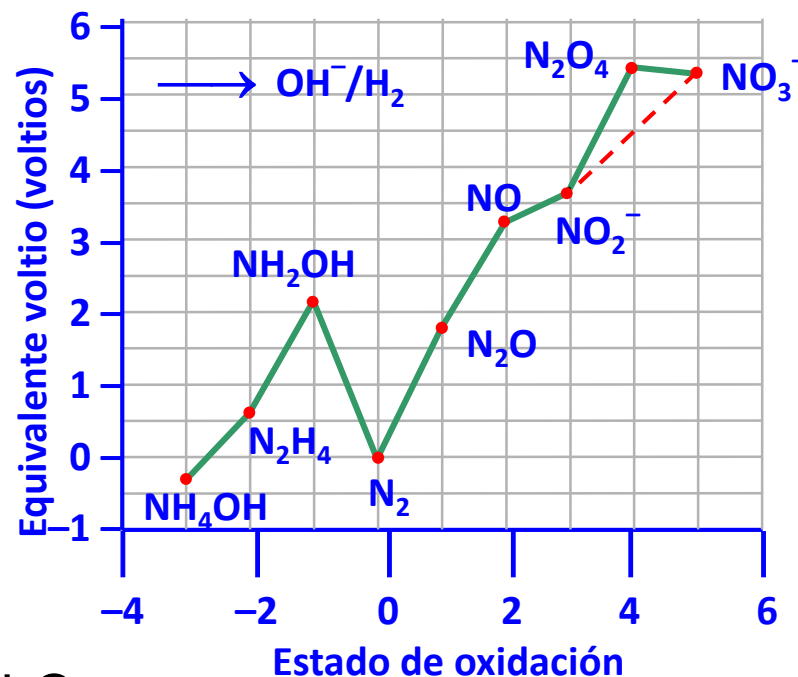


## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

$\text{N}_2\text{O}_4$  molekula honako  
dismutazio hau jasaten du



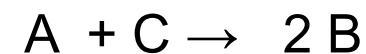
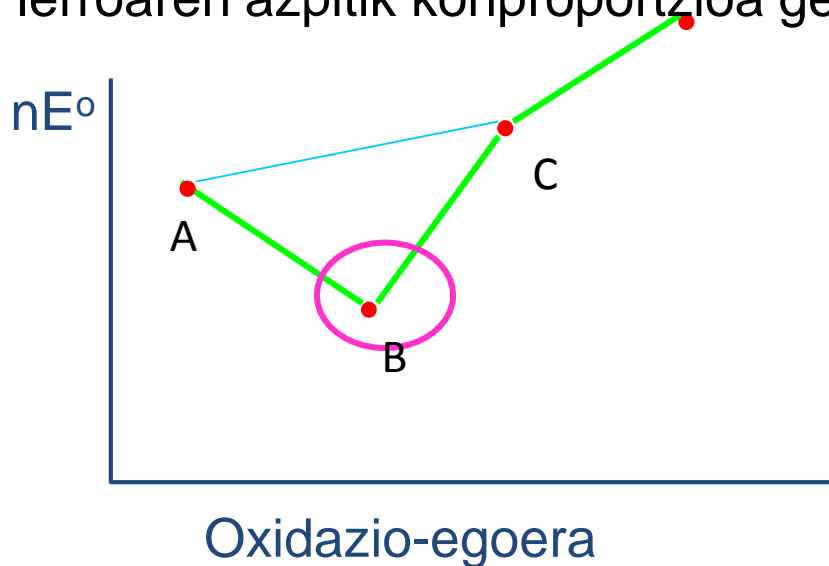
$$E = 0,88 - (-0,86) = 1,74 \text{ V} > 0 \Rightarrow \text{berezkoa}$$



## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

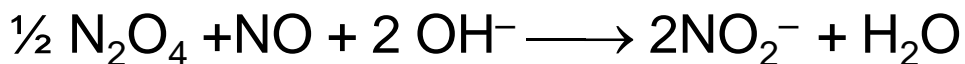
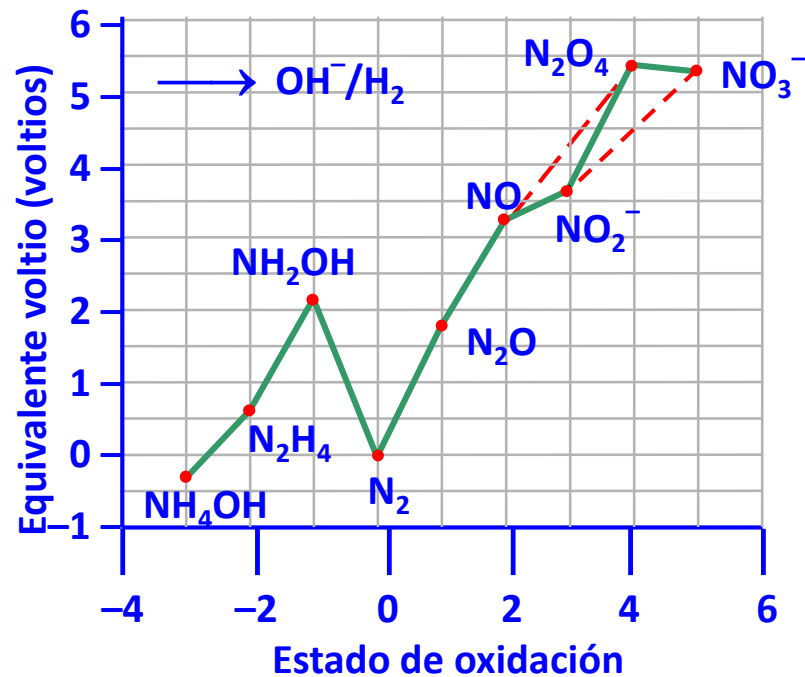
Erreakzioaren espontaneotasuna: konproportzioa

Espezie bat kokatuta baldin badago aldameneko bi espezien arteko lerroaren azpitik konproportzioa gertatuko da



## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

$\text{N}_2\text{O}_4$  eta  $\text{NO}$  molekulak  
konproporzionatzen dira  
 $\text{NO}_2^-$  emateko

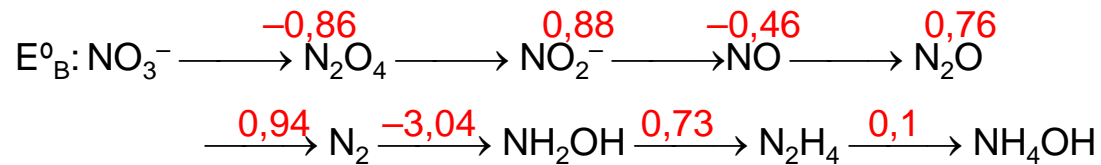


$$E = 0,88 - (-0,46) = 1,34 \text{ V} > 0 \Rightarrow \text{berezkoa}$$

1. Oinarriak	2. erredox egonkortasuna	3. Elektrodo formalak	4. Elektrodo - diagramak
--------------	--------------------------	-----------------------	--------------------------

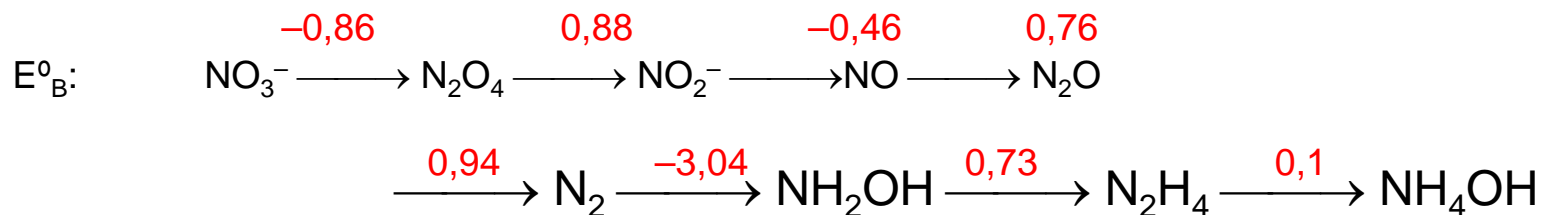
#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak):Frost-diagramak

- Frosten diagramak lor daiteke erraz potentzial normalak erabiliz
- Nitrogenoaren diagrama ingurune basikoan eraikiko dugu
- Horretarako behar dugu Latimerren diagrama ingurune basikoan



- N oxidazio-egoeratik 0-ra doan erredukzio-potentziala kalkulatu behar da

## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak):Frost-diagramak



Hurrengo taula lor daiteke :

$$\text{NO}_3^- \quad E = \frac{1(-0,86) + 1(0,88) + 1(-0,46) + 1(0,76) + 1(0,94)}{5} = 0,25 \text{ V}$$

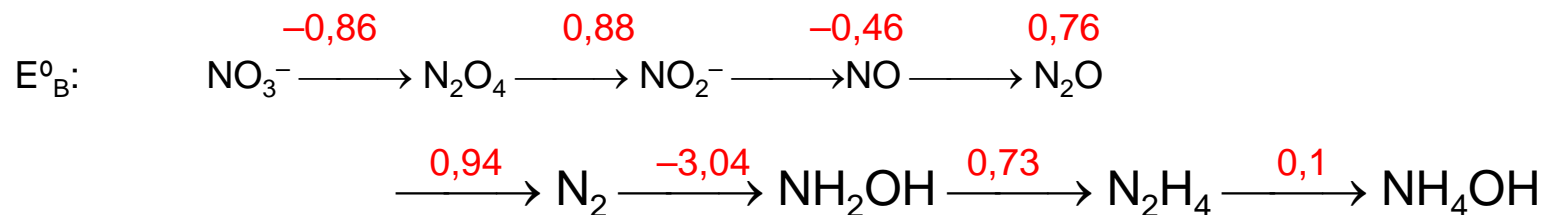
$$\text{N}_2\text{O}_4 \quad E = \frac{1(0,88) + 1(-0,46) + 1(0,76) + 1(0,94)}{4} = 0,53 \text{ V}$$

$$\text{NO}_2^- \quad E = \frac{1(-0,46) + 1(0,76) + 1(0,94)}{3} = 0,41 \text{ V}$$

$$\text{NO} \quad E = \frac{1(0,76) + 1(0,94)}{2} = 0,85 \text{ V}$$

$$\text{N}_2\text{O} \quad E = \frac{1(0,94)}{1} = 0,94 \text{ V}$$

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak):Frost-diagramak



Hurrengo taula lor daiteke :

$$\text{N}_2 \quad E = \quad = 0,00 \text{ V}$$

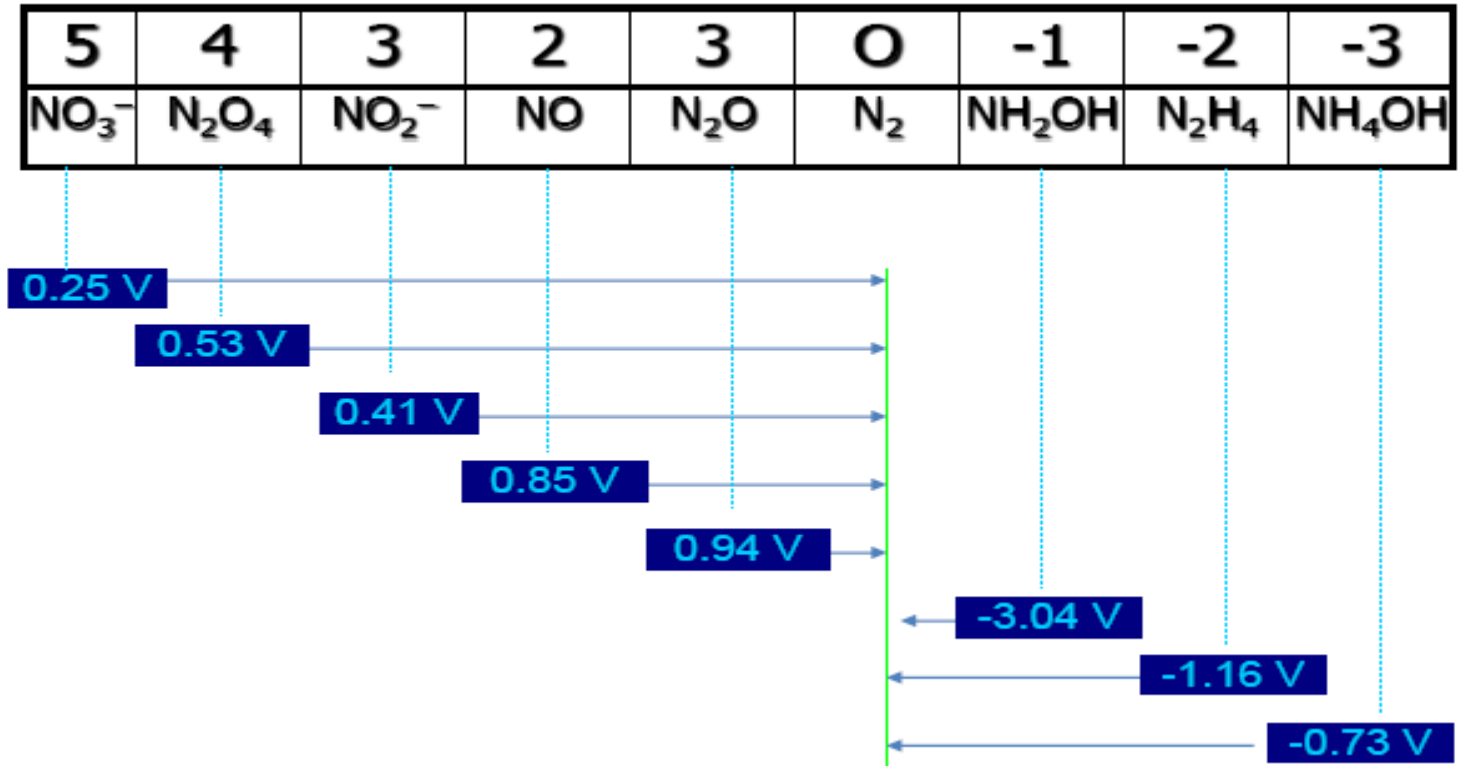
$$\text{NH}_2\text{OH} \quad E = \frac{1(-0,34)}{1} = -3,04 \text{ V}$$

$$\text{N}_2\text{H}_4 \quad E = \frac{1(-0,34) + 1(0,73)}{2} = -1,16 \text{ V}$$

$$\text{NH}_4\text{OH} \quad E = \frac{1(-3,04) + 1(0,73) + 1(0,1)}{3} = -0,73 \text{ V}$$

1. Oinarriak	2. erredox egonkortasuna	3. Elektrodo formalak	4. Elektrodo - diagramak
--------------	--------------------------	-----------------------	--------------------------

#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak



#### 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

Frost-en diagramak egiterakoan, ondoko baldintza jartzen zaio grafikoari:  
 $H^+$  espeziearen erredukzioari dagokion malda ZERO izan dadila

Ingurune azidoan:  $pH = 0$ ,  $[H^+] = 1 \text{ M}$ ,  $E = 0 \text{ V}$

Ingurune basikoan:  $pH = 14$ ,  $[OH^-] = 1 \text{ M}$ ,  $E = -0.83 \text{ V}$

Beraz, ingurune basikoan  $H^+$  espeziearen erredukzioari dagokion aldapa ZERO izan dadila, zuzenketa bat egin behar zaio potentzialean: **+0.83**



## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak

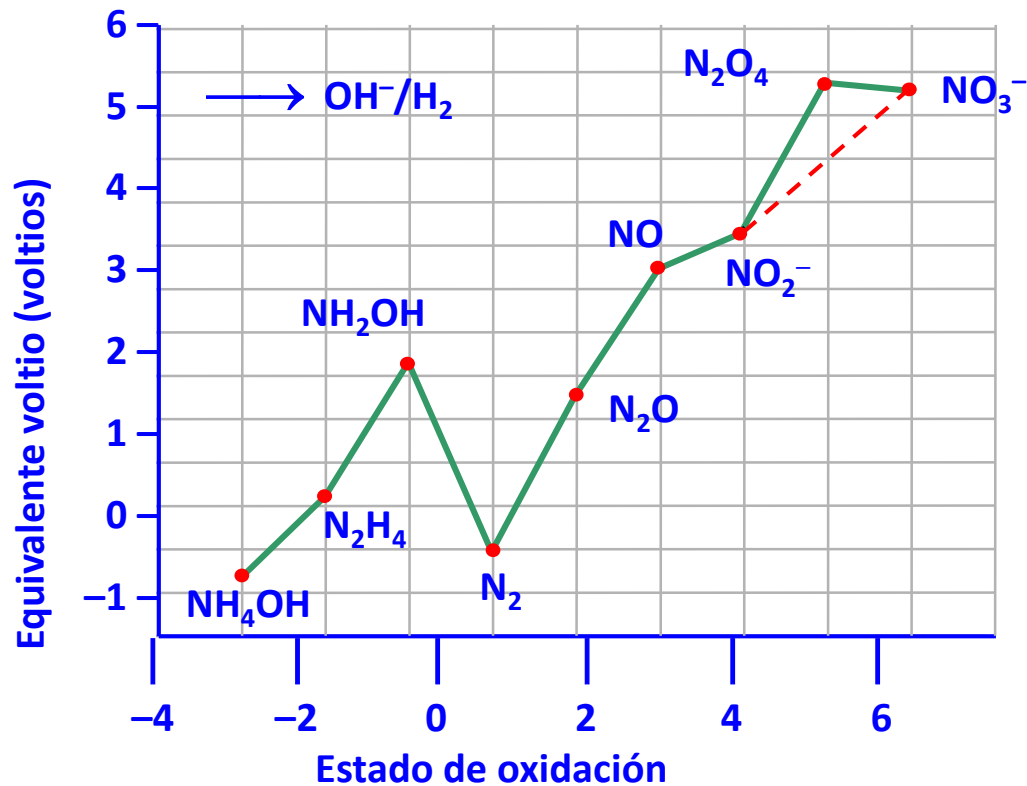
$nE^0$  -ren kalkulua

$E^0$  potentziala da(zuzendua ingurune basikoa denean)

$n = N =$  oxidazio-egoera

$\text{NO}_3^-$	$nE^0 = (0.25 + 0.83) \times 5$	$= 1.08 \times 5$	$= 5.41$
$\text{N}_2\text{O}_4$	$nE^0 = (0.53 + 0.83) \times 4$	$= 1.36 \times 4$	$= 5.44$
$\text{NO}_2^-$	$nE^0 = (0.41 + 0.83) \times 3$	$= 1.24 \times 3$	$= 3.73$
$\text{NO}$	$nE^0 = (0.85 + 0.83) \times 2$	$= 1.68 \times 2$	$= 3.36$
$\text{N}_2\text{O}$	$nE^0 = (0.94 + 0.83) \times 1$	$= 1.77 \times 1$	$= 1.77$
$\text{N}_2$	$nE^0 = (0.00 + 0.83) \times 0$	$= 0.83 \times 0$	$= 0.00$
$\text{NH}_2\text{OH}$	$nE^0 = (-3.04 + 0.83) \times (-1)$	$= -2.21 \times (-1)$	$= 2.21$
$\text{N}_2\text{H}_4$	$nE^0 = (-1.16 + 0.83) \times (-2)$	$= -0.33 \times (-2)$	$= 0.65$
$\text{NH}_4\text{OH}$	$nE^0 = (-0.73 + 0.83) \times (-3)$	$= 0.09 \times (-3)$	$= -0.28$

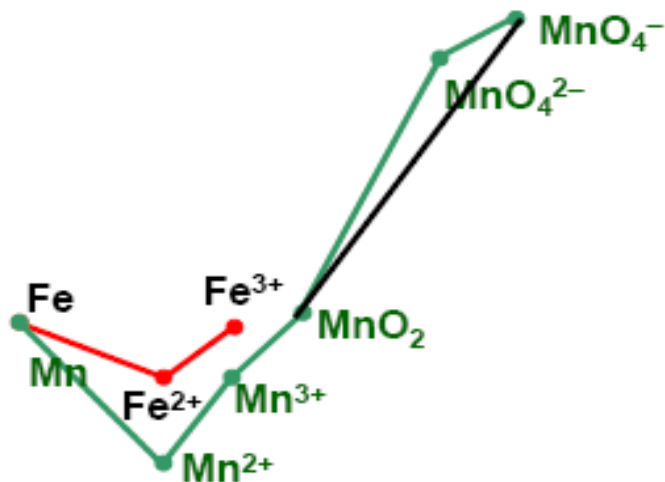
## 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak): Frost- Diagramak



#### 4.ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak):Frost-diagramak

Frosten diagramen bidez erredox aurreikusteak egin daitezke erraz

Zer gertatzen da  $\text{Fe}^{2+}$  eta  $\text{MnO}_4^-$  espezien artean ingurune azidoan?



**$\text{MnO}_2$ -tik  $\text{MnO}_4^-$  -ra doan lerroaren malda  $\text{Fe}^{2+}$  -tik  $\text{Fe}^{3+}$  -ra doana baino handiagoa da: beraz, gutxienez  $\text{Mn}^{\text{IV}}$ -ra erreduzituko da.**

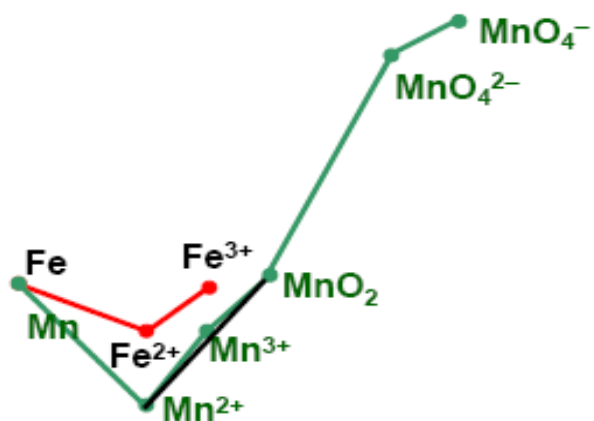
$\text{Fe}^{2+}$  ioia oxidatuko da  $\text{Fe}^{3+}$  ioia emanaz

$\text{MnO}_4^-$  ioia erreduzituko da:  $\text{MnO}_4^{2-}$ ,  $\text{MnO}_2$ ,  $\text{Mn}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Mn}$

## 4. ELEKTRODO-DIAGRAMA (IEE diagramak):Frost-diagramak

Frosten diagramen bidez erredox aurreikusteak egin daitezke erraz

$\text{Fe}^{2+}$  eta  $\text{MnO}_4^-$  espezien artean ingurune azidoan?



$\text{Mn}^{2+}$ -tik  $\text{MnO}_2$ -ra doan lerroaren malda  $\text{Fe}^{2+}$  -tik  $\text{Fe}^{3+}$  -ra doana baino handiagoa da: beraz,  $\text{Mn}^{\text{II}}$ -ra erreduzituko da.



## LABURPENA

1. Kimikan behar dugu erredukziozko potentzialak
2. Baliogarriak dira oreka konstanteak kalkulatzeko eta ustezko erreakzio ez-organikoen aurreesan termodinamikoak
3. Oreka-mota desberdinen aldibereketasunak erredukziozko potentzialetan eragina du
4. Erredox egonkortasuna aztertzeko diagrama-mota batzuk erabiltzen dira. pH-en arabera erredox egonkortasuna aztertzeko diagrama berezi batzuk existitzen dira, Porbaix-diagrama deiturikoak.
5. Uretan gertatutako erreakzioak uraren erredox egonkortasunaren eraginpean daude

1. Oinarriak

2. erredox egonkortasuna

3. Elektrodo formalak

4. Elektrodo - diagramak

## Hitzen glosarioa

- Pila elektrokimika
- Kuba electrolitika
- Elektrodoa
- Anodoa
- Katodoa
- Oreka kimikoa
- Metal noblea
- Azido oxidatzailea

## Hitzen glosarioa

- Pila elektrokimika: erredox erreakzio kimikoen bidez energia sortzeko erabiltzen den gailua
- Kuba elektrolitikoa: energia elektrikoaren bidez erredox prozesu bat sorraraztea
- Elektrodoa: oxidazioa edo erredukzioa gertatzeko eustarri fisikoa
- Anodoa: oxidazioa gertatzen den elektrodoa da
- Katodoa: erredukzioa gertatzen den elektrodoa
- Oreka kimikoa: erreakzio kimiko baten erreaktiboak eta produktuak erlazio jakin batean dauden egoera berezi bat da

1. Oinarriak

2. erredox egonkortasuna

3. Elektrodo formalak

4. Elektrodo - diagramak

## Hitzen glosarioa

- Metal noblea: bakarrik azido oxidatzaileen erasoak oxida daiteke metalak
- Azido oxidatzailea: hidrogenioa ez ezik beste espezie oxidatzailea duen azidoa da, esatebaterako azido nitrikoa edo sulfurikoa



## 5. Gaia. Egitura atomikoa eta taula periodikoa

### AURKIBIDEA

#### **5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak**

#### 5.2. Atomo hidrogenoideak

#### 5.3. Atomo polielektronikoak

#### 5.4. Taula periodikoa

Farmaziako gradua. 1.kurtsoa

Kimika orokorra eta ez-organikoa

## Gogoeta batzuk...

- *“Unibertsoa eratu zen garaietan dena zen kaos, desorden hutsa*
- *“Big Bang” ondoren , atomoak sortu ahala, egoera aldatu zen*
- *Atomoa ez existitzekotan unibertsoa....kaos hutsa izango litzateke*
- *Atomoen arteko erlazioari, loturari eta interakzioari esker unibertsoak hartzen zuen forma, ordena eta kohesioa*
- *Merezi du txikia baino txikiagoa den partikula hau ikastea*



Hasi baino lehen.....

1. *Mekanika kuantikoa beharrezkoa da?*

2. *Zergatik sortu zen?*

3. *Ibilbide historikoa: 1803 -1930 urteetan zehar*

. *1803.urtean: Dalton, "atomismo teoria"*

. *1905.urtean:Thomsomen eredua*

. *1911.urtean:Rutherforden eredua*

. *1913.urtean:Rutherford-Bohrren eredua*

. *1926.urtean:eredu mekanokuantikoa*



# TEMA 05.1

## MEKANIKA KUANTIKOAREN OINARRIAK

## 5. 1.Gaia. Mekanika Kuantikoaren oinarriak

### AURKIBIDEA

1. Sarrera
2. Bohrren teoria atomikoaren oinarriak
3. Plancken Teoria Kuantikoa
4. Efektu fotoelektrikoa
5. Uhin-gorpuzkulu dualtasuna
6. Ziurgabetasunaren Printzipioa
7. Schödingerren ekuazioa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak. Sarrera

- Adituak ez duzue izan behar
- Atomoa materiaren osagai nagusia izanik garrantzia du zertaz dago osatuta jakiteak eta bere antolamendua
- Honek eramango gaitu MEKANIKA KUANTIKOra eta bere aplikazioa eredu atomikoan: eredu mekanokuantikoa
- Ematen du fisikoei bakarrik dagokien gaia dela baina hori gezur hutsa da
- Gure bizitza ez da izango bera M.K.-a barik
- Estatu batuetan BPG(barne-produktu gordina)-ren %40a M.K.-arekin erlazionatuta dauden produktuetan oinarritzen da

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

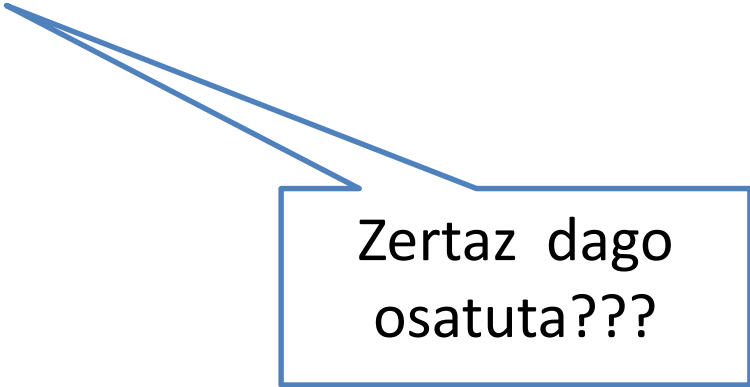
### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

- Honela pentsatu zuen zientzialari talde batek, gehienak alemaniarrek zirenak
- XX. mendearen hasieran mundu zientifikoan iraultza sortarazi zuten: fisikan ideia berriak, harritzekoak, izugarriak, barneratzen zituzten
- Ideia hauek Mekanika Kuantikoa sortarazi zuten
- Ideia hauei esker egun onartzen den eredu atomikoa garatu zen, EREDU MEKANOKUANTIKOA, atomoa hobeto azaltzen duena
- Gai honetan hastapen interesgarri hauetan murgilduko gara

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

*MATERIAREN EGITURA AZALDUKO DUGU*



Zertaz dago  
osatuta???



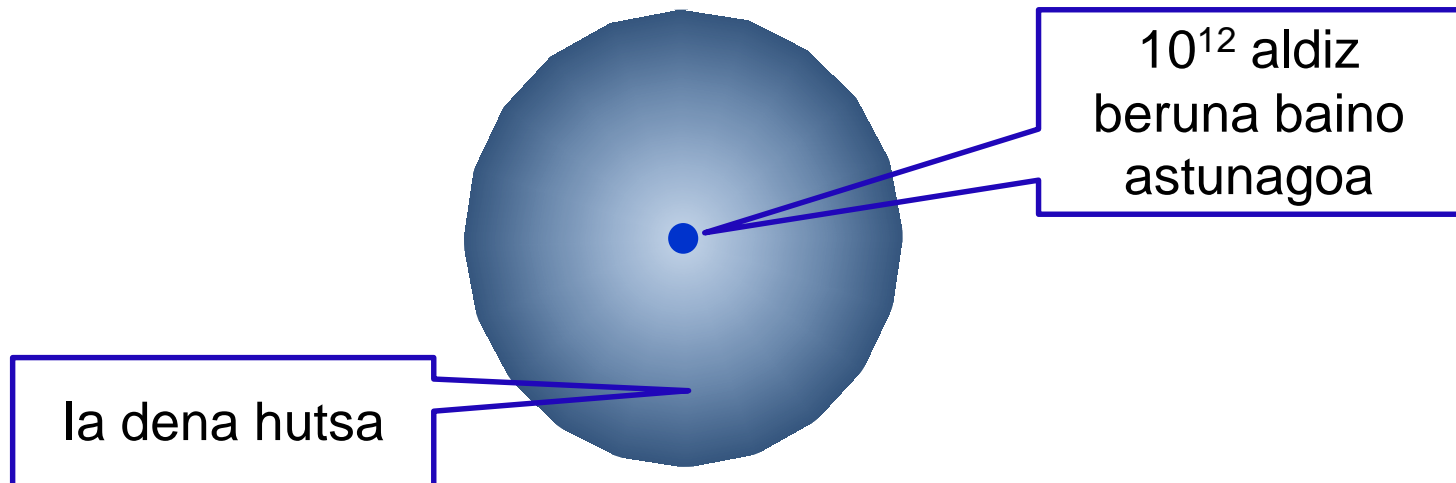
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

#### Atomoa

Nukleoa: diametroa  $10^{-13}$  cm, karga: + Z

Azala: diametroa  $10^{-8}$  cm karga: - Z



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Atomoen osagaiak: **nukleoa** eta **geruza elektronikoa**

⊕  
Nukleoan: protoiak eta neutroiak.  
Geruza elektronikoa: elektroiak ⊖

Atomoaren masa gehiena nukleoan dago

$$m_p = m_n = 1.6725 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$$

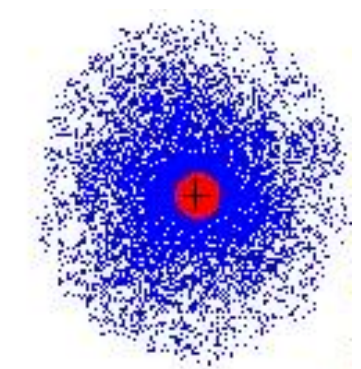
$$m_e = 9.1091 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$$

Protoiek eta elektroiek kontrako zeinuko eta balio berbereko karga dute

$$c_p = c_e = 1.60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Neutroiak kargarik gabeko partikulak dira

Atomoak **neutroak** dira → elektroien kopurua = protoien kopurua



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

- “Atomo “ hitzaren agerpena: Democritok k.a.400.urtean aipatu zuen

**“Atomoak eta hutsa besterik ez dira existitzen;  
gainontzekoa iritzia da”**



Democrito  
(k.a.460-k.a.370)

- Atomoaren lehen ideia moderna 1803.urtean sortu zen:  
DALTON-en TEORIA ATOMIKOA:
  - Materia partikula zatiezinez osatuta dago, ATOMO deritzonak
  - Atomoak ezin da sortu edo suntsitu erreakzio kimiko baten bidez
  - Elementu baten atomo bakoitza besteekiko berdina da eta beste elementuen dauden beste atomoekiko desberdina.



J. Dalton  
(1766-1844)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

- 1897.urtetik aurrera azpipartikula atomikoen aurkikuntza gertatu zen: neutroia, elektroia, protoia, quark,...



NOLA ANTOLATU ?

- Kimikarientzat partikularik inportanteena elektroia da, erreakzio bat gertatzean parte hartzen duena baita



NOLA DA ELEKTROIAREN ETXEA?

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

- Garai hartan zientzialari guztiek erabili zuten Mekanika Klasikoa gertaera makroskopikoak azaltzeko. Beraz honekin hasita, saiatu ziren atomoaren egitura azaltzen
- Honen arabera, materiaren jokaera aztertzeko erabili zuten:
  - Newton-en legeak, partikula modura, edo,
  - Maxwell-en legeak, uhin modura
- XX.mendearen hasieran banaketa honekin ulertezinak ziren gertakariak nabaritu zituzten eta saiatu ziren argitzen



Lege fisiko berrien beharra, egitura atomikoa adierazteko

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

- Gertakari eta ideia hauen eta gehiagoren azalpenak emateko, ideia berriak sortuak izan ziren, bere garaian HARRIGARRIAK, IRAULTZAILEAK zirenak.
- Historia honetan zientzialari batzuen izenak agertuko zaizkigu

Niels Bohr  
Max Planck  
Albert Einstein  
Louis de Broglie  
Karl Heisenberg  
Ernest Schödinger

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

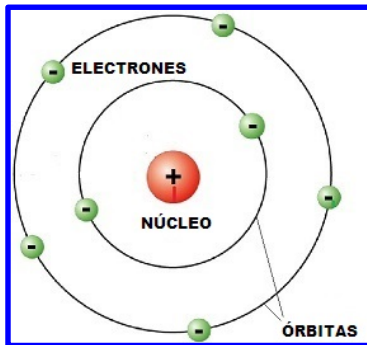
### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak : Bohr-en eredu planetarioa

#### o Bohr (1913)

- Nukleoaren eta elektroien arteko erakarpen-indar coulombiarra
- Elektroien energia eta ibilbidea ezagunak, une guztietan
- Elektroiak biraka daude, orbita zirkularretan nukleoaren inguruan energia galdu edo irabazi barik
- Ideia oso erakargarria izan zen

Bohr  
baino  
lehen?

Abiadura?  
3 triloia bira  
minutuko



Niels Bohr  
(1885-1962)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

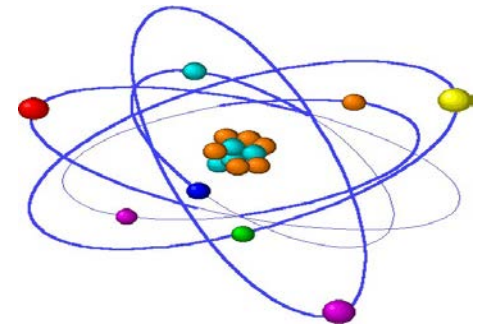
### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Bohr-en eredu planetarioa**

- Garapen matematikoa ez zen erabat zuzena
- Akatsak akats oso eredu ona izan zen
- Azaldu zituen H-ren igorpen-espektroak, elementuen hatz-marka
- Lehen aldiz, n zenbaki kuantikoa eta energia erlazionatu zen:

#### ORBITEN KUANTIKOTASUNAREN LEHEN IDEIA

$$E = - R_H(1/ n^2) \quad R_H : \text{Rydberg konstantea}$$

- Izan zen azken eredu klasikoa

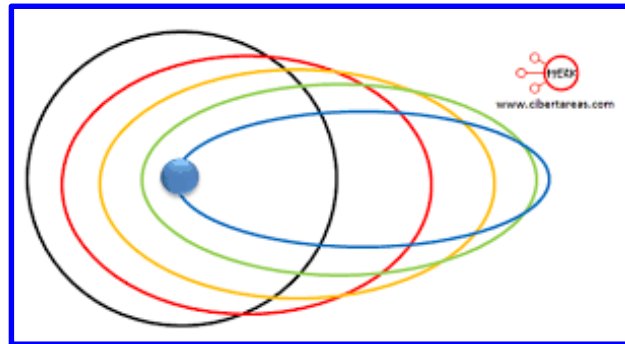




## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak : Bohr-en eredu planetarioa

- Arnold Sommerfeld (1920)
  - Bohr-en ereduak akatsak zituen: orbita eliptikoak, ere, izan daitezke



- Egun zer dakigu?
  - Askoz konplexuagoa da
  - Ez dago orbitarik



A. Sommerfeld  
(1868-1951)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Bohr-en eredu planetarioa**

- Borh-ek igorpen-espektroak azaltzeko energiaren kuantikotasuna erabili zuen baina.....
- Ez zekien zergatik elektroia behartuta zegoen orbita zehatz batzuetan biratzeko!
- Hamarkada bat pasatu zen eta inork ez zuen lortu azalpen logikoa ematea
- 1924an Louis de Broglie-k erantzuna eman zuen, uhin-gorpuzkulu dualtasuna planteatuz
- Horretarako aurreko oinarrizko bi ideia erabili zituen: Plancken teoria kuantikoa eta efektu fotoelektrikoa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak:Planck-en Teoria Kuantikoa

- 1900.urtean Planckek ideia harrigarria, apurtzailea, planteatu zuen, une hartan arte kontzeptu guztiak hankaz gora utzi zituen
- Fisika Klasikoaren arabera energia igorri edo xurgatu egiten da edozein kantitatean
- Hona hemen bere proposamena:

*Atomoek eta molekulek bakarrik igorri edo xurgatu ahal dute energia kantitate zehatzetan, “energia minimo”-tan edo bere multiploetan.*



- Energia minimo honi “*Kuantu*” deritzo
- Definitu zuen kuantua eta berari zor diogu **Mekanika Kuantikoaren** izena

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak: Planck-en Teoria Kuantikoa

- Definitu zuen KUANTUA:

*“Irradiatze elektromagnetiko eran igortzen edo xurgatzen den energia kantitate minimoa”*

$$E = h\nu$$

h: Planck-konstantea,  $6,63 \cdot 10^{-34}$  J.s

- Energia guztiak minimo honen multiploak izan behar dira

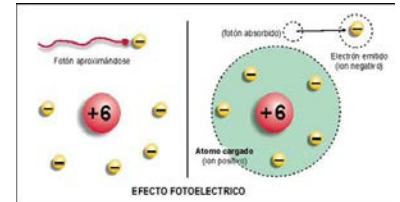
$$E = nh\nu, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- n kuantu zenbakia da (agertu zen lehen aldiz)
- Planck-ek zekien honela zela baina ez zekien zergatia

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Efektu Fotoelektrikoa**

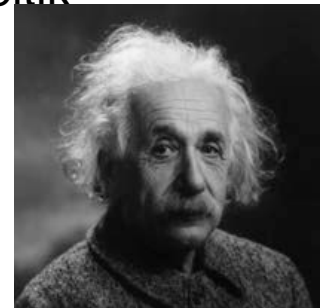
- 1903.urtean Albert Einstein-ek azaldu zuen
- Zertan datza?



*“Metalek,  $\nu$  edo frekuentzia minimoko argipean, elektroiak askatzen dituzte”*

<http://www.educaplus.org/game/efecto-fotoelectrico>

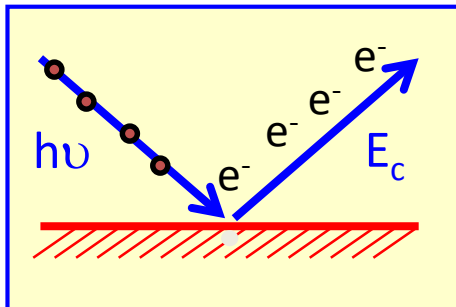
- Askatutako elektroikopurua intentsitatearekiko proportzionala da
- Elektroien energiak ez zuen intentsitatearekiko menpekotasunik
- Nahiz eta oso argi intentsoa erabili, frekuentzia minimoz azpitik ez zegoen elektroien igorpenik
- Hau guztia uhin-teoria erabiltzen ez zen posiblea argitzea
- Berrir suposaketa harrigarri bat!



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Efektu Fotoelektrikoa**

- Argi-sorta partikulaz osatuta kontsideratu zuen, argia uhinaren izaeratik aldentuz
- Partikula hauei “fotoi” izena ipini zien eta energia zehatza esleitu zuen,  $h\nu$ , Planck-en energia



atari-energia,  $E_0$

$$E = E_0 + E_z$$

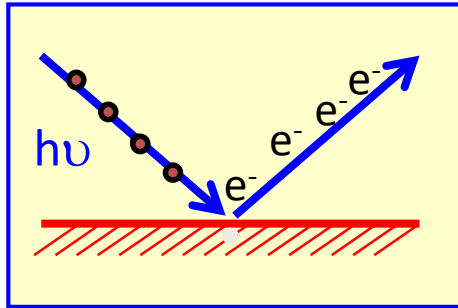
$$E = h\nu \quad \text{eta} \quad E_0 = h\nu_0$$

$$h\nu = h\nu_0 + E_c$$

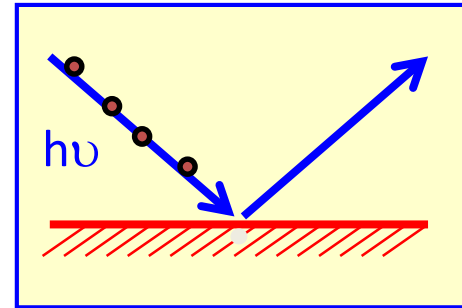
$$E_c = h\nu - h\nu_0 = h(\nu - \nu_0)$$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Efektu Fotoelektrikoa**



atari-energia,  $E_0$ , txikia



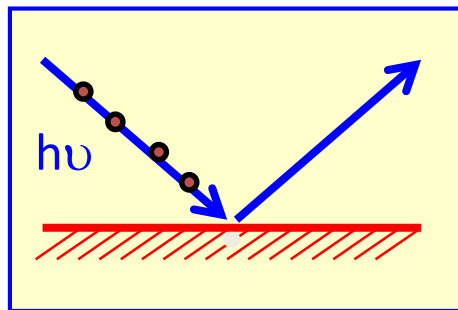
atari-energia,  $E_0$ , handia

- Fotoiaren energia atari-energiaren berdina edo handiagoa bada elektroiak askatuko dira
- Esan ahal da: atari-energia = lotura-energia

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

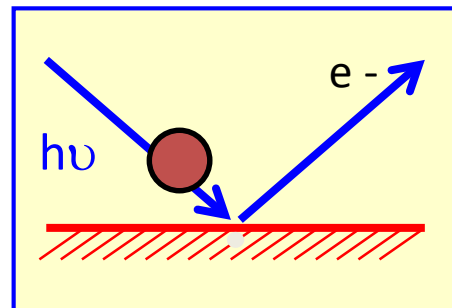
### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Efektu Fotoelektrikoa**

- Elektroiak metalaren barruan lotura-energiari esker lotuta mantentzen dira. Fotoiak energia hau gaindituz gero elektroia erauztea ahal izango du
- Energia hau atari-energia izenekoa da,  $E_0$ , eta,  $\nu_0$  **atari-frekuentziarekin** erlazionatzen da



atari-energia handia

Argi intentsoa  
Fotoi asko



atari-energia handia

Energia altuko argia  
Fotoi bakarra



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Efektu Fotoelektrikoa**

Suposaketa hauekin azaldu ahal dugu gertakariak ?

- Argiaren intentsitate handia bada fotoi gehiago izango ditu, baina fotoi hauen energia ez bada atarikoa baino handiagoa ez du elektroiak erauziko
- Aitzitik, frekuentzia handiko argi-izpia erabiliz gero elektroiek ,ere, energia handiagoa izango dute
- Intentsitea handiagoa bada energia ez da handituko baina bai sortutako elektroikopurua, fotoi gehiago baitaude
- Erabat azalduta dago efektu fotoelektrikoa eta argiaren izaera bikoitza finkatuta geratu zen
- 1921.urtean Albert Einsteinek Nobel saria irabazi zuen

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Uhin-gorpuzkulu dualtasuna**

- Itzul gaitezen gure galderari:

Zergatik elektroiak murriztuta daude orbita zehatzetan mugitzeko?

- 1924.urtean Louis de Broglie-k, honela hausnartu zuen:

Argiko uhinak partikula-izpi bezala joka baldin badute, zergatik ez partikulak (elektroiak) uhin-propietateak ezin dituzte izan?



- De Broglie-ren ustez nukleo batean dagoen elektroiak uhin geldikor bezalaxe jokatzen du

Honen arabera uhinen ibilbidea,  $\lambda$ -ren multiploa izan behar da

$$L = 2\pi r = n \frac{\lambda}{2} \quad n = 1, 2, 3.. \rightarrow r_1, r_2, r_3, \dots$$

$r$  = orbitaren erradioa

**Orbitak kuantizatuta daude!** 26

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Uhin-gorpuskulu dualtasuna**

- Lehen aldiz matematikoki frogatu zuten atomoko orbiten kuantizazioa
- Esan dezakegu materia izaera duala duela

Uhin ↔ Gorpuskulu

Uhin bati dagokion energia  $E = h\nu$

Gorpuskulu bati dagokion energia  $E = mc^2$

Biak berdinduz lortzen da De-Broglieren hipotesia

$$p = h / \lambda$$

- Ondorioz

Uhin guztiek  $p$ , momentu lineala, dute  $p = h / \lambda$

Gorpuskulu guztiek  $\lambda$ , uhin-luzera, dute  $\lambda = h / p$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Uhin-gorpuzkulu dualtasuna**

- Gorpuzkulu mikroskopikoentzat, elektroia bezala



$$\lambda = 10^{-10} \text{ m}$$

Mekanika  
Kuantikoa

- Gorpuzkulu makroskopikoentzat, 1 kg-ko masa eta 1 m/s-ko abiadura



$$\lambda = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ m}$$

Mekanika  
gorpuzkularra  
klasikoa  
(Newton eta  
Maxwell)

- Masa handia dutenek, uhin-luzera txikiago dute
- Masa oso handia bada ez dira aurkezten uhin-fenomeno nabariak, baztergarriak dira

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **Uhin-gorpuzkulu dualtasuna**

Esteka honetan begiratu dezakezue zein aldea dago uhinaren eta partikularen artean.

“Zirritu bikoitzaren saikuntza” azaltzen da. Saiakuntza hau ospetsua da beraren bidez bidez elektroien uhin bezalaxe portaera egiaztatu baitzuten. (ikusi 3.06 minututik aurrera)

<https://www.youtube.com/watch?v=IhHwqV2wYqI&t=1s>

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak:**Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioa**

- Arazo berria  
Posiblea izango litzateke elektroaren posizioa jakitea uhin-izaera izanik?

EZ → espazio osoan mugitzen ari da

- Sortu zen ZIURGABETASUNaren ideia
- Ez dago modurik elektroia orbita zehatzetan kokatzeko



Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioa

- Argi dago Bohr-en eredua huts egin zuela



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak: Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioa

- Mekanika Kuantikoan zenbait magnitude elkarren artean osagarriak dira  
Magnitude hauek neurtzean → zehaztasun eza



ZIURGABETASUNA

$$\Delta x \cdot \Delta y \geq h / 4\pi$$



- Partiluken posizioa eta abiadura zehatzak aldi berean ezagutzerik ez daukagu

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h / 4\pi$$

- Elektroia ibilbidea bakarrik ez ikuten badugu existitzen da ziurtasunez

## 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak:Schrödinger-en ekuazioa

- Sistema kuantikoak azaltzen dituen zutabea Ernest Schrödingerren ekuazioa da
- E. Schrödingerrek 1926.urtean proposatu zuen
- Sistema kuantikoen propietate fisikoak beraien uhin-funtzioetatik,  $\psi$ , lortzen dira
- Funtzio hauek, Schrödingerren ekuazioaren ebazpenak dira

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

H: eragile Hamiltondarra

E: sistemaren energia osoa: zinetika eta potentziala

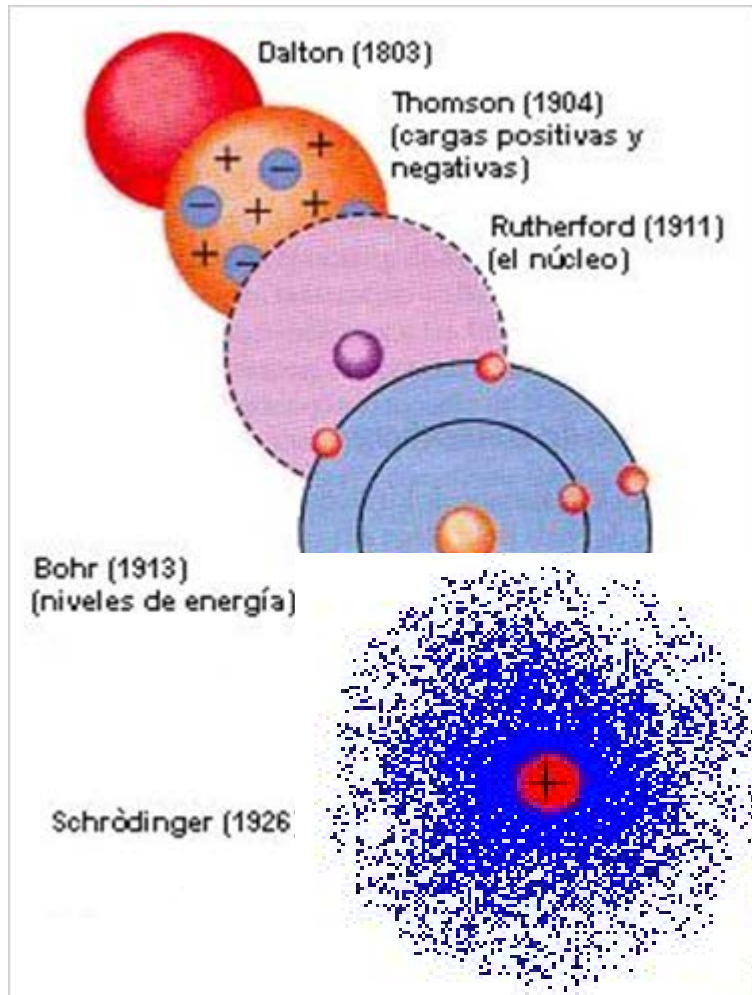
$\psi$ : uhin-funtzioa



E. Schrödinger  
(1887-1961)

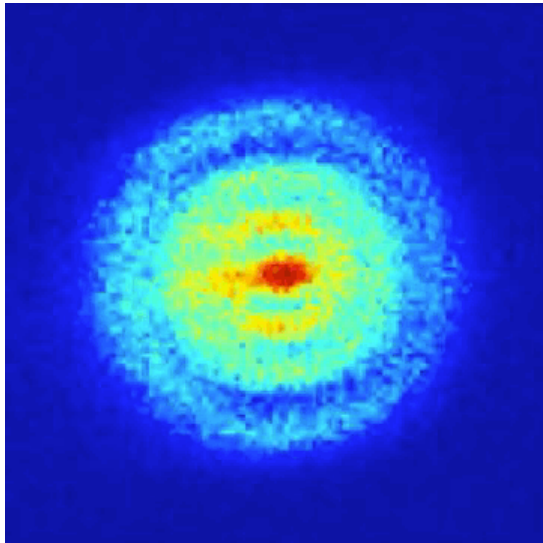


## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



Egitura atomikoaren eboluzioa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



Primera imagen real del átomo de hidrógeno obtenido en un microscopio cuántico.  
(fuente: twiter)

<https://www.youtube.com/watch?v=0b8CekLDdhk>

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

Bi pentsamolde hauen arteko desbertasunik nabarienak

MEKANIKA KLASIKOA	MEKANIKO KUANTIKOA
Partikula eta uhin-izaerak erabat bananduzkoak dira	Partikula eta uhin-izaerak ezin bananduzkoak dira
Magnitude fisikoak elkarren independienteak dira	Zenbait magnitude fisiko osagarriak dira
Energia magnitude jarraitutzat jotzen da	Energia kuantizatuta dago

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak

Gaiaren ideia nagusia...

*EGITURA ATOMIKOARI BURUZKO GURE EZAGUPEN*

*OSOA MEKANIKA KUANTIKOAN OINARRITZEN DA*

*EZER EZ DA ZIURRA, PROBABLEA BAIZIK*

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Laburpena

- XX.mendearen hasieran lehenengo eredu atomikoak proposatu ziren
- Eredu hauek betegabeak ziren
- Garai hartako iraultzaileak ziren ideak aplikatzean hobetuz joan ziren
- Pentsamolde berri baten beharra ikusi zen, egitura atomikoa erabat azaltzeko: Mekanika Kuantikoa
- Gai honetan ikusitako aurreko ideiak **Teoria Kuantiko Zaharra** osatzen dute (1913-1924)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **bibliografia**

1. Lothar Beyer. *Química Inorgánica*. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
2. Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)
3. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*;11<sup>a</sup> Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
4. Valenzuela, C.: *Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia*. Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### 5.1.Mekanika Kuantikoaren oinarriak: **bibliografia**

5. Jesús Navarro Faus: Física Cuántica. El principio de incertidumbre. Heisenberg, National Geographic, edición especial, (2014)
6. Jaume Navarro: el átomo cuántico. Niels Bohr, National Geographic, edición especial, (2016)



## 5.2. GAIA

# ATOMO HIDROGENOIDEAK

# EGITURA ATOMIKOA

Farmaziako gradua. 1.kurtsoa

Kimika orokorra eta ez-organikoa



## 5. Gaia. Egitura atomikoa eta taula periodikoa

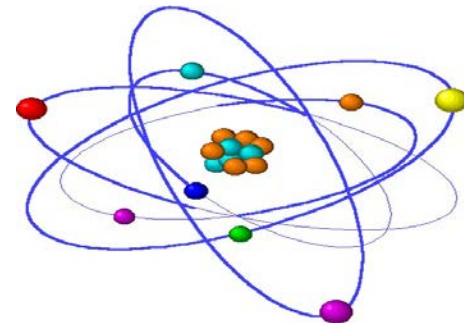
### INDIZEA

5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak

**5.2. Atomo hidrogenoideak Egitura atomikoa.**

5.3. Egitura atomikoa. Atomo polielektronikoak.

5.4. Taula periodikoa



## 5. 2.Gaia. Atomo hidrogenoideak. Egitura atomikoa.

### INDIZEA

- 5.2. a. Schödingerren ekuazioa
- b. Uhin-funtzioa
- c. Kuantu-zenbakiak
- d. Uhin-funtzioa erradiala
- e. Uhin-funtzioa angeluarra

## 5.2. GAIA

### ATOMO HIDROGENOIDEAK. EGITURA ATOMIKOA

#### 5.2.a. Schödingerren ekuazioa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

. Eredu atomiko desberdinak erabili dira:



- Bohr-Sommerfeld-en eredua (1913-1916)

- Eredu mekanokuantikoa, Mekanika Ondulatorioan  
oinarritutako eredua(1924)

- Eredu bektoriala (atomo polielektronikoetarako)

. **Schrödingerren ekuazioa gaur egungo egitura atomikoari buruzko ezagupen osoaren zutabea da**

. **Elektroiarekin elkartzen duen uhin elektromagnetikoa hirudimentsionalaren existentzia suposatzen du**

. **Uhin honek eta bere ekuazioak atomoan bertan elektroien portaera definitzen dute**

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Eredu mekanokuantikoa edo mekaniko ondulatorioa

- . Atomoa sistema kuantikotzat hartzen da
- . Sistema kuantikoak azaltzen dituen zutabea E. Schrödingerren ekuazioa da, 1926.urtean proposatutakoa
- . Sistema kuantikoen propietate fisikoak beraien uhin-funtzioetatik,  $\psi$ , lortzen dira
- . Funtzio hauek, Schrödingerren ekuazioaren ebazpenak dira

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

H: eragile Hamiltondarra

E: sistemaren energia osoa

$\psi$ : uhin-funtzioa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Schrodingerren ekuazioa

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

non

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \quad \text{eta} \quad V = \frac{e^2}{r}$$

beraz:

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

Uhin-funtzioak  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_i, \Rightarrow E_1, E_2, E_3, \dots, E_i$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

. Ekuazio honetatik emaitzak

$$E(n) = -\frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad \text{eta} \quad \psi(n) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi}{a} x$$

. Sistema honetarako baimendutako energiak eta uhin-funtzioak  $n$ , zenbaki kuantikoaren menpekoak dira

atomoa

orbitala

$$\begin{aligned} n=1 &\rightarrow E_1 \quad \text{eta} \quad \psi_1 \\ n=2 &\rightarrow E_2 \quad \text{eta} \quad \psi_2 \end{aligned}$$

. Sistema kuantiko honetako egoera kuantiko bakoitzari  $\psi$  balorea eta honi dagokion  $E$  balorea esleitzen dio

. Egoera bakoitzaren ezaugarriak kuantu-zenbakiek determinatzen

dute  $\Rightarrow$  ENERGIAREN KUANTIZAZIOA

5.2. GAIA

ATOMO HIDROGENOIDEAK. EGITURA ATOMIKOA

5.2.b. Uhin-Funtzioak



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

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

H: Eragile Hamiltondarra

E: Sistemaren energia osoa: zinetikoa eta potentziala

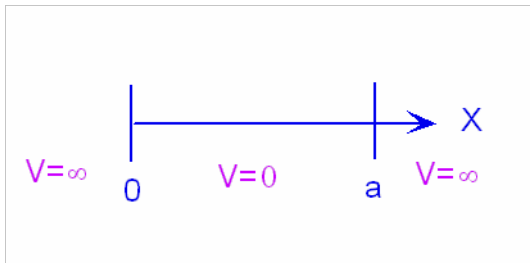
$\psi$ : Uhin-funtzioa / funtzio orbitala

- . Ekuazioa konplexua da bai itxuraz bai ebazpenaz
- . Bakarrik kasu particular batentzat ebazten da: elektroia hidrogeno atomoaren barruan dagoenean

dimentsio bakarreko kutxa  hiru dimentsioko kutxa  
atomo hidrogenoidea

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Sistema kuantiko baten Schrödingerren ekuazioa ebatziko dugu: **dimentsio bakarreko kutxa** batean dagoen partikula bat, hain zuzen.



V=energia potentziala da

a= kutxaren aldea

Beraz, kutxa barruan dagoenean, partikularen **energia bakarra zinetikoa da.**

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}$$

Operatzaile hamiltondarrak energia zinetikoa baino ez du kontuan hartzen

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Ekuazio hau ebatziz, sistemaren  
energi maila baimenduak eta uhin-funtzio  
baimenduak lortzen dira

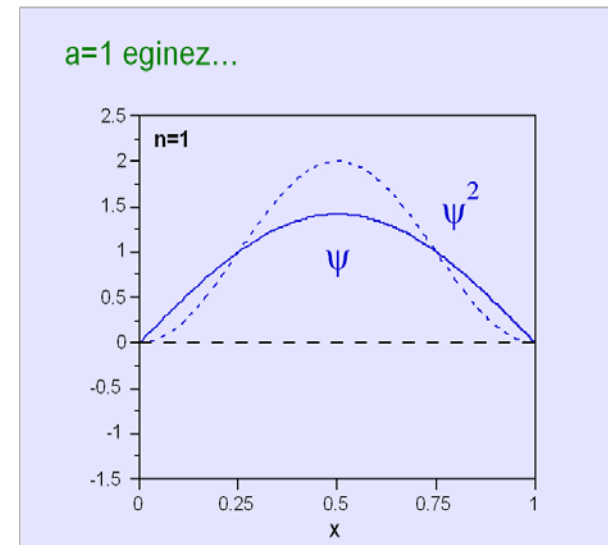
$$E(n) = -\frac{n^2\hbar^2}{8ma^2}$$

$$\psi(n) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi}{a} x$$

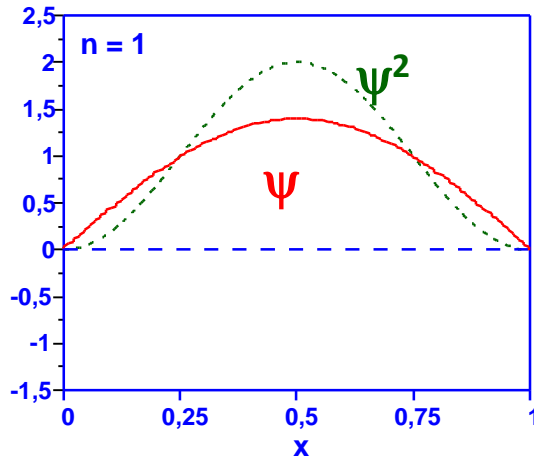
$\Psi(n)$  eta  $\Psi^2(n)$  adierazpen grafikoki

$\Psi(n)$  funtzioak ez du esangura fisikorik

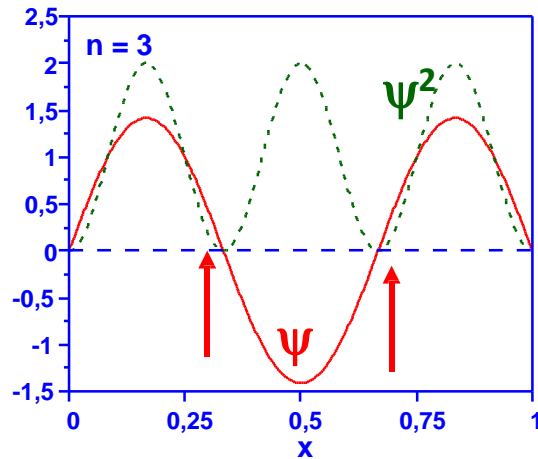
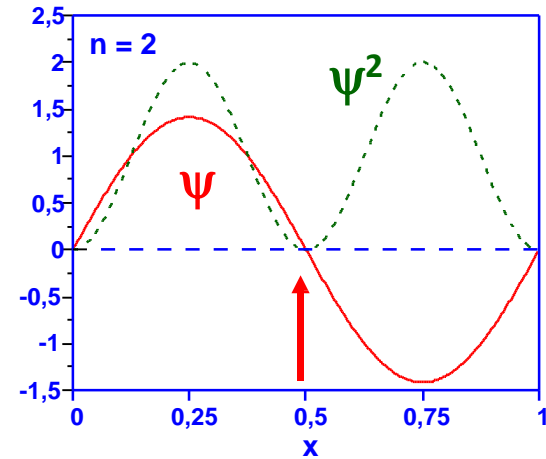
$\Psi^2(n)$  probabilitate-banaketaren funtzioa da.  
Partikula kutxan aurkitzeko probabilitatearekin  
erlazionatuta dago. Interesatzen zaiguna da.



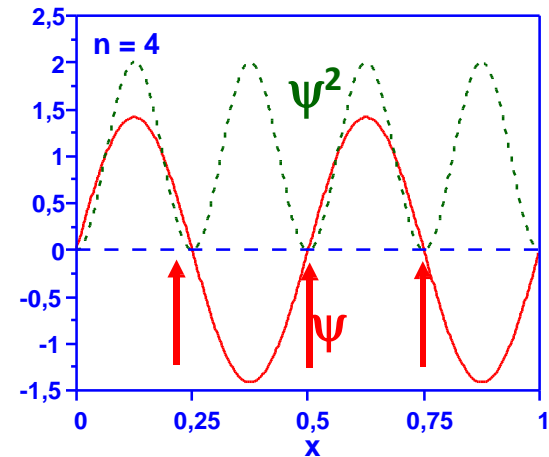
# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



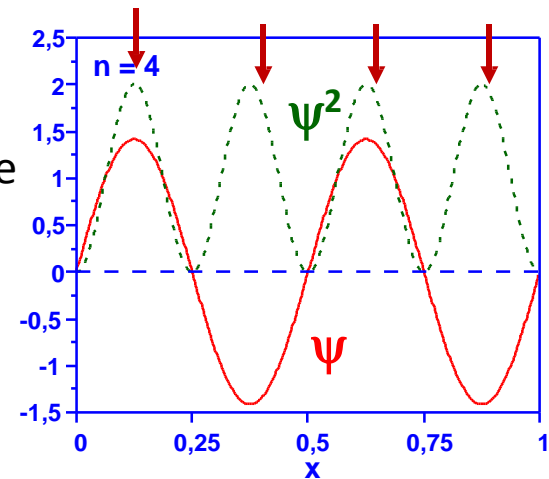
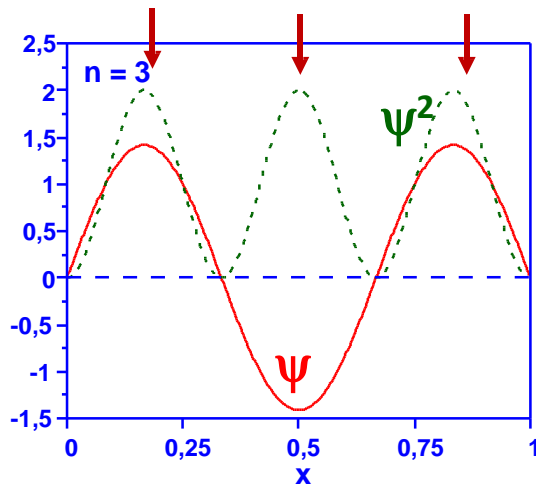
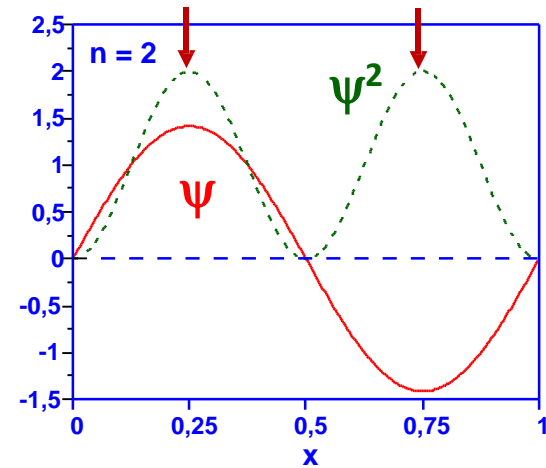
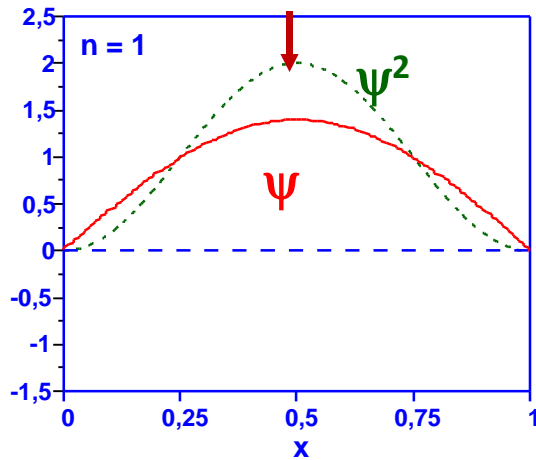
$\psi^2(n) = 0$   
 $x = 0$  eta  $X = L$  badira



$n-1$  nodoak ,  $0$  eta  $L$   
 izan ezik (partikula  
 aurkitzeko probabilitate  
 minimoa)



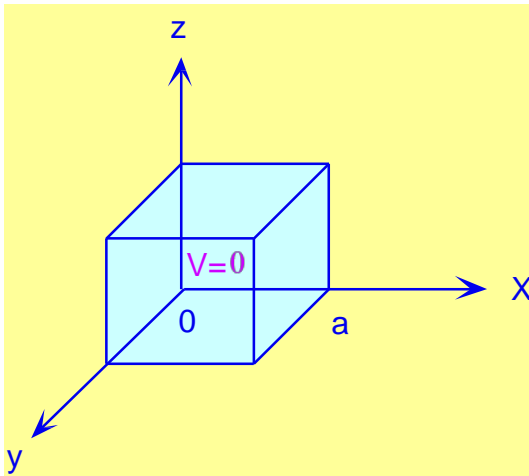
# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



.  $\psi^2(n) = 0$   
 $x = 0$  eta  $X = L$  badira

.  $n$  maximo (partikula aurkitzeko probabilitate maximoa)

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



Partikula kutxa barruan dagoenean,  $V=0$

Partikula kutxatik kanpo dagoenean,  $V=\infty$

**Schrödinger-en ekuazioa, 3Dtan**

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

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \frac{n_x \pi}{a} x$$

$$\psi(y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \frac{n_y \pi}{a} y$$

$$\psi(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \frac{n_z \pi}{a} z$$

$\Psi$  uhin-funtzioa 3 ekuazio independenteetan bana daiteke

→ 3 kuantu-zenbaki ( $n_x, n_y, n_z$ )

$$E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

energiaren balio posibleak

### DEGENERAZIOA

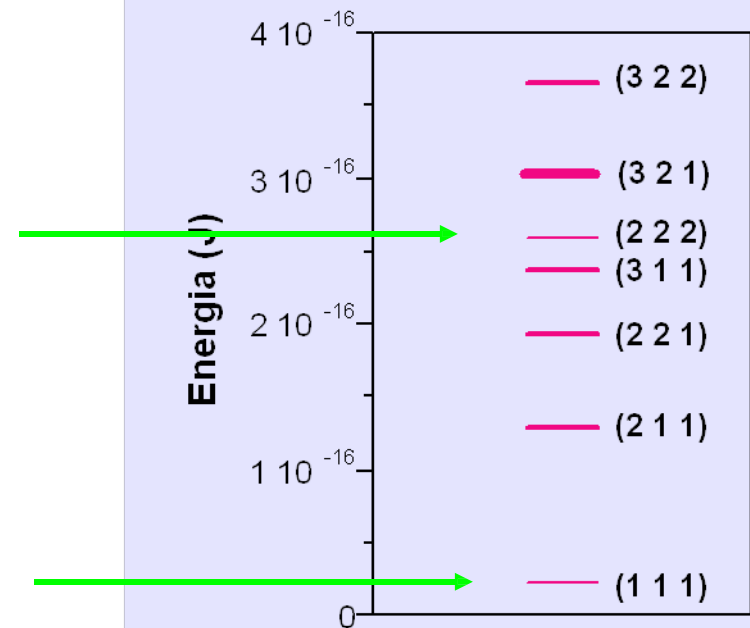
- . 3 kuantu-zenbakiak ( $n_x, n_y, n_z$ ) elkarren independenteak dira
- . Haien arteko hainbat konbinazio **energia bereko** egoerei dagozkie
- . Egoera hauek **degeneratuak** dira
- . Energia bera badute ere, egoera hauek desberdinak dira

## DEGENERAZIOA

Sistema kuantikoetan egoera degeneratuak oso arruntak dira

**EGOERA EZ  
DEGENERATUAK**

**$r=a_0$  aldeko 3Dko kutxan dagoen elektro baten lehen 20 energi mailak**





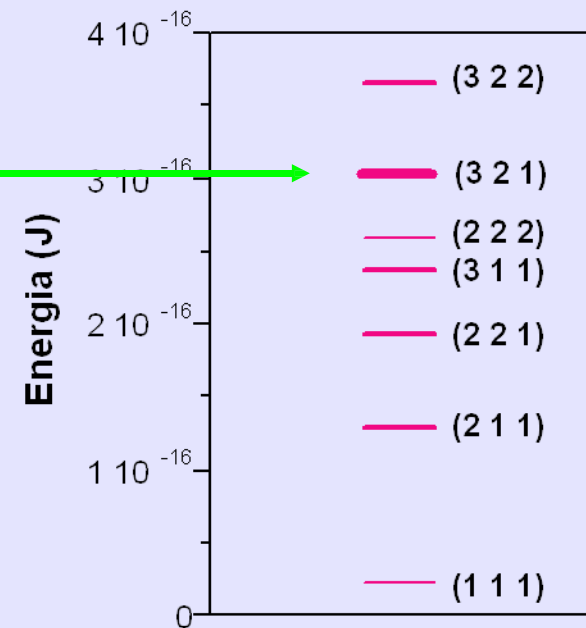
## DEGENERAZIOA

6 aldiz DEGENERATUTA  
dagoen egoera

(3,2,1), (2,3,1), (1,2,3)

(3,1,2), (2,1,3), (1,3,2)

$r=a_0$  aldeko 3Dko kutxan  
dagoen elektro baten  
lehen 20 energi mailak



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Elektroiak atomoaren barruan????

Sistema kuantiko konplexua dugu

Ez dago partikula bakarra, baizik eta gehiago

Kontrako karga duten partikulak

Kontsideratzeko beharra:

- . protoien eta elektroien arteko **erakarpenak** (p ► — ◄ e)
- . elektroien arteko **aldarapenak** (e ◄ — ► e)



*EZ DA KUTXAREN BARRUAN BEZAIN ERRAZA*

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- . Kasu sinpleenetik abiatuko gara: **ATOMO HIDROGENOIDEAK** (elektroi bakarra duten atomoak)
- . H-az gain, atomo hidrogenoide gutxi ezagutzen dira: adibidez, He<sup>+</sup> atomo-ioia.



protoien eta elektroien arteko **erakarpenak** (p  —  e)

~~elektroien arteko **aldarapenak** (e  —  e)~~

- . Atomo hidrogenoideen deskribapena **zeharo** sinplifikatzen da
- . Energia potentziala ez da nulua

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \psi = E\psi$$

Energia zinetikoari  
dagokion terminoa

Energia potentzialari  
dagokion terminoa

konparatu

3Dko kutxan dagoen partikularen  
Schrödinger-en ekuazioa ( $V=0$ , partikula  
kutxa barruan dagoenean)

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

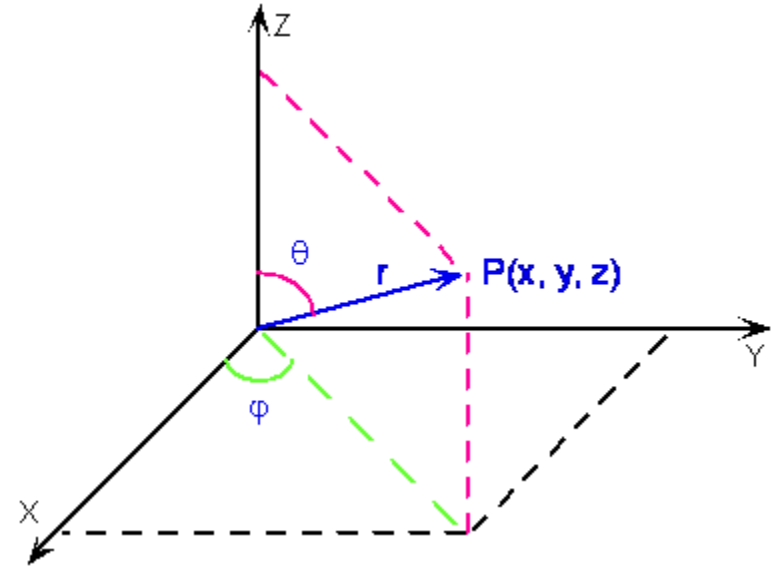
# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Schrödingerren ekuazioa

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \psi = E\psi$$

Koordenatu  
kartesianetan

Koordenatu  
polarretan



$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[ \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \psi = E\psi$$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Schrödingerren ekuazioa

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m r^2 \sin\theta} \left[ \sin\theta \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \psi = E\psi$$

Ekuazioa honek abantail nabariak dauzka

$\psi(r, \theta, \phi)$  = **elektroiaren uhin-funtzioa**

$R(r)$  = **funtzio erradiala** (r distantziarekiko mendekotasun soila adierazten du)

$A(\theta, \phi)$  = **funtzio angeluarra** ( $\theta$  eta  $\phi$  angeluekiko mendekotasun soila adierazten du)

Ebatzi eta gero

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

*Koordenatu hauen baliatuz posiblea da uhin-funtzioa bi errezagotan banatzea*

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- . Hidrogeno atomoaren orbitalak hurrengo motako funtzioak dira

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$



$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) A_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$R_{n,l}(r)$  Funtzio erradiala:  $r$  distantziarekiko mendekotasun soila adierazten du

$A_{l,m}(\theta, \varphi)$  Funtzio angeluarra: orbitalaren forma angeluarra adierazten du

- . Zein funtzio erradialak zein funtzio angeluarrak ez dute berezko esanahi fisikoa
- . Bere karratuak elektroia atomoan aurkitzeko probabilitatearekin,  $P$ , erlazionatzen da

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Banaketa Erradialaren Funtzioa  $4\pi r^2 R^2(r)$ 
  - Elektroia aurkitzeko probabilitatea
    - Nukleotik distantzia batean
  - Orbitalaren tamaina adierazten du
  
- Banaketa Angeluarraren Funtzioa,  $A^2(\theta, \varphi)$ 
  - Elektroia aurkitzeko probabilitatea
    - $\theta$  eta  $\varphi$  angeluekiko
    - Nukleotik edozein distantziara
  - Orbitalaren itxura adierazten du



5.2. GAIA

ATOMO HIDROGENOIDEAK. EGITURA ATOMIKOA

5.2.c. Kuantu-zenbakiak

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Schrödinger-en ekuazioa ebatzi ondoren, **3 kuantu-zenbaki** agertzen dira

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

$n$ =kuantu-zenbaki nagusia

$l$ = kuantu-zenbaki azimutala

$m$ = kuantu-zenbaki magnetikoa

$n$ ,  $l$ , eta  $m$  **ez dira elkarren independenteak**

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

$l=0,1,2, \dots, (n-1)$

$m= -l, -l+1, \dots, -1, -2, 0, 1, 2, \dots, l-1, l$

$n$ ,  $l$ , eta  $m$  **hirukoteak** osatzen dituzte

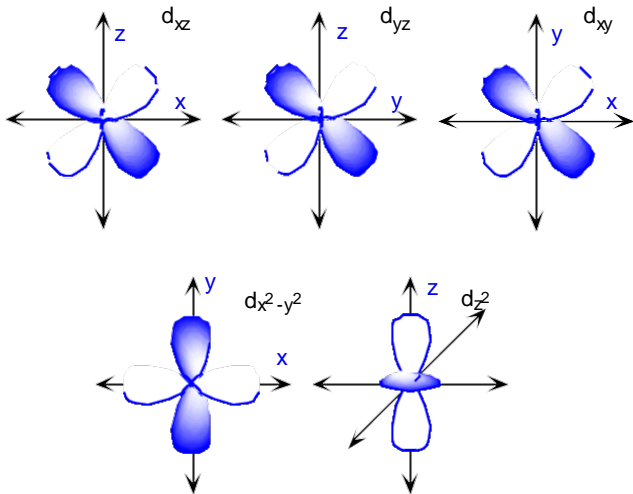
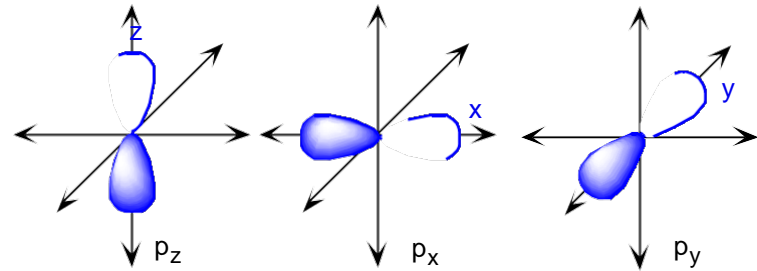
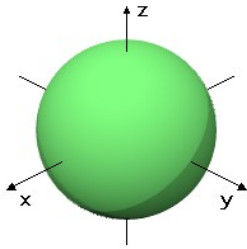
Adib: (1,0,0)

(3,2,-1)

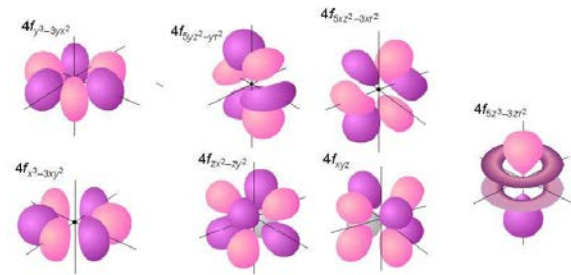
(2, 1, 0)

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Schrödingerren ekuazioa ebatzi ondoren, **3 kuantu-zenbaki** agertzen dira. Hirukote bakoitza **ORBITAL BAT DA**



## Orbitales f



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### *LABURBILDUZ.....*

- . UHIN-FUNTZIOA ,  $\psi$ ,  $\rightarrow$  ORBITALA
- . ORBITAL BAKOITZA HIRU KUANTU-ZENBAKIK DEFINITUTA DAGO
- . *ZENBAKI-KUANTIKOAK HAIEN ARTEKO MENPEKOAK DIRA*

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

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm(l-1), \pm l$$

.

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Kuantu-zenbakiak orbitalen ezaugarriak determinatzen dituzte

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

n=kuantu-zenbaki nagusia  
l= kuantu-zenbaki azimutala  
m= kuantu-zenbaki magnetikoa

**orbitalaren energia eta tamaina**

**orbitalaren itxura**

**orbitalaren orientazioa espazioan**

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Hurrengoa ondo bereiztu behar duzue:

. ORBITALA: hiru kuantu-zenbakiz definituta

$$n, l, m_l$$

. ELEKTROIA: lau kuantu-zenbakiz definituta

$$n, l, m_l, s$$



Spinaren  
kuantu-zenbakia

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## Kuantu-zenbakiaren hirukote posibleak

kuantu-zenbakiak			uhin-funtzioak	l balio berbereko hirukote- kopurua	n balio berbereko hirukote- kopurua
n	l	$m_l$	izendatzeko era	$2l+1$	$n^2$
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
2	1	-1,0,1	$2p_{-1}, 2p_0, 2p_{+1}$	3	4
3	0	0	3s	1	9
3	1	-1,0,1	$3p_{-1}, 3p_0, 3p_{+1}$	3	9
3	2	-2,-1,0,1,2	$3d_{-2}, 3d_{-1}, 3d_0, 3d_{+1}, 3d_{+2}$	5	9
4	0	0	4s	1	16
4	1	-1,0,1	$4p_{-1}, 4p_0, 4p_{+1}$	3	16
4	2	-2,-1,0,1,2	$4d_{-2}, 4d_{-1}, 4d_0, 4d_{+1}, 4d_{+2}$	5	16
4	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	$4f_{-3}, 4f_{-2}, 4f_{-1}, 4f_0, 4f_{+1}, 4f_{+2}, 4f_{+3}$	7	16

## 5.2. GAIA

# ATOMO HIDROGENOIDEAK. EGITURA ATOMIKOA

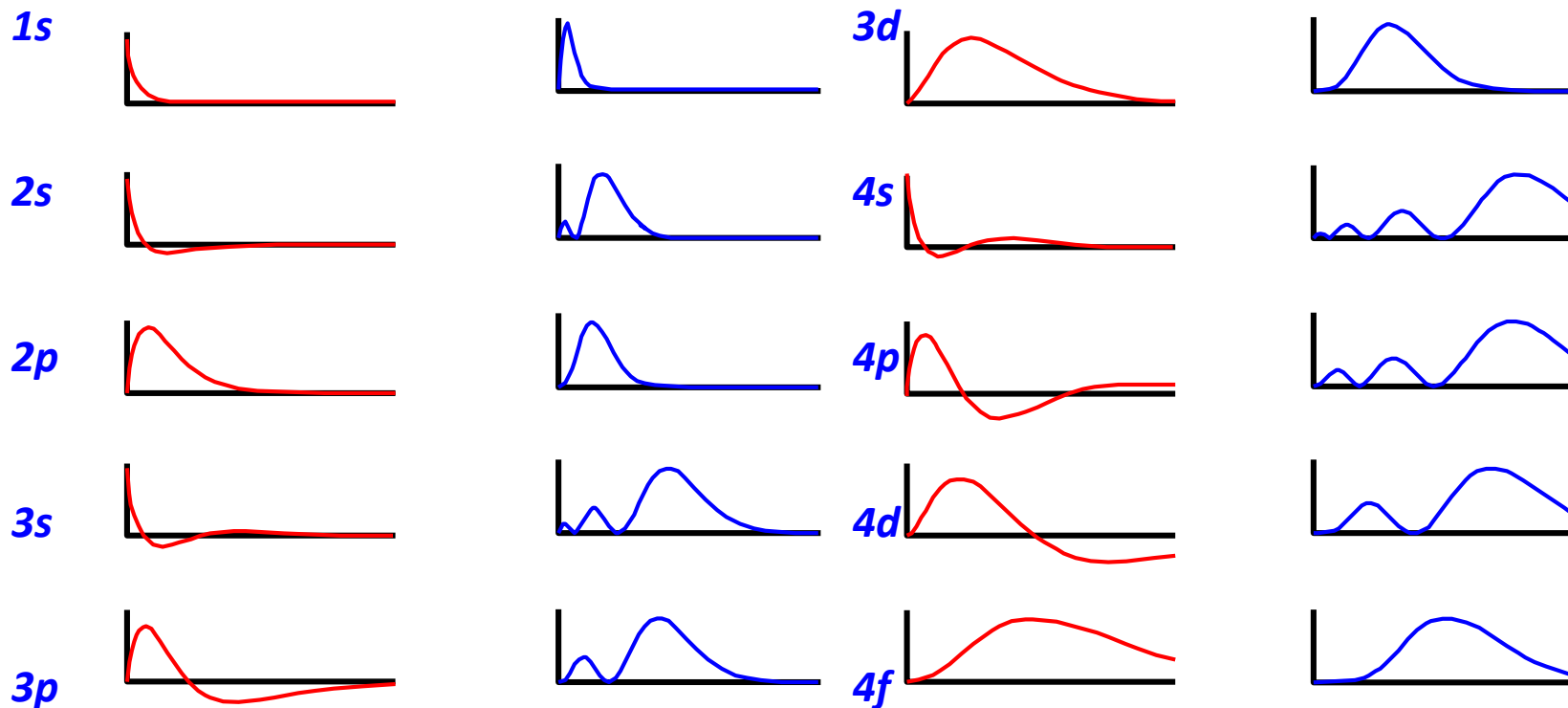
### 5.2.d. Uhin-funtzio erradiala



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Banaketa Erradialaren Funtzioa  $4\pi r^2 R^2(r)$ 
  - Elektroia aurkitzeko probabilitatea
    - Nukleotik distantzia batean
  - Orbitalaren tamaina adierazten du

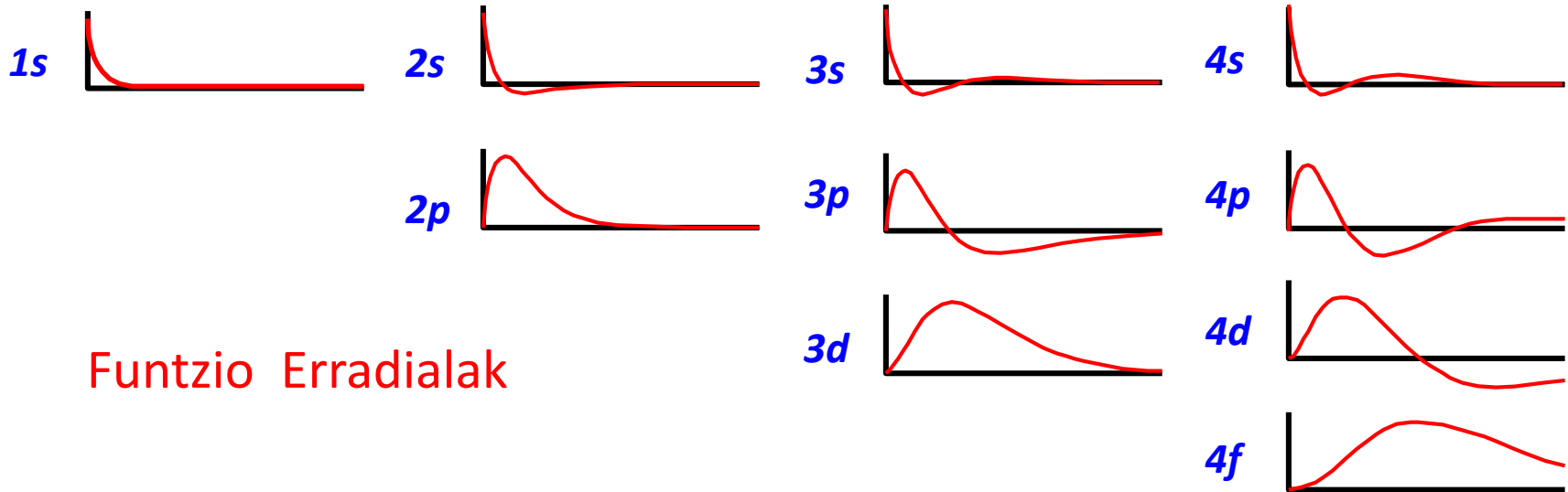
# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



H atomoaren Funtzio Erradiala  $R_{n,l}(r)$

H atomoaren banaketa -erradialaren funtzioa  $4\pi^2r^2R^2(r)$

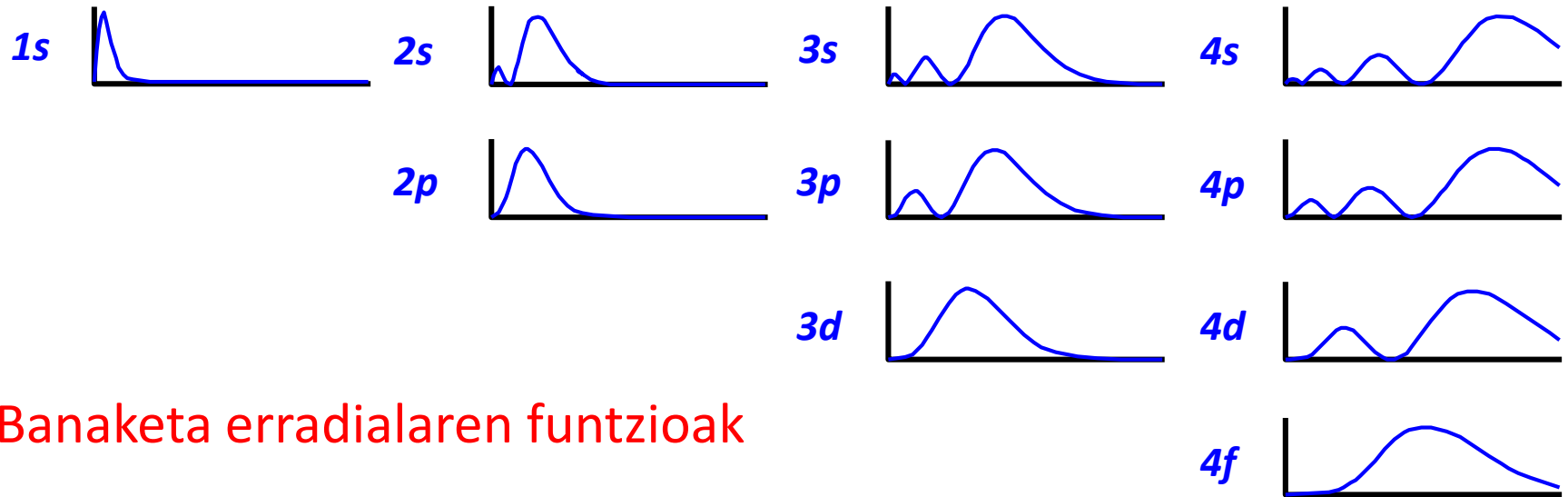
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



### Funtzio Erradialak

- $1s$ ,  $2p$ ,  $3d$  y  $4f$  funtzioek ez dute nodorik
  - Beti positiboak dira.
  - Besteak  $(n-l-1)$  aldiz  $0 - \infty$  tartean anulatzeko dira
- Funtzio guztiak 0-ra jotzen dira “ $r$ ” handitzean era esponentzian.

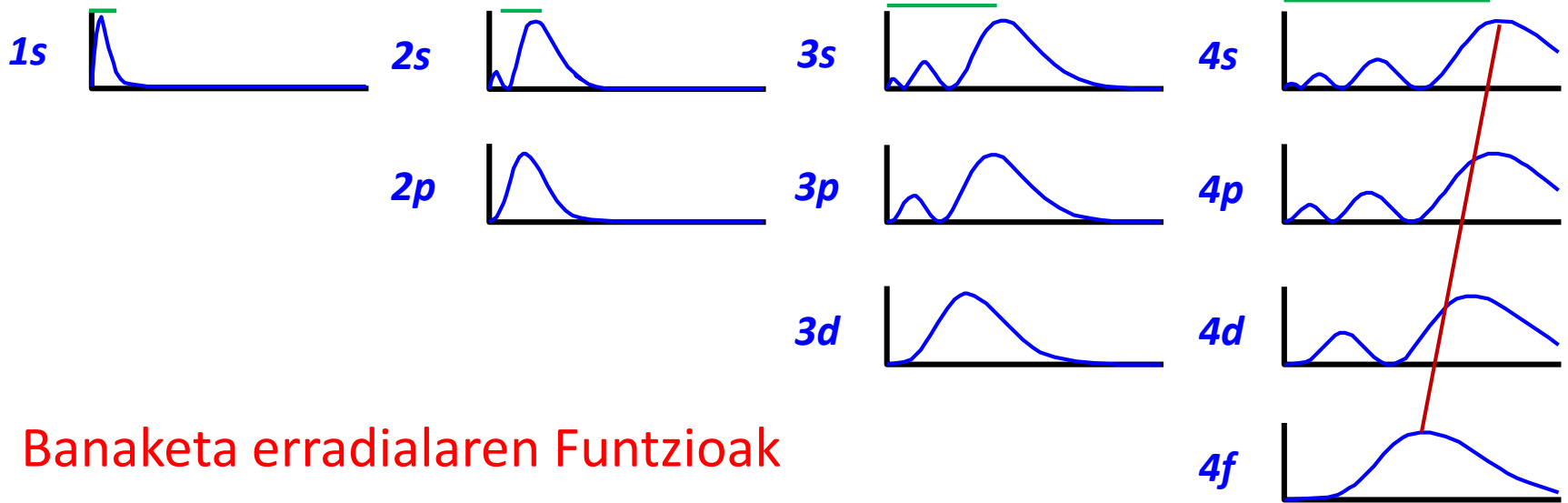
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



### Banaketa erradialaren funtzioak

- $r$  erradioko geruza esferiko batean elektroia aurkitzeko probabilitatea
  - Beti positiboa da
  - Beti nukleoan 0 balioa hartzen du
- Probabilitatea  $r$ -arekiko handitzen da  $\rightarrow$
- Maximoak gero eta altuenak dira  $r$  handitzen den heinean

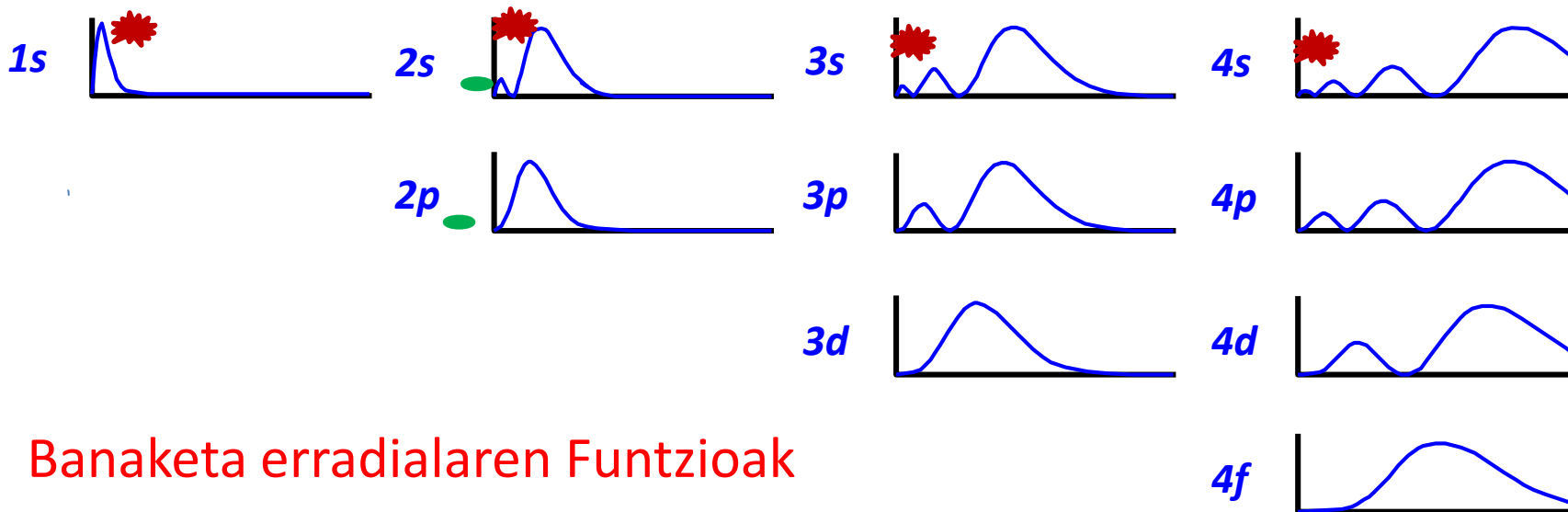
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



### Banaketa erradialaren Funtzioak

- Elektroia nuklearen distantzia jakin batean aurkitzeko probabilitate maximoa
  - $n$  kuantu- zenbakia handitzen den heinean elektroia nukleatik aurkitzeko distantzia oso azkar handituz doa.
  - $n$  balore berberako  $l$  handitzean arinki gutxitzen da.

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

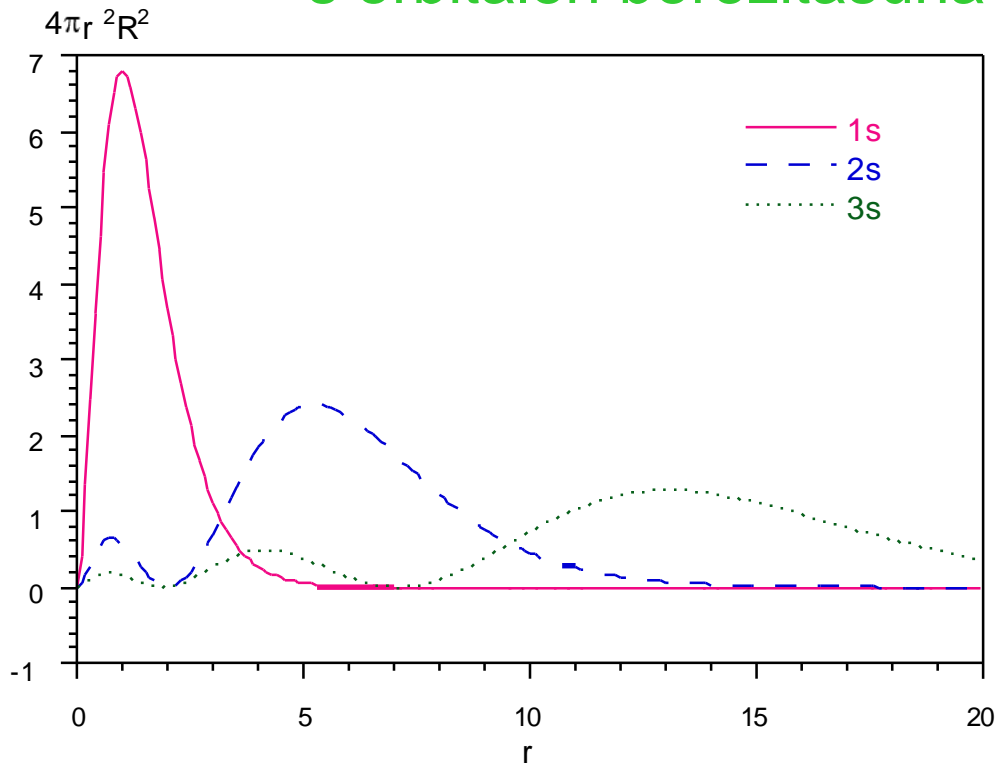


## Banaketa erradialaren Funtzioak

- Nukleotik hurbil dauden zonaldeetan
  - $n$  berberako funtzioaren balore handiagoak duten orbitalek  $s$  motakoak dira, txikienak  $d$  motakoak eta tarteko balore dituztenak  $p$  orbitalak dira.
  - Nukleotik hurbil elektroia aurkitzeko probabilitatea hurrengo ordenari jarraitzen dio :  $s > p > d > f$
  - $s$  orbitalean elektroiak BETI nukleotik hurbil egoteko aukera du, nahiz eta txikia izan,  $1s$  orbitalean izan ezik. Izan ere lehenengo maximoa nukleotik hurbil dute.

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### s orbitalen berezitasuna

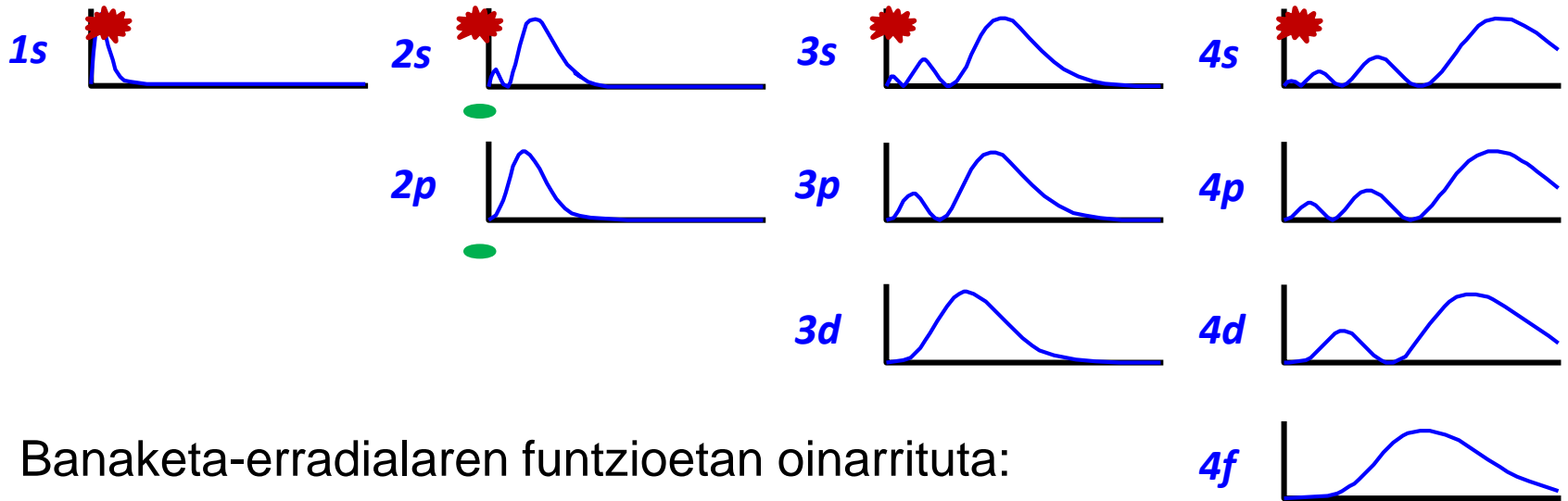


**s orbitalek beti dute nukleotik hurbil egoteko probabilitate bat**

Hori dela eta, s orbitalak **SARKARIAK** direla esaten da.

Ondorio honek atomo polielektronikoen egitura elektronikorako izugarrizko garrantzia du

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



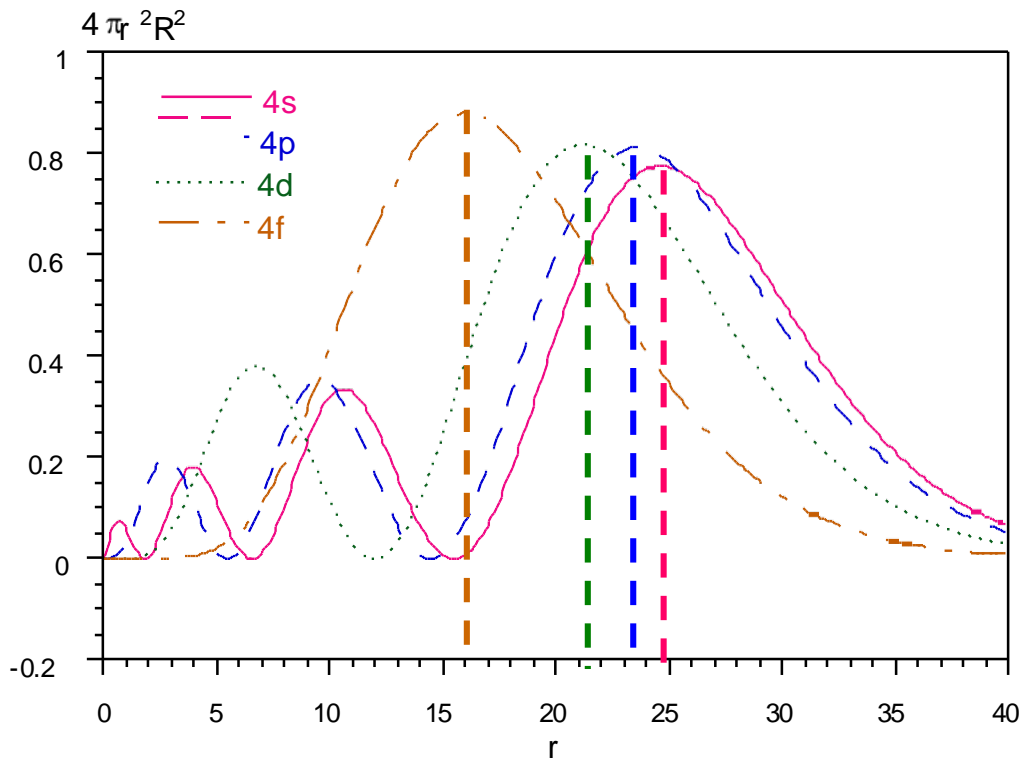
Banaketa-erradialaren funtzioetan oinarrituta:

- . Elektroia **s** orbitaletan nukleora besteetan baino gehiago hurbiltzen da. **s** orbitalek **beti daukate lehen maximoa nukleotik hurbil**
- . *Beti nukleoaren gertu aurkitzeko probabilitateren bat dago, nahiz eta txikia izan*
- . *s* orbitalak gainontzekoak baino sarkariagoak dira



# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## Geruza bereko orbitalen konparazioa



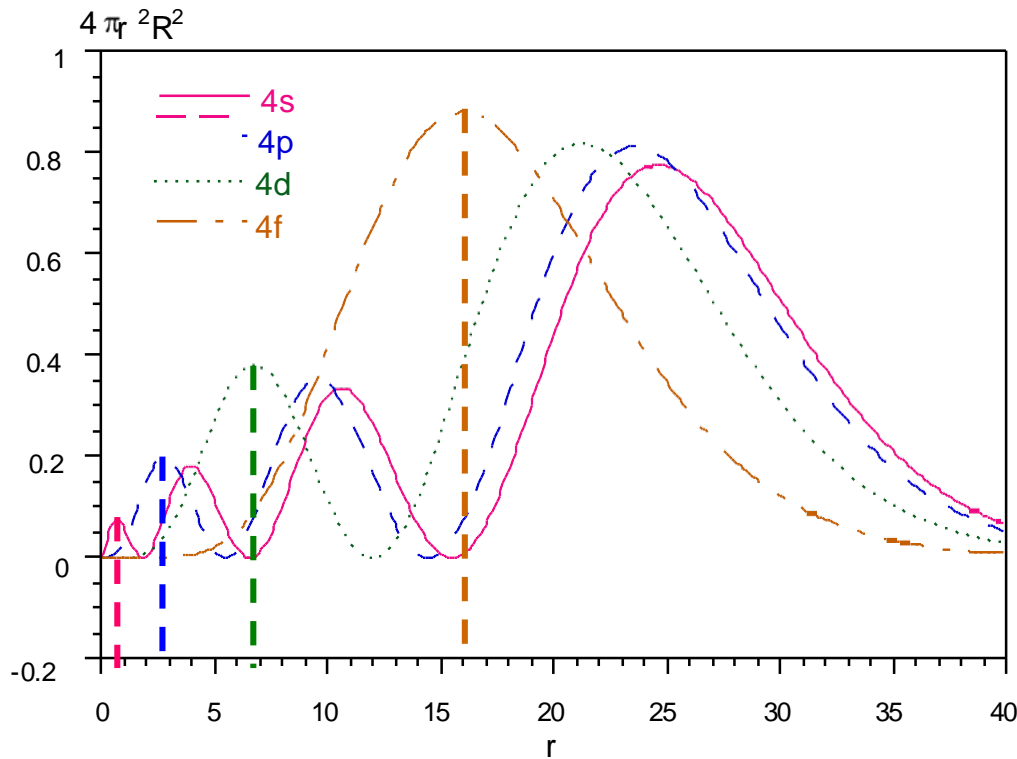
**Batez bestean**, nukleotik hurbil aurkitzeko probabilitate handiena duen elektroia l handienekoa da:

$$P_{\max}(4f) > P_{\max}(4d) > P_{\max}(4p) > P_{\max}(4s)$$

Maximorik altuena

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Geruza bereko (n bereko) orbitalen konparazioa



Une jakin batean,  
nukleotik hurbilen  
aurkitzeko elektroia l  
txikieneko da:

$$P_u(4s) > P_u(4p) > P_u(4d) > P_u(4f)$$

Lehen  
maximoa

### ONDORIOAK

- . Geruza bereko (2s, 2p, 2d) orbitalen konparazioa...
- . Batez bestean:  $n$  berarentzat nukleotik hurbil aurkitzeko probabilitate handiena duen elektroia  $l$  handienekoa da
- . Une jakin batean: nukleotik hurbilen aurkitzeko elektroia  $l$  txikienekoa da

5.2. GAIA

ATOMO HIDROGENOIDEAK. EGITURA ATOMIKOA

5.2.e. uhin-funtzioa angeluarra

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Funtzio angeluarra  $A(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$

- . Honek, hidrogeno atomoan, elektroiak nahiago dituen norabideak adierazten ditu
- . Angeluekiko  $(\theta, \varphi)$  besterik ez du menpekotasunik
- . Konstante batez eta polinomio batez eratuta daude ( $\cos\theta$  eta  $\sin\varphi$ )

Banaketa angeluarren funtzioa  $A^2(\theta, \varphi)$

- .  $\theta$  eta  $\varphi$  norabideetan edozein distantzietara elektroia aurkitzeko probabilitatea adierazten du
- . **Orbitalaren forma** adierazten du

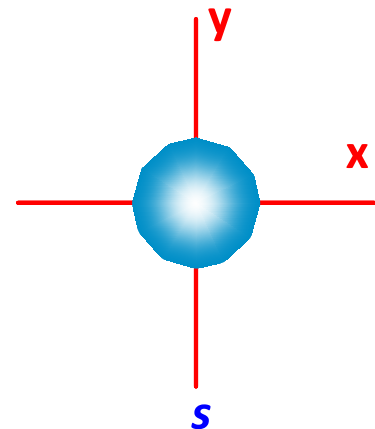
## Atomo hidrogenoideen funtzio angeluarrak normalizatuak

Orbitala	Funtzio Angeluarra		Orbitala	Funtzio Angeluarra	
$s$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$		$d_{x^2-y^2}$	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}$	$\text{sen}^2\theta (2\text{cos}^2\varphi-1)$
$p_z$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}$	$\text{cos}\theta$	$f_{z^3}$	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}}$	$(5\text{cos}^3\theta - 3\text{cos}\theta)$
$p_x$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}$	$\text{sen}\theta \text{cos}\varphi$	$f_{z^2x}$	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}}$	$(5\text{cos}^2\theta-1) \text{sen}\theta \text{cos}\varphi$
$p_y$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}$	$\text{sen}\theta \text{sen}\varphi$	$f_{z^2y}$	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}}$	$(5\text{cos}^2\theta-1) \text{sen}\theta \text{sen}\varphi$
$d_{x^2}$	$\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}}$	$(3\text{cos}^2\theta - 1)$	$f_{z(x^2-y^2)}$	$\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{\pi}}$	$\text{cos}\theta \text{sen}^2\theta (2\text{cos}^2\varphi-1)$
$d_{xy}$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}}$	$\text{cos}\theta \text{sen}\theta \text{cos}\varphi$	$f_{zxy}$	$\frac{\sqrt{105}}{2\sqrt{\pi}}$	$\text{cos}\theta \text{sen}^2\theta \text{cos}\varphi \text{sen}\varphi$
$d_{yz}$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}}$	$\text{cos}\theta \text{sen}\theta \text{sen}\varphi$	$f_{x^3}$	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}}$	$\text{sen}^3\theta (4\text{cos}^2\varphi-3\text{cos}\varphi)$
$d_{xz}$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}}$	$\text{sen}^2\theta \text{sen}\varphi \text{cos}\varphi$	$f_{y^3}$	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}}$	$\text{sen}^3\theta (3\text{sen}\varphi-4\text{sen}^2\varphi)$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### “S” motako orbitala

- $A^2(s)$ -ren adierazpena esfera/koro bat da
- Funtzio angeluarra konstantea da
- Ez du  $\theta$  eta  $\varphi$ -rekiko menpekotasuna
- $\psi$  funtzioa bakarrik funtzio erradialaren menpekoa da
- Zeinu bera du puntu guztietan
- Ez du izaera zuzenduta
- Ez dauka gogoko norabiderik
- Simetria esferikoa du

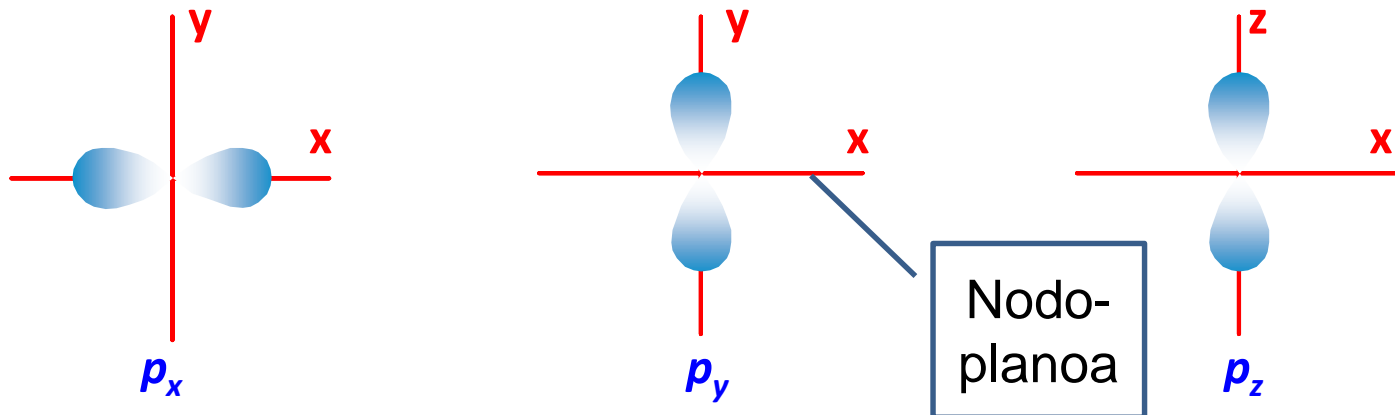


## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### “P” motako orbitalak

$A^2(p_x)$ ,  $A^2(p_y)$  eta  $A^2(p_z)$ -ren adierazpena bi lobulu luzatuta ematen dituzte, zeinu positiboaz hiru ardatzean zuzenduta

Bi esfera ukitzaille jatorrian,  $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}$  diametrokoa





## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### “P” motako orbitalak

- Beraz  $p_x$ ,  $p_y$  eta  $p_z$  orbitalen izenak honako hauek ditugu, koordenatu esferikoekin erlazionatuta

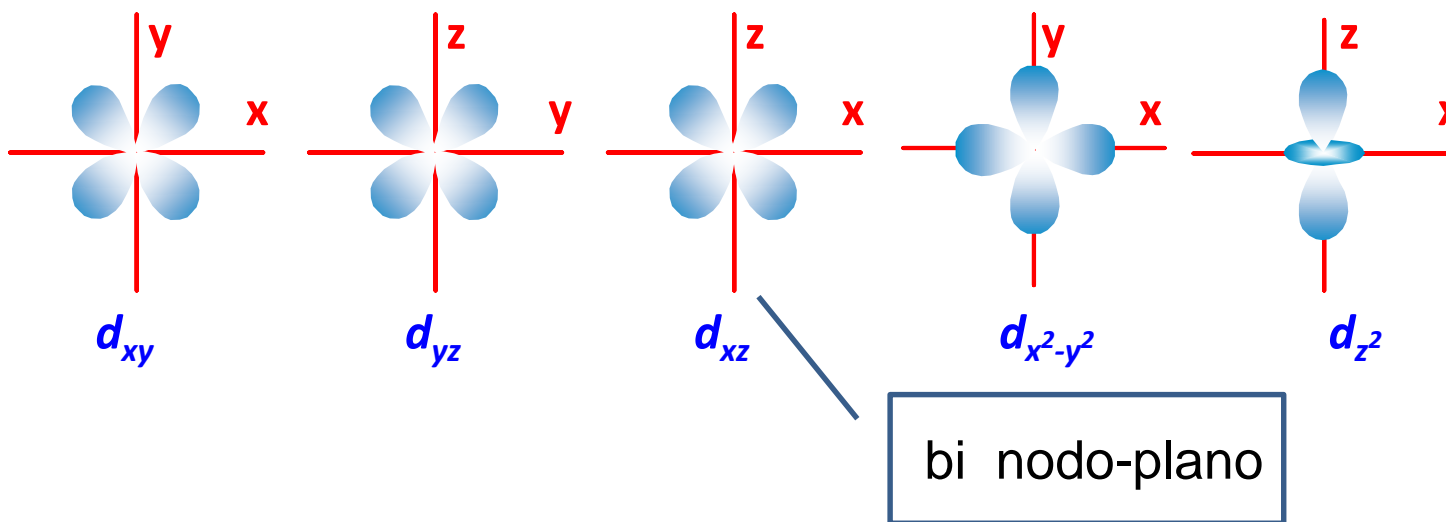
$$p_x = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cos\theta$$
$$p_y = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \sin\theta$$
$$p_z = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$$

- $p_z$  orbitala  $\phi$ -rekiko independentea da. Ondorioz z ardatzean zehar simetria zilindrikoa du.
- $p_x$  eta  $p_y$  orbitalek itxura bera dute baina dagozkien maximoak x eta y ardatzean zehar

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

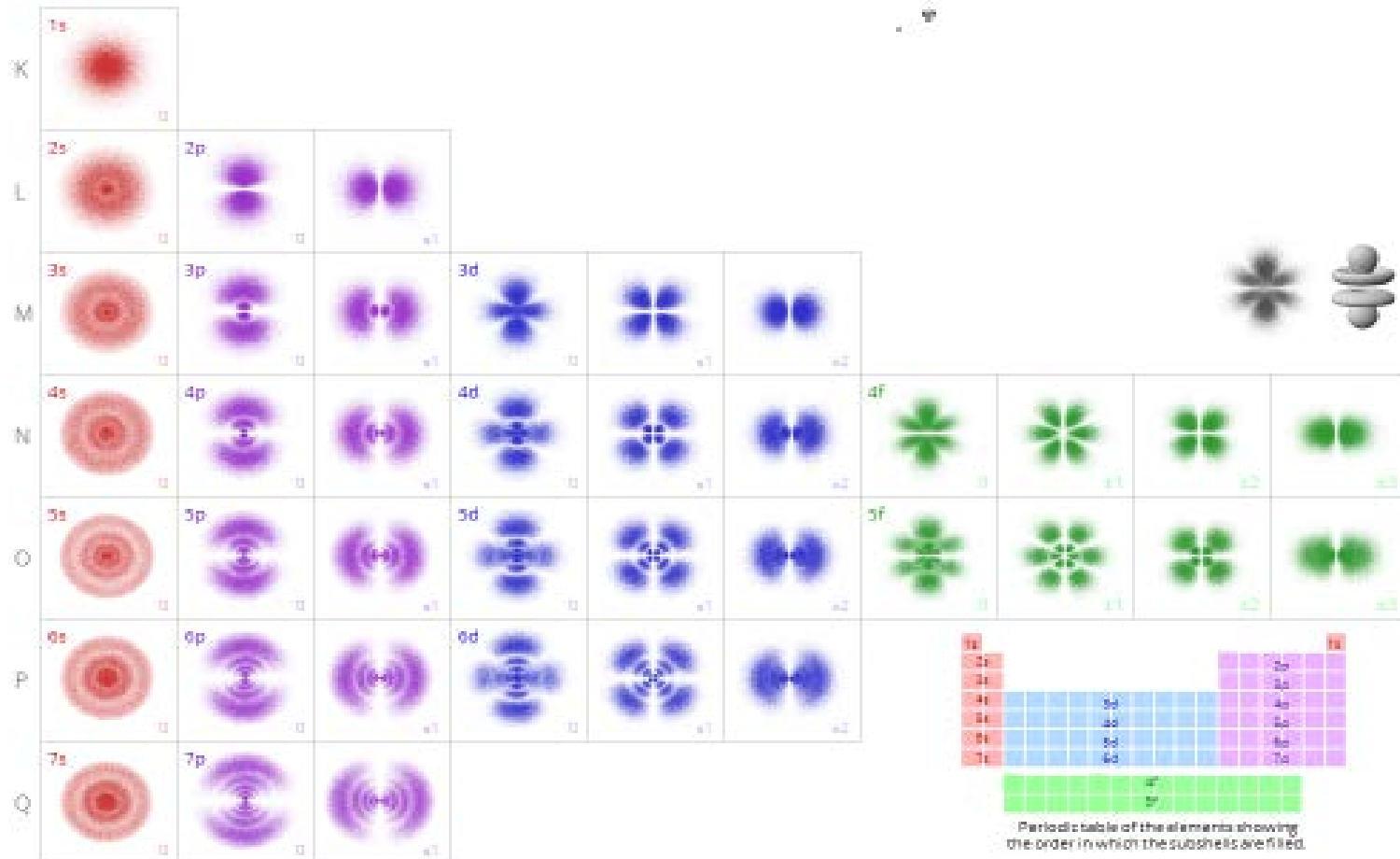
### “d” motako orbitalak

$A^2$ -ren adierazapena konplexuagoa da eta honakoak dira bost “d” orbitalak

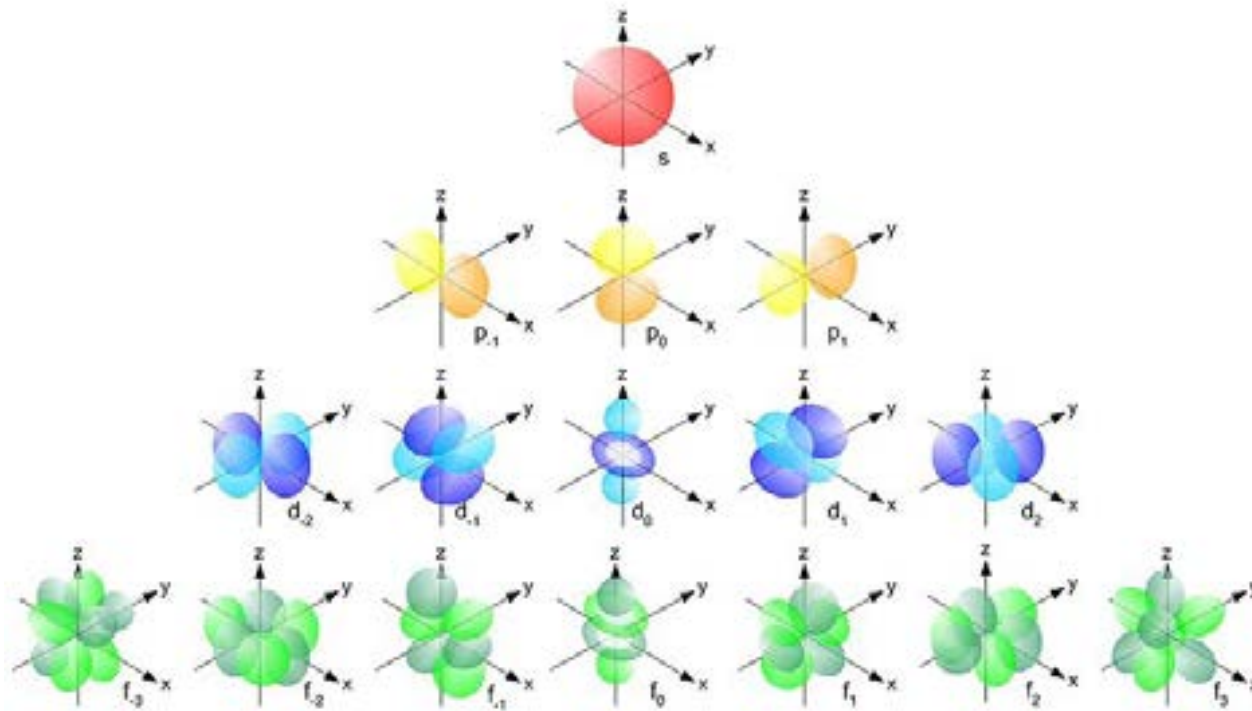


banaketa- angeluarraren funtzioaren adierazpen grafikoa

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



Orbital atomikoak

### ONDORIO INPORTANTEAK

Honek eragina  
izango du atomo  
polielektronikoetan

- . s orbitalak esferikoak dira, beste gainerako guztiak, ordea, ez.
  - . Honek, molekulek ze nolako loturak eratuko dituzten ildoan, izugarrizko garrantzia du
- . Geruza bereko orbitalen konparazioa:
  - . une jakin batean:nukleotik hurbilen aurkitzeko elektroia “ $\ell$ ” txikienekoa da
  - . Batez bestean:nukleotik hurbilen aurkitzeko elektroia “ $\ell$ ” handienekoa da

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### MEKANIKA KLASIKOA

partikula baten **energia zinetikoa**  
 $E_z = 1/2mv^2$  da

$E_z$  **jarraia** da, v abiadurarekiko mendekotasun soila adierazten duela

ibilbidearen edozein puntutan partikula aurkitzeko **probabilitatea bera** da.

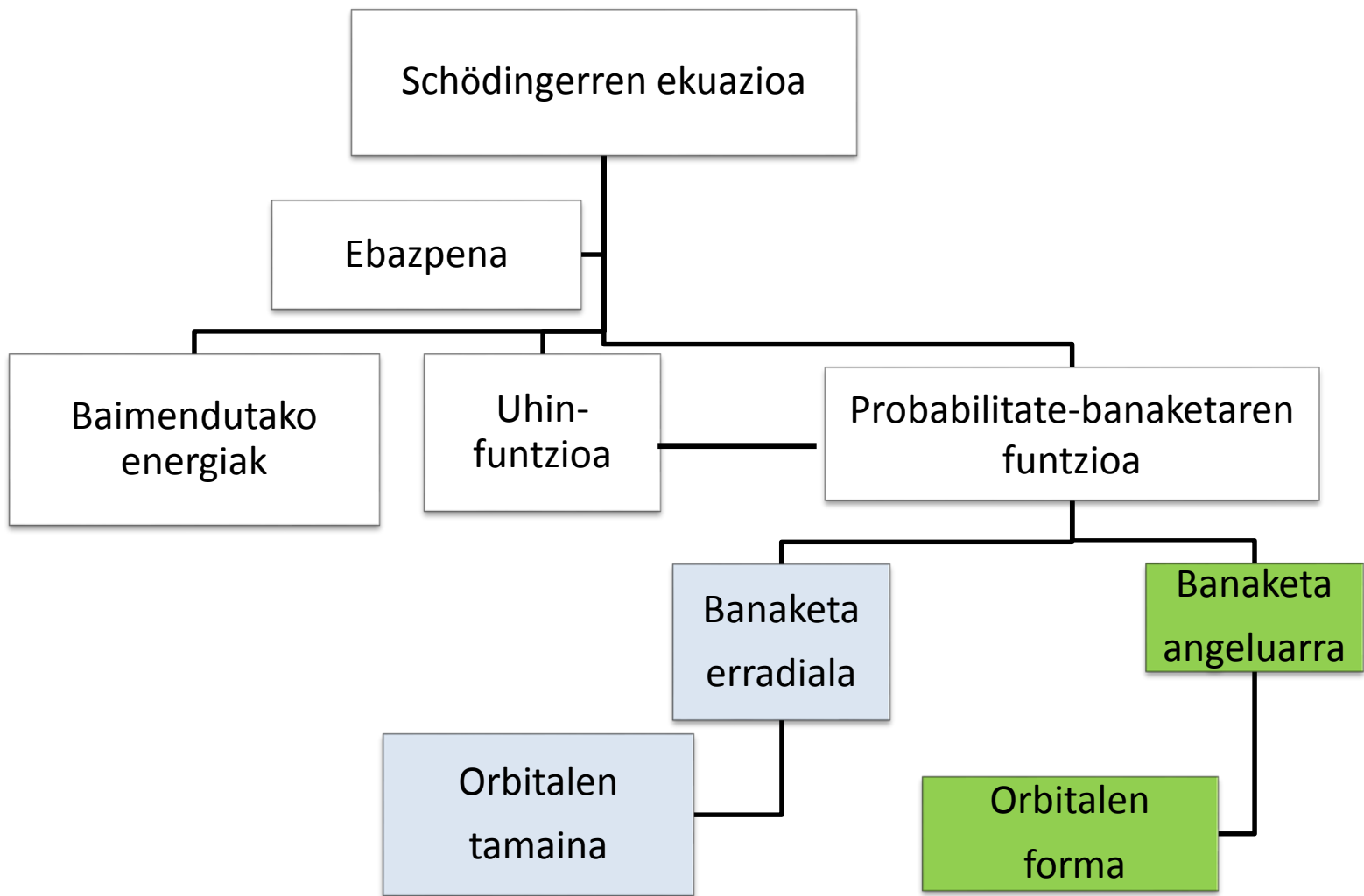
### MEKANIKA KUANTIKOA

n kuantu-zenbakiarekiko mendekotasuna duenez, energia kuantizatua dago

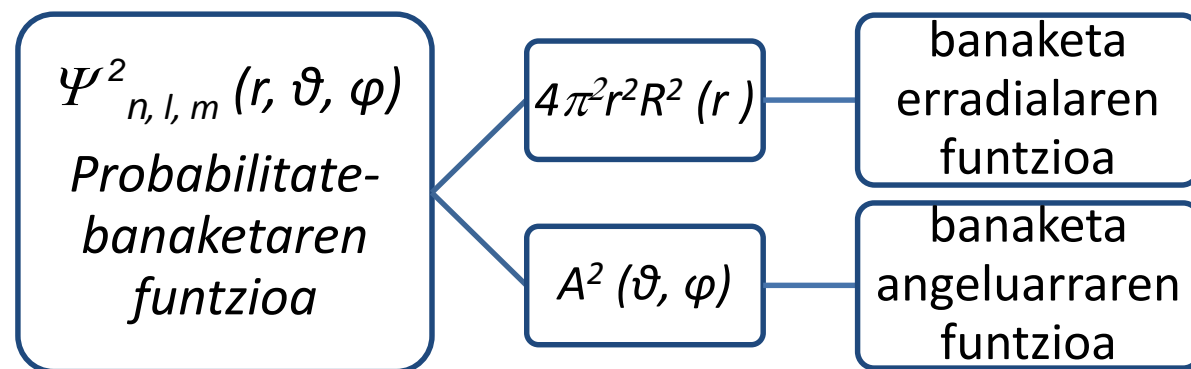
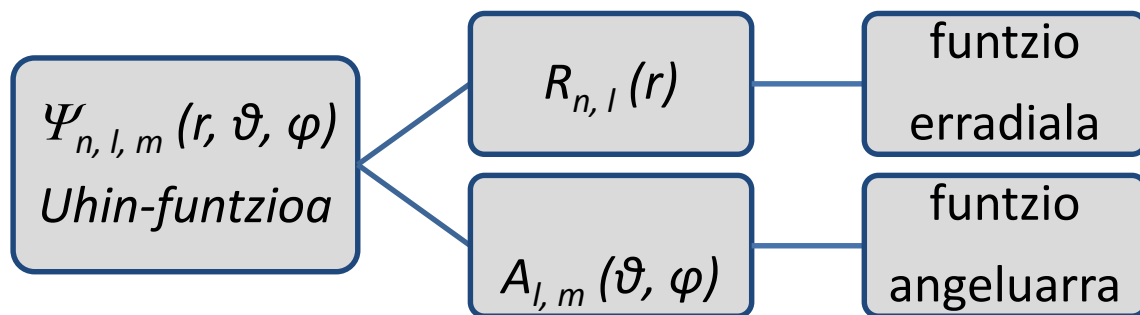
$$E(n) = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

partikula aurkitzeko **probabilitatea** ibilbidean puntuz puntu **aldatuz** doa, posizio jakin batzuetan **maximoa** dela

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA





## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Hitzen glosarioa

- . Zenbaki atomikoa
- . Isotopoa
- . Masa-zenbakia
- . Masa isotopikoa
- . Uhin-funtzioa
- . Kuantu-zenbakia
- . Banaketa erradialaren funtzioa
- . Banaketa angeluarraren funtzioa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.; Química General. Pearson Education, 10<sup>a</sup> Ed., Madrid, (2011)
2. Lothar Beyer. Química Inorgánica. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
3. Shivers & Athkins: Química Inorgánica. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)
4. Chang, R., Goldsby, K. A.:Química;11<sup>a</sup> Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
5. Valenzuela, C.:Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia.Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)



# 5.3. GAIA

## ATOMO POLIELEKTRONIKOAK.

### EGITURA ATOMIKOA

Farmaziako gradua. 1.kurtsoa  
Kimika orokorra eta ez-organikoa

## 5. Gaia. Egitura atomikoa eta taula periodikoa

### INDIZEA

5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak

5.2. Atomo hidrogenoideak. Egitura atomikoa

**5.3. Atomo polielektronikoak. Egitura atomikoa**

5.4. Taula periodikoa

## 5. 3.Gaia. Atomo polielektronikoak.Egitura atomikoa

### INDIZEA

1.Sarrera

2. Hurbilketa orbitalaren metodoa

3. Atomo polielektronikoen energia-mailak

4. Atomo polielektronikoen konfigurazio elektronikoa

## 5.3. GAIA

# ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

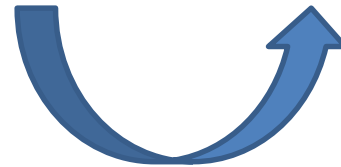
### 5.3. 1. SARRERA

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Aurreko gaietan.....

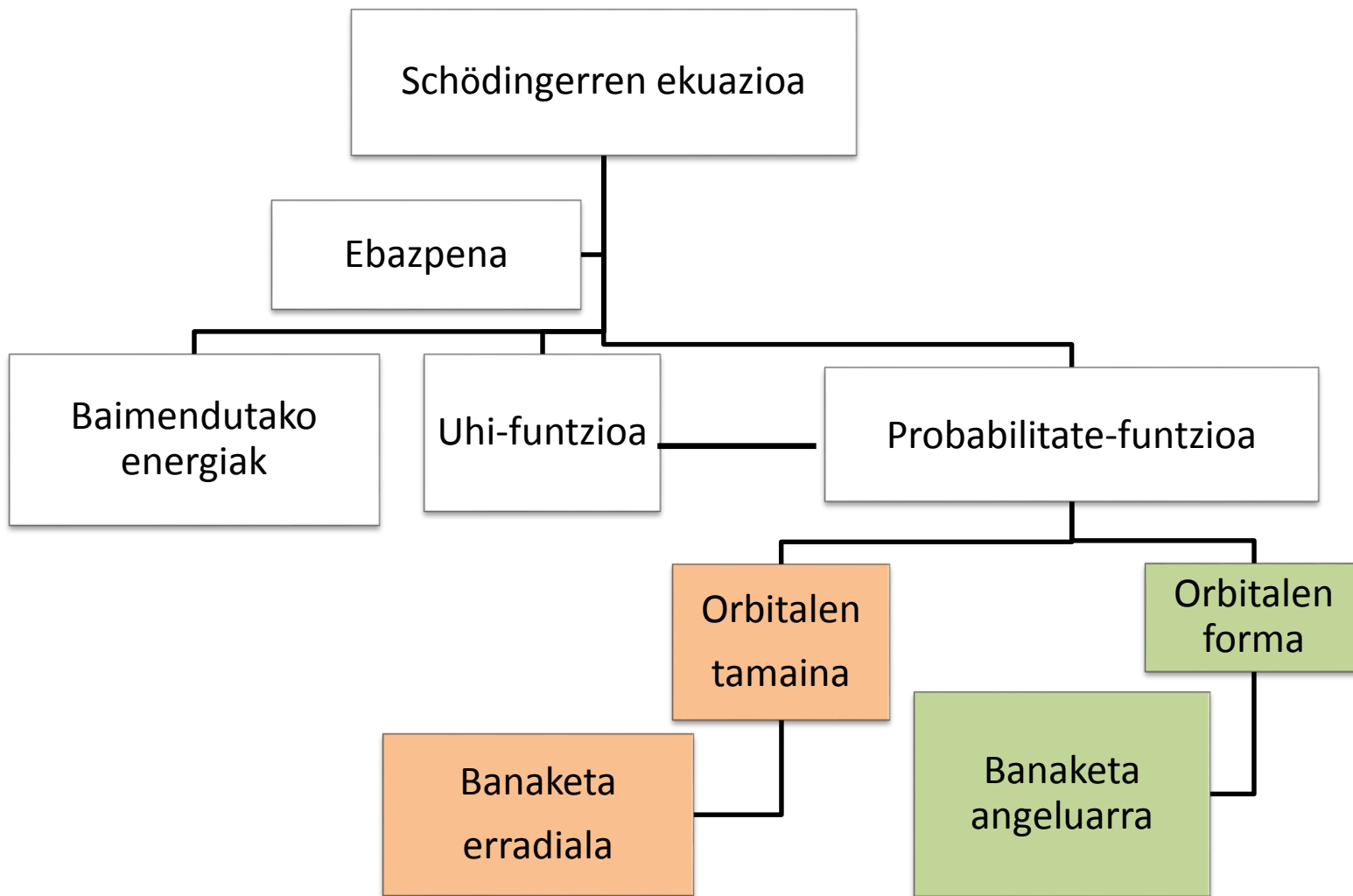
Bohr-Sommerfeld  
Eredu Klasikotik

Schödinger  
Eredu Kuantikora



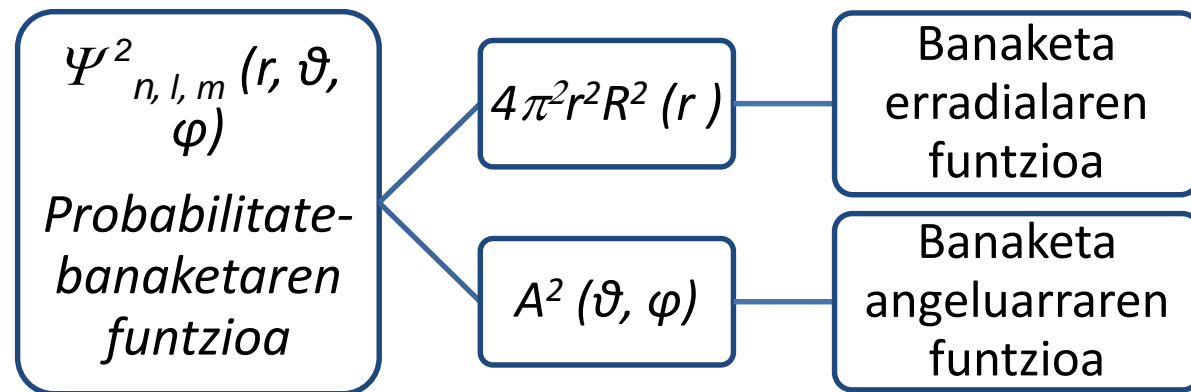
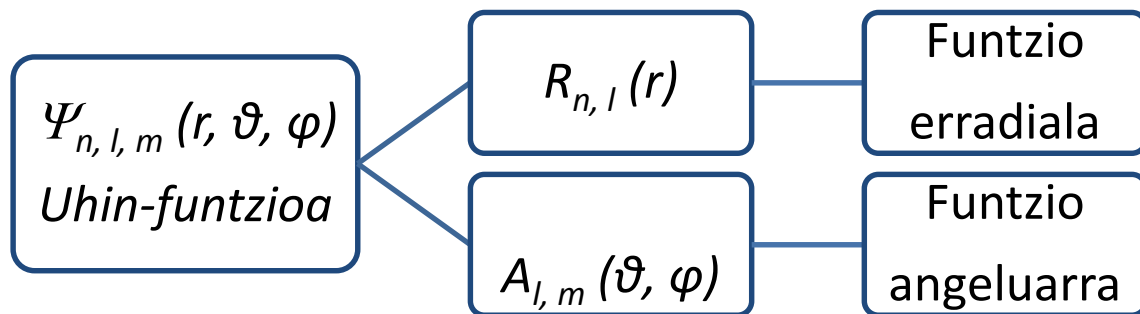
Niels Bohr  
Max Planck  
Albert Einstein  
Louis de Broglie  
Karl Heisenberg  
Ernest Schödinger

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



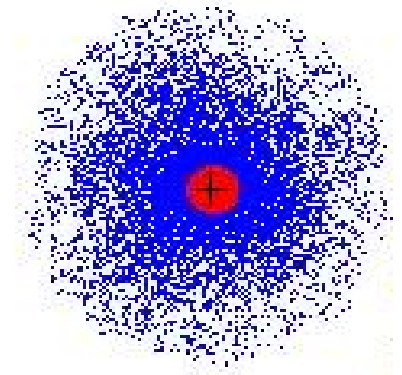


## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- .Orain arte aztertu dira
  - . Mekanika Kuantikoaren hastapenak
  - . Schödingerren ekuazioa
- . Atomo hidrogenoideentzat ebazpena, elektroi bakarra dutenak  
(H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>)
- . Energiaren balore baimenduak
- . Elektroiaren “etxea” ezagutu dugu: orbitala
- . Atomo polielektronikoetan ....?**



5.3. GAIA

ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

5.3. 2. HURBILKETA ORBITALAREN METODOA

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Atomo  
hidrogenoideak

$$\Psi = f_n(r, \theta, \varphi)$$

3 aldagai

Atomo  
polielektronikoak

$$Z\Psi = f_n(r, \theta, \varphi)$$

3Z aldagai

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Egoera berrian....

- . Atal erradialaren eta angeluarraren arteko banaketa suposatzea ezinezkoa da

- . Potentziala,  $V$ , kalkulatzeko bi distantziak derrigorrezkoak dira

- . Nukleoaren eta elektroaren arteko distantzia

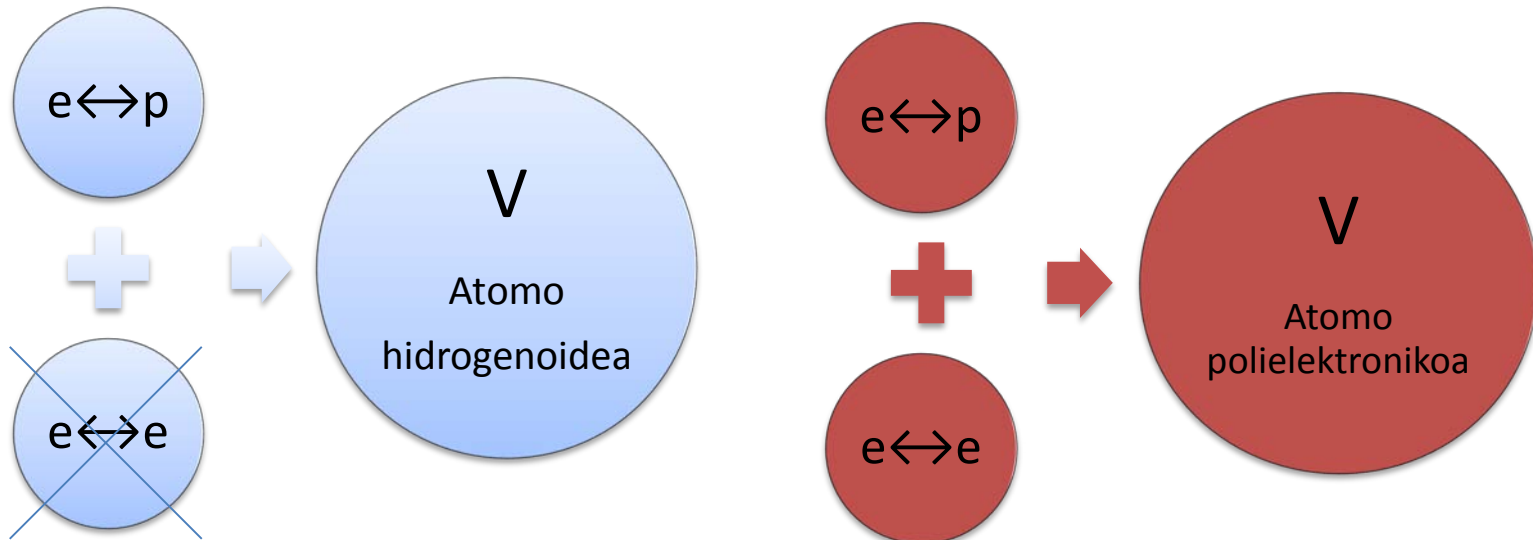
- . Elektroien arteko distantzia



Lehenengo potentziala ez da baliogarria eta hurbilketa batzuk behar dira ekuazioa ebazteko

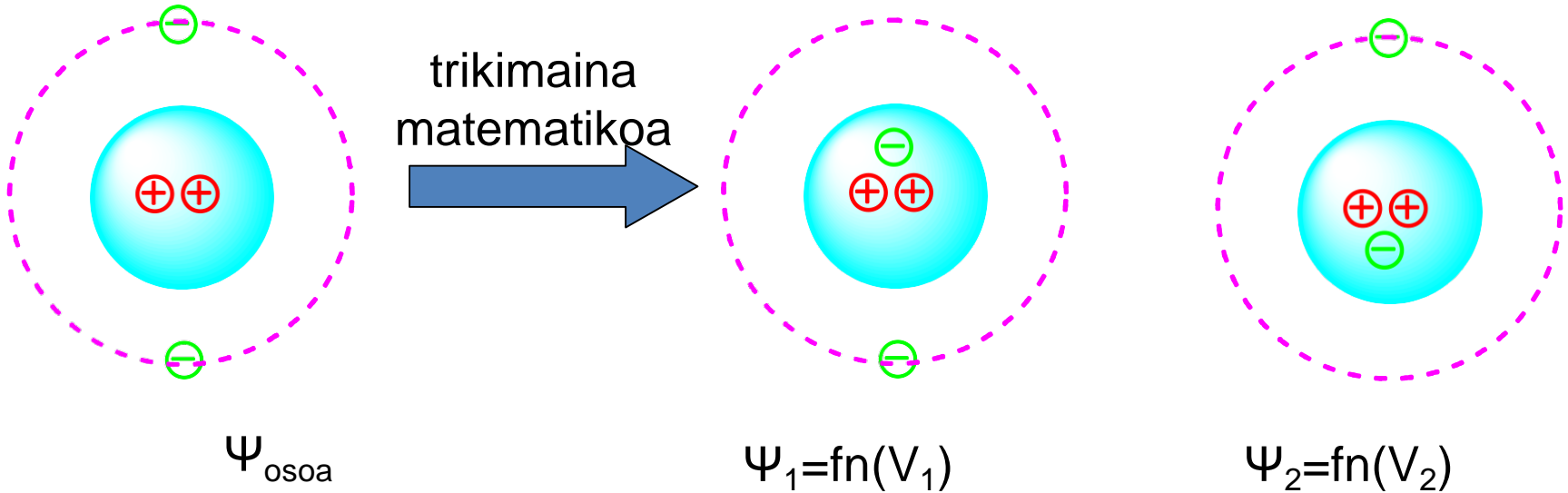
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- . **Arazoak sortzen dira  $V$  zehazteko** eta atomo polielektronikoetan ez da posiblea Schröndigerren ekuazioa ebaztea, ezta atomorik sinpleen kasuan, Helio atomoa
- . Hurbilketa behar dugu



# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

He atomoa



6 aldagai,  $V$  kalkulatzeko  
elektroien arteko  
aldarapena  $\leftarrow \text{---} \rightarrow$  hartu  
behar da kontuan

3 aldagai,  $V$  kalkulatzeko  
elektroien arteko aldarapena **ez**  
da kontuan hartu behar

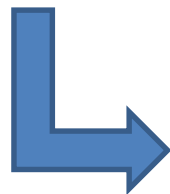
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Eremu Autoosagarriaren metodoa (Hartree).

- . Douglas Hartree-ri zor diogu (1928)
- . Atomo polielektroniko baten Uhin-funtzioa definitzen du “n” funtzio elektroi bakarrekoen biderkadura bezala

$$\psi = \psi (r_1) \psi (r_2) \psi (r_3) \dots \psi (r_n)$$

- . ELEKTROI BAKOITZARI UHIN-FUNTZIO BAT ESLEITEN DIO, KANPOKO ELEKTROI BAKARRA KONTSIDERATUZ ETA GAINERAKOAK NUKLEOAN DAUDELA



*Elektroi bakoitzak atomo hidrogenoideen berberako orbital atomikoa bete duela suposatzen du*



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Eremu Autoosagarriaren metodoa (Hartree)

- . Indar-eremu esferiko eta simetrikotzat jotzen du
- . Potentziala  $V(r)$   $r$ -arekiko menpekoa baina  $\theta$  eta  $\varphi$ -rekiko independientea izango da  $\rightarrow$  A bera da
- . Uhin-funtzio berriak  $\psi_{n,l,m} = R'(r) A_{l,m}(\theta, \varphi)$ , izango du:

$R'(r)$

Hidrogenoaren uhin-funtzio desberdina

$A_{l,m}(\theta, \varphi)$

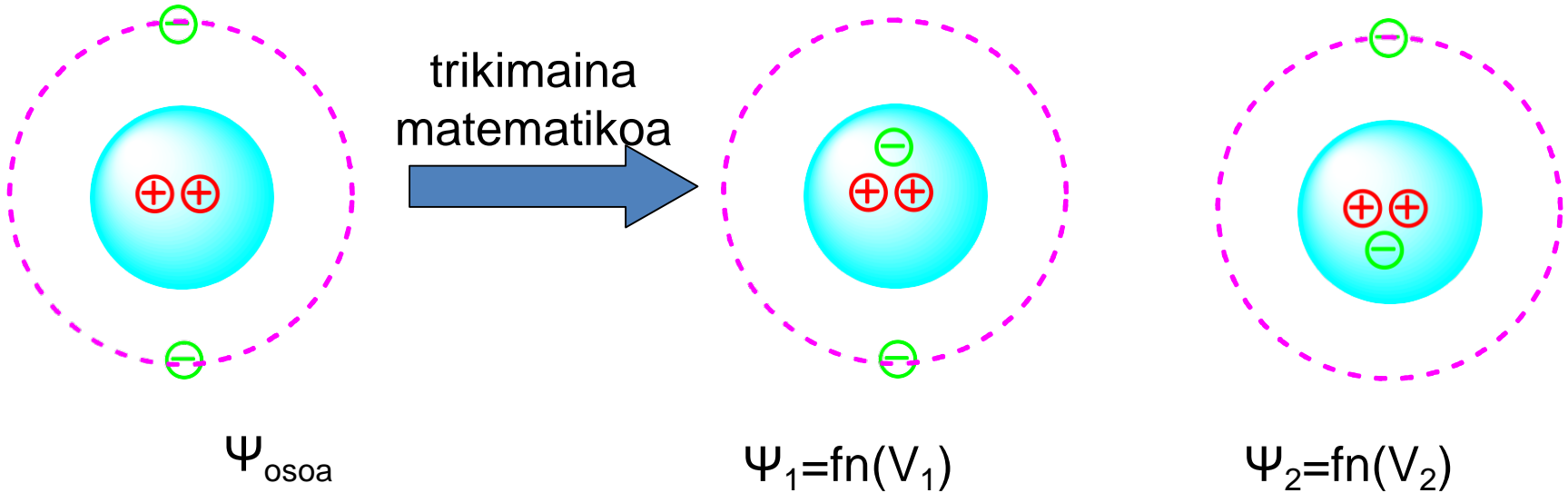
Hidrogenoaren uhin-funtzio berdina



- .  $s, p, d, f$ , orbitalak ez dira aldatzen

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

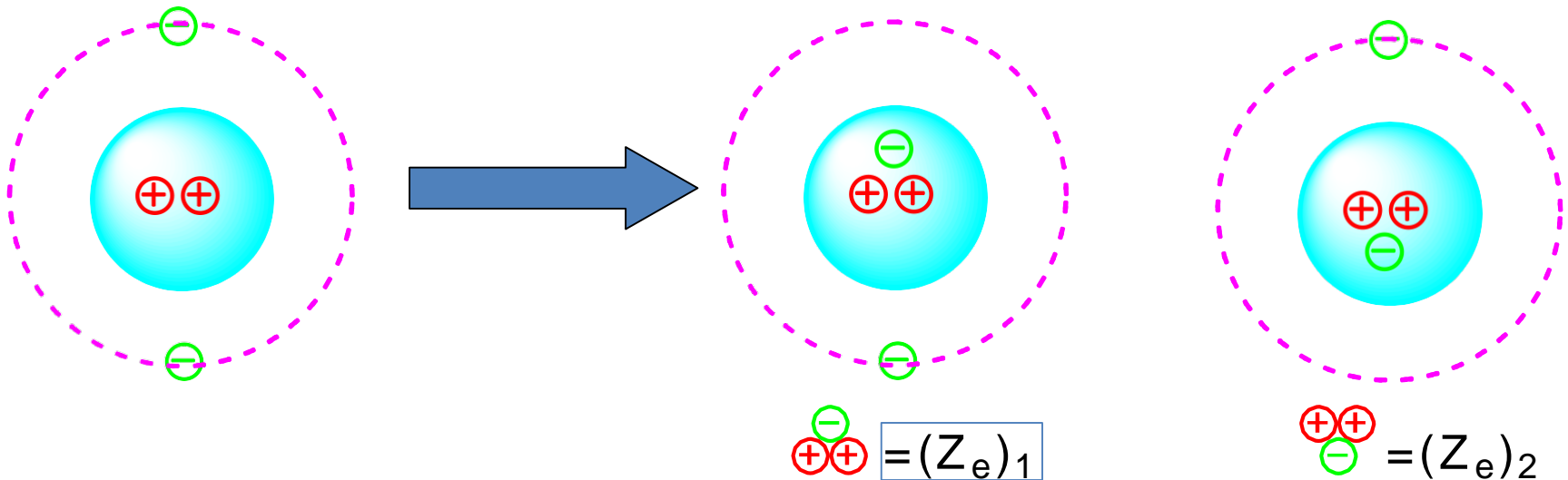
He atomoa



6 aldagai,  $V$  kalkulatzeko  
elektroien arteko  
aldarapena  $\leftarrow \rightarrow$  hartu  
behar da kontuan

3 aldagai,  $V$  kalkulatzeko  
elektroien arteko aldarapena **ez**  
da kontuan hartu behar

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

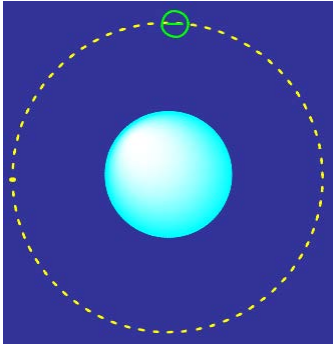


$Z_e$  karga nuklear eraginkorra da, elektroi bakoitzak “sentitzen” duen karga positiboa

$$\Psi_{\text{osoa}} = \Psi_1 \cdot \Psi_2$$

Hurbilketa orbitalaren metodoaren oinarria

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



Elektroi **bakoitzak**  $Z_e$  “karga” positiboak eragindako benetako erakarpena sentitzen du, non  $Z_e$  “karga” duen **Z protoiek** eragindako **erakarpena** eta gainerako **(Z-1) elektroiek** eragindako **aldarapena** kontutan hartuta dauden.

Horrela, atomo polielektroniko baten uhin-funtzioa ( $\psi$ ) elektroien guztien uhin-funtzioen biderkadura da.

$$\Psi_{\text{osoa}} = \Psi_1 \cdot \Psi_2 \cdot \Psi_3 \cdot \Psi_4 \cdot \dots \cdot \Psi_z = \prod_z \Psi(i)$$

Zer esanik ez, hipotesi hau ez dator bat errealitatearekin, elektroiek elkarrekiko **harremanean** baitaude

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

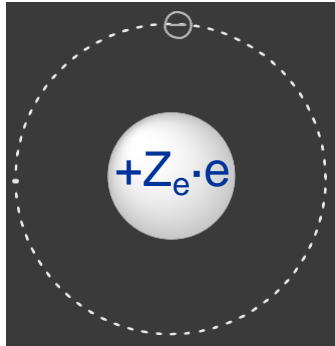
. Esan ahal da....

Zenbait protoik ez dute eragiten elektroiarekiko erakarpén-indarra, beste elektroiak pantailaketa egiten baitute

. Definitzen da:

*KARGA NUKLEAR ERAGINKORRA, NUKLEOAK KANPOKOAGO  
ELEKTROIAREKIKO DUEN ERAKARPEN "ERREALA"*

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_e e \cdot e}{r^2}$$

atomo polielektronikoa

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z e \cdot e}{r^2}$$

atomo hidrogenoideak

- . Hauxe izango da desberdiketa bakarra Schröndingerren ekuazioa ebaztean

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

$$V_{AP} = \text{fn}(r)$$

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

$A(\theta, \varphi)$  funtzio angeluar  
hidrogenoideak **baliagarriak** dira  
atomo polielektronikoetarako

Kalkulatu beharreko bakarrak  
 $R(r)$  funtzio erradialak dira



$$\Psi = \Psi_1 \Psi_2 \Psi_3 \dots = \prod_1^z \Psi_i \quad R = R_1 R_2 R_3 \dots = \prod_1^z R_i$$

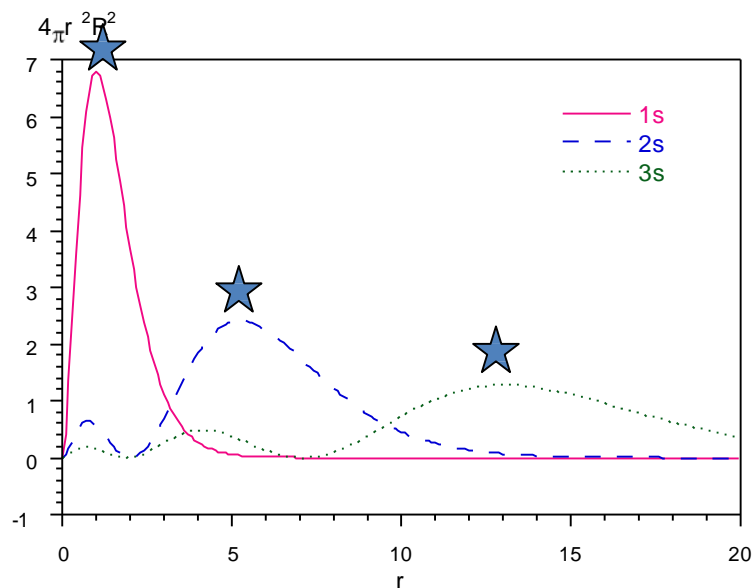


Kalkulatu beharrea

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

$Z_e = Z - \sigma$ , non  $\sigma$  **pantailatze- konstantea** den

Zer da **pantailatzea**?



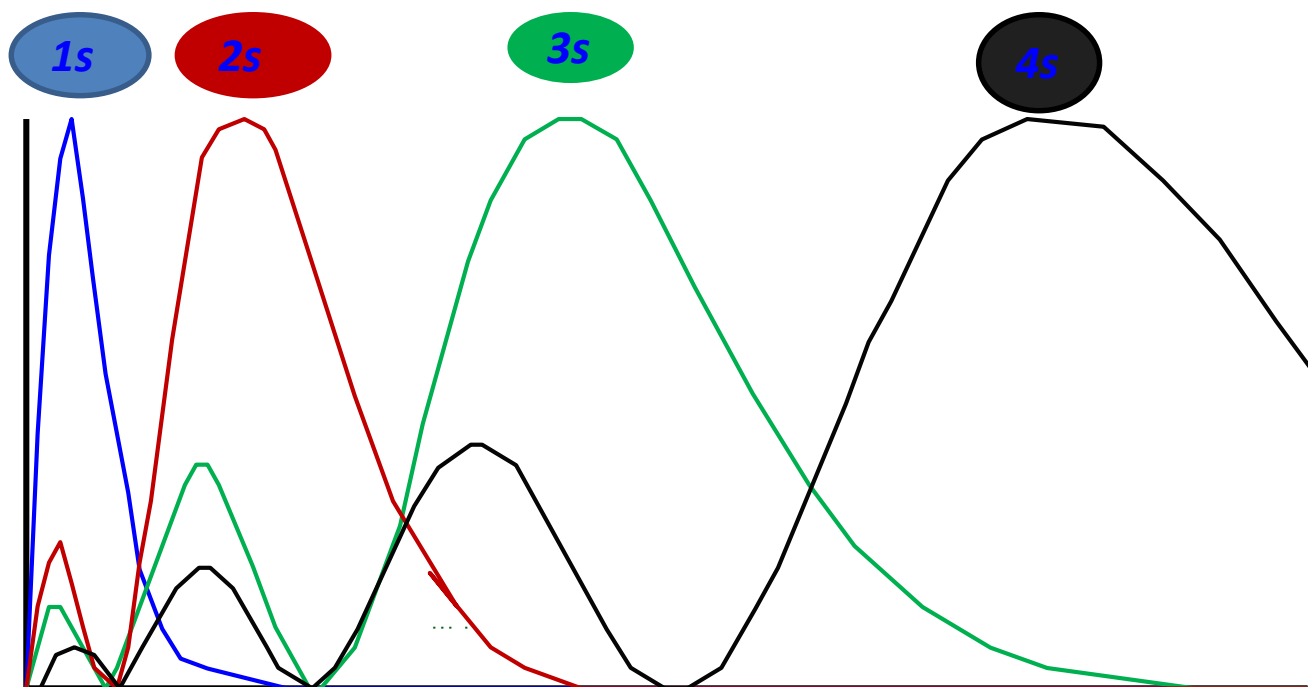
Gogoratzuz....

Batez bestean, 1s orbitaleko elektroia 2s orbitalekoa baino nukleotik hurbilago dago.

Batez bestean, 2s orbitaleko elektroia 3s orbitalekoa baino nukleotik hurbilago dago.



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



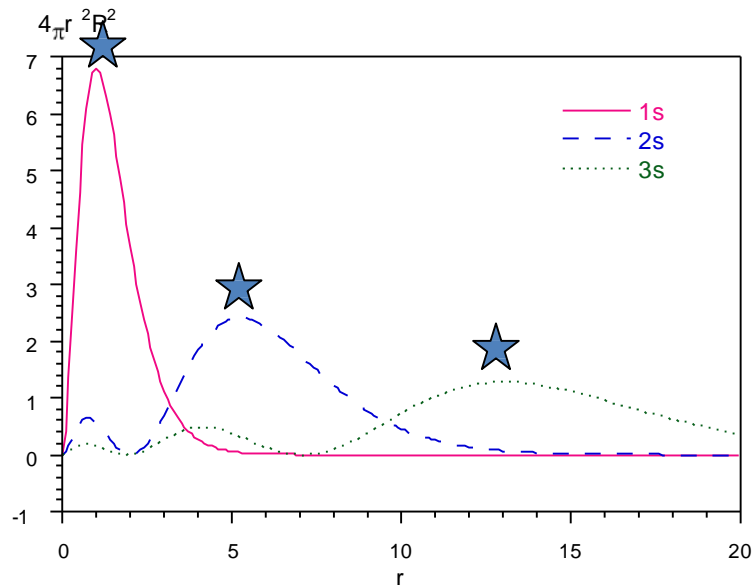
Banaketa-erradiala  $r$ -arekiko

- . Batez bestean, 1s elektroia 2s delakoa nukleotik baino hurbilago dago
- . Gauza bera gertatzen da  $n$  altuagoko  $n$  txikiagorekin konparatzean

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

$Z_e = Z - \sigma$ , non  $\sigma$  **pantailatze- konstantea** den

Zer da **pantailatzea**?

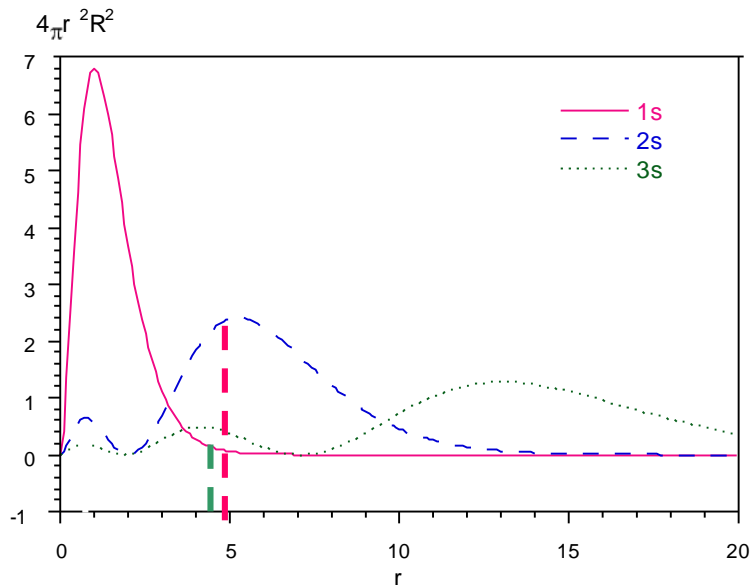


Horren ondorioz, 2s elektroia ezin du “sentitu” nukleoan dagoen karga positiboa osoa. Horixe da, hain zuzen ere, pantailatzea.

1s orbitalak 2s eta 3s orbitalak pantailatzen ditu, eta 2s orbitalak 3s orbitala pantailatzen du.

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

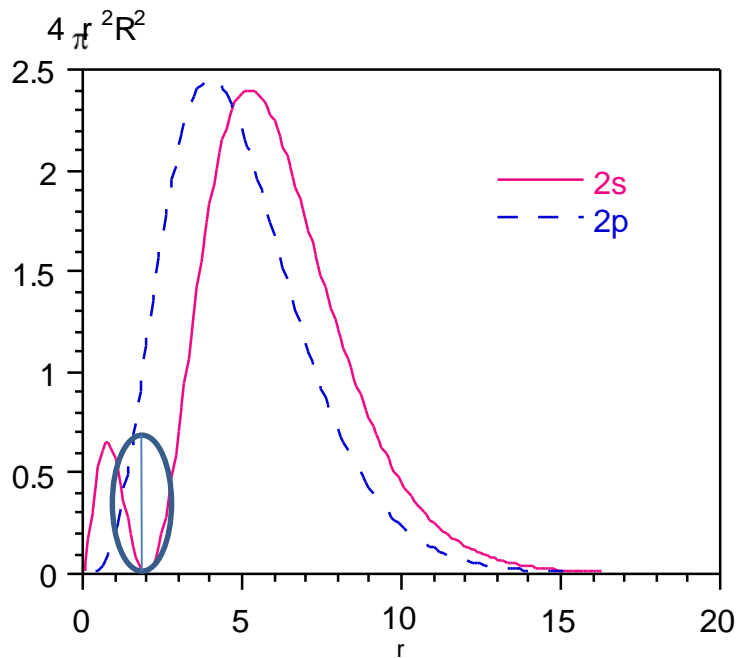
Beste geruza bateko elektroiak BETI kanpokoagoak pantailatzen dituzte?



- . Une jakin batean 2s orbitaleko elektroia 1s orbitalekoa baino nukleotik gertuago egon daitekeenez, 1s elektroia karga 'osoak' ez du pantailatzen 2s elektroia.
- . 1s elektroia karga nuklear eraginkorrean ez da "karga osoaren" baliokoa, txikiagoa baizik.

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Geruza bereko eletroien artean ba al dago pantailatzerik?



2s elektroiak 2p elektroia pantailatzen du, baina eragina ez da karga oso bati dagokiona baizik eta txikiagoa

**barne-elektroiek**  
**kanpokoagoak**  
**pantailatzen dituzte**

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

. Esan ahal da....

Zenbait protoik ez dute eragiten elektroiarekiko erakarpén-indarra, beste elektroiak pantailaketa egiten baitute

. Definitzen dira:

*KARGA NUKLEAR ERAGINKORRA, NUKLEOAK KANPOKOAGO ELEKTROIAREKIKO DUEN ERAKARPEN "ERREALA"*

*PANTAILAKETA: BARRUKO ELEKTROIAGATIK KARGA NUKLEARRAREN MURRIZKETA DA ETA KARGA NUKLEAR ERAGINKORRA SORTARAZTEN DU*

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### AURREKO GRAFIKOEN ONDORIOAK

- . ns elektroi bakoitzak ezin du nukleoak eragiten duen karga positibo osoa nabaritu. Hain zuzen ere, horretan datza pantailaketa
- . Pantailaketa ez da % 100a une zehatz batean 2s orbitalaren elektroia 1s-arena nukleotik baino hurbilago egon baitaiteke
- . Hau da, 1s elektroiak ez dio une guztietan 2s-ri pantailatzen
- . 1s elektroia karga nuklear eraginkorraren ekarpena ez da elektroia oso batena, txikiagoa baizik (He-rako  $Z_e = 1.69$  eta ez 1)
- . Gainera, banaketa erradialaren funtzioak geruza bereko elektroiak aurreko geruzenak baino gutxiago pantailatzen dutela azaltzen du; d edo f orbitalak s eta p orbitalak baino pantailaketa gehiago jasaten dute

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Karga nuklear eraginkorraren kalkulua. Slaterren arauak

- . John C. Slaterrek (1930) hartu zituen Hartreeren funtzio erradialak
- . Kontzeptu berri bat barneratu zuen: karga nuklear eraginkorra:  $Z_e$  edo  $Z^*$
- . Balore berri hauek hasita atomo polielektronikoaren uhin-funtzioa ebatzi du

$$Z_e = Z - \sigma$$

$\sigma$ : **Slaterren** pantailaketa konstantea

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

$Z_e$  -ren kalkuluak:

$[1s^2] [2s^2 2p^6] [3s^2 3p^6] [3d^{10}] [4s^2 4p^6] [4d^{10} 4f^{14}]$

Taldea	n talde bereko elektroiak	(n-1) taldeko elektroiak	(n-2), (n-3..) taldeko elektroia
[1s]	0.30	-	-
[ns,np]	0.35	0.85	1.00
[nd] edo [nf]	0.35	1.00	1.00



## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

Slaterren ondorioaz:

- . **ns** eta **np** orbitalek pantailaketa bera egiten dute
- . **nd** eta **nf** orbitalek pantailaketa bera egiten dute.
- . **nd** eta **nf** orbitalek ns eta np orbitalak baino gehiago pantailatzen dute

Beraz, aurrekoaren arabera bereizten dira **orbital-multzoak** pantailaketari dagokionez

Taldea (x)	[1s <sup>2</sup> ]	[2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> ]	[3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> ]	[3d <sup>10</sup> ]	[4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup> ]	[4d <sup>10</sup> 4f <sup>14</sup> ]
	1.goa	2.goa	3.goa	4.goa	5.goa	6.goa

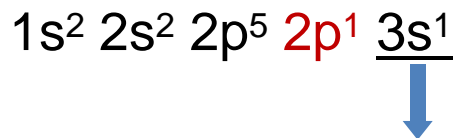
e <sup>-</sup> taldea(x)(orbitala)	(x) talde bereko e <sup>-</sup>	(x-1) taldeko e <sup>-</sup>	(x-2, x-3..) taldeko e <sup>-</sup>
[1s]	0.30	-	-
[ns,np]	0.35	0.85	1.00
[nd] edo [nf]	0.35	1.00	1.00

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Zein da Na atomoaren 2p elektroien baten  $\sigma$  ?



Baina 2p elektroien baten  $\sigma$  kalkulatu behar dugunez honela idatziko dugu konfigurazio elektronikoa, kontsideratzen ari garen elektroia banatzeko:



n altuagoko e- bakoitzaren kontribuzioa=0.....0

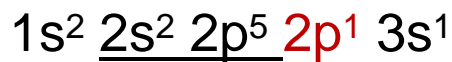
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Zein da Na atomoaren 2p elektroien baten  $\sigma$

$$Z=11 \quad 1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^1$$

2p elektroien baten  $\sigma$  kalkulatu behar dugunez...

Honela idatziko dugu konfigurazio elektronikoa:



n bereko e- bakoitzaren  
kontribuzioa=0.35

$$0 \dots \dots \dots 0$$

$$0.35 \dots \dots 7 \times 0.35 = 2.45$$

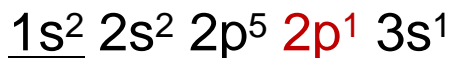
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Zein da Na atomoaren 2p elektroien baten  $\sigma$

$$Z=11 \quad 1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^1$$

2p elektroien baten  $\sigma$  kalkulatu behar dugunez...

Honela idatziko dugu konfigurazio elektronikoa:



(n-1) geruzako e- bakoitzaren  
kontribuzioa=0.85

0.....	0 x 0	= 0
0.35.....	7 x 0.35	= 2.45
0.85	2 x 0.85	= 1.70

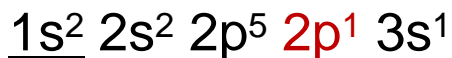
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Zein da Na atomoaren 2p elektroien baten  $\sigma$

$$Z=11 \quad 1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^1$$

2p elektroien baten  $\sigma$  kalkulatu behar dugunez...

Honela idatziko dugu konfigurazio elektronikoa:



n txikiagoko gainontzeko elektroirik ez dago

0.....	0 x 0	= 0
0.35.....	7 x 0.35	= 2.45
0.85	2 x 0.85	= 1.70

---

$$\sigma = 4.15$$

Beraz, Na atomoan  $Z_e(2p) = Z - \sigma = 11 - 4.15 = 6.85$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### $Z_e$ karga nuklear eraginkorra

Balio hauek metodo modernoago baten bidez lortuta daude

atomoa	Z	1s	2s	2p
Li	3	2.69	1.28	
Be	4	3.68	1.91	
B	5	4.68	2.58	2.42
C	6	5.67	3.22	3.14
N	7	6.66	3.85	3.83
O	8	7.66	4.49	4.45
F	9	8.65	5.13	5.10
Ne	10	9.64	5.76	5.76

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### $Z_e$ karga nuklear eraginkorra

Slaterren metodoaren bidez kalkulaturakoa  $Z_e=6.85$  da

at.	Z	1s	2s	2p	3s	3p
Na	11	10.63	6.57	6.80	2.51	
Mg	12	11.61	7.39	7.83	3.31	
Al	13	12.59	8.21	8.96	4.12	4.07
Si	14	13.57	9.02	9.94	4.90	4.29
P	15	14.56	9.82	10.96	5.64	4.89
S	16	15.54	10.63	11.98	6.37	5.48
Cl	17	16.52	11.43	12.99	7.07	6.12
Ar	18	17.51	12.23	14.01	7.76	6.76

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- .Slaterrek atomoaren kanpokoago elektroien propietateak justifikatzen ditu
- . Emaizak  $n$  handitzen den ahala zehaztasuna galtzen dute
- . Egun  $Z_e$ -ren baloreak metodo modernoagoen bidez kalkulatu dira, potentzia handiko ordenagailuaren laguntzaz



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### ONDORIOZ

- . Barne-elektroiek kanpoko balentzia-elektroiak (kanpo-elektroiak) pantailatzen dituzte
- . Atomo astun baten elektroia bat atomo arin baten elektroia-mota bera baino pantailatuago dago
- . Pantailaketa ez da % 100a
- . Ezin da esan protoi bat erabat "ezabatuta" dagoela elektroia-gatik
- . Pantailaketa desberdina da elektroia baldin badago s/p edo d/f orbital batean

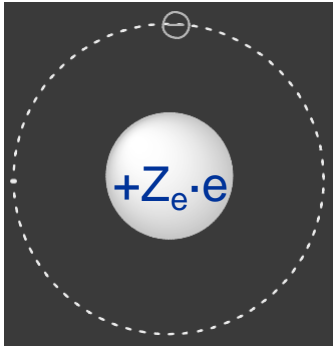
## 5.3. GAIA

# ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

## 5.3. 3. ATOMO POLIELEKTRONIKOEN ENERGIA-MAILAK

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Atomo polielektronikoen energia-mailak



$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_e e \cdot e}{r^2}$$



$$E = -R \frac{Z_e^2}{n^2}$$

energia baimendua  
atomo polielektronikoak

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e \cdot e}{r^2}$$




$$E = -R \frac{Z^2}{n^2}$$

energia baimendua  
atomo hidrogenoideak

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

atomo polielektronikoak


$$E = -R \frac{Z_e^2}{n^2}$$

$Z_e$  fn(n,l)   $E$  fn(n,l)

n eta l bereko egoerak  
degeneratuak dira

atomo hidrogenoideak

$$E = -R \frac{Z^2}{n^2}$$

Z fn (n)   $E$  fn(n)

n bereko egoerak  
degeneratuak dira

**Degenerazioa:** kuantu-mailetako energiaren berdinketa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

E baimendua H atomoan

$$E = -R \frac{Z^2}{n^2}$$

n=1 egoera ez dago degeneratua (1s)

n=2 egoera 4 aldiz degeneratua dago

$2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$

E baimendua AP-etan

$$E = -R \frac{Z_e^2}{n^2}$$

n=1 egoera ez dago degeneratua (1s)

n=2, l=0 egoera ez dago degeneratua (2s)

n=2, l=1 egoera 3 aldiz degeneratua dago  
 $2p_x, 2p_y, 2p_z$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Adierazi hurrengo orbitalak degeneratuak diren edo ez

BAI	EZ	H atomoa , $2s$ , $2p_x$ , $2p_y$ , $2p_z$
BAI	EZ	Li atomoa , $2s$ , $2p_x$ , $2p_y$ , $2p_z$
BAI	EZ	H atomoa, $1s$ , $2s$ , $3s$
BAI	EZ	Al atomoa , $3s$ , $3p_x$ , $3p_y$ , $3p_z$
BAI	EZ	Fe atomoa, $3p_x$ , $3p_y$ , $3p_z$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Adierazi hurrengo orbitalak degeneratuak diren edo ez

BAI	EZ	H atomoa , $2s$ , $2p_x$ , $2p_y$ , $2p_z$
BAI	EZ	Li atomoa , $2s$ , $2p_x$ , $2p_y$ , $2p_z$
BAI	EZ	H atomoa, $1s$ , $2s$ , $3s$
BAI	EZ	Al atomoa , $3s$ , $3p_x$ , $3p_y$ , $3p_z$
BAI	EZ	Fe atomoa, $3p_x$ , $3p_y$ , $3p_z$

5.3. GAIA

ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

5.3. 4. ATOMO POLIELEKTRONIKOEN  
KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOAK



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

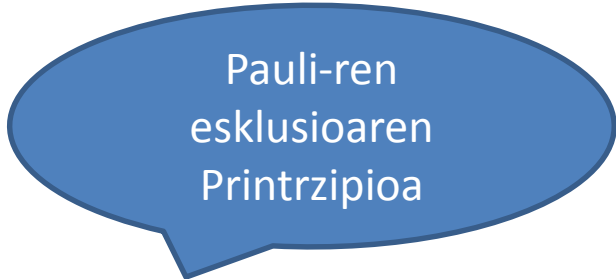
Energia-mailak kalkulatuta nola determinatu  
konfigurazio elektronikoa?

**'building-up'-aren  
printzipioa**  
(ingelesez) edo eta  
**Aufbau-ren printzipio**  
(alemanez)

1. Betetzeko ordena finkatzen
2. Egoera orbital bakoitzean koka daitezke elektroi-kopurua ezagutuz
3. Orbital degeneratuen konfigurazio elektronikoa ezagutzen

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Energia-mailak kalkulatuta nola determinatu atomoen oinarrizko konfigurazio elektronikoa?



Pauli-ren  
esklusioaren  
Printzipioa

1. Betetzeko ordena finkatzen
2. Egoera orbital bakoitzean koka daitezke elektroi-kopurua ezagutuz
3. Orbital degeneratuen konfigurazio elektronikoa ezagutzen

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Energia-mailak kalkulatuta nola determinatu atomoen oinarrizko konfigurazio elektronikoa?

1. Betetzeko ordena finkatzen
2. Egoera orbital bakoitzean koka daitezke elektroi-kopurua ezagutuz
3. Orbital degeneratuen konfigurazio elektronikoa ezagutzen



Hund-en araua

### Aufbau-ren edo Building-up'-aren printzipioa

- . ***Atomoaren oinarrizko egoera ustezkoen artean energia txikiagokoa da***
- . Gainezko egoerei *kitzikatuak* deritze
- . Konfigurazio elektroniko egonkorrean, elektroiak hutsik dauden energi maila baxuenetan kokatuta daude
- . Beraz, energi mailak behetik gora daude beteta

### Orbitalen betetzeko ordena

- Hidrogenoa:  $n$  kuantu-zenbakiaren balore txikienatik hasita
- Polielektronikoak:  $n+1$  gehiaketaren balore txikienatik hasita

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Orbitalen betetzeko ordena

- Hidrogenoa:  $n$  kuantu-zenbakiaren balore txikiena hasita
- Polielektronikoak:  $n+l$  gehiaketaren balore txikiena hasita

	$n$	$l$	$n+l$
H [≡] $1s^1$	1	0	1
He [≡] $1s^2$	1	0	1
Li [≡] $1s^2 2s^1$	2	0	2
Be [≡] $1s^2 2s^2$	2	0	2

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Orbitalen betetzeko ordena

- Hidrogenoa:  $n$  kuantu-zenbakiaren balore txikiena hasita
- Polielektronikoak:  $n+l$  gehiaketaren balore txikiena hasita

B	$[\equiv] 1s^2 2s^2 2p_x^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^1$	$n$	$l$	$n+l$
			2	1	3
C	$[\equiv] 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^2$	2	1	3
N	$[\equiv] 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^3$	2	1	3
O	$[\equiv] 1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^4$	2	1	3
F	$[\equiv] 1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$	2	1	3
Ne	$[\equiv] 1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	2	1	3

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Na [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$		3	0	3
Mg [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$		3	0	3
Al [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	3	1	4
Si [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^1 3p_y^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	3	1	4
P [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	3	1	4
S [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	3	1	4
Cl [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	3	1	4
Ar [≡]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^2$	$\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	3	1	4

Hona arte ordena geruzarekin batera doa

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Hemendik aurrera:

	$n$	$l$	$n + l$
$3d:$	3	2	5
$4s:$	4	0	4
$4p:$	4	1	5



	$n$	$l$	$n + l$
K $[≡] 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$	4	0	4
Ca $[≡] 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$	4	0	4
Sc $[≡] 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$	3	2	5



# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Atomo polielektronikoetan orbitalen egonkortasunaren ordena  $n+l$  balore berdinak energia bera daukate:  $(n+l) \uparrow \rightarrow \text{energia} \uparrow$

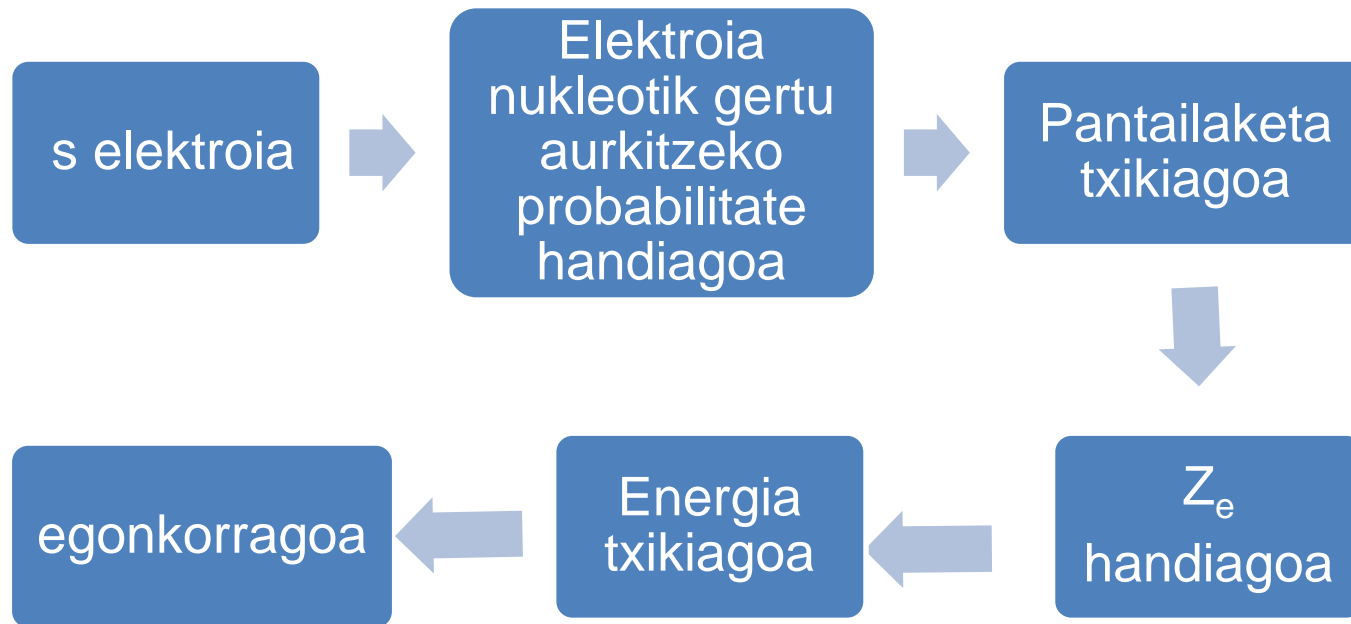
$l$	0	1	2	3	4
$n$					
1	1s				
2	2s	2p			
3	3s	3p	3d		
4	4s	4p	4d	4f	
5	5s	5p	5d	5f	5g
6	6s	6p	6d	6f	6g
7	7s	7p	7d	7f	7g

1s	$(n+l)=(1+0)=1$
2s	$(n+l)=(2+0)=2$
2p	$(n+l)=(2+1)=3$
3s	$(n+l)=(3+0)=3$
3p	$(n+l)=(3+1)=4$
4s	$(n+l)=(4+0)=4$ 
3d	$(n+l)=(3+2)=5$
4p	$(n+l)=(4+1)=5$
5s	$(n+l)=(5+0)=5$ 
4d	$(n+l)=(4+2)=6$
5p	$(n+l)=(5+1)=6$
6s	$(n+l)=(6+0)=6$
4f	$(n+l)=(4+3)=7$
5d	$(n+l)=(5+2)=7$
6p	$(n+l)=(6+1)=7$

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Betetzearen orden hau, s, p eta d orbitalek duten sarkotasun ezberdinaren ondorioa da

$$s > p > d$$



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Pauli-ren esklusioaren printzipioa

*Kuantu-zenbaki berberetako bi elektroik ezin daitezke egon atomo polielektroniko batean*



**egoera orbital bakoitzean [(n, l, m<sub>l</sub>) hirukote bera duen orbital batean] bi elektroik egon daitezke: s=+1/2 eta s=-1/2**

orbital bakoitzean **2** parekatutako elektroik (↑↓) egon daitezke

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Hund-en araua

- . ***Orbital endekatuetan elektroiei bat baino gehiago badaude,  $m_l$  egoera orbital desberdinetan kokatzen dira***



- . Elektroiei ez dira parekatzen orbital guztiak erdibeteta egon arte
- . Nahiago dute parekatu gabe egotea
- . Elektroiei .....

gu geuk autobusean bezala jokatzeko dute

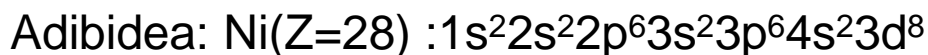
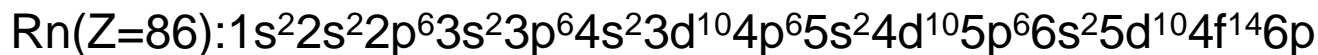
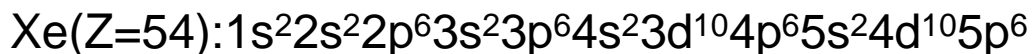
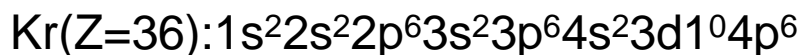
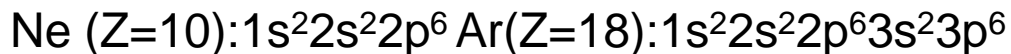
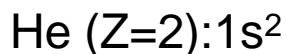
<https://www.youtube.com/watch?v=2yFff7yarqM> (en los abismos del átomo) oso interesgarria egoera kuantikoak ulertzeko eta eredu mekanokuantikoa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1) Konfigurazio elektronikoa “Kernel” geruzetan adierazita



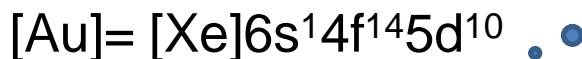
2) Gas geldoen bidez adierazitako konfigurazio elektronikoa



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Aurreko arauak aplikatzen...

...baina benetakoakl



Zergatik?

*Oinarrizko konfigurazio elektronikoak zehazteko orbitalen energiaz aparte elektroien arteko aldarapenak eta erdibetetzearen egonkortasuna kontsideratu behar da*

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### LABURPENA

- . Schödingerren ekuazioa bakarriz atomo hidrogenoideetarako ebazgarria da
- . Hurbilketen laguntzaz atomo polielektronikoetarako erabilgarria izatea lortu da
- . Horrek eramaten gaitu, karga nuklear eraginkorraren kontzeptua definitzera
- . Honek elektroik kanpokoek jasaten duten pantailaketa kontuan hartzen du, banaketa erradialaren grafikoetan euskarria izanik
- . Ondorio hauek direla eta orbitalen energia determinatzen dira
- . Energia-maila hauek konfigurazio elektronikoak determinatzen dute

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

Slaterren ondorioaz:

- . **ns** eta **np** orbitalek pantailaketa bera egiten dute
- . **nd** eta **nf** orbitalek pantailaketa bera egiten dute.
- . **nd** eta **nf** orbitalek ns eta np orbitalak baino gehiago pantailatzen dute

Beraz, aurrekoaren arabera bereizten dira **orbital-multzoak** pantailaketari dagokionez

Taldea (x)	[1s <sup>2</sup> ]	[2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> ]	[3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> ]	[3d <sup>10</sup> ]	[4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup> ]	[4d <sup>10</sup> 4f <sup>14</sup> ]
	1.goa	2.goa	3.goa	4.goa	5.goa	6.goa

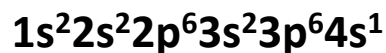
e <sup>-</sup> taldea(x)(orbitala)	(x) talde bereko e <sup>-</sup>	(x-1) taldeko e <sup>-</sup>	(x-2, x-3..) taldeko e <sup>-</sup>
[1s]	0.30	-	-
[ns,np]	0.35	0.85	1.00
[nd] edo [nf]	0.35	1.00	1.00



## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

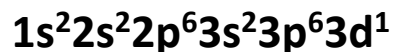
1. Egiaztatu K atomoarentzat honako konfigurazio elektroniko hau energiari dagokionez egonkorrena dela :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$   
Zein da atomo honetarako kontsidera daiteke beste konfigurazio elektronikoa?

$[1s][2s,2p][3s,3p][3d][4s,4p][4d][4f][5s,5p]$



$$Z_e = Z - s$$

$$= 19 - [(8 \times 0.85) + (10 \times 1.00)] = 2.20$$



$$Z_e = Z - s$$

$$= 19 - (18 \times 1.00) = 1.00$$

Azken elektroia 4s orbitalean kokatzen bada  $Z_e$  handiagoa da, energia txikiagoa eta egonkortasun handiagoa.

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

2. Kalkulatu  $Z_e$ -ren balioa 4s, 3d, 3s, 3p, 2s, 2p eta 1s orbitaletan dauden elektroietarako, burdina atomoan ( $Z = 26$ )

Burdina ( $Z = 26$ ) :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

$$4s: \quad \sigma: 0.35 \times 1 + 0.85 \times 6 + 1.00 \times 18 = 23.45 \Rightarrow$$

$$Z_e(4s) = 2.55$$

$$3d: \quad \sigma: 0.35 \times 5 + 1.00 \times 18 = 19.75 \Rightarrow$$

$$Z_e(3d) = 6.25$$

$$3s, 3p: \quad \sigma: 0.35 \times 7 + 0.85 \times 8 + 1.00 \times 2 = 11.25 \Rightarrow$$

$$Z_e(3s, 3p) = 14.75$$

$$2s, 2p: \quad \sigma: 0.35 \times 7 + 0.85 \times 2 = 4.15 \Rightarrow$$

$$Z_e(2s, 2p) = 21.85$$

$$1s: \quad \sigma: 0.30 \times 1 = 0.30 \Rightarrow$$

$$Z_e(1s) = 25.70$$

[1s<sup>2</sup>] [2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup>] [3s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup>] [3d<sup>10</sup>] [4s<sup>2</sup> 4p<sup>6</sup>] [4d<sup>10</sup> 4f<sup>14</sup>]

Taldea (x)    1.goa    2.goa    3.goa    4.goa    5.goa    6.goa

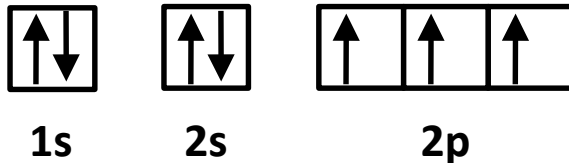
e <sup>-</sup> taldea(x)(orbitala)	(x) talde bereko e <sup>-</sup>	(x-1) taldeko e <sup>-</sup>	(x-2, x-3..) taldeko e <sup>-</sup>
[1s]	0.30	-	-
[ns,np]	0.35	0.85	1.00
[nd] edo [nf]	0.35	1.00	1.00

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

3. Hurrengo atomoetako oinarrizko K. E. idatzi:

- Nitrogenoa
- Argona
- Magnesioa
- Burdin(II) katioia
- Burdin(III) katioia

**Nitrogenoa(Z=7):**  $1s^2 2s^2 2p^3$



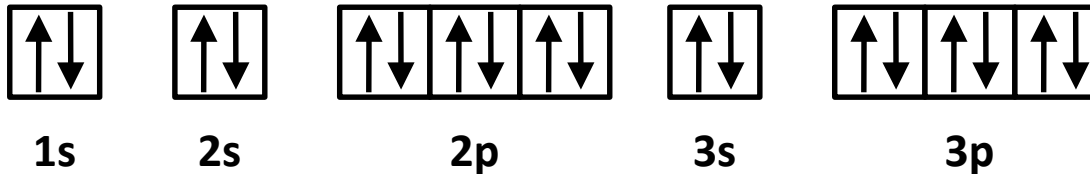
*Nitrogenoak 3 elektroi parekatu gabe ditu : diamagnetikoa da*

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

3. Hurrengo atomoetako oinarrizko K. E. idatzi:

- Nitrogenoa
- Argona
- Magnesioa
- Burdin(II) katioia
- Burdin(III) katioia

Argona (Z=18):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$



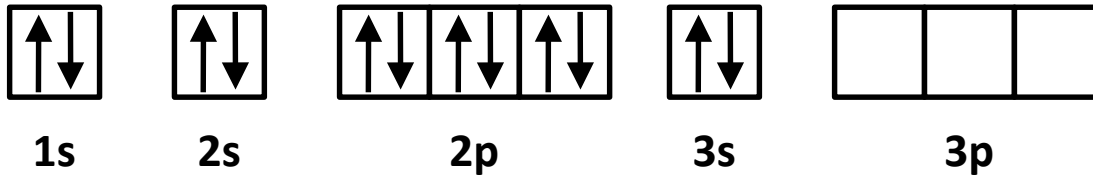
*Argonak ez ditu elektroirik parekaturik : diamagnetikoa da*

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

3. Hurrengo atomoetako oinarrizko K. E. idatzi:

- Nitrogenoa
- Argona
- Magnesioa
- Burdin(II) katioia
- Burdin(III) katioia

**Magnesioa (Z=12):**  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$



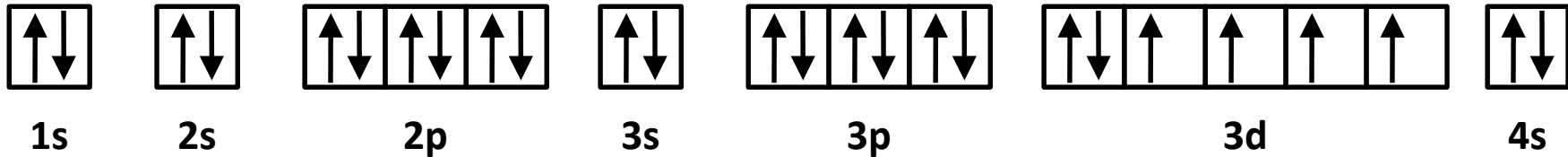
*Magnesioak ez ditu elektroirik parekaturik : diamagnetikoa da*

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

3. Hurrengo atomoetako oinarrizko K. E. idatzi:

- Nitrogenoa
- Argona
- Magnesioa
- Burdin(II) katioia
- Burdin(III) katioia

**Burdina (Z=26):**  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$



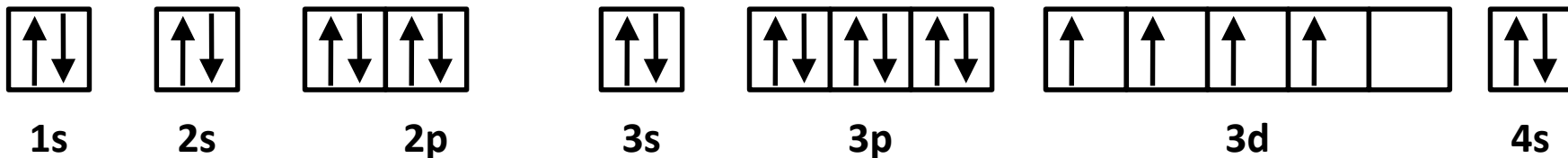
*Burdinak 4 elektroi parekatu gabe ditu: paramagnetikoa da*

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

3. Hurrengo atomoetako oinarrizko K. E. idatzi:

- Nitrogenoa
- Argona
- Magnesioa
- Burdin(II) katioia
- Burdin(III) katioia

**Burdin(II) katioia(Z=26):**  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$



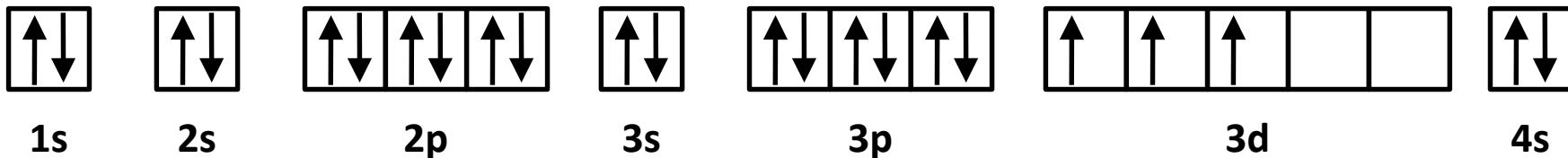
Burdin(II) katioiak 4 elektroi parekatu gabe: paramagnetikoa da

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

3. Hurrengo atomoetako oinarritzko K. E. idatzi:

- Nitrogenoa
- Argona
- Magnesioa
- Burdin(II) katioia
- Burdin(III) katioia

Burdin(III) katioia( $Z=26$ ):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$



Burdin(II) katioiak 3 elektroi parekatu gabe: paramagnetikoa da



## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

4. Atomo batean zenbat elektroik hurrengo kuantu-zenbakiak izan ditzateke?

Kuantu -zenbakiak	Elektroi - kopurua
$n= 2, m_s= -1/2$	4 elektroi
$n= 2, l=0, m_s= -1/2$	Elektroi bakarra
$n= 4, m_l= 1$	6 elektroi
$n= 2, l=3, m_l= -2$	0 elektroi
$n= 3, l= 2$	10 elektroi

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

5. Kuantu-zenbakizko laukote hauen artean zeinek dira onartezinak?

Kuantu -zenbakiak	Erantzuna
$(1,0,1/2,-1/2)$	<input checked="" type="checkbox"/> $(1,0,1/2,-1/2)$
$(4,3,-2,1/2)$	<input type="checkbox"/> $(4,3,-2,1/2)$
$(2,2,1,1/2)$	<input checked="" type="checkbox"/> $(2,2,1,1/2)$
$(3,0,0,1/2)$	<input type="checkbox"/> $(3,0,0,1/2)$
$(3,2,1,1)$	<input checked="" type="checkbox"/> $(3,2,1,1)$

## 05.03.GAIA: ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. ARIKETAK

6. Oxigeno atomoak 8 elektroi ditu. Idatzi elektroi bakoitzari dagozkion lau kuantu-zenbakiak.

n	l	$m_l$	$m_s$	Orbitala
1	0	0	$\frac{1}{2}$	$1s^2$
1	0	0	$-\frac{1}{2}$	
2	0	0	$\frac{1}{2}$	$2s^2$
2	0	0	$-\frac{1}{2}$	
2	1	-1	$\frac{1}{2}$	$2p^4$
2	1	-1	$-\frac{1}{2}$	
2	1	0	$\frac{1}{2}$	
2	1	1	$\frac{1}{2}$	

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Hitzen glosarioa

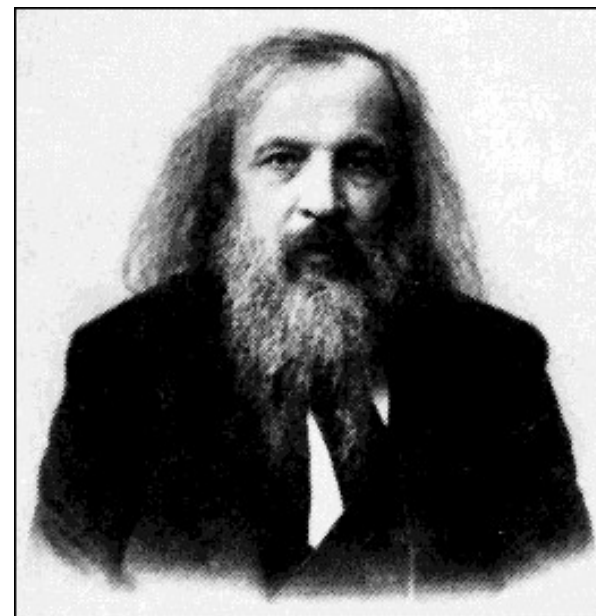
- . Atomo hidrogenoidea:
- . Banaketa erradiala:
- . Banaketa angeluarra
- . Funtzio orbitala
- . Pantailaketa
- . Karga nuklear eraginkorra
- . Energia-degenerazioa
- . Konfigurazio elektronikoa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.; Química General. Pearson Education, 10<sup>a</sup> Ed., Madrid, (2011)
2. Lothar Beyer. Química Inorgánica. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
3. Shivers & Athkins: Química Inorgánica. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)
4. Chang, R., Goldsby, K. A.:Química;11<sup>a</sup> Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
5. Valenzuela, C.:Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia.Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)



## 5.4. GAIA TAULA PERIODIKOA



Farmaziako gradua. 1.kurtsoa  
Kimika orokorra eta ez-organikoa  
2019/20 kurtsoa

## 5. Gaia. Egitura atomikoa eta taula periodikoa

### INDIZEA

5.1. Mekanika Kuantikoaren oinarriak

5.2. Atomo hidrogenoideak. Egitura atomikoa

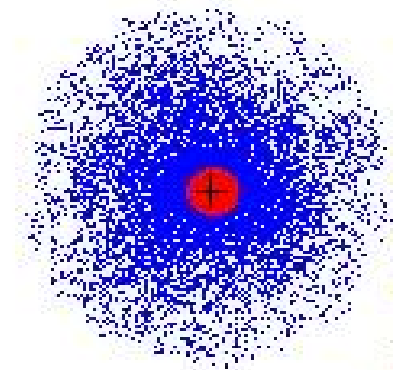
5.3. Atomo polielektronikoak. Egitura atomikoa

**5.4. Taula periodikoa**

## 5. 4.Gaia. Taula Periodikoa

### INDIZEA

1. Taula periodikoaren hastapenak
2. Taula periodikoaren antolaketa
3. Balentzia-elektroiak
4. Propietate periodikoak



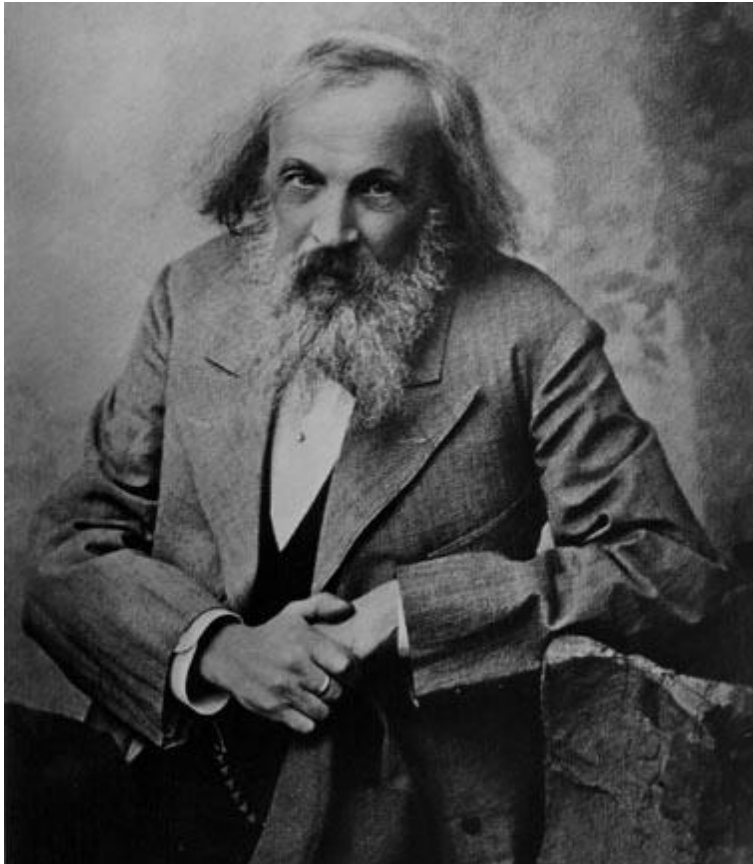


## 5.4. GAIA

### ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

#### 5.4. 1. TAULA PERIODIKOAREN HASTAPENAK

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



Dimitri Ivanovich Mendeleev (1834-1907)

1869.urtean Dimitri Mendeleev **kimikari errusiarrak** taula periodiko *moderno*a **antolatu** zuen, **zutabe bakoitzean balentzia bereko elementuak kokatuz**

**Mendeleev-ek ez zekien antolamendu hau Z-aren arabera**koa zenik

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- ✓ 1700.urtean baino lehen bakarrik 12 elementu ezagunak ziren.
- ✓ 1700-1799 tartean 21 elementu gehiago aurkitu zituzten.
- ✓ 1800-1849 tartean 24 elementu berriak agertu ziren
- ✓ 1850-1899 tartean beste 24 elementu batzuk aurkitu zituzten
- ✓ Guztira: 81 elementu
- ✓ Egun 119 elementu ezagunak dira, 92 naturalak izanik
- ✓ Lurrean arinena H-a da eta astunena U-a da

Ikurrak?  
J.J.Berzelius  
(1813.urtean)



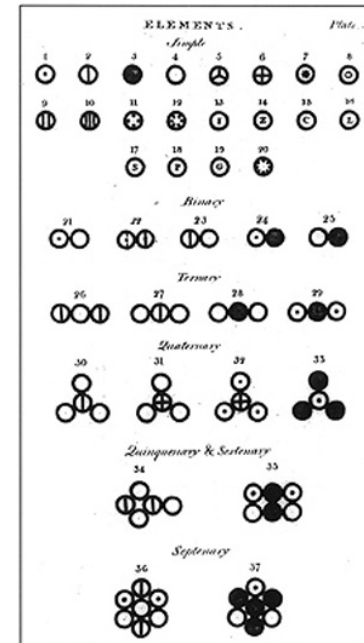
XVIII. mendeko laborategia

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## Taula periodikoaren hastapenak. Sinbologia

An Explication of the Characters which are used in this Book.

☉ <i>Gold.</i>	A. F. <i>Aqua Fortis.</i>
☽ <i>Silver.</i>	A. R. <i>Aqua Regus.</i>
♂ <i>Iron.</i>	S. V. <i>Spirit of Wine.</i>
☿ <i>Mercury.</i>	☿ <i>Sublimate,</i>
♃ <i>Jupiter.</i>	☿ <i>Precipitata.</i>
♀ <i>Venus.</i>	☿☿ <i>Amalgama.</i>
♄ <i>Lead.</i>	▽ <i>Water.</i>
♁ <i>Antimony.</i>	△ <i>Fira,</i>
✽ <i>Sal armoniac.</i>	



Sinbologia alkimikoa  
planeten oinarrituta  
( XIII-XIV. mendeak)

**Nola ordenatu?**

Elementuen eta konposatuen  
irudia.

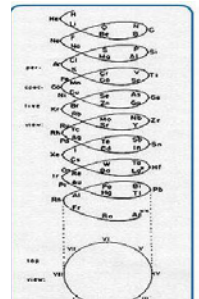
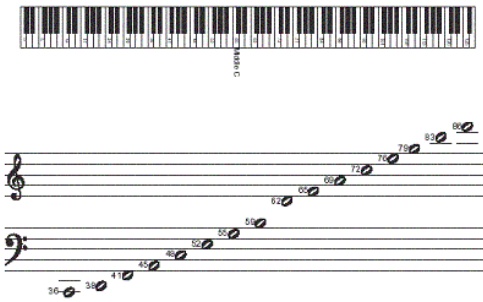
“A New System of Chemical  
Philosophy” . John Dalton (1808)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Taula periodikoaren hastapenak. Saialdi lehenak

- Dobereiner-en hirukoak edo “triadas” (1829)
- Newlands-en zortzikoak edo “octavas” (1864)
- Alexandre-Emile Chancourtois en “helize telurikoa” (1820 – 1886)
- 1869.urtean Dimitri Mendeleev-ek antolaketa berri bat proposatu zuen, hurrengoan oinarrituta:

*“Gorputz sinpleen propietateak beraien pisu atomikoarekiko era periodiko batean erlazionatuta daude”*



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Elementuak zutabeetan kokatu zituen eta zutabeetan zehar propietateak errepikatu zirela ohartu zuen
- Ezagunak ez ziren elementu batzuen existentzia aurrean zituen
- Iragarpen okertuta batzuk ere egin zituen: bere ustez gas nobleak ez ziren existitzen!
- Atomismoari buruz eszeptikoa zen
- Kimikaren Tratatu (1868-1869)

The image shows a handwritten manuscript page, likely a draft of a periodic table. The page is filled with handwritten text and numbers, organized into columns and rows. The handwriting is in a cursive script, possibly from the 19th century. The text is arranged in a grid-like structure, with some elements grouped together. There are several lines of text at the top and bottom of the page, and a large rectangular box containing text in the lower right quadrant. The overall appearance is that of a working draft or a preliminary sketch of a scientific discovery.


## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Aldi berean beste zientzialari batzuk lan bera garatu zuten baina ez zuten hain ondo aurkeztu
- Julius Lothar Meyer-en lana aipagarria da, 1864.urtean 28 elementu balentziaren arabera ordenatu baitzuen



Julius Lothar Meyer(1830-1895)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Mendeleev-ek taula batean elementuak ordenatu zituelako ospe osoa bereganatu zuen
- Bunsen-ekin biek lan egin zuten eta 1882an sari bat jaso zuten, *Davy domina*, elementuen arau periodikoaren aurkikuntzagatik
- Taula periodikoan jardun zuten zientzialarien artean ezagunena Mendeleev da. Zergatik?
- Bizitza gogorra izan zuelako eta kasualitatez garai horretan ezagunak ziren 62 elementuak taula batean kokatu zituelako.
- Egungo taula: Henry Moseley-ri zor diogu . . .  *Z eta pisu atomikoaren erlazioaz konturatu zen*



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Mendeleev-ek egindako aurreanen arrakasta

Eka-silizio (Es):Germanioa

Eka-aluminio (Ea):Galioa

“*Eka*”: sanskritoz, lehena

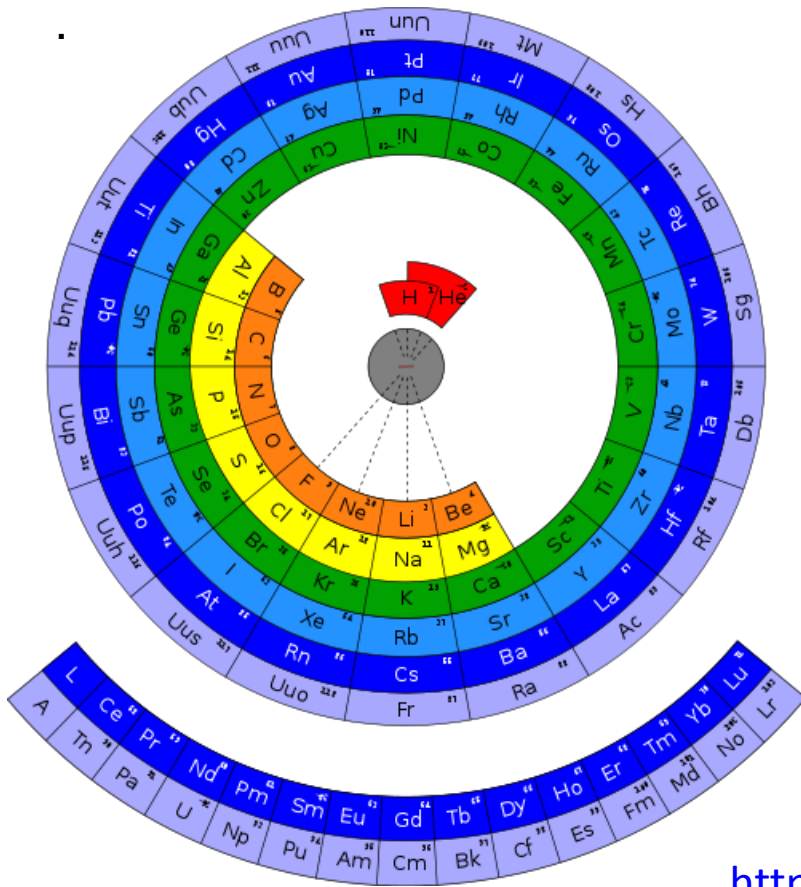
Propietatea	Eka-silizio(1871)	Germanio (1886)
Masa atomikoa	72	72,6
Dentsitatea g/cm <sup>3</sup>	5,5	5,47
kolorea	Gris	Gris
Oxidoaren dentsitatea, g/cm <sup>3</sup>	EsO <sub>2</sub> : 4,7	GeO <sub>2</sub> : 4,703
Kloruroren irakite-puntua	EsCl <sub>4</sub> : T < 100 °C	GeCl <sub>4</sub> : 86 °C
Kloruroaren dentsitatea, g/cm <sup>3</sup>	EsCl <sub>4</sub> : 1,9	GeCl <sub>4</sub> : 1,887

## 5.4. GAIA

### ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

#### 5.4.2. TAULA PERIODIKOAREN ANTOLAKETA

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

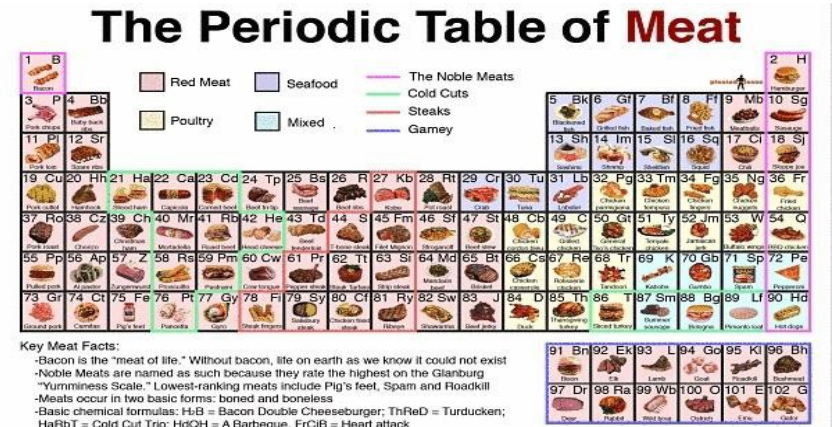
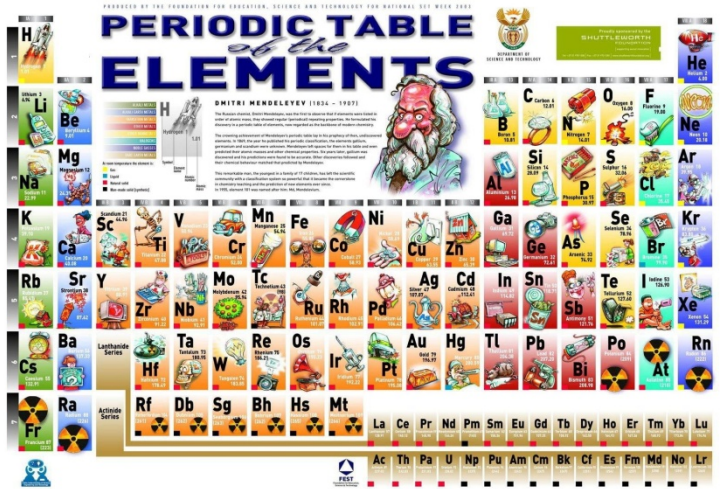


Taula periodikoa?

Erdirantz mugitzean tamaina atomikoa txikitzen dela adierazten du

[https://verne.elpais.com/verne/2018/12/16/articulo/1544973683\\_866319.html](https://verne.elpais.com/verne/2018/12/16/articulo/1544973683_866319.html)

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA






# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

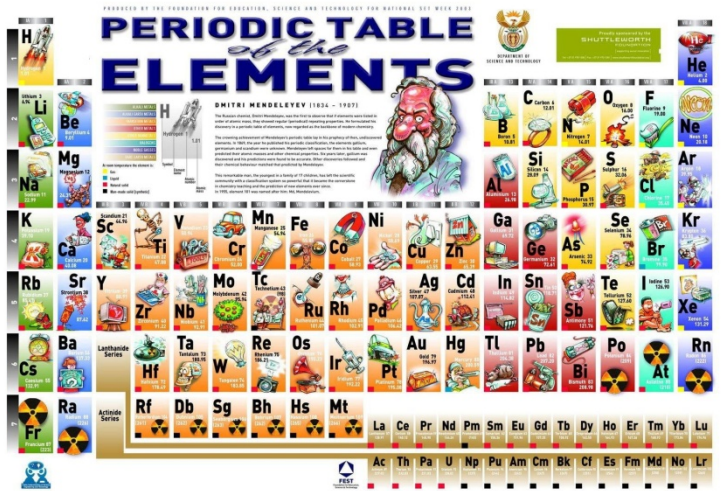
PRODUCED BY THE FOUNDATION FOR EDUCATION, SCIENCE AND TECHNOLOGY FOR NATIONAL DAY WEEK 2003

## PERIODIC TABLE of the ELEMENTS

DMITRI MENDELEEV (1834 - 1907)



UNIVERSITY OF SHUTTLERDORTH



## SISTEMA PERYODICO

Un equipo de investigadores de la Otonomic Yunibersiti ha logrado fotografíar los átomos en su estado fundamental. En este sistema peryódico (HIO<sub>3</sub>) se pueden observar ciertas modificaciones en la nomenclatura para que su estudio sea más lógico y comprensible. "Omnia mentira est" - MENDELEJEV.



IA: Hidrogeno, IIA: Litu, Bario, Sr, Ba, Ra, Francio, Radio, Mactinidos, VIII: Hierro, Cobalto, Niquel, Cobre, Zinc, Galio, Germanio, Arseno, Selenio, Bromo, Yodo, Plomo, Bismuto, Polonio, Astatino, Francio, Radio, Mactinidos, VIII: Hierro, Cobalto, Niquel, Cobre, Zinc, Galio, Germanio, Arseno, Selenio, Bromo, Yodo, Plomo, Bismuto, Polonio, Astatino, Francio, Radio, Mactinidos.

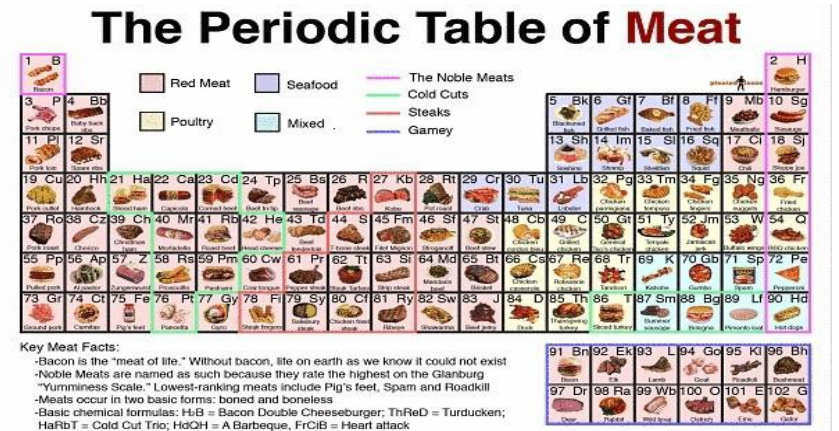
## THE PERIODIC TABLE OF JAZZ

AN EVOLUTION OF JAZZ STYLE, IMPROVISATION AND INNOVATION VISUALIZED



Legend: TENOR SAXOPHONE, TRUMPET, PIANO, MILES DAVIS, ALTO/BARI SAXOPHONE, DRUMS/BASS/GUITAR, BAND/BANDLEADER or COMPOSER/ARRANGER.

## The Periodic Table of Meat



Legend: Red Meat, Seafood, Poultry, Mixed, The Noble Meats, Cold Cuts, Steaks, Gamey.

Key Meat Facts:  
 -Bacon is the "meat of life." Without bacon, life on earth as we know it could not exist  
 -Noble Meats are named as such because they rate the highest on the Glamour "Yumminess Scale." Lowest-ranking meats include Pig's feet, Spam and Roadkill  
 -Meats occur in two basic forms: boned and boneless  
 -Basic chemical formulas: H<sub>2</sub>B = Bacon Double Cheeseburger; ThReD = Turducken; HaRbT = Cold Cut Trio; HdQH = A Barbeque, FCIB = Heart attack



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Taula periodikoak isladatzen du
  - Elementuen berezko ezaugarriak
  - Egitura eta konposatuetan sortuko diren loturak
  - Elementuaren izaera kimikoa
- Aurreko guztia erlazio estua du hurrengoarekin
  - Konfigurazio elektronikoa
  - Elektronegatibitatea
  - Tamaina
- Izaera kimikoaren arabera elementuak izan daitezke: metalak, ez-metalak eta metaloideak

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Elementu-mota eta sailkapen periodikoa

4 elementu mota bereizten dira konfigurazio elektronikoa dela eta:

#### Gas Noble motako elementuak

- Geruza elektronikoak erabat beteta dute.
- He  $1s^2$  izan ezik, dagokion konfigurazio elektronikoa:  
 $ns^2 np^6$

#### Elementu Adierazgarriak/talde nagusiak

- Kanpoko geruza partzialki beteta dute.
- Konfigurazioak honakoak izan daitezke:  $ns^1$ -tik  $ns^2 np^5$ -ra



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Trantsiziozko elementuak (3-11 taldeak)

- d geruza partzialki beteta dute
- Elementu hauen oinarritzko konfigurazioak :



### d blokeko elementuak (3-12 taldeak)

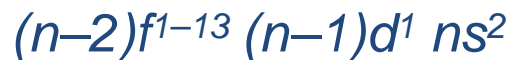
- d orbitalak partzialki edo erabat beteta
- Elementu hauen oinarritzko konfigurazioak:



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Barne-Trantziziozko elementuak

- Partzialki beteta dute:
  - Azken bi geruzak
  - Azken hirugarrena
- Elementu hauen oinarritzko konfigurazioak:



- Askotan  $(n-1)d^1$  elektroia 4f orbital bateraino pasatzen da

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts		Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Egun eta 1988tik **IUPAC**-ek onartzen duen zutabeen izendapen bakarra:  
1-18

Kimika Puru eta Aplikatuko Nazioarteko Batasuna

International **U**nion **P**ure and **A**pplyed **C**hemistry

Unión Internacional de Química Pura y Aplicada

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## Taula periodikoaren antolamendua

- Periodoak (ilarak)
- Taldeak (zutabeak)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## ➤ Bi elementu-mota

- Elementu Metalikoak
- Elementu Ez-metalikoak

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

8	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
9	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

%75 metalak  
11 gasak

2 likidoak

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Taula periodikoaren talde nagusiak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Dobereiner-hirukoak



# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Elementu adierazgarriak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts		Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Metal alkalinoak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Metal lurralkalinoak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Halogenoak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

C-taldea edo 14. taldea

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Anfigenoak, Kalkogenoak, edo 16.taldea

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts		Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Gas geldoak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts		Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Trantsiziozko elementuak



# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Barne-trantsiziozko elementuak edo lurralkalinoak: lantanidoak eta aktinidoak

Lantanoa eta Aktinioa zalantzazkoak dira sailkatzeko orduan

5.4. GAIA

ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

5.4. 3. BALENTZIA ELEKTROIAK

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Balentzia-elektroiak

- Kanpo-elektroiak elementuen jokaera kimikoa baldintzatze dute  
Kanpo-elektroiak **BALENTZIA - ELEKTROIAK** dira

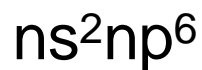
*TAULA PERIODIKOAN TALDE BEREKO ELEMENTUEK BALENTZIA - ELEKTROIEN KOPURU BERA DAUKATENEZ, ANTZEKO JOKAERA KIMIKOA ERE DAUKATE.*

- Taldeko lehen elementuak ezaugarri desberdin samarrak aurkeztu ohi dira.
- Elementu tipikoak: talde bakoitzeko lehenengo bi elementuak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No



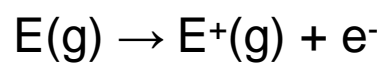
- s eta p geruzak beteta dituztenez gas geldoak kimikoki inerteak dira
- Horregatik beraien konfigurazio elektronikoa egonkortzat hartzen da

Beraz, orokorrean, s eta p blokeko elementuen kimika gas nobleen konfigurazioa lortzeko abiatuta dagoela esan daiteke

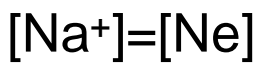
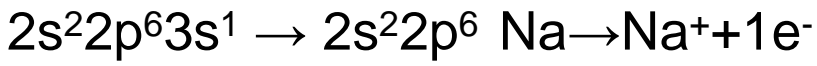
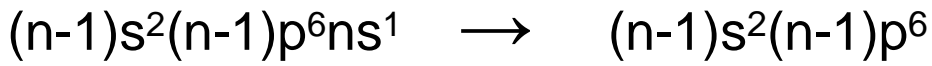
# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

Alkalinoek orokorrean katioi monobalente ( $E^+$ ) modura jokatzen dute, elektroi bat galdu ondoren



La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No



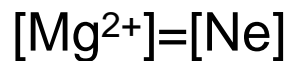
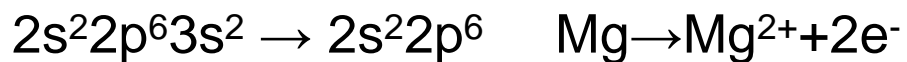
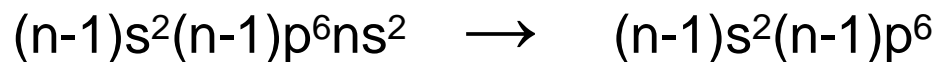
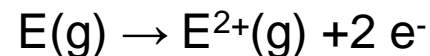
# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

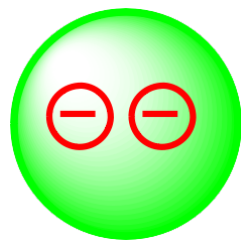
Lurralkalinoek katioi dibalente ( $E^{2+}$ ) modura jokatzen dute gehienetan, elektro bi galdu ondoren



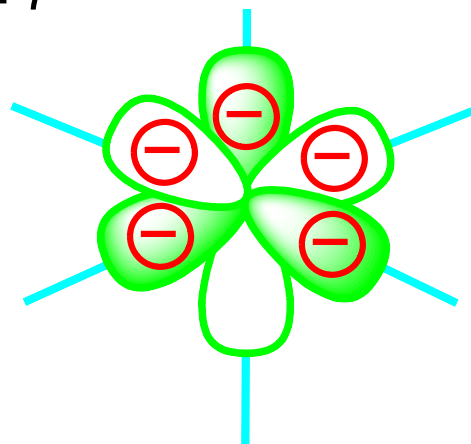
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Hona hemen halogenoen haluro gisa portaeraren zergatia

Balentzia-elektroiak =  $t - 10 = 17 - 10 = 7$



S orbitala



P orbitala

ZER EGIN DEZAKE KLORO ATOMO BATEK?

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

p taldeko elementuen kimika askotarikoa da

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

p blokean balentzia-elektroi kopurua t-10 da, t taldea izanik

Esaterako, 14 taldearen balentzia-elektroiak 4 dira

$$14 - 10 = 4$$

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No



5.4. GAIA

ATOMO POLIELEKTRONIKOAK. EGITURA ATOMIKOA

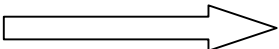
5.4. 4. PROPIETATE PERIODIKOAK

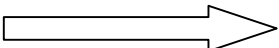
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Ikuspuntu kimikotik, **atomo baten elektroi guztietatik garrantzizkoenak balentzia-elektroiak dira**. Premiazkoa da bere portaera ezagutzea
- **Elementuen oinarrizko ezaugarri kimikoak deskribatzeko, ondoko ezaugarriak aztertu beharra dago:**
  - Balentzia-elektroiak erraz galtzen dira?
  - Balentzia-elektroiak erraz hartzen dira?
  - Bi prozesuen arteko lehiaketan, zer gertatzen da errazago?
  - Nukleoaren inguruan zenbat hedatzen dira?

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Propietate Periodikoak

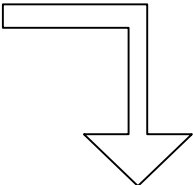
Erraz galtzen dira?  Ionizazio-energia

Eraz irabazten dira  Afinitate-elektronikoa

Bi prozesuen arteko lehiaketan, zer gertatzen da errazago?



 Elektronegatibitatea

Nukleoaren inguruan zenbat hedatzen dira?

 Tamaina

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Karga nuklearra eraginkorraren,  $Z_e$ , aldakuntza



1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

talde batean goitik behera nukleotik gero eta urrunago daudenez, balentzi elektroiek sentitzen duten erakarpena (nukleoak eragindakoa) gero eta txikiagoa

periodo batean ezkerrealdetik eskumaldera balentzia-elektroiek sentitzen duten erakarpena (nukleoak eragindakoa) gero eta handiagoa

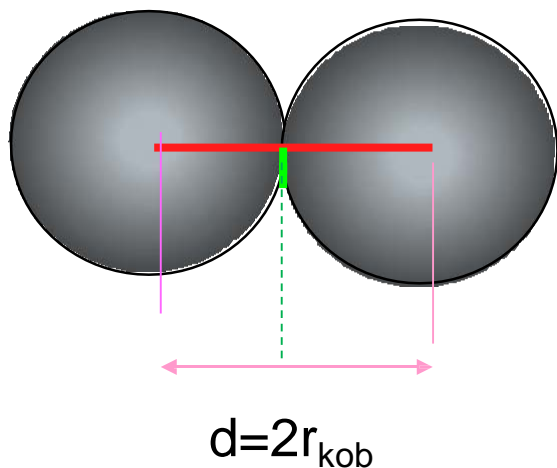
## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Erradio atomikoa

- Heisenberg-en zehazgabetasunaren printzipioaren arabera erradioa atomikoaren kontzeptua zentzugabekoa da, definituta ez baitago, geruza elektronikoa mugagabeko baita
- Nola definitu erradio atomikoaren tamaina atomo isolatutakoarena neurtzea ezinezkoa bada? Nola definitzea?
- *Nukleoaren inguruan dentsitate elektronikoaren % 95a bolumena da*
- Joera periodikoa adierazten du

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

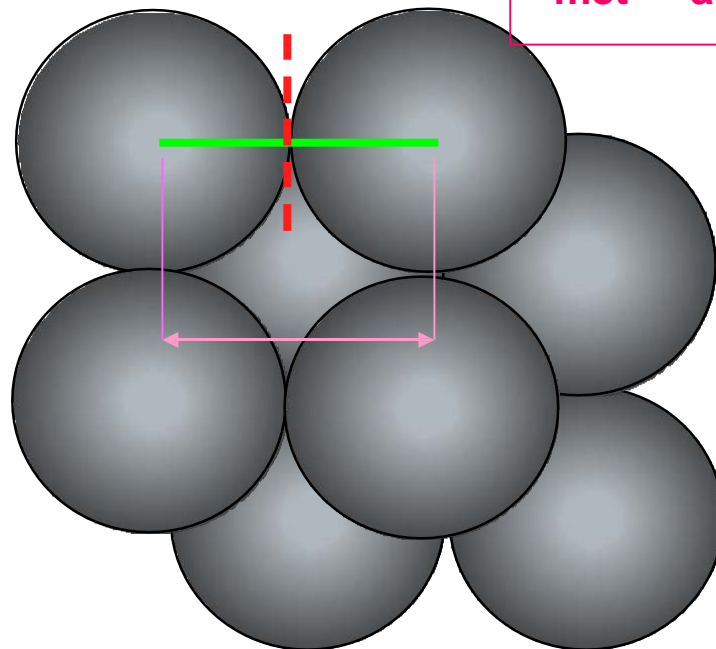
$$r_{\text{kob}} = r_{\text{atom}}$$



### Erradio kobalenteak

Molekula diatomiko homonuklearrean kontaktuan dauden bi atomoen arteko distantziaren erdia

$$r_{\text{met}} = r_{\text{atom}}$$



### Erradio metalikoak (Goldschmidt-en)

Solido batean ondoz ondoko dauden bi atomoko zentroen arteko distantzia

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

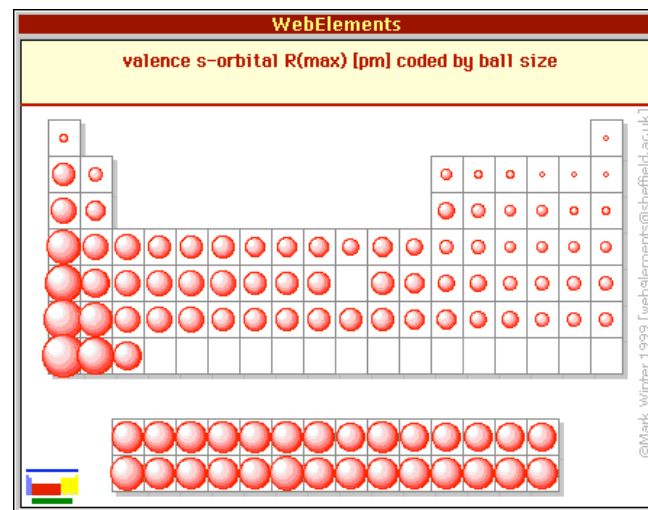
## Erradio atomikoa

### Periodoetan

$Z_e$  handiagoa den heinean erakarpen nuklearra handiagoa da eta ondorioz erradioa txikiagoa da

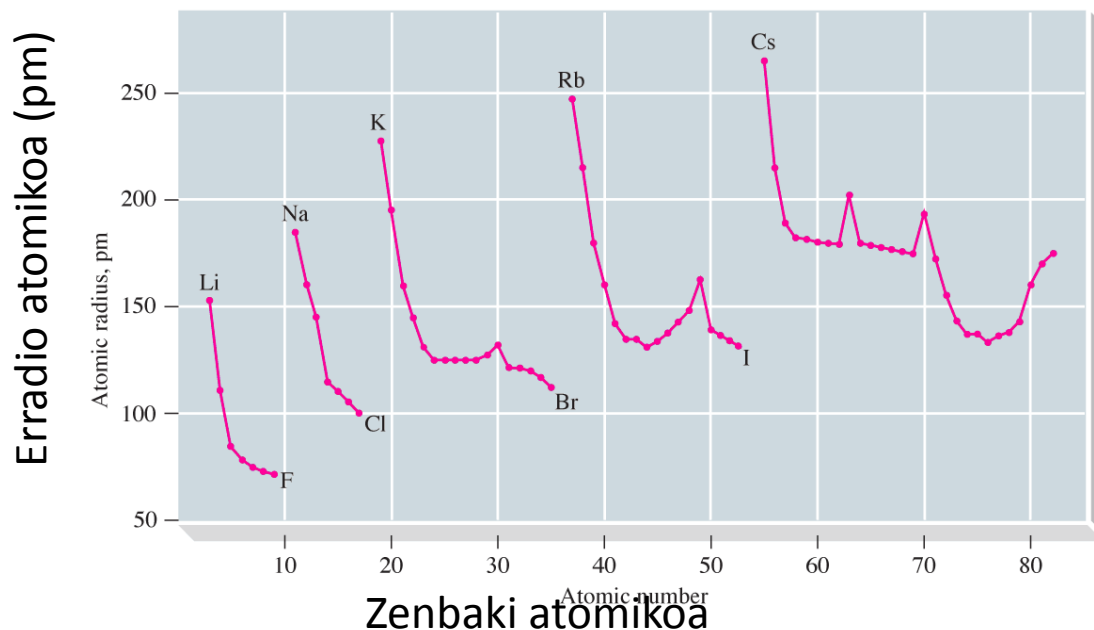
### Taldeetan

n handitzen den neurrian erradioa ere handitzen da, elektroien arteko aldarapenak handitzen direlako eta ondorioz elektroihodeia hedatzen da



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Eskuinerantz gutxitzen da: protoi gehiago, geruza bera,  $Z_e$  handiagoa
- Beherantz handitzen da: elektroiek geruza berriak betetze dute → hodei elektronikoaren hedapena



Erradio atomikoaren aldakuntza



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: erradio ionikoa

### ANIOIAK

$Z_e$  konstantea da baina elektroi kopurua handituz doaz, ondorioz **aldarapenak handiagoak** dira eta anioiaren erradioa atomo neutroarena baino handiagoa da.

### KATIOIAK

Elektroi gutxiago daude, **hodei elektronikoa uzkuratzen da** eta atomoarekin konparatuta txikiagoa da.

### TAULA PERIODIKOAN ALDAKUNTZA

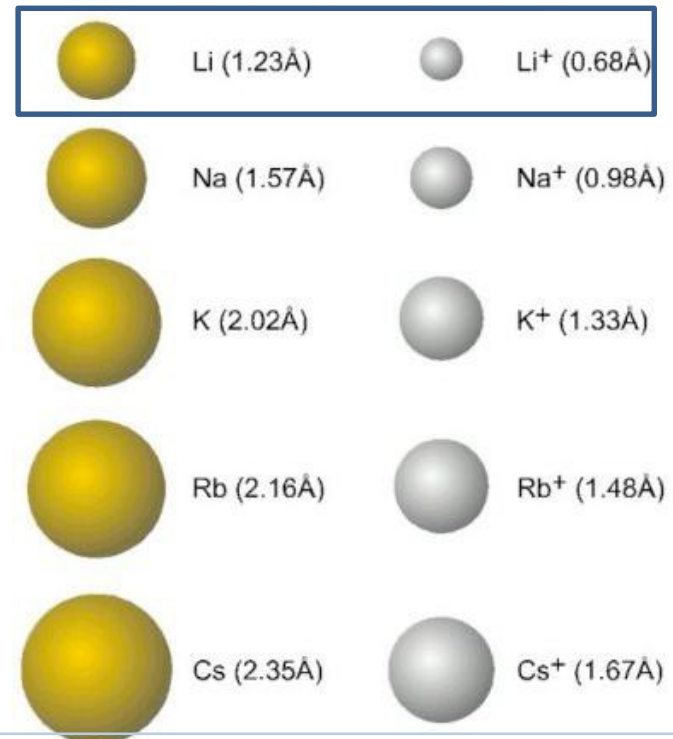
Bai erradio atomikoak bai erradio ionikoak taldeetan goitik behera handituz doa.

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

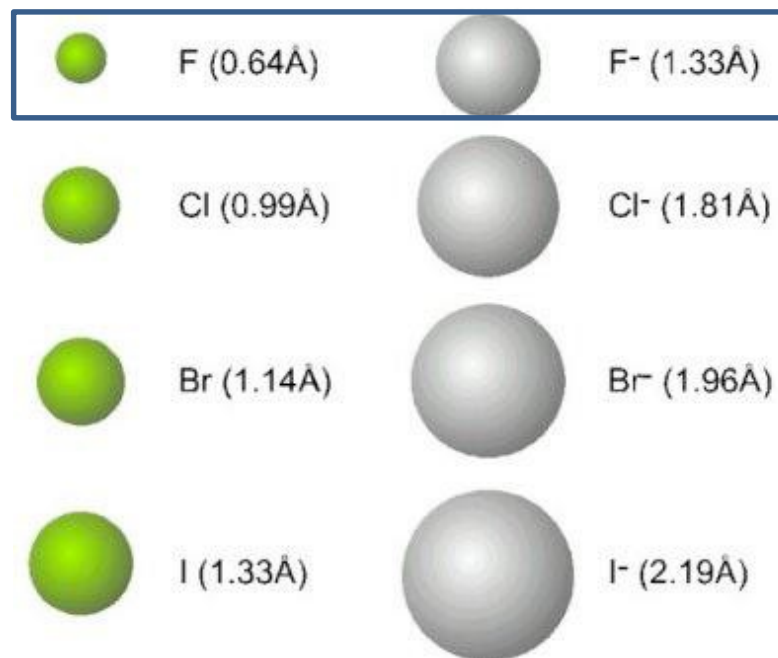
Propietate periodikoak: erradio ionikoa

Bai anioiena bai katioiena taldean zehar jaistean handitzen dira

Atomic Radii of Alkali Metal Elements and Ions



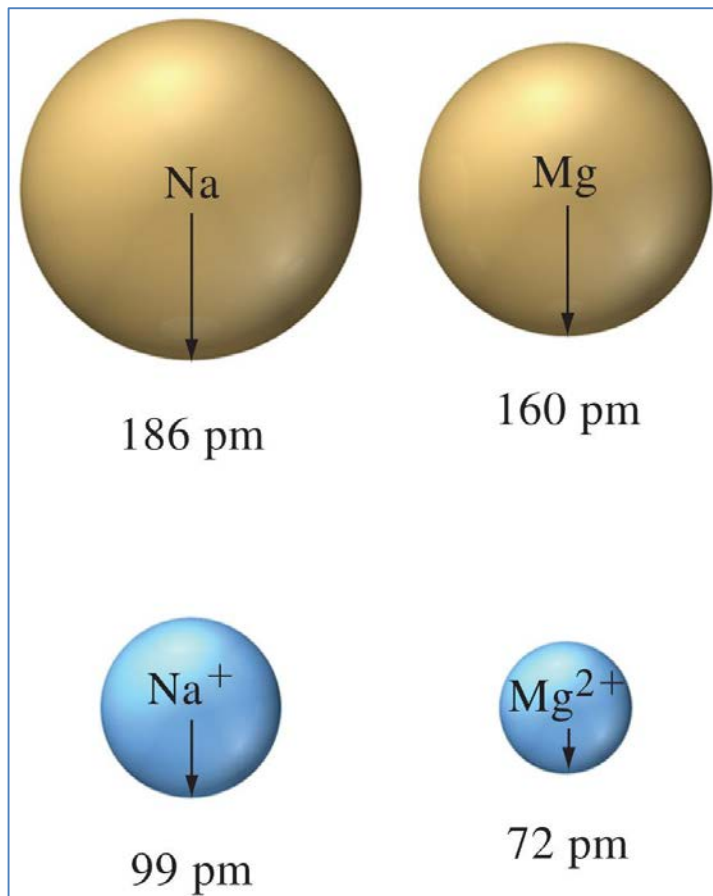
Atomic Radii of Halogen Elements and Ions



Erradioen arteko konparaketa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: erradio ionikoa



Erradioen arteko konparaketa

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: erradio atomikoa. Ariketak

*Hurrengo espezieak erradio ionikoarekiko ordena hazkorrean ordenatu :  
Na<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Cl<sup>-</sup> y Ar.*

<p><b>Li</b> 152 Li<sup>+</sup> 59</p>	<p><b>Be</b> 111 Be<sup>2+</sup> 27</p>											<p><b>B</b> 88</p>	<p><b>C</b> 77</p>	<p><b>N</b> 75 N<sup>3-</sup> 171</p>	<p><b>O</b> 73 O<sup>2-</sup> 140</p>	<p><b>F</b> 71 F<sup>-</sup> 133</p>		
<p><b>Na</b> 186 Na<sup>+</sup> 99</p>	<p><b>Mg</b> 160 Mg<sup>2+</sup> 72</p>											<p><b>Al</b> 143 Al<sup>3+</sup> 53</p>	<p><b>Si</b> 117</p>	<p><b>P</b> 110 P<sup>3-</sup> 212</p>	<p><b>S</b> 104 S<sup>2-</sup> 184</p>	<p><b>Cl</b> 99 Cl<sup>-</sup> 181</p>		
<p><b>K</b> 227 K<sup>+</sup> 138</p>	<p><b>Ca</b> 197 Ca<sup>2+</sup> 100</p>	<p><b>Sc</b> 161 Sc<sup>3+</sup> 75</p>	<p><b>Ti</b> 145 Ti<sup>2+</sup> 86</p>	<p><b>V</b> 132 V<sup>2+</sup> 79 V<sup>3+</sup> 64</p>	<p><b>Cr</b> 125 Cr<sup>2+</sup> 82 Cr<sup>3+</sup> 62</p>	<p><b>Mn</b> 124 Mn<sup>2+</sup> 83</p>	<p><b>Fe</b> 124 Fe<sup>2+</sup> 77 Fe<sup>3+</sup> 65</p>	<p><b>Co</b> 125 Co<sup>2+</sup> 75 Co<sup>3+</sup> 61</p>	<p><b>Ni</b> 125 Ni<sup>2+</sup> 70</p>	<p><b>Cu</b> 128 Cu<sup>+</sup> 96 Cu<sup>2+</sup> 73</p>	<p><b>Zn</b> 133 Zn<sup>2+</sup> 75</p>	<p><b>Ga</b> 122 Ga<sup>3+</sup> 62</p>	<p><b>Ge</b> 122</p>	<p><b>As</b> 121</p>	<p><b>Se</b> 117 Se<sup>2-</sup> 198</p>	<p><b>Br</b> 114 Br<sup>-</sup> 196</p>		
<p><b>Rb</b> 248 Rb<sup>+</sup> 149</p>	<p><b>Sr</b> 215 Sr<sup>2+</sup> 113</p>											<p><b>Ag</b> 144 Ag<sup>+</sup> 115</p>	<p><b>Cd</b> 149 Cd<sup>2+</sup> 95</p>	<p><b>In</b> 163 In<sup>3+</sup> 79</p>	<p><b>Sn</b> 141 Sn<sup>2+</sup> 93</p>	<p><b>Sb</b> 140 Sb<sup>3+</sup> 76</p>	<p><b>Te</b> 137 Te<sup>2-</sup> 221</p>	<p><b>I</b> 133 I<sup>-</sup> 220</p>



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: erradio atomikoa. Ariketak

*Aukeratu atomiko txikiena duen elementuak: Se, Te edo S*

Se ( $Z = 34$ ) 4. periodoa, 16. taldea

Te ( $Z = 52$ ) 5. periodo, 16. taldea

S ( $Z = 16$ ) 3. periodo, 16. taldea

Talde batean erradio atomikoa handitzen da  $Z$  handitu ahala.

Beraz S-ak erradio txikiena du.



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: erradio atomikoa. Ariketak

*Aukeratu atomiko txikiena duen elementuak: Ca, Ga edo Br*

Ca ( $Z = 20$ ) 4. periodo, 2. taldea

Ga ( $Z = 31$ ) 4. periodo, 13. taldea

Br ( $Z = 35$ ) 4. periodo, 17. taldea

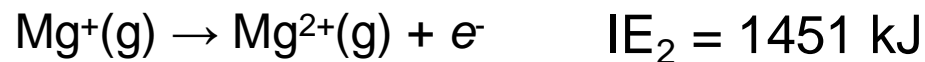


Periodo batean erradioa txikitzen da  $Z$  handitu ahala. Beraz Br-ak erradio atomiko txikiena du.

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

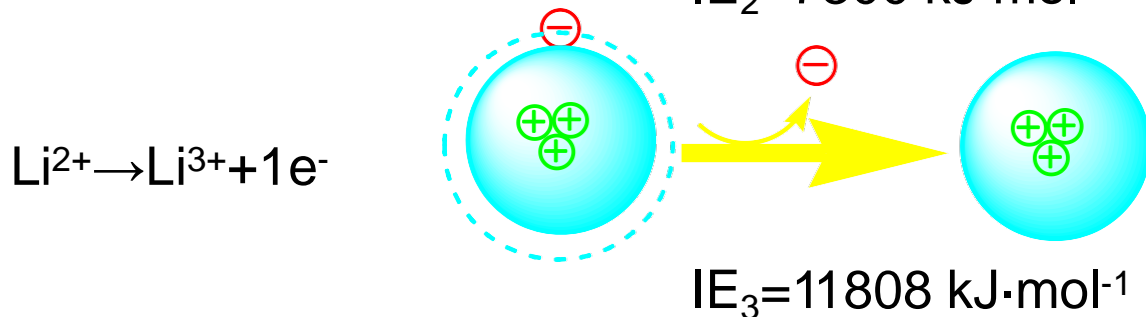
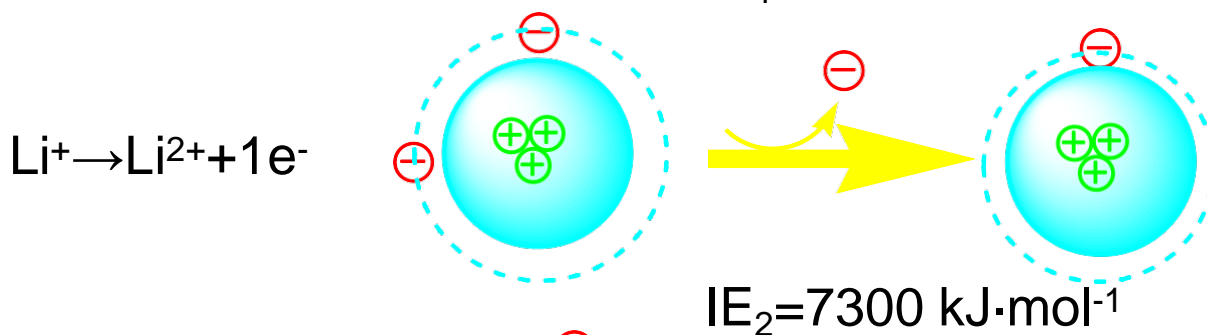
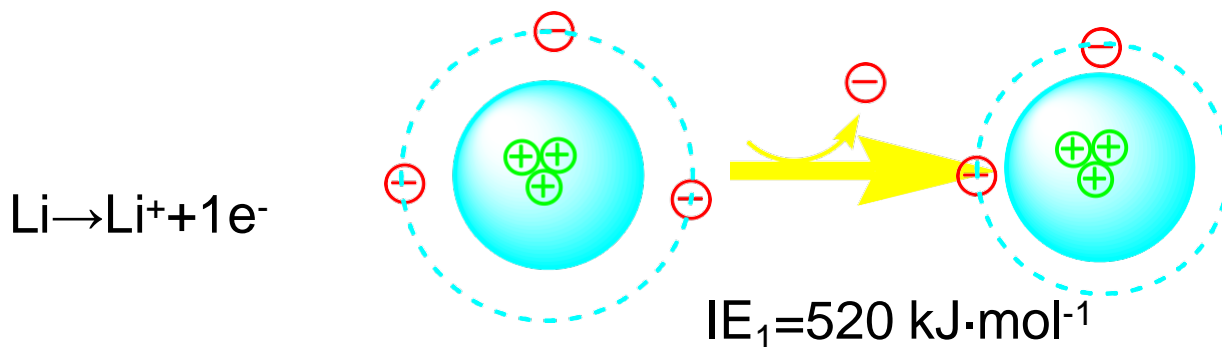
Propietatate periodikoak: Ionizazio-energia (IE)

- Atomo gaseoso batean elektroia bat erazteko bekarrezkoa den energia minimoa, ioi positibo bihurtuz
- Beti endotermikoa da
- Beti  $IE_1 < IE_2 < IE_3$



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Elektroiaren mailakako galeraren bistaratzea



Ondorio orokorra  
da hau:

$IE_n$  **ionizazio-  
energiaren** balioek  
n balioarekin  
egiten dute gora.



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: Ionizazio-energia

### PERIODOETAN

- ✓ Ionizazio energia **eskuinaldera handituz** doa,  $Z_e$  handitu egiten baitu
- ✓ Elektroiak erakarpen altuagoa jasaten du
- ✓ Energia handiagoa behar da erauzteko
- ✓ Metalek IE baxuenak dituzte
- ✓ Ez- metalek altuenak dituzte

### TALDEETAN

- ✓ Behera txikituz doa
- ✓ Elektroiak indar gutxiagoz erakartuta dago.
- ✓ Galtzea errazagoa da.
- ✓ Behar den energia txikiagoa da.

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

.Propietate periodikoak: Ionizazio-energia

	1	2	13	14	15	16	17	18
H <sup>+</sup>	H							He
He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
Ar	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Kr	Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe

Metalak erraz galtzen dira elektroiak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

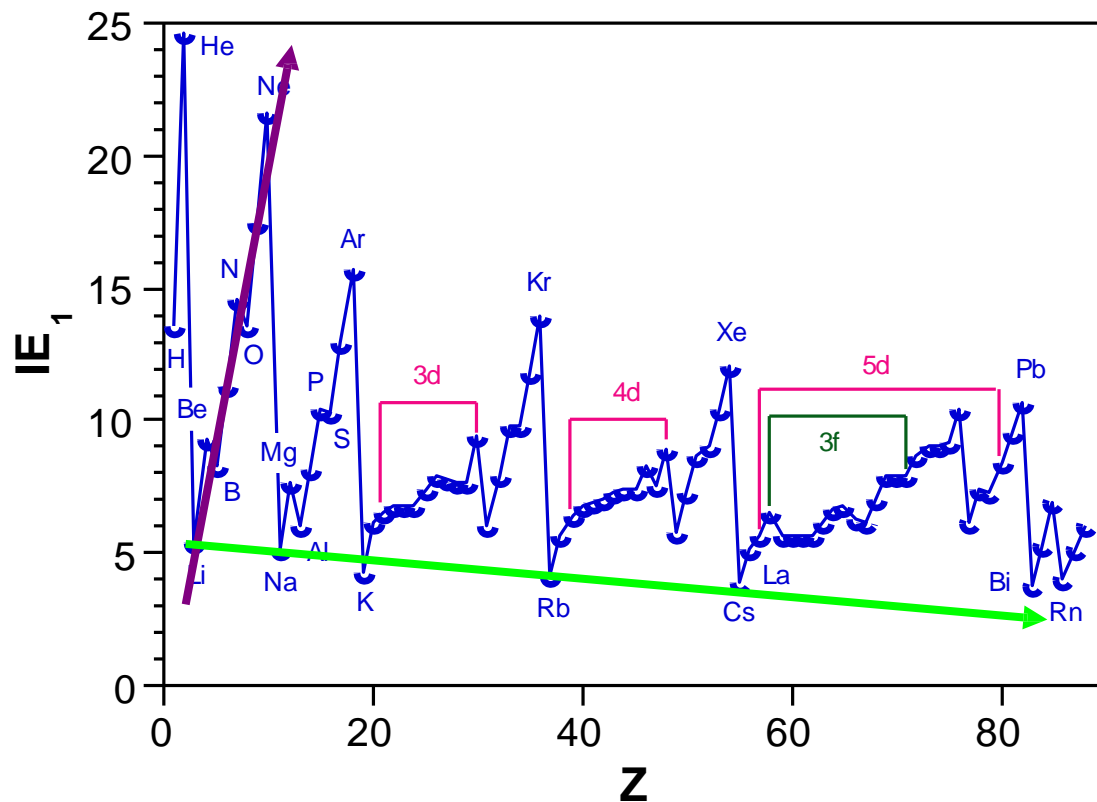
Propietate periodikoak: Ionizazio-energia

1	2	13	14	15	16	17	18
H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe

Ez-metalak erraz hartzen dira elektroiak

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## Z-arekiko lehen ionizazio-energia



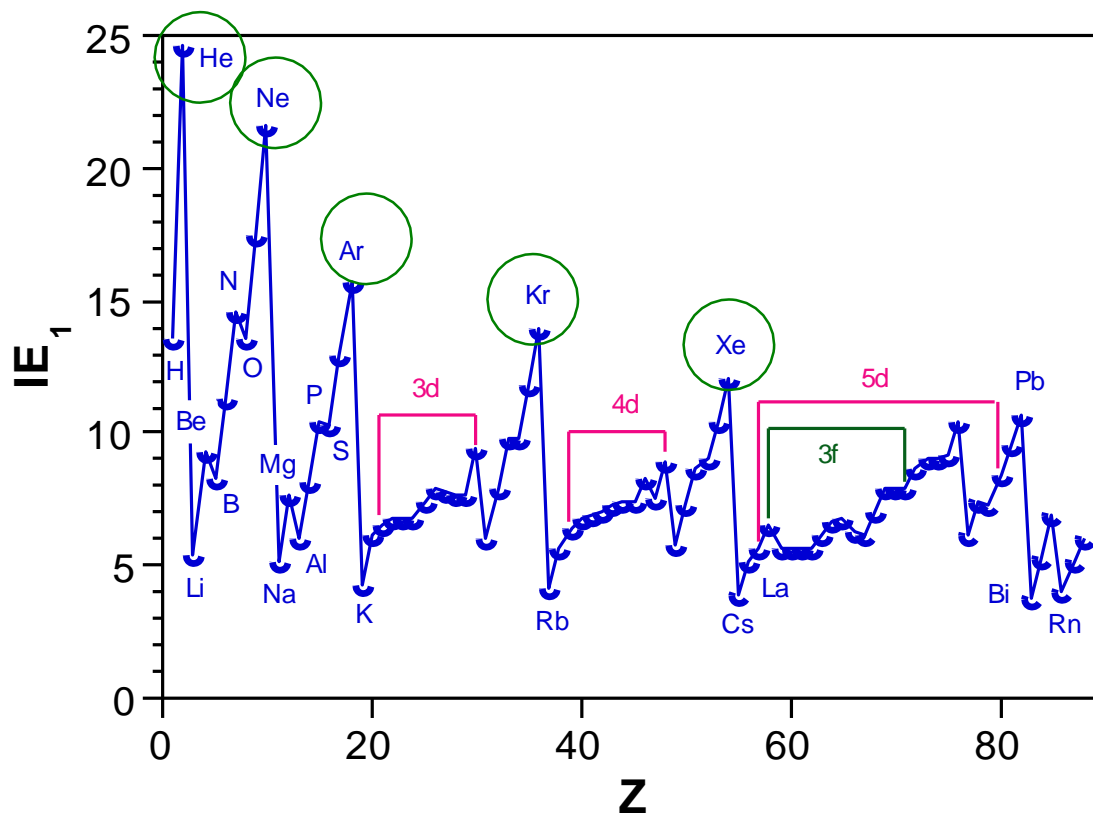
Joera orokorrak

Periodoak:  $Z_e \uparrow$ , I.E.  $\uparrow$

Taldeak:  $n \uparrow$ , I.E.  $\downarrow$

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## Z-ren menpe lehen ionizazio-energia

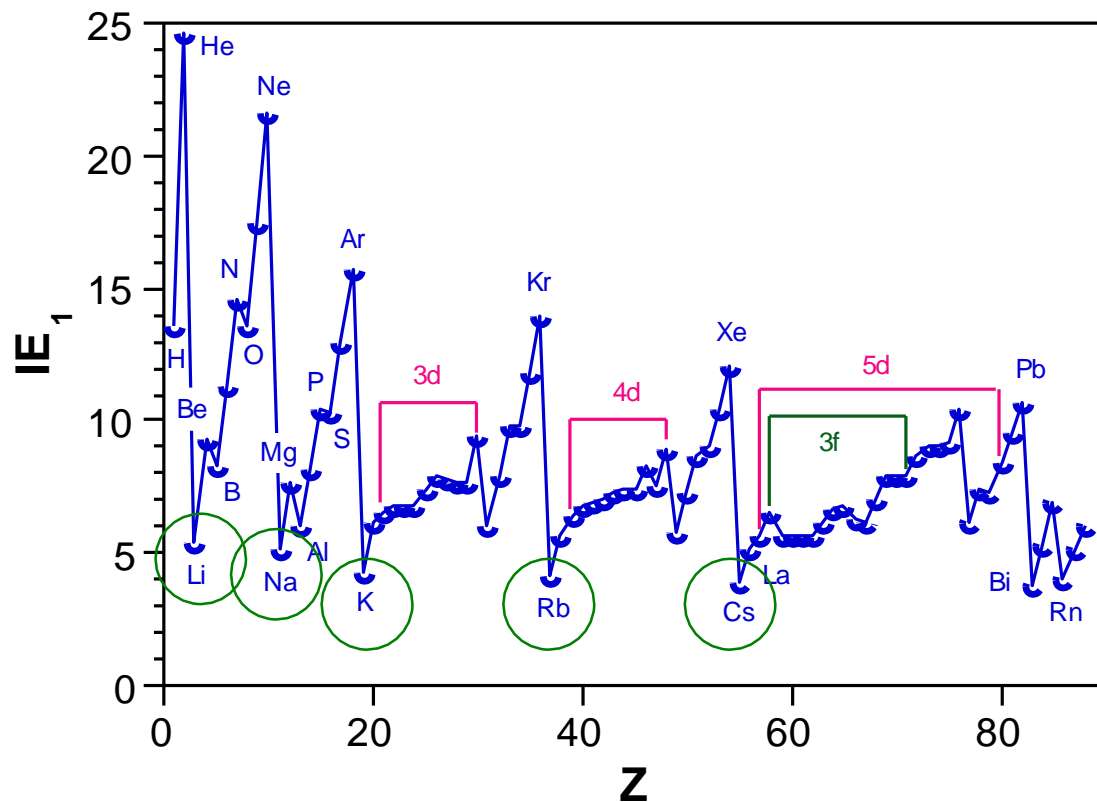


Balore altuenak gas geldoek dituzte

Konfigurazio elektronikoa galtzen dutelako

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Z-ren menpe lehen ionizazio-energia

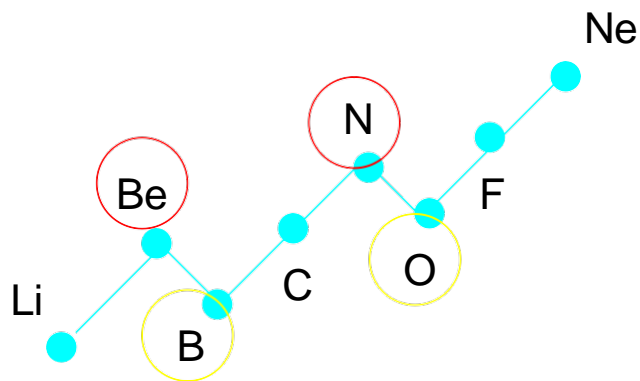


Balore baxuenak  
alkalinoek dauzkate

Prozesuan gas geldoen  
konfigurazio elektronikoa  
eskuratzen dute

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Salbuespenak

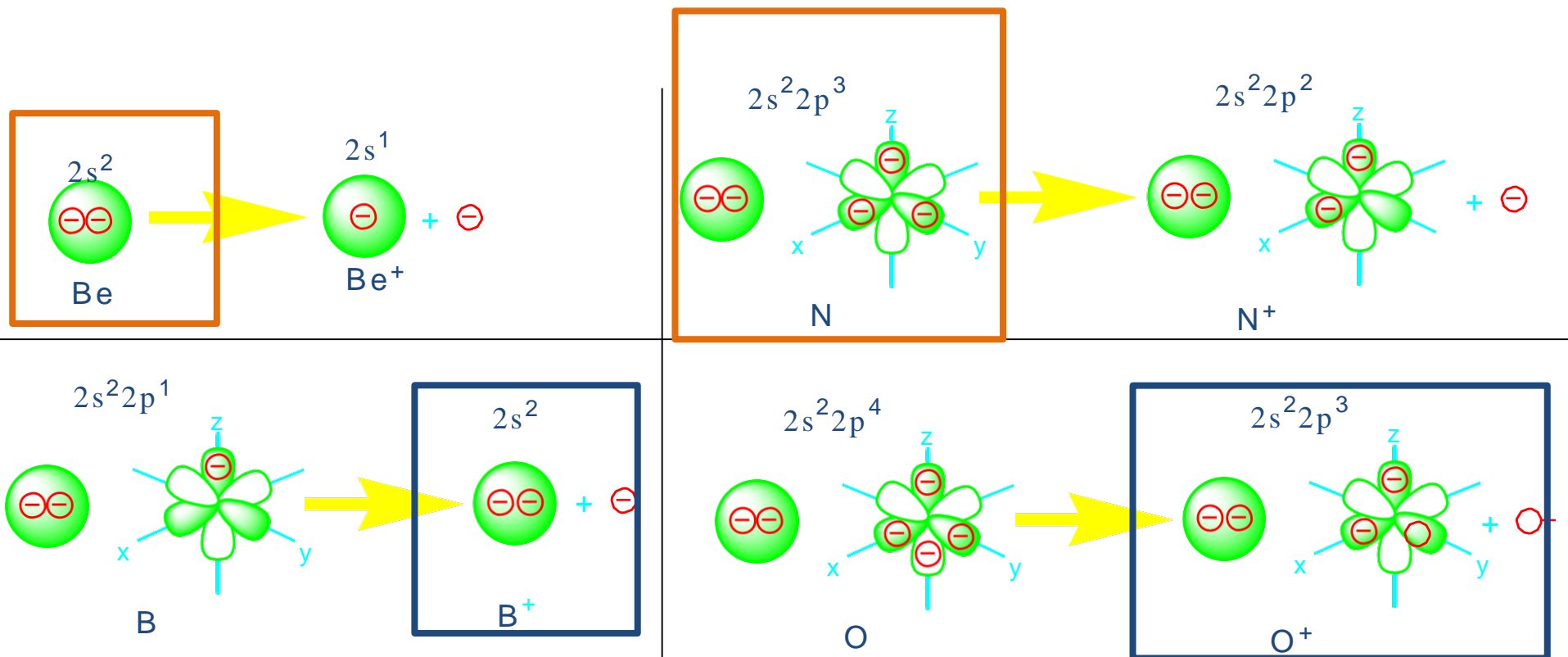


ZERGATIA?

Orbital atomikoen erbibetetzea

- Be eta N bigarren periodokoek espero zitezkeen  $EI_1$  balioak baino handiagoak dituzte. Baita Mg eta P hirugarren periodokoek ere
- B eta O bigarren periodokoek espero zitezkeen  $EI_1$  balioak baino txikiagoak dituzte. Baita Al eta S hirugarren periodokoak ere

# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA



Geruza beteta edo erdibeteta galtzen da: IE altuagoa

Geruza Beteta edo erdibeteta lortzen da: IE txikiagoa



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Salbuespenak

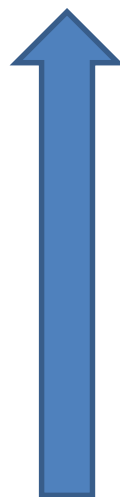
Konfigurazio elektronikoa:

Gas Geldoa

Geruza betea

Geruza erdibetea

Geruza partzialki betea



EGONKORTASUN- ORDENA

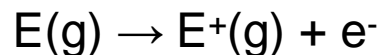
IE-k konfigurazio  
elektronikoei  
buruzko berrriak  
ematen ditu

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: Ionizazio-energia. Ariketak

*Hurrengo espezieak Ionizazio- energiarekiko ordena hazkorrean ordenatu :  
H, He<sup>+</sup> eta Li<sup>2+</sup>.*

Lehen Ionizazio-energia: energia minimoa atomo gaseoso batetik elektroi bat erauzteko, ioi gaseoso bat eratzeko



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: Ionizazio-energia. Ariketak

*Elementu hauek ordenatu lehen IE-ren arabera, ordena hazkorrean: Cl, K, Mg eta S.*

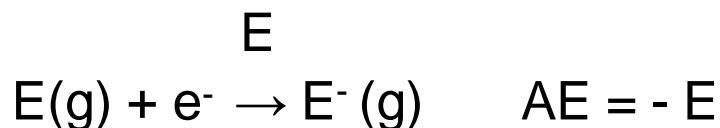
K-a laugarren periodoan egoteagatik IE gutxiago du besteekiko. Gainera metal alkalinoa da eta hauek IE txikienak dituzte. Beste hiruak 3. periodoan daude eta haien artean IE-a eskuinerantz joaten garen neurrian  $Z_e$  handiagoa da eta energia gehiago behar izango genuke elektroia erauzteko



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: Afinitate elektronikoa (AE)

- Atomo gaseoso batean elektroia bat onartzean askatu edo xurgatu behar den energia minimoa da
- Endotermikoa zein exotermikoa izan daiteke
- Konbenioz ohiko zeinua aldatzen da:
- AE-ren balio positiboak prozesu exotermikoei dagozkie
- AE-ren balio negatiboak prozesu endotermikoei dagozkie



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate periodikoak: Afinitate-elektronikoa

### PERIODOETAN

Eskuinerantz handituz doa

### TALDEETAN

Aldeak txikiak dira

Ez-Metalek metalek baino balore negatiboagoak dituzte eta horregatik anioiak osatzen dituzte ( $O^{2-}$ ,  $F^{-}$ )

Oro har IE-ren joera bera du baina periodikotasun gutxiagoarekin

*HANDIAGOA DA  $Z_e$  HANDIAGOA DENEAN*

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Elektronegatibitatea ( $\chi$ )

- Ionizazio potentziala eta afinitate elektronikoa atomo isolatuekin erlazionatzen diren propietateak dira
- Hala ere, atomoak ez daude isolatuta, loturak eratuz baino
- Kimikariontzat ezinbestekoa da loturetako egoeraren jakinaren gainean egoteko beste propietate bat definitzea: elektronegatibitatea
- Parametro enpirikoa

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Elektronegatibitatea

- Atomo batek molekula bateko lotura-elektroiak bereganatzeko duen gaitasuna da
- Loturako atomo bakoitzak elektroiak bereganatzeko duen joeraren neurketa da
- Ez da atomoaren berezko propietate bat, baizik eta konparaziozkoa
- Hiru eskala bereizten dira
  - Pauling (1932) - Mulliken (1934) - Allred-Rochow (1958)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Elektronegatibitatea: Pauling-eskala

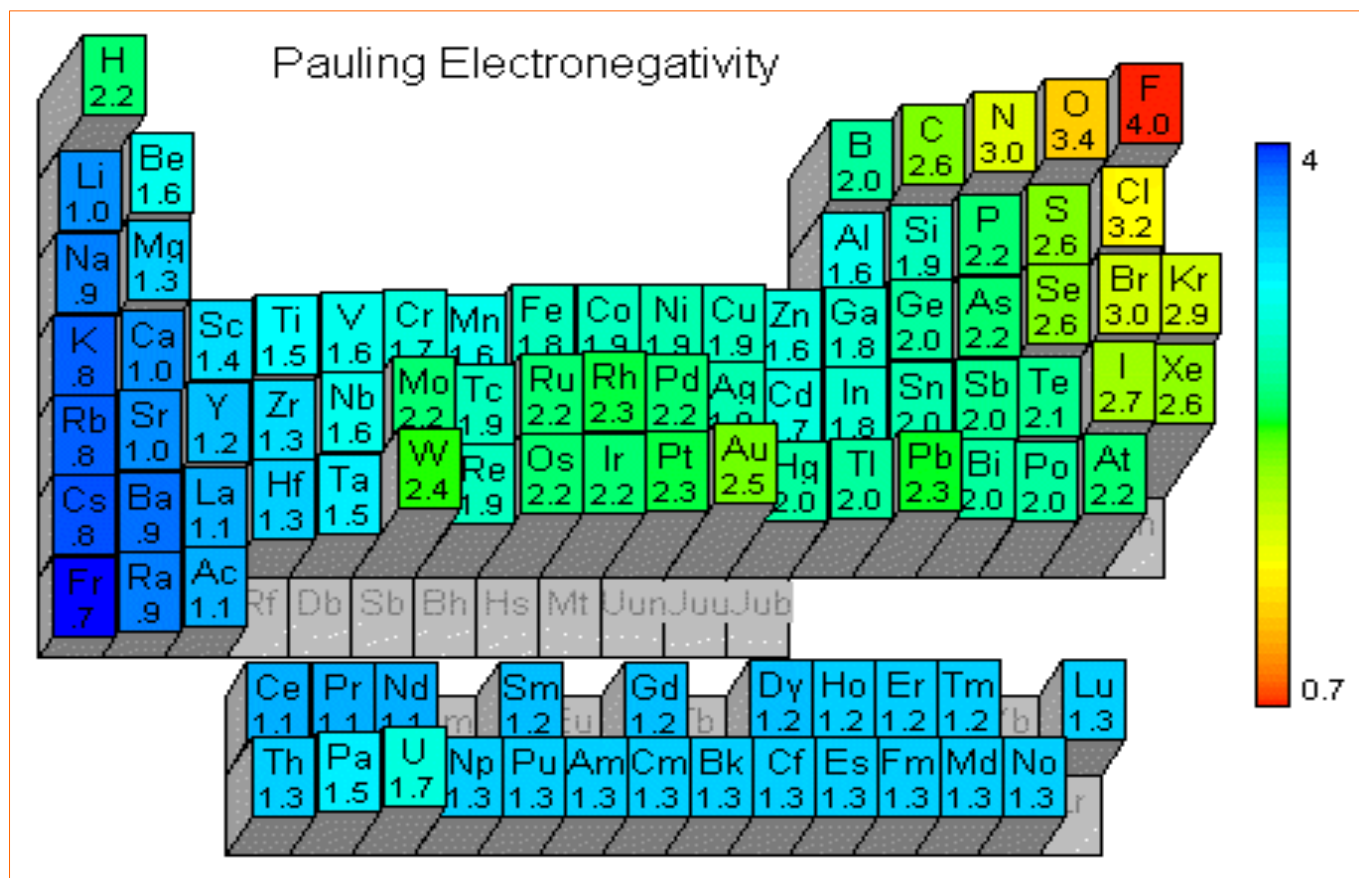
- Karga-banaketa desberdinak energia-aldea sorrarazten du.
- Energia-alde hauetatik abiatuta elektronegatibitatea definitu zuen
- Berak eskala bat proposatu zuen hidrogeno atomoaren elektronegatibitatearekin abiatuta, erreferentzia gisa :  $\chi = 2.2$

Elementua	$\chi$	Elementua	$\chi$
Hidrogeno	2,2	Fluor	4
Karbono	2,6	Fosforo	2,2
Nitrogeno	3	Sufre	2,6
Oxigeno	3,4	Kloro	3,2



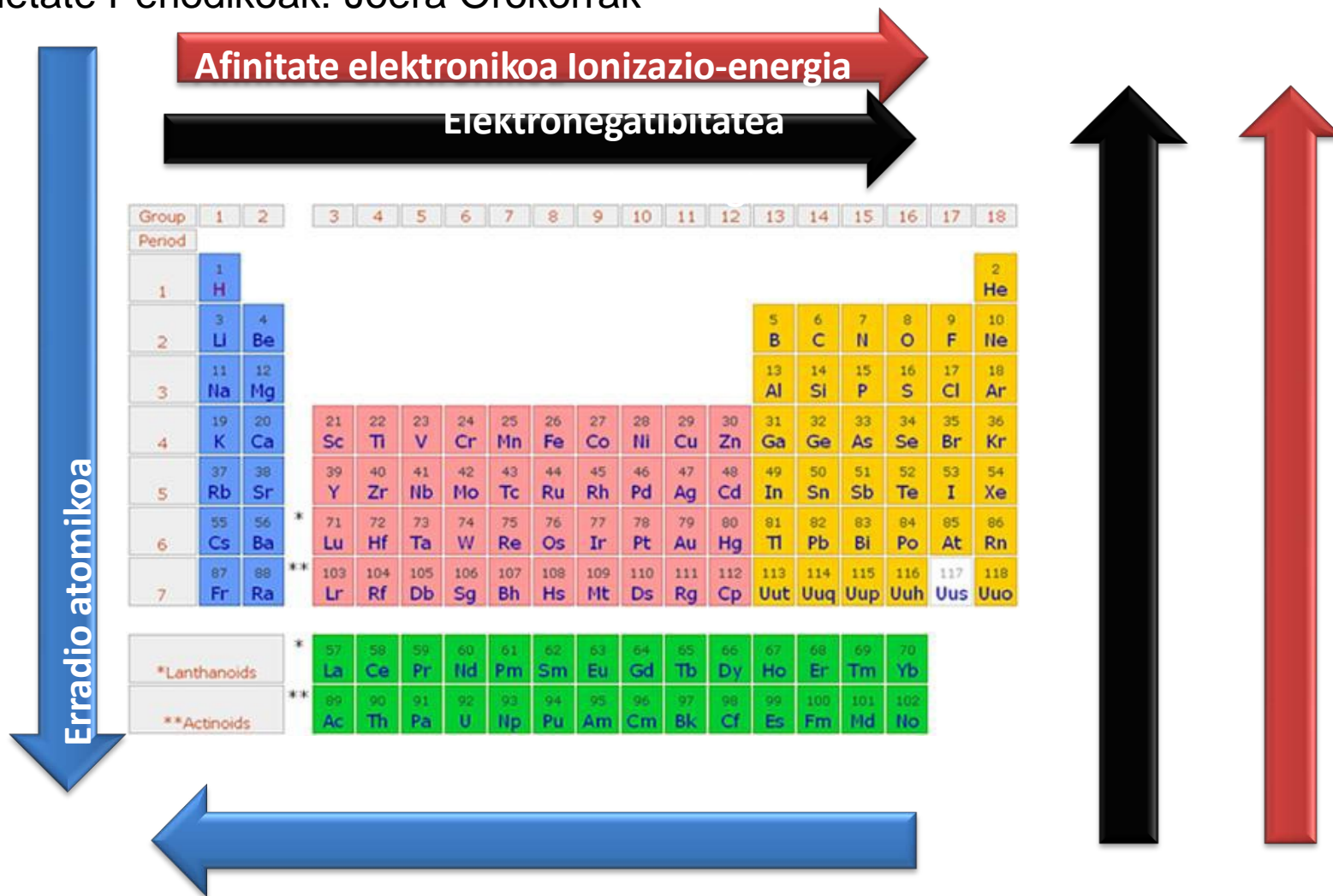
# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

## Elektronegatibitatea: Pauling-eskala



# 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

Propietate Periodikoak. Joera Orokorrak



## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Elementu kimikoen ezagupen oso taula periodikoan oinarritzen da
- Elementuen propietateak duten periodikotasuna abiapuntua izan zen
- Propietate hauek joera orokorrak aurkezten dituzte:
  - Erradio atomiko/ioniko
  - Ionizazio-energia
  - Afinitate elektronikoa
  - Elektronegatibitatea

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

### Hitzen glosarioa

- Zenbaki atomikoa:
- Zenbaki masikoa:
- Erradio atomikoa:
- Erradio kobalentea:
- Ionizazio-energia:
- Elektroafinitatea:
- Elektronegatibitatea:

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Petrucci, R. H., Harwood, W. S., Herring, F. G.: *Química General. Enlace Químico y Estructura de la Materia*, 8ª Ed. Pearson Prentice Hall, Madrid (2005)
- L. Meyer y V. Fernández Herrero, : *Química Inorgánica* 1ª Ed., Ariel Ciencia, Barcelona (2000)
- Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)
- Atkins & Jones: *Principios de Química, los caminos del descubrimiento*, 5º Ed. Médica Panamericana, Buenos Aires (2012)
- R. Chang, K. A. Goldsby: *Química*, 11ª Ed. McGraw-Hill, China (2013)

## 05 GAIA: EGITURA ATOMIKOA ETA TAULA PERIODIKOA

- Valenzuela, C. "Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia", Ed. Universidad de Granada, Granada (2002)
- C. E. Housecroft, Sharpe, A.: Química Inorgánica. Ed. Pearson Prentice Hall, YMadrid (2006)
- Sam Keam: *La cuchara menguante*. Ed. Ariel, Barcelona (2011)

## *06.GAIA: LOTURA KIMIKOA*

### *06.1: LOTURA IONIKOA*

### *06.2: LOTURA KOBALENTEA*

### *06.3: LOTURA METALIKOA*

### *06.4: KOHESIO-INDARRAK*

## *06.GAIA: LOTURA KIMIKOA*

### *06.1: LOTURA IONIKOA*

### *06.2: LOTURA KOBALENTEA*

### *06.3: LOTURA METALIKOA*

### *06.4: KOHESIO-INDARRAK*



## 06.GAIA: LOTURA IONIKOA

### 06.1: LOTURA IONIKOA

#### **6.1. Sarrera**

#### **6.2. Sare ionikoak**

6.2.1. Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

6.2.2. Anioien paketatze hexagonaletan oinarritutako sare ionikoak

#### **6.3. Erradio ionikoa**

#### **6.4. Ioi- tamainen araberako egitura-aurreikuspenak**

#### **6.5. Solido ionikoen estereokimika**

#### **6.6. Lotura ionikoen energia**

6.6.1. Born/Mayer-en ekuazioa

6.6.2. Born/Haber-en zikloa

#### **6.7. Ioiaren polarizazioa eta loturaren polaritatea**

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARRERA

- Gas nobleak izan ezik, gainerako elementuek konposatuak eratzen dituzte, mota desberdinetako loturak eratzen dituzte, atomoak lotuta mantentzen dituen indarraren arabera
- Indar-mota hauen arabera osatutako konposatuek izaera kobalentea edo elektrostatikoa /ionikoa izango dute
- Nolakoak dira lotura hauek?
- Zergatik eratzen dira lotura-mota desberdinak kasu bakoitzean?

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARRERA

Elementu guztiak, gas geldoak izan ezik, LOTURA KIMIKOAK eratzen dute

- Nola dira lotura kimiko hauek?

$\Delta\chi=0$	$0 < \Delta\chi < 1,613$	$\Delta\chi > 1,613$
A-B	$A \leftrightarrow B$	$A^- B^+$
kobalente ideala	kobalente polarra	ioniko ideala

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARRERA

Konposatua	F <sub>2</sub>	HF	LiF
$\Delta$ Elektronegatibitatea	4.0 – 4.0 = 0	4.0 – 2.1 = 1.9	4.0 – 1.0 = 3.0
Lotura-mota	Kobalente ez-polarra	Kobalente polarra	Ionikoa



F<sub>2</sub>

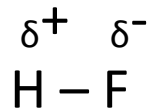


HF



LiF

Bi atomoen arteko elektronegatibitatearen aldea gero eta handiagoa izan, lotura polarragoa izango da



$\delta^+$  eta  $\delta^-$  ikurrak karga partzial positiboak eta negatiboak adierazten dute

## 06.1. LOTURA IONIKOA

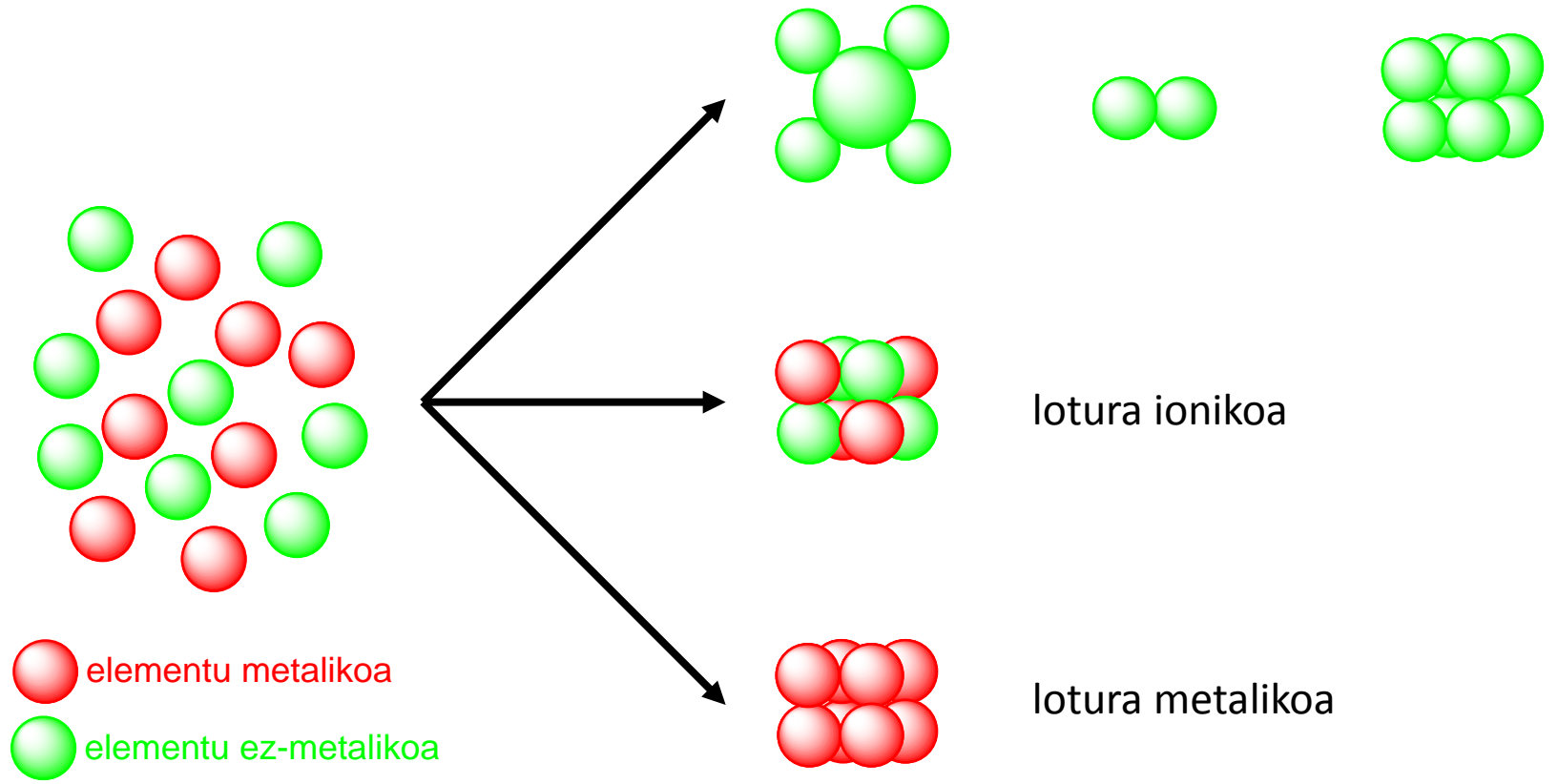
### SARRERA

Askotariko lotura-motak existitzen dira

- Lotura kobalentea
- Lotura ionikoa
- Lotura metalikoa
- Lotura intermolekularra / Kohesio indarrak

# 06.1. LOTURA IONIKOA

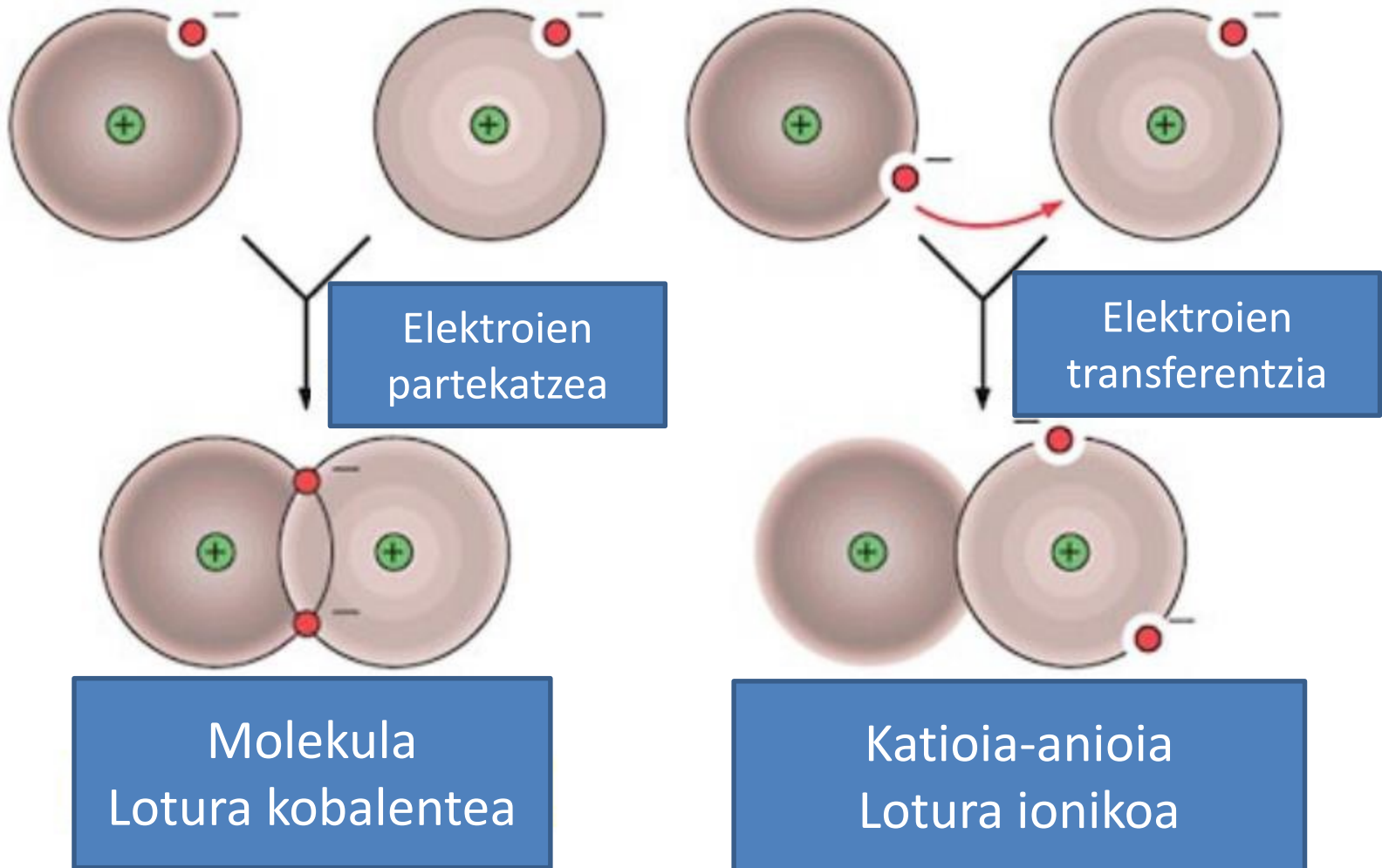
## SARRERA



# 06.1. LOTURA IONIKOA

## SARRERA

### LOTURA ERATZEKO BIDEA

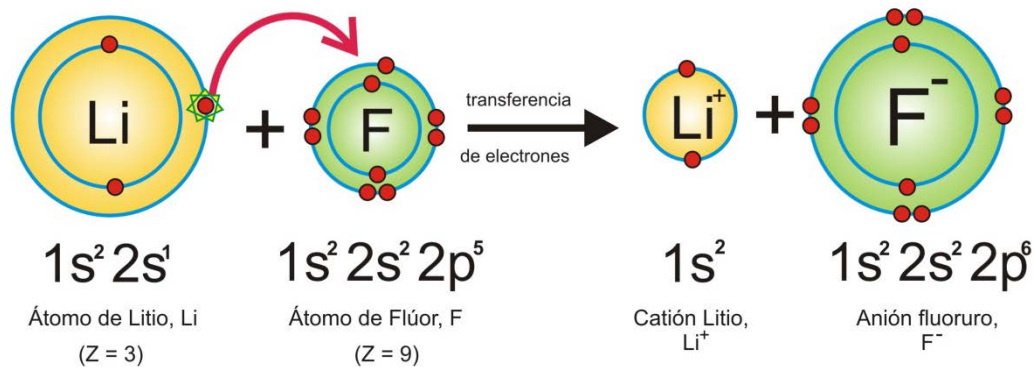


## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARRERA

# LOTURA IONIKOA.....

# ELEKTROIAK HARA ETA HONA !





06.GAIA: LOTURA IONIKOA

06.1: LOTURA IONIKOA

## **6.1. Sarrera**

## **6.2. Sare ionikoak**

6.2.1. Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

6.2.2. Anioien paketatze hexagonaletan oinarritutako sare ionikoak

## **6.3. Erradio ionikoa**

## **6.4. Ioien tamainen araberako egitura-aurreikuspenak**

## **6.5. Solido ionikoen estereokimika**

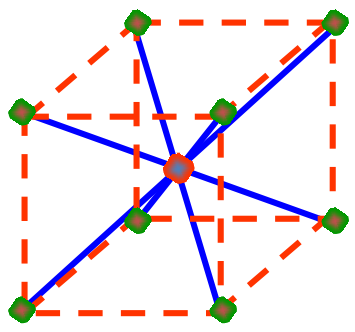
## **6.6. Lotura ionikoen energia**

6.6.1. Born/Mayer-en ekuazioa

6.6.2. Born/Haber-en zikloa

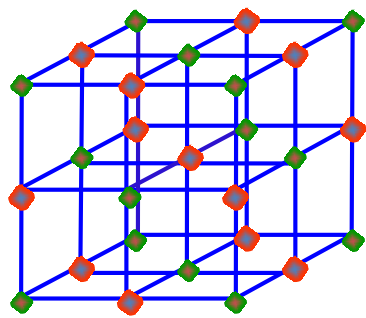
## **6.7. Ioien polarizazioa eta loturaren polaritatea**

# 06.1. LOTURA IONIKOASARE IONIKOAK SARE IONIKOAK



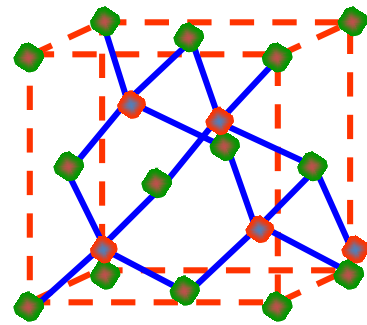
● Cs ● Cl

Cesio kloruroa



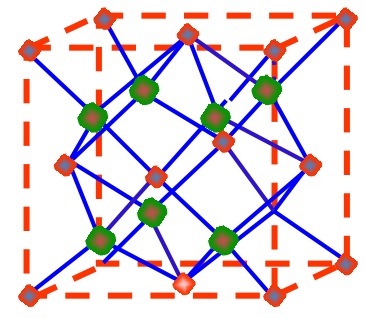
◆ Na ● Cl

Sodio kloruroa



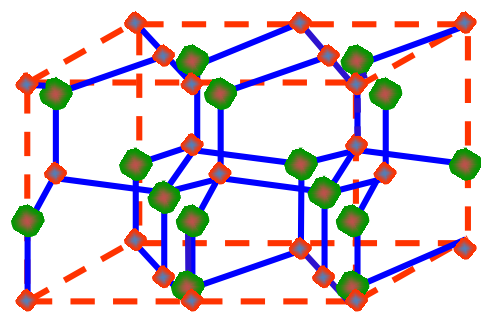
● S ◆ Zn

Zinc-blenda, ZnS



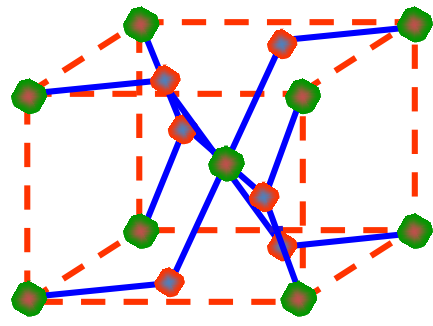
● F ◆ Ca

Fluorita, CaF<sub>2</sub>



◆ Zn ● S

Wurtzita, ZnS



◆ Ti ● O

Rutilo, TiO<sub>2</sub>

Zenbait egitura ioniko arruntak

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

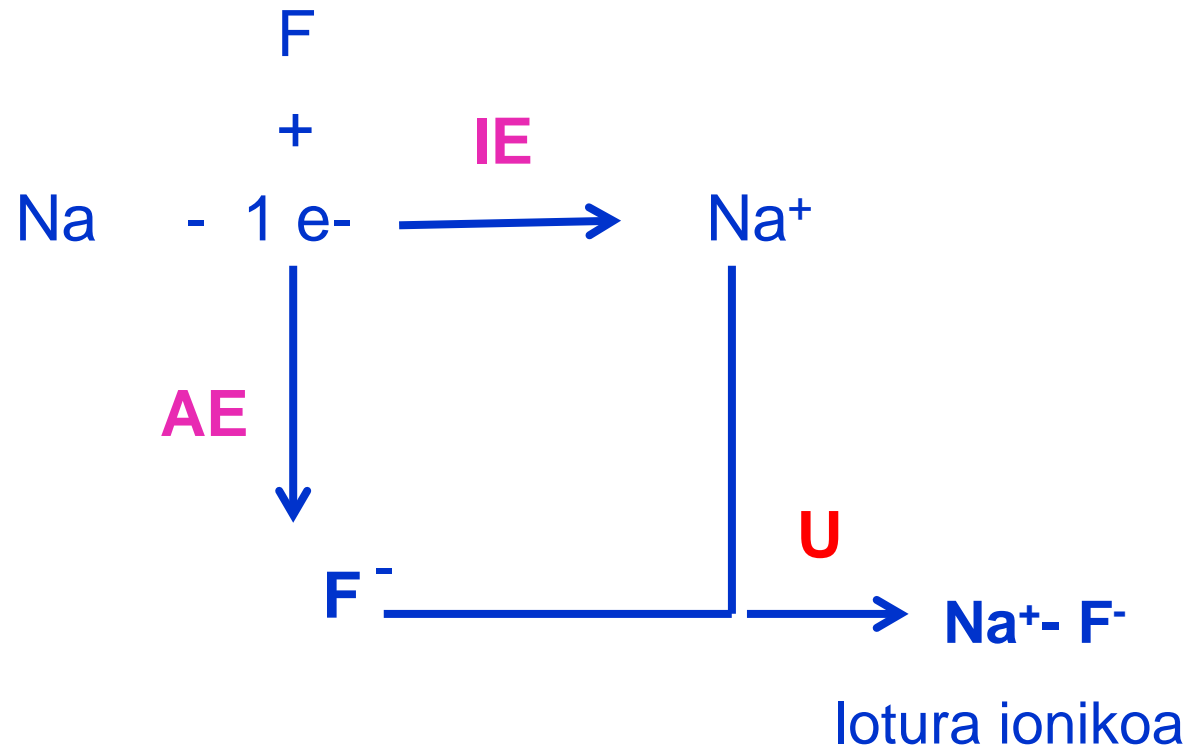
Lotura ionikoa ioien arteko **interakzio elektrostati**koan datza

- Konposatu ionikoak ioiez osatuta daude
- Ioien eraketa atomo neutroarekin hasita gertatzen da eta honakoak suertatuko dira:
  - Elektroien galera: ioi positiboak (katioiak)
  - Elektroien harrapaketa: ioi negatiboak (anioiak)
- Ioi hauek paketatzen dira SAREAK eratuz eta sare hauetako gurutzatze-puntuetan kokatzen dira

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

Sare ionikoak egitura egonkorak dira kargen artekoa den interakzioari esker



## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

#### Sare ionikoen osagaiak

- Katioiak eta anioiak monoatomikoak edota poliatomikoak izan daitezke:

Katioiak:  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$

Anioiak:  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $[\text{Fe}(\text{NCS})_6]^{3-}$

- Ioi hauek paketatzen dira konplexu samarrak diren sareak eratuz, ioien tamaina desberdinagatik
- Sare guztiak ez dute ezaugarria hau

Sare metalikoak?

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

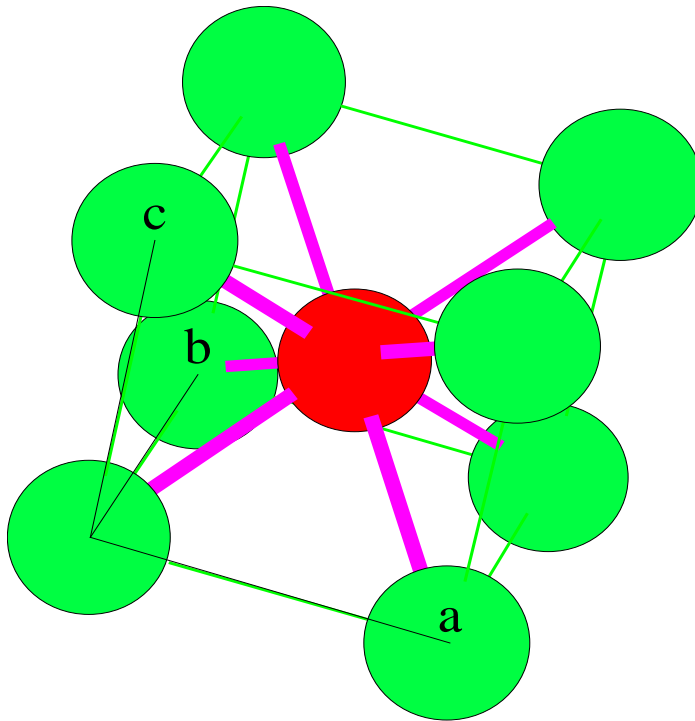
- Ioiak esfera uzkurtezinak, deformaezinak eta kargadunak diren esferatzat hartzen dira: **esfera- zurrunetako eredua**
- Hona hemen irizpideak paketatze ona edo “eraginkorra” izan dadin
  - Espazioaren aprobetxamendu maximoa
  - Anioien eta katioien arteko aldarapen minimoa izango da
  - Katioi-anioien arteko erakarpena maximoa izango da
  - Esfera guztiak kontaktuan egon behar dira
  - KZ posibleentarikoen artean handiena izango da

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

Koordinazio-indizea (KZ) definitzen da:

*IOI BAT DISTANTZIA BERDINERA INGURATZEN DUTEN  
KONTRAKO KARGAREN IOI KOPURUA*



Zein da KZ?

KZ=8

**CsCl**-aren sarea

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

Solido ionikoen paketatze-irizpideak ikusita, kristal-egitura deskribatzeko ondokoa suposatzen da:

- Ioi handienek (eskuarki, anioiek) eratutako sareen erreferentzia gisa hartzen dira
- Ioi txikienak (normalean, katioiak), sare horietako hutsuneetan daudela kontsideratzen da
- Sare ionikoak sailkatzeko anioien paketatzeak deskribatzen dira
- Mota askotako paketatzeak definitzen dira



## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

#### Ohikoen paketatzeak

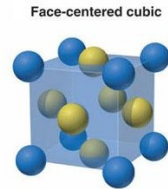
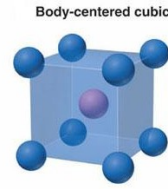
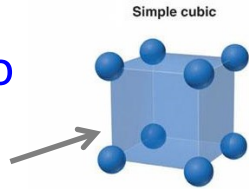
- Kubikoa gorputzean zentratuta (KZ: 8)
- Kubikoa aurpegietan zentratuta edo kubiko trinkoa (KZ:12)
- Hexagonal trinkoa (KZ: 12)
- Paketatze modurik eraginkorrena trinko motakoa da, beti KZ 12 baitu
- N anioiez osatutako paketatze kubiko trinko batean N hutsune oktaedrikoak eta  $2N$  hutsune tetraedrikoak daude
- Gogoratu....zer da Koordinazio-indizea(KZ)?

“Ioi bat distantzia berdina inguratzen duten kontrako kargaren ioi kopurua da”

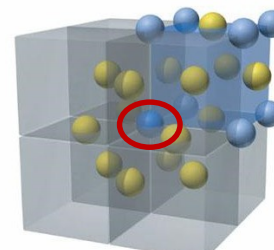
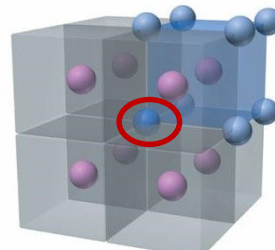
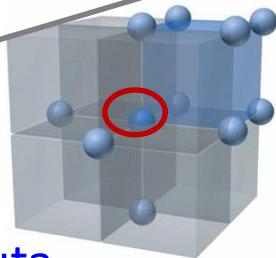
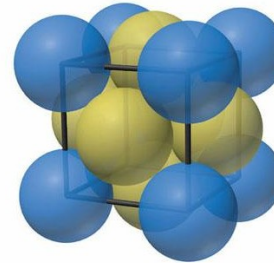
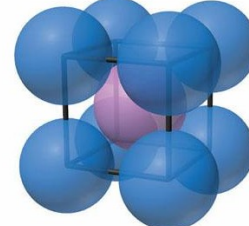
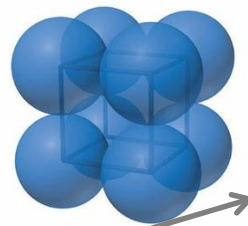
# 06.1. LOTURA IONIKOA

## SARE IONIKOAK

Paketatze kubiko simplea



Paketatze kubikoa aurpegietan zentratuta

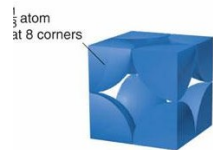


Paketatze Kubikoa gorputzaren zentratuta

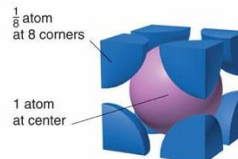
Coordination number = 6

Coordination number = 8

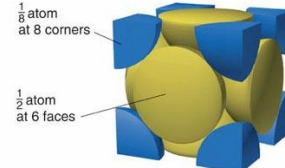
Coordination number = 12



Atoms/unit cell =  $(\frac{1}{8} \times 8) = 1$



Atoms/unit cell =  $(\frac{1}{8} \times 8) + 1 = 2$



Atoms/unit cell =  $(\frac{1}{8} \times 8) + (\frac{1}{2} \times 6) = 4$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

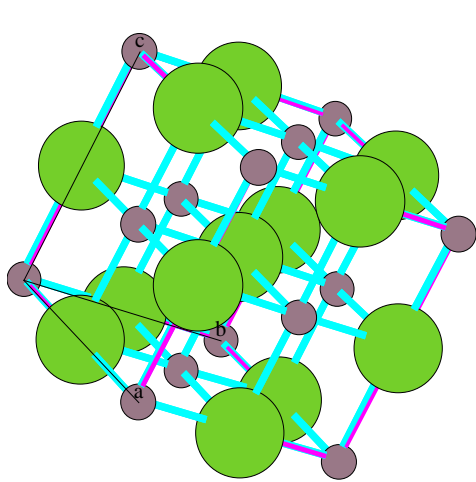
### SARE IONIKOAK

- Sare kristalinoek konposatu edo mineral-mota baten izena hartzen dute
- Koordinazio-indizearekin erlazionatzen dira, honela definituta:

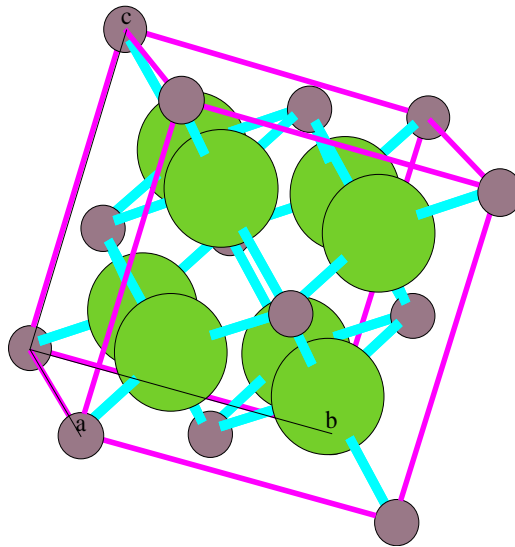
<b>K.I.</b>	<b>geometria</b>	<b>Konposatu - mota</b>
4	tetraedrikoa	Blenda-wurtzita, ZnS
6	oktaedrikoa	NaCl
8	kubikoa	CsCl

06.1. LOTURA IONIKOA  
SARE IONIKOAK

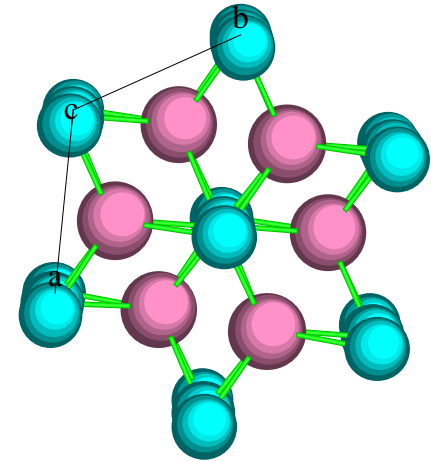
Paketatze kubikoa eta hexagonala



oktaedrikoa



tetraedrikoa



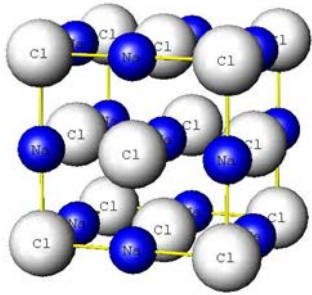
hexagonala

<https://auladetecnologias.blogspot.com.es/2009/09/redes-cristalinas-de-los-metales.html>

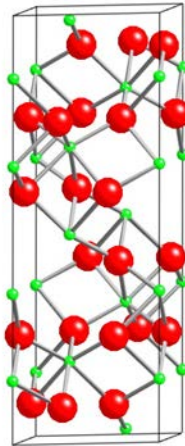
# 06.1. LOTURA IONIKOA

## SARE IONIKOAK

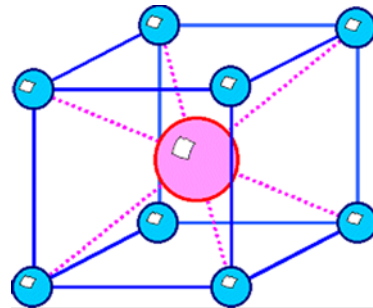
### Kristal ionikoetako hainbat sare



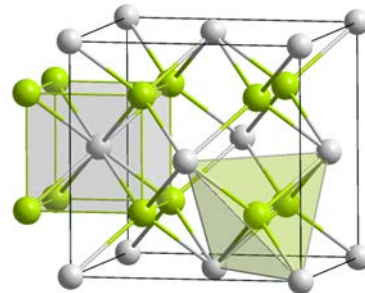
NaCl (6:6)



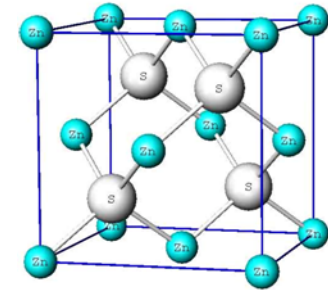
Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (6:4)



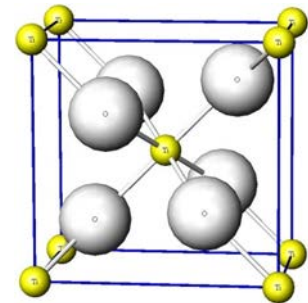
CsCl (8:8)



CaF<sub>2</sub> (8:4)



ZnS (4:4)



TiO<sub>2</sub> (6:3)

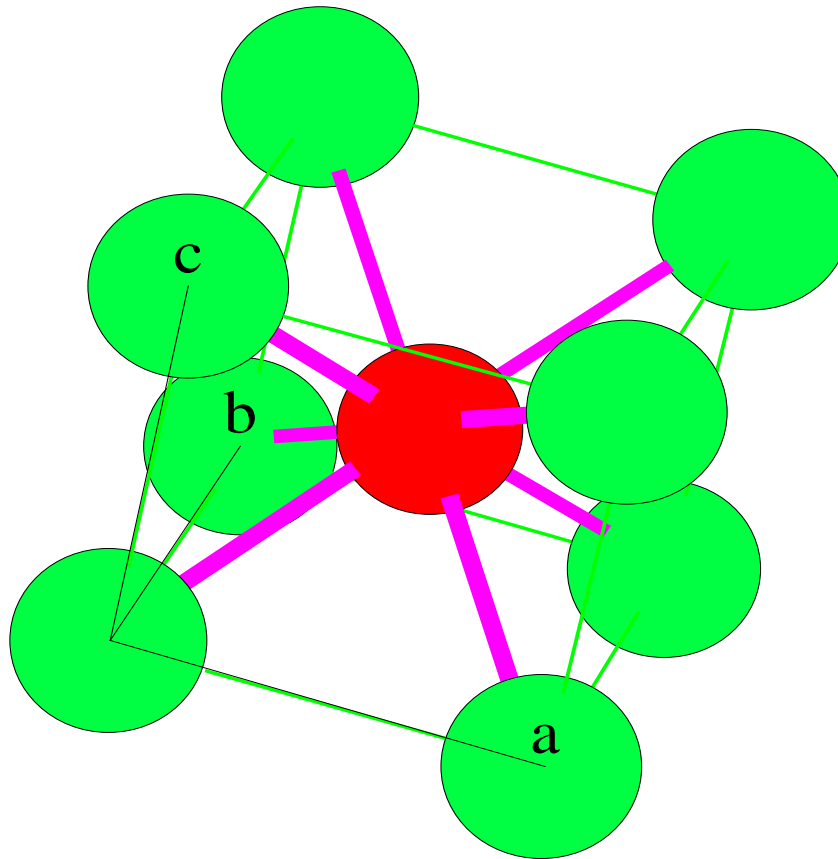
## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

**CsCl**-aren sarea

$$r_K/r_A > 0.752$$



Cl<sup>-</sup> kuboko erpinetan

Cs<sup>+</sup> hutsune kubikoetan

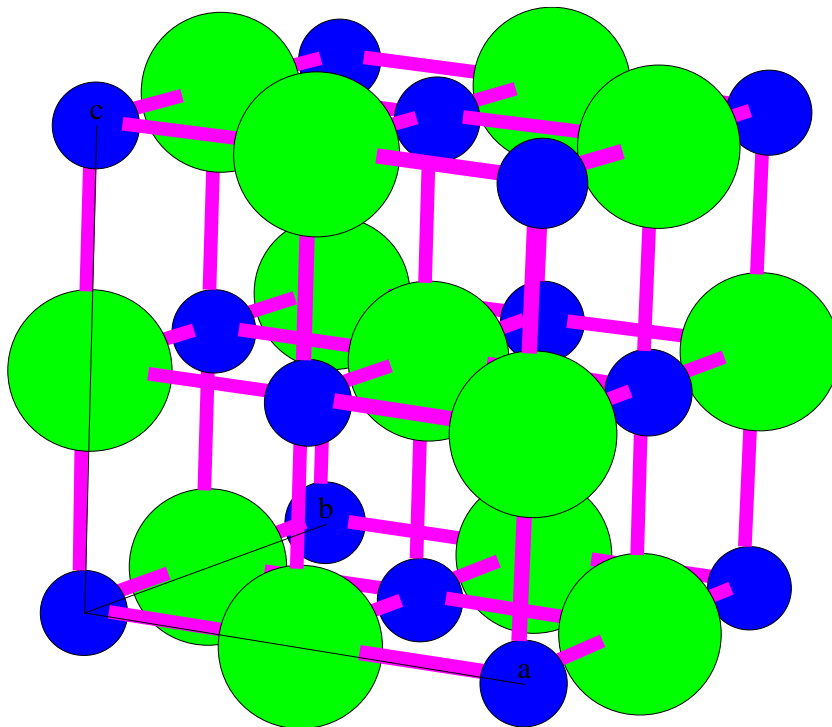
**KZ=8**

# 06.1. LOTURA IONIKOA

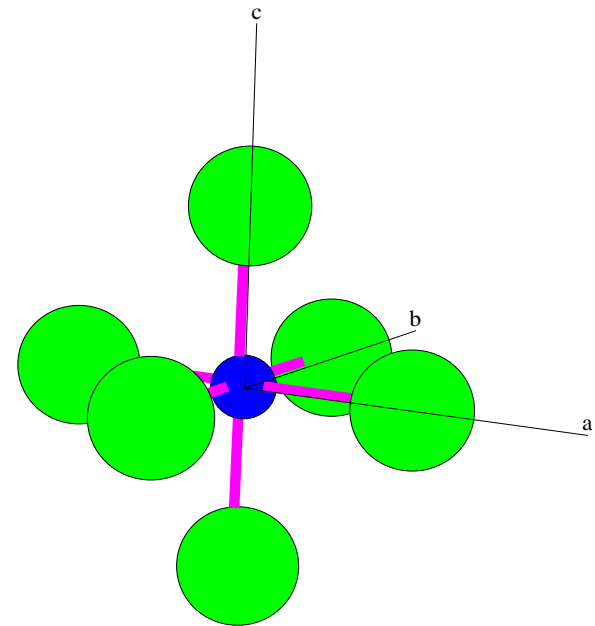
## SARE IONIKOAK

Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

**NaCl**-aren sarea  $r_K/r_A > 0.414$



**KZ=6**



**Na<sup>+</sup> hutsune okateedrikoetan**

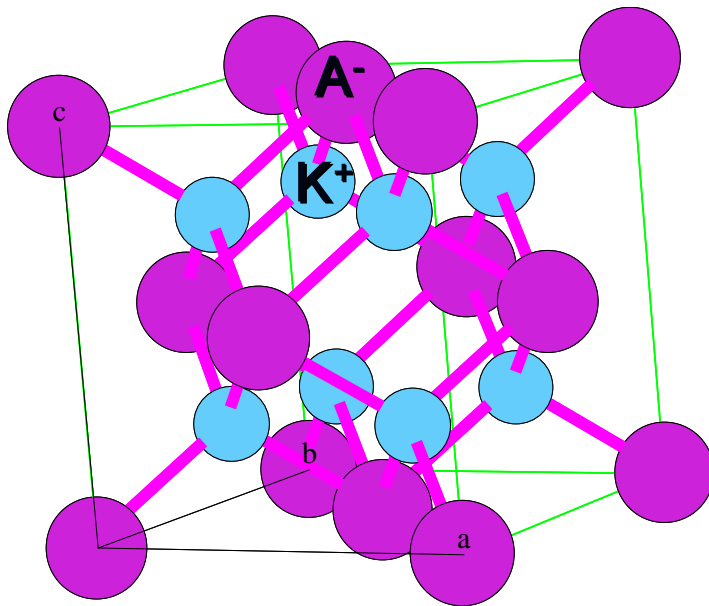
## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

$K_2A$  antifuorita

$$r_K/r_A > 0.752$$



Katioiak hutsune tetraedrikoetan

Anioiak F sarea (trinkoa)

$$KZ=4$$



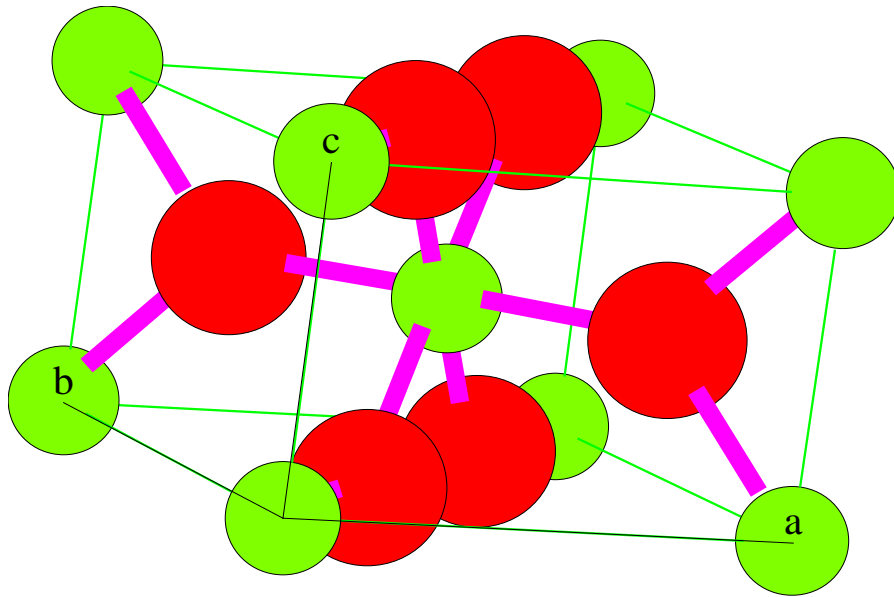
# 06.1. LOTURA IONIKOA

## SARE IONIKOAK

Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

TiO<sub>2</sub> errutiloa

$$r_K/r_A > 0.414$$



KZ=6

KZ=3

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

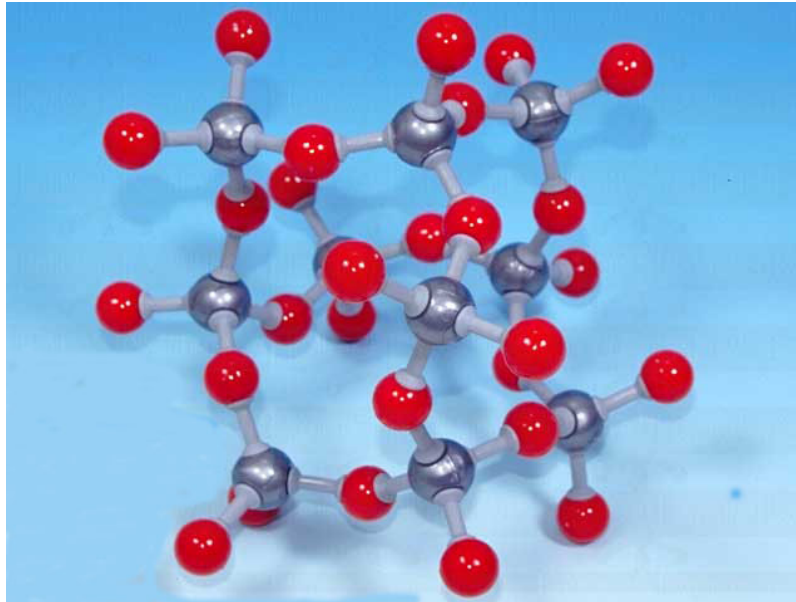
Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

$\text{SiO}_2$  kuartzoa

$\text{KZ}=4$

$\text{KZ}=2$

$r_{\text{K}}/r_{\text{A}} > 0.225$



<https://auladetecnologias.blogspot.com.es/2009/09/redes-cristalinas-de-los-metales.html>

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SARE IONIKOAK

Anioien paketatze hexagonal trinkoan oinarritutako sare ionikoak

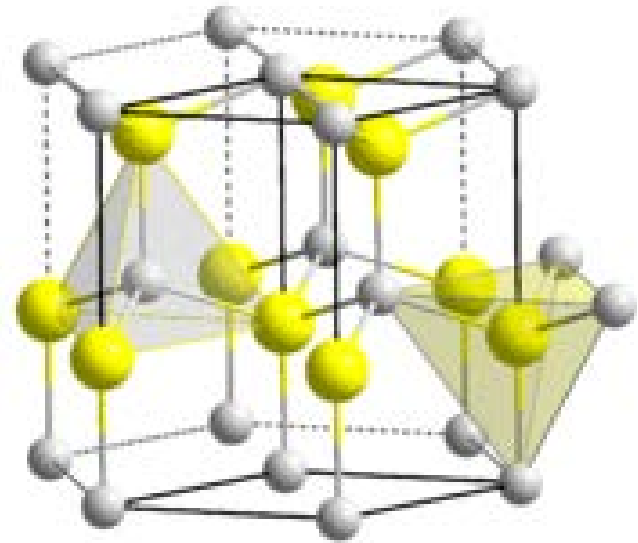
ZnS / **wurtzita**-aren sarea  $r_K/r_A > 0.225$

KZ=4 KZ=4

Katioiak hutsune tetraedrikoetan

Anioiak PHT(paketatze hexagonal trinkoa) sarea

[http://www.uv.es/lahuerta/indice\\_estructuras/indice\\_estructuras/describir/zns/index.htm](http://www.uv.es/lahuerta/indice_estructuras/indice_estructuras/describir/zns/index.htm)



## 06.GAIA: LOTURA IONIKOA

### 06.1: LOTURA IONIKOA

6.1. Sarrera

#### **6.2. Sare ionikoak**

6.2.1. Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

6.2.2. Anioien paketatze hexagonaletan oinarritutako sare ionikoak

#### **6.3. Erradio ionikoa**

#### **6.4. Ioiien tamainen araberako egitura-aurreikuspenak**

#### **6.5. Solido ionikoen estereokimika**

#### **6.6. Lotura ionikoen energia**

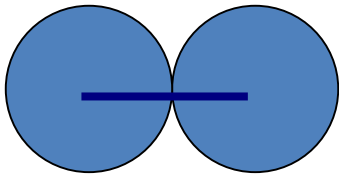
6.6.1. Born/Mayer-en ekuazioa

6.6.2. Born/Haber-en zikloa

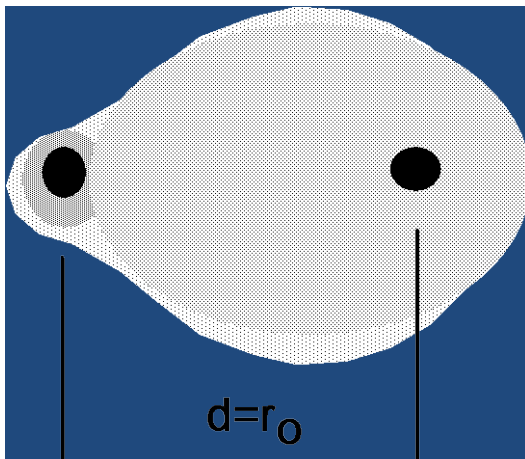
#### **6.7. Ioiien polarizazioa eta loturaren polaritatea**

## 06.1. LOTURA IONIKOA ERRADIO IONIKOAK

NORAINO HEDATZEN DA IOI BATEN GERUZA ELEKTRONIKOA?



Erradio atomikoak neurtzeko, atomo-mota berekoen arteko lotura erabiltzen da



Lotura ioniko batean, zer egin dezakegu?

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

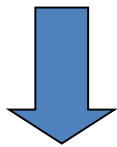
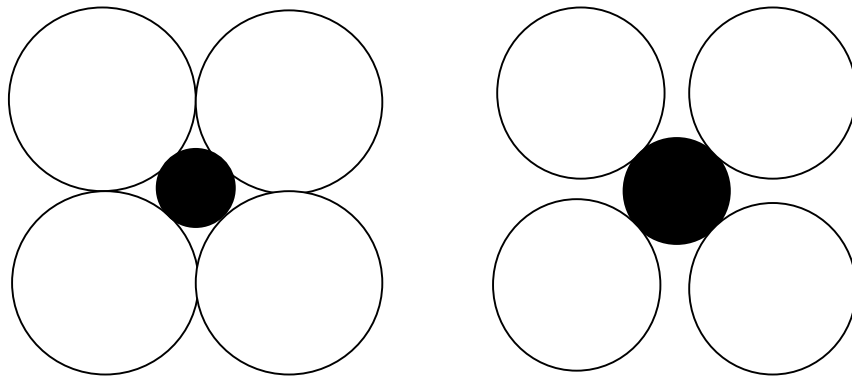
- Ioi baten erradio ionikoa beste ioi batera hurbiltze distantziarik minimoena da
- Ioi jakin baten erradioa ez da nahitaez konstante izan behar kristal guztietan, KZ-ren menpekoa baita
- Katio isoelektronikoez segida bat kontsideratuta, karga gero eta handiagoa izan erradioa orduan eta txikiagoa da
- Elementu berarentzat
  - karga handitzean erradio gutxitzen da
  - KZ handitzean erradioa handitzen da

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

#### Landé-ren metodoa (1920)

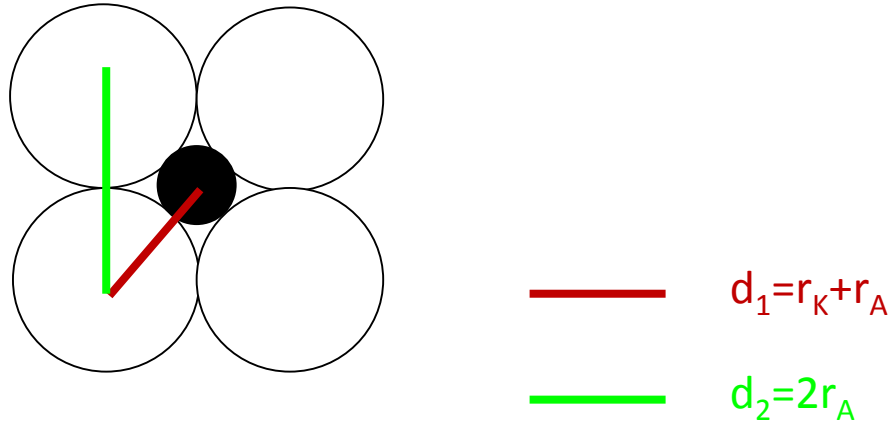
Sare ionikoetan anioien arteko ukipena gerta dadin, **anioia handia izan behar da; eta katioia, txikia.**



Anioi handia eta katioi txikia dauzkan sare bat aukeratuz gero, anioien arteko ukimena dagoela onartzea badago

## 06.1. LOTURA IONIKOA ERRADIO IONIKOAK

### Lande-ren metodoa (1920)



Landek Lil aukeratu zuen (NaCl-aren sarea), non

$$d_1 = 3.42 \quad \text{eta} \quad d_2 = 2.31 \text{ \AA}$$

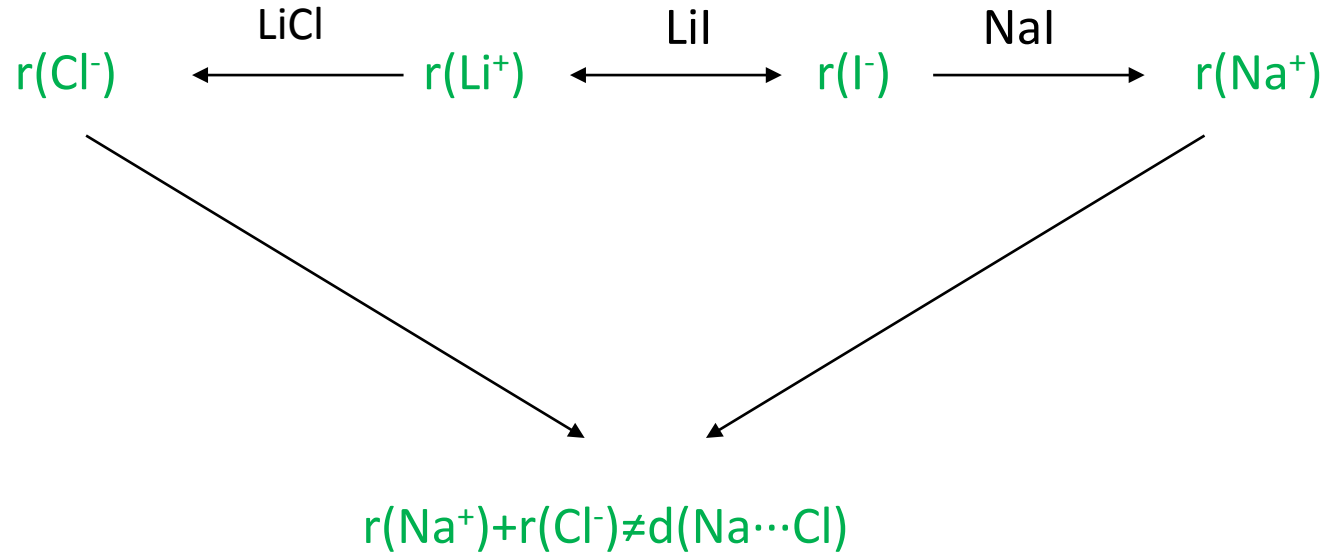
$$r(\text{I}^-) = d_1 / 2 = 1.71 \text{ \AA} \quad \text{eta} \quad r(\text{Li}^+) = d_2 - r(\text{I}^-) = 2.31 \text{ \AA} - 1.71 \text{ \AA} = 0.61 \text{ \AA}.$$



## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

#### Lande-ren metodoa (1920)



Hauxe ez da metodo ona!!!

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

#### Pauling-en metodoa (1927)

NaF, KCl, RbBr, CsI

Guztiek G.N.-ren egitura eta isoelektronikoak izan behar dira

$$r_{\text{ionikoa}} = f_n \left( \frac{1}{Z^*} \right) \quad \text{— Bere suposaketa: ioiak kontaktuan, esfera deformaezinak}$$

$r_o$  = lotura-distantzia

$$r_o = r_K + r_A \quad \text{non } r_K = \frac{C}{Z_K^*} \quad \text{eta } r_A = \frac{C}{Z_A^*}$$

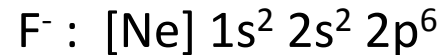
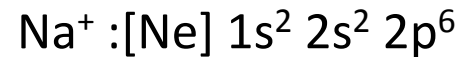
$$\text{beraz, } r_o = \frac{C}{Z_K^*} + \frac{C}{Z_A^*}$$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

Erreferentziazko erradioak kalkulatzeko, ioi isoelektronikoak hartzen dira

NaF konposatu ionikoarentzat



$$r_o(\text{NaF}) = 2.31 \text{ \AA}$$

Slater-en konstantea  $\sigma = 4.15$

Modu berean KCl, RbBr, eta CsI

$$Z^*(\text{Na}^+) = 11 - 4.15 = 6.85$$

$$Z^*(\text{F}^-) = 9 - 4.15 = 4.85$$



$$r_o = \frac{C}{Z_{\text{Na}^+}^*} + \frac{C}{Z_{\text{F}^-}^*} = 2.31 \Rightarrow C = 6.56$$

$$r_{\text{Na}^+} = \frac{6.56}{6.85} = 0.96 \text{ \AA} \quad \text{eta} \quad r_{\text{F}^-} = \frac{6.56}{4.85} = 1.35 \text{ \AA}$$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

#### **Goldschmidt-en metodoa (1927)**

$r(\text{O}^{2-})=1.32 \text{ \AA}$  onartuz gero,

MO oxidoetako katioien erradioak determinatu

ondoren MX konposatuetan anioien erradioak determinatu

#### **Shannon/Previtt-en metodoa**

Aurrekoaren antzekoa

$r(\text{O}^{2-})=1.40 \text{ \AA}$  onartuta

Kontuz!!

. Erradio ionikoak definitzeko eskala desberdinak erabil ditzakegu

. Datu hauek erabiliz gero ezin da eskala desberdinetako erradioak nahastu!!!

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

Ikusitakoa ioi guztietarako hedatzen da

$$r = \frac{C}{Z^*} m^{-(2/n-1)}$$

m=ioiaren karga

n=Born-en berretzailea

C=konstante bat

Z\*=karga nuklear eraginkorra



Pauling-en metodoan  
oinarritutako ekuazioa

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

Born-en berretzailea edo uzkurdura-koefizientea "n"

Konfigurazio elektronikoaren menpe dago

	[He]	[Ne]	[Ar] [Ar]3d <sup>10</sup>	[Kr] [Kr]4d <sup>10</sup>	[Xe] [Xe]5d <sup>10</sup>
n	5	7	9	10	11
anioiak	-	F <sup>-</sup> , O <sup>2-</sup> , N <sup>3-</sup>	Cl <sup>-</sup> , S <sup>2-</sup> , P <sup>3-</sup>	Br <sup>-</sup> , Se <sup>2-</sup> , As <sup>3-</sup>	I <sup>-</sup> , Te <sup>2-</sup> , Sb <sup>3-</sup>
katioiak	Li <sup>+</sup> , Be <sup>2+</sup>	Na <sup>+</sup> , Mg <sup>2+</sup> , Al <sup>3+</sup>	K <sup>+</sup> , Ca <sup>2+</sup> , Cu <sup>+</sup> , Zn <sup>2+</sup>	Rb <sup>+</sup> , Sr <sup>2+</sup> , Ag <sup>+</sup> , Cd <sup>2+</sup>	Cs <sup>+</sup> , Ba <sup>2+</sup> , Au <sup>+</sup> , Hg <sup>2+</sup>

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERRADIO IONIKOAK

Erradioen konparazioa

$$r = \frac{C}{Z^*} m^{-(2/n-1)}$$



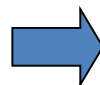
Ekuazio honetan ez dago adierazita K.Z.-aren eragina erradioan

$$\text{K.Z.} \uparrow \Leftrightarrow r_{\text{ionikoa}} \uparrow$$

K.Z.=6 ugariena da eta erreferentziatzat jotzen da, kalkuluak alkalino halogenuroetarako eginda daudelako, baina KZ= 4 eta KZ= 8 kalkulatzeko:

$$r_4 = 0.95r_6$$

$$r_8 = 1.036r_6$$



$$r_4(\text{Na}^+) = 0.99 \text{ \AA}$$

$$r_6(\text{Na}^+) = 1.02 \text{ \AA}$$

$$r_8(\text{Na}^+) = 1.16 \text{ \AA}$$

## 06.GAIA: LOTURA IONIKOA

### 06.1: LOTURA IONIKOA

#### 6.1. Sarrera

#### 6.2. Sare ionikoak

6.2.1. Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

6.2.2. Anioien paketatze hexagonaletan oinarritutako sare ionikoak

#### 6.3. Erradio ionikoa

#### 6.4. Ioen tamainen araberako egitura-aurreikuspenak

#### 6.5. Solido ionikoen estereokimika

##### 6.5.1. Ioen tamainen arteko erlazioak

##### 6.5.2. Ioen tamainen araberako egitura-aurreikuspenak

#### 6.6. Lotura ionikoen energia

6.6.1. Born/Mayer-en ekuazioa

6.6.2. Born/Haber-en zikloa

#### 6.7. Ioen polarizazioa eta loturaren polaritatea



## 06.1. LOTURA IONIKOA

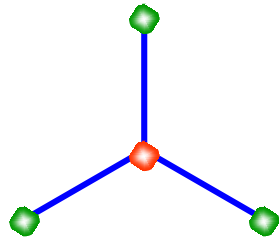
### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

#### Gogoratzeko .....

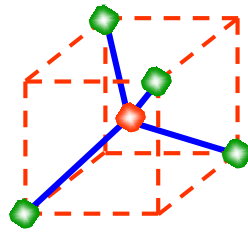
- ioiak: uzkurtezinak, deformaezinak eta kargadunak diren esferak dira
- kontrako seinuko karga-multzoa egonkorra izateko baldintza → karga bateko ioi guztiek kontrako karga duten guztiak ukitu behar dituzte.
- KZ posiblea den handiena izango da, aurreko baldintza betez.
- Ioi zentral baten inguruko posizioak aldarapen elektrostatikoak gutxitzen dituztenak dira (energia txikieneko egoera)
- Solido ionikoa elektrikoki neutroa izan behar da
- Estereokimika, zer da?  
Sare bateko atomoen espazio-kokapena

$MX_2$ Lineala	$MX_6$ Octaedrikoa	$MX_5$ Piramide karratua, bipiramide trigonala
$MX_3$ Laua-triangeluarra	$MX_8$ Kubikoa	$MX_7$ Oktaedro + estekatzaile bat
$MX_4$ Tetraedrikoa	$MX_{12}$ Dodekaedrikoa	$MX_9$ Prisma trigonala + hiru estekatzaile

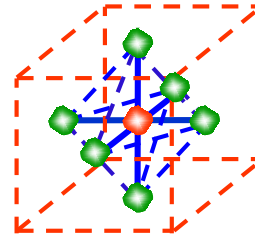
K.I. bakoitzari geometria teoriko bat dagokio



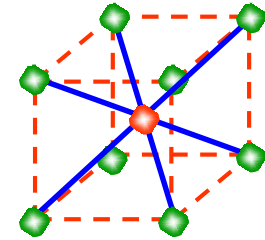
3



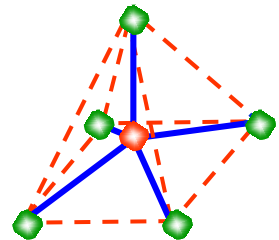
4



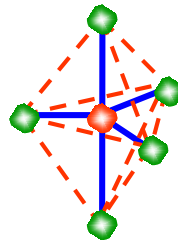
6



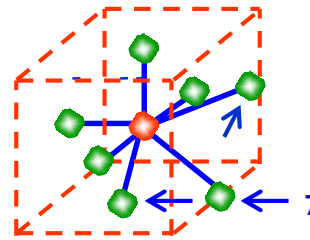
8



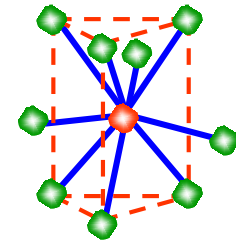
5



5



7



9

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

$r_K/r_A$  parametroa, parametro erradiala

- Sare hauen konplexutasuna ikusita egiturazko analisi teorikoak garatzen dira
- Anioiak eta katioiak esferikotzat jotzen ditugu, analisi teorikoak egiteko
- Definitzen dira:  $r_K$  = katioaren erradioa  
 $r_A$  = anioiaren erradioa
- $r_K=r_A \Rightarrow$  tamaina bereko esferak paketatuta beharra dago

$$\rho = \frac{r_+}{r_-}$$

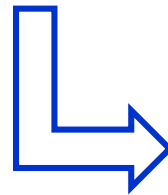
## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

- Ohikoena solido ionikoetan

$r_k < r_A \Rightarrow$  katioiaren inguruan ez dago leku  
fisikorik 12 anioi kokatzekoa

- Solido ionikoetan parametro eradiala  $r_k/r_A < 1$

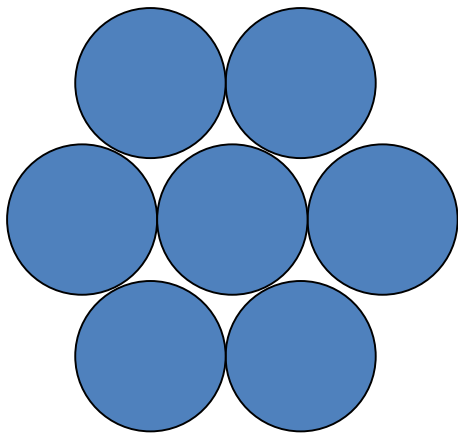


K.Z. < 12

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

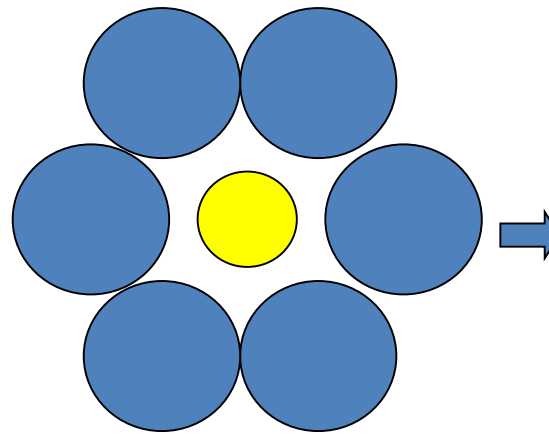
loi-tamainen arteko erlazioak,  $r_K/r_A$  parametroa determinatzen du



PHT eta PKT

Plano trinko bat

$$r_K/r_A=1$$



Esfera bat txikiagoa izanez gero,  
hutsuneak geratzen dira

Honela ez da betetzen  
espazioaren  
aprobetxamendu  
maximoaren irizpidea

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

- Pentsa dezagun...

ZENBAT ANIOI KOKA DAITEZKE KATIOI BATEN INGURUAN, KATIOIA ANIOIA BAINO TXIKIAGOA BADA?

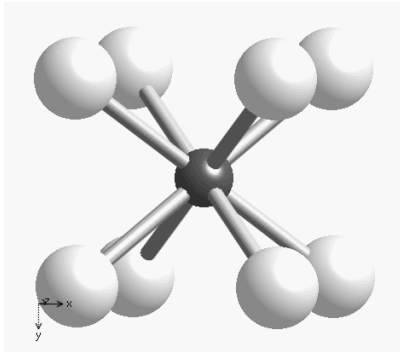
- Solido errealetako koordinazio-zenbakien eta parametro erradialen arteko erlazioa miatzen da.
- Galdera hau planteatuko dugu:

ZEIN DA  $r_K/r_A$  PARAMETROA GEOMETRIA BAKOITZEAN?

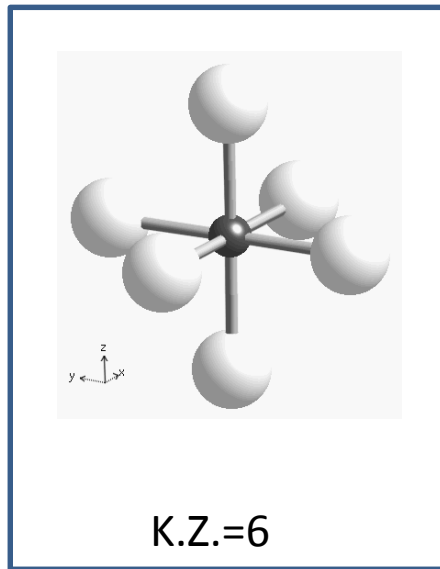
- Sareen estereokimika parametroa erradialaren arabera sailkatzen dira
- Honen bidez egitura teorikoaren arrazionalizazioa lortzen da

06.1. LOTURA IONIKOA  
SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

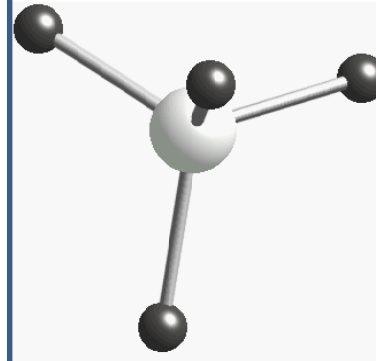
GEOMETRIAK ETA KOORDINAZIO-ZENBAKIAK



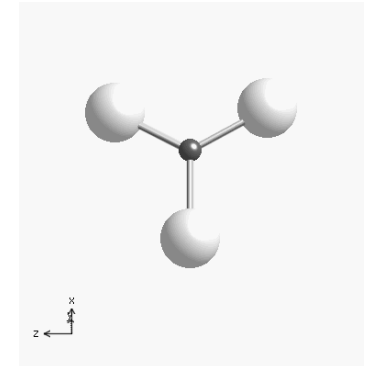
K.Z.=8



K.Z.=6



K.Z.=4



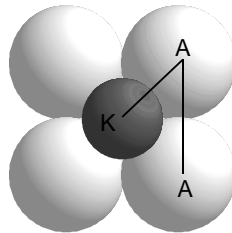
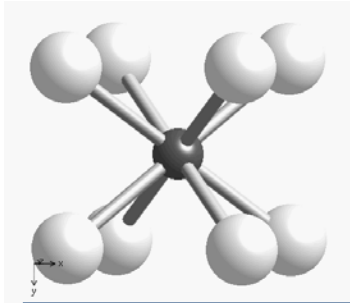
K.Z.=3

Ohikoen estereokimikak

# 06.1. LOTURA IONIKOA

## SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

K.Z. = 8



$$2r_A = a$$

$$2(r_A + r_K) = \sqrt{3}a$$

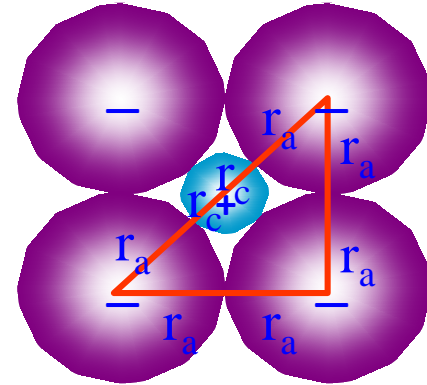
$$\frac{r_K}{r_A} = \frac{\sqrt{3}d/2 - a/2}{a/2} = \frac{\sqrt{3}-1}{1} = 0.752$$

$$\frac{r_k}{r_a} = 0,752$$

Kl 6 izateko beheko muga:  $r_k/r_a = 0,414$

Kl 6 izateko goiko muga:  $r_k/r_a = 0,752$

K.Z. = 6



$$2r_A = a$$

$$2(r_A + r_B) = \sqrt{2}a$$

$$\frac{r_K}{r_A} = \frac{\sqrt{2}a/2 - a/2}{a/2} = \frac{\sqrt{2}-1}{1} = 0.414$$

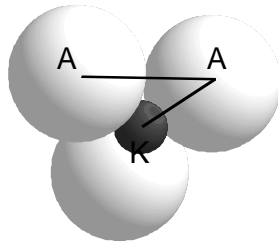
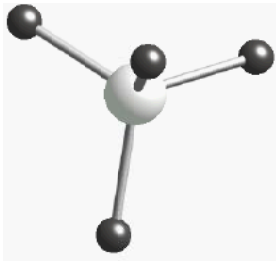
$$\frac{r_k}{r_a} = \frac{1 - \cos 45^\circ}{\cos 45^\circ} = 0,414$$



## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

K.Z. = 4



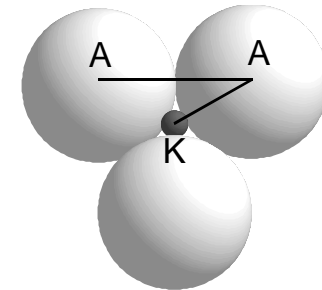
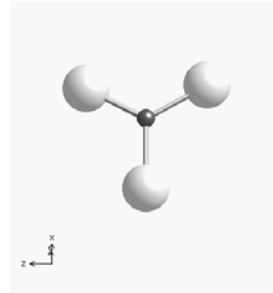
$$2r_A = \sqrt{2}a$$

$$2(r_A + r_B) = \sqrt{3}a$$

$$\frac{r_K}{r_A} = \frac{\sqrt{3}a/2 - \sqrt{2}a/2}{\sqrt{2}a/2} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} - 1 = 0.225$$

$$\frac{r_k}{r_a} = 0,225$$

K.Z. = 3



$$2r_A = a$$

$$3(r_A + r_B) = \sqrt{3}a$$

$$\frac{r_K}{r_A} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{3}a - \frac{1}{2}a}{\frac{1}{2}a} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{3} - \frac{1}{2}}{\frac{1}{2}} = \frac{2\sqrt{3}}{3} - 1 = 0.155$$

$$\frac{r_k}{r_a} = 0,155$$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

K.Z.	12	8	6	4	3	2
$r_K/r_A$ minimoa	1	0.752	0.414	0.225	0.155	< 0,155
Geom.	Kubo- oktaedrikoa	kubikoa	Oktaedr.	Tetraedr.	Triangel.	lineala

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

#### Erradioak eta Koordinazio indizeen arteko erlazioa

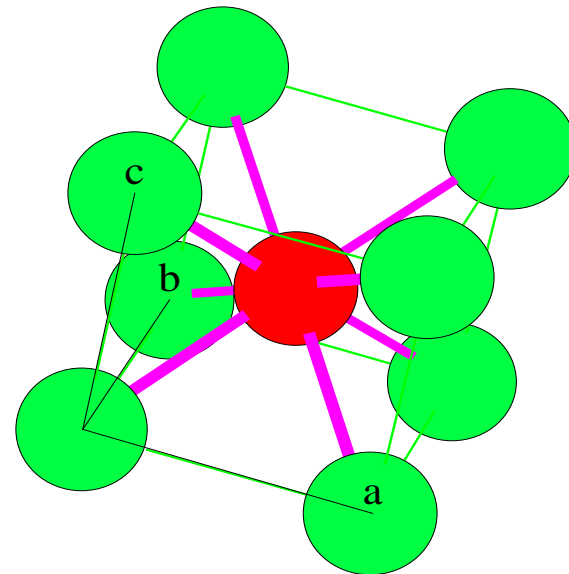
Koordinazio-zenbakia	Geometria	$r_k / r_a$	Egitura
AB			
2	Lineala	< 0,155	CO <sub>2</sub> (molecularra)
3	Trigonala	0,155-0,225	(NB) <sub>x</sub> (kobalentea)
4	Tetraedrikoa	0,225-0,414	ZnS Wurtzita, blenda, (kuartzoa)
	Lau-karratua	0,414-0,73	
6	Oktaedrikoa	0,414-0,752	NaCl (errutilo)
8	Kubikoa	0,752-1,00	CsCl, (Fluorita)
12	Dodekaedrikoa	> 1,00	

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

Egitura–mota eta erradioen arteko erlazioa AB konposatueta azter ditzagun aurrekoa betetzen den edo ez egiaztatzeko

AB motako sare kubikoa $r_K / r_A > 0.732$	
CsCl	0.91
CsBr	0.84
CsI	0.75



Kasu honetan datu esperimentalak eta aurrean teorikoak bat daude


## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

Aurrekoa beti betetzen da?

CsCl-ren sarea Kubikoa $1 > r_k / r_a > 0,732$		NaCl-ren sarea Oktaedrikoa $0,732 > r_k / r_a > 0,414$				ZnS, Blendaren sarea Tetraedrikoa $0,414 > r_k / r_a > 0,225$			
CsCl	0,91	<u>KF</u>	<u>1,00</u>	KCl	0,73	NaCl	0,54	MgTe	0,37
CsBr	0,84	<u>SrO</u>	<u>0,96</u>	SrS	0,73	NaBr	0,50	BeO	0,26
CsI	0,75	<u>BaO</u>	<u>0,94</u>	RbI	0,68	MgS	0,49	<u>BeS</u>	<u>0,20</u>
		<u>RbF</u>	<u>0,89</u>	KBr	0,68	NaI	0,44	<u>BeSe</u>	<u>0,18</u>
		<u>RbCl</u>	<u>0,82</u>	BaTe	0,68	LiCl	0,43	<u>BeTe</u>	<u>0,17</u>
		<u>BaS</u>	<u>0,82</u>	KI	0,68	<u>MgSe</u>	<u>0,41</u>		
				MgO	0,59	<u>LiBr</u>	<u>0,40</u>		
						<u>LiI</u>	<u>0,35</u>		

Katioia handienetarikoen artean dago (ez suposatzen den hain txikia)

Anioia txikienetarikoen artean dago (ez suposatzen den ez hain handia)  Paketatze txarragoa

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

Eta  $AB_2$  konposatuetan , zer gertatzen da?

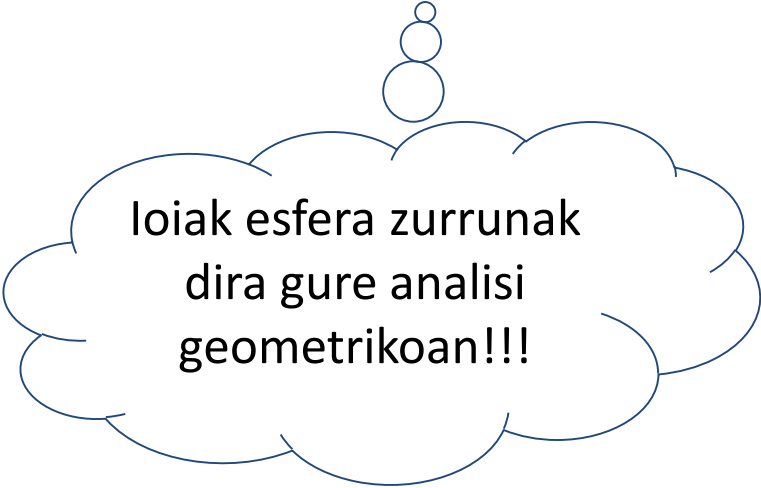
Fluoritaren sarea Kubikoa $1 > r_c / r_a > 0,732$	Rutiloren sarea Oktaedrikoa $0,732 > r_c / r_a > 0,414$		Kuartzoren sarea Tetraedrikoa $0,414 > r_c / r_a > 0,225$
<u>BaF<sub>2</sub></u> <u>1,05</u>	MnF <sub>2</sub> 0,66	MgF <sub>2</sub> 0,58	GeO <sub>2</sub> 0,36
PbF <sub>2</sub> 0,99	PbO <sub>2</sub> 0,64	<u>MnO<sub>2</sub></u> <u>0,39</u>	SiO <sub>2</sub> 0,29
SrF <sub>2</sub> 0,95	FeF <sub>2</sub> 0,62	<u>GeO<sub>2</sub></u> <u>0,36</u>	BeF <sub>2</sub> 0,26
HgF <sub>2</sub> 0,84	CoF <sub>2</sub> 0,62		
ThO <sub>2</sub> 0,83	ZnF <sub>2</sub> 0,62		
CaF <sub>2</sub> 0,80			

## 06.1. LOTURA IONIKOA

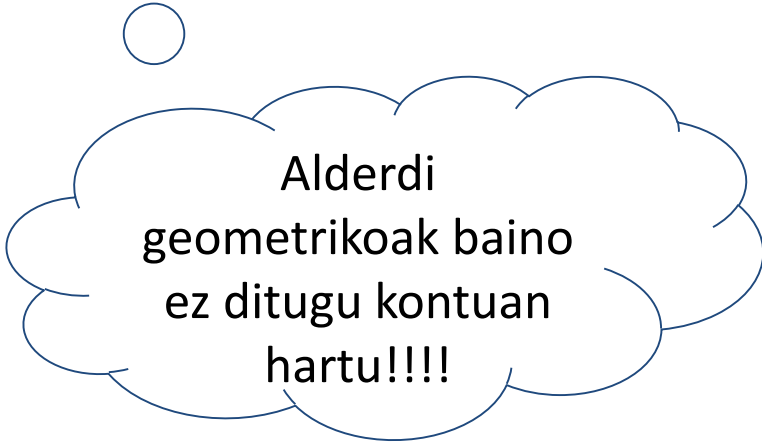
### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

Ondorioaz:

- Aurreanak betetzen dira OROKORREAN
- Betetzen ez direnean...
  - . Sare berean katioi handiak eta anioi txikiak sare daude
  - . Sarean katioi txiki-txikiak daude



loiak esfera zurrinak  
dira gure analisi  
geometrikoan!!!



Alderdi  
geometrikoak baino  
ez ditugu kontuan  
hartu!!!!

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### SOLIDO IONIKOEN ESTEREOKIMIKA

Arrazoiak betegabekoak azaltzeko???

- **Loturak erabat ionikoak ez izatea** ( izan ohi da)

Hain zuzen ere, horrek F.P.-en aldakunta eta konposatu ionikoen disolbagarritasunak bermazen du

- **loiak esfera perfektuak eta deformaezinak ez izatea**

Probablea dena eta uzkuratun-koefizienteak egiaztatuta

- **Erradio ionikoen baloreak zuzenak ez izatea**

Aztarnak daude



## 06.GAIA: LOTURA IONIKOA

### 06.1: LOTURA IONIKOA

#### 6.1. Sarrera

#### 6.2. Sare ionikoak

6.2.1. Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

6.2.2. Anioien paketatze hexagonaletan oinarritutako sare ionikoak

#### 6.3. Erradio ionikoa

#### 6.4. Ioien tamainen araberako egitura-aurreikuspenak

#### 6.5. Solido ionikoen estereokimika

#### 6.6. Lotura ionikoen energia

6.6.1. Born/Mayer-en ekuazioa

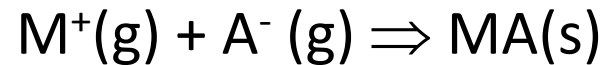
6.6.2. Born/Haber-en zikloa

#### 6.7. Ioien polarizazioa eta loturaren polaritatea

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

Ikuspuntu teorikotik solido ioniko bat era dadin, gas egoeran dauden anioiak eta katioiak paketatu behar dira



Prozesu honetan askatzen denari **sare-energia ( $U / E_s$ )** deritzo

Sare-energia zaila da kalkulatzeko erakarpenak eta aldarapenak aldi berean gertatzen dira eta

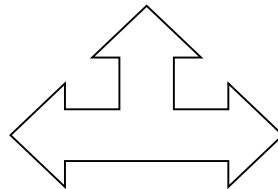
06.1. LOTURA IONIKOA  
LOTURA IONIKOEN ENERGIA

SARE-ENERGIA ( $U$ ,  $E_s$ ): Kristal ionikoaren mol baten eraketa prozesuan askatzen den energia da, egoera gaseosoan dauden ioietatik abiatuta

↑  $E_R$ , ↑ egonkortasuna

$U / E_s$ -ren kalkuluak

Kalkulu teorikoa  
Max Born/Alfred  
Lande-ren ekuazioa  
(1918-1924)



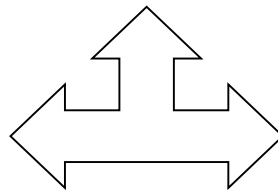
Kalkulu termodinamikoa  
Max Born/FritzHaber-ren  
zikloa (1918)

06.1. LOTURA IONIKOA  
LOTURA IONIKOEN ENERGIA

SARE-ENERGIA ( $U$ ,  $E_s$ ): Kristal ionikoaren mol baten eraketa prozesuan askatzen den energia da, egoera gaseosoan dauden ioietatik abiatuta

$U / E_s$ -ren kalkuluak

Kalkulu teorikoa  
Max Born/Alfred  
Lande-ren ekuazioa  
(1918-1924)



Kalkulu termodinamikoa  
MaxBorn/FritzHaber-ren  
zikloa (1918)

## 06.1. LOTURA IONIKOA

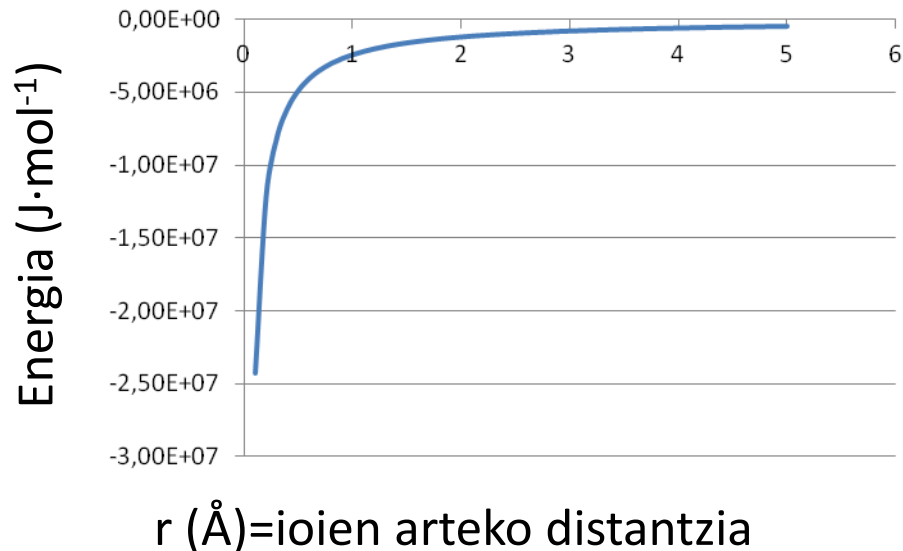
### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

Born-Landeren ekuazioa

Teoria honen arabera bi ekarpen daude sare energian:

- Ioen arteko interakzio coulombiarrak:erakarpen eta aldarapen guztiak( $E_e$ )

$E_e(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1})$ =ioien arteko erakarpen eta aldarapen guztiak

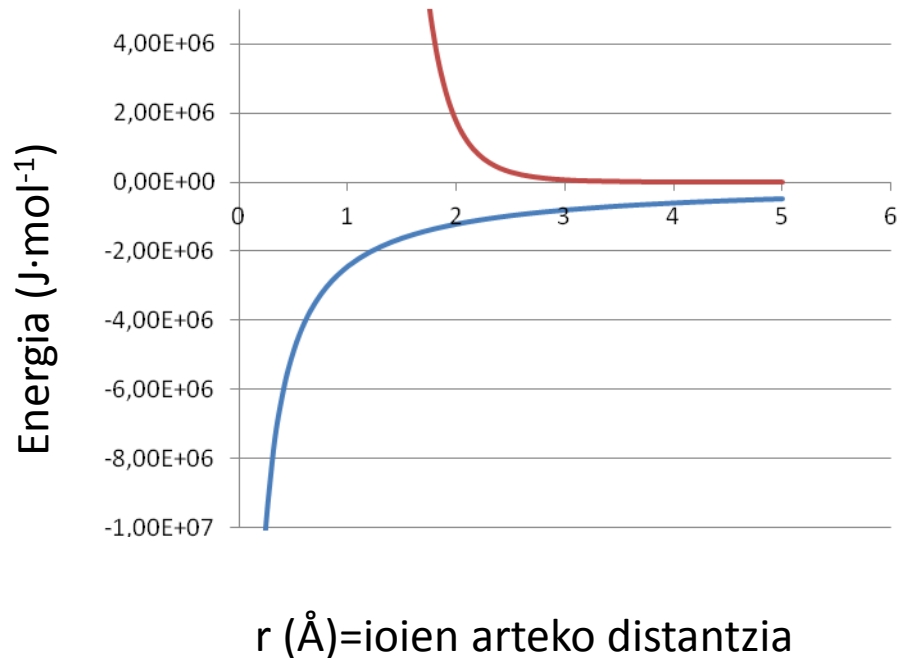


## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$E_e$ =ioien arteko erakarpen eta aldarapen guztiak

$E_a$ =geruza elektronikoen arteko aldarapenak

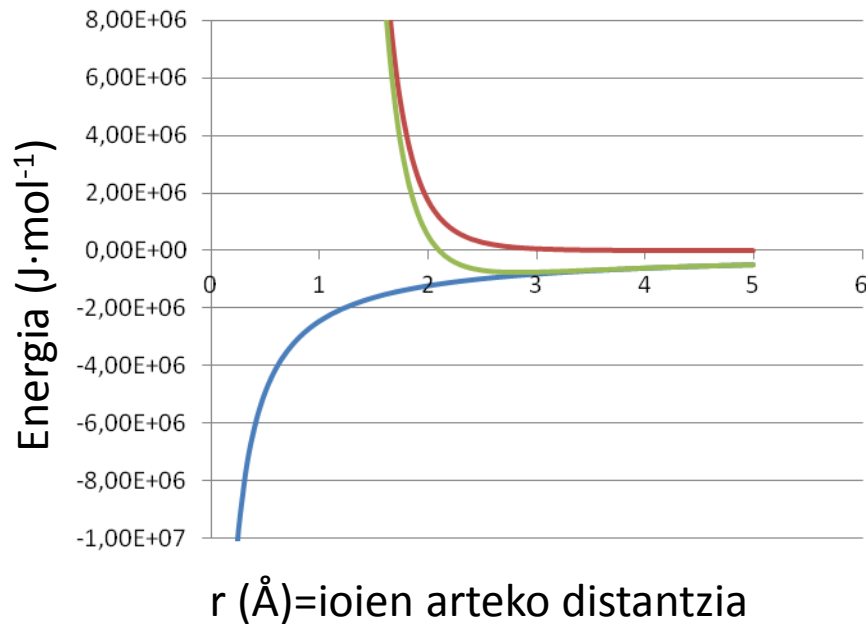


## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$E_e$ =ioien arteko erakarpen eta aldarapen guztiak

$E_a$ =geruza elektronikoen arteko aldarapenak



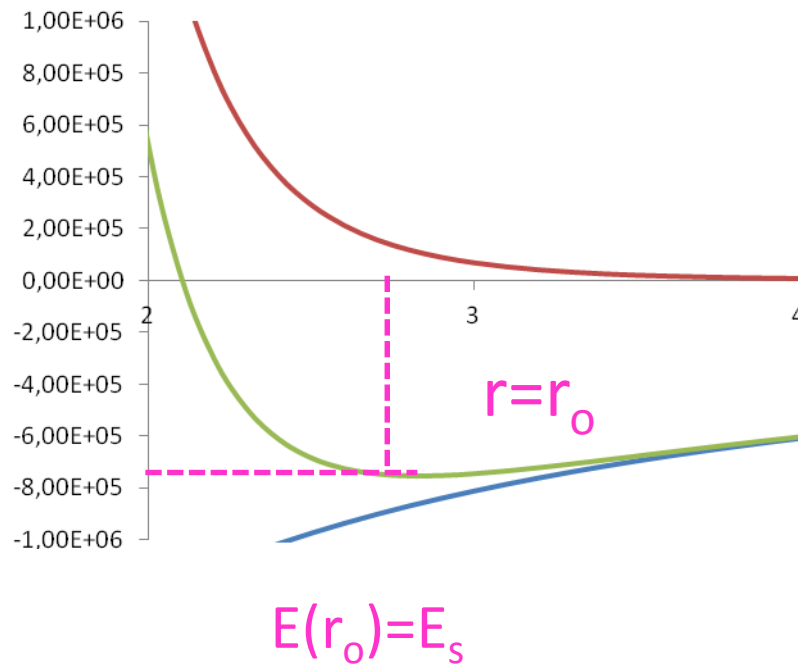
$$E_{\text{osoa}} = E_e + E_a$$

# 06.1. LOTURA IONIKOA

## LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$E_e$ =ioien arteko erakarpen eta aldarapen guztiak

$E_a$ =geruza elektronikoen arteko aldarapenak



$$E_{\text{osoa}} = E_e + E_a$$

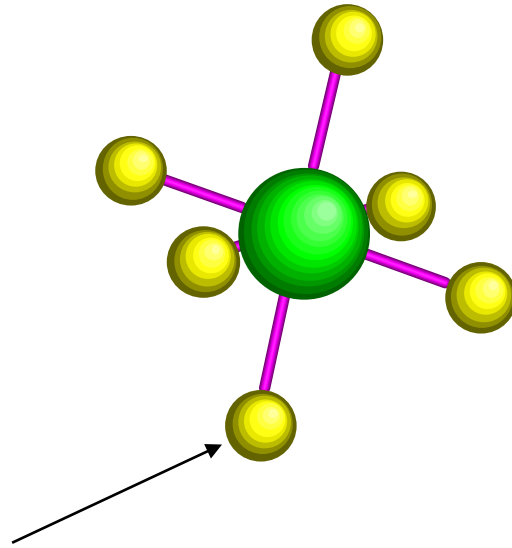


## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

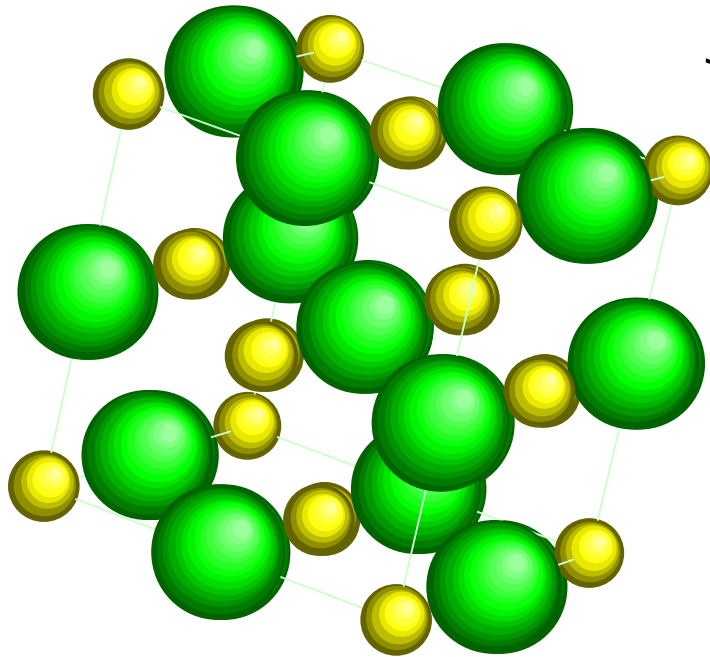
$E_e$ =ioien arteko erakarpen eta aldarapen guztiak

Demagun,  $\text{Cl}^-$  anioi baten inguruan  $\text{Na}^+$  katioiak ordenatzen hasten direla...



NaCl-aren sarean, 6  $\text{Na}^+$  katioi daude  $r$  distantzian

06.1. LOTURA IONIKOA  
LOTURA IONIKOEN ENERGIA



Horrela jarraituz,....

Jarraian, 12 Cl<sup>-</sup> anioi kokatzen dira  $\sqrt{2}r$  distantzian

Jarraian, 8 Na<sup>+</sup> katioi kokatzen dira  $\sqrt{3}r$  distantzian

$r$  distantziara: 6 katioi (erakarpena)

$\sqrt{2} r$  distantziara: 12 anioi (aldarapena)

$\sqrt{3} r$  distantziara: 8 katioi (erakarpena)

$2r$  distantziara: 6 anioi (aldarapena)

$\sqrt{5} r$  distantziara: 24 katioi (erakarpena)

.....

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

. Erakarpen eta aldarapen osoak kontuan hartzeko ez ahaztu:  $E_e = K \cdot \frac{q_1 q_2}{d}$

$$E_e = \sum \left( -\frac{q^+ q^-}{d_{+-}} + \frac{q^- q^-}{d_{--}} \right)$$

$$q^+ = e \cdot Z_K \text{ eta } q^- = -e \cdot Z_A$$

$e$ =elektroiaren karga;  $Z_K$  eta  $Z_A$  = ioien karga

Z ez da zenbaki atomikoa!!!!

. Kontuan izan NaCl-rako:

$$Z_A = Z_K$$

$$E_e = \sum \left( -\frac{(eZ)_K (eZ)_A}{d_{K-A}} + \frac{(eZ)_A (eZ)_A}{d_{A-A}} \right)$$

$$E_e = \sum \left( -\frac{e^2 Z^2}{d_{K-A}} + \frac{e^2 Z^2}{d_{A-A}} \right)$$

06.1. LOTURA IONIKOA  
 LOTURA IONIKOEN ENERGIA

- r distantziara: 6 katioi (erakarpena)
- √2 r distantziara: 12 anioi (aldarapena)**
- √3 r distantziara: 8 katioi (erakarpena)
- 2r distantziara: 6 anioi (aldarapena)**
- √5 r distantziara: 24 katioi (erakarpena)

$$E_e = \sum \left( -\frac{e^2 Z^2}{d_{K-A}} + \frac{e^2 Z^2}{d_{A-A}} \right)$$



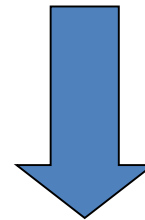
erakarpenak,  $E_e \downarrow$

$$E_e = \boxed{-\frac{6e^2 Z^2}{r}} + \frac{12e^2 Z^2}{\sqrt{2}r} - \boxed{\frac{8e^2 Z^2}{\sqrt{3}r}} + \frac{6e^2 Z^2}{2r} - \boxed{\frac{24e^2 Z^2}{\sqrt{5}r}} + \dots$$

06.1. LOTURA IONIKOA  
 LOTURA IONIKOEN ENERGIA

- r distantziara: 6 katioi (erakarpena)
- $\sqrt{2} r$  distantziara: 12 anioi (aldarapena)
- $\sqrt{3} r$  distantziara: 8 katioi (erakarpena)
- $2r$  distantziara: 6 anioi (aldarapena)
- $\sqrt{5} r$  distantziara: 24 katioi (erakarpena)
- .....

$$E_e = \sum \left( -\frac{e^2 Z^2}{d_{K-A}} + \frac{e^2 Z^2}{d_{K-K}} \right)$$



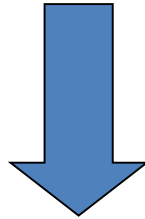
aldarapenak,  $E_e \uparrow$

$$E_e = -\frac{6e^2 Z^2}{r} + \frac{12e^2 Z^2}{\sqrt{2}r} - \frac{8e^2 Z^2}{\sqrt{3}r} + \frac{6e^2 Z^2}{2r} - \frac{24e^2 Z^2}{\sqrt{5}r} + \dots$$

# 06.1. LOTURA IONIKOA

## LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$$E_e = -\frac{6e^2Z^2}{r} + \frac{12e^2Z^2}{\sqrt{2}r} - \frac{8e^2Z^2}{\sqrt{3}r} + \frac{6e^2Z^2}{2r} - \frac{24e^2Z^2}{\sqrt{5}r} + \dots$$



$$E_e = -\frac{e^2Z^2}{r} \left( 6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \dots \right)$$

Segida konbergentea

**A Madelung-en konstantea**

Sare-motaren ezaugarria

06.1. LOTURA IONIKOA  
LOTURA IONIKOEN ENERGIA

A, Madelung-en konstantearen baloreak

Solido ionikoa	koordinazioa	A
NaCl	6:6	1.748
CsCl	8:8	1.763
ZnS (blenda)	4:4	1.638
ZnS (wurtzita)	4:4	1.641
CaF <sub>2</sub> (fluorita)	8:4	2.519
TiO <sub>2</sub> (errutiloa)	6:3	2.408

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

Born-Landeren ekuazioan ioien arteko erakarpenei eta aldapenei dagokien gaia honako hau dugu:

$$E_e = -K \frac{e^2 |Z_K| |Z_A|}{r} A$$

loi batentzat

$$E_e = -K \frac{N_A A e^2 |Z_K| |Z_A|}{r}$$

Kristaleko mol batentzat

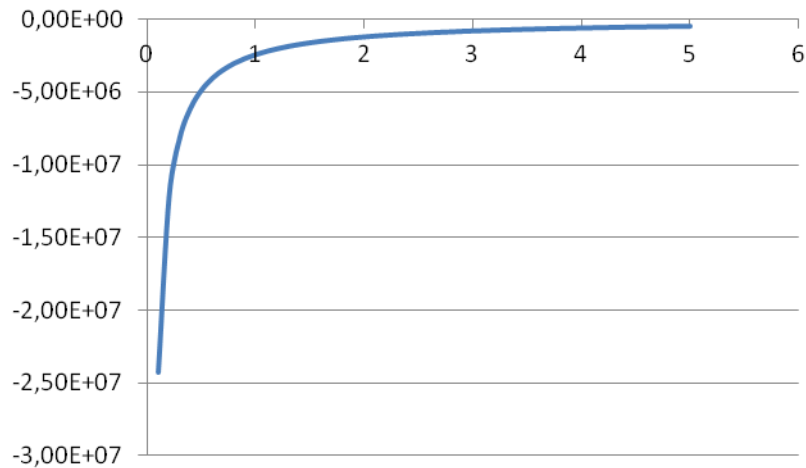


# 06.1. LOTURA IONIKOA

## LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$$E_e = -K \frac{N_A A e^2 |Z_K| |Z_A|}{r}$$

Born-en ekuazioa



## 06.1. LOTURA IONIKOA

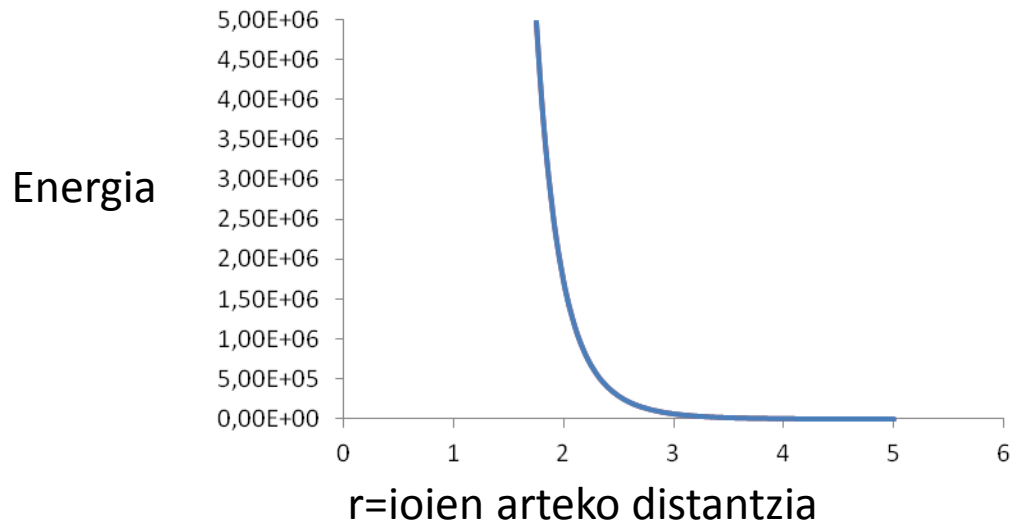
### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$E_a$ =geruza elektronikoen arteko aldarapenak

$$E_a = + \frac{N_A B}{r^n}$$

B=konstante bat

n=Born-en berretzailea



## 06.1. LOTURA IONIKOA

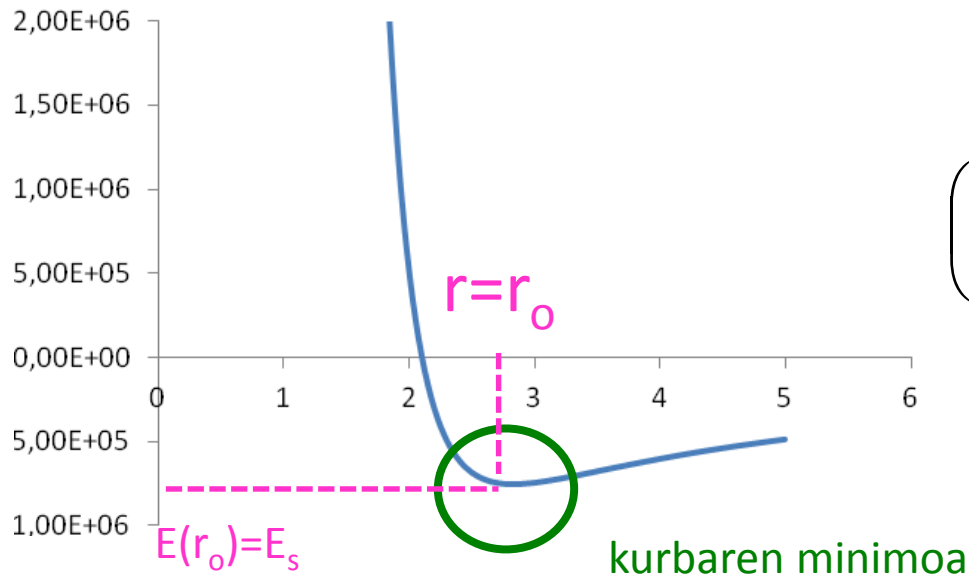
### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$E_a$ =geruza elektronikoen arteko aldarapenak

$$E_a = + \frac{NB}{r^n}$$

$$E_o = E_e + E_a = -K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r} + \frac{NB}{r^n}$$

nola kalkulatu B????



$$\left( \frac{\partial E_o}{\partial r} \right)_{r=r_o} = 0$$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$$E_o = E_e + E_a = -K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r} + \frac{NB}{r^n} \quad \left( \frac{\partial E_o}{\partial r} \right)_{r=r_o} = 0$$

$$\frac{\partial E_o}{\partial r} = K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r^2} - \frac{nNB}{r^{n+1}} \rightarrow \left( \frac{\partial E_o}{\partial r} \right)_{r=r_o} = K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r_o^2} - \frac{nNB}{r_o^{n+1}} = 0$$

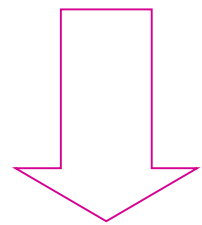
$$K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r_o^2} = \frac{nNB}{r_o^{n+1}} \rightarrow B = K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r_o^2} \frac{r_o^{n+1}}{nN} = K \frac{e^2 Z^2 A r_o^{n-1}}{n}$$

$$E_o = -K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r} + \frac{N}{r^n} K \frac{e^2 Z^2 A r_o^{n-1}}{n}$$

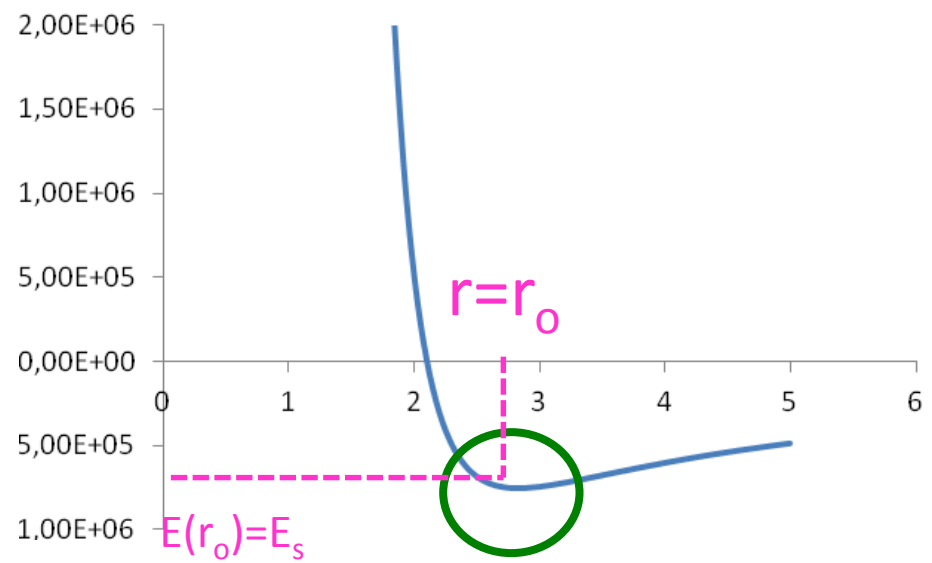
# 06.1. LOTURA IONIKOA

## LOTURA IONIKOEN ENERGIA

$$E_o = -K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r} + \frac{N}{r^n} K \frac{e^2 Z^2 A r_o^{n-1}}{n}$$



$$E_o(r=r_o) = E_s$$



$$E_s = -K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r_o} + \frac{N}{r_o^n} K \frac{e^2 Z^2 A r_o^{n-1}}{n} = -K \frac{Ne^2 Z^2 A}{r_o} + \frac{N}{r_o} K \frac{e^2 Z^2 A}{n}$$

Born-Landeren ekuazioa

$$E_s = -K \frac{N_A e^2 Z^2 A}{r_o} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

Adibide bat: NaCl-ren sare-energia

.  $r_0 = 2.82 \text{ \AA}$  eta  $A = 1.748$

.  $\text{Na}^+$  eta  $\text{Cl}^-$  ioiak ez dira isoelektronikoak eta ondoko Bornen berretzaileak dira erabiltzekoak

.  $n(\text{Na}^+) = 7$  eta  $n(\text{Cl}^-) = 9$

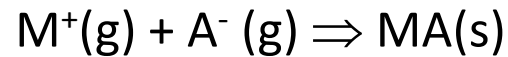
. Ondorioz  $n = 8$  batez besteko balioa erabiliko dugu

$$E_s = -862111 \left(1 - \frac{1}{8}\right) \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} = -754347 \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} = -754.347 \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

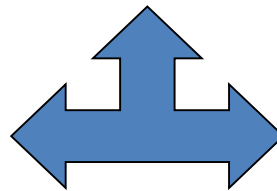
### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

Ikuspuntu teorikotik solido ioniko bat era dadin, gas egoeran dauden anioiak eta katioiak paketatu behar dira.



Prozesu honetan askatzen den energiari **sare-energia**( $E_s$ ) deritzo eta hipotesi honekin lotuta dago, sarearen teoria solido ionikoetan.

Kalkulu teorikoa  
Max Born/Alfred  
Lande-ren ekuazioa  
(1924-1918)



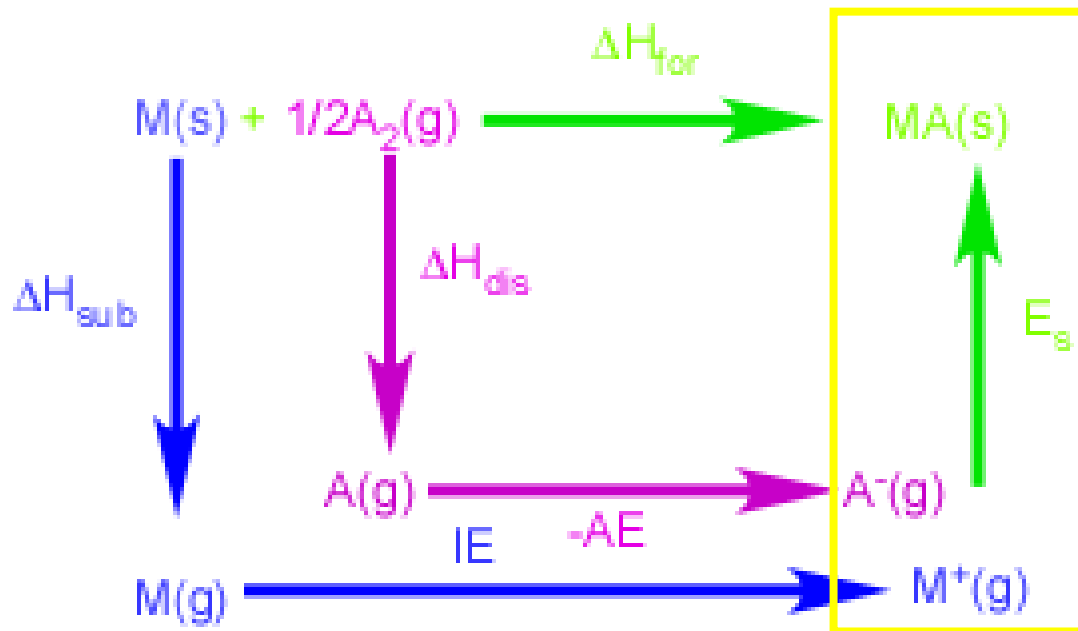
Kalkulu termodinamikoa  
Max Born/FritzHaber-  
ren zikloa (1918)

# 06.1. LOTURA IONIKOA

## LOTURA IONIKOEN ENERGIA

### Born-Haber-en zikloa

Hess-en legean oinarritzen da: prozesu bateko energia ez dago jarraitutako bidearen menpe





# 06.1. LOTURA IONIKOA

## LOTURA IONIKOEN ENERGIA

Born-Haber-en zikloa



$$\Delta H_{\text{for}} = \Delta H_{\text{sub}} + IE + 1/2 \Delta H_{\text{dis}} - AE + E_s$$

$$\Delta H_{\text{for}}(\text{NaCl}) = -411 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{\text{sub}}(\text{Na(s)}) = +109 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$IE(\text{Na(g)}) = +496 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$AE(\text{Cl(g)}) = 348 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{\text{dis}}(\text{Cl}_2(\text{g})) = +244 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$E_s(\text{NaCl}) = -790 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### LOTURA IONIKOEN ENERGIA

Born-Haber-en zikloa

#### Aplikazioak

- . Afinitate elektronikoen kalkuluak
- . Konposatu ionikoen izaera ionikoa aurreesatea
- . Balizko konposatuen egonkortasuna aztertzea

## 06.GAIA: LOTURA IONIKOA

### 06.1: LOTURA IONIKOA

#### 6.1. Sarrera

#### 6.2. Sare ionikoak

6.2.1. Anioien paketatze kubikoetan oinarritutako sare ionikoak

6.2.2. Anioien paketatze hexagonaletan oinarritutako sare ionikoak

#### 6.3. Erradio ionikoa

#### 6.4. Ioiien tamainen araberako egitura-aurreikuspenak

#### 6.5. Solido ionikoen estereokimika

#### 6.6. Lotura ionikoen energia

6.6.1. Born-Mayer-en ekuazioa

6.6.2. Born-Haber-en zikloa

#### 6.7. Ioiien polarizazioa eta loturaren polaritatea

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

Sare-energia: konparazioa  $E_s$  teorikoa vs esperimentalala

- Ez dago adostasunik:

$$E_s(\text{teor}) < E_s(\text{esp})$$

- Konparaketa hau izaera ionikoz maila neurtzeko erabil dezakegu, bi metodoen arabera kalkulaturako sare-energia konparatuz
- Emaitzak:
  - .  $M_A$  -haluroentzat konkordantzia altua
  - . CdI edo Cu(II)-haluroentzat alde itzela

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

Sare-energia: konparazioa  $E_s$  teorikoa vs esperimentalak

<b>Solidoa</b>	<b><math>E_s</math> teorikoa</b>	<b><math>E_s</math> esperimental</b>	<b>lotura-distantzia</b>
LiF	-1003	-1040	2.01
NaF	-896	-920	2.31
KF	-793	-818	2.67
LiCl	-819	-862	2.57
NaCl	-754	-790	2.81
KCl	-689	-716	3.14
NaBr	-724	-747	2.97
KBr	-661	-683	3.29

NaCl-aren sare duten zenbait solidoen  $E_s$  sare-energia ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) eta lotura-distantzia ( $\text{\AA}$ )

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

lotura ionikoa ioien arteko elkarreragin  
elektrostatikoak baino gehiago da

$$|E_s(\text{teor})| < |E_s(\text{esp})|$$



$$E_s = -K \frac{N e^2 Z^2 A}{r_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

Konposatua	U	
	Teorikoa	Esperimentala
M alkalinoen haluroak	-783 KJ/mol	-768 KJ/mol
Cu(I)-ren haluroak	-1986 KJ/mol	-2453 KJ/mol

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

Ioiak kontsideratzen dira:

- Esfera kargatuak
- Konprimaezinak
- Deformaezinak
- Elektrostatikoki BAKARRIK elkarren eragiten dute

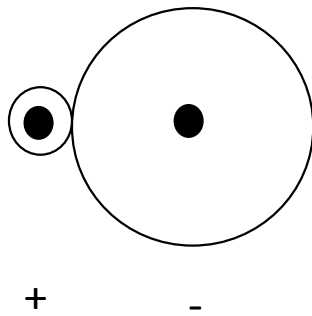
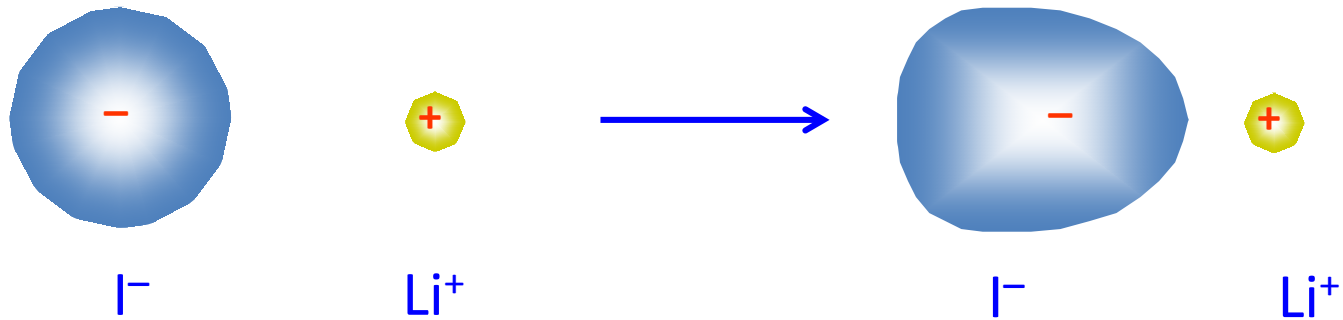
Solido ioniko idealarentzat:

- Katioien eta anioien arteko ukimena dago
- Katioien eta anioien arteko transferentzia elektronikorik ez dago; alegia, trukutzen den elektroien dentsitatea anioiaren eragin-zonaldean baino ez dago
- **Katioiak eta anioiak esfera zurrinak dira**
- Baina.....

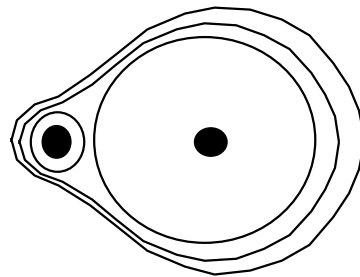
## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

Kasimir Fajans (1928) definitu zuen polarizazioa, hodei elektronikoaren deformazioa dena



Solido ioniko ideala



Solido erreala



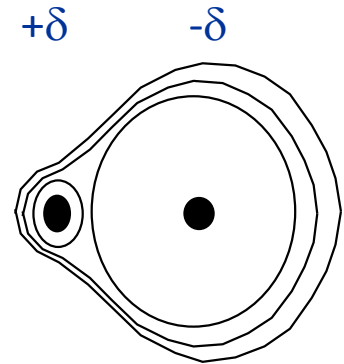
## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

Solido ioniko errealean kobalentzia badago:

Geruza elektronikoak deformagarriak dira

Anioitik katioirako transferentzia elektronikoa dago ( $\delta < 1$ )



POLARTASUNA

Izaera ionikoaren  
neurria

POLARIZAZIOA

Izaera kobalentearen  
neurria

Kobalentzia: lotura ionikoetan izaera kobalentea agertzea

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

#### POLARIZAZIOA

- Lotura ionikoa → polarizazioa → kobalentzia → Izaera ionikoa gutxitu
- Polarizazioa ioi batek (KATIOAK) beste baten( ANIOIAREN) hodei elektronikoarekiko sorrarazten duen deformazioa da
- Eskuarki katioiak anioiekiko eragiten dute
- Polarizazioa ioien egitura elektronikoen eta molekularen formaren, ere, menpekotasuna du
- Geruza elektronikoak deformagarriak dira eta honek polarizazioa sorrarazten du

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

#### POLARIZAZIOA

- Polarizaziorik handiena da:
  - . Katioia txikiagoa den ahala eta bere karga handiagoa duen ahala
  - . Tamaina eta karga handiagoko anioiak badaude
- **Katioiak polarizatzaileak izateko: Karga handia eta tamaina txikia**
- **Anioiak polarizagarriak izateko: Tamaina handia eta karga handia**

Coulson (1961)definitu zuen **konposaturik ionikoena: CsF**

- Anioia ez da oso polarizagarria
- Katioa ez da oso polarizatzailea
- Izaera ionikoa ez dago murriztuta kobalentetasunagatik

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

#### POLARIZAZIOA. IDEIAK NAGUSIAK

- Ioi Polarizatzaileak (KATIOIAK)  
Karga altua, Tamaina txikia
- Ioi Polarizagarriak (ANIOIAK)  
Tamaina eta karga handia

Kasimir Fajans-en arabera izaera kobalente partziala areagotzen da :

- Anioiaren tamaina handitzean
- Katioiaren karga handitzean
- Katioiaren tamaina gutxitzean

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

Polarizazioaren efektuak: - Loturen ahultasuna  
- Fusio-tenperatura baxuagoa

Honako taulan hurrengo  
PF(°C): 405-714-782 kokatu

	$r^+$ (pm)	PF (°C)
<b>BeCl<sub>2</sub></b>	41	
MgCl <sub>2</sub>	86	
CaCl <sub>2</sub>	114	

Honako taulan hurrengo  
PF(°C): 800-271-180 kokatu

	$Z^+$	PF (°C)
NaCl	1	
MgCl <sub>2</sub>	2	
AlCl <sub>3</sub>	3	

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IOIOEN POLARIZAZIOA ETA LOTURAREN POLARITATEA

Polarizazioaren efektuak: - Loturen ahultasuna  
- Fusio-tenperatura baxuagoa

Erradioa handitzean gutxiago polarizatzen du, lotura ionikoaren maila handiagoa da eta PF handiagoa

	$r^+$ (pm)	PF (°C)
<b>BeCl<sub>2</sub></b>	41	405
MgCl <sub>2</sub>	86	714
CaCl <sub>2</sub>	114	782

Karga handitzean gehiago polarizatzen du, lotura ionikoaren maila txikiagoa eta PF txikiago

	$Z^+$	PF (°C)
NaCl	1	800
MgCl <sub>2</sub>	2	271
AlCl <sub>3</sub>	3	180

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

Koordinazio-zenbakia, K.Z., eta polarizazioa. Hainbat ideia

- Koordinazioa-zenbakia zenbat eta txikiagoa izan, lotura ionikoaren kobalentetasun-maila hainbat eta handiagoa izango da
- Ioi tamainak zenbat eta antzekoagoak izan, ionikotasuna orduan eta altuagoa izango da
- Katioi handiek eta anioi handiek egonkortzen diote elkarri
- Katioi eta anioi txikiek egonkortzen diote elkarri

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

Solido ionikoen ezaugarriak determinatzen diren faktoreak

- Indar-mota, elektrostatikoak, sendoak dira

$$F = Q \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

- Sare-energia ( $U$ ,  $E_s$ ), oro har, altua da
- Karga altua bada eta erradio txikia, ( $U$ ,  $E_s$ ) handiagoa izango da

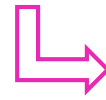




## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

- Gogortasuna eta hauskortasuna ( oro har batera gertatukoak)
- Egoera urtuta elektrizitatearen eroaleak
- Fusio-temperatura altuak ( $> 400^{\circ}\text{C}$ )
- Disolbagarritasuna



Propietate fisikoak  
eta mekanikoak

- Ioi-en paketatzea



Sare ionikoen eraketa



Egiturazko propietateak

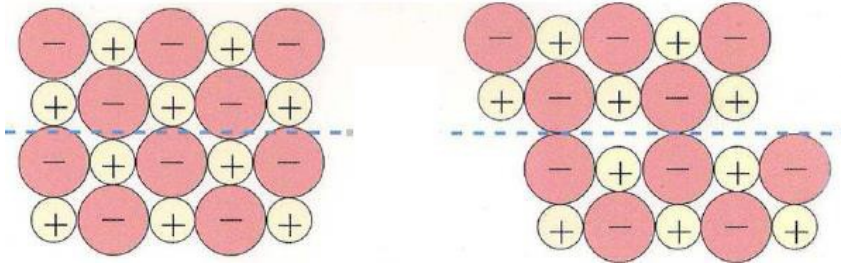
## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

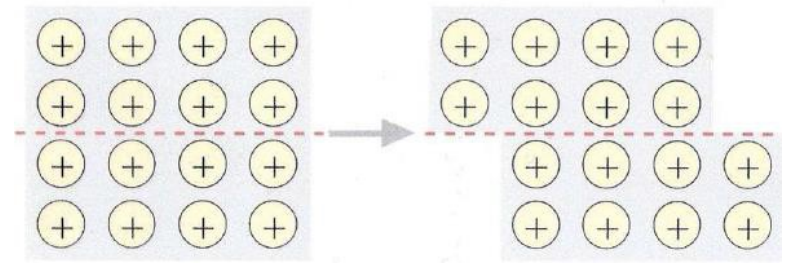
#### Ezaugarri mekanikoak

Solido ionikoak metalikoak baino gogorragoak eta hauskorragoak dira, mugikortasuna oso murriztua baitago elektroien lekupenaren ondorioz

Hori dela eta, solido ionikoak ezin daitezke mekanizatu.



Solido ionikoa

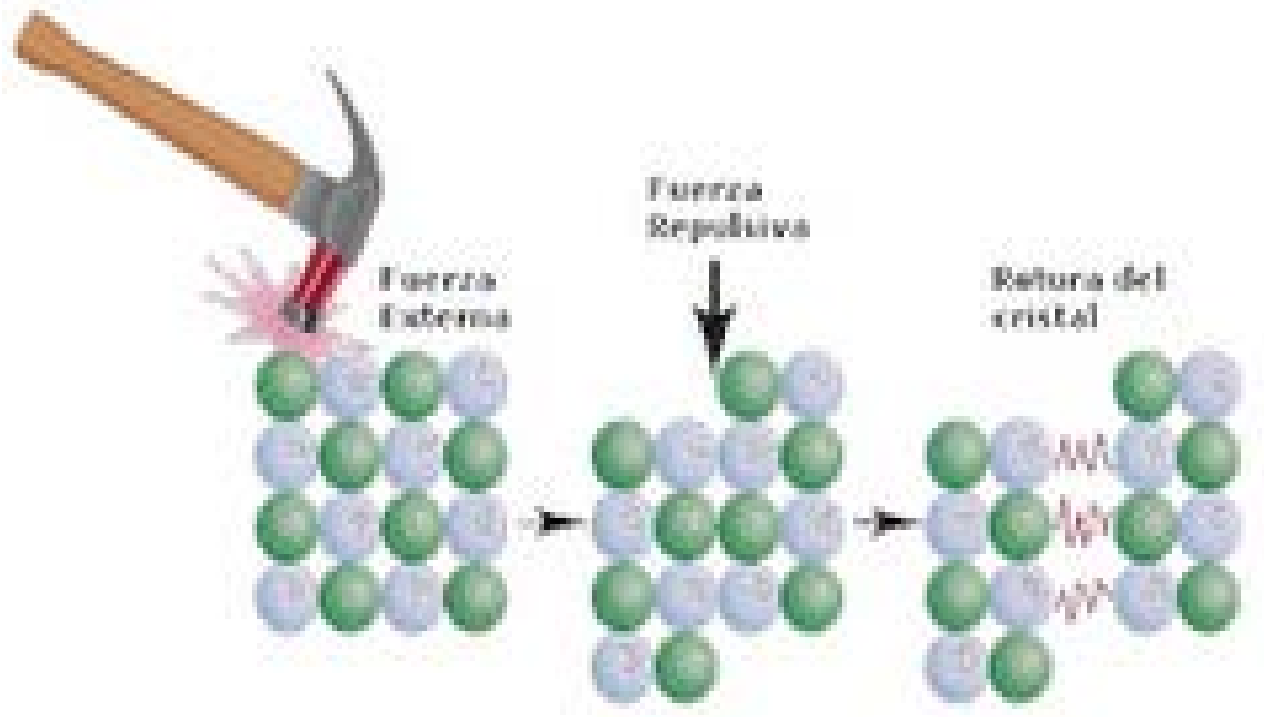


Solido metalikoa

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

#### Ezaugarri mekanikoak



Gogorak baina hauskorrak

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

#### **Gogortasuna**

- . Partikulen arteko loturaren sendotasunaren menpe dago
- . Material bat bestea baino gogorragoa izango da beste honek ezin badu bera marratzea edo deformatzea

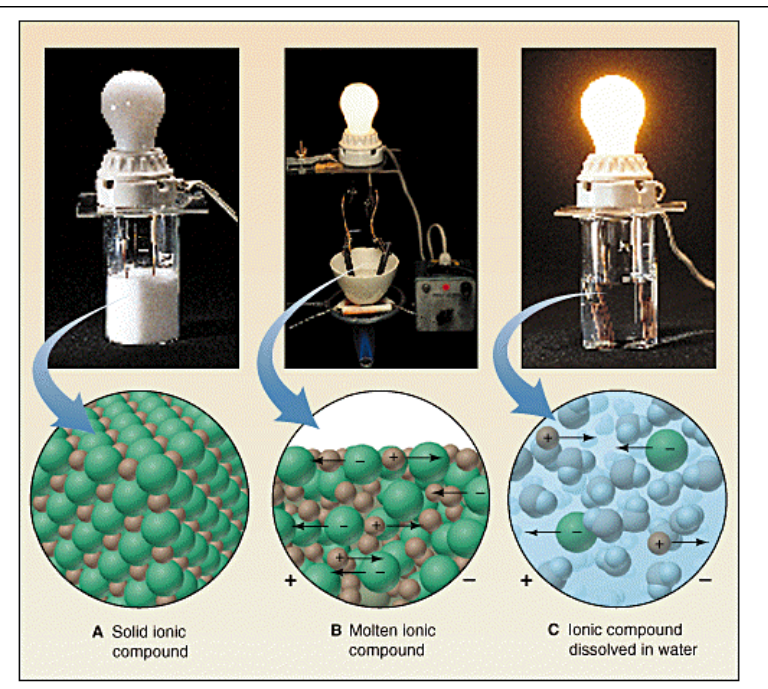
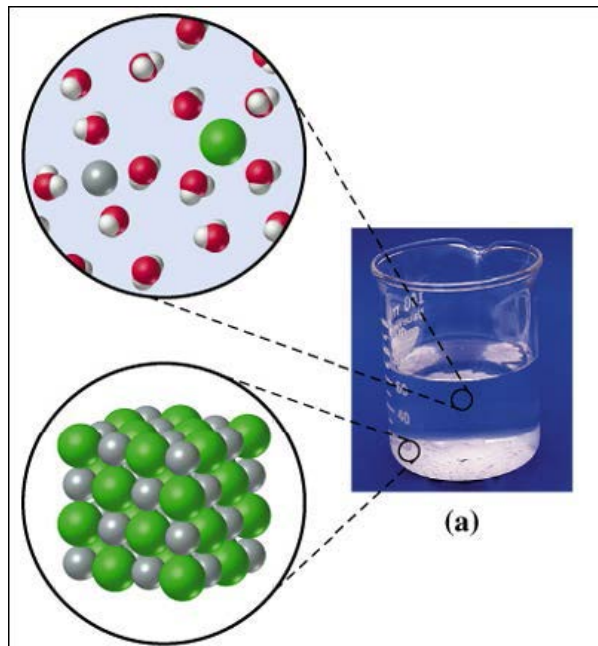


## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

#### Eroankortasun elektrikoa

- Solido ionikoak isolatzaile elektrikoak dira, elektroien mugikortasunik ez baitago
- Solidoa fundituz gero, likido egoeran, ordea, ioiak isolatuta daude, eta eroankortasun elektrikoa ahalbidetuta dago, ioiak direlako korrante elektrikoaren garraiatzaileak

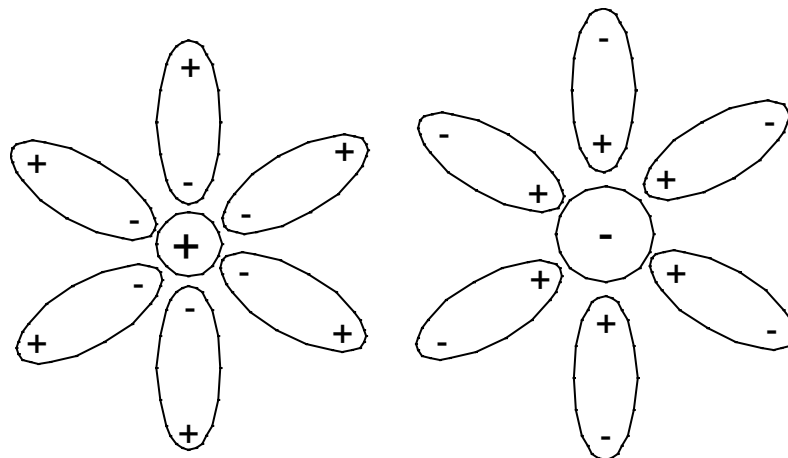


## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

#### Disolbagarritasuna

- Solido ionikoen disolbagarritasuna uretan, lotura horren polaritatearen neurria da
- Solido ionikoak disolbatzean, ioien arteko loturak desagiten dira, eta disolbatzailearen dipolo-molekulek inguratzen dituzte.
- Horrela, uretan ioiak **solbatatuak** daude



## 06.1. LOTURA IONIKOA

### ERANSKINA: SOLIDO IONIKOEN EZAUGARRIAK

#### Disolbagarritasuna

- Solido ionikoen disolbagarritasuna asko aldatzen da konposatuz konposatu.
- Ohiko solido ionikoak uretan disolbagarriak dira eta **gatz** deritze
- Ur mineraletan gatz ioniko asko daude disolbatuta, gizakientzat ezinbestekoak direnak.
- Hala ere, ionikotzat jo ditugun solido asko disolbagarritasun txikia dute uretan, eta are gehiago **batzuk disolbagaitzak** dira
- $\text{CaF}_2$ -aren  $K_s=1.46 \cdot 10^{-10}$
- $\text{ZnS}$ -aren  $K_s=2.93 \cdot 10^{-25}$
- Disolbagarritasunaren eta sare-energiaren arteko erlazioa ez da zuzena, disoluzio-prozesuan disoluzio-entalpiak parte hartzen duelako

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IDEIA NAGUSIAK

1. Konposatu ionikoak sare ioniko konplexuetan paketatzen dira
2. Sare honen estereokimika parametro erradialaren menpekoa da
3. Estereokimikan sarritan betebageak nabariak dira
4. Lotura ionikoen izaerak beraien propietate fisikoa eta kimikoak determinatzen ditu
5. Konposatu ionikoen sare energia altua da
6. Izaera ionikoaren ezak kobalentetasuna sorrazten du eta fusio puntua eta lotura - energia esperagarriak baino txikiagoak dira



## 06.1. LOTURA IONIKOA

### IDEIA NAGUSIAK

7. Tamaina ionikoak gero eta konparagarriagoak izan lotura ionikoagoa izango da
8. Tamaina ionikoak gero eta konparagarriagoak izan loturaren izaera kobalentea txikiagoa izango da

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### HITZ GAKOAK

#### Hitzen glosarioa

- . Polarizazioa: hodei elektronikoaren deformazioa
- . Polartasuna: lotuen dentsitate elektronikoaren banketa
- . Sare-ionikoa: konposatu ionikoek eratzen dituen egiturak, paketatzearen ondorioz
- . Sare-energia: Kristal ionikoaren mol baten eraketa prozesuan askatzen den energia da, egoera gaseosoan dauden ioietatik abiatuta
- . Parametro erradiala: estereokimika determinatzen duen faktore garrantzitsuenetariko bat, katioi- erradioa eta anioi- erradioaren arteko zatiketa
- . Koordinazio-zenbakia: ioi bat distantzia berdiner inguratzen duten kontrako kargaren ioi kopurua

## 06.1. LOTURA IONIKOA

### BIBLIOGRAFIA

1. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*; 11ª Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
2. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.: *Química General*. Ed: Pearson Education, 10ª Ed., Madrid, (2011)
3. Valenzuela, C.: *Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia*. Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)
4. Lothar Beyer: *Química Inorgánica*. Ed. Ariel Ciencia, Barcelona (2000)
5. Housecroft, C. E., Sharpe, A. : *Química Inorgánica*. Ed. Pearson Prentice Hall, Madrid (2006)
6. Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)

*06.GAIA: LOTURA KIMIKOA*

*06.1: LOTURA IONIKOA*

*06.2: LOTURA KOBALENTEA*

*06.3: LOTURA METALIKOA*

*06.4: KOHESIO-INDARRAK*

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2: LOTURA KOBALENTEA

#### 6.2.1 . Sarrera

#### 6.2. 2. Elektro-bikoteen bidezko ereduak

##### 6.2.2.1. Lewis-en egiturak

##### 6.2.2.2. BGEBA metodoa

#### 6.2. 3. Balentzia-loturaren Teoria (hibridazioa)

#### 6.2. 4. Orbital Molekularraren Teoria

#### 6.2. 5. Lotura-parametroak

## 06.2. GAIA. LOTURA KOBALENTEA

### 06.2.1 Sarrera

## 06. LOTURA KIMIKOA

### SARRERA

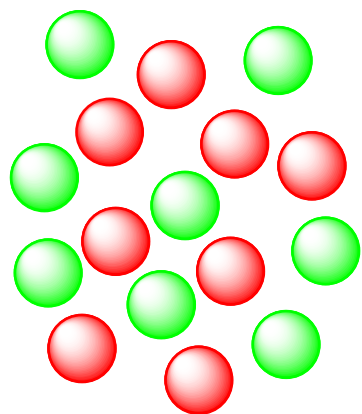
Gas nobleak izan ezik, gainontzeko elementuek konposatuak eratzen dituzte.

**Nolakoak** dira lotura hauek?


**Zergatik** eratzen dira lotura-mota desberdinak kasu bakoitzean?

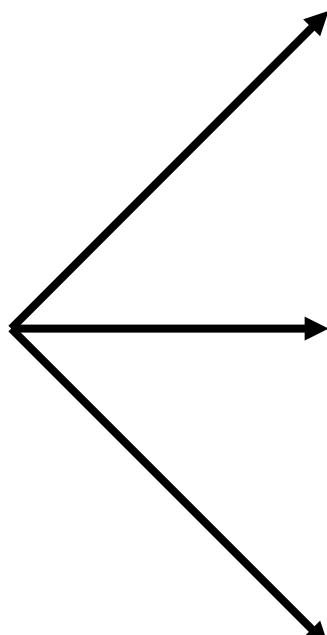
# 06. LOTURA KIMIKOA

## SARRERA

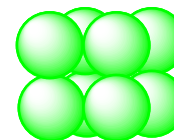
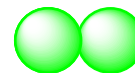
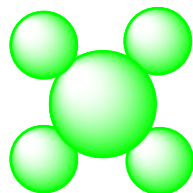


 elementu metalikoa

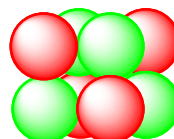
 elementu ez-metalikoa



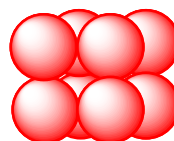
lotura kobalentea



lotura ionikoa

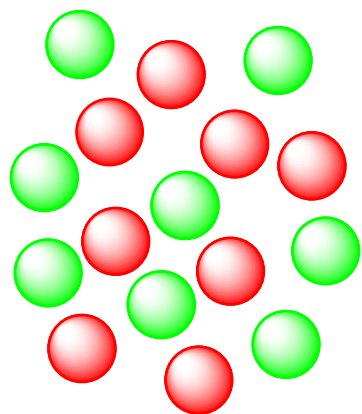


lotura metalikoa




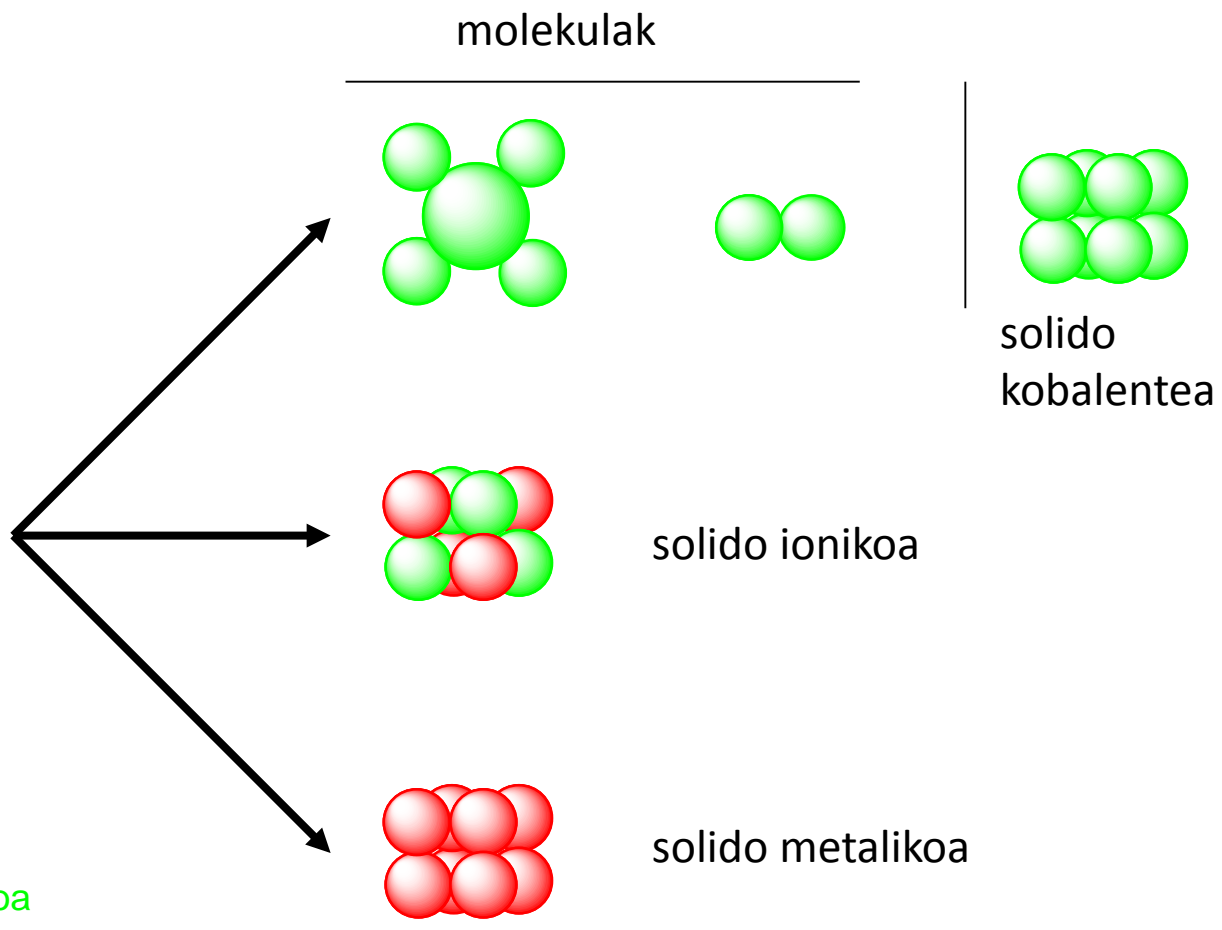


## 06. LOTURA KIMIKOA SARRERA



 elementu metalikoa

 elementu ez-metalikoa



Planteamendu honen arabera, lotura kovalentea alde batetik aztertzen da eta solidoen lotura, bestaldetik.

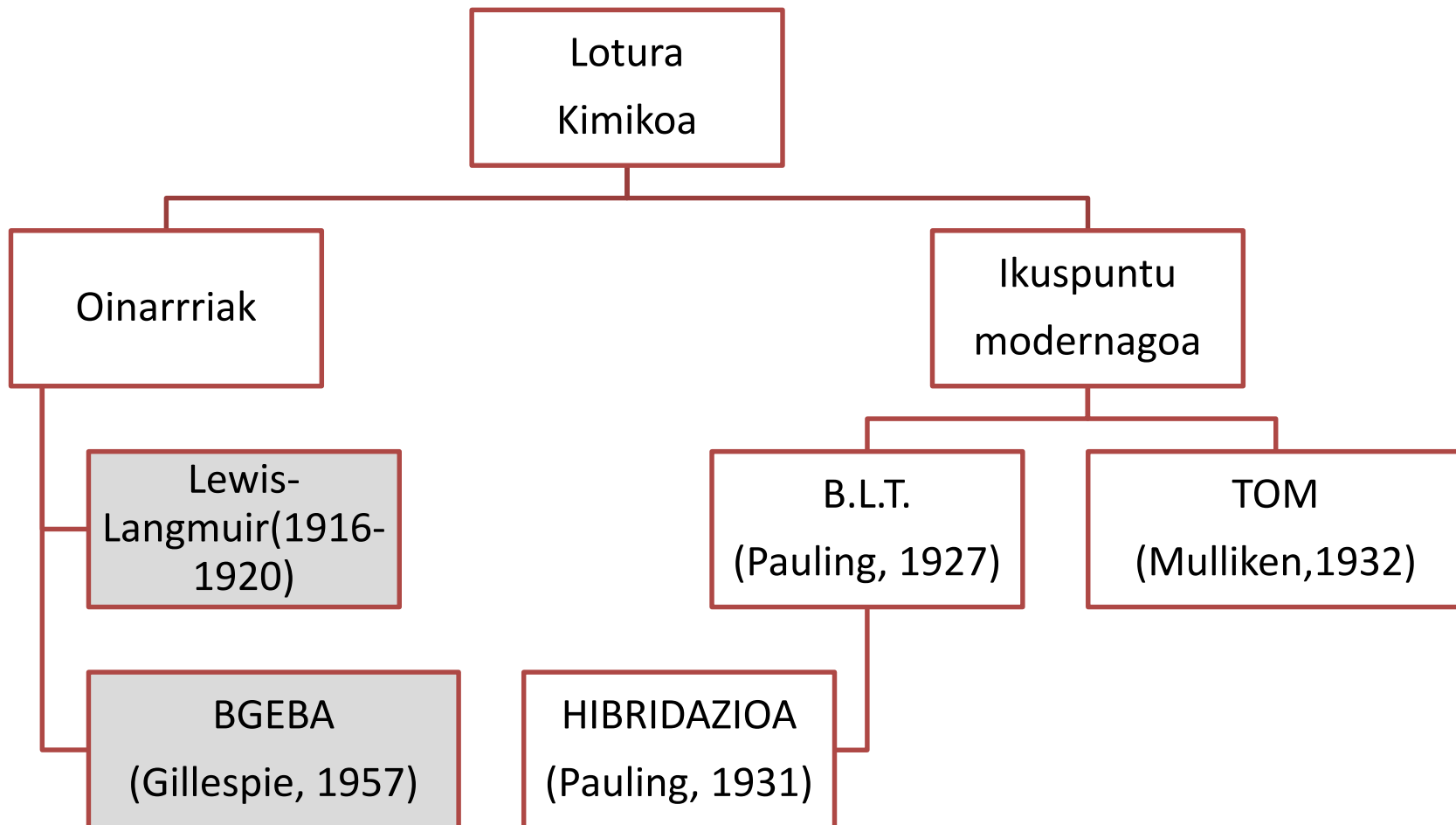
## 06.2. GAIA. LOTURA KOBALENTEA

### 06.2. 2. Elektro-bikoteen bidezko eredua

#### 06.2.2.1. Lewis-en egiturak

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2: LOTURA KOBALENTEA



## 06. LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

LEWIS-EN EGITURAK

BGEBE METODOA



EREDU KLASIKOAK

BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA



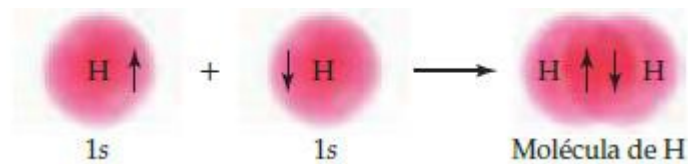
MEKANIKA KUANTIKOAN  
OINARRITUTAKO TEORIA



TARTEKOA

## *LOTURA KOBALENTEA.....*

### *ELEKTROIAK PARTEKATZEN !*

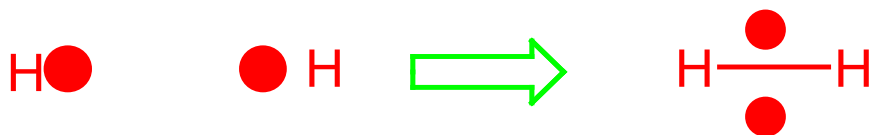


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

- . Lotura kobalentea elektroi-bikoteen **partekatzea** da



Gogoan izan, lotura kobalentea elementu ez metalikoen artean baino ez dela sortzen

- . Elektroi-bikotea partekatzean H atomo biak bi elektroiz inguratuta daude, He gas noblearen konfigurazio egonkorra lortuz.

- . p blokeko elementuek **zortzi** elektroi behar dituzte  $ns^2np^6$  konfigurazioa lortzeko.

- . **Lewis-en zortzikotearen araua:** atomoak zortzikotea lortzen bikoteak partekatuz; hots, lotura kobalenteak eratuz

Idea simple hau lotura kobalenteari buruzko teoria klasikoen oinarria da

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

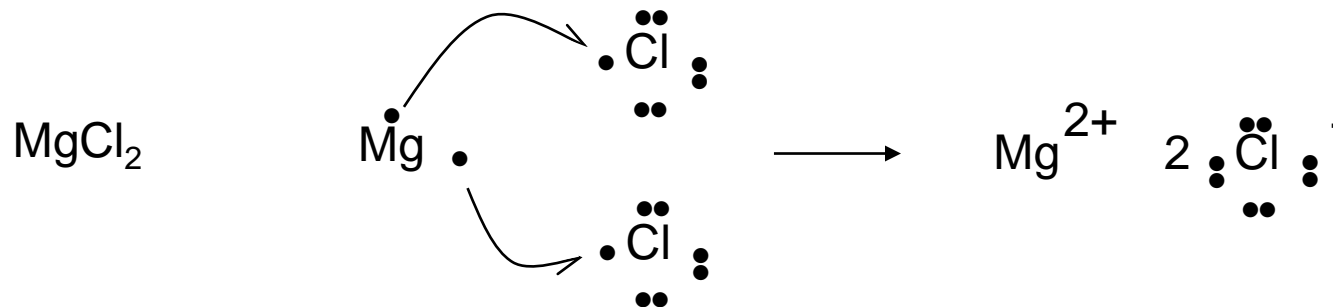
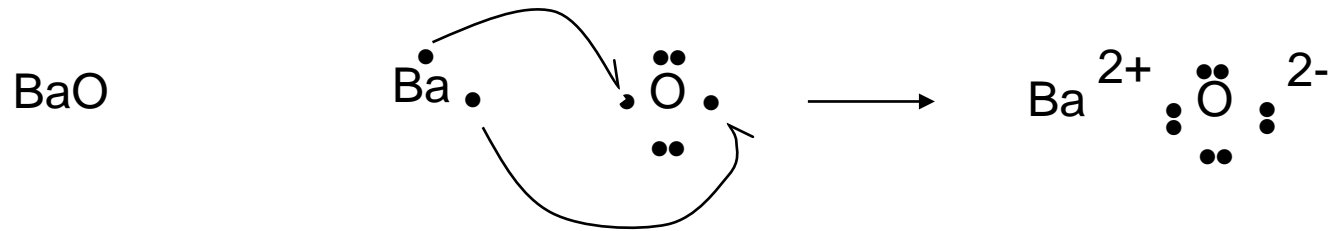
#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

- Eredu hauetan, balentzia-elektroiak baino ez dira kontuan hartzen.
- Elektroibikoteak erabiltzen dira, molekulen lotura eta geometria azaltzeko
- Ioi polinuklearrak molekula kargatutzat jotzen dira eta eredu hauen bidez azaltzen dira ere

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### KONPOSATU IONIKOEN ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EGITURAK

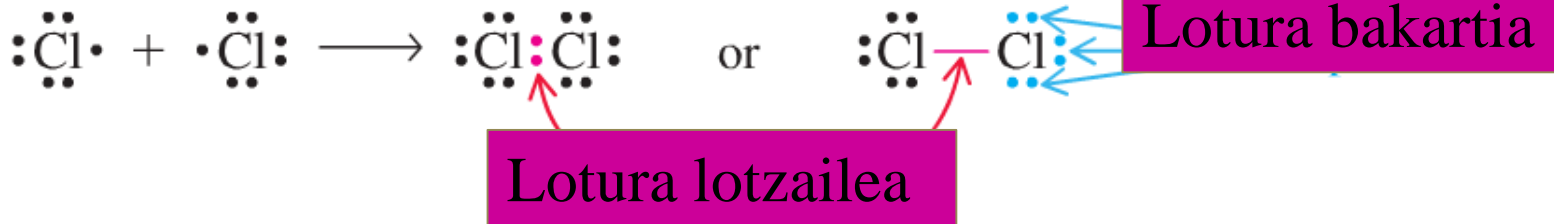
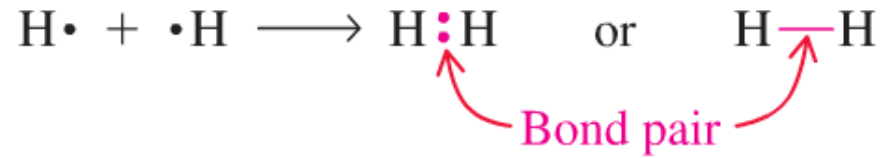




## 06. GAIA: LOTURA KIMIKO

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### KONPOSATU KOBALENTEETAN ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EGITURAK

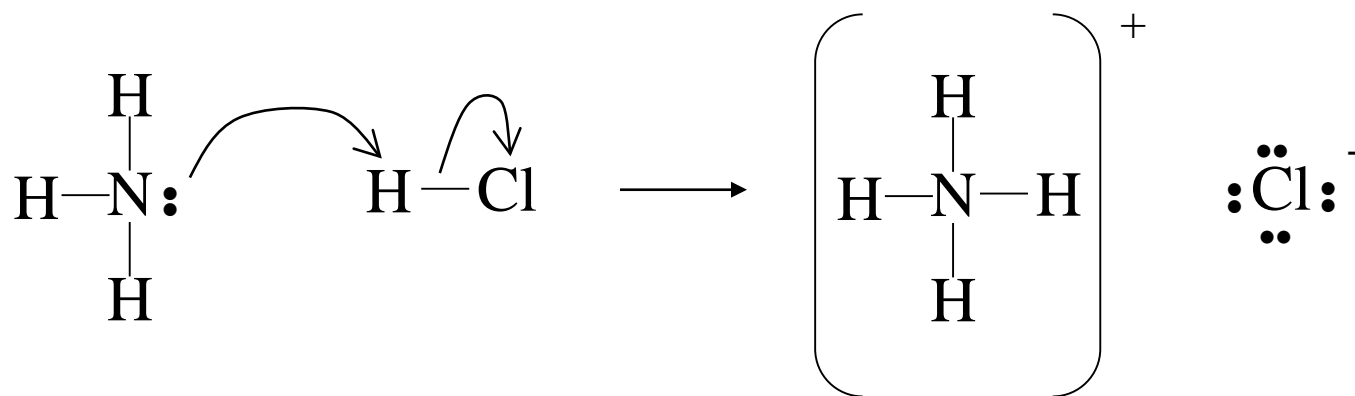


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKO

### 06.2. LOTURA KOBALENTEAK

#### KONPOSATU KOBALENTEETAN ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EGITURAK

##### LOTURA KOBALENTE KOORDINATUA

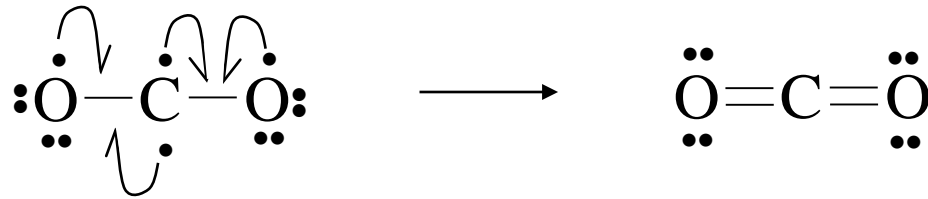
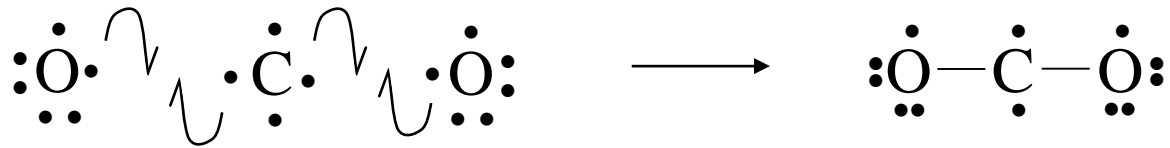


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKO

### 06.2. LOTURA KOBALENTEAK

#### KONPOSATU KOBALENTEETAN ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EGITURAK

#### LOTURA KOBALENTE ANIZKOITZAK

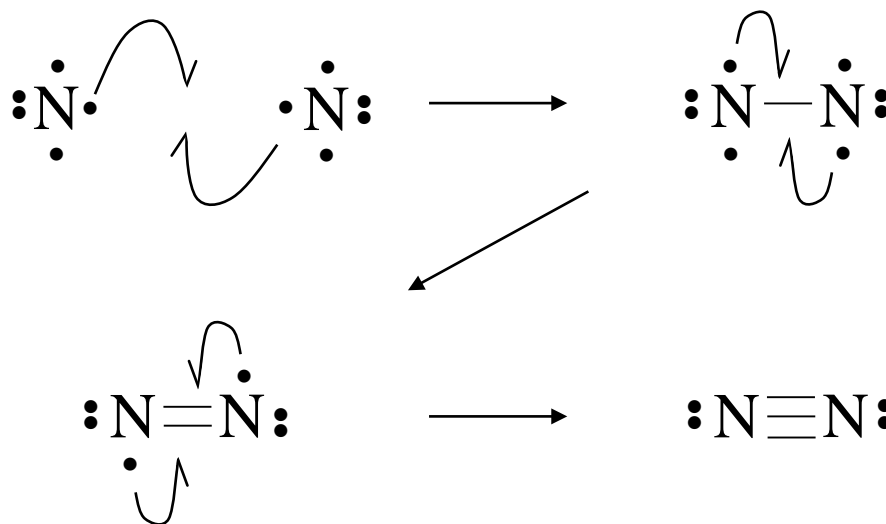


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKO

### 06.2. LOTURA KOBALENTEAK

#### KONPOSATU KOBALENTEETAN ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EGITURAK

##### LOTURA KOBALENTE ANIZKOITZAK



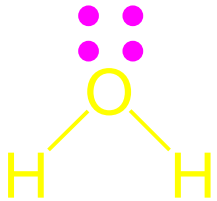
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKO

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

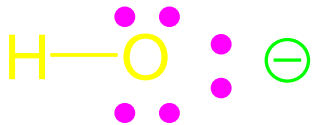
#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EGITURAK



O atomoa, elektroi-bikoteen ikurrak adieraziz



H<sub>2</sub>O molekula, elektroi-bikoteen ikurrak adieraziz



OH- anioi polinuklearra, elektroi-bikoteen ikurrak adieraziz

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

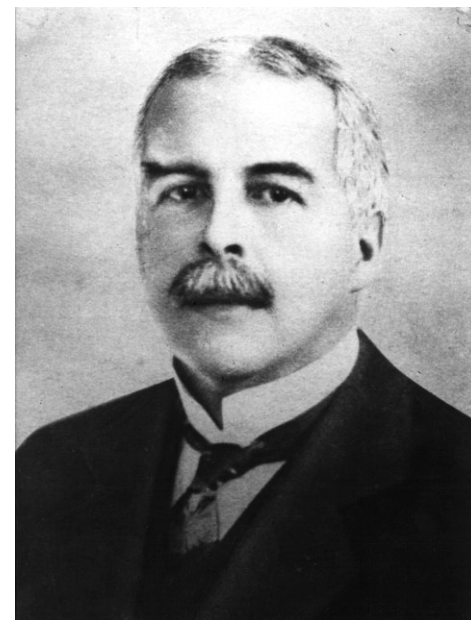
Lotura kobalentean: atomoak ez metalikoak (**elektronegatiboak**) lotzen dira

Lotura elektro-bikoteak **partekatzean** datza.

Elektroietan oinarritutako lehen ereduak Lewis-ek eta Langmuir-ek proposatu zuten (1916); halere, Lewis-ek hartu meritu gehiena historian zehar.

Lewis-ek **zortzikotearen araua** proposatzeaz gain, egitura molekularra deskribatzeko ikurrak definitu zituen.

Izan ere, gaur egun erabiltzen ditugun lotura bakunerako, bikoitzerako eta hirukoitzerako ikurrak Lewis-ek asmatu zituen.



**Gilbert Newton Lewis**  
**1875-1946**

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

Oso arrakastatsua izan arren, LEWIS-en ereduak zenbait alderdietan egiten zuen huts (zortzikotearen arauak salbuespen asko ditu)

Salbuespenak azaltzeko PAULING-ek **erresonantziaren** kontzeptua proposatu zuen.

(Paulingek elektronegatibotasunaren kontzeptua ere asmatu zuen)



**Linus Pauling**

**1901-1994**

**Aktibista antinuklearra**

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

Lewis-en teoria hedatu nahian, Gillespie-k balentzia-geruzako elektroibikoteen arteko aldarapenaren teoria (BGEBA) garatu zuen (1972an)

BGEBAren teoria egitura molekularra azaltzeko aurrerapen nabaria izan zen



Ronald James Gillespie  
1924-bizirik



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

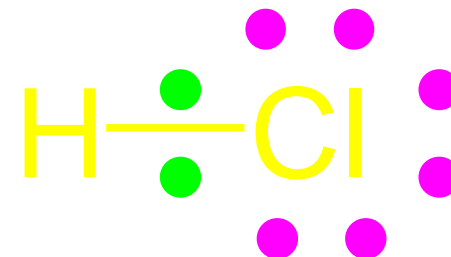
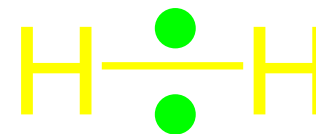
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK

Elektroi-bikoteen bidezko loturaren eredua:

Lotura kobalentean **elektroi-bikoteak** partekatzen dira, **zortzikotea** ( $ns^2np^6$ ) lortzea helburu dela (H eta He izan ezik).

Partekatzen direnak balentzia-elektroiak dira



Zenbat balentzia-elektroi dauzka p blokeko atomo ez metaliko batek?

$t-10$ =balentzia-elektroien kopurua

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK

$t-10 = \text{balentzia-elektroien kopurua}$

Balentzia- elektroiak	3	4	5	6	7	8
taldea	13	14	15	16	17	18
	B	C	N	O	F	Ne
	Al	Si	P	S	Cl	Ar
	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK

Arauk:

1. Molekularen atomo guztien balentzia-elektroiak zenbatu (anioia baldin bada, elektroi bat gehitu karga negatibo bakoitzeko eta katioia baldin bada, elektroi bat kendu karga positibo bakoitzeko)
2. Muturreko atomoen inguruan lau elektroi-bikote kokatu (H eta He elementuen inguruan elektroi-bikote bat)
3. Soberako elektroi-bikoteak geratuko balira, atomo zentralaren inguruan jarri.
4. Soberako elektroi-bikoterik ez badago, atomo zentralaren inguruan lau elektroi-bikote daudela konprobatu. Holan ez bada, lotura anizkoitzak proposatu atomo zentralaren inguruan
5. Kalkulatu atomo zentralaren inguruko KARGA FORMALA

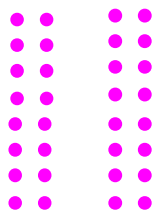
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

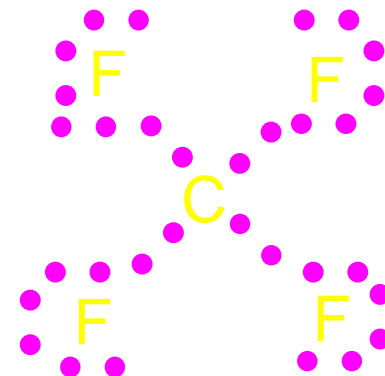
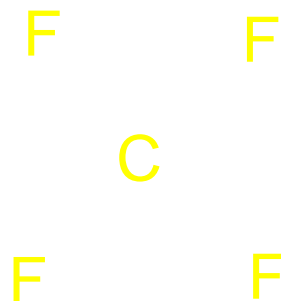
#### LEWIS-EN EGITURAK

Molekula:  $\text{CF}_4$

1.  $4C + 4 \times 7F = 32 \rightarrow 16$  elektroi-bikote



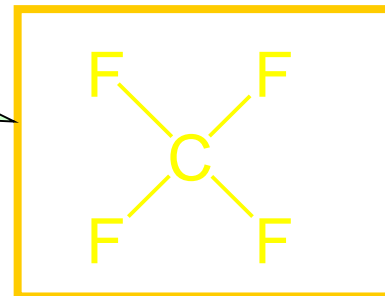
2. C da atomo zentrala; F atomoak, muturrekoak



3. Ez dago soberako elektroirik

4. Atomo zentralak eta muturrekoak berareko elektroirik ez dira

Muturreko atomoen inguruan dauden elektroiak ez dira normalean adierazten



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

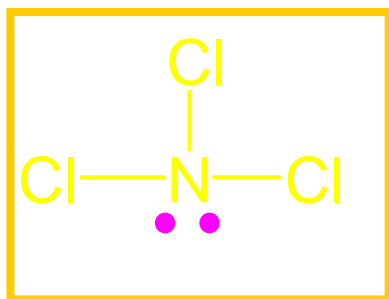
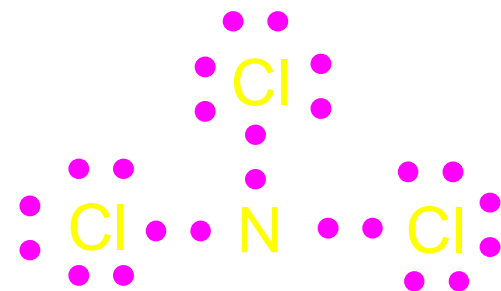
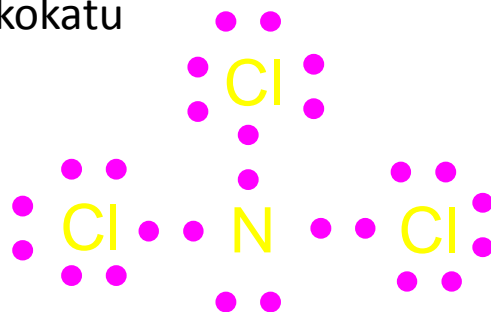
#### LEWIS-EN EGITURAK

Molekula:  $\text{NCl}_3$

1.  $5_{\text{N}} + 3 \times 7_{\text{Cl}} = 26 \rightarrow 13$  elektroi-bikote

2. N da atomo zentrala; Cl atomoak, muturrekoak

3. Elektroi-bikote bat dago soberan: atomo zentralaren inguruan kokatu



4. Atomo zentralaren inguruan 8 elektroi daude

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

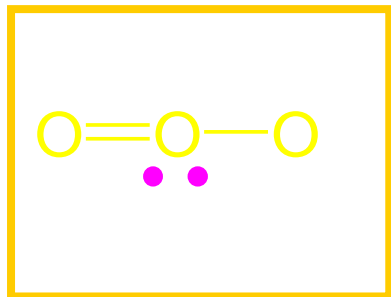
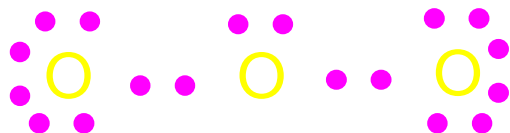
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK

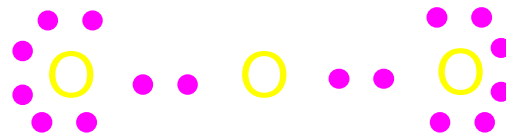
Molekula:  $O_3$

1.  $3 \times 6_O = 18 \rightarrow 9$  elektroi-bikote

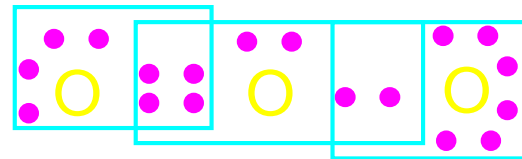
3. Elektroi-bikote bat dago soberan:  
atomo zentralaren inguruan kokatu



2. O bat, zentrala; beste biak, muturrekoak



4. Atomo zentralaren inguruan 6 elektroi daude; egin dezagun lotura bikoitz bat

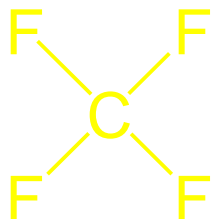


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

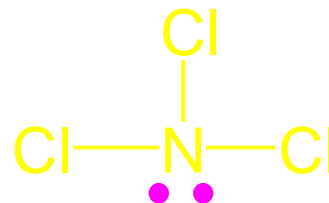
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK

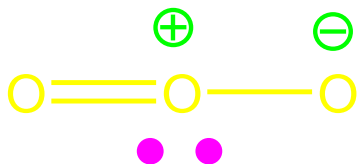
Molekula:  $\text{CF}_4$



Molekula:  $\text{NCl}_3$



Molekula:  $\text{O}_3$



Zer da hau?

- **KARGA FORMALA**: atomo guztiek karga formal bat dute.
- Adierazten ez denean, karga formal zero da.
- Positiboa edo negatiboa izan daiteke.

Karga formalak zer nahi du esan?

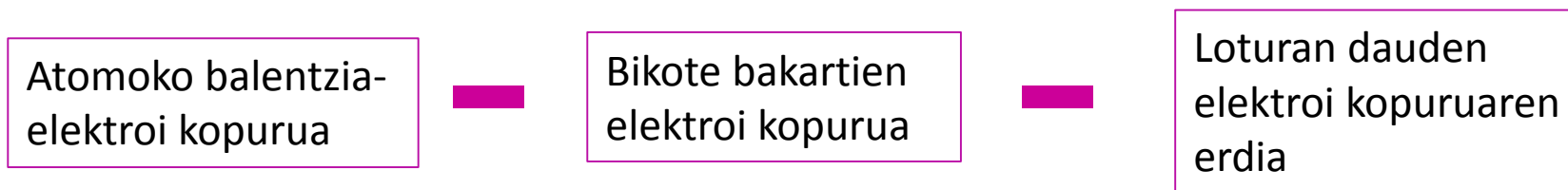
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

Karga formalak loturak egiteko gaitasunari buruzko informazioa ematen digu

NOLA KALKULATZEN DA KARGA FORMALA?



Molekula batean atomo guztien karga formalaren zenbaketa 0 izan behar da



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

##### OHARPENAK

- ✓ Atomo guztien karga formalen gehiketa molekularen karga izan behar da
- ✓ Energia txikiagoko Lewis-en egitura, probableena, karga formal txikienak dituen da (0, +1, -1) eta hobe da elkarren artean urrun egotea
- ✓ Molekula neutroa bada hobe KF 0 izatea (+1-1 ordeztuz)
- ✓ Atomo elektronegatiboagoak ezin du karga positiboa izan

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

$\text{CH}_2\text{O}$  – ren Lewis-en egiturak idatzi , atomo bakoitzaren karga formalak adierazten.

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

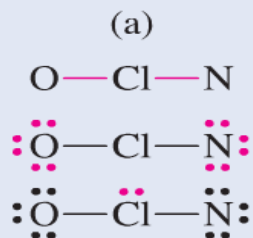
NOCl – ren (nitrosilo kloruroa) Lewis-en egiturak idatzi, atomo bakoitzaren karga formalak adierazten.

#### Electronegatibitateak

$$O = 3.5$$

$$N = 3.0$$

$$Cl = 3.0$$

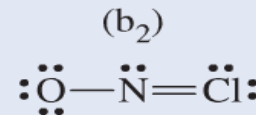
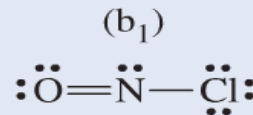
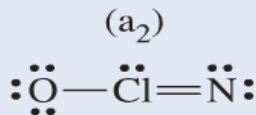
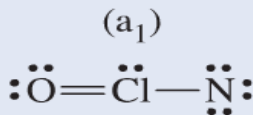
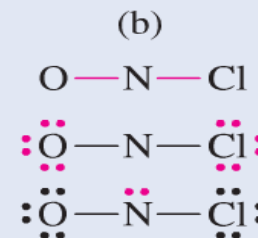


1. Assign four electrons.

2. Assign twelve more electrons.

3. Assign the last two electrons.

4. Complete the octet on the central atom.



	(a <sub>1</sub> )	(a <sub>2</sub> )	(b <sub>1</sub> )	(b <sub>2</sub> )
N:	-2	-1	0	0
O:	0	-1	0	-1
Cl:	+2	+2	0	+1

Egitura b1 da

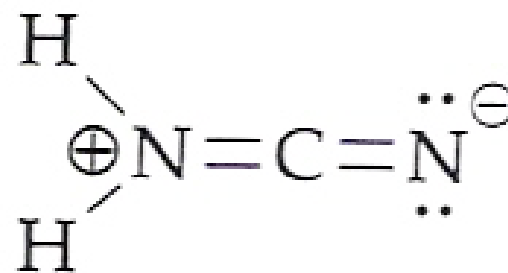
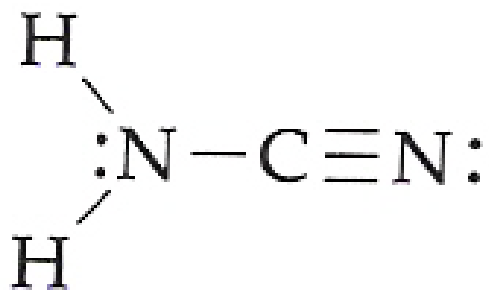
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

H<sub>2</sub>NCN-ren Lewis-en egitura idatzi, karga formalak adieraziz.

Electronegatibitateak: N = 3,0; C = 2,5



*Egiturarik egonkorrena*

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

$\text{NF}_3$  -ren Lewis-en egitura irudikatu, karga formalak adieraziz

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

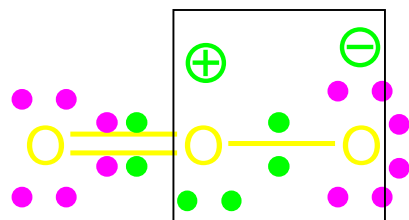
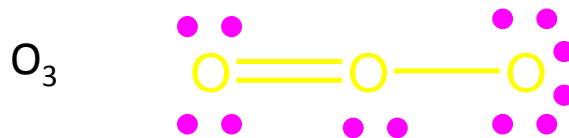
$\text{HNO}_3$  -ren Lewis-en egitura irudikatu, karga formalak adieraziz.

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

KARGA FORMALA



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

Ioien Lewis-en egiturak:

Ioia **molekula kargatutzat** jotzen dira

Lewis-en egiturak egiteko, diferentzia bakarra molekulekin konparatuz, elektroien zenbaketan dago:

$$\text{NO}_3^- \cdot 5_{\text{N}} + 3 \times 6_{\text{O}} + 1 = 24 \rightarrow 12 \text{ elektroï-bikote}$$

$$\text{SO}_4^{2-} \cdot 6_{\text{S}} + 4 \times 6_{\text{O}} + 2 = 32 \rightarrow 16 \text{ elektroï-bikote}$$

$$\text{NH}_4^+ \cdot 5_{\text{N}} + 4 \times 1_{\text{H}} - 1 = 8 \rightarrow 4 \text{ elektroï-bikote}$$

$$\text{NO}_2^+ \cdot 5_{\text{N}} + 2 \times 6_{\text{O}} - 1 = 16 \rightarrow 8 \text{ elektroï-bikote}$$

Atomo guztien karga formalaren zenbaketa ioiaren karga izan behar da



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

$\text{CO}_3^{2-}$  -ren Lewis-en egitura irudikatu, karga formalak adieraziz

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK:KARGA FORMALA

ZORTZIKOTEAREN ARAUA BETETZEN EZ DUTEN ESPEZIEAK

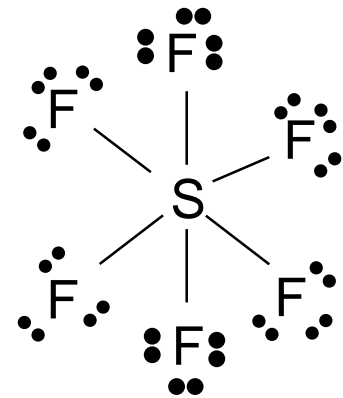
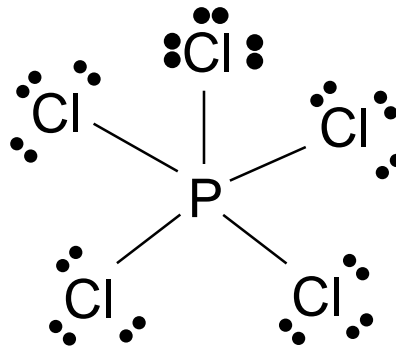
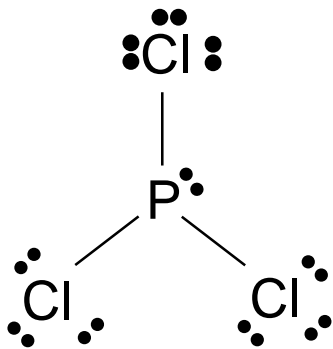
1. Zortzikote hedatua
2. Zortzikote betegabekoa
3. Elektroi-kopuru bakoitia

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

1. Zortzikote hedatua. Atomo zentrala 2. periodokoa ez denean, bere inguruan 8 elektroie baino gehiago koka daitezke



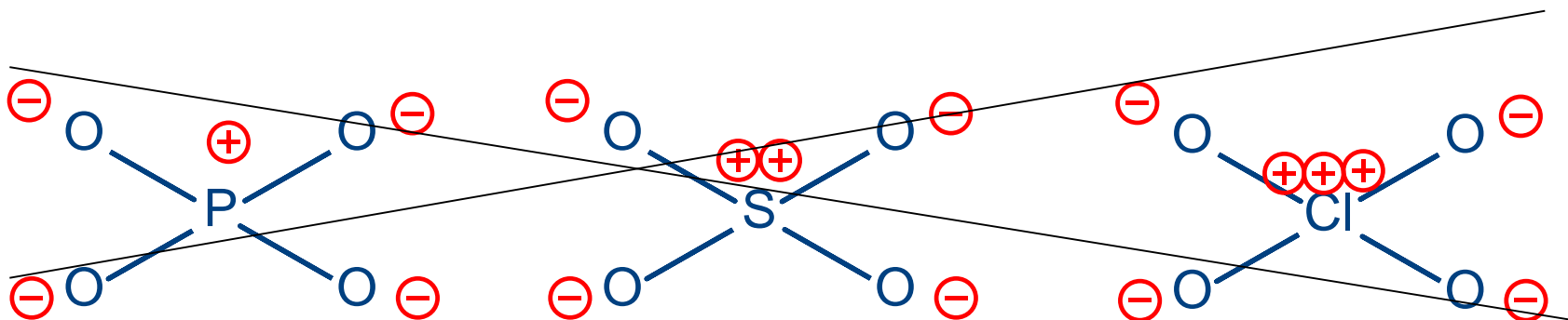
Konposatu Hiperbalenteak  
Hirugarren periodoko elementuak

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

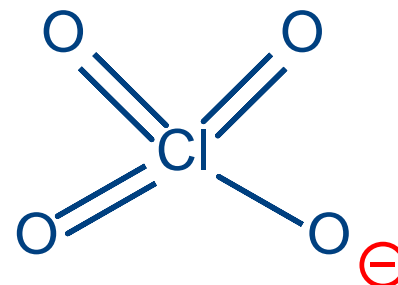
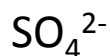
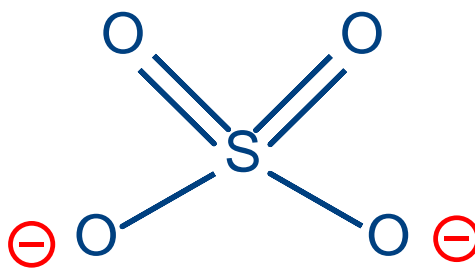
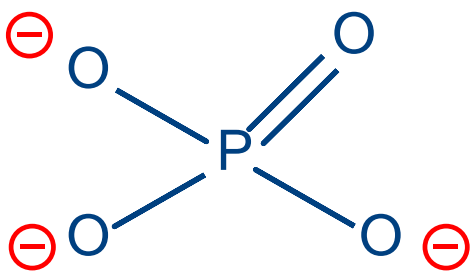
3 periodotik aurrera d  
orbitalak daudenez, geruza  
bakoitzean 18 elektroiegon  
daitezke:  $s^2p^6d^{10}$



Atomo zentrala bigarren periodokoa ez denean bere inguruan zortzi elektroie baino gehiago koka daitezke.

Atomo zentralen karga formal hauek baino txikiagoak lortzeko aukera al dago?

Horrek karga formalaren gutxipenaren ondorioa izango du?

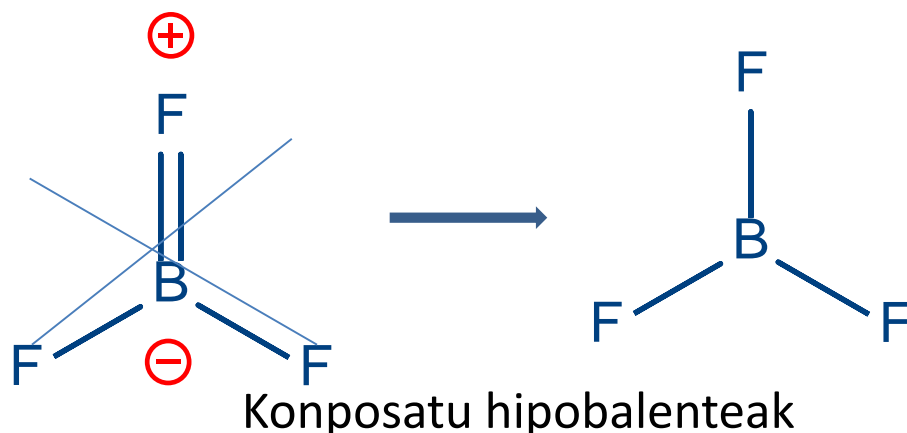


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

2. Zortzikote betegabekoa: atomo zentrala B denean, gehienetan 6 elektroi daude kokatua B-aren inguruan



- . Karga formalaren araua ez da betetzen
- . F atomoa B atomoa baino askoz elektronegatiboa da, ezin da karga negatiboa izan

3. Elektroi-kopuru bakoitiako konposatuak: erradikal askeak

Erradikal askeak oso erreaktiboak dira



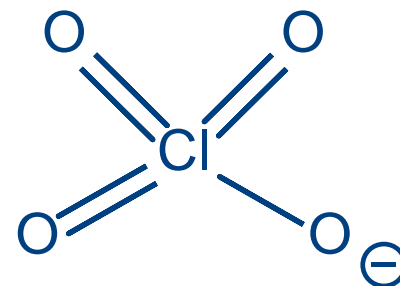
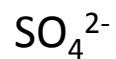
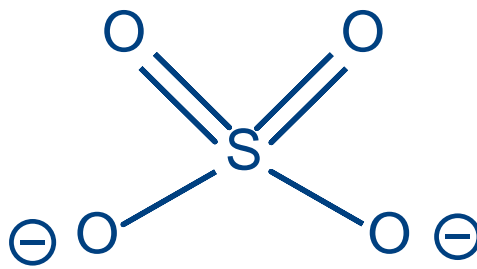
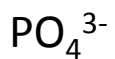
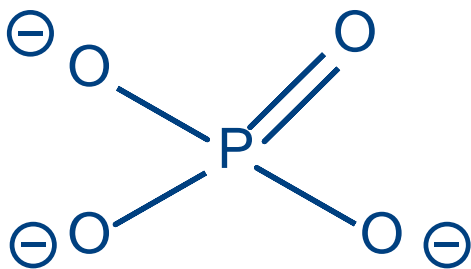
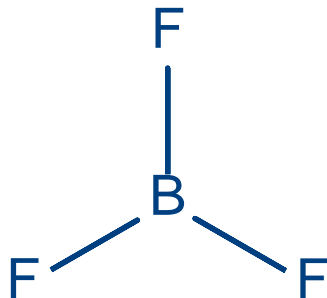
<https://www.youtube.com/watch?v=54qo7bBfnHg>

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

GOGORATU: ZORTZIKOTEAREN ARAUA BETETZEN EZ DUTEN ESPEZIEAK: ADIBIDE BATZUK



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: ERRESONANTZIA

Ikusi bezala, batzuetan Lewis-en egitura bat baino gehiago proposa daiteke, **zortzikotearen araua bete ez arren.**

Egokiena aukeratzeko:

- elektronegatibotasuna
- karga formala

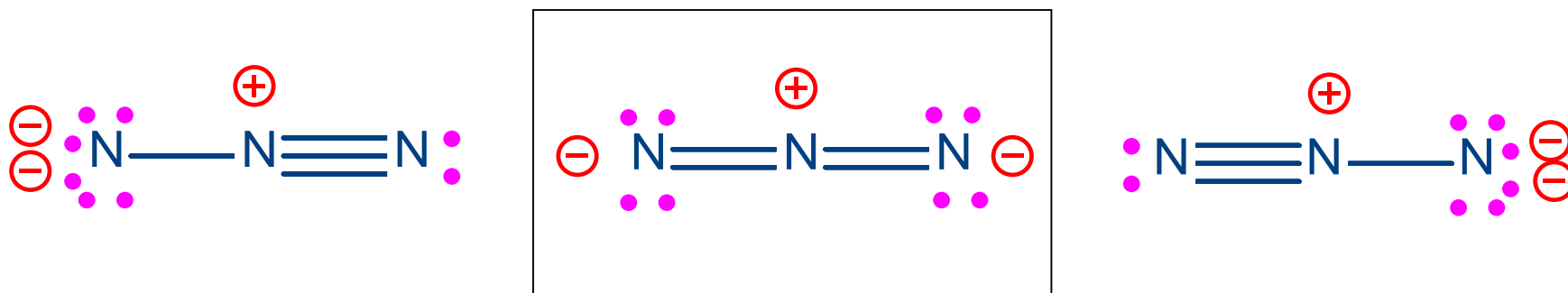
Beste adibide askotan, lotura anizkoitzen kokapena aldakorra da. Orduan ere, elektronegatibotasuna eta karga formala izango dira erabiliko ditugun irizpideak Lewis-en egitura egokiena aukeratzeko.

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

##### ERRESONANTZIA



$\text{N}_3^-$  aziduro anioiaren 3 egitura erresonanteak

Zein da egokiena?

Erdikoa egitura erresonante egokiena da, karga formalak txikienak direlako.

Gainera, errealitatean N-N distantzia guztiak berdinak dira.

Halere, muturreko egiturak ez dira erabat baztertzen.

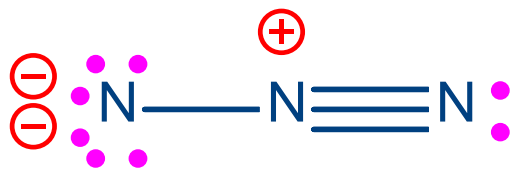


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

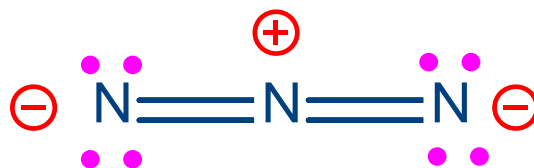
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

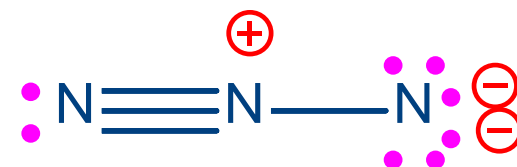
##### ERRESONANTZIA



%5



%90



%5

Erdiko egitura erresonantea nagusia da (espeziearen ezaugarriak hoberen deskribatzen dituen da eta).

Muturrekoak guztiz baliokideak dira, eta ehuneko txikia dute.

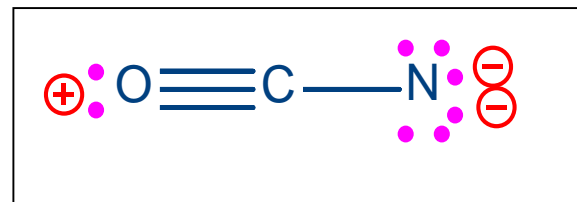
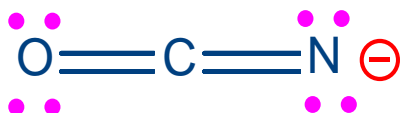
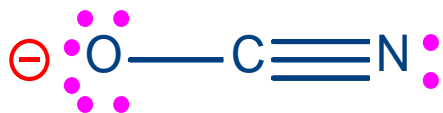
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

#### ERRESONANTZIA

NCO<sup>-</sup> zianato anioiaren egitura erresonanteak



Zein da egokiena?

Karga formal handienak

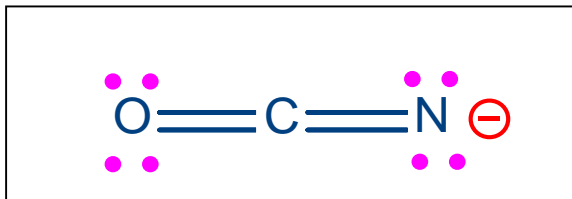
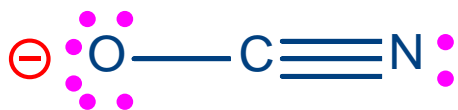
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

#### ERRESONANTZIA

NCO<sup>-</sup> zianato anioiaren egitura erresonanteak



Karga negatiboa ez dago atomo elektronegatiboaren gainean

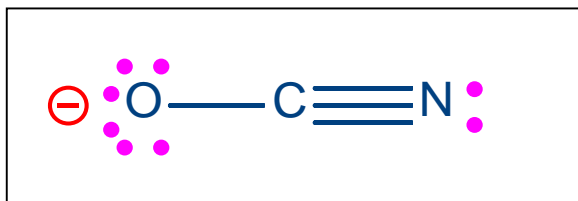
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

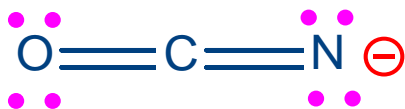
#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

#### ERRESONANTZIA

NCO<sup>-</sup> zianato anioiaren egitura erresonanteak



Karga negatiboa badago atomo elektronegatiboenaren gainean



Beraz, hauxe da Lewis-en egitura egokiena



Datu esperimentalak:

C-O distantzia erreala, lotura bakunari dagokiona baino laburragoa da

C-N distantzia erreala, lotura hirukoitzari dagokiona baino luzeagoa da

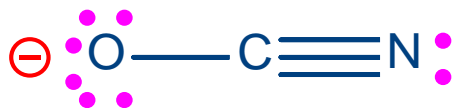
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

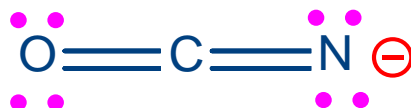
#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

#### ERRESONANTZIA

NCO<sup>-</sup> zianato anioiaren egiturak forma erresonante guztien ekarpena du



%60



%35



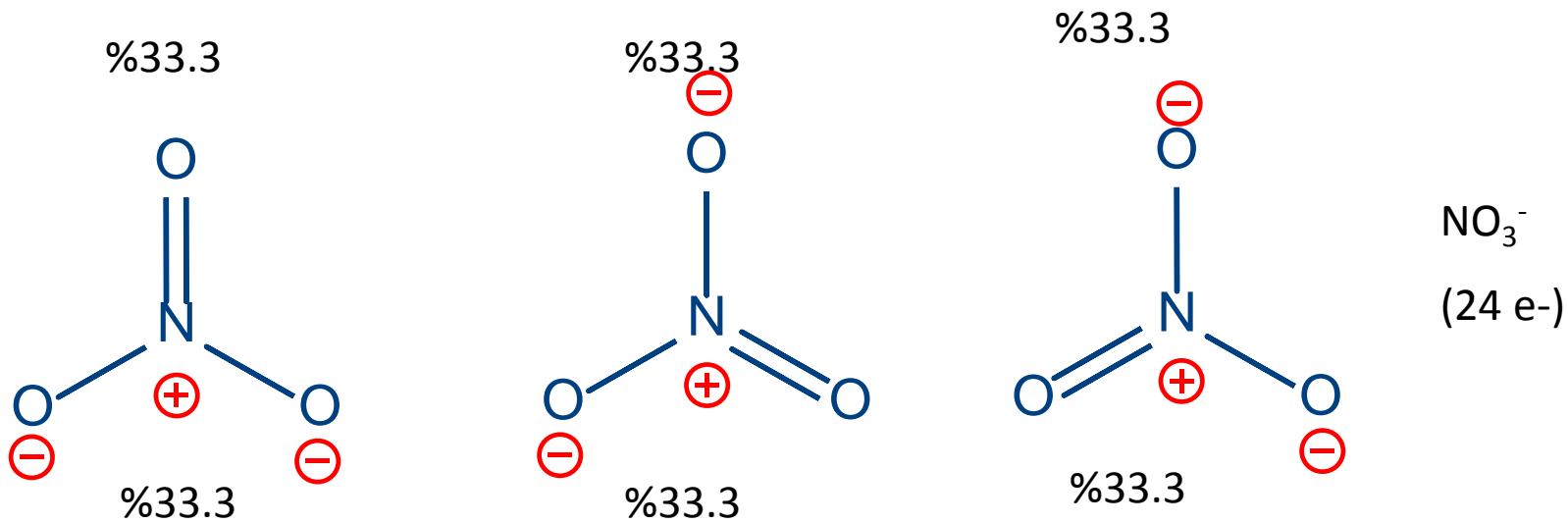
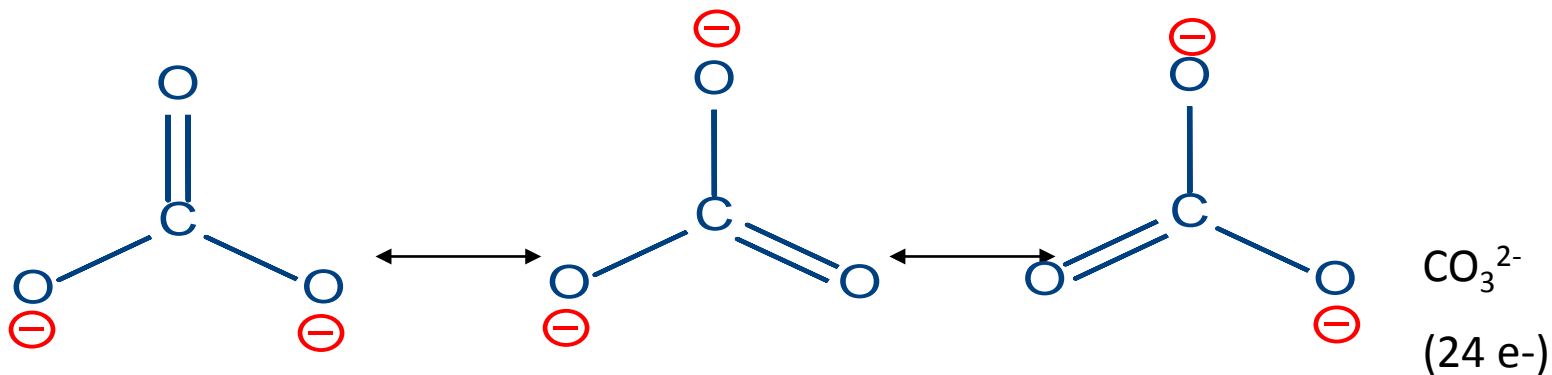
%5

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

ERRESONANTZIA

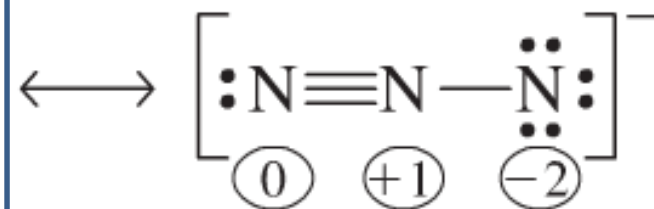
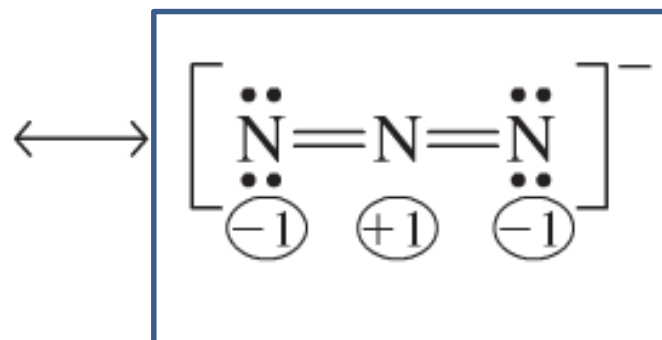
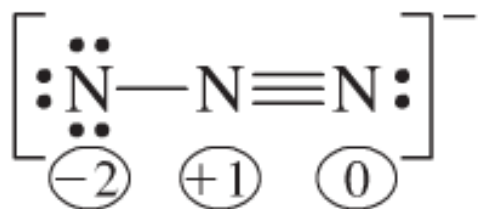
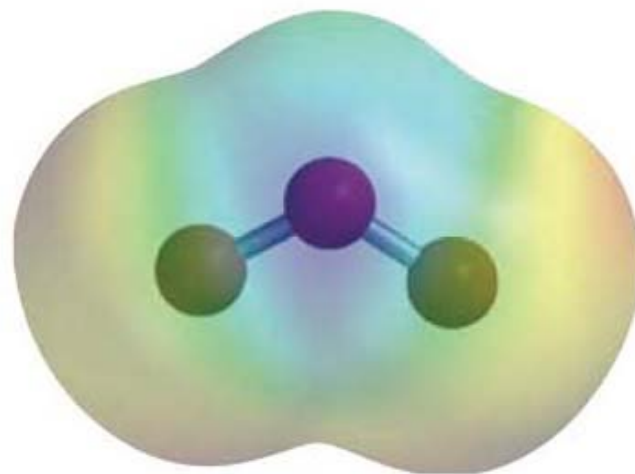
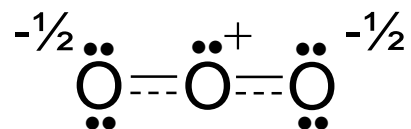
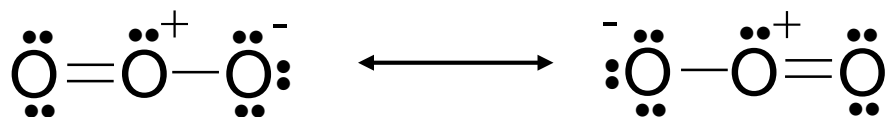


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

ERRESONANTZIA



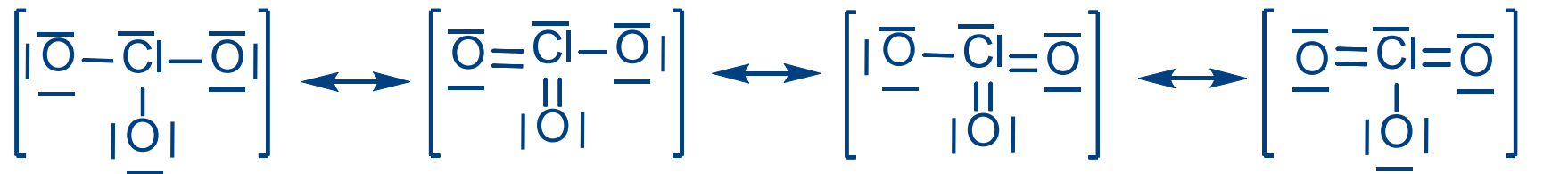
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### LEWIS-EN EGITURAK: KARGA FORMALA

Laburbilduz...

- . Askotan egitura bat baino gehiago planteatu ahal da: forma kanoniko deritzonak sortzen dira
- . Benetako egoera forma kanoniko hauen hibrido bat bezala deskribitzen da
- . Erresonantziak egonkortasuna ematen dio molekulari



$\text{ClO}_3^-$  ioia erresonantziaz egonkortuta



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

**ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA  
METODOA**

#### 06.2. GAIA. LOTURA KOBALENTEA

06.2. 2. Elektro-bikoteen bidezko ereduak

06.2.2.2. BGEBA Metodoa

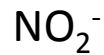
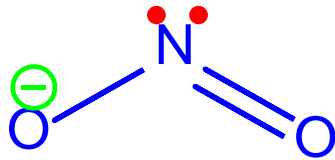
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

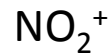
- Lewis-ek ez zuen ezer azaldu geometriari buruz
- Hori azaltzeko beste eredu bat garatu zen, Lewis-en teorian oinarrituta
- Molekula poliatomikoa hartzen duen geometria azalteko baliogarria da:

Balentzia-Geruzako Elektroien Bikoteen arteko Aldarapena (BGEBA)



(18 e<sup>-</sup>)

angeluarra



(16 e<sup>-</sup>)

lineala

zergatik?

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

- BGEBA metodoa: Zertan datza?

Zein loturakoa  
zein bakartia

*Atomo zentralaren inguruko elektroibikoteen banaketa espazialak egonkortasunaren aldea sorrarazten du*

- BGEBA metodoaren bidez, molekulen **geometria** aurreango dugu, Lewis-en egituretan oinarrituz

## 06. GAI: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

- Eredu hau 1949 urtean Sidwick-ek eta Powell-ek proposaturiko ideietan oinarritzen da, zeinak 1977 urtean Nyholm-ek eta, batez ere, Gillespie-k garatu zituzten
- Horregatik, eredu honi **Gillespie-ren eredu** ere deritzo
- s eta p blokeko metalak dituen molekula poliatomikoentzat besterik ez da baliogarria
- Atomo zentralaren inguruko karga-banaketa faboragarriena **elektroi-bikoteen arteko aldarapenak ahalik eta txikiak** sorrarazten dituen da.
- Horretarako elektroi-bikoteek geometria jakin batzuetan kokatuko dira.

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

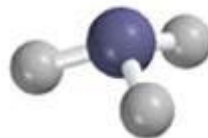
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Idea nagusia....

*Atomo zentralaren inguruko karga-banaketa egonkorrena bikote elektronikoen artean aldarapen txikiagoak sortarazten dituena da*

*Honen arabera elektroibikoteak atomo zentralaren inguruan kokatzen dira, molekula-geometria determinatuz*

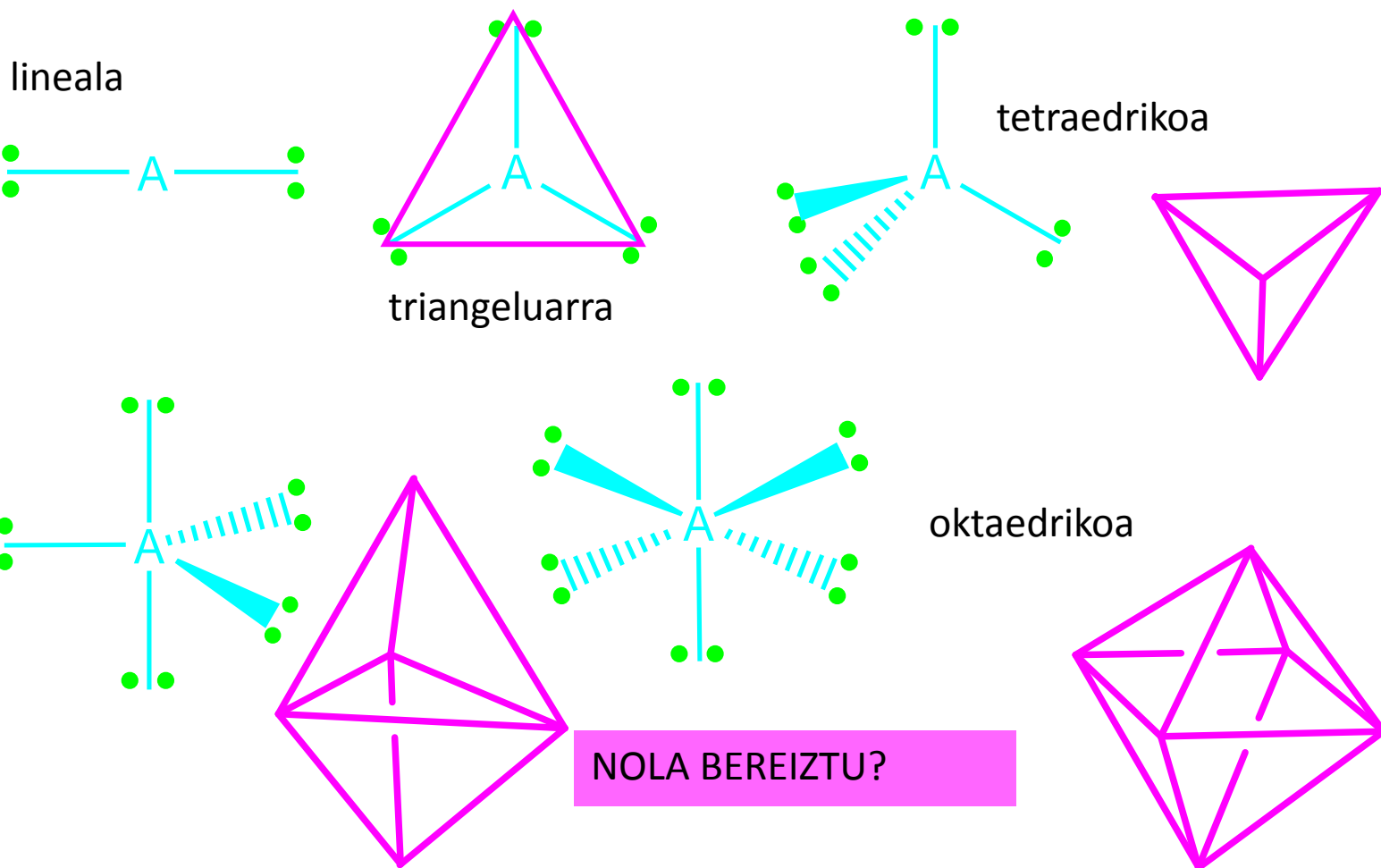


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Zeintzuk dira GEOMETRIA IDEAL hauek?



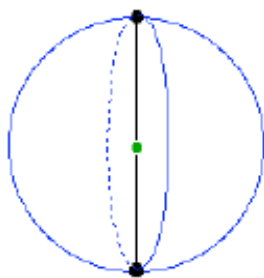
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

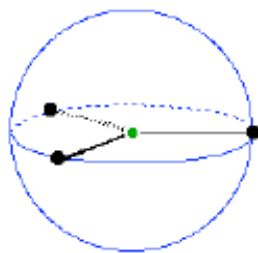
#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Sidwick y Powell (1940), Nyholm y Gillespie (1991)

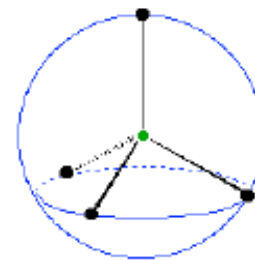
Geometria idealak:  $AX_n$



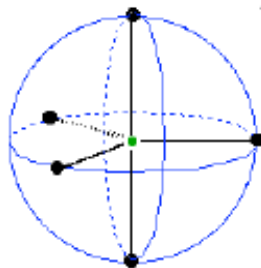
$AX_2$  lineal



$AX_3$  triangular



$AX_4$  tetraedro



$AX_5$  BPT



$AX_6$  octaedro

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

#### Elektroi-bikote kopurua

#### Geometria

2	Lineala ( $AB_2$ )
3	Trigonalala ( $AB_3$ )
4	Tetraedrikoa ( $AB_4$ )
5	Bipiramide trigonalala ( $AB_5$ )
6	Oktaedrikoa ( $AB_6$ )

- . **Elektroi-bikote bakartiek geometria ideal hauek aldatzen** dituzte aldarapenak direla eta
- . Aurrekoak oinarrizko geometriak besterik ez dira



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

BGEBA metodoak molekulen geometria auresaten du aurreko poliedroetan oinarrituz

#### PROZEDURA

1. Molekulen Lewis-en egitura irudikatu

2. Molekulak sailkatu

$AB_n$  modura:

$AB_2$ -tik  $AB_8$ -ra, non n atomo zentralaren inguruan dauden elektroibikoteen kopurua den

Lotura anizkoitzak lotura bakuntzat jotzen dira

$AX_xE_e$  modura ( $x+e=n$ ):

A = atomo zentrala

n = guztizko elektroibikote

E = bikote bakartia

e = bikote bakartien kopurua






X = lotutako atomoak

x = bikote konpartitutaren kopurua

# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Molécula	Estructura de Lewis	Pares enlazantes	Pares no enlazantes	Estructura	Geometría	Modelo molecular
<b>BeCl<sub>2</sub></b>	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{Cl} - \text{Be} - \text{Cl} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$	2	0	$\text{Cl} - \text{Be} - \text{Cl}$	Lineal	
<b>BF<sub>3</sub></b>	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{F} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{F} - \text{B} - \text{F} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$	3	0	$\begin{array}{c} \text{F} \\ \diagdown \\ \text{B} \\ \diagup \\ \text{F} \end{array}$ 120°	Triangular	
<b>CH<sub>4</sub></b>	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	4	0	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ 109,5°	Tetraédrica	
<b>NH<sub>3</sub></b>	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H} - \text{N} - \text{H} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$	3	1	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{N} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ <109,5°	Pirámide trigonal	
<b>H<sub>2</sub>O</b>	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{H} - \text{O} - \text{H} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$	2	2	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ <109,5°	Angular	

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

GEOMETRIA	$AX_xE_e$ MOTA	ADIBIDEAK
LINEALA	$AX_2$	$BeF_2$ (16 e-)
ANGELUARRA	$AX_2E$	$O_3$ (18 e-)
ANGELUARRA	$AX_2E_2$	$OF_2$ (20 e-)
LINEALA	$AX_2E_3$	$XeF_2$ (22 e-)
TRIGONALA	$AX_3$	$BF_3$ (24 e-)
PIRAMIDE TRIGONALA	$AX_3E$	$NF_3$ (26 e-)
T-FORMA	$AX_3E_2$	$ClF_3$ (28 e-)
	$AX_3E_3$	(30 e-)
TETRAEDRIKOA	$AX_4$	$CF_4$ (32 e-)
TETR. DISTORTSIONATUTA	$AX_4E$	$SF_4$ (34 e-)
KARRATU LAUNA	$AX_4E_2$	$XeF_4$ (36 e-)
	$AX_4E_3$	(38 e-)
BIPIRAMIDE TRIGONALA	$AX_5$	$PF_5$ (40 e-)
PIRAMIDE KARRATUA	$AX_5E$	$ClF_5$ (42 e-)
	$AX_5E_2$	(44 e-)
	$AX_5E_3$	(46 e-)
OKTAEDRIKOA	$AX_6$	$SF_6$ (48 e-)

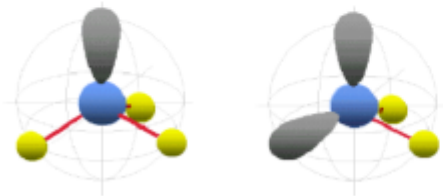
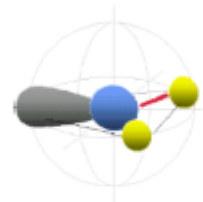
06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

06.2. LOTURA KOBALENTEA

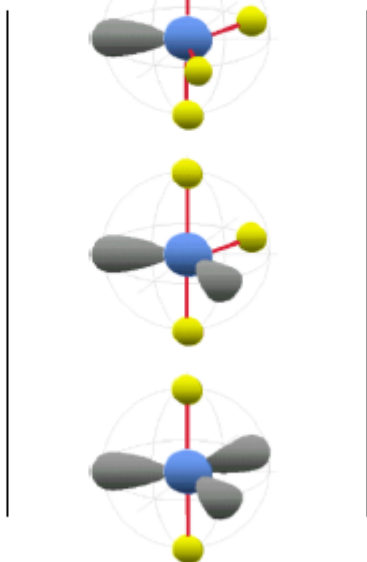
ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Bikote bakartiaren efektua

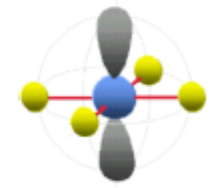
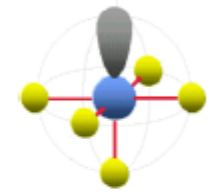
Triangeluar laua



Tetraedrikoa



Bipiramide trigonala

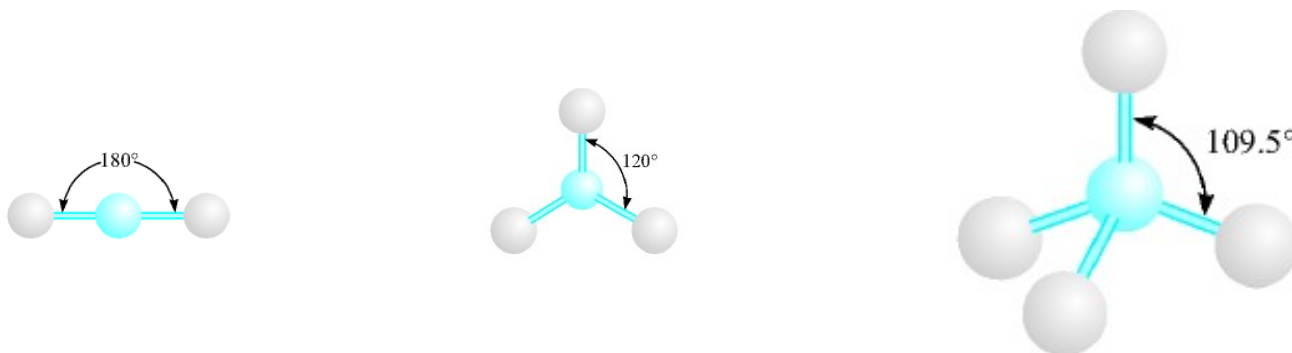


Oktaedrikoa

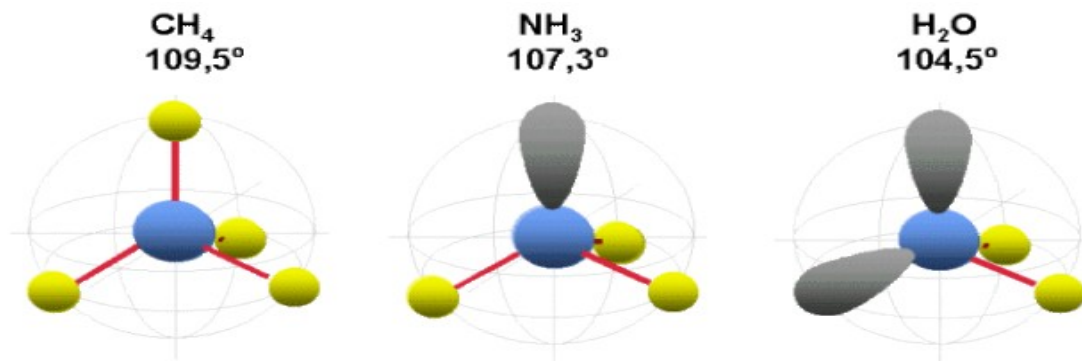
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA



Eratzen diren angeluak oinarrizko geometrietan



Bikote bakartiaren efektua geometria tetraedrikoan

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Azalpena:  $\text{H}_2\text{O}$  -  $\text{NH}_3$  -  $\text{CH}_4$  egituren arteko konparaketa

-  $\text{CH}_4$ : tetraedro perfektua, HCH angeluak:  $109.5^\circ$

-  $\text{NH}_3$ : elektroikote ez konpartituta batek N-H loturarena baino bolumen handiagoa betetzen du eta ondorioz HNH angeluak tetraedro perfektu batentzat esperagarriak baino txikiagoak dira:  $107.3^\circ$

-  $\text{H}_2\text{O}$ : bi elektroikote ez konpartituta  $\rightarrow$  HOH angelua oraindik txikiagoa da:  $104.5^\circ$

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

*Datu esperimentalak*

$NH_3 \rightarrow$  banaketa geometrikoa?

*Piramide triangeluarra, EZ TETRAEDRIKOA*

Datu gehiago: hainbat hidruroetan lotura-angeluak

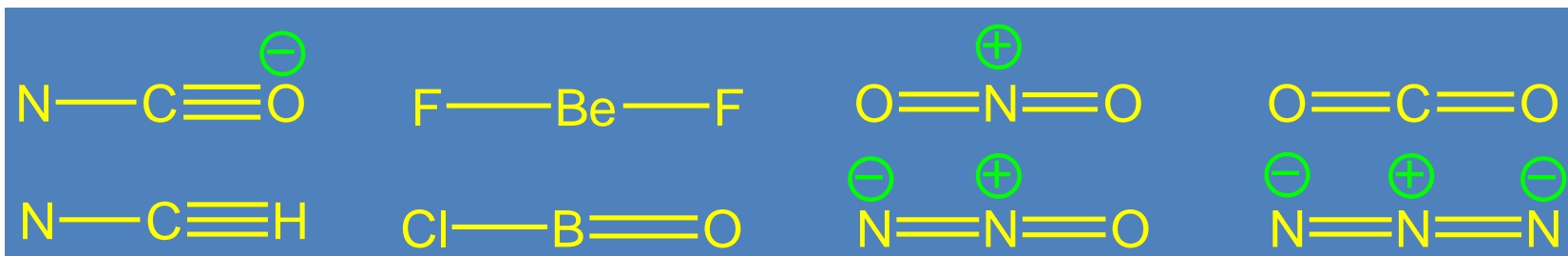
Konposatua	Angelua	Konposatua	Angelua
$CH_4$	$109^\circ 28'$	$CF_4$	$109^\circ 28'$
$:NH_3$	$106^\circ 47'$	$H_2O$	$104^\circ 27'$
$:PH_3$	$93^\circ 37'$	$H_2S$	$92^\circ 16'$
$:AsH_3$	$92^\circ$	$H_2Se$	$91^\circ$
$:SbH_3$	$91^\circ$	$H_2Te$	$90^\circ$

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

$AB_2$  espezie linealak( 16 elektroi)



espezie isoelektronikoek  
geometria bera daukate



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

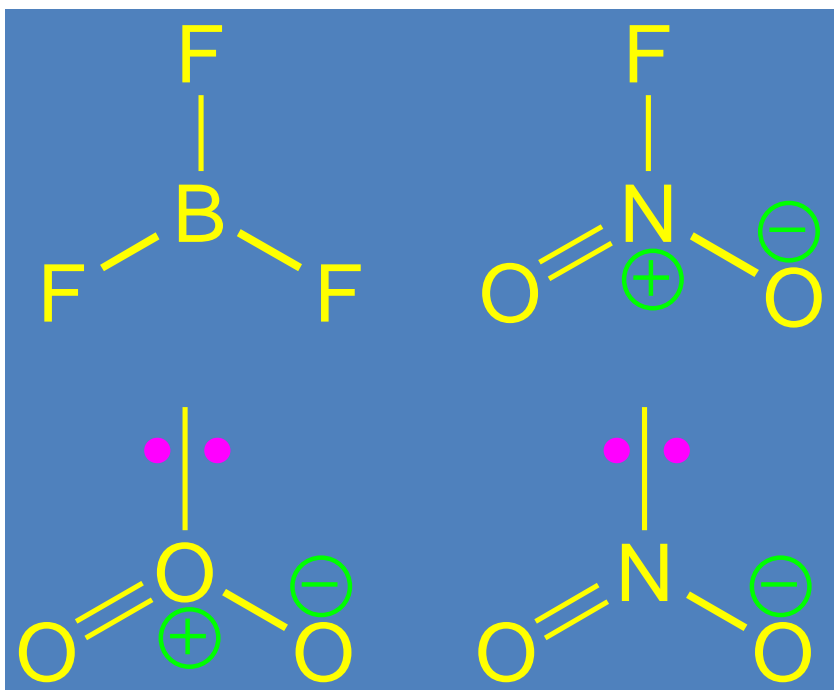
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

$AB_3$  espezieak

$AB_3$  molekula triangeluarrak (24 elektroio)

$AX_2E$  molekula angeluarrak (18 elektroio)



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

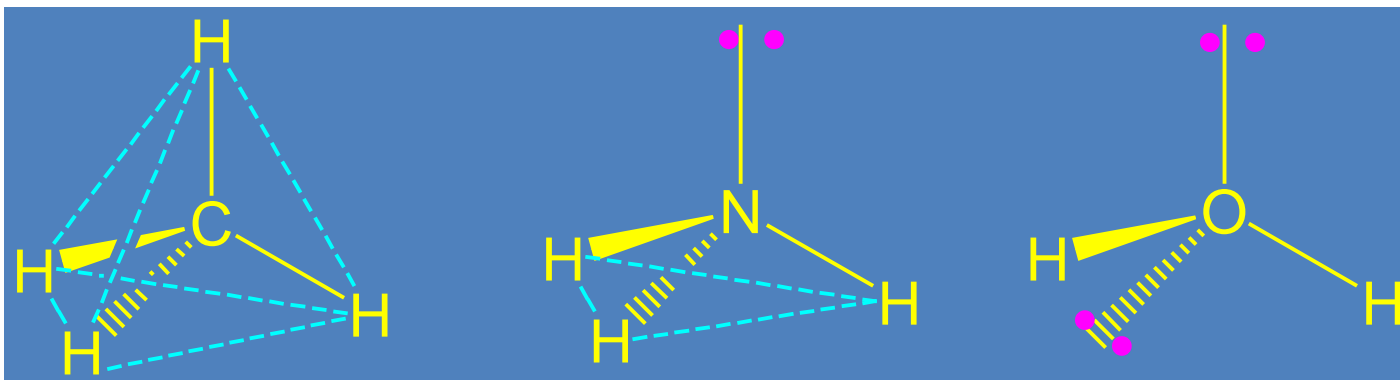
#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

##### AB<sub>4</sub> espezieak

AX<sub>4</sub> 32 elektroiko espezie tetraedrikoak: CF<sub>4</sub>, CCl<sub>4</sub>, CBr<sub>4</sub>, Cl<sub>4</sub>, NF<sub>4</sub><sup>+</sup>, BF<sub>4</sub><sup>-</sup>

AX<sub>3</sub>E 26 elektroiko espezie piramide trigonala: NF<sub>3</sub>, NCl<sub>3</sub>, PF<sub>3</sub>

AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub> 20 elektroiko espezie angeluarrak: OF<sub>2</sub>, SF<sub>2</sub>



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

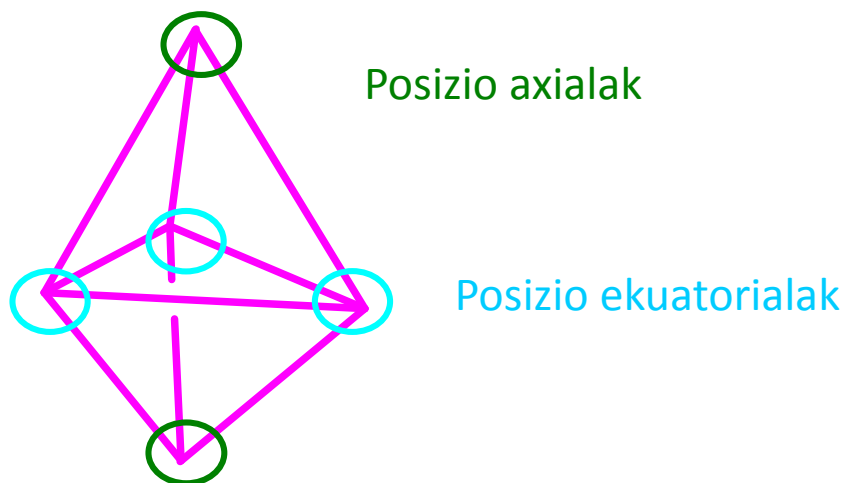
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

$AB_5$  espezieak

$AX_5$  40 elektroiko espezie bipiramide trigonalak:  $PF_5$ ,  $PCl_5$ ,  $AsF_5$

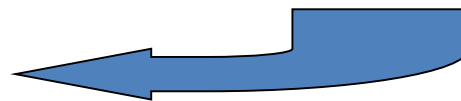
Bipiramide trigonal batean posizio guztiak ez dira baliokideak



Leku axialetako bikoteen arteko aldarapena, ekuatorialetakoen artekoa baino handiagoa da

Bikote bakartiek lotura-bikoteek baino aldarapen handiagoa eragiten dute...

bikote-bakartiak bipiramide trigonalaren leku ekuatorialetan kokatzen dira.



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

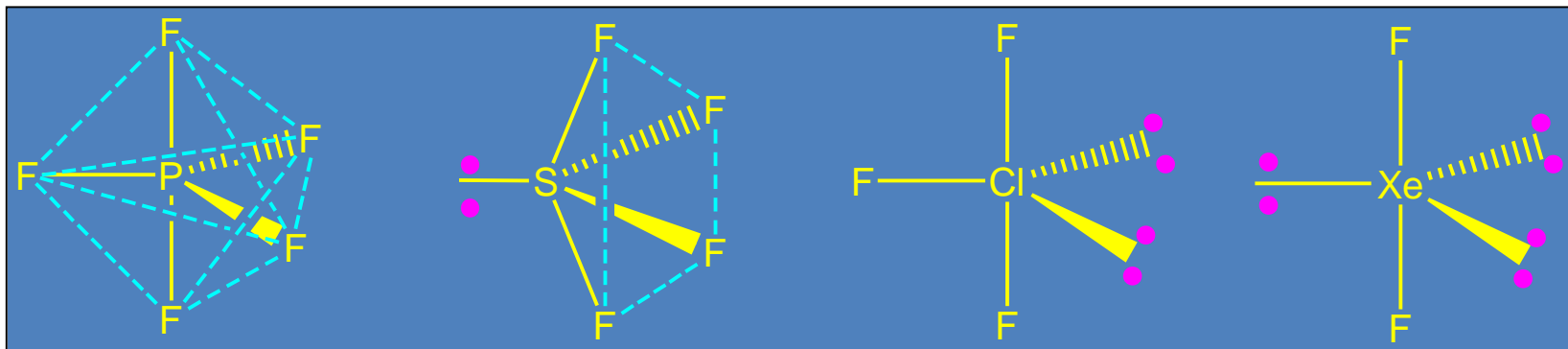
##### $AB_5$ espezieak

$AX_5$  40 elektroi, bipiramide trigonalak:  $PF_5$ ,  $PCl_5$ ,  $AsF_5$

$AX_4E$  34 elektroi, piramide karratu distortsionatuak:  $SF_4$ ,  $SeF_4$

$AX_3E_2$  28 elektroi, T-formakoak:  $ClF_3$ ,  $BrF_3$

$AX_2E_3$  22 elektroi, linealak:  $XeF_2$



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

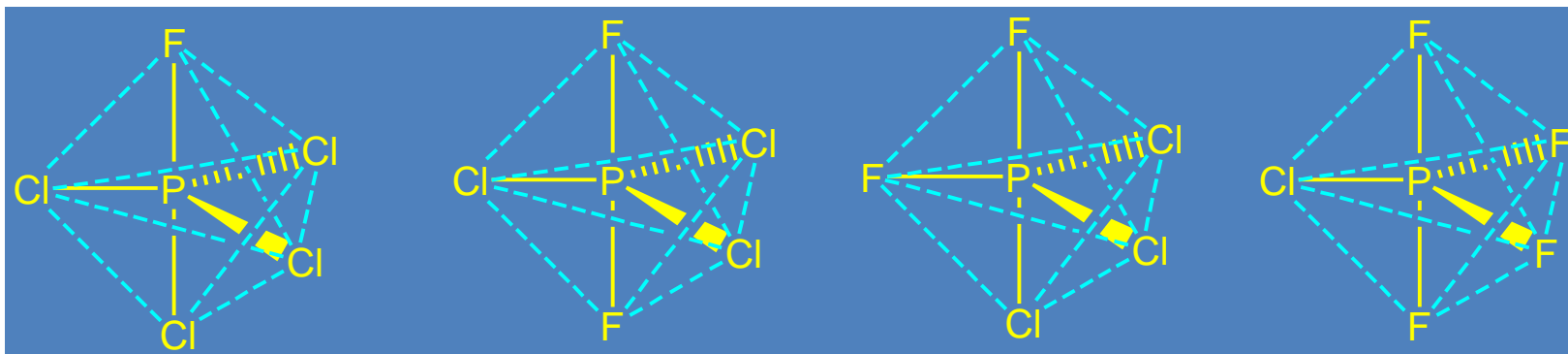
#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

$AB_5$  espezieak

$AX_5$  espezieak:

zelan kokatzen dira muturreko atomoak guztiak berdinak ez direnean????

atomo elektronegatiboenak leku axialetan kokatzen dira, dentsitate elektronikoa atomo zentraletik urruntzen baitute.



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

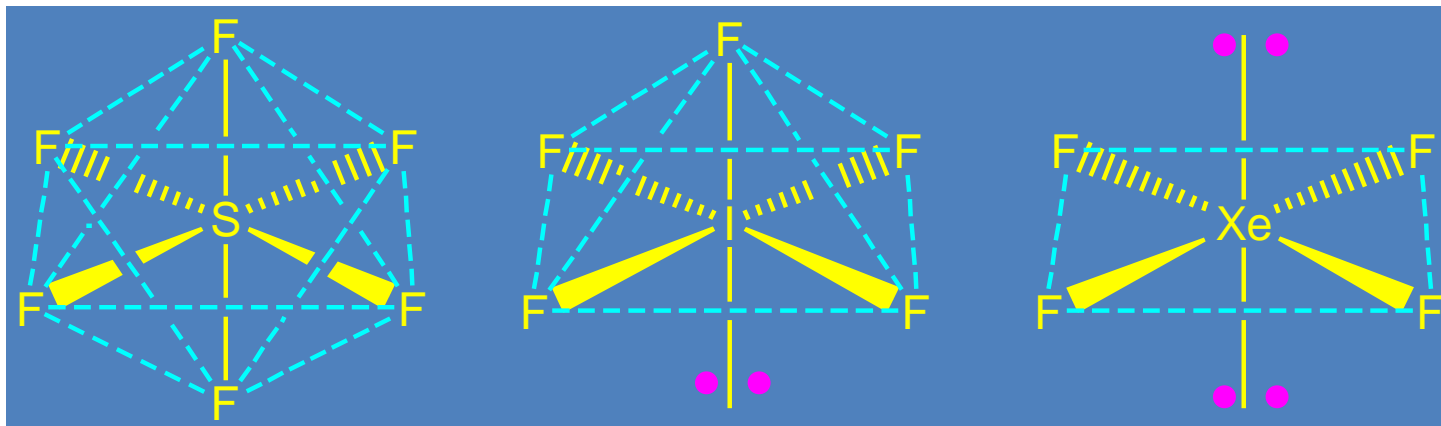
#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

#### $AB_6$ espezieak

$AX_6$  48 elektroi, okatedrikoak:  $SF_6$ ,  $SeF_6$ ,  $TeF_6$ ,  $PF_6^-$

$AX_5E$  42 elektroi, piramide karratuak:  $ClF_5$ ,  $BrF_5$ ,  $IF_5$

$AX_4E_2$  36 elektroi, karratu lauak:  $XeF_4$ ,  $ICl_4^-$



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA BGEBA METODOA

- Beraz aldarapenak daude, baina denak intentsitate berekoa?
- Honen arabera, elektroikoteak aldarapenak murrizteko posizioetan kokatzen dira
- Aldarapenak honela gutxitzen dira:



non, BEK = Bikote ez konpartituta

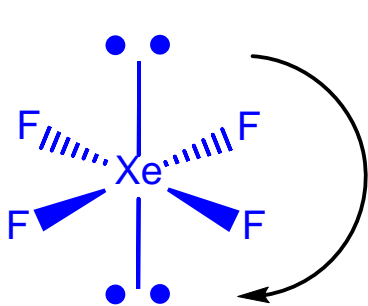
BK= Bikote konpartituta

“Ez konpartitutako elektroikote batek inguruko bikoteekiko sortarazten duen aldarapena konpartituta delakoarena baino handiagoa da”

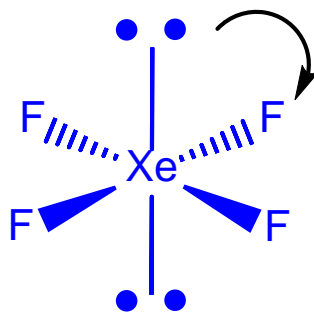
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

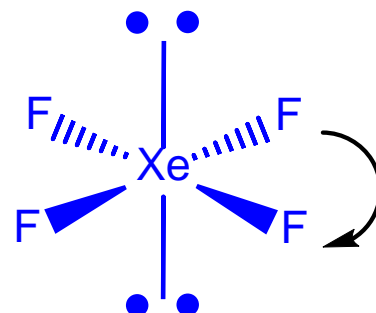
#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA BGEBA METODOA



BEK-BEK



BEK-BK



BK-BK



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Orain arte ikusitakoa da Gillespiek emandako arauen artean erabilgarriena da  
Ez da berak proposatu zuen bakarra...

- Gillespie-ren Arauek (1977) kontsideratzen dituzte hainbat eraginak elektroibikoteen arteko aldarapenetan:
  - Balentzia-Geruzako Elektroien Bikoteen arteko Aldarapena (BGEBA) (lehenengo araua)
  - Atomo zentralaren tamaina (bigarren araua)
  - Lotura anizkoitzak (hirugarren araua)
  - Elektronegatibitatea (laugarren araua)

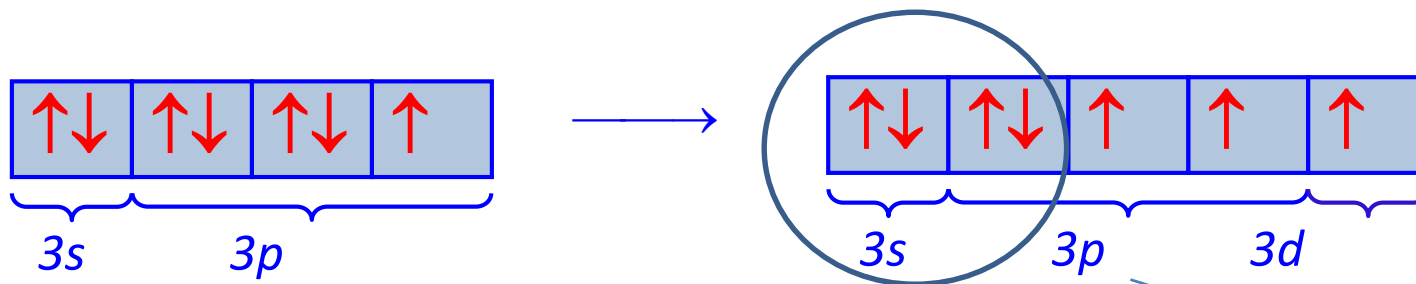
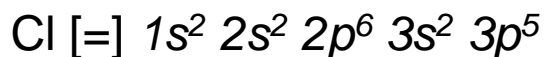
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

### 1.Araua.Gillespie-ren lehenengo arauaren aplikaziozko bi adibide

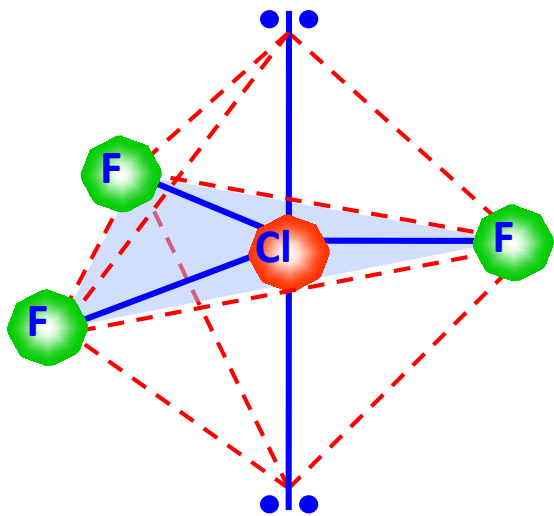
Molekula  $\text{ClF}_3$



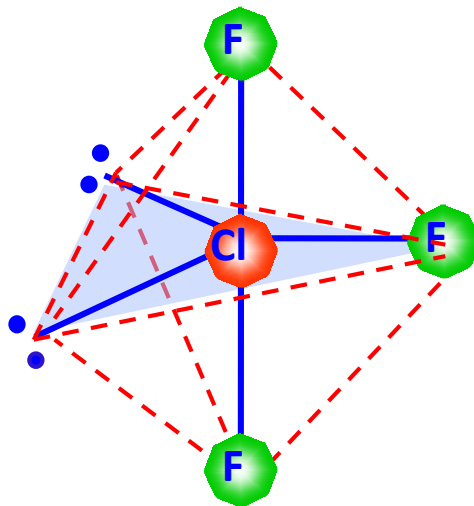
5 bikote , 10 elektroi: *bipiramide trigonala* (Hibridación  $sp^3d$ ) “E” bikoteak

Molekula-mota:  $\text{AX}_3\text{E}_2$

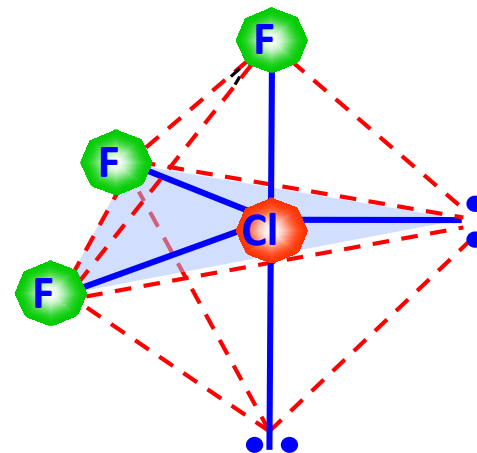
Zein izango da dagokion geometria? Izan ere, nola kokatu bikote lotzaileak?



(a)



(b)



(c)

OHARRA:  $180^\circ$ -ko eta  $120^\circ$ -ko angeluak ez dira kontuan hartzen eta  $90^\circ$ -koak dira nagusiak

bek – bek: 1( $180^\circ$ )

bek – bk: 6 ( $90^\circ$ )

bk - bk: 3 ( $120^\circ$ )

1( $120^\circ$ )

4 ( $90^\circ$ ), 2 ( $120^\circ$ )

2 ( $90^\circ$ )

1 ( $90^\circ$ )

3 ( $90^\circ$ ), 2 ( $120^\circ$ )

2 ( $90^\circ$ ), 1 ( $120^\circ$ )

Bakarrik gorritz daudenak kontsideratuta:

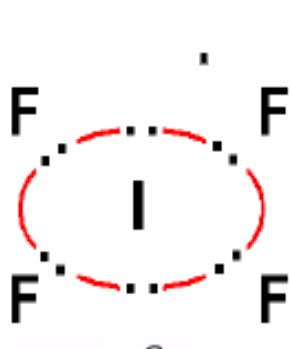
Egonkorrena den geometria (b) da, aldarapen txikiagoak izateagatik

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

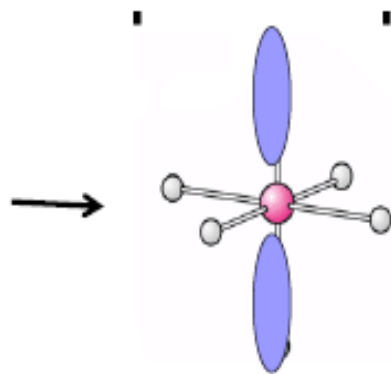
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Molekula :  $\text{IF}_4^-$   
elektroi-kopurua:  
 $7 + 7 \times 4 + 1 = 36$

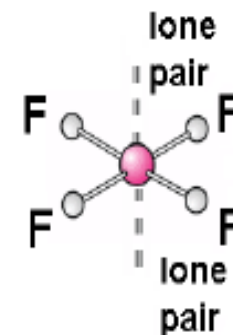


Lewis-en egitura



Geometria elektronikoa  
oktaedrikoa da

two lone  
pairs



Geometria molekularra  
Plano-karratua

KONTUZ!!!!

GEOMETRIA MOLEKULARRA ETA GEOMETRIA ELEKTRONIKOA BETI EZ DATOZ BAT.  
*Molekula "E" bikoteak* izanez gero, hauek ez dira kontsideratzen geometria molekularra definitzeko

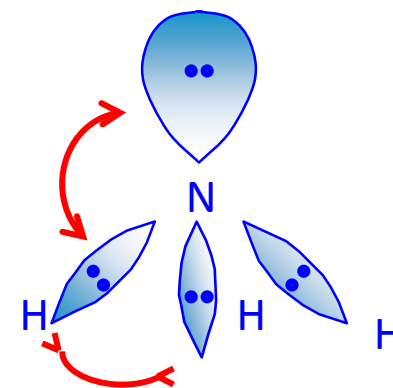
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

**2.Araua.** Atomo zentralaren eragina: atomo zentrala gero eta handiagoa izan orduan eta difusoagoak izango dira elektroibikote ez konpartituta

Konposatua	Angelua	Konposatua	Angelua
CH <sub>4</sub>	109° 28'	CF <sub>4</sub>	109° 28'
:NH <sub>3</sub>	106° 47'	H <sub>2</sub> Ö:	104° 27'
:PH <sub>3</sub>	93° 37'	H <sub>2</sub> S:	92° 16'
:AsH <sub>3</sub>	92°	H <sub>2</sub> Se:	91°
:SbH <sub>3</sub>	91°	H <sub>2</sub> Te:	90°

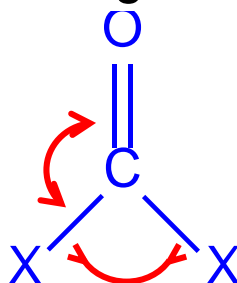


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

**3.Araua.** Lotura anizkoitzen eragina: lotura anizkoitzek ondoko bikoteen gainean aldarapen handiagoa eragiten dute



Lotura anizkoitzak dituen molekulen lotura-angeluak(°)

Molécula	XCX	XCO	Molécula	XCX	XCC
$F_2C = O$	108	126	$H_2C = CF_2$	110	125
$Cl_2C = O$	111	124	$H_2C = CCl_2$	114	123
$(NH_2)_2C = O$	118	121	$F_3P = O$	103	
$F_2S = O$	93	107	$Cl_3P = O$	104	
$Br_2S = O$	96	108			

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

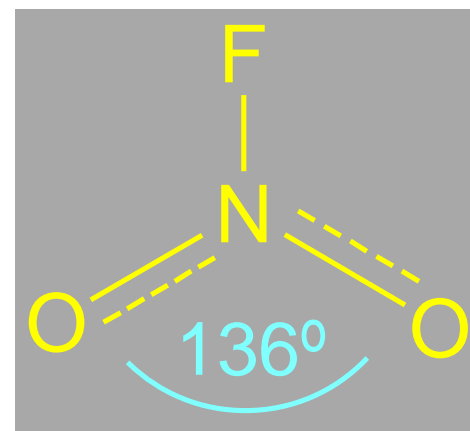
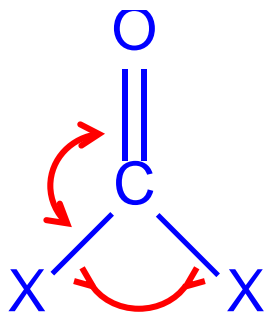
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

#### 4.Araua: elektronegatibotasuna

- Atomo zentralaren elektronegatibitatea handiagoa bada bere elektroiek betetzen duten espazioa txikiagoa izango da.
- Muturreko atomo bat besteak baino elektronegatiboagoa bada dentsitate elektronikoa berarengana zuzenduko da. Ondorioz bere ondoko angeluak ixten dira, eta bestea irekitzen da

Molécula	XCX	XCO
$F_2C = O$	108	126
$Cl_2C = O$	111	124



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

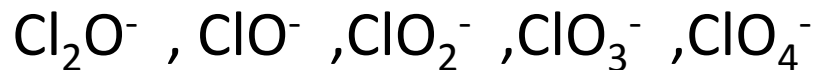
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

1. Lewis-en egitura irudikatu , forma erresonanteak adieraziz:

- a) Azetato ioia:  $\text{CH}_3\text{COO}^-$
- b) Zianogenoa:  $\text{C}_2\text{N}_2$

2. O-z eta Cl-z osatutako hurrengo konposatuak ezagunak ditugu:



a) Lewis-en egiturak idatzi

b) Molekula guztien geometria aurreesan , gutxi gorabeherako angeluak adierazten eta BGEBA erabiltzen.



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA. BGEBA METODOA

Molekula hauen geometria irudikatu:



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA

#### HITZEN GLOSARIOA

- . Elektronegatibitatea: atomo batek lotura-elektroiak beregaratzeko dituen gaitasuna da
- . Balentzia-elektroiak: azken geruzako elektroiak
- . Karga formala: atomo bakoitzak molekula batean duen karga partziala
- . Erresonantzia: lotura anizkoitzak lekuz aldatzean sortzen den dentsitate elektronikoa deslekupena
- . Bikote bakartia: atomo bateko konpartitu gabeko elektroi bikotea
- . Bikote lotzailea: atomo bateko konpartitutako elektroi bikotea
- . Erradio kobalentea: molekula kobalentean nukleoen arteko distantzia

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK. GEOMETRIA MOLEKULARRA

#### BIBLIOGRAFIA

1. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*; 11<sup>a</sup> Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
2. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.: *Química General*. Ed: Pearson Education, 10<sup>a</sup> Ed., Madrid, (2011)
3. Valenzuela, C.: *Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia*. Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)
4. Lothar Beyer: *Química Inorgánica*. Ed. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
5. Housecroft, C. E., A. Sharpe: *Química Inorgánica*. Ed. Pearson Prentice Hall, Madrid (2006)
6. Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)

## *06.GAIA: LOTURA KIMIKOA*

*06.1: LOTURA IONIKOA*

*06.2: LOTURA KOBALENTEA*

*06.3: LOTURA METALIKOA*

*06.4: KOHESIO-INDARRAK*

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2: LOTURA KOBALENTEA

#### 6.2.1 . Sarrera

#### 6.2. 2. Elektro-bikoteen bidezko ereduak

##### 6.2.2.1. Lewis-en egiturak

##### 6.2.2.2. BGEBA metodoa

#### **6.2. 3. Balentzia-loturaren Teoria (hibridazioa)**

#### 6.2. 4. Orbital Molekularraren Teoria

#### 6.2. 5. Lotura - Parametroak

06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

06.2: LOTURA KOBALENTEA

### **06.2.3. BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)**

#### **AURKIBIDEA**

**06.2.3. 1. Sarrera**

**06.2.3. 2. Loturaren eraketa**

**06.2.3. 3. Molekula sinpleen miaketa**

**06.2.3. 4. Hibridazioa**

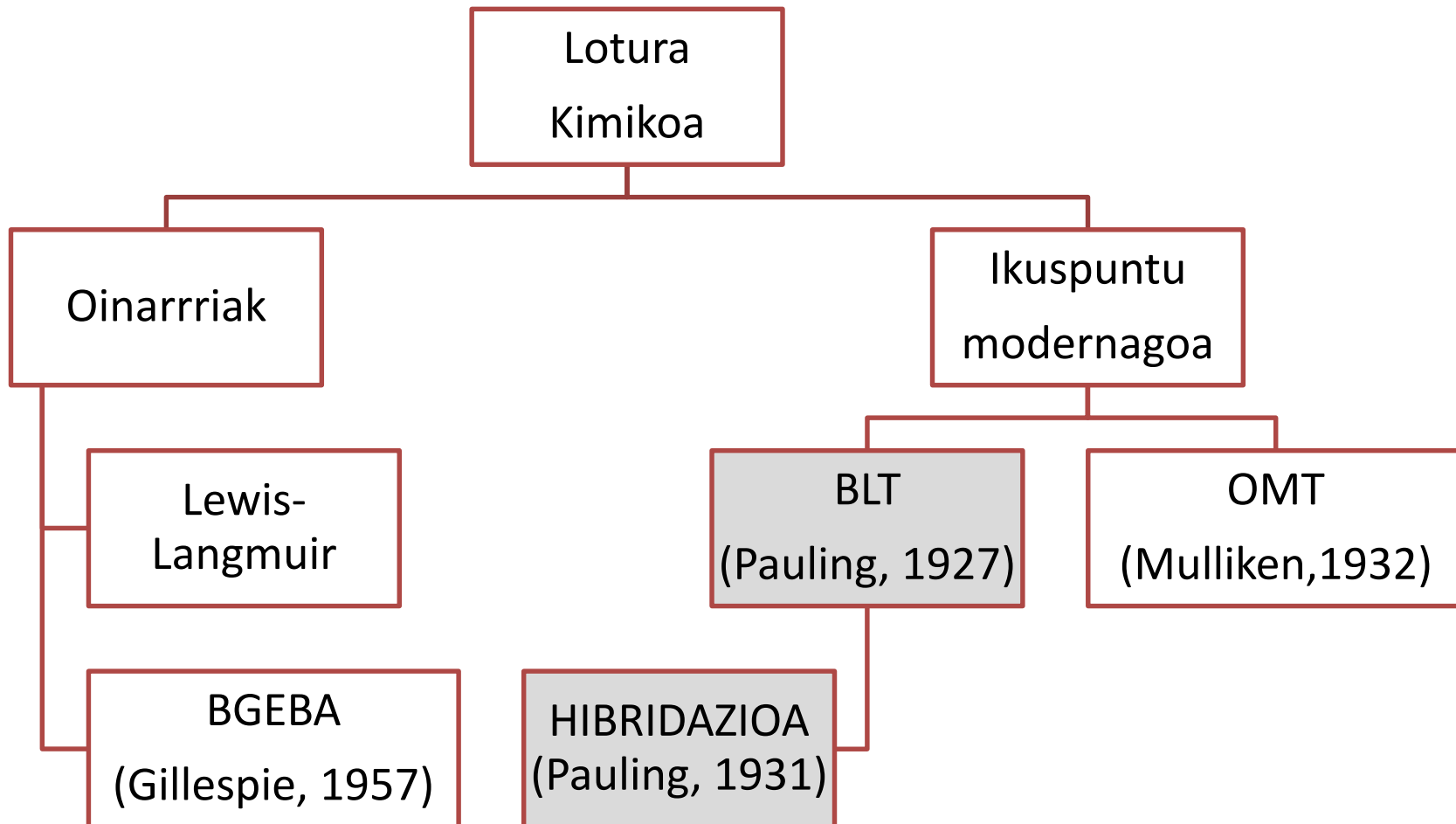
06.2. GAIA. LOTURA KOBALENTEA

06.2. 3. Balentzia-loturaren Teoria

06.2.3.1. Sarrera

06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

06.2: LOTURA KOBALENTEA





## 06. LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

LEWIS-EN EGITURAK

BGEBEA METODOA



EREDU KLASIKOAK

BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA



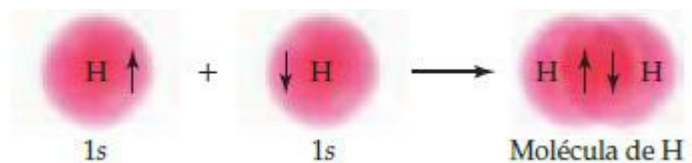
MEKANIKA KUANTIKOAN  
OINARRITUTAKO TEORIA



TARTEKOA

## *LOTURA KOBALENTEA.....*

### *ELEKTROIAK PARTEKATZEN !*



## 06.2. GAIA. LOTURA KOBALENTEA

### 06.2. 3. Balentzia-loturaren Teoria

#### 06.2.3.2. Loturaren eraketa

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

- 1927.urtean Walter H Heitlerrek y Fritz W. Londonek garatua
- Alderdi energetikoak azaltzeko sortua zen
- 1932.urtean L. Paulingek osatu zuen hibridazio teoriarekin



molekula poliatomikoetako loturaren norabidetasuna  
azaltzen du

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

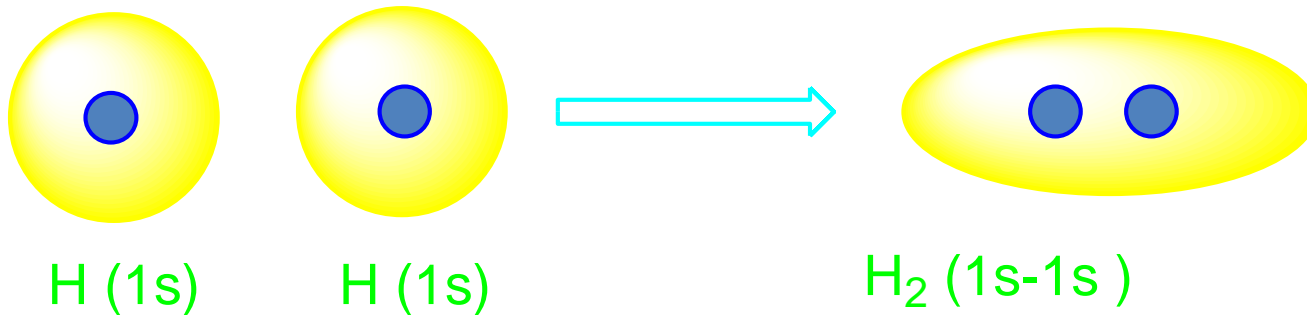
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

- Molekula bat sortzeko lotura kobalentearen eraketak suposatzen du.....

*“BI ATOMOEN ARTEKO DENTSITATE ELEKTRONIKOAREN METAKETA”*

- Aurrekoa loturaren definizioa besterik ez da
- Dentsitate elektronikoaren metaketa **atomoen gainezarpenari esker** lortzen da, hemen ikusten den bezala



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Hainbat ideiak

1. Elektroiak " loturan " uhin-funtzio baten bidez azaltzen dira
2. Funtzio honen balioa alda daiteke energia minimoa lor dadin
3. Atomo isolatuen elektroiak orbital atomikoetan daude
4. Loturak eratzen direnean orbital atomikoek elkarri **gainezartzen** diote
5. Horrela lotura-bikoteak **gainezartze-zonalde** hauetan zehar mugitzen dira
6. Bi atomo hauen eragina nabaritzuz elektroiak atxikirik mantentzen dira

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Hainbat ideiak

- Loturako elektroiak uhin-funtzio bat adierazten duen ekuazio matematiko baten bidez definitzen dira

- Orbital atomikoaren gainezarpena



ekuazio matematikoen arteko konbinaketa lineala

- Ekuazioa hau bolumen atomikoren adierazpena da
- Sortutako bolumen berriak lotura honen gakoa dira

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

- Egoera kuantiko berriak sortzen dira,  $H_2$  molekularako uhin-funtzioa adierazgarriak direnak
- Uhin-funtzio hau Schrödingerren ekuazioa ordezkatzeko da

$$H \psi = E \psi$$

- $r$ , nukleoarteko distantzia guztietarako ebatzen da
- Energia minimoko egoerari dagokion distantzia, oreka distantzia edo lotura-distantzia izango da
- Energia minimo hau lotura-energia da



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

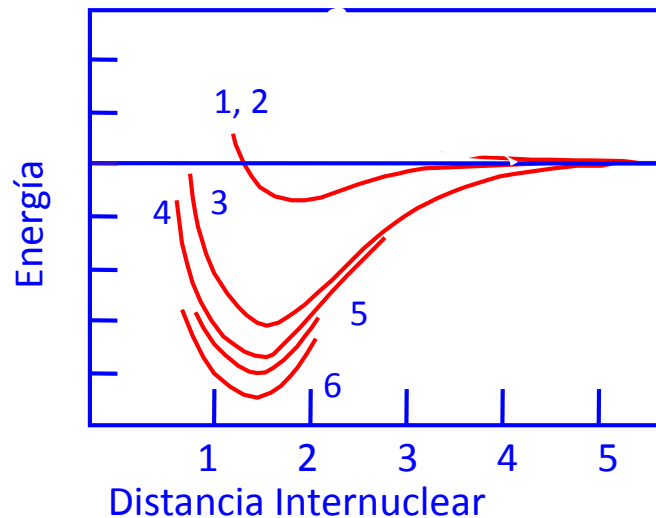
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Caso	Estructura	Función de onda	E (–kcal mol <sup>-1</sup> )	r <sub>min</sub> (Å)
1	H <sub>A</sub> <sup>(1)</sup> (2)H <sub>B</sub>	$\psi_1 = \psi_A(1) \psi_B(2)$	6,0	0,90
2	H <sub>A</sub> <sup>(2)</sup> (1)H <sub>B</sub>	$\psi_2 = \psi_A(2) \psi_B(1)$	6,0	0,90
3	H <sub>A</sub> <sup>(1)</sup> (2)H <sub>B</sub> H <sub>A</sub> <sup>(2)</sup> (1)H <sub>B</sub>	$\Psi_{\text{covalente}} = \psi_1 + \psi_2$	72,4	0,87
4	Caso 3 con z*		87,2	0,743
5	H <sub>A</sub> <sup>(1)</sup> (2)H <sub>B</sub> H <sub>A</sub> <sup>(2)</sup> (1)H <sub>B</sub> H <sub>A</sub> <sup>(1)(2)-</sup> H <sub>B</sub> <sup>+</sup> H <sub>A</sub> <sup>+</sup> (1)(2)H <sub>B</sub> <sup>-</sup>	$\psi_3 = \psi_A(1) \psi_A(2)$ $\psi_4 = \psi_B(1) \psi_B(2)$ $\Psi_{\text{ionikoa}} = \psi_3 + \psi_4$ $\Psi = \Psi_{\text{kobalente}} + \lambda \Psi_{\text{ionikoa}}$	92,7	0,749
6	H <sub>2</sub> (erreala)		104,0	0,741

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)



Energia-potentzialaren kurbak hidrogeno molekularako

Erabilitako egiturak izen desberdinak dituzte

- Balentzia-loturazko egiturak
- Forma kanonikoak
- Forma erresonanteak

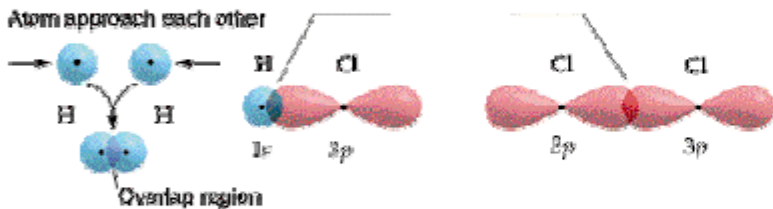
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

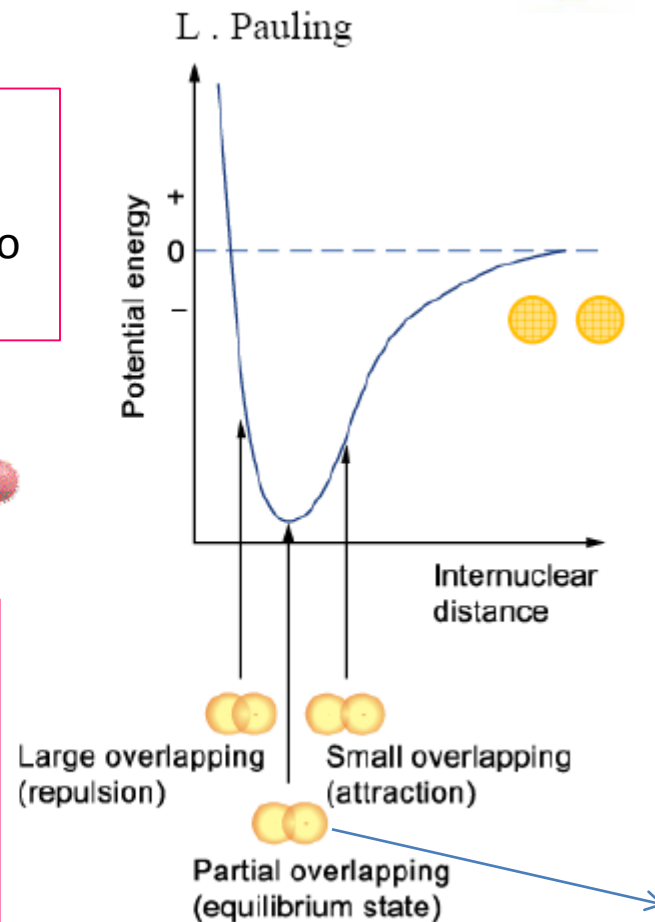
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

#### ENERGIARI DAGOKIONEZ ,NOLA SORTZEN DA LOTURA?

- Bi O.A. gainezarpenerari esker sortzen da
- Orbital bakoitzean elektroik parekatu gabeko bakarra dago



- Gainezarpeneratik elektroik lotura bi nukleoen arteko zonaldean kokatzen dira
- Elektroiak zonalde honetan aurkitzeko probabilitatea handiagoa da



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

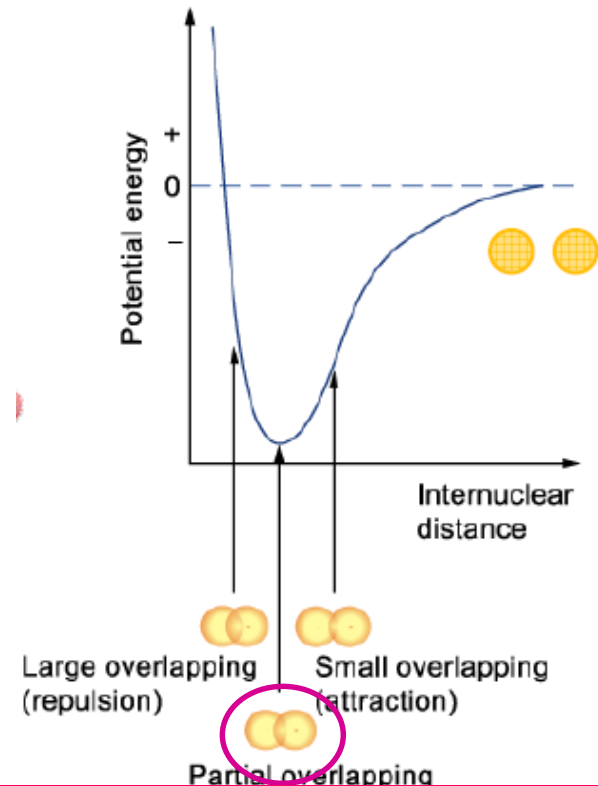
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

#### NOIZ SORTZEN DA LOTURA ENERGIARI DAGOKIONEZ?

- Eskumaldekoan:  
Erakarpén-indarraren eza
- Ezkerraldekoan:  
Aldarapén-indarraren gehiegizkoa
- Erdian  
Erakarpén- eta aldarapén-  
indarren oreka



Loturaren energia eta distantzia dira



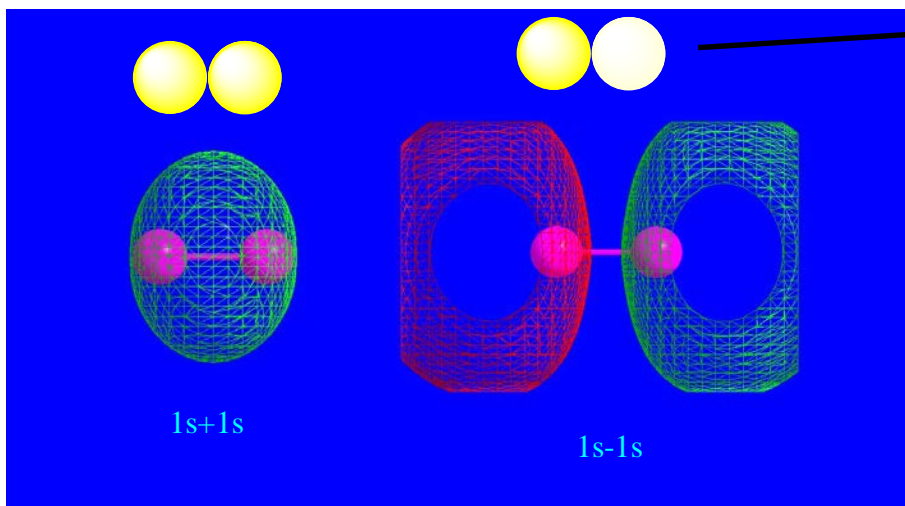
Erakarpén indarrak= Aldarapén indarrak

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

- Gainezartzea → orbitalen ekuazio matematikoen **arteko konbinazioa**
- Orbitalen ekuazio matematikoak bolumenen adierazpenak dira → horien arteko konbinazioak egitean sortzen diren **bolumen berrietan** loturaren gakoa dugu
- Bolumenen **batuketa** egitean nukleo bien artean **zonalde komun** bat sortzen da → **bertan** egongo da kokatuta **lotura-bikotea**.
- Bolumen arteko **kenketa** ere egin daiteke, eta orduan nukleo bien artean ez da egongo komuna den zonalderik.



kenketa adierazteko  
Kolore desberdinak  
erabiltzen dira

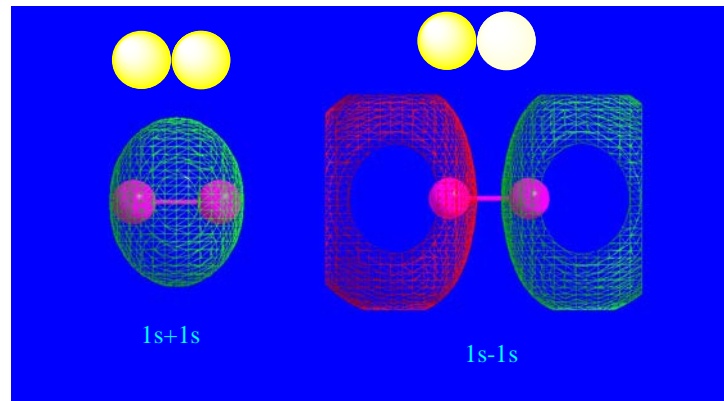
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Konbinaketaren bi aukera

- **Konbinaketa simetrikoa, batuketa: LOTURAREN ALDE**
  - Bolumenak gehitzean zonalde amankomun bat sortzen da, loturako bikotea bertan daudelarik
- **Konbinaketa antisimetrikoa, kenketa: LOTURAREN AURKA**
  - Bolumenak gehitzean zonalde amankomuna ez da sortzen
  - Nodo-planoa dago non elektroia ez da inoiz egongo

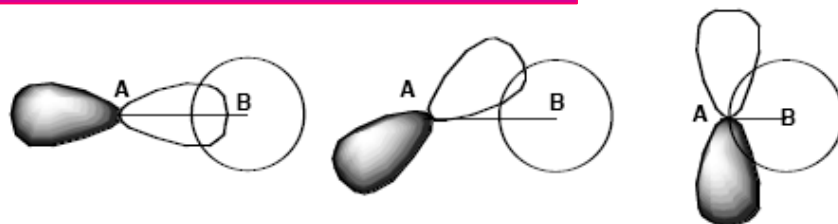


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

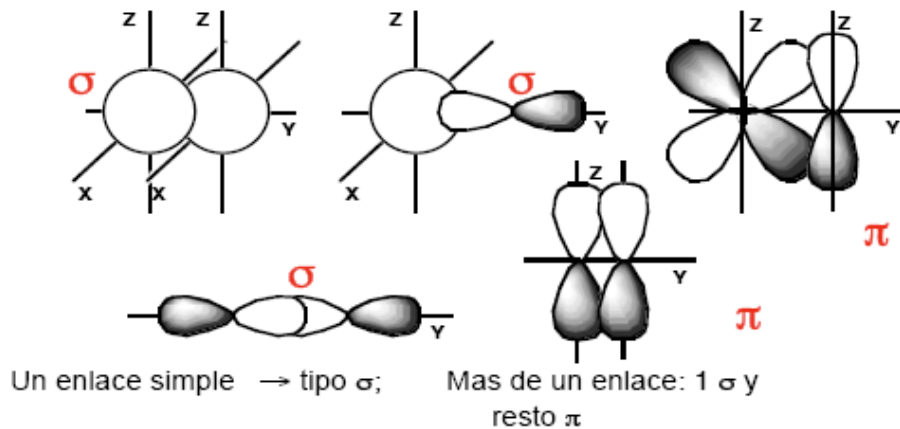
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### Gainezarpen- maximoaren Printzipioa



##### $\sigma$ -LOTURAK eta $\pi$ -LOTURAK



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

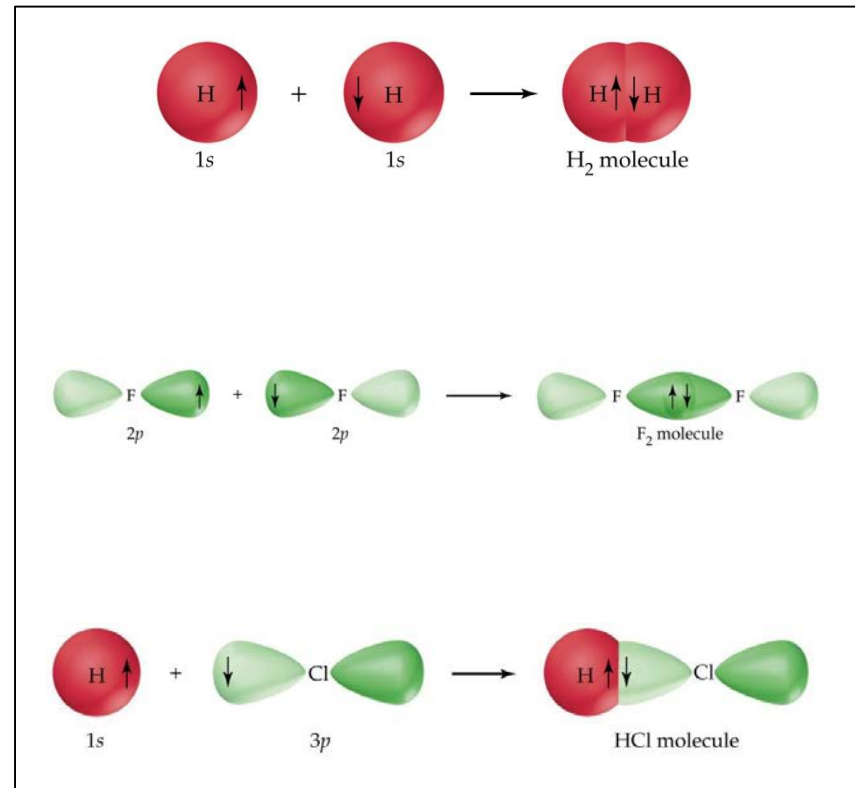
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Teoria honetan gainezarpenaren arabera bi lotura mota agerian daude

#### $\sigma$ loturak

- Gainezarpen frontala
- Aurrez aurreko gainezarpenera suertatuz gero, bi orbital atomikoren nukleoak biltzen dira lerroaren zehar
- Konpartitzen den bikotearen hodei elektronikoa bi nukleoaren artean dago eta ardatzarekiko simetrikoa da
- s eta  $p_z$  orbitalak parte hartzen dute



“sigma” lotura guztiak bakunak dira



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

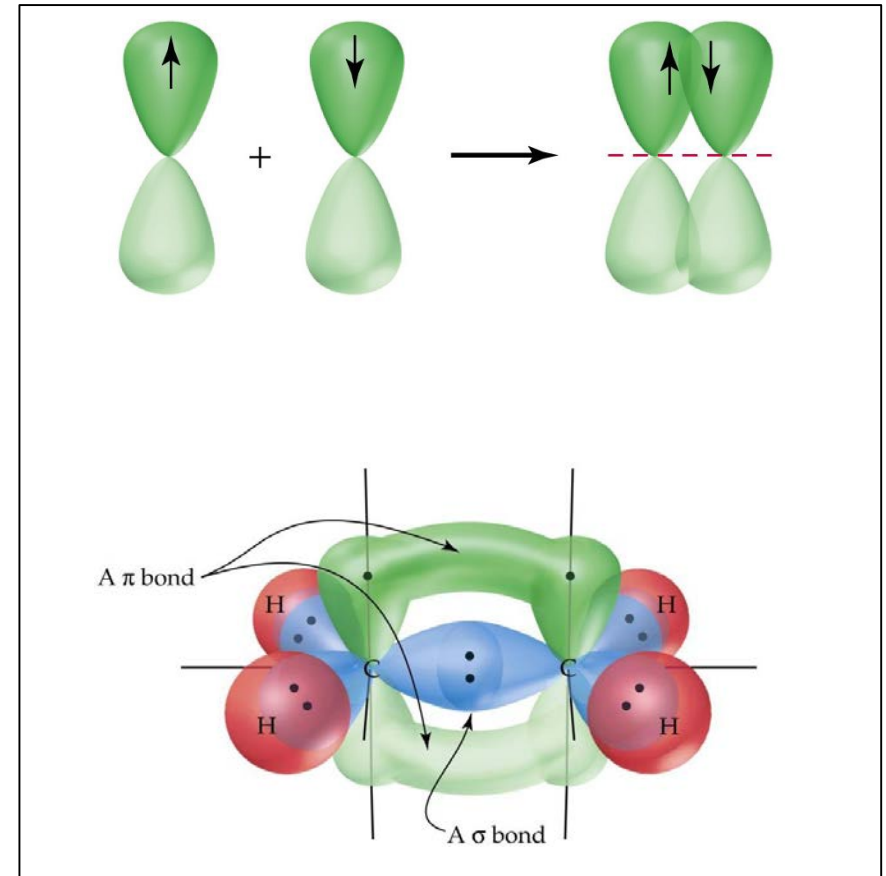
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

#### $\pi$ loturak

- Gainezarpen albokoa, ez zuzena
- Lotura anizkoitzak sortarazten dituzte
- Euren arteko gainezartzea lotura-direkzioaren azpian eta gainean dago kokatuta
- horietan  $p_x$  eta  $p_y$  orbitalek hartzen dute parte, orbitalak lotura-direkzioarekiko **perpendikularrak** baitira
- "pi" lotura eratzeko aldez aurretik "sigma" lotura bat eratu behar da

Gogoratu:

p orbitalen gainezartzean:  
norabidetasuna aproposa  
izan behar da



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### LABURPENNA

- Lewis-en egituran **lotura sinplea**  $\sigma$  lotura bati dagokio B.L.T.-n (s-s, s- $p_z$  edo  $p_z$ - $p_z$  )
- Lewis-en egituran **lotura anizkoitza** (bikoitzak eta hirukoitzak)  $\pi$  lotura bati dagokio B.L.T.-an
- Lotura anizkoitzen **kopuru maximoa molekuletan 3** da, gehienez bi p lotura era daitezkeelako ( $p_x+p_x$  eta  $p_y+p_y$  konbinazioei dagozkienak)
- $\pi$  loturak sigma loturak baino ahulagoak dira, bere gainezarpenna txarragoa delako

## 06.2. GAIA. LOTURA KOBALENTEA

### 06.2. 3. Balentzia-loturaren Teoria

#### 06.2.3.3. Molekula sinpleen miaketa

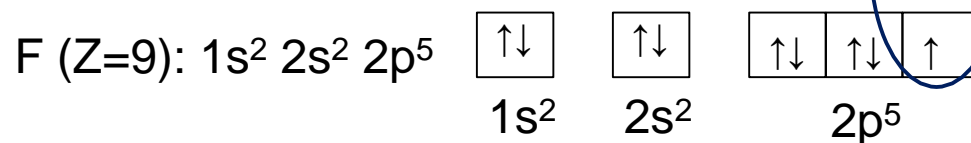
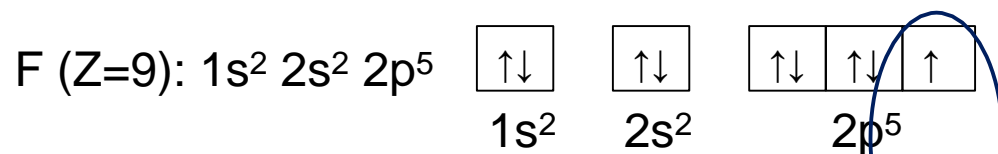
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

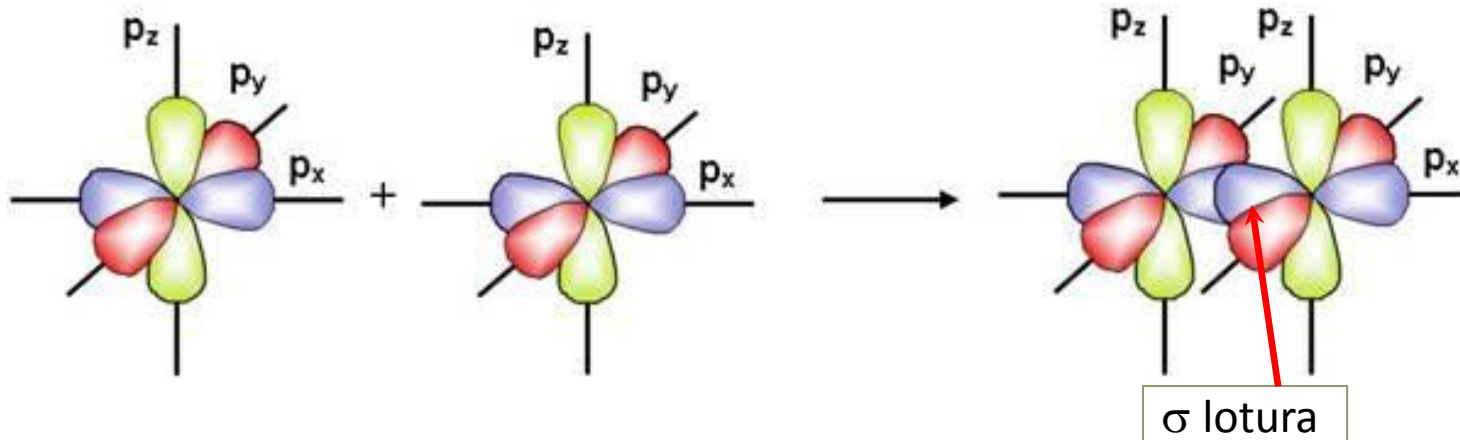
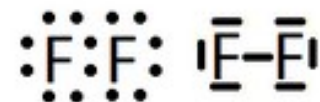
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

F<sub>2</sub> molekula

Lotura bakarra: LOTURA BAKUNA → Lotura  $\sigma$



Lewis-en egitura



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

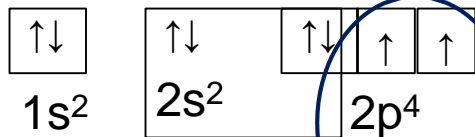
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

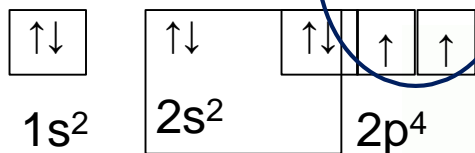
## O<sub>2</sub> molekula

2 lotura: **LOTURA BIKOITZA** → **lotura  $\sigma$  + lotura  $\pi$**

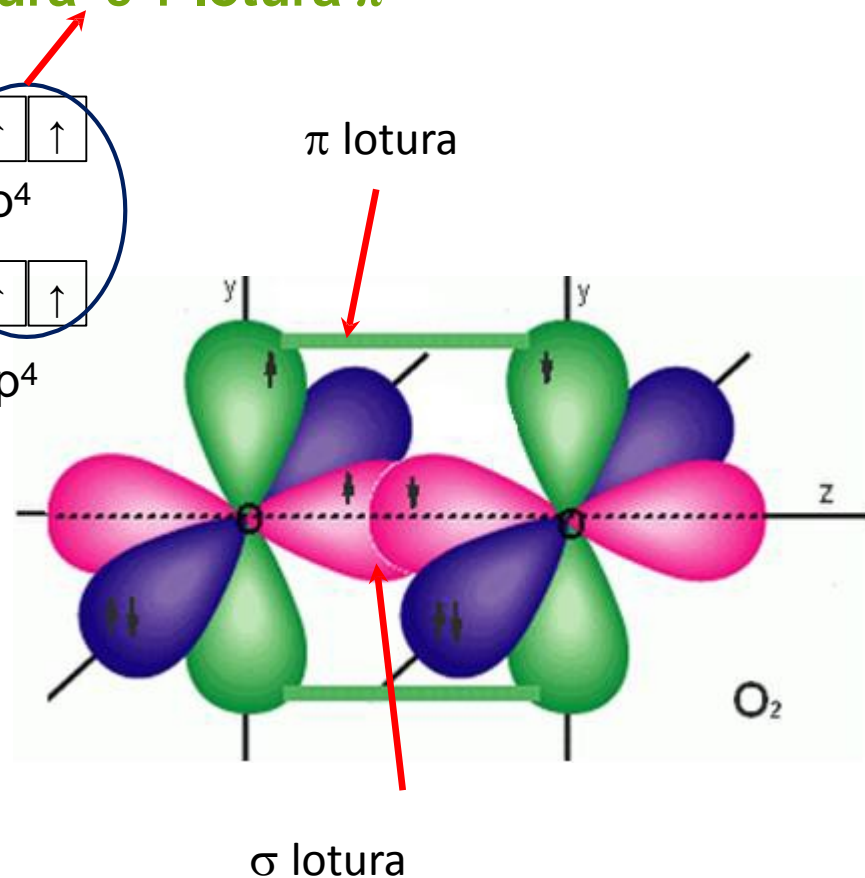
O (Z=8): 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup>



O (Z=8): 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup>



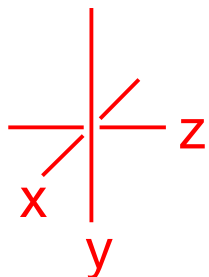
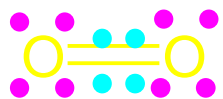
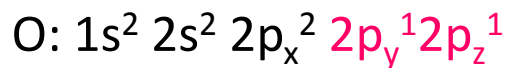
Lewis-en egitura



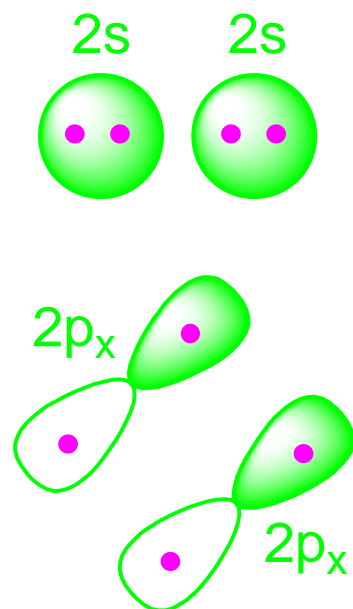
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

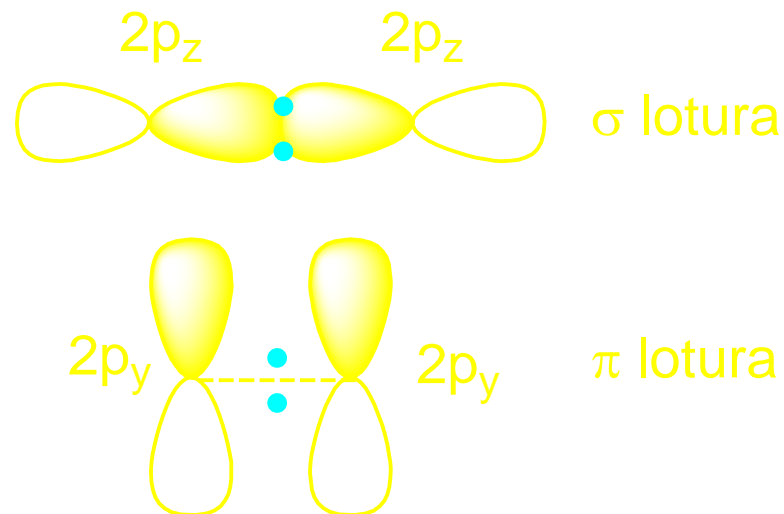
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)



loturan parte hartzen ez duten elektroiak



loturan parte hartzen duten elektroiak



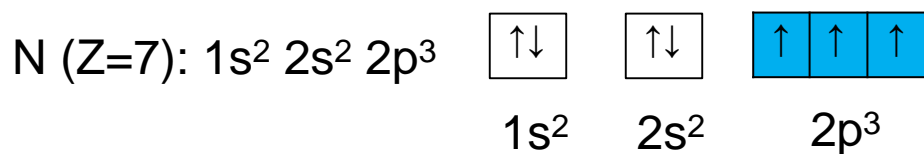
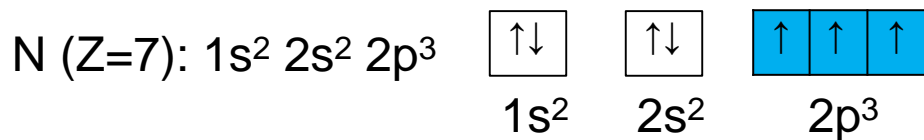
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

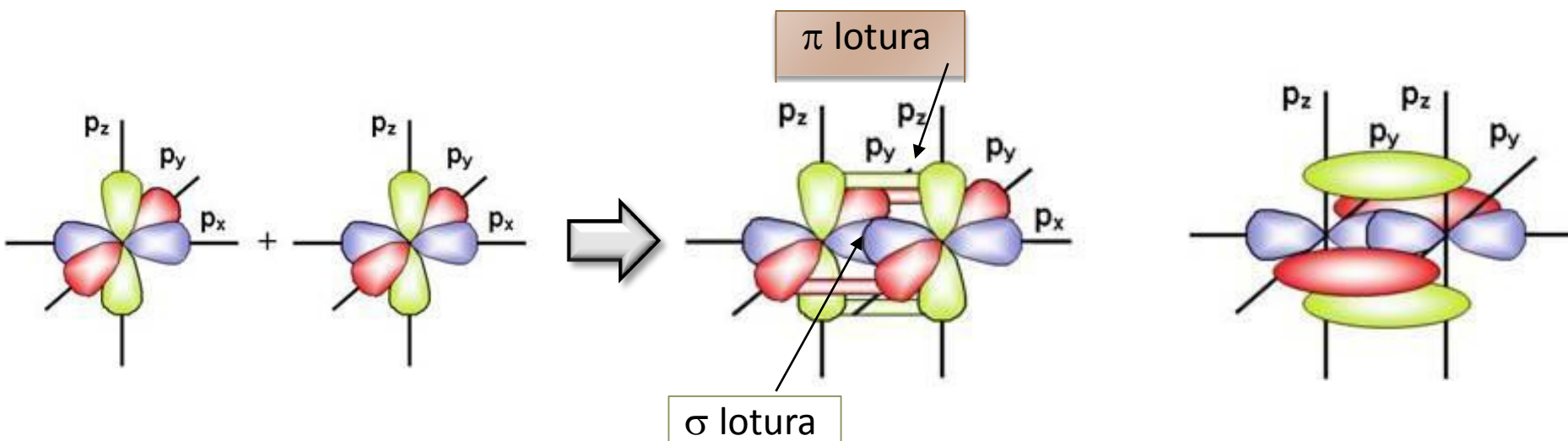
### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

#### $N_2$ molekula

3 lotura: **LOTURA HIRUKOITZA** → **Lotura  $\sigma$  + 2  $\pi$  loturak**



Lewis-en egitura



## 06.2. GAIA. LOTURA KOBALENTEA

### 06.2. 3. Balentzia-loturaren Teoria

#### 06.2.3.4. Orbital atomikoen hibridazioa



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

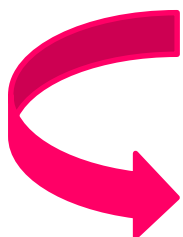
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$O_2$   $N_2$  eta  $F_2$  molekula diatomikoak dira

Zelan azaldu lotura orbitalen bidez espezie poliatomikoetan???

Molekula gehienetan ezin daiteke geometria azaldu orbital atomikoen bidez



HIBRIDAZIOA

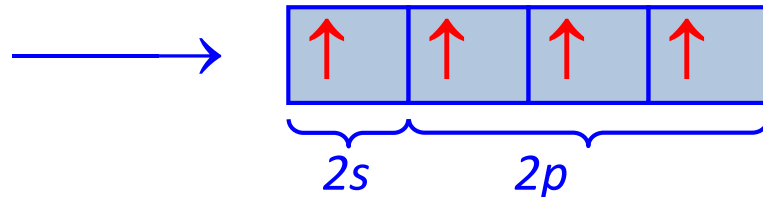
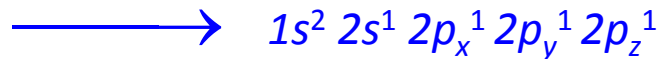
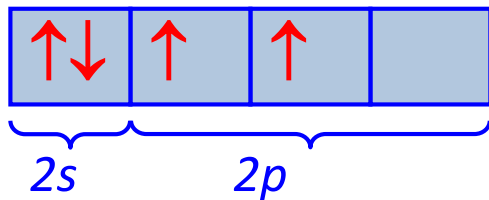
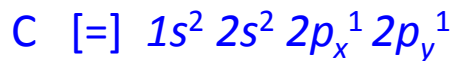
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### Promoio elektronikoa eta hibridazioa

- Orbital atomiko batean parekatuta dauden elektroiak eszitzatu erara pasa daitezke, haietariko bat hutsik dagoen energia handiagoko orbital batera pasatuz
- Prozesu endotermikoa da.
- Karbono atomoan:

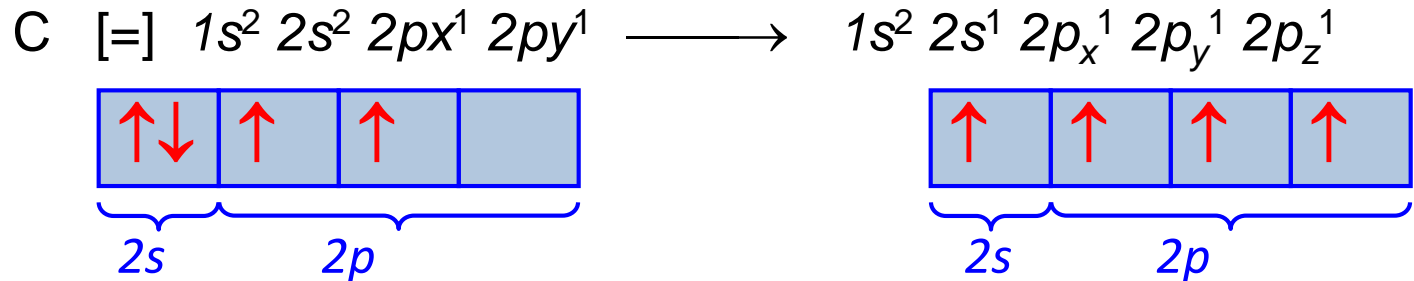


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

- Metano molekula,  $\text{CH}_4$ : tetradrikoa da, lau lotura bakunak baliokideak eta lau  $109,2^\circ$ -ko angelu ditu. NOLA? Ezin da konfigurazio elektronikoa eta elektroien banaketa ikusita



Baina orbitalak nahasten badira?

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

- Kimball (1940) 2tik 8ra lotura eratzeko orbital hibridoak kalkulatuko ditu

Enla- ces	Hibri- dación	Distribución Espacial	Enla- ces	Hibri- dación	Distribución Espacial	Enla- ces	Hibri- dación	Distribución Espacial
2	$sp$ $dp$ $p^2$ $ds$ $d^2$	Lineal Lineal Angular Angular Angular	4	$sp^3$ $d^3s$ $dsp^2$ $d^2p^2$ $d^2sp$ $dp^3$ $d^3p$ $d^4$	Tetraédrica Tetraédrica Plano cuadrada Plano cuadrada Tetraedro irreg. Tetraedro irreg. Tetraedro irreg. Pirám.tetragonal	6	$d^2sp^3$ $d^4sp$ $d^5p$ $d^3p^3$ $d^3sp^2$ $d^5s$ $d^4p^2$	Octaédrica Prisma trigonal Prisma trigonal Antiprisma trigonal Mixta Mixta Mixta
3	$sp^2$ $dp^2$ $d^2s$ $d^3$ $dsp$ $p^3$ $d^2p$	Trigonal plana Trigonal plana Trigonal plana Trigonal plana Asim. plana Pirám. trigonal Pirám. trigonal	5	$dsp^3$ $d^3sp$ $d^2sp^2$ $d^4s$ $d^2p^3$ $d^4p$ $d^3p^2$ $d^5$	Bipirám. trigonal Bipirám. trigonal Pirám. tetragonal Pirám. tetragonal Pirám. tetragonal Pirám. tetragonal Plano pentagonal Pirám. Pentag.	7	$d^3sp^3$ $d^5sp$ $d^4sp^2$ $d^4p^3$ $d^5p^2$	Bipirámide pentagonal Bipirámide pentagonal Prism. trig. centr. cara Prism. trig. centr. cara Prism. trig. centr. cara
						8	$d^4sp^3$ $d^5p^3$ $d^5sp^2$	Dodecaédrica Antiprisma cuadrado Prisma centrado cara

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

- B.L.T.-k orbital hibridoen eraketa proposatzen du, atomo zentralaren orbital atomikoen konbinazioz
- Orbital hibridoak mota askotakoak izan daitezke, edozein orbital atomiko konbina daitekeelako
- Halere, molekula arrunten geometria azaltzeko nahikoa da hurrengo hibridazio-motak aztertzea

$sp$  ( $AB_2$  espezieak)

$sp^2$  ( $AB_3$  espezieak)

$sp^3$  ( $AB_4$  espezieak)

$sp^3d$  ( $AB_5$  espezieak)

$sp^3d^2$  ( $AB_6$  espezieak)

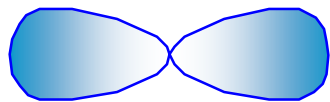
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

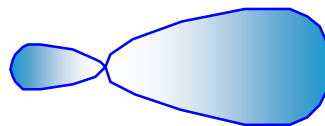
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### Hibridazio orbitala

- Orbital atomikoen konbinaketan datza
- Baldintzak
  - Antzeko energia eta simetria
  - Konbinatzen diren OA kopurua eta lortutako O.H.-enak berdinak dira
  - Orbital hibrido guztiak elkarren baliogarriak dira
  - Forma eta orientazio desberdinarekin O.A.-ekin konparatuta



*P orbital atomiko*



*sp<sup>3</sup> orbital hibridoa*

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### Hibridazioaren onurak

B.L. ren arabera gainezarpena handiagoa izango da hurrengoa betez gero:

- Lotura ardatza orbitalen orientazioarekin bat egitean
- Orbitalak norabide horretan karga-kontzentrazio handiagoa badute

##### Orbital hibridoak

- Dentsitate maximoko zonaldeak kontzentratuagoak daude
- Eratuko dituzte loturak orbital puruarenak baino sendoagoak izango dira

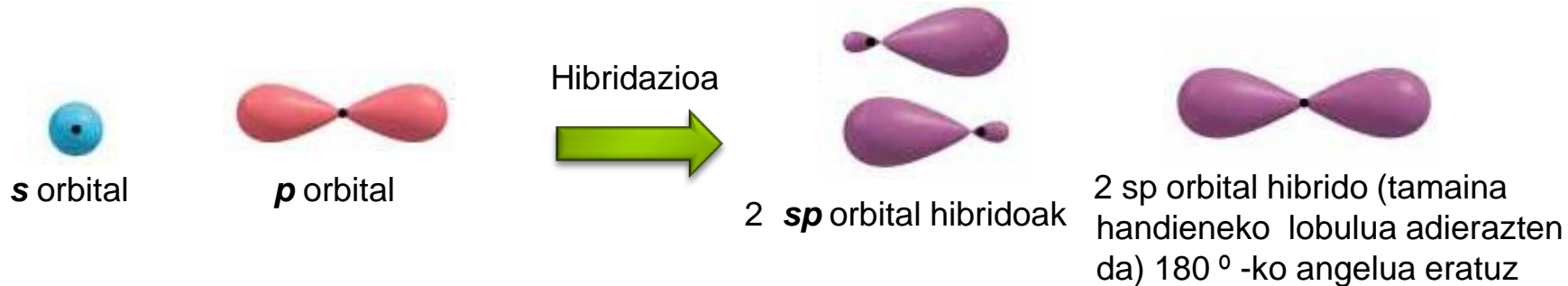
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### *sp* hibridazioa

- **s orbitala** eta **p orbitala** konbinatzen direnean, 2 orbital hibrido *sp* eratzen dira
- 2 orbital hibrido berriak baliokideak dira, bai energian bai itxuran



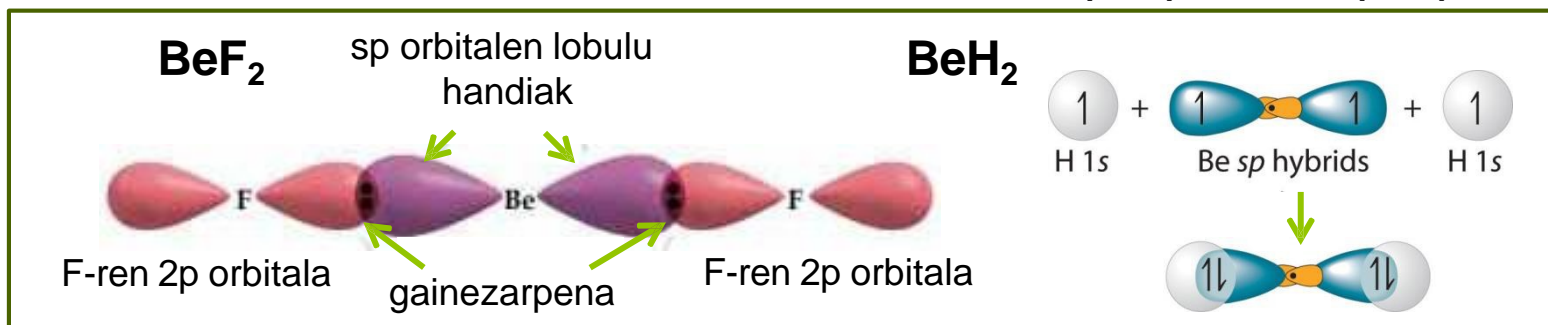
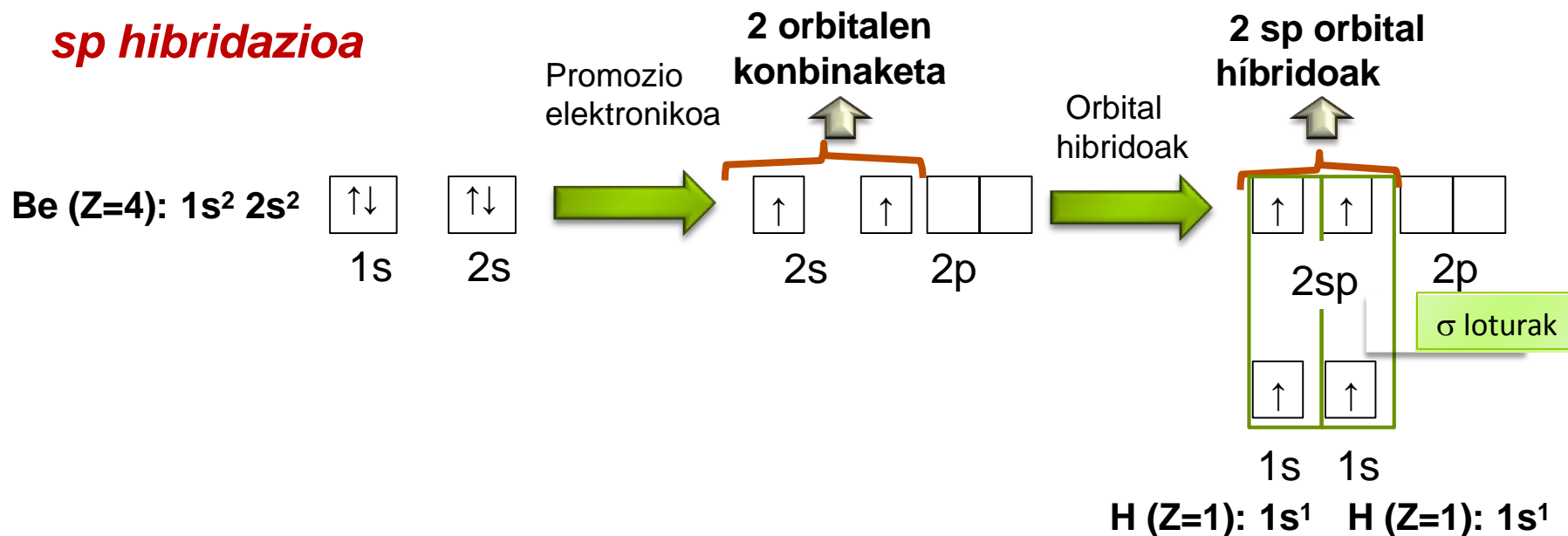


# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

#### *sp* hibridazioa



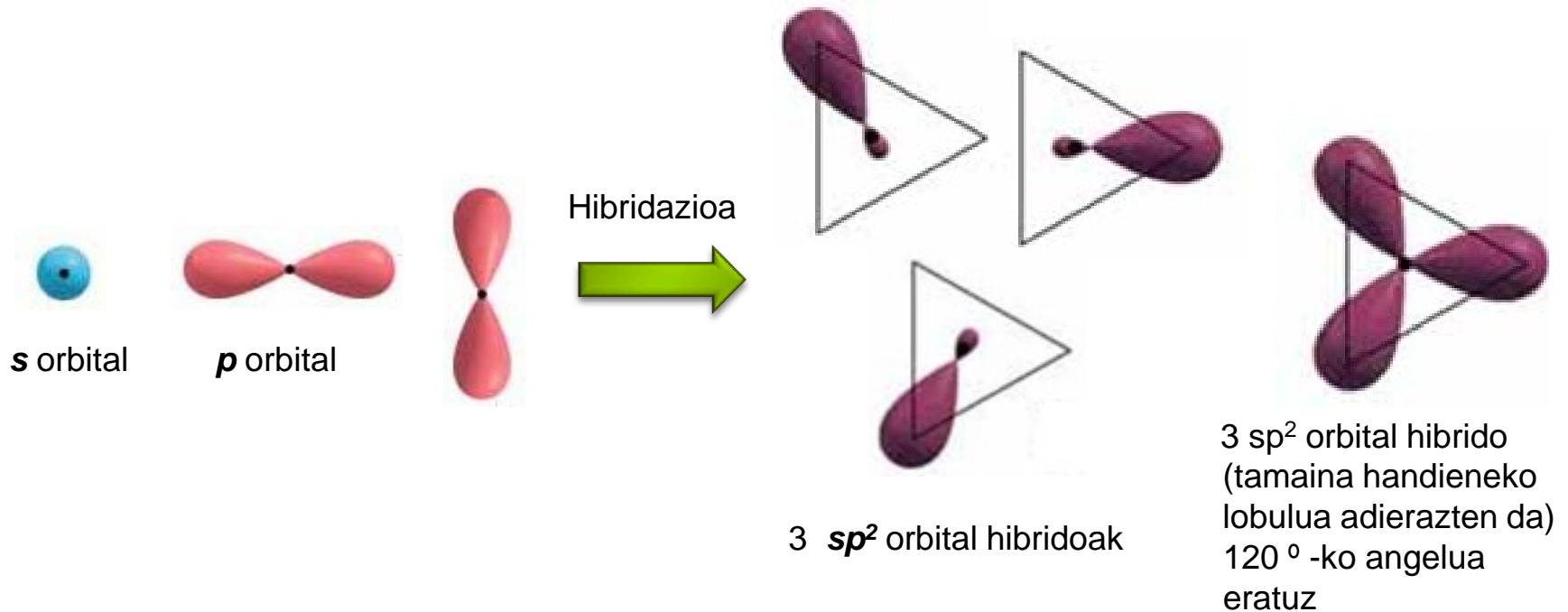
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

### *sp<sup>2</sup> hibridazioa*

- **s orbital** eta **2 p orbitalak**: 3  $sp^2$  orbital hibrido baliokideak
- Lobularrak dira, hiru orbital hibridoak plano berean daude,  $120^\circ$  distantzia batera (trigonal-laua geometria osatuz)



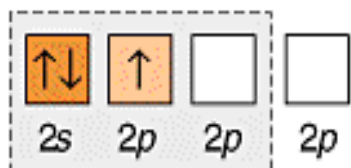
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

### *sp<sup>2</sup> hibridazioa*

B (Z=5):  $1s^2 2s^2 2p^1$



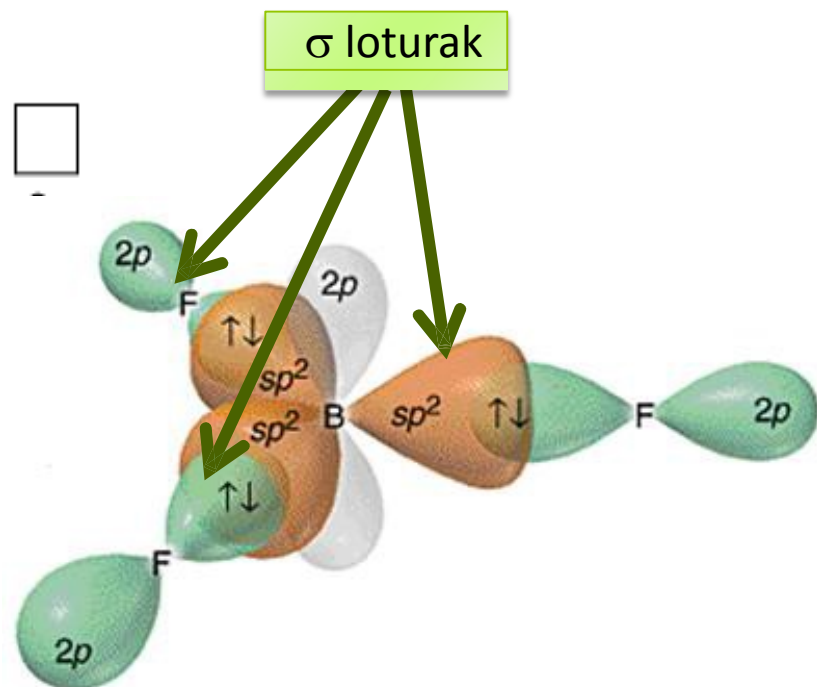
Promozio  
elektronikoa  
eta  
hibridazioa



BF<sub>3</sub> molekula

Lotura-angeluak: 120°

Geometria: trigonal laua



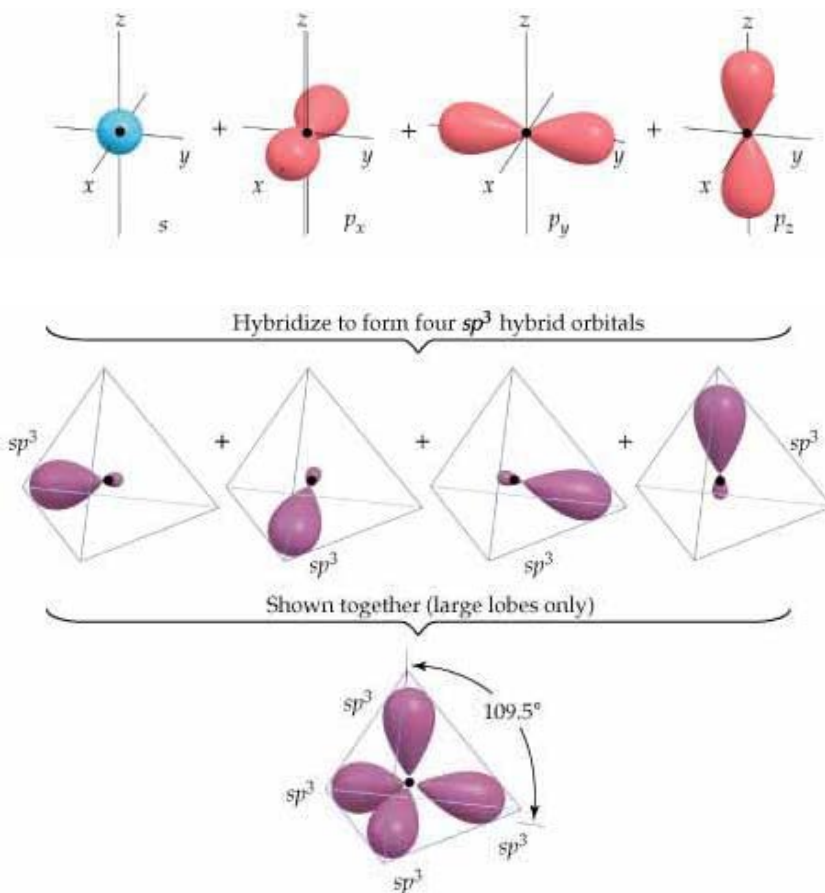
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### ***sp<sup>3</sup> hibridazioa***

- s orbitala eta 3 p orbitalak:  
4 *sp<sup>3</sup>* orbital hibrido baliokideak
- Lobular itxurakoak, lau orbital hibridoak geometria tetraedrikoa eratzen dute

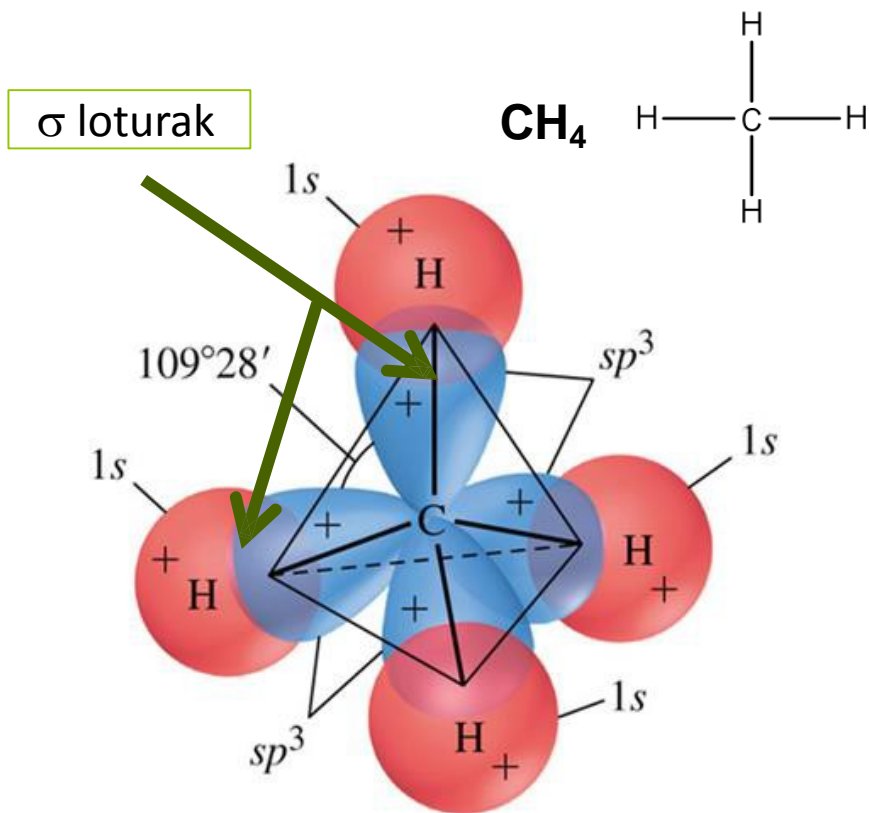


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

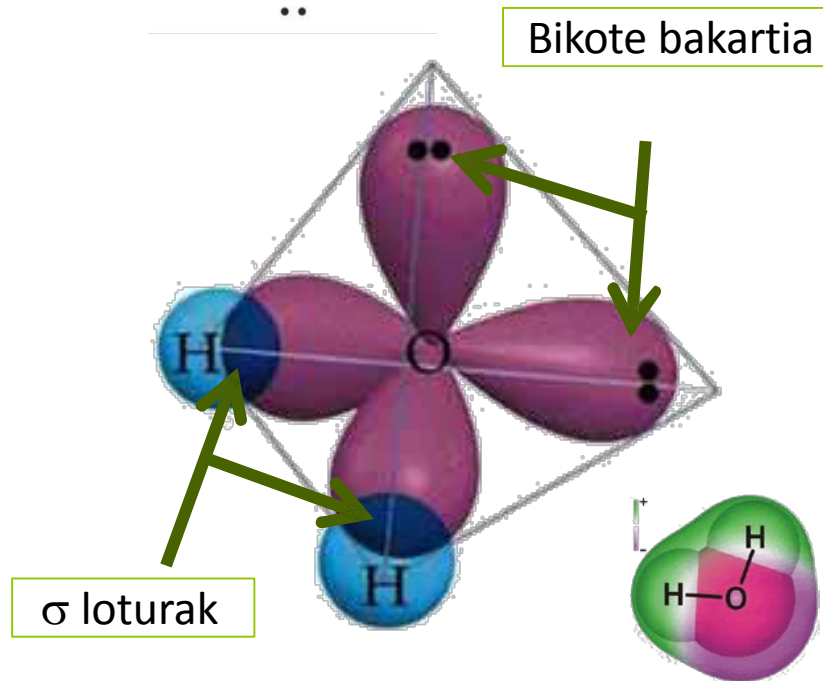
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

### $sp^3$ Hibridación



Lotura-angelua: 109.5°  
Geometria: tetraedrikoa



Lotura-angelua: <109.5° (104.5°)  
Geometria: angeluar-laua

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_2$  espezieak



sp hibridazioa

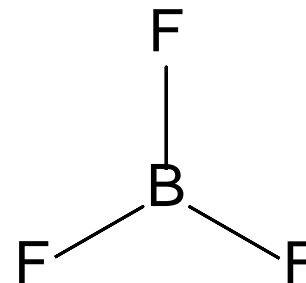
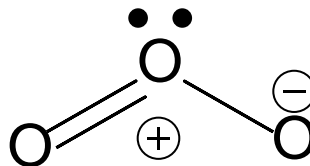
$AB_3$  espezieak

$AB_3$  trigonal-lauak

$AB_2E$  angeluarrak



$sp^2$  hibridazioa



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

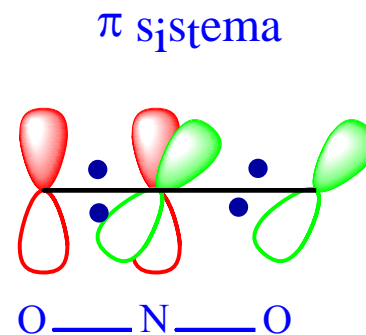
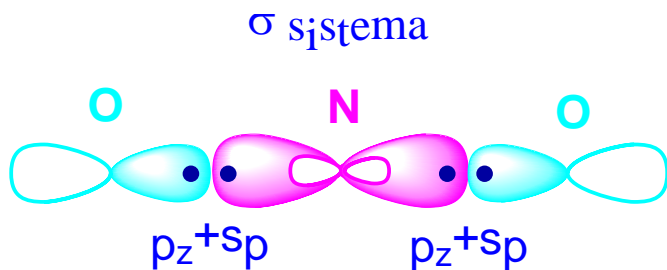
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$$\text{NO}_2^+: 5+(6 \times 2)-1=16 \text{ elektroi, AB}_2$$



Lotura lekutatuta  
Ez dago erresonantzia

Lewis eta BGEBA



$\text{AB}_2$  lineala, sp hibridazioa, erresonantziarik gabe

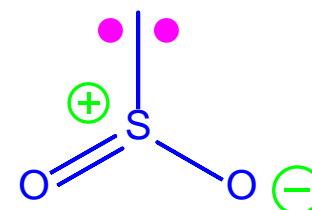
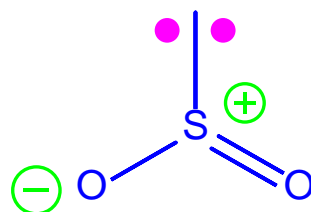
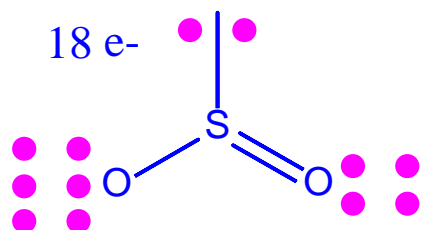
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

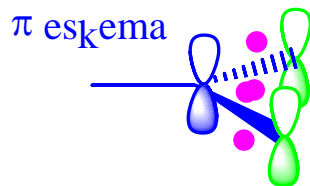
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Sufre dioxidoa:  $\text{SO}_2$

$\text{AB}_3 \rightarrow \text{AX}_2\text{E}$ : molekula angeluarra



Lewis



$\text{sp}^2$  hibridazioa

lotura  $\pi$  deslekatatuta  
(erresonantzia)

BGEBA



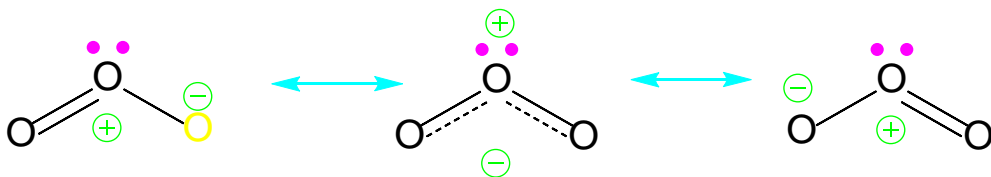
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

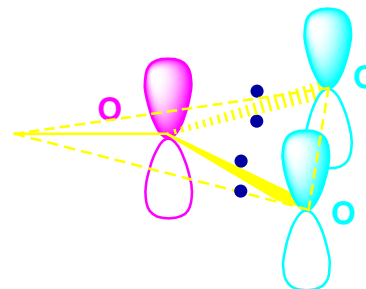
Deslekupena: ozono molekula

Lewis-en egiturak erresonanteak:  
erresonantzia



Lotura bikoitza mugikorra

B.L.T. :hibridazioa



$\pi$  loturaren deslekupena

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

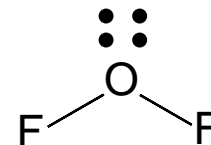
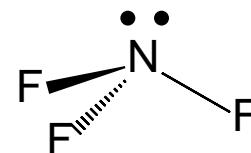
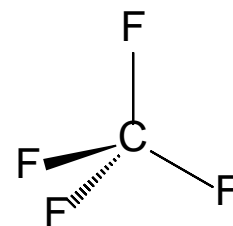
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_4$  espezieak

$AX_4$  espezie tetraedrikoak

$AX_3E$  espezie piramidal trigonalak  
 $AX_2E_2$  espezie angeluarrak

$sp^3$  hibridazioa



B	C	N	O	F	Ne
Al	Si	P	S	Cl	Xe

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

**AB<sub>5</sub> espezieak**

AX<sub>5</sub> espezie bipiramidal trigonala

AX<sub>4</sub>E espezie tetraedriko distortsionatua

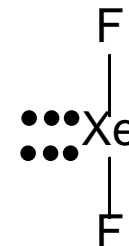
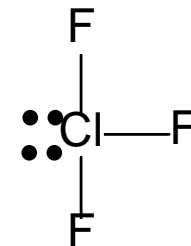
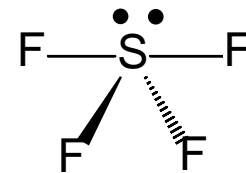
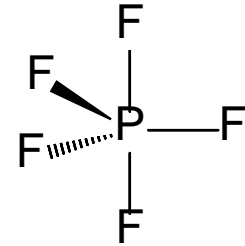
AX<sub>3</sub>E<sub>2</sub> T formako espezieak

AX<sub>2</sub>E<sub>3</sub> espezie linealak



dsp<sup>3</sup> hibridazioa

<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>	<b>Xe</b>



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

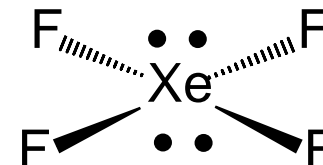
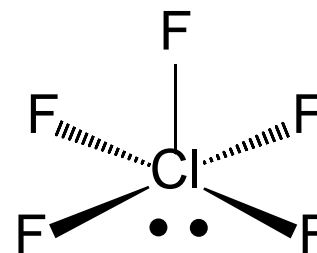
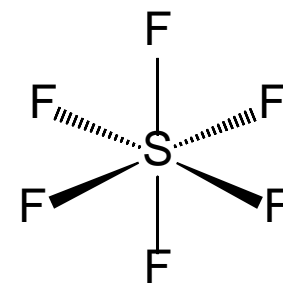
**AB<sub>6</sub> espezieak**

AX<sub>6</sub> espezie okaedrikoak

AX<sub>5</sub>E espezie piramide karratuak

AX<sub>4</sub>E<sub>2</sub> espezie karratu laua

d<sup>2</sup>sp<sup>3</sup> hibridazioa

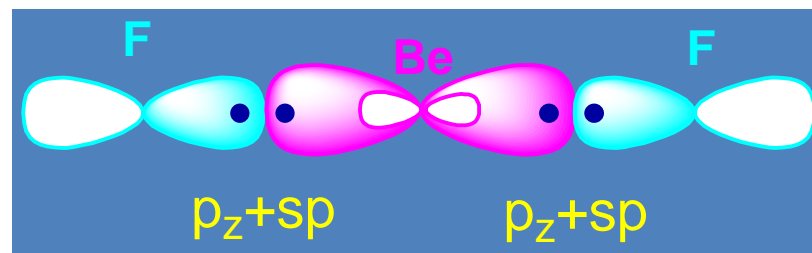
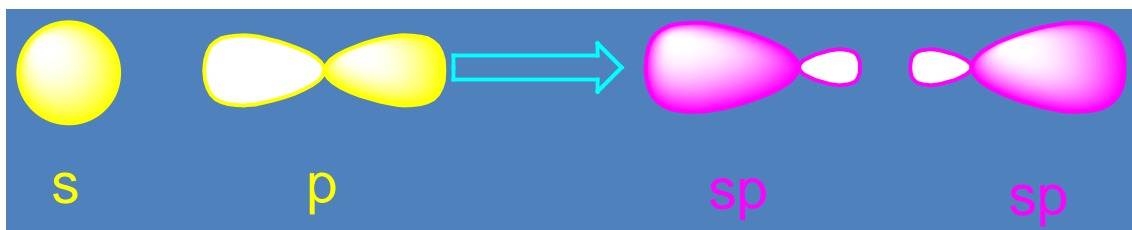


B	C	N	O	F	Ne
Al	Si	P	S	Cl	Xe

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_2$  espezieak(16 elektroi)  $\longrightarrow$  sp hibridazioa



$\sigma$  loturak

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

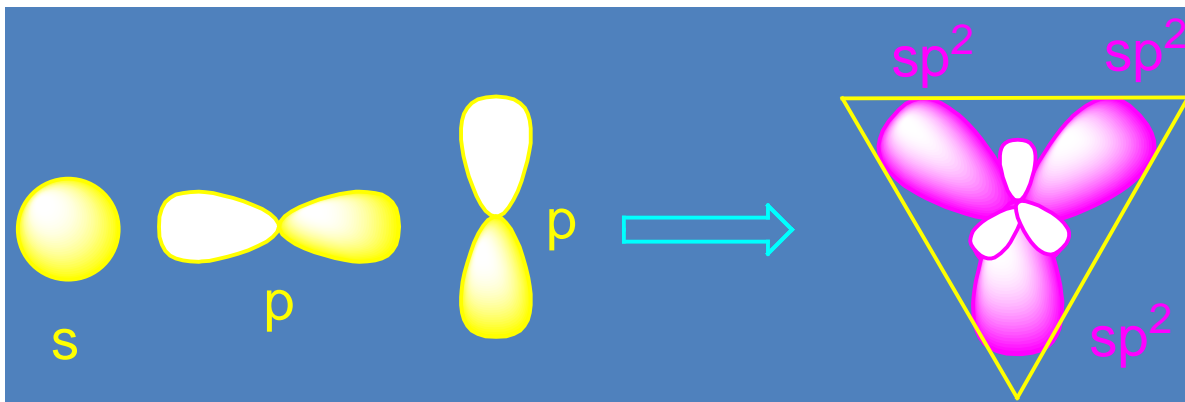
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_3$  espezieak

$AX_3$  espezie triangeluarrak (24 elektroi)

$AX_2E$  espezie angeluarrak (18 elektroi)

→  $sp^2$  hibridazioa



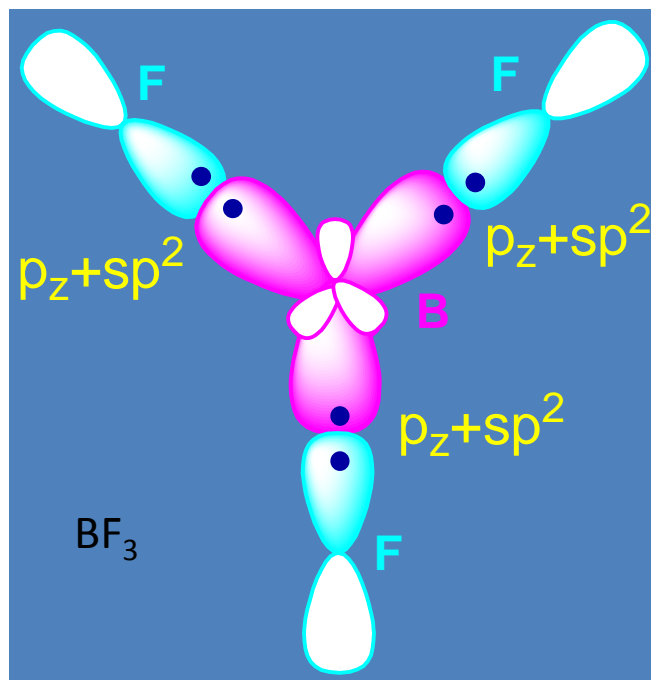
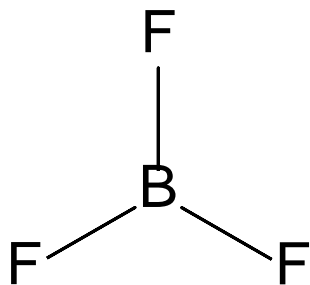
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_3$  espezieak

$AX_3$  espezie triangularrak (24 elektroi)  $\longrightarrow$   $sp^2$  hibridazioa



$\sigma$  loturak

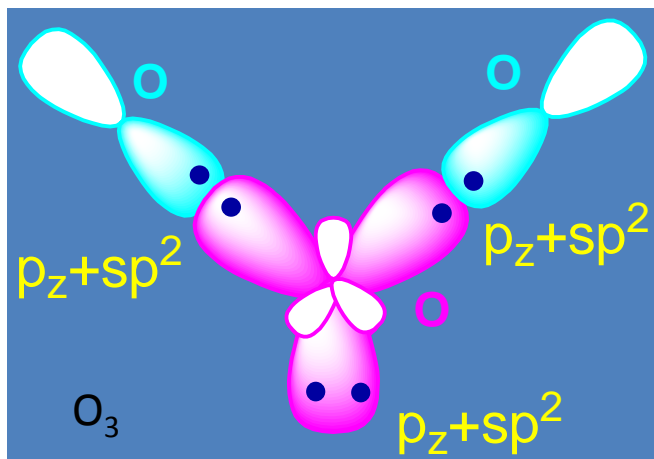
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

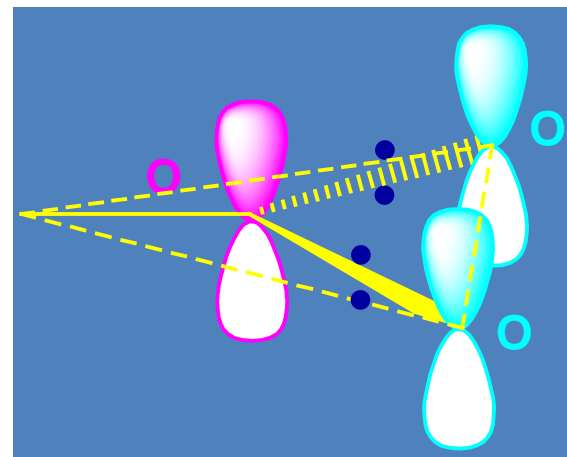
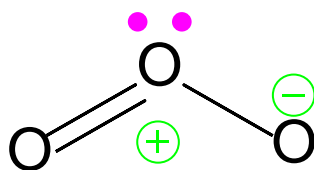
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_3$  espezieak

$AX_2E$  espezie angeluarrak (18 elektroi)  $\longrightarrow$   $sp^2$  hibridazioa



$\sigma$  loturak



$\pi$  lotura  
deslektutua



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_4$  espezieak

$AX_4$  espezie tetraedrikoak (32 elektroi)

$AX_3E$  espezie piramidal trigonalak (26 elektroi)

$AX_2E_2$  espezie angeluarrak (20 elektroi)

  $sp^3$  hibridazioa

4 OA ( 1 2s eta 3 2p)  $\rightarrow$  4 OH  $sp^3$

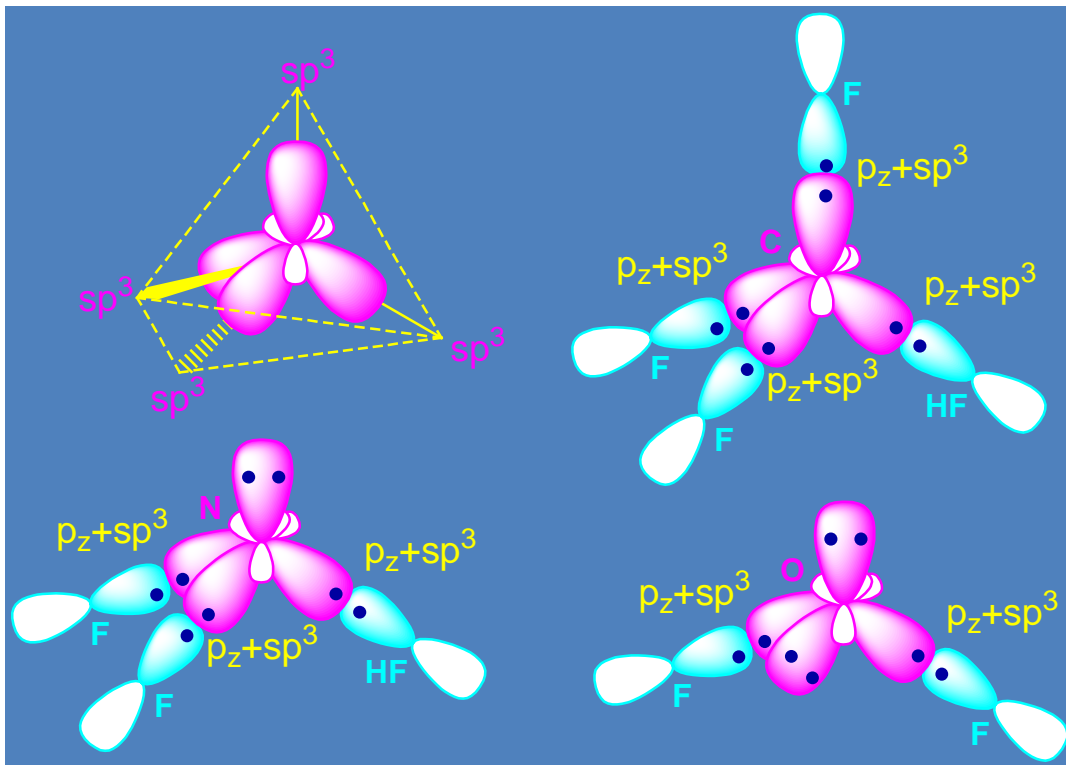
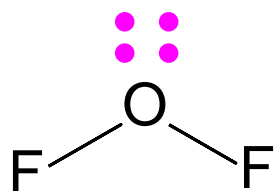
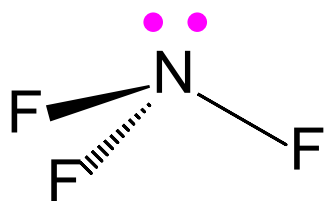
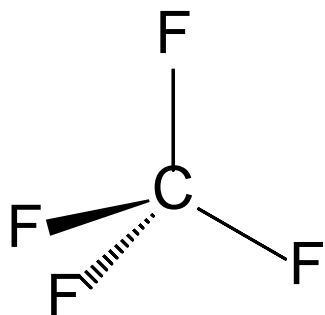
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

$AB_4$  espezieak

$sp^3$  hibridazioa



B	C	N	O	F	Ne
Al	Si	P	S	Cl	Xe

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

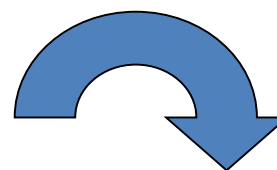
### $AB_5$ espezieak

$AX_5$  espezie bipiramidal trigonala (40 elektroi)

$AX_4E$  espezie tetraedriko distortsionatua (34 elektroi)

$AX_3E_2$  T formako espezieak (28 elektroi)

$AX_2E_3$  espezie linealak (22 elektroi)



$dsp^3$  hibridazioa

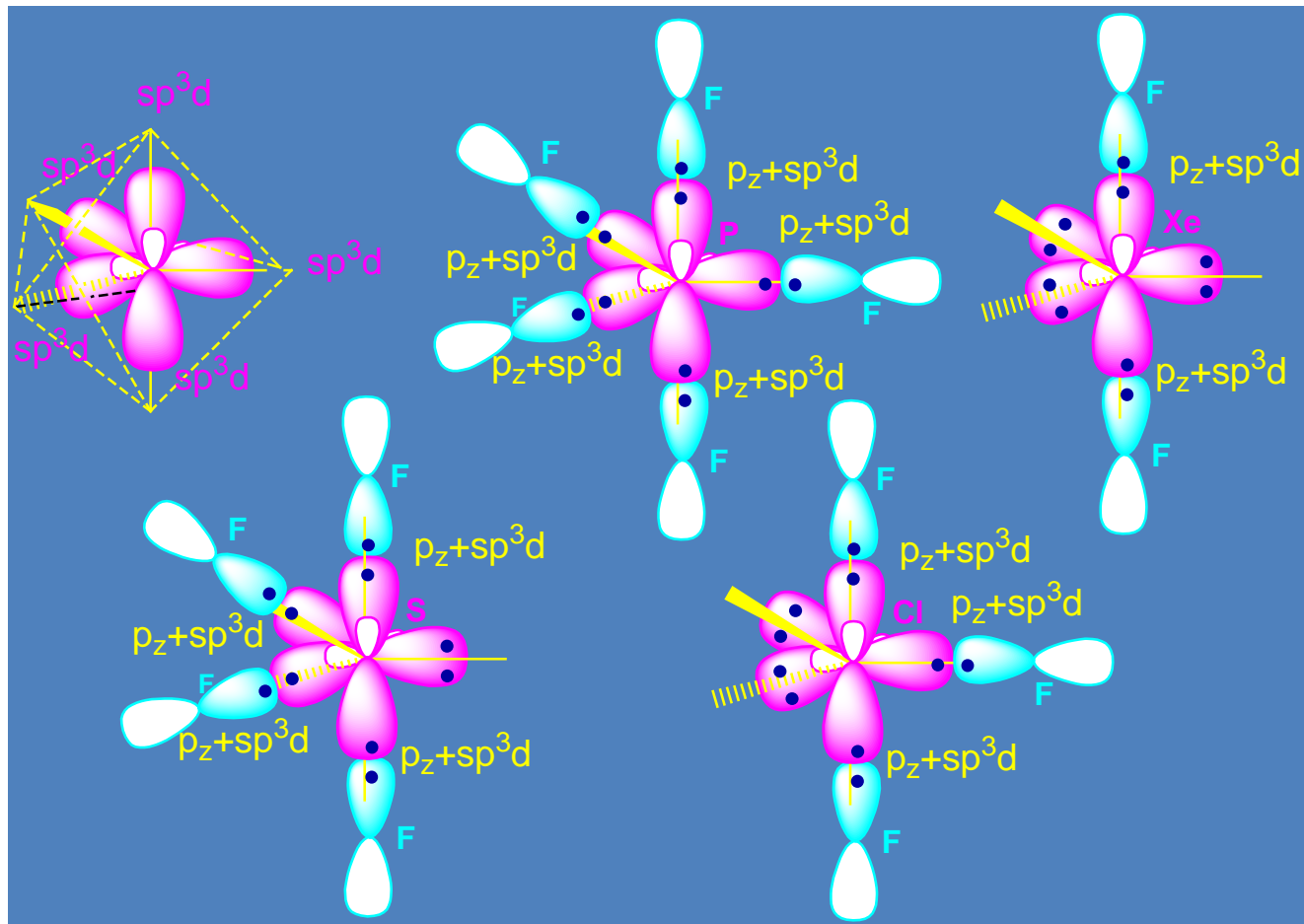
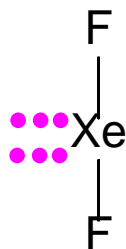
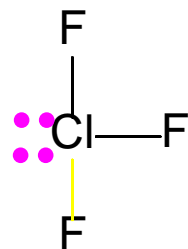
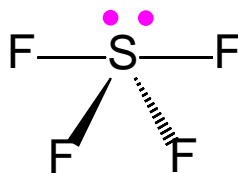
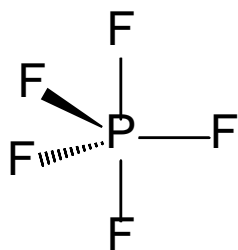
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

AB<sub>5</sub> espezieak

dsp<sup>3</sup> hibridazioa



<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
<b>Al</b>	<b>Si</b>	P	S	Cl	Xe

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

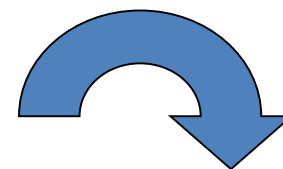
#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

### $AB_6$ espezieak

$AX_6$  espezie oktaedrikoak (48 elektroi)

$AX_5E$  espezie piramide karratuak (42 elektroi)

$AX_4E_2$  espezie karratu laua (36 elektroi)



$d^2sp^3$  hibridazioa

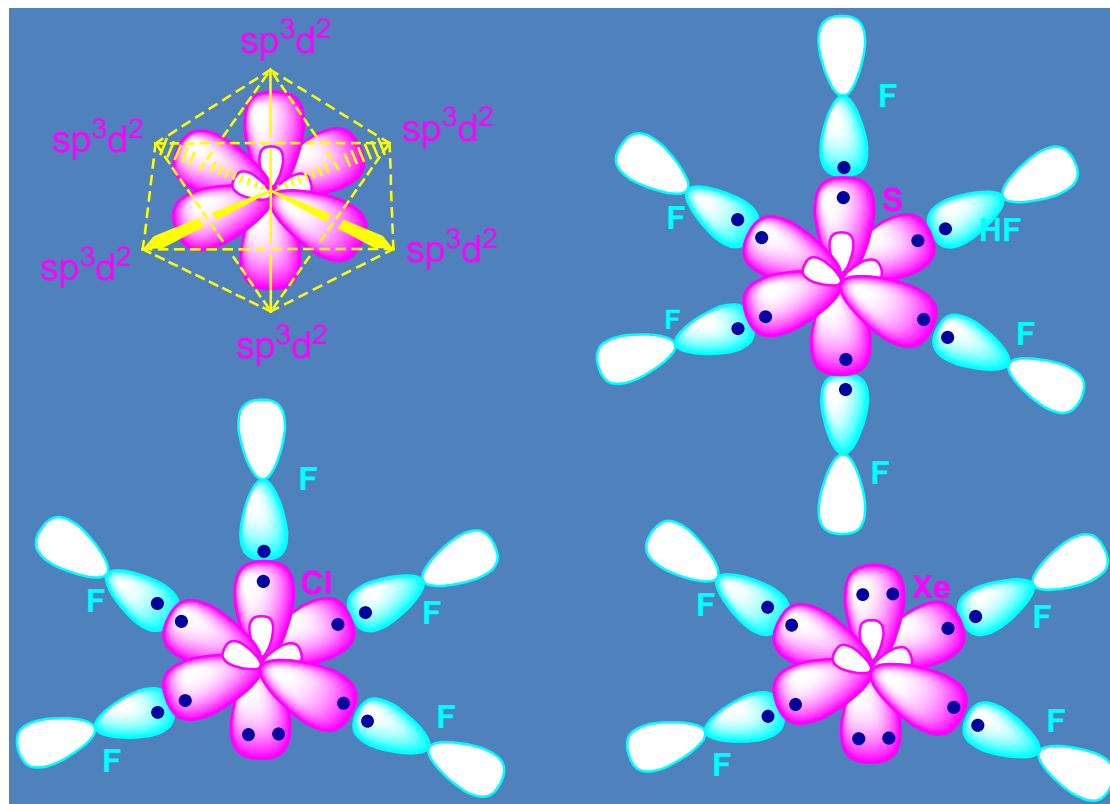
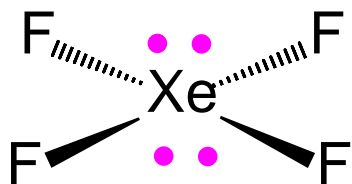
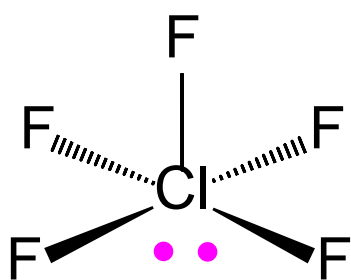
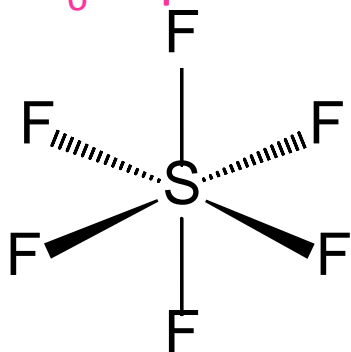
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	S	Cl	Xe

### AB<sub>6</sub> espezieak



d<sup>2</sup>sp<sup>3</sup> hibridazioa

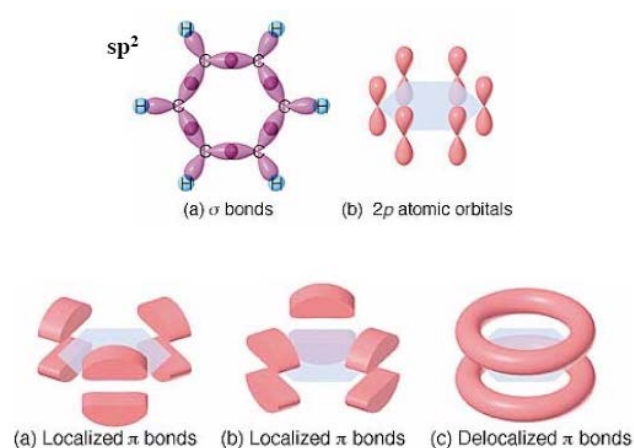
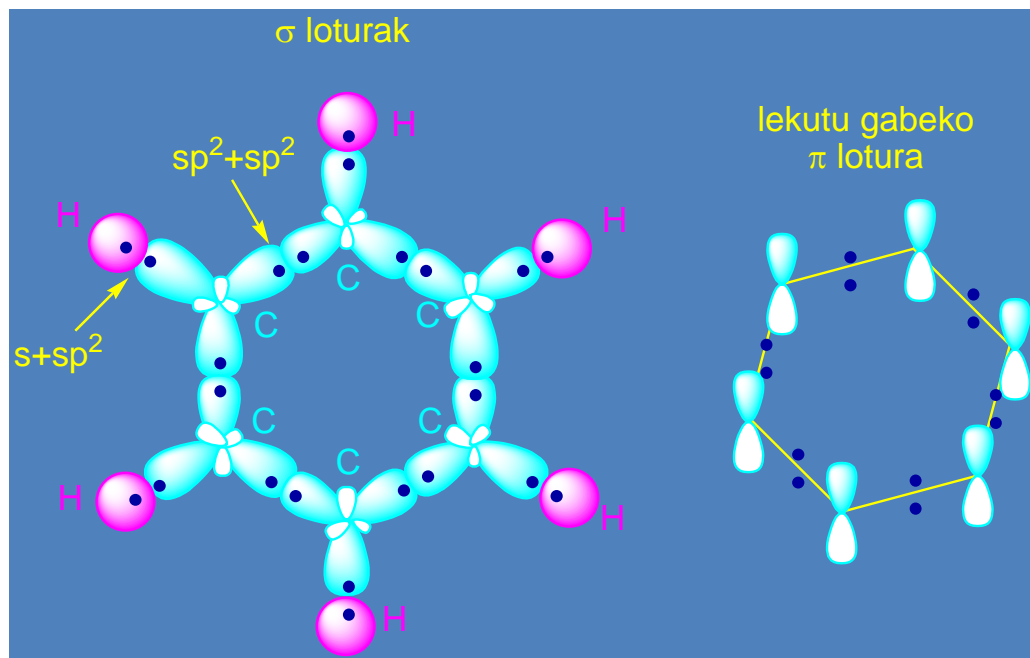
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

## Molekula konplexuagoak

Aurreko kasuetan bezalaxe BGEBA metodoan oinarritu besterik ez da egin behar



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### Lotura-ordena

	Lewis-Gillespie	BL teoria
L.O.=1	lotura sinplea	1 $\sigma$ lotura
L.O.=2	lotura bikoitza	1 $\sigma$ lotura+1 $\pi$ lotura
L.O.=3	lotura hirukoitza	1 $\sigma$ lotura+2 $\pi$ lotura

Zer gertatzen da lekutu gabeko  $\pi$  lotura dagoenean ?

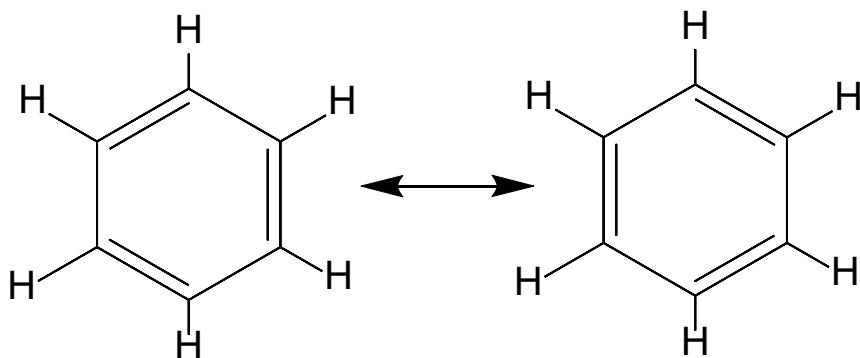


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Lotura-ordena, lekutu gabeko  $\pi$  loturak daudenean



C-H loturak bakunak dira

C-C loturetan  $\sigma$  bikote bat partekatzen da, baina lekutu gabeko  $\pi$  lotura ere badago

6 karbonoek partekatzen dituzten elektroibikoteen kopurua 9 da

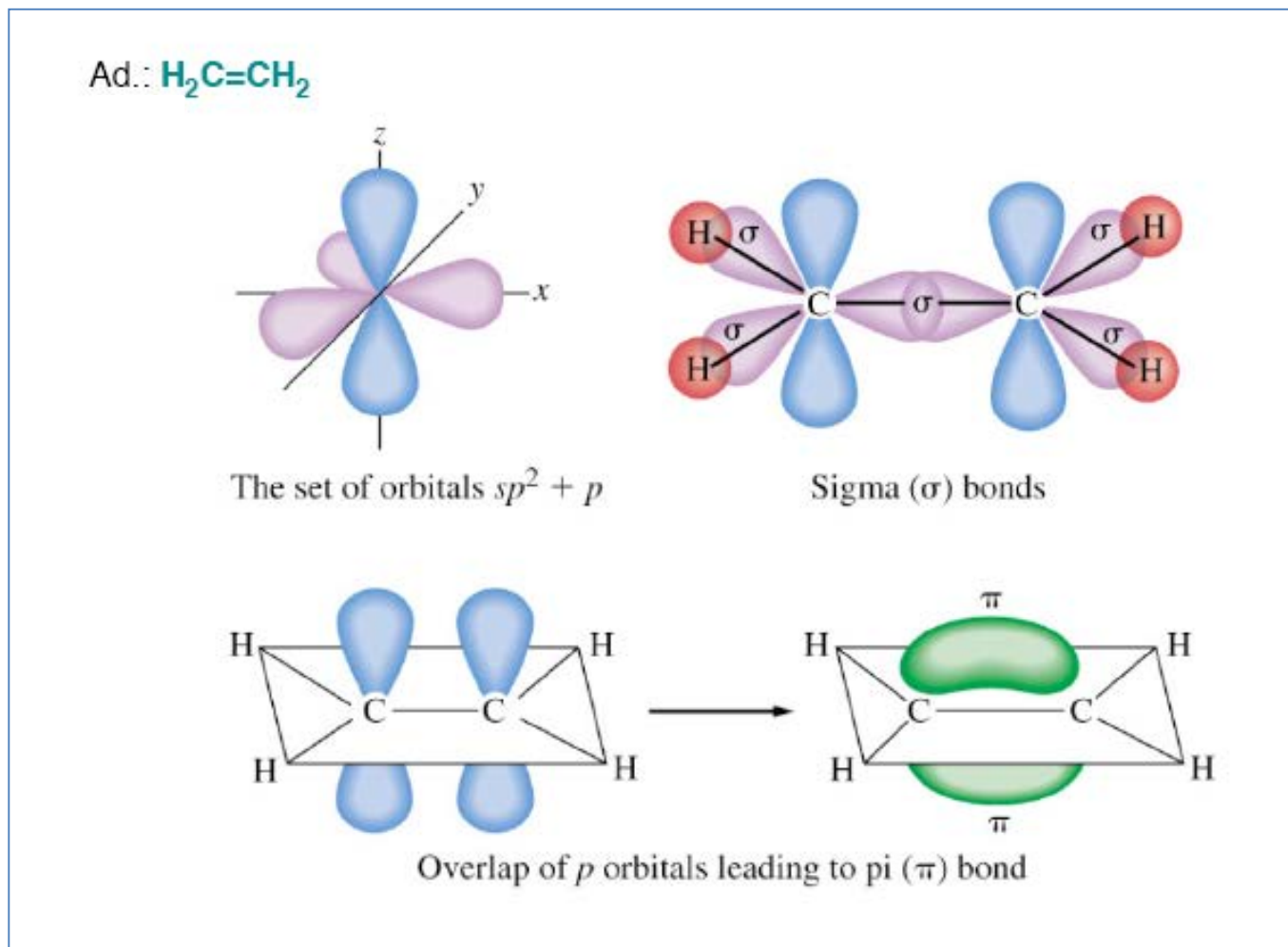
6  $\sigma$  bikote + 3 lotura-bikote lekutu gabeko  $\pi$  loturan

Beraz, C-C loturen ordena  $9/6=1.5$  da

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

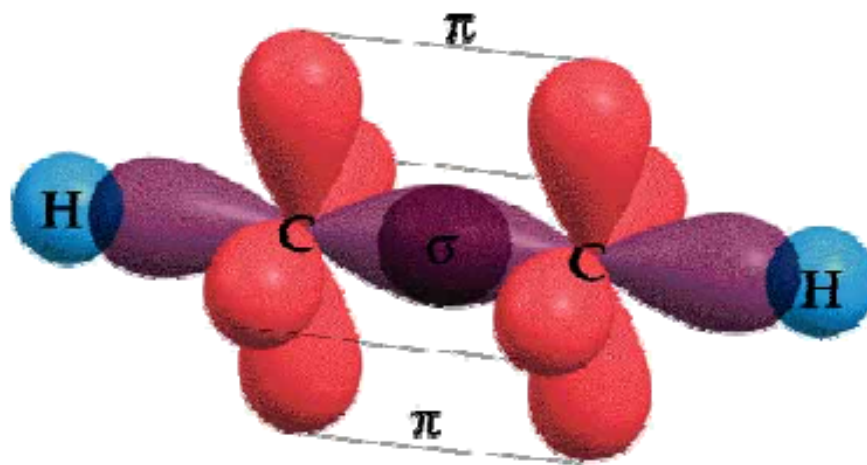
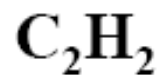
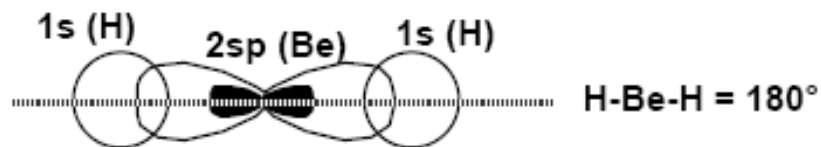


Lotura bikoitzaren azalpena hibridazioaren bidez

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)



Adibide batzuk

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Argia izateko.....

Orbital atomikoak	Orbital hibridoak	Geometria	P orbitalak hibridatu gabe
1s + 1p	2 sp	Lineala (180°)	2
1s + 2p	3 sp <sup>2</sup>	Trigonal-laua (120°)	1
1s + 3p	4 sp <sup>3</sup>	Tetraedrikoa (109,5°)	0
1s + 3p +1d	5 dsp <sup>3</sup>	Bipiramide trigonala	0
1s+ 3p+2d	6 d <sup>2</sup> sp <sup>3</sup>	Oktaedrikoa	0

Geometriaren eta hibridazioaren arteko erlazioa

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### Laburpena

- Lotura kobalenteak lotuta dauden bi atomoen arteko dentsitate elektronikoaren metaketa suposatzen du
- Lotura-balentziaren teoriaren arabera(L.B.T.) orbital atomikoaren gainezarpenari esker lortzen
- Hibridazioak loturaren norabidetasunarekin erlazionatutako zenbait arazoak konpontzen du
- Bi teoriak beharrezkoak dira molekulen egitura azaltzeko

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

Hitzen glosarioa

- Eredu mekanokuantikoa:
- Balentzia-elektroiak:
- Lotura-ordena:
- Hibridazioa:
- “ $\sigma$ ” lotura:
- “ $\pi$ ” lotura:

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

1. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*. 11<sup>a</sup> Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
2. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.: *Química General*. Ed: Pearson Education, 10<sup>a</sup> Ed., Madrid, (2011)
3. Valenzuela, C.: *Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia*. Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)
4. Lothar Beyer: *Química Inorgánica*. Ed. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
5. Housecroft, C. E., Sharpe, A.: *Química Inorgánica*. Ed. Pearson Prentice Hall, Madrid (2006)
6. Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

##### 6.2.1. ELEKTROI-BIKOTEEN BIDEZKO EREDUAK

###### 6.2.1.1. LEWIS-EN EGITURAK

###### 6.2.1.2. BGEBA METODOA



EREDU KLASIKOAK

##### 6.2.2. BALENTZIA-LOTURAREN TEORIA (HIBRIDAZIOA)

##### 6.2.3. ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA



MEKANIKA KUANTIKOAN  
OINARRITUTAKO TEORIA



TARTEKOA





## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

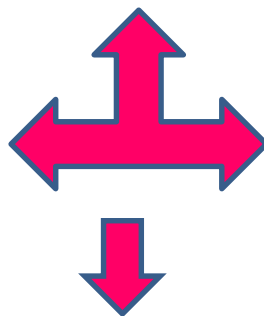
- Lewis-en egiturak, BGEBA eta Balentzia-lotura metodoa osagarriak dira molekulen geometria azaltzeko
- Ia beti nahikoak dira molekulari buruzko egitura egokiak jakiteko, baina ...



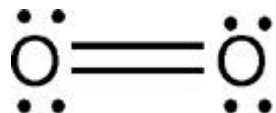
Batzuetan zehaztasun gehiago behar dugu



Nola Azaldu  $O_2$ -ren paramagnetismoa?



Nola azaldu  $H_2^+$  molekulen egonkortasuna? Edo diboranoen eraketa?



Beste Teoriaren beharra

ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA (Mulliken, 1932)

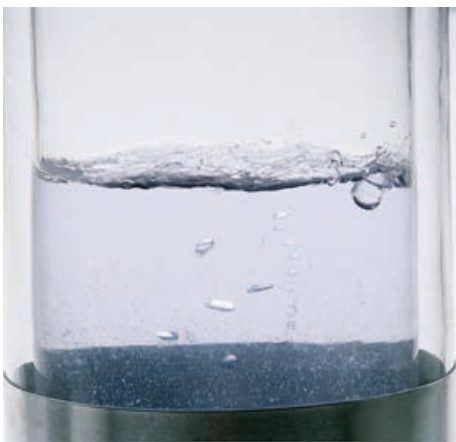
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA



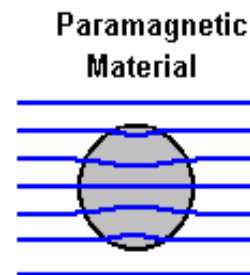
El oxígeno es licuado haciéndolo pasar x una bobina sumergida en  $N_2(l)$   $T = -195.8\text{ }^\circ\text{C}$



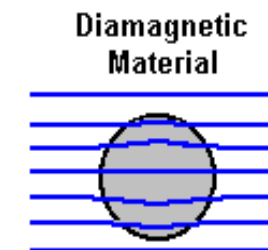
El  $O_2$  líquido es de color azul claro y su  $T_{\text{ebu}} = -183\text{ }^\circ\text{C}$



$O_2$ , paramagnético, se adhiere relativamente a un imán de Nd



$N_2$ , diamagnético al contrario, no se ve atraído hacia el imán, se repele.



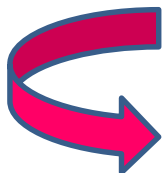


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

- Egoera hauei **ORBITAL MOLEKULARRAK** deritze eta orbital atomikoen konbinaketa lineala egiteagatik sortzen dira ( $\phi$ )
- Dena den , nahiz eta kalkuluetan hurbilketak egin , ez da erraza Schrodingerren ekuazioa ebaztea funtzio honetarako eta energia kalkulatzeko



**IKUSPEN OROKORRA , AZALETIK, BESTERIK EZ DUGU IKUSIKO!!!!**

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

Mulliken-en ustez:

***“ Lotura eratzean osatzen dira orbital berriak , molekula osoari dagozkionak”***

Hainbat ideia :

- *Orbital hauek (OM) orbital atomikoen (OA) konbinaketa lineala egitean sortuta dugu*
- ***Bakarrik balentzia-elektroiak loturan inplikatur daude, hortaz bakarrik hauek konbinatzen dira***
- *Konbinatzen diren orbital-kopurua eta orbital molekular berriarrena bat dago: orbital kopurua ez da aldatzen*

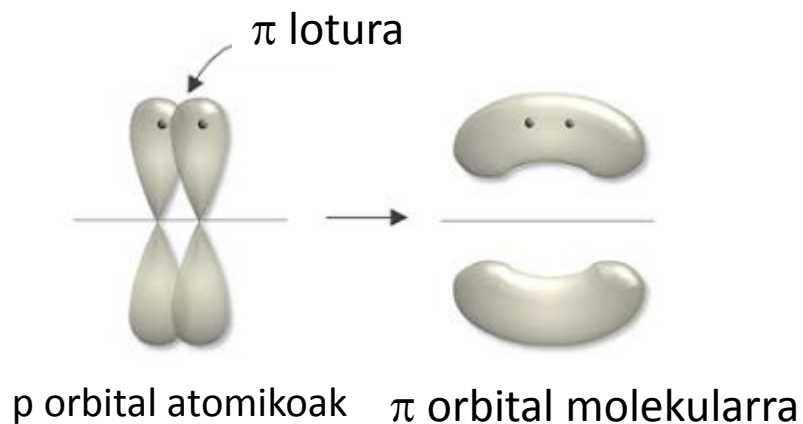
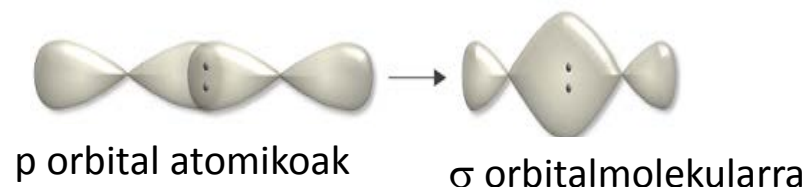
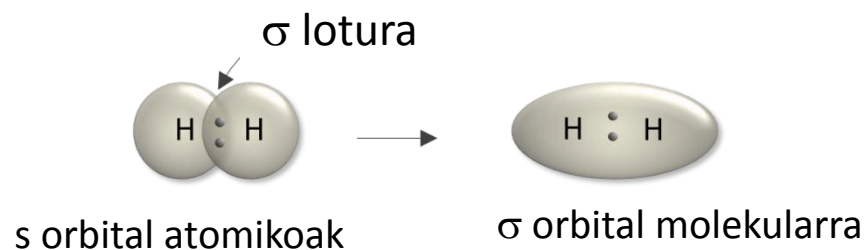
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

Mulliken-en ustez:

*“Lotura eratzean osatzen dira orbital berriak, molekula osoari dagozkionak”*



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

*Hainbat ideia*

- *Osatzen diren orbitalak Uhin-funtzioak dira. Beraz orbital atomikoen propietate berdinak dituzte, Hund-araua eta Pauling- Esklusio Printzipioa betetzen dituzte*
- *Orbitalen simetria bera izan behar da konbina daitezzen*
- *Orbitalen nahasketa adierazgarriena da orbital atomikoak energia berekoak izanez gero*
- *Bi atomoak hurbiltzean bere uhin-funtzioak konbinatzen dira*



INTERFERENTZIA KONSTRUKTIBOA (FASEA)

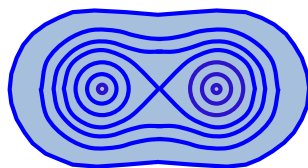
INTERFERENTZIA SUNTSITZAILEA (ANTIFASEA)

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

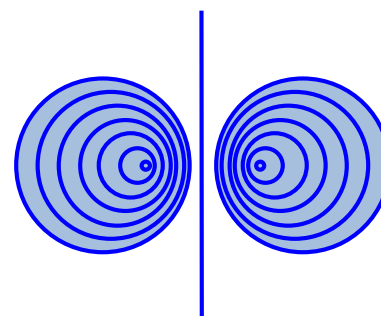
#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

$$\begin{aligned}\psi_+ &= \psi_A + \psi_B && \text{Orbital lotzailea} \\ \psi_- &= \psi_A - \psi_B && \text{Orbital antilotzailea}\end{aligned}$$



$\psi_+$

Orbital Molekularra lotzailea



$\psi_-$

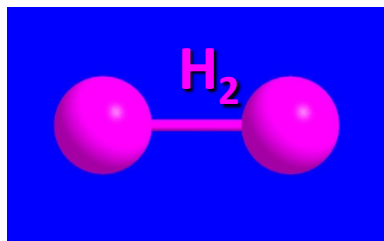
Orbital Molekularra antilotzailea



# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

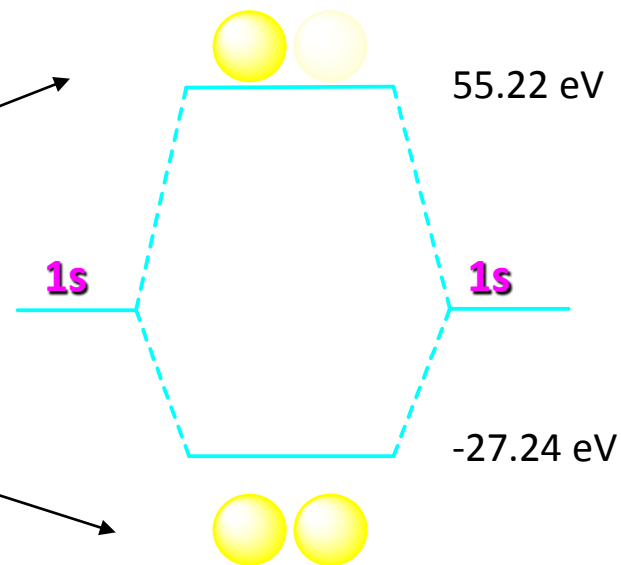
### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA



**Orbital atomikoak**

antifasean  
konbinatu

fasean  
konbinatu

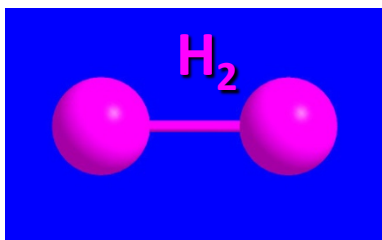


**Orbital  
molekularrak**

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

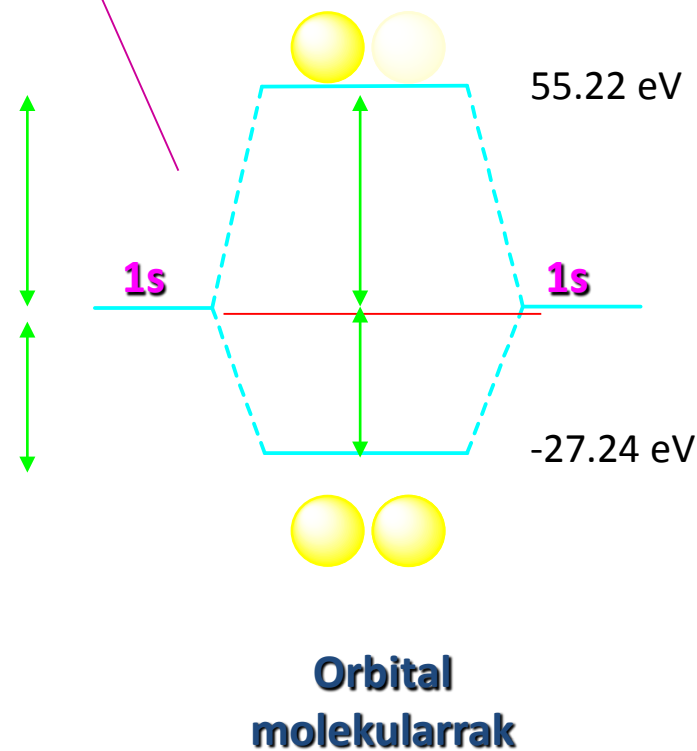


$\Delta E_{\text{desegonkortze}}$

$\Delta E_{\text{egonkortze}}$

$\Delta E_d > \Delta E_e$

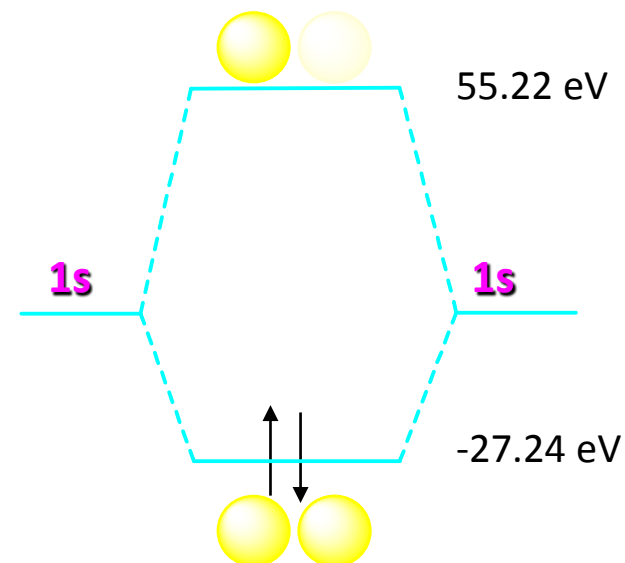
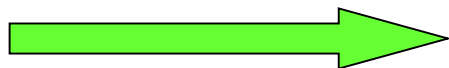
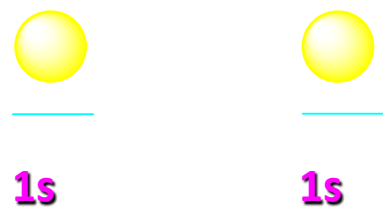
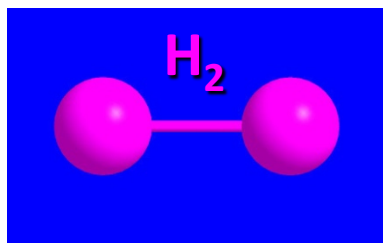
Egonkortasuna beti desegonkortasuna baino txikia da



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA. **Zergatik eratzen da H<sub>2</sub> molekula?**

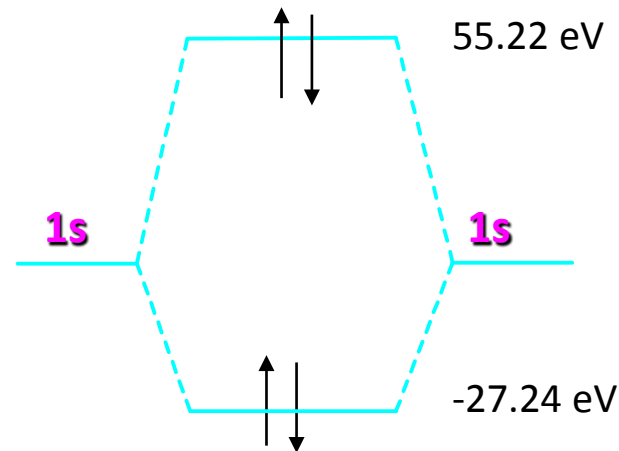
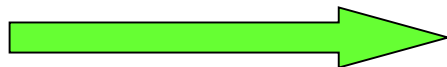
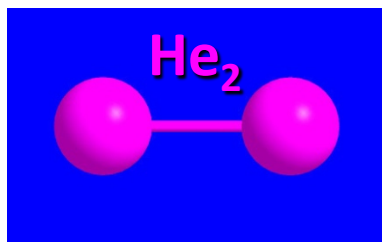


Molekula eratzean, sistemak  $2(-27.54)\text{eV}=-55.08\text{ eV}$  balioko energian egonkortu da.

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA. Zergatik ez da eratzen da  $\text{He}_2$  molekula?



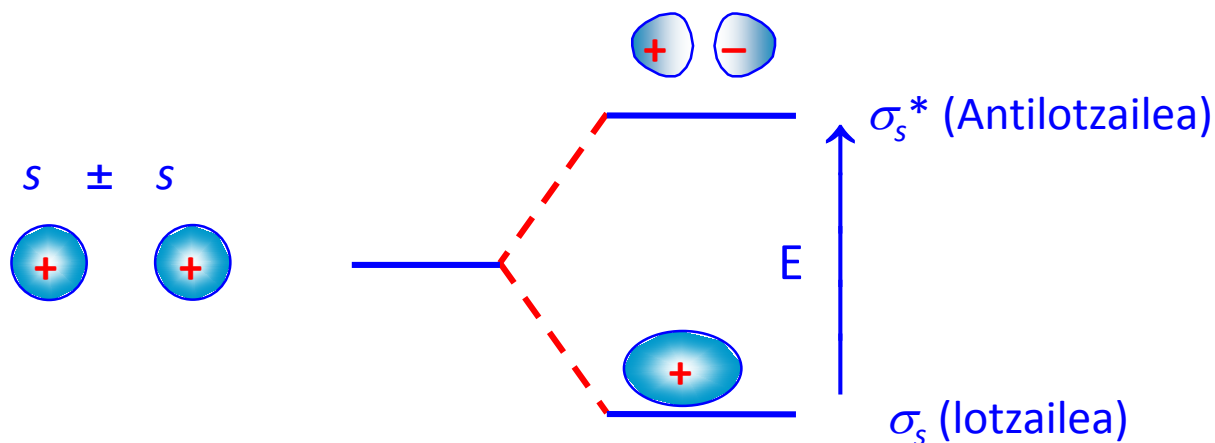
Molekula eratzean, sistemak  $2(-27.54)\text{eV} + 2(55.22)\text{eV} = +55.96\text{ eV}$  balioko energian desegonkortuko litzateke.

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA.

a)  $\sigma$  orbital molekularrak **s** orbital atomikoez eratutakoak



s orbital atomikoak

Simetria esferikoa

Orbital Molekularrak

Simetría cilíndrica  $\Rightarrow$

Orbital  $\sigma$

Orbital  $\sigma_s$

Lotzailea

Orbital  $\sigma_s^*$

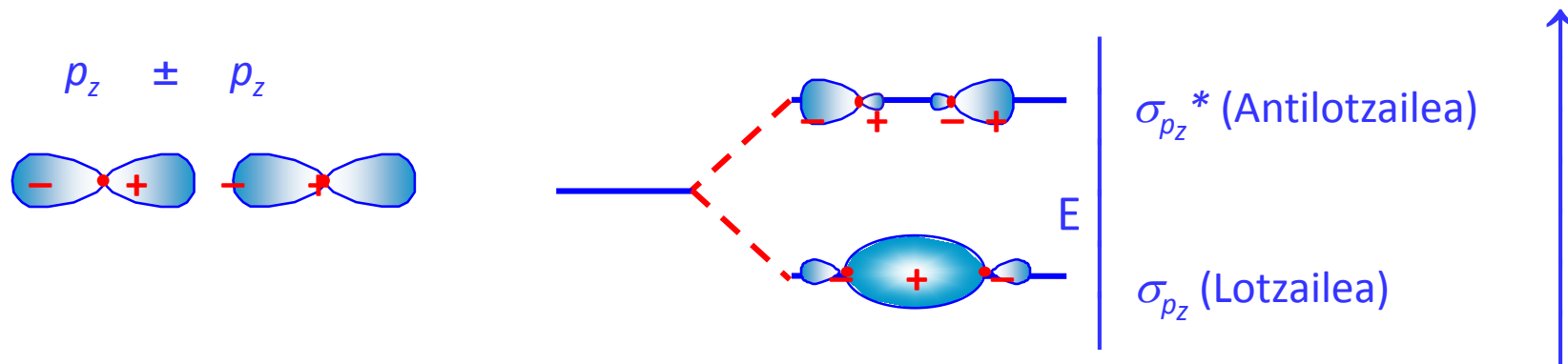
Antilotzailea

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA.

b)  $\sigma$  orbital molekularrak  $p_z$  orbital atomikoek eratutakoak



$\sigma_{p_z}$  orbitala

simetria zilindrikoa

Molekularen erdiko puntuarekiko simetrikoa da

$\sigma_{p_z}^*$  orbitala

simetria zilindrikoa

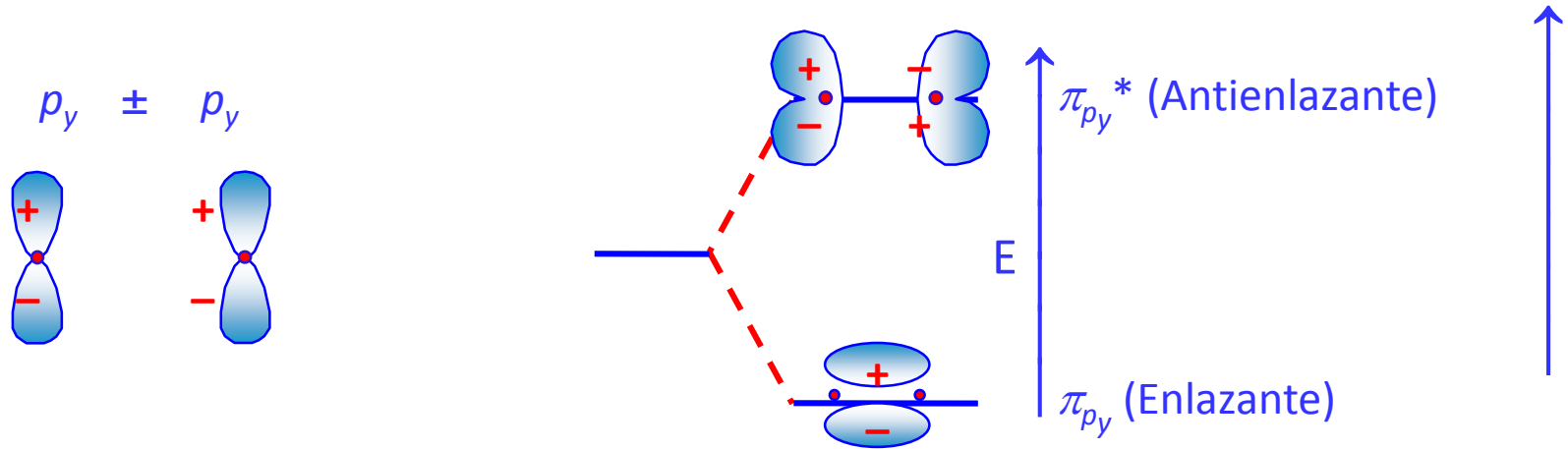
Molekularen erdiko puntuarekiko antisimetrikoa da

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA.

c)  $\pi$  orbital molekularrak  $p_x$  eta  $p_y$  orbital atomikoez eratutakoak



$\pi_{p_y}$  orbitala

Molekularen gainetik eta behetik hedatzean da dentsitate elektronikoa.

Molekularen erdiko puntuarekiko antisimetrikoa da

$\pi_{p_y}^*$  orbitala

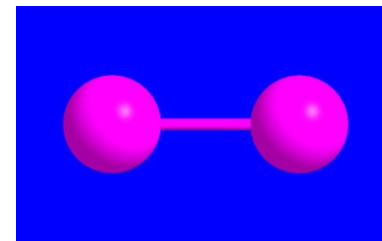
dentsitate elektronikoaren bi zonaldea ditu

Molekularen erdiko puntuarekiko simetrikoa da

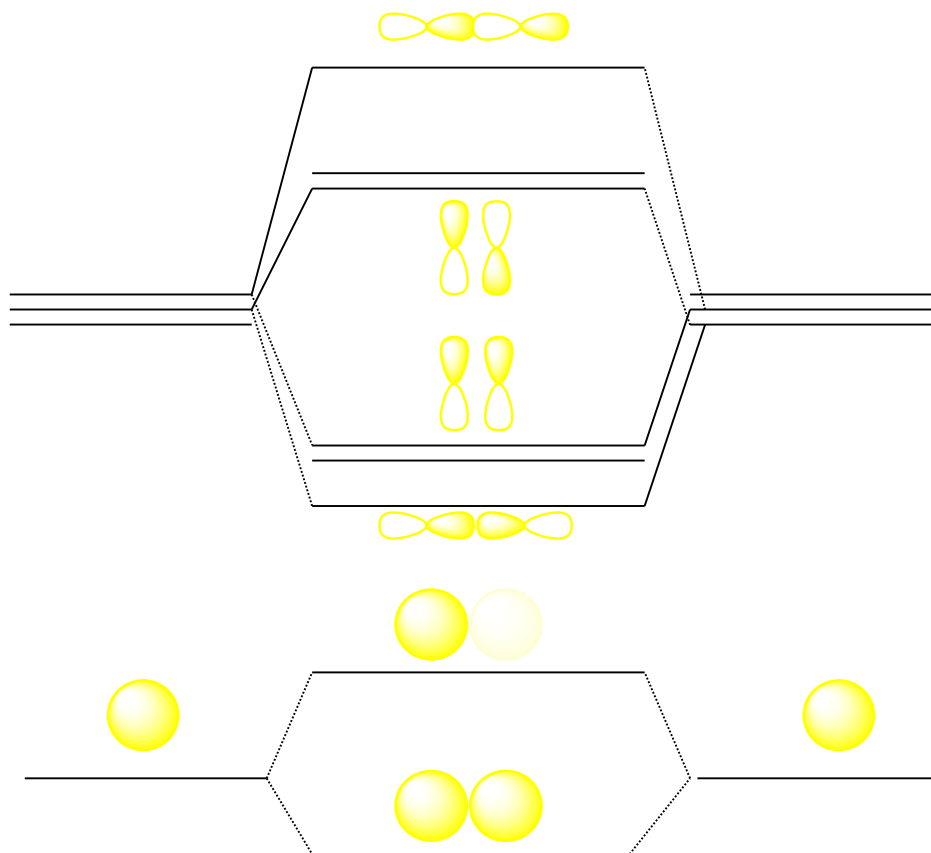
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA $O_2$ , $F_2$ , $Ne_2$



Molekula diatomiko  
homonuklearrak



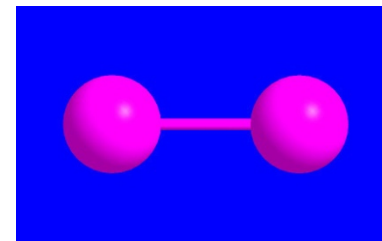
erabilgarri dauden orbital atomikoak  
 $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$   
(atomo bakoitzeko)



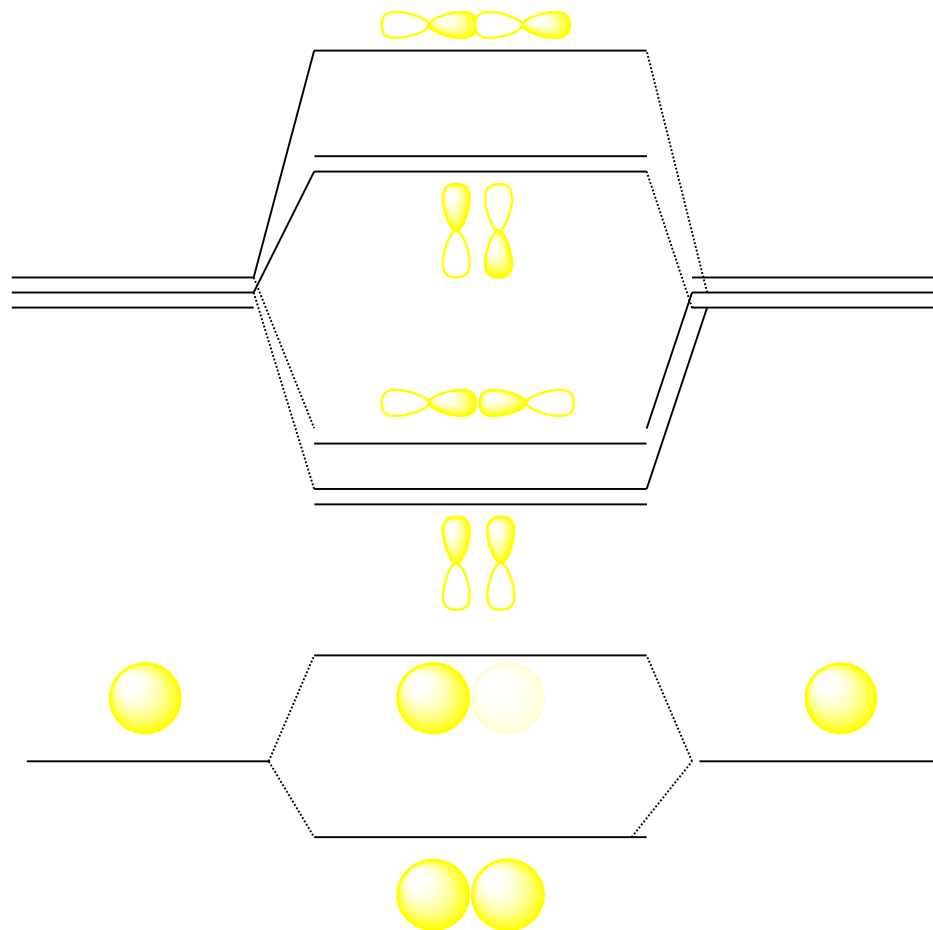
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA $\text{Li}_2, \text{Be}_2, \text{B}_2, \text{C}_2, \text{N}_2$



Molekula diatomiko homonuklearrak

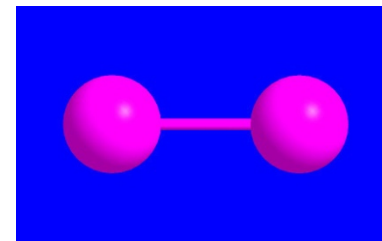


erabilgarri dauden orbital atomikoak  
 $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$   
(atomo bakoitzeko)

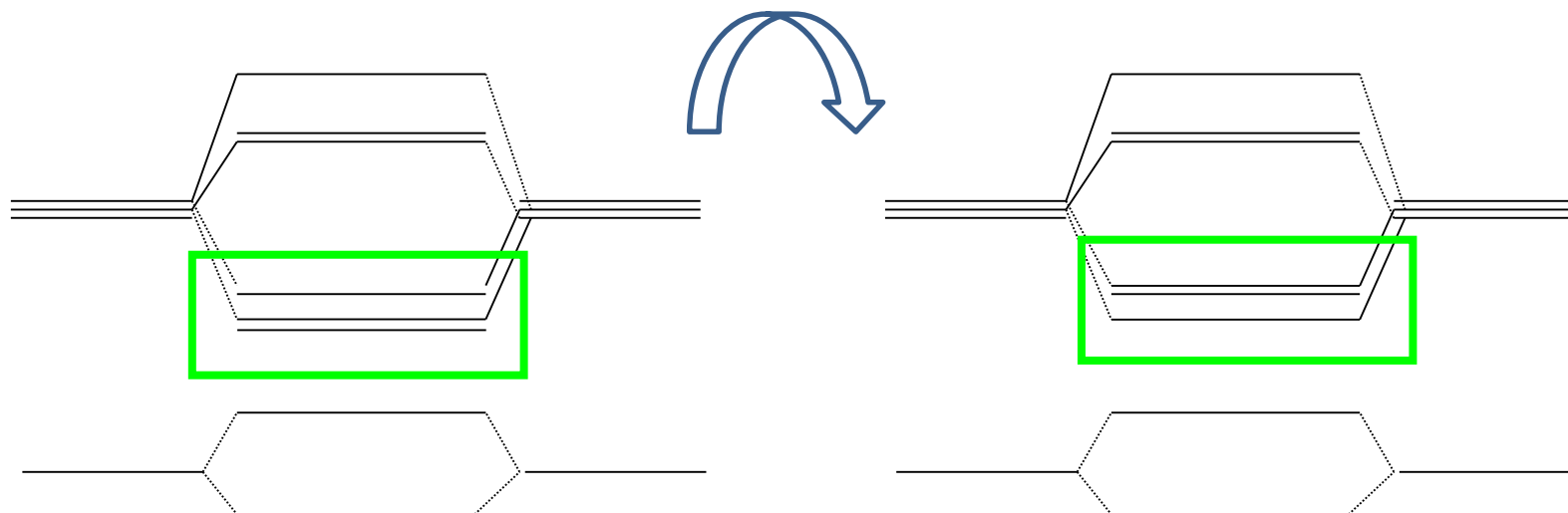
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA



Molekula diatomiko  
homonuklearrak



$\text{Li}_2, \text{Be}_2, \text{B}_2, \text{C}_2, \text{N}_2$

Nahastutako diagrama

$\text{O}_2, \text{F}_2, \text{Ne}_2$

Nahastu barik diagrama

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

- . Orbital molekularrak energia hazkorraren arabera ordenatzen dira, interakzio-diagrama deituriko diagramak eratuz
- . Ordena hau oso inportantea izango da molekularren konfigurazio elektronikoa eta berarekin erlazionatzen duten ildoetan
- . Atomoan s eta p orbitalak badaude bi diagrama-mota bereizten dira
  - nahasketarekin
  - nahasketarik gabe
- . Energiaren aldea da kontuan hartu behar dugun faktorea bien arteko aldeak azaltzeko

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

##### *s eta p orbitalekin atomoak*

. s eta p orbitalak oro har haien artean energia-alde txikia daukate.

Energia-alde oso txikia denean

- atomo bakoitzaren s eta p orbitalak nahasten dira
- OM-ak s eta p orbitalen nahasketatik eratzen dira

. Energia-alde handiagoa denean

- s eta p *orbitalak ez dira nahasten*
- OM bakarrik s edo bakarrik p orbitalen nahasketatik eratzen dira

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

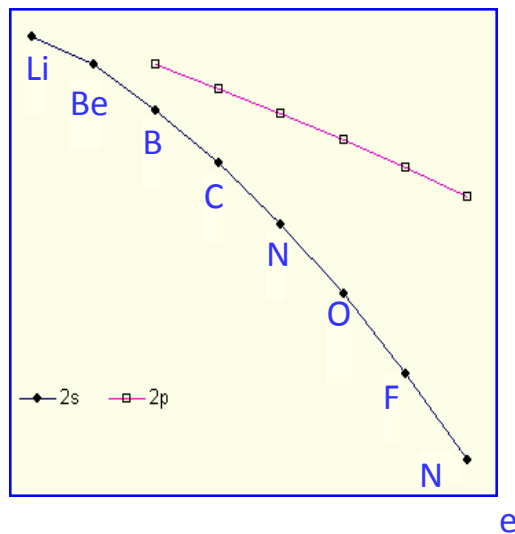
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

Orbitalen energia taula periodikoan ezkerretik eskuinera gutxitzen da

N atomora arte: orbitalen energia-aldea txikia da  
Nahasketa esperagarria izango da

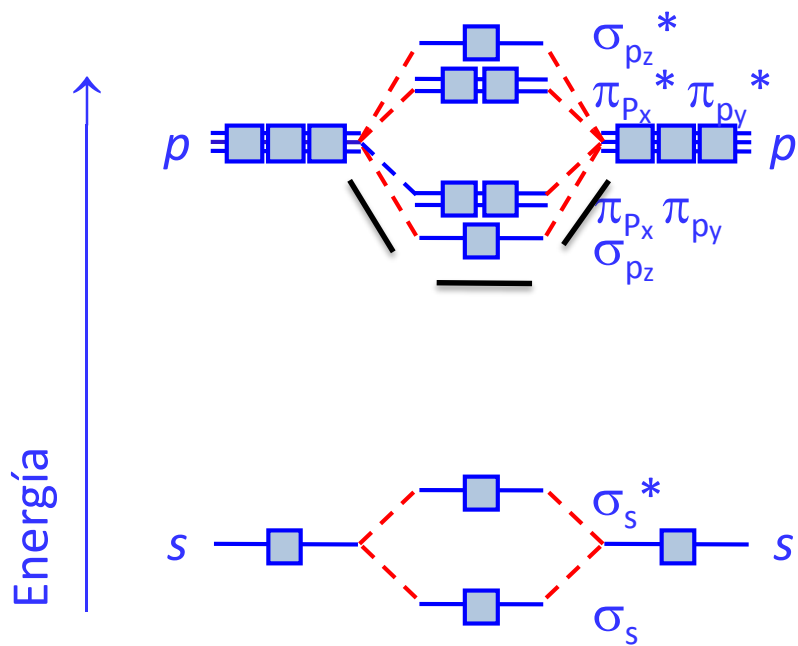
N ondoren: orbitalen energia-aldea handiagoa  
Nahasketa ez da izango esperagarria



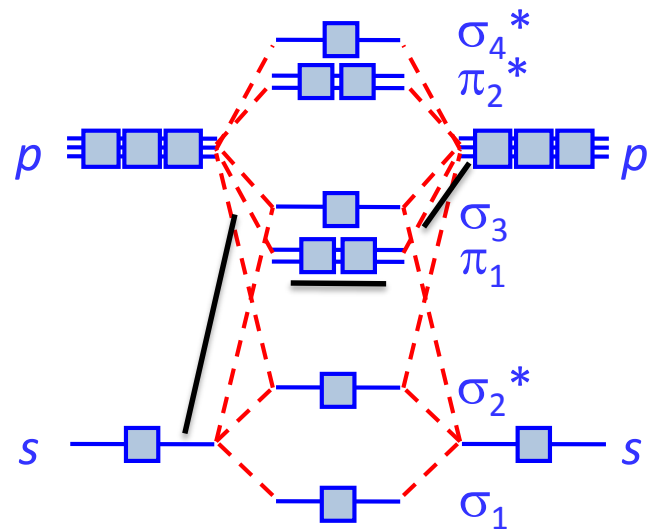
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA



(a) Nahasketarik gabe



(b) Nahasketarekin

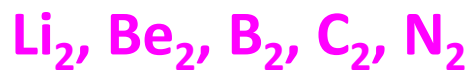
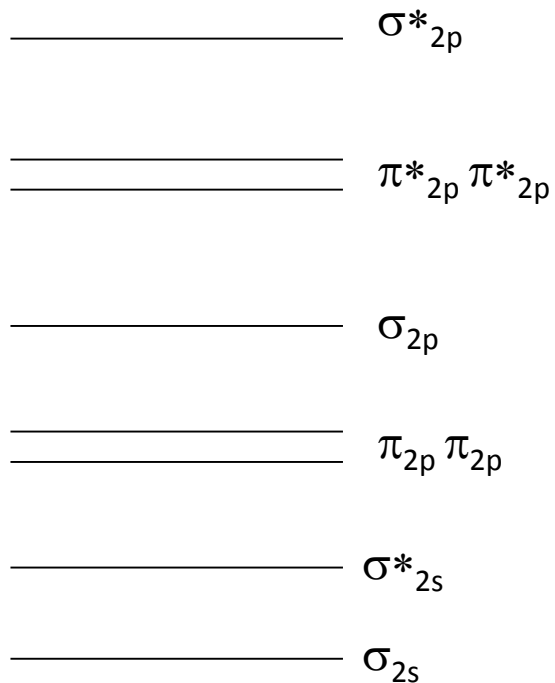
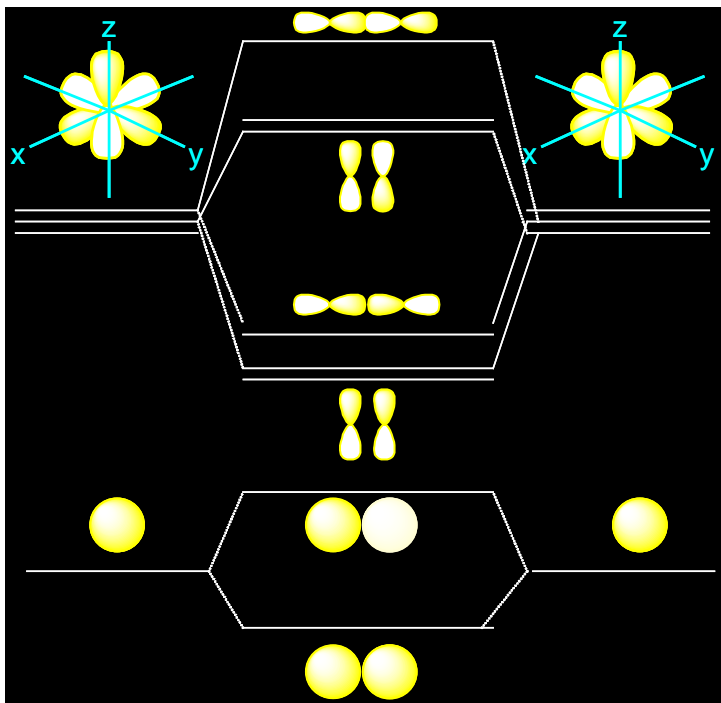
Nitrogeno atomoa baino lehen (b)

Nitrogeno atomoa ondoren (a)

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA. 2. periodoko molekula diatomikoak



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

Orbital lotzaileetan dauden  
elektroien kopurua

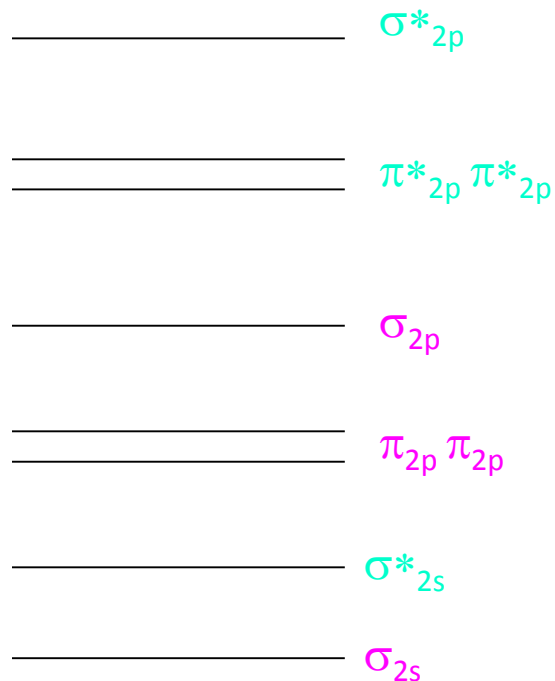
-

Orbital antilotzaileetan  
dauden elektroien kopurua

2



**Lotura-ordena**





# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearra



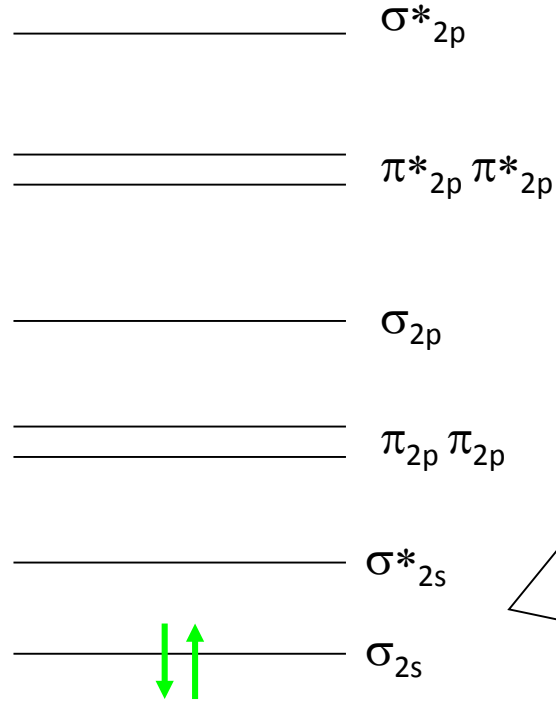
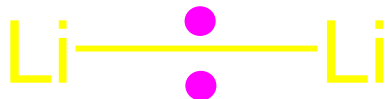
$2s^1$

2 balentzia-elektroi

$\sigma_{2s}^2$

$$LO = (2 - 0) / 2 = 1$$

LEWIS-en egitura



Izartxo  
erabiltzen da  
antilotzailea  
dela  
adierazteko

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak



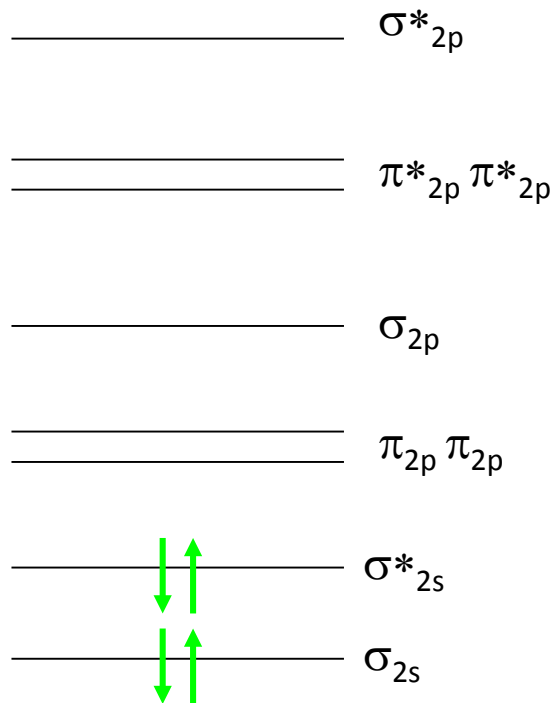
$2s^2$

4 balentzia-elektroi

$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2}$

$$LO = (2 - 2) / 2 = 0$$

LEWIS-en egitura

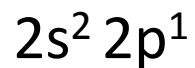


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

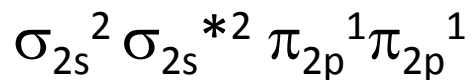
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

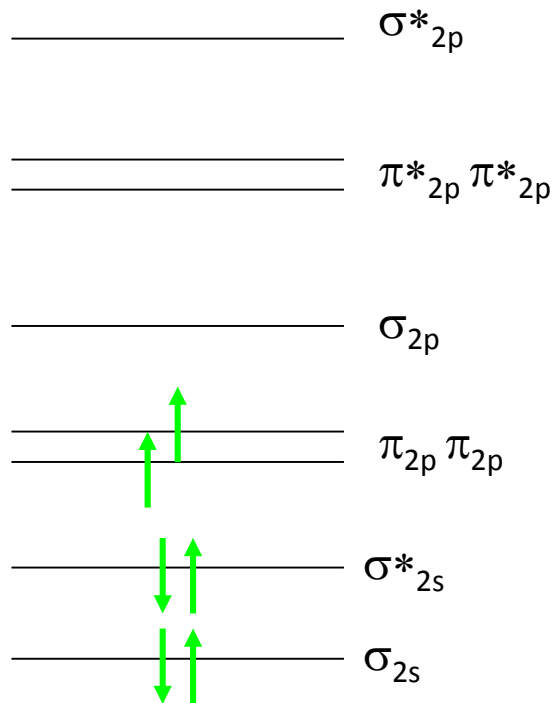
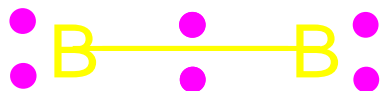


6 balentzia-elektroi



$$\text{LO} = (4 - 2) / 2 = 1$$

LEWIS-en egitura

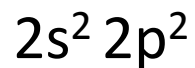


## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

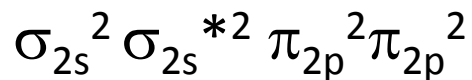
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

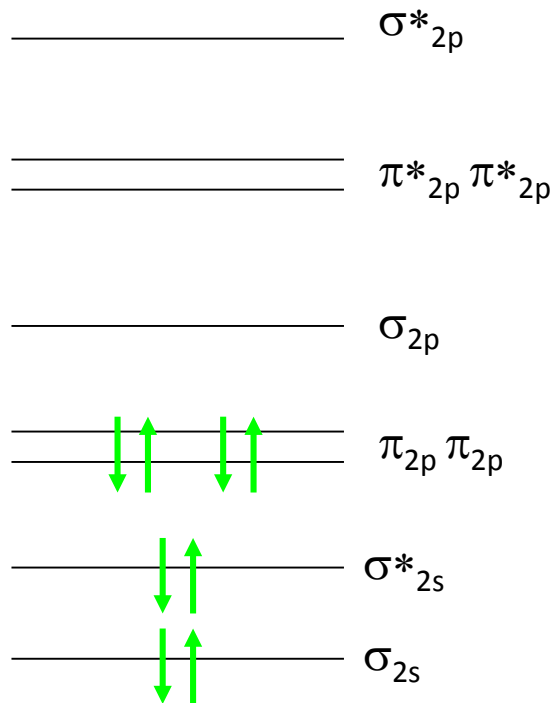
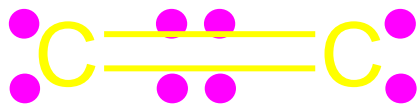


8 balentzia-elektroi



$$LO = (6 - 2) / 2 = 2$$

LEWIS-en egitura

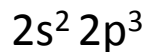


## 2. LOTURA KIMIKOA

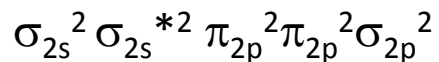
## 2.1. LOTURA KOBALENTEA

### 2.1.2. ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

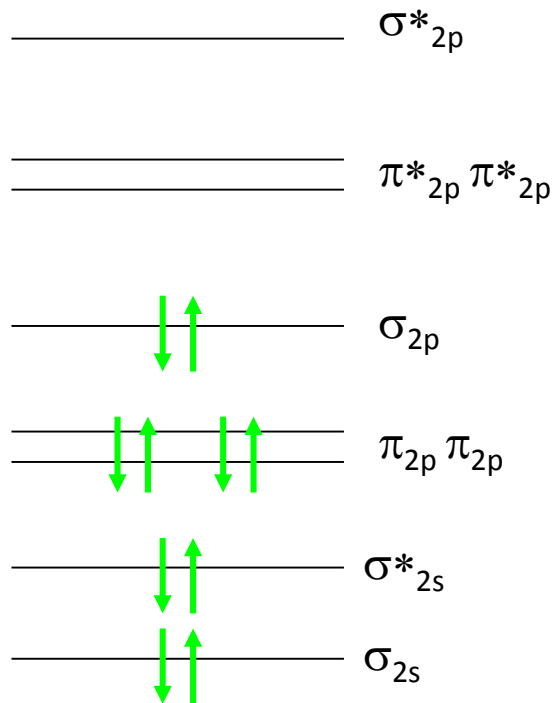


10 balentzia-elektroi



$LO = (8 - 2) / 2 = 3$

LEWIS-en egitura

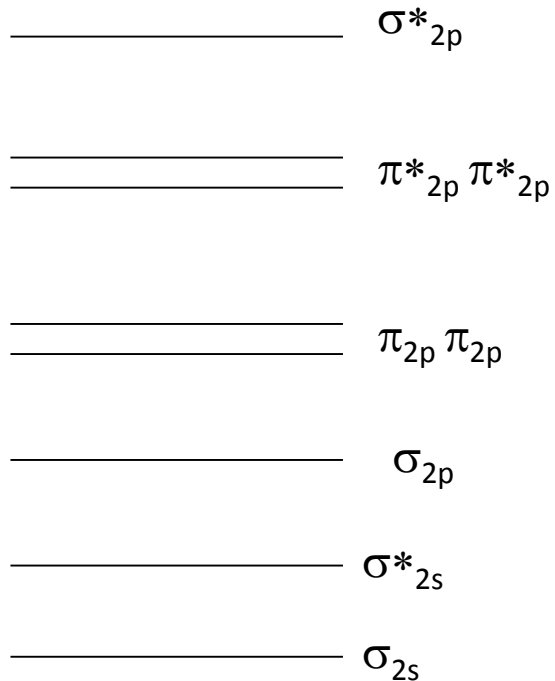
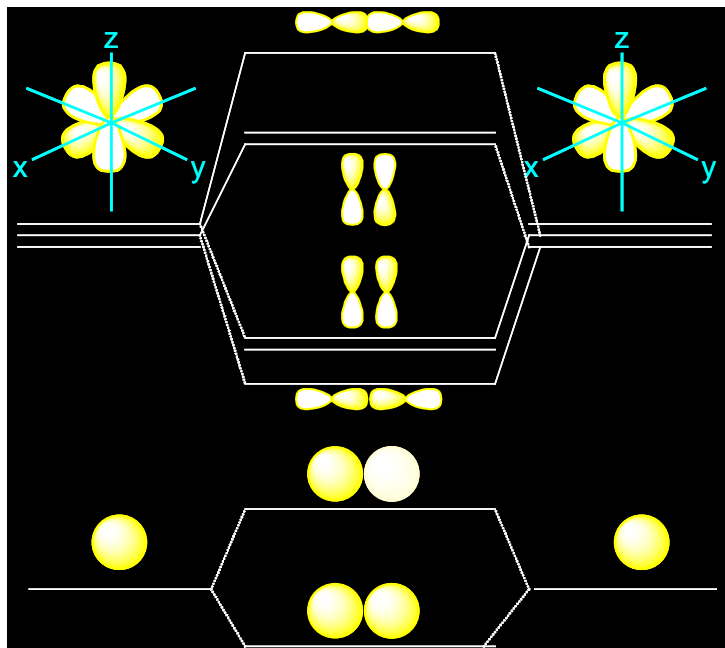


# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

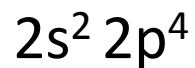
#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak



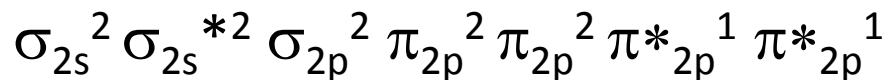
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

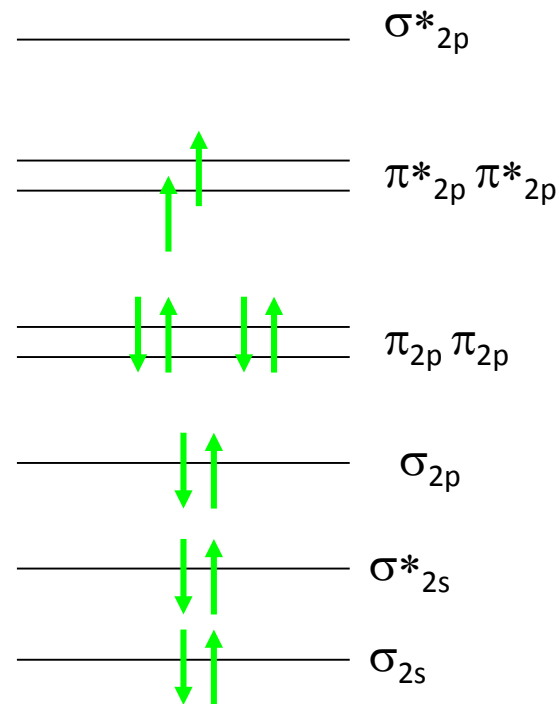
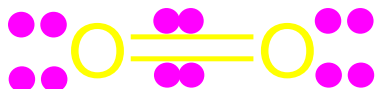


12 balentzia-elektroi



$LO = (8 - 4) / 2 = 2$

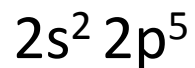
LEWIS-en egitura



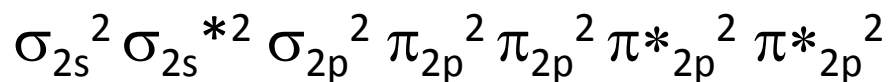
## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

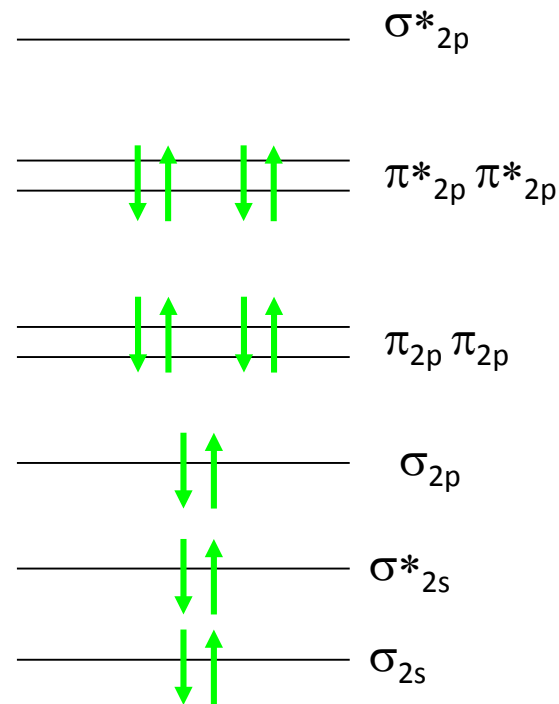
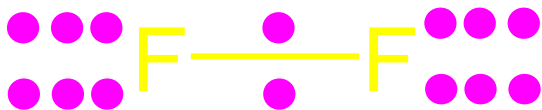


14 balentzia-elektroi



$$LO = (8 - 6) / 2 = 1$$

LEWIS-en egitura

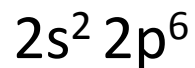




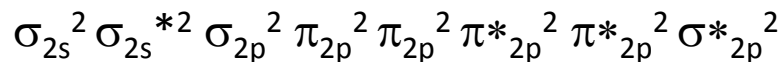
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

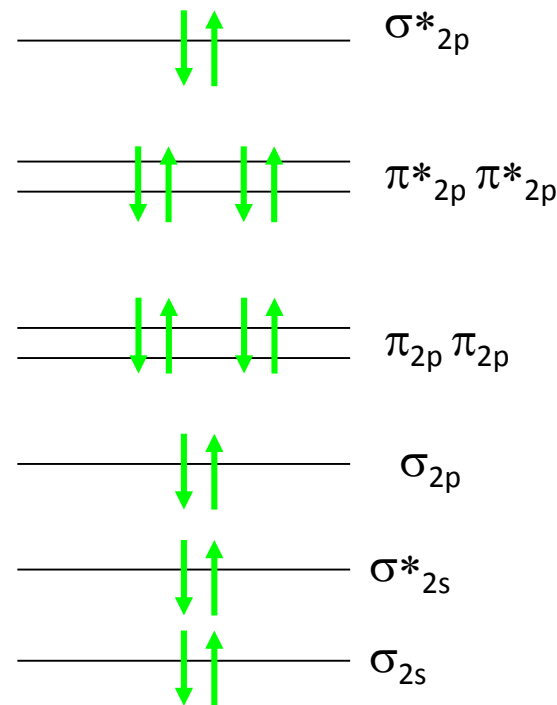


16 balentzia-elektroi



$LO = (8-8)/2 = 0$

LEWIS-en egitura



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

$A_2$	konfigurazio elektronikoa	lo	$\Delta H_{dis}$
$Li_2$	$(\sigma_{2s})^2$	$(2-0)/2=1$	105
$Be_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2$	$(2-2)/2=0$	-
$B_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^1(\pi_{2p})^1$	$(4-2)/2=1$	125
$C_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2$	$(6-2)/2=2$	588
$N_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$	$(8-2)/2=3$	944
$O_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^1(\pi_{2p}^*)^1$	$(8-4)/2=2$	496
$F_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2$	$(8-6)/2=1$	158
$Ne_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2(\sigma_{2p}^*)^2$	$(8-8)/2=0$	-

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

$A_2$	konfigurazio elektronikoa	L.O.	$\Delta H_{\text{dis}}$
$Li_2$	$(\sigma_{2s})^2$	$(2-0)/2=1$	105
$Be_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2$	$(2-2)/2=0$	-
$B_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^1(\pi_{2p})^1$	$(4-2)/2=1$	125
$C_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2$	$(6-2)/2=2$	588
$N_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$	$(8-2)/2=3$	944
$O_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^1(\pi_{2p}^*)^1$	$(8-4)/2=2$	496
$F_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2$	$(8-6)/2=1$	158
$Ne_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2(\sigma_{2p}^*)^2$	$(8-8)/2=0$	-

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

$A_2$	konfigurazio elektronikoa	lo	$\Delta H_{dis}$
$Li_2$	$(\sigma_{2s})^2$	$(2-0)/2=1$	105
$Be_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2$	$(2-2)/2=0$	-
$B_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^1(\pi_{2p})^1$	$(4-2)/2=1$	125
$C_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2$	$(6-2)/2=2$	588
$N_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$	$(8-2)/2=3$	944
$O_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^1(\pi_{2p}^*)^1$	$(8-4)/2=2$	496
$F_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2$	$(8-6)/2=1$	158
$Ne_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2(\sigma_{2p}^*)^2$	$(8-8)/2=0$	-

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

$A_2$	konfigurazio elektronikoa	lo	$\Delta H_{\text{dis}}$
$Li_2$	$(\sigma_{2s})^2$	$(2-0)/2=1$	105
$Be_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2$	$(2-2)/2=0$	-
$B_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^1(\pi_{2p})^1$	$(4-2)/2=1$	125
$C_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2$	$(6-2)/2=2$	588
$N_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$	$(8-2)/2=3$	944
$O_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^1(\pi_{2p}^*)^1$	$(8-4)/2=2$	496
$F_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2$	$(8-6)/2=1$	158
$Ne_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2(\sigma_{2p}^*)^2$	$(8-8)/2=0$	-

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

$A_2$	konfigurazio elektronikoa	lo	$\Delta H_{\text{dis}}$
$Li_2$	$(\sigma_{2s})^2$	$(2-0)/2=1$	105
$Be_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2$	$(2-2)/2=0$	-
$B_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^1(\pi_{2p})^1$	$(4-2)/2=1$	125
$C_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2$	$(6-2)/2=2$	588
$N_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$	$(8-2)/2=3$	944
$O_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^1(\pi_{2p}^*)^1$	$(8-4)/2=2$	496
$F_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2$	$(8-6)/2=1$	158
$Ne_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2(\sigma_{2p}^*)^2$	$(8-8)/2=0$	-

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

## Portaera magnetikoa

### 2. periodoko molekula diatomiko homonuklearrak

$A_2$	konfigurazio elektronikoa	parekatu gabeko elektroirik?	
$Li_2$	$(\sigma_{2s})^2$	ez	diamagnetikoak
$B_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^1(\pi_{2p})^1$	bai	paramagnetikoak
$C_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2$	ez	diamagnetikoak
$N_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\sigma_{2p})^2$	ez	diamagnetikoak
$O_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^1(\pi_{2p}^*)^1$	bai	paramagnetikoak
$F_2$	$(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p}^*)^2(\pi_{2p}^*)^2$	ez	diamagnetikoak

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### Lotura-luzera

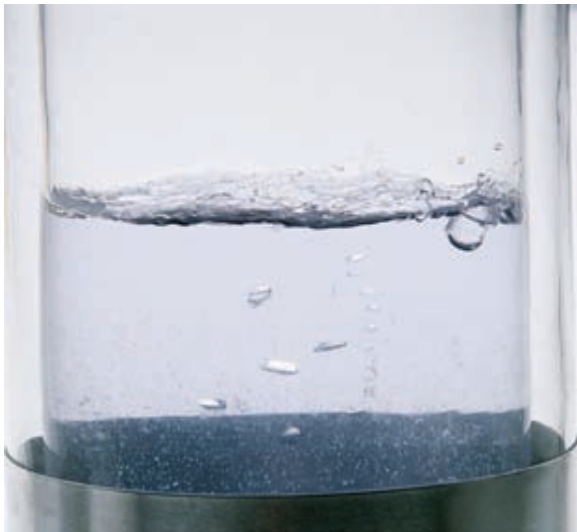
Espezia	elektroi kopurua	konfigurazio elektronikoa	lotura ordena	lotura luzera	lotura energia*
$\text{H}_2^+$	1	$\sigma_s^1$	$1/2$	1,06	61
$\text{H}_2$	2	$\sigma_s^2$	1	0,74	104
$\text{He}_2^+$	3	$\sigma_s^2 \sigma_s^{*1}$	$1/2$	1,08	60
$\text{He}_2$	4	$\sigma_s^2 \sigma_s^{*2}$	0	$\infty$	inestable

\*kcal mol<sup>-1</sup>





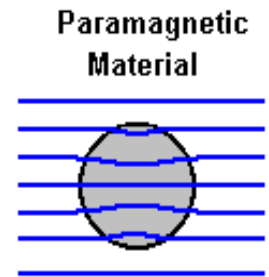
El oxígeno es licuado haciéndolo pasar x una bobina sumergida en  $N_2(l)$   $T = -195.8\text{ }^\circ\text{C}$



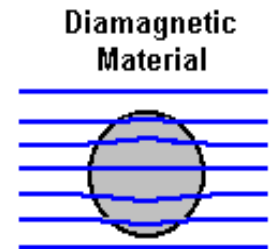
El  $O_2$  líquido es de color azul claro y su  $T_{ebu} = -183\text{ }^\circ\text{C}$



$O_2$ , paramagnético, se adhiere relativamente a un imán de Nd



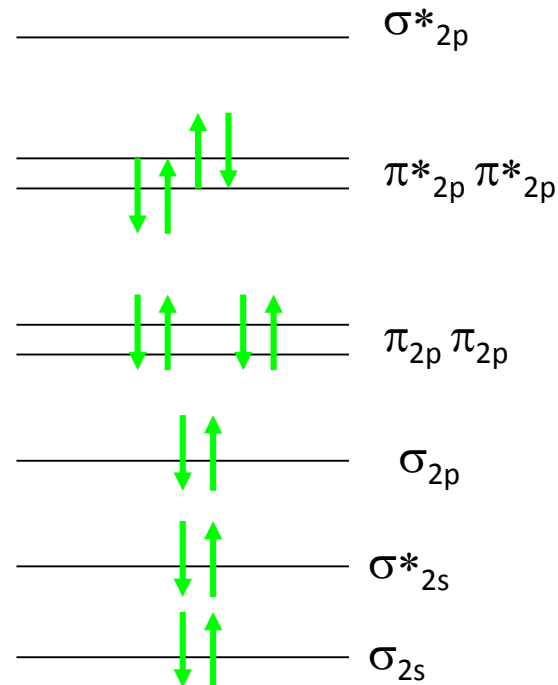
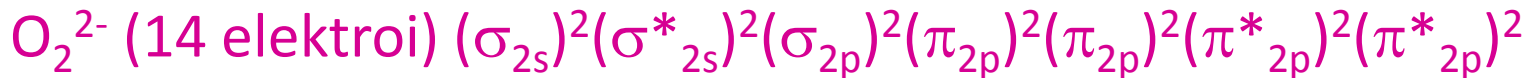
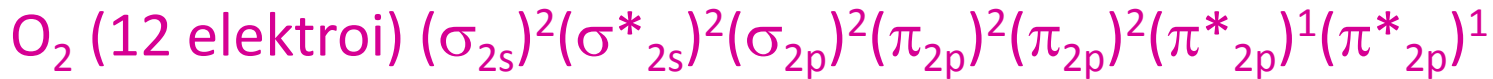
$N_2$ , diamagnético al contrario, no se ve atraído hacia el imán, se repele.



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

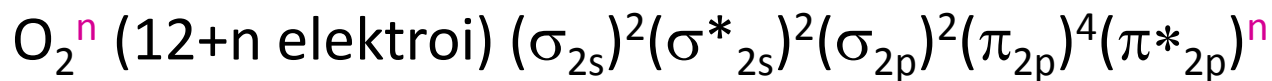
#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA. **Dioxigeno espezieak**



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA. **Dioxigeno espezieak**



	$\text{O}_2^+$	$\text{O}_2$	$\text{O}_2^-$	$\text{O}_2^{2-}$
<b>n</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
elektroiak	11	12	13	14
orotarako lotura-ordena	<b>2.5</b>	<b>2</b>	<b>1.5</b>	<b>1</b>
$\sigma$ lotura-ordena	1	1	1	1
$\pi$ lotura-ordena	1.5	1	0.5	0
lotura-distantzia (Å)	<b>1.12</b>	<b>1.21</b>	<b>1.33</b>	<b>1.49</b>

## TEMA 11.5.2. Análisis de moléculas heteronucleares

### Molekula Heteronuklearrak

- . Orbital atomikoak desberdinak dira eta konbinaketa linealean, ere, ekarpen desberdina izango dute
- . Nahasketaren koefizienteak agertzen dira

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

$$\psi_-^* = \psi_A - \lambda \psi_B \quad \text{O M Antilotzailea}$$

- . Atomo elketronegatiboagoak energi-mailak baxuenak ditue
- . Orbital lotzaileak atomo elektronegatiboarena hurbilago daude

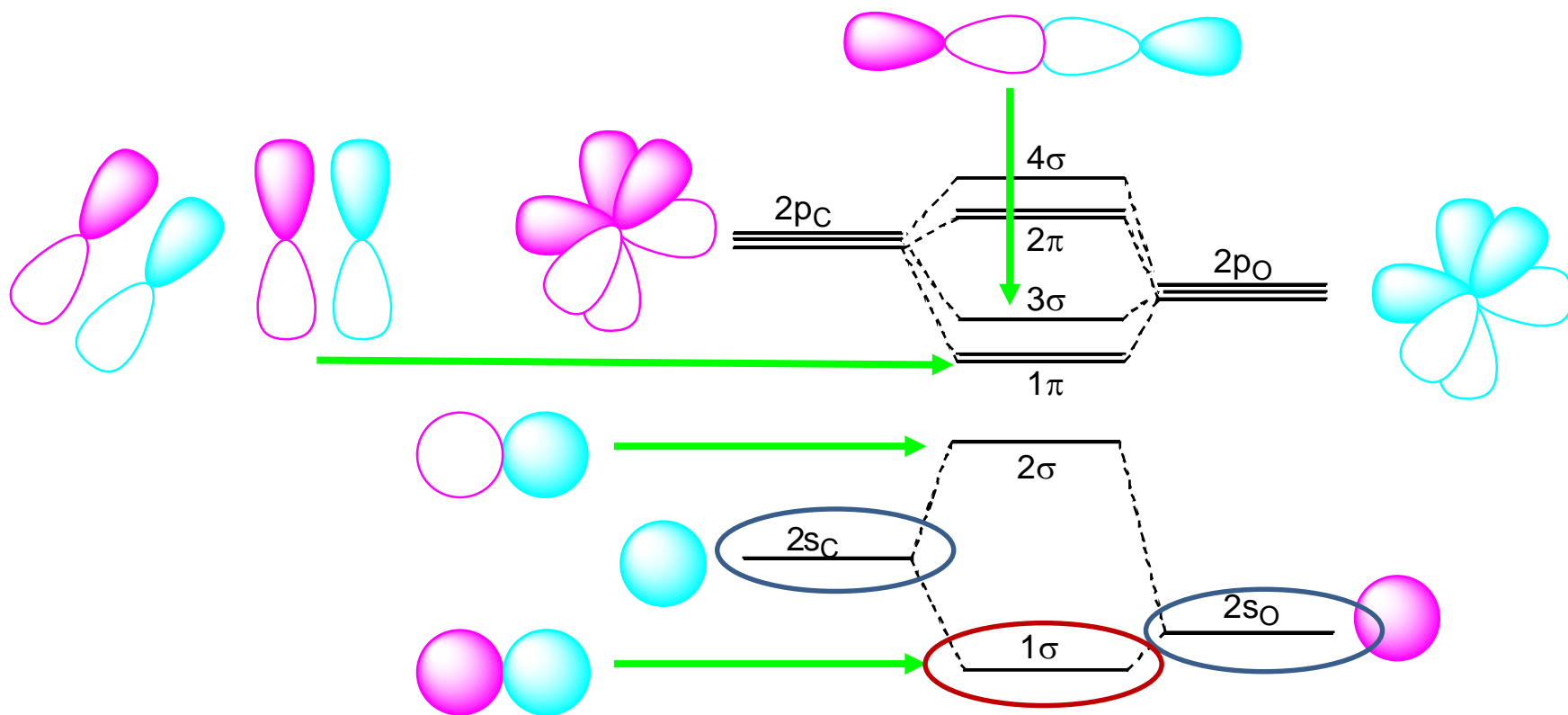
# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko heteronuklearrak: CO molekula

(Nahastutako diagrama)

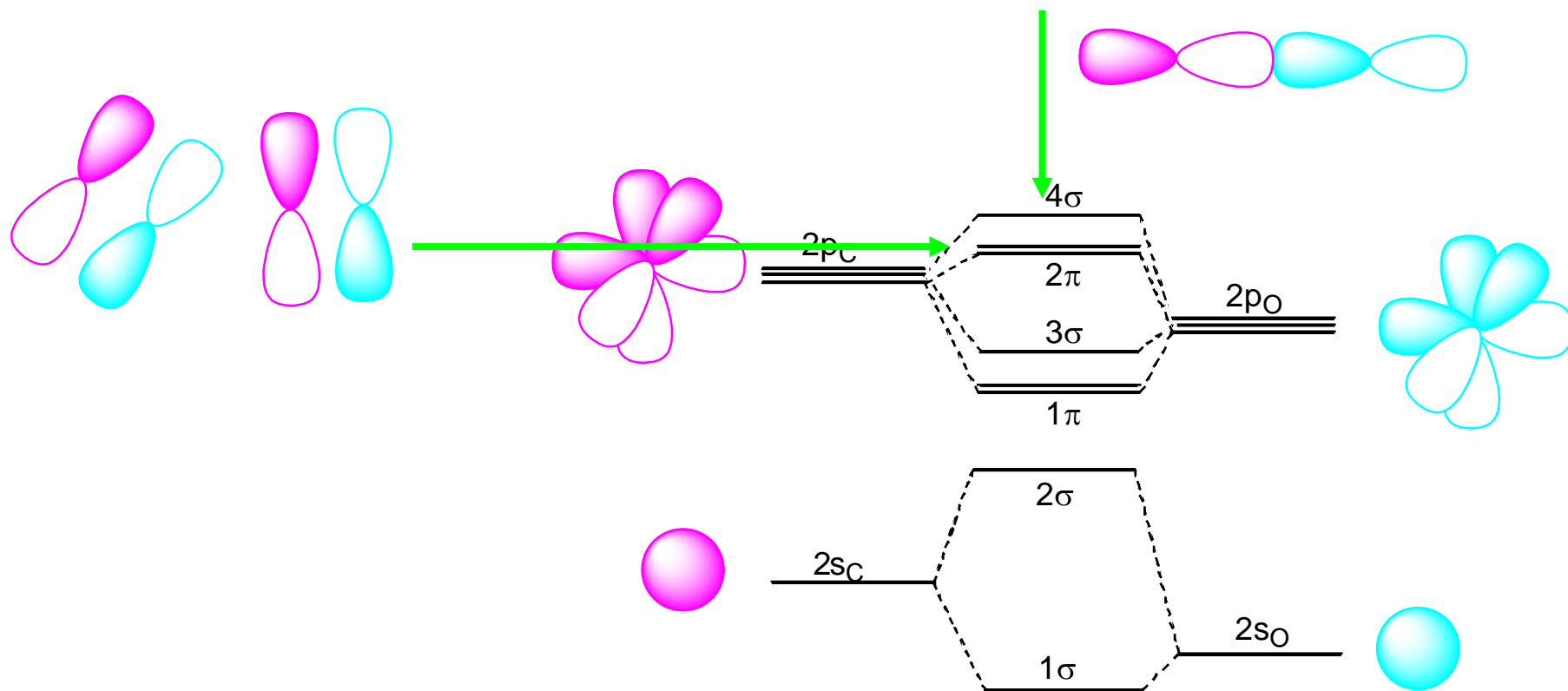


# 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.2. LOTURA KOBALENTEA

### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko heteronuklearrak



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

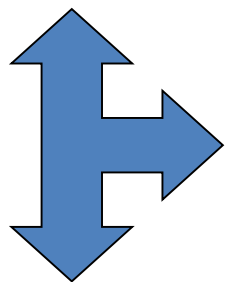
### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

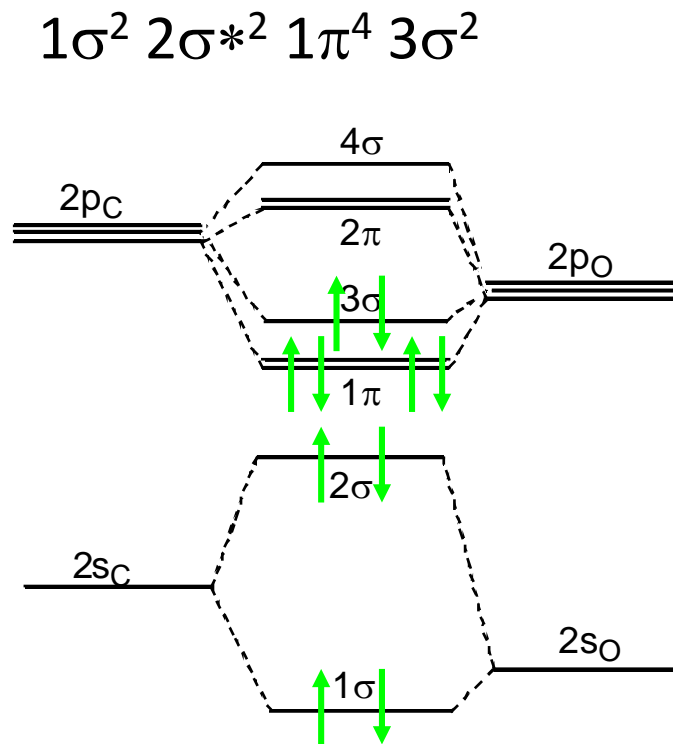
#### 2. periodoko molekula diatomiko heteronuklearrak

CO (10 elektroi)

$$\text{L.O.} = (8 - 2) / 2 = 3$$



ados!!!!



## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### 2. periodoko molekula diatomiko heteronuklearrak

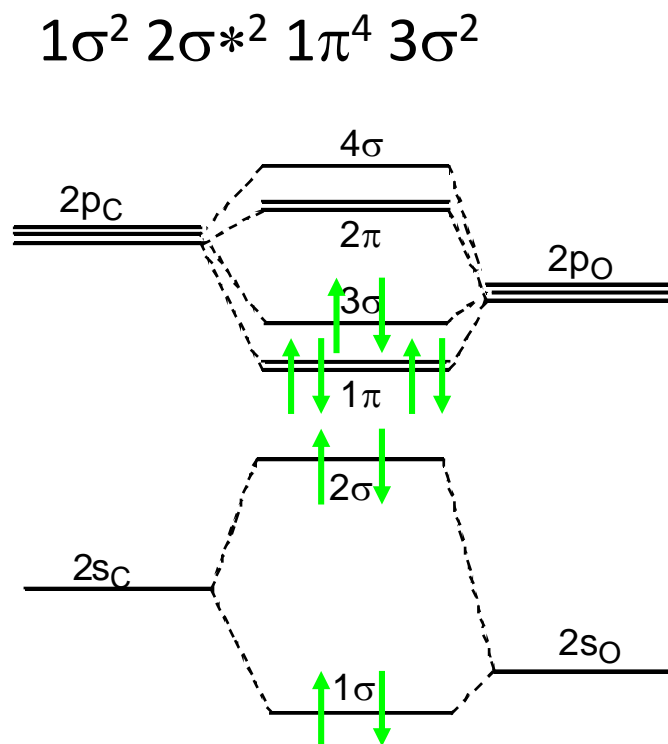
CO (10 elektroi)



NO<sup>+</sup> (10 elektroi)



CN<sup>-</sup> (10 elektroi)





## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

##### Orbital-muga

- . **HOMO** (*highest occupied molecular orbital*):beteta dagoen energia handiko orbital molekularra
- . **LUMO** (*lowest unoccupied molecular orbital*):hutsik dagoen energia gutxiko orbital molekularra
- . HOMO eta LUMO-ren arteko energiaren aldea banda-jauzia deritzo
- . Molekularen eszitzatzeko gaitasuna neurtzen du



Hainbat eta energia txikiagoa, elektroia errezago eszita daiteke

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

## Laburpena

- . Molekula gehiago azaltzeko baliogarria da
- . Elektroi bakarra duten molekulen egonkortasuna azaltzen du
- . Oxigenoaren paramagnetismoa azaltzeko bakarria da
- . Orbital-mugak nagusiak dira egonkortasun molekularrean
- . Askotan molekula bat azaltzeko ikusitako lotura-eredu guztiak aplikatu behar da

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

#### Hitzen glosarioa

- . Orbital Molecular
- . O.A.K.L.
- . Paramagnetismoa
- . Lotura-ordena
- . Lotura-luzera
- . HOMO orbitala
- . LUMO orbitala

## 06. GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.2. LOTURA KOBALENTEA

#### ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

##### Bibliografia

1. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*; 11ª Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
2. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.: *Química General*. Ed: Pearson Education, 10ª Ed., Madrid, (2011)
3. Valenzuela, C.: *Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia*. Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)
4. Lothar Beyer: *Química Inorgánica*. Ed. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
5. Housecroft, C. E., A. Sharpe: *Química Inorgánica*. Ed. Pearson Prentice Hall, Madrid (2006)
6. Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed: Mac Graw Hill, México (2008)

## *06.GAIA: LOTURA KIMIKOA*

*06.1: LOTURA IONIKOA*

*06.2: LOTURA KOBALENTEA*

*06.3: LOTURA METALIKOA*

*06.4: KOHESIO-INDARRAK*

## *06.GAIA: LOTURA KIMIKOA*

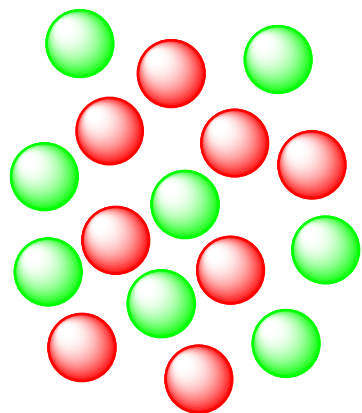
### *06.1: LOTURA IONIKOA*

### *06.2: LOTURA KOBALENTEA*


### *06.3: LOTURA METALIKOA*

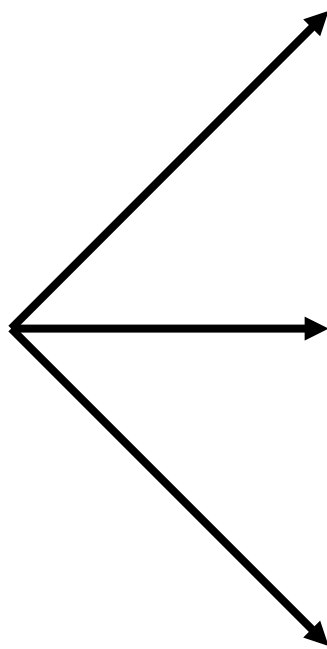
### *06.4: KOHESIO-INDARRAK*

# 06.1. LOTURA KIMIKOA SARRERA

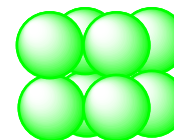
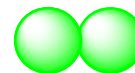
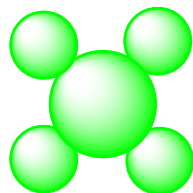


 elementu metalikoa

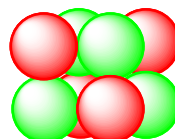
 elementu ez-metalikoa



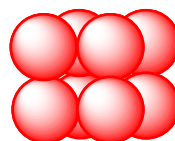
lotura kobalentea



lotura ionikoa



lotura metalikoa



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### 6.3. 1. Solido metalikoen ezaugarriak

#### 6.3. 2. Sare metalikoak

#### 6.3. 3. Lotura metalikoaren ereduak. Banden teoria

#### 6.3. 4. Erdieroaleak eta supereroaleak

#### 6.3. 5. Portaera magnetikoa



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA



Burdinazko igitaia

Gizakiaren historia eta metalen erabilera banaezinak dira, metalak eroale elektriko eta termiko onak direlako eta harikortasuna eta zailtasuna handia daukatelako. Ezaugarri hauek gizakiaren garapen teknologikorako ezinbestekoak izan dira mendeetan zehar

Are gehiago, metalak distiratsuak direnez apaingarri gisa erabili dira betidanik

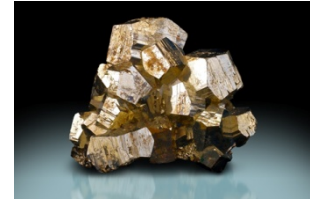


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

Metalen propietaterik garrantzitsuenak

- . Eroankortasun altua
- . Argiaren isladapen handia (distira metalikoa)
- . Xaflakortasuna (geruza meheak) eta harikortasuna (hari meheak)
- . Zailtasuna (indarra jasaterakoan energiaren xurgapena)
- . Dentsitate altua (Os, Iridio, altuenetarikoen artean daude)
- . Opakuak (gehienak grisak dira)
- . Fusio-puntu altuak ( $W$  altuena)



## 306.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

- Metalak harikorrak dira: kanpoko indar bat eragitean erraz deformatzen dira.
- Metalak zailak dira: energia asko xurgatzen dute hautsi baino lehen, kanpoko indar batenpean
- Material harikorrak zailak izaten dira, deformatzean energia asko xurgatzen baitute
- Aleazioek ere ezaugarri hauek izaten dituzte, zenbait metalen konbinazioak baitira.
- Aleazioak prestatzeko metalak elkarrekin funditzen dira, eta hozketaren ondorioz suertatzen solidotze-prozesuan, metalek sare berean kristalizatzen dira.
- Gaur egun, aleazioak aldez aurretik 'diseinatzen' dira aplikazio jakin baterako.
- Hala ere, zenbait aleazio antzinatek ezagutzen dira: adibidez, brontzeak (Cu eta Sn), letoiak (Cu eta Zn) eta amalgamak (Hg-aren konbinazioak)

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

Atomizazio-beroa(kcal/mol, a 25 °C)  
Fusio-puntuak(°C)

<b>Li</b> 38,6 180°	<b>Be</b> 77,5 1283°										
<b>Na</b> 25,9 97,5°	<b>Mg</b> 35 650°	<b>Al</b> 78 660°									
<b>K</b> 21,5 63,4°	<b>Ca</b> 42,5 850°	<b>Sc</b> 90 1539°	<b>Ti</b> 112 1725°	<b>V</b> 123 1730°	<b>Cr</b> 95 1900°	<b>Mn</b> 68 1247°	<b>Fe</b> 99,3 1535°	<b>Co</b> 102,4 1493°	<b>Ni</b> 102,8 1455°	<b>Cu</b> 81,1 1083°	<b>Zn</b> 31,2 420°
<b>Rb</b> 19,5 38,8°	<b>Sr</b> 39 770°	<b>Y</b> 101,5 1509°	<b>Zr</b> 145,5 1852°	<b>Nb</b> 172 2487°	<b>Mo</b> 157 2610°	<b>Tc</b> 158 2140°	<b>Ru</b> 153 2400°	<b>Rh</b> 133 1960°	<b>Pd</b> 91 1550°	<b>Ag</b> 68 961°	<b>Cd</b> 26,7 321°
<b>Cs</b> 18,7 28,7°	<b>Ba</b> 42,5 704°	<b>La</b> 103 920°	<b>Hf</b> 148 2300°	<b>Ta</b> 187 2997°	<b>W</b> 203 3380°	<b>Re</b> 187 3150°	<b>Os</b> 188 2700°	<b>Ir</b> 160 2454°	<b>Pt</b> 135 1769°	<b>As</b> 88 1063°	<b>Hg</b> 15,3 -38,9°

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

- Metalen komunean dauzkaten ezaugarriak ezagunak dira, baina guztiz diferenteak diren propietateak ere badauzkate:
- Adibidez, atomizazio-entalpiak eta fusio-puntuak

Li (180°C)

Mg (650°C)

W (3380°C)

Cu (1083°C)

Cs (28.7°C)

Al (660°C)

Fe (1535°C)

Zn (420°C)

Hg (-39.9°C)



- Horregatik zaila izan da historian zehar metalen lotura deskribatzeko eredu teoriko sinple bat garatu.
- Izan ere, gaur egun erabiltzen den eredua (banden teoria, alegia) orbital molekularren teoriaren kasu partikular bat da

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

**6.3. 1. Solido metalikoen ezaugarriak**

**6.3. 2. Sare metalikoak**

**6.3. 3. Lotura metalikoaren ereduak. Banden teoria**

**6.3. 4. Erdieroaleak eta supereroaleak**

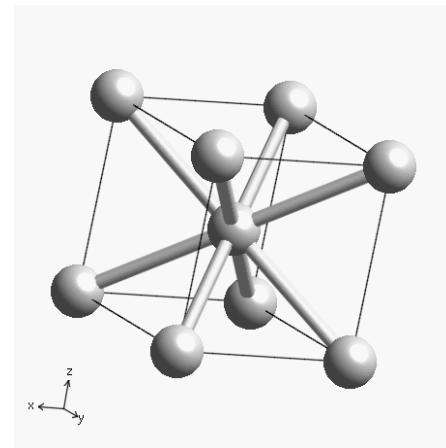
**6.3. 5. Portaera magnetikoa**

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Metalen egitura kristalina. Solido metalikoak

- . Metalak paketatzen dira oso trinkoak diren sareak eratzen (K.I.:8-12)
- . Espazioa betetzen da modurik hoberena
- . KI handiagoa ordenamendu trinko batean 12 da
- . Askotan lortzen dute indize hau, tamaina bereko osagaiak izateagatik sareak ez baitira oso konplexuak



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Metalen egitura kristalina. Solido metalikoak

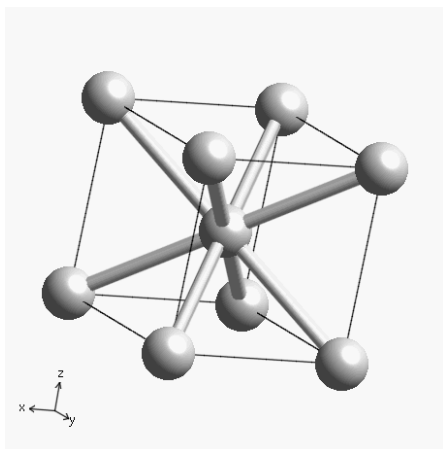
Nagusiki metalak sare-mota hauek eratzen dira

➤ Paketatze Trinkoak:K.I.12

- Hexagonala (esaterako Hg)

- Kubikoa (esaterako Cu)

➤ Paketatze Kubikoa gorputzean zentratuta (Kl:8) (esaterako W)



- Esfera ukizailleez osatutako geruzetan datzan

- Geruza hauek bata bestearen gainean kokatzen dira

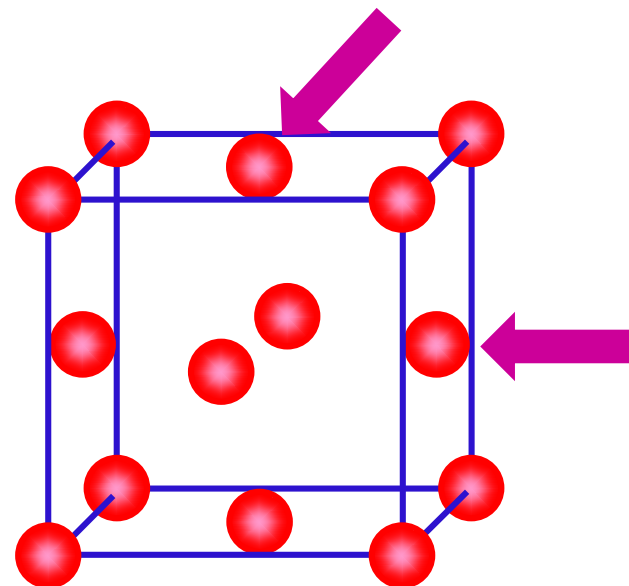


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Paketatze trinko kubikoa (PKT)

- Sare kubikoa aurpegietan zentratuta
- Geruza bateko esfera bakoitza ondoko geruzako bi atomoen gainean kokatzen da
- Atomo metalikok inguruan 12 atomo ditu
- Espazio askea: %26a

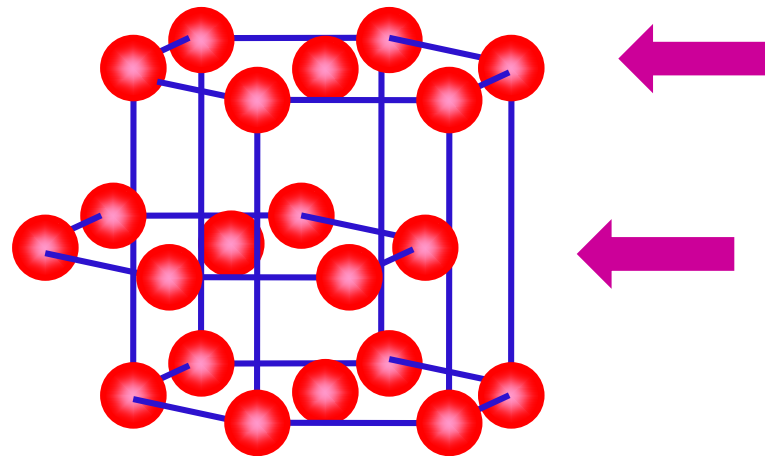


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Paketatze trinko hexagonala (PHT)

- Bi geruzetan behin gainezartzen dira
- Geruza bateko esfera bakoitza ondoko geruzako hiru atomoen gainean kokatzen da
- Atomo metalikok inguruan 12 atomo ditu

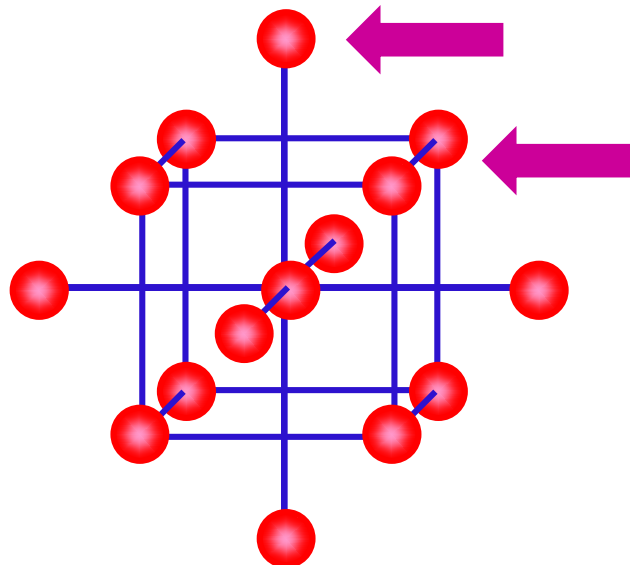


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Paketatze kubiko gorputzean zentratua(PKGZ)

- Bi geruzetan behin gainezartzen dira
- Esfera bakoitza ondoko geruzako lau atomoen gainean kokatzen da
- Atomo metalikok inguruan 6 atomo ditu eta 8 distantzia apur bat handiago distantzia batera

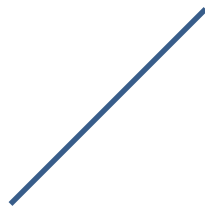


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Metalen egitura kristalina.Solido metalikoak

- Metal gehienek aurreko paketatzeetan kristalizatzen dira



Naturan, metal puru gisa,  
agertutako metalak:  
Au, Cu, Ag eta Pt

- Horrek naturak jarraitzen dion **espazioaren aurrekiaren irizpidea** baieztatzen du
- Ezagutzen diren salbuespenak oso eskasak dira

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

Metalen egitura kristalina. Solido metalikoak

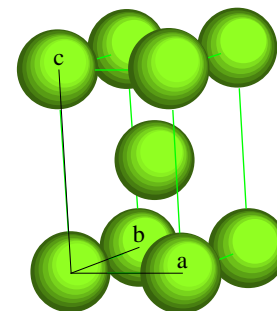
Loturaren  
norabidetasun  
ezagatik

. Paketatze trinko bien antzekotasunaren ondorioz, oso energia gutxi behar da bata beste bilakatzeko, eta horregatik metalek **polimorfismoa** erakusten dute.

. Ezaugarri honi **alotropia** ere esaten zaio

$\alpha$ -Fe	$T < 912^{\circ}\text{C}$	I sarea
$\gamma$ -Fe	$912^{\circ}\text{C} < T < 1394^{\circ}\text{C}$	F sarea (PKT)
$\delta$ -Fe	$1394^{\circ}\text{C} < T < 1538^{\circ}\text{C}$ (FP)	I sarea
$\beta$ -Fe	presio altukopean	PHT

Burdinaren sistema polimorfikoa



**a** parametroan  
dago aldea

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

6.3. 1. Solido metalikoen ezaugarriak

6.3. 2. Sare metalikoak

6.3. 3. Lotura metalikoaren ereduak. Banden teoria

6.3. 4. Erdieroaleak eta supereroaleak

6.3. 5. Portaera magnetikoa

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

- Metalen egiturak trinkoak dira eta K.Z. handiak izan ohi dute
- Li atomoak bakarrik elektroioi bat du baina beste 8 atomok inguratzen dute
- ¿Nola da posible hain lotura sendoa eratzea, elektroioi gutxi egonda?
- Ze nolako indarrei esker lotuta mantentzen dira?

<p>Lotura Kobalentea</p>
<ul style="list-style-type: none"><li>• Orbital gutxi</li><li>• Elektroioi asko</li></ul>

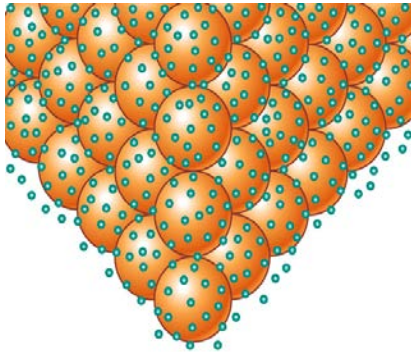
<p>Lotura Metalikoa</p>
<ul style="list-style-type: none"><li>• Orbital gutxi</li><li>• Elektroioi gutxi</li></ul>

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

**Lehen eredua. Ideia oso sinplea:** atomo metalikoek elektroiak galtzen dituzte, eta horiek “elektroi-itsaso” edo gas elektroniko deritzona osatzen dute

“Irudi” horretan elektroiak mugikorrek dira, eta horregatik ideia hori oso lagungarria da metalen ezaugarri termikoak eta elektrikoak aztertzeko (distira, xaflakortasuna, gogortasuna, eroankortasuna..)



elektroi-hodeia  
edo  
gas elektronikoa

**Egungo teoria. Banden teoria:** orbital molekularren kasu berezia da finkatu gabeko tamaina duen “molekula itzel” batean oinarrituta baitago.

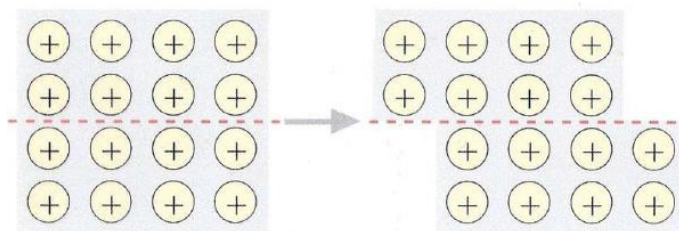
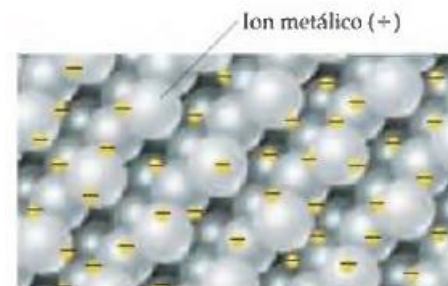


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

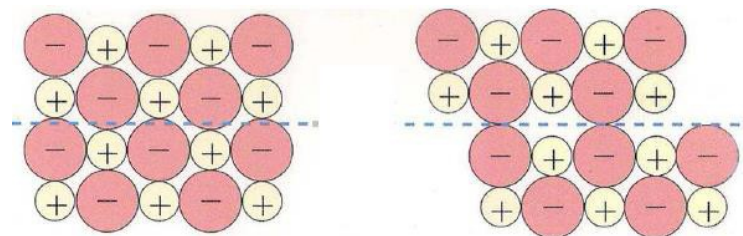
### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Elektroi-Itsaso eredua (Drude eta Lorentz, 1898)

- . Katioaz osatutako egitura eratzen da, haien artean mugitzen diren elektroiaz inguratuta
- . Katioiak: egituraren eustarria
- . Elektroiak : gas elektronikoa/elektroi-itsasoa
- . Ezaugarri garrantzitsuenak azaltzen ditu



Solido metalikoa



Solido ionikoa

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Metalen konfigurazio elektronikoak

Ez dute azaltzen metalen propietate magnetikoak

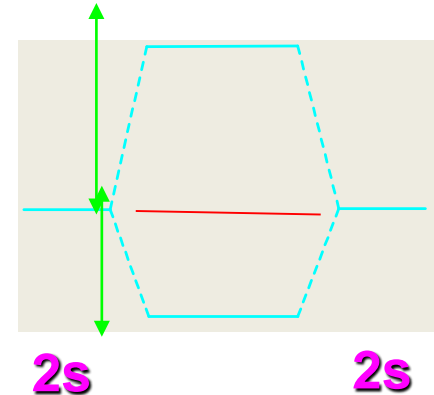
	s	d						s	d				
K, Rb, Cs	↑						↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	
Ca, Sr, Ba	↑	↑					↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	
Sc, Y, La	↑	↑	↑				↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	
Ti, Zr, Hf	↑	↑	↑	↑			↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	
V, Nb, Ta	↑	↑	↑	↑	↑		↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	
Cr, Mo, W	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Banden teoria (Block, 1928)

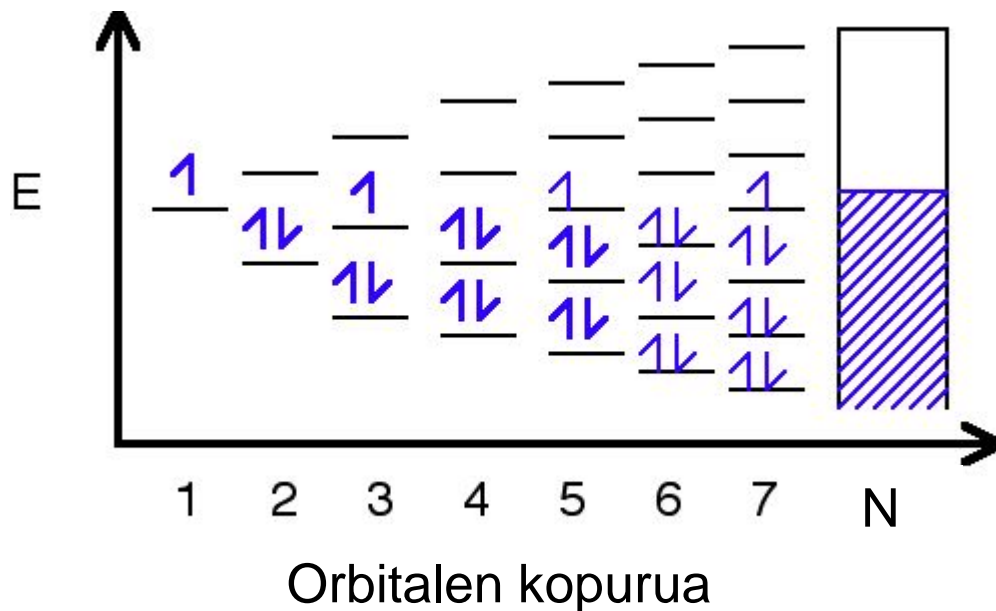
- Demagun 7 g duen Li kristal bat dugula; kantitate hau 1 mol denez,  $6.023 \times 10^{23}$  Li atomo daude kristal horretan
- Li atomoaren konfigurazioa  $1s^2 2s^1$  denez,  $6.023 \times 10^{23}$  2s balentzia orbital atomiko daude orbital molekularrak eraikitzeko.
- Bi orbital atomiko konbinatzen direnean, bi orbital molekular lortzen dira: bata, lotzailea (energia gutxikoa) eta bestea, antilotzailea (energia handikoa)



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### METAL ALKALINOAK



Li atomoan energi-mailaren banda

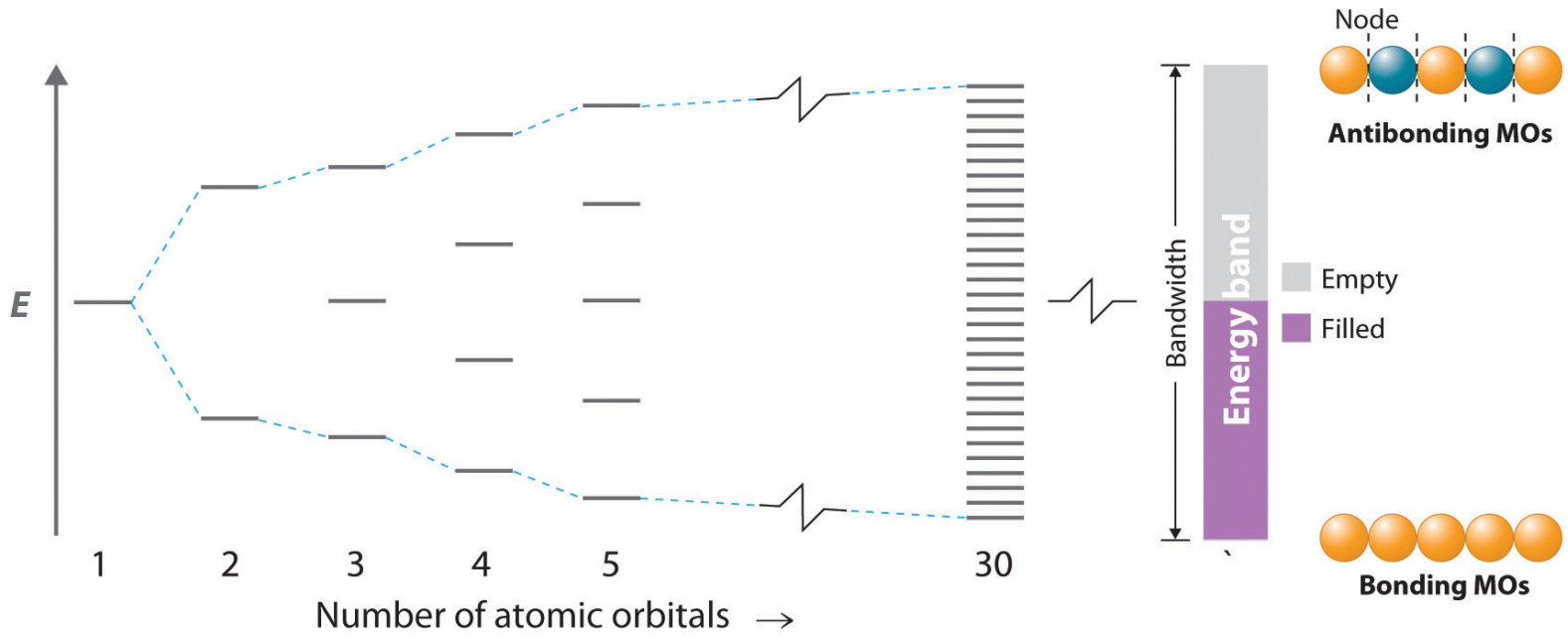
Konbinatzen diren orbital atomikoen kopurua handitu ahala, orbital molekularren arteko energia-aldea gero eta txikiagoa da.

Aukeratutako 7 g-ko eredu honetan, orbital atomikoen kopurua (n) izugarri handia da, eta horregatik  $Li_n$  solidoaren orbital molekularren arteko energia-aldea txiki-txikia da, ia jarraia izango da

Hori dela eta, orbital molekularrek **banda** bat osatzen dutela esaten da

# 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

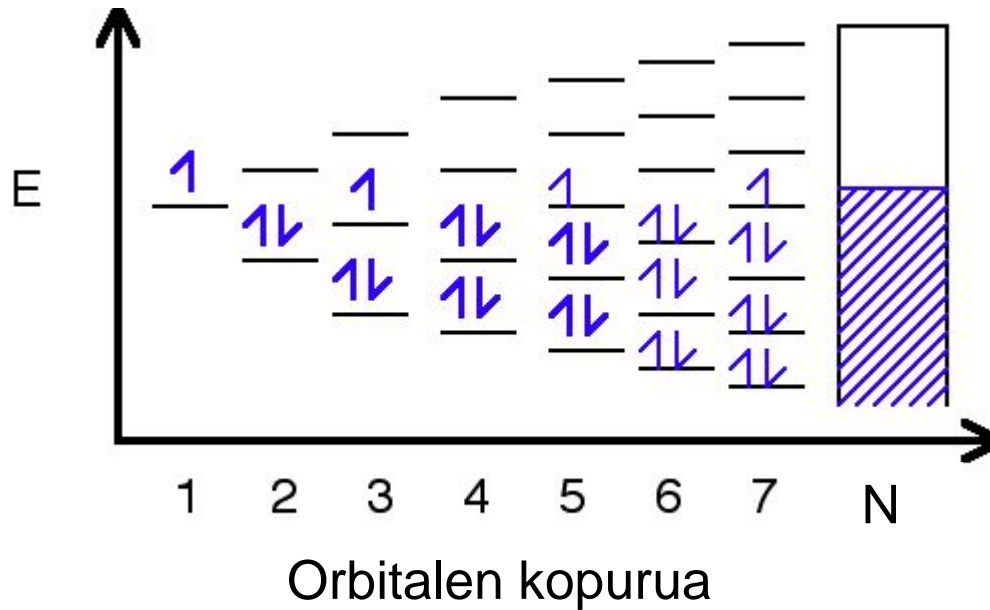
## 06.3: LOTURA METALIKOA



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### METAL ALKALINOAK



Horren ondorioz, erdi beteta dagoen bandan hainbat energi maila hutsik daude (energi hutsuneak sortzen dira), eta elektroien **mugikortasuna** ahalbidetzen da.

Horretan datza preseski **eroankortasun elektrikoa**.

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

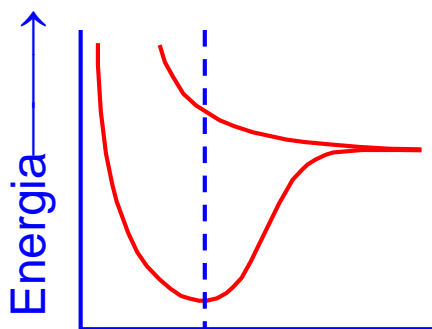
#### METAL ALKALINOAK

Orbital Molekularren Teoriaren arabera:

$n$  orbital atomikoen konbinaketa lineala suertatzean eratzten dira  $n$  orbital molekularrak

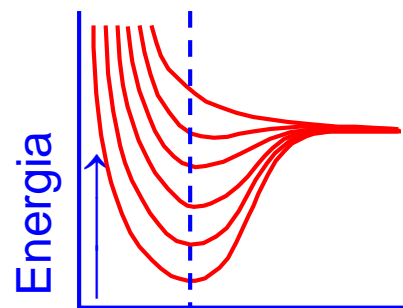
$n/2$  txikiagoko energia

$n/2$  handiagoko energia



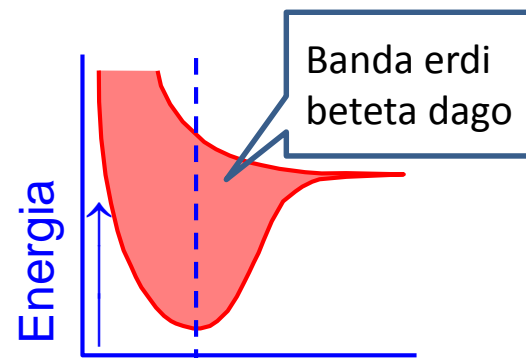
Atomoen arteko distantzia

2 Li atomo  
2 O.M.  
2 elektroio



Atomoen arteko distantzia

6 Li atomo  
6 O.M.  
6 elektroio



Atomoen arteko distantzia

$n$  Li atomo  
 $n$  O.M.  
 $n$  elektroio → banda

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### METAL ALKALINOAK

Beraz, Li metalikoan 2s banda **eroopen-banda** da, **erdi beteta dago** eta

Na<sub>n</sub> solidoaren kasuan, eroopen-banda 3s da, Na-aren konfigurazio elektronikoa [Ne]3s<sup>1</sup> baita

Laburbilduz, alkalinoetan balentzia-banda **eroopen-banda** da, ns<sup>1</sup> konfigurazioa daukate eta



balentzia-banda (BB), ere, eroopen-banda(EB) da



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

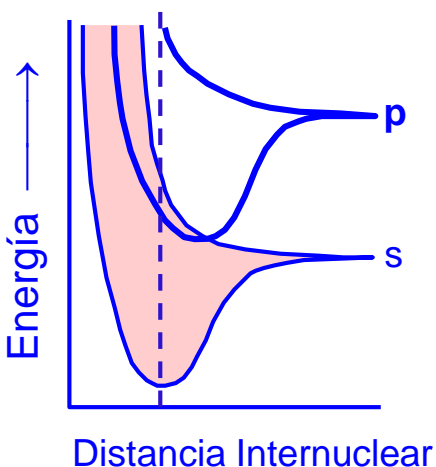
### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### METAL LURRALKALINOAK

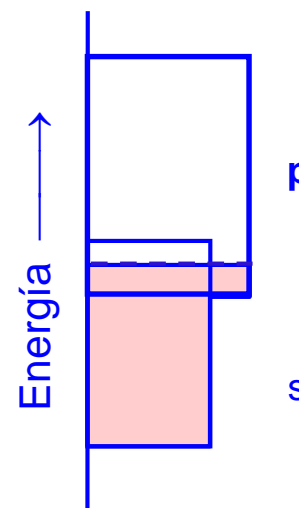
**S** - banda erabat beteta ( $n$  orbitaletan,  $2n$  elektroi)  $\Rightarrow$  ezin da banda eroalea izan ( $e^-$  ezin dute mugitu banda honen zehar)  $\Rightarrow$  Isolatzailea ????

**P** - bandarekin gainezartzen da

Honela lortzen da eroankortasuna, p banda, banda-eroalea izanik



Balentzi-banda eroale-  
bandarekin gainezarritua



Betetze-diagrama

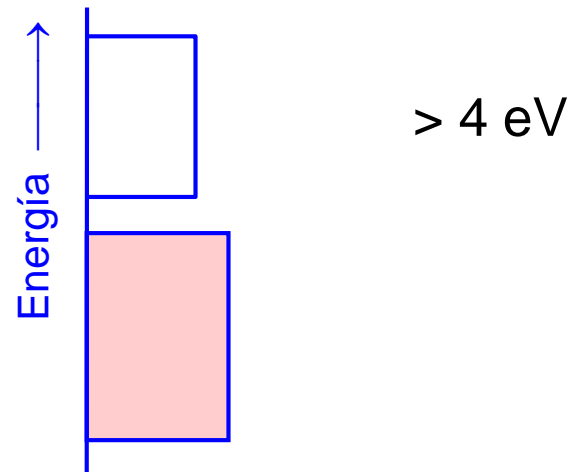
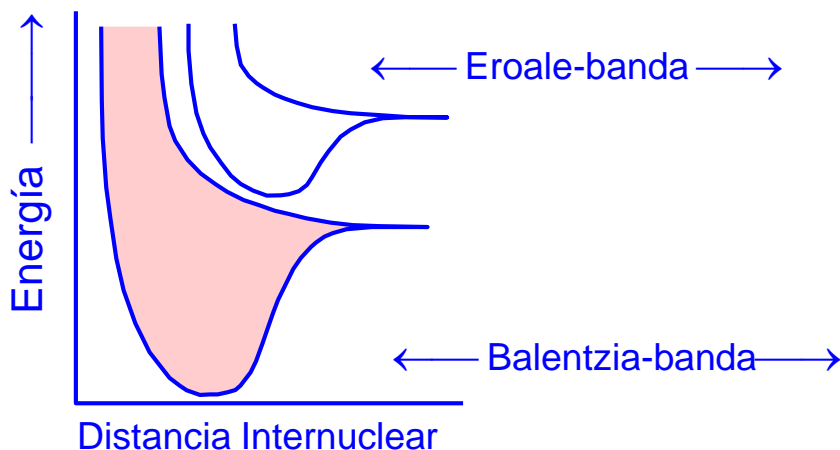
**EROALEA**

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### ISOLATZAILEAK

- **Isolatzaille elektrikoak** beteta dagoen balentzia-banda eta hutsik dagoen eroale banden artean energia-langa dute
- Hori dela eta **elektroiak** ezin dira ailegatu eroale-bandara eta **mugikortasunik ez dute** → ez dira eroaleak



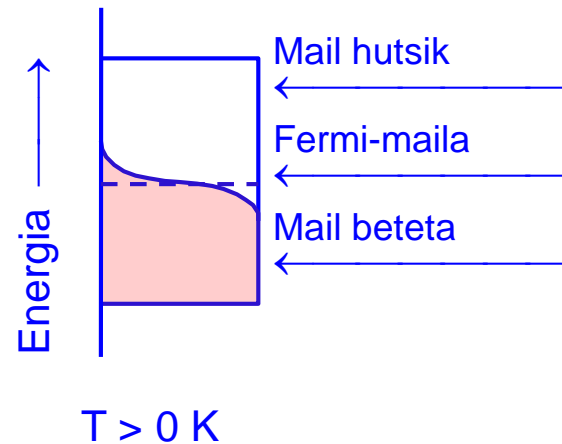
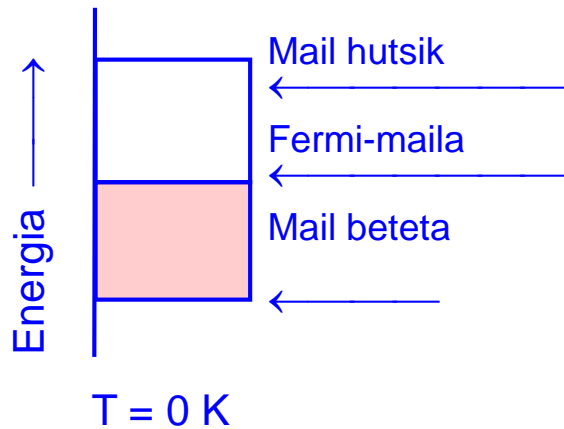
Isolatzaillearen balentzia- banda

Isolatzaillearen betetze diagrama

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### ERDIEROALEAK



. Fermiren-maila:  $T = 0\text{ K}$ -etan orbitalek betetzen duten mailarik altuena

. **Fermi-Dirac**en banaketa

$T > 0\text{ K}$ : zenbait elektroi goiko mailetara pasatzen dira (0,6 eV eta 3 eV-koa baino txikiagoa bada)

## **06.GAIA: LOTURA KIMIKOA**

### **06.3: LOTURA METALIKOA**

**6.3. 1. Solido metalikoen ezaugarriak**

**6.3. 2. Sare metalikoak**

**6.3. 3. Lotura metalikoaren ereduak. Banden teoria**

**6.3. 4. Erdieroaleak eta supereroaleak**

**6.3. 5. Portaera magnetikoa**

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

- Erdieroalea: balentzia-banda beteta eta eroale- banda hutsik arteko energia-langa oso txikia ( $< 4$  eV) duen kristala da
- Ertaineko eroankortasuna dute, metalena eta ez-metalenaren artean
- Eroankortasuna eroale-bandako elektroien zenbakiarekiko proportzionala da eta tenperaturarekiko esponentzialki handitzen da

*EROANKORTASUN ELEKTRIKOA TENPERATURAREKIKO  
HANDITZEN DA*

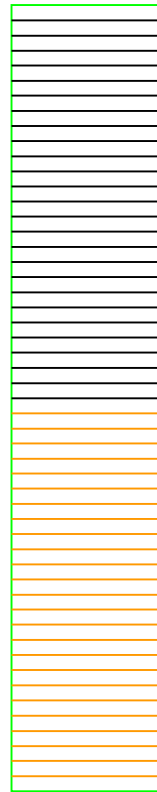
## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

Tenperaturaren eragina

0 K-etan

Fermi-ren maila →



bete gabe dauden  
mailak

beteta dauden  
mailak

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

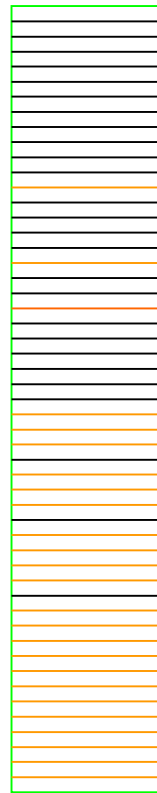
### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Tenperaturaren eragina

$T > 0 \text{ K}$

agitazio termikoaren  
eraginaren ondorioz...

Fermi-ren maila →



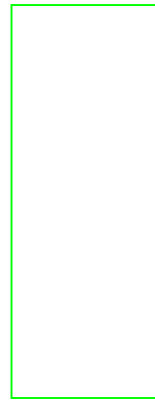
maila batzuk beteta  
daude

maila batzuk bete  
gabe geratu dira

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

EROAPEN-BANDA(E.B.)



BALENTZIA-BANDA (B.B.)

$T > 0$  K denean, agitazio termikoaren eragina energia-langarena baino handiagoa baldin bada, elektroi batzuk B.B.-tik E.B.-ra pasa daitezke

ENERGIA-LANGA,  $E_g$



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### 14.taldeko elementuak

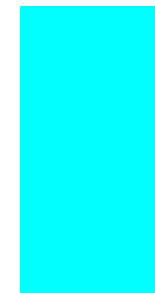
#### 14. taldeko solidoen energia-langa (kJ·mol<sup>-1</sup>)

solidoa	C	Si	Ge	Sn
langa	508	105	58	8

↓  
isolatzaile elektrikoa

↓  
erdieroalea

↓  
eroale elektrikoa



↑  
ENERGIA-LANGA/  
BANDA DEBEKATUTA

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### 14.taldeko elementuak

solidoa	C	Si	Ge	Sn
E-langa (kJ·mol <sup>-1</sup> )	508	105	58	8
FP (°C)	3550	1410	937	232

—————> metalikoagoa

—————< kobalenteagoa



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

## Energia-langaren zenbait baloreak

Bandas prohibidas			
Aislantes (kJ/mol)		Semiconductores (kJ/mol)	
C (Diamante)	520	Si	107
ZnO	308	Ge	65
AgCl	308	Te	32
CdS	233	InSb	22
		Sn (estaño gris)	8

Banda debekatuak ikusita.....

Zein metalak errezago eroankortasuna sortaraziko du?

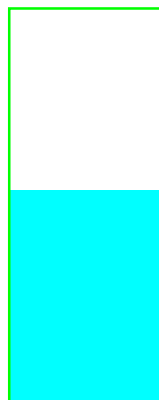
## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

BB: Balentzia- banda

EB: Eroale-banda

Laburpena: eroankortasun elektrikoa ahalbidetzen duten egoerak



BB EZ BETEA

$BB=EB$

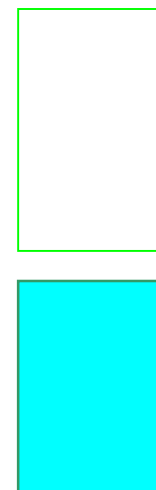
alkalinoak



BB BETEA, baina  
EBrekin gainezarrita

$BB \neq EB$

lurralkalinoak



BB BETEA, baina  
EBtik gertu

$BB \neq EB$

erdieroaleak

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Metalak eta lotura-energia

	Na	Ca	Ti
Konfigurazioa (E.V.)	2s <sup>1</sup>	3s <sup>1</sup>	2s <sup>2</sup>
Energia(KJ/mol)	108	177	477
Fusio-puntua(°C)	<b>63,5</b>	<b>85</b>	<b>1660</b>

  
spd hibridazioa



Izaera metalikoa

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Kobalentzia

- . Lotura metalikoan lotura kobalentearen kuantifikazioa:  
METABILITATE KOBALENTEA (M.K.)
- . Metalen  $P_f$  karbonoa (diamantea)-arekiko konparatzen dira

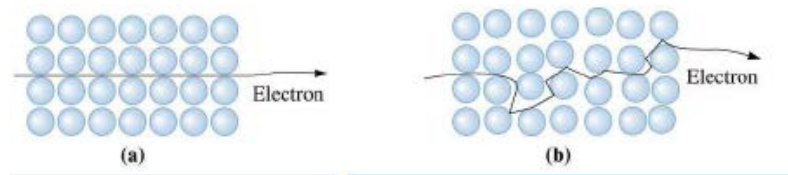
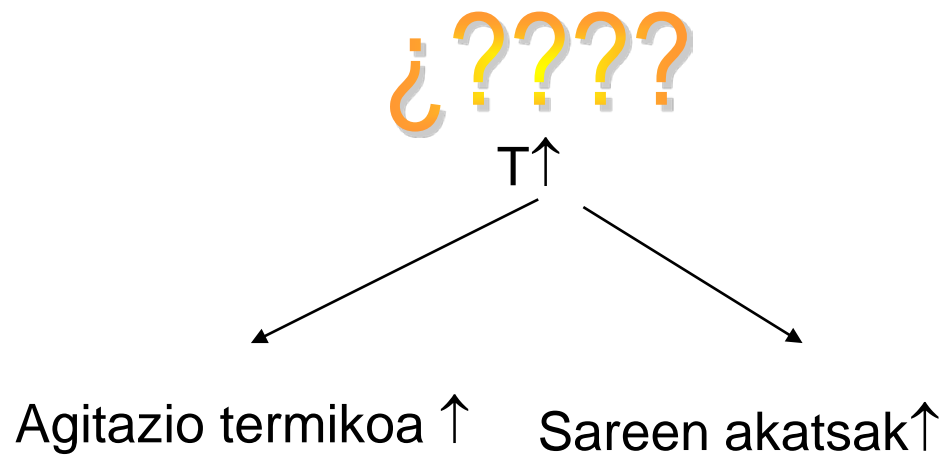
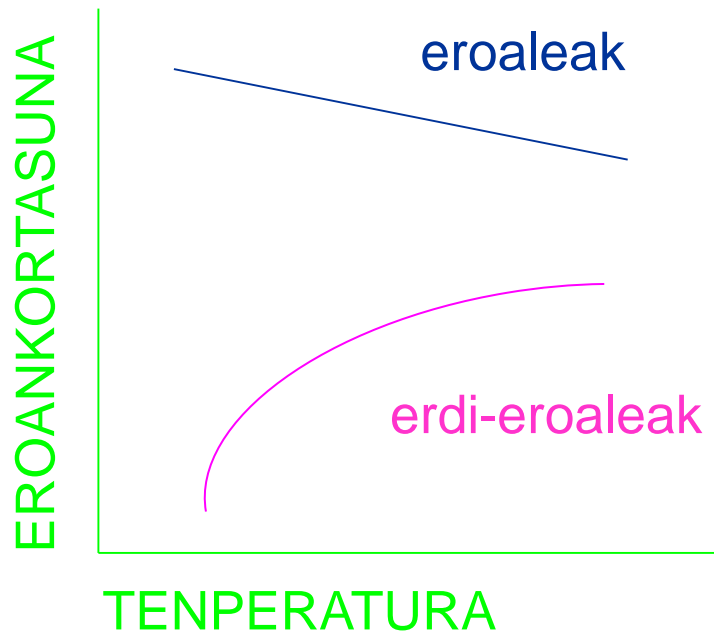


% 56,3 izaera metalikoa

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

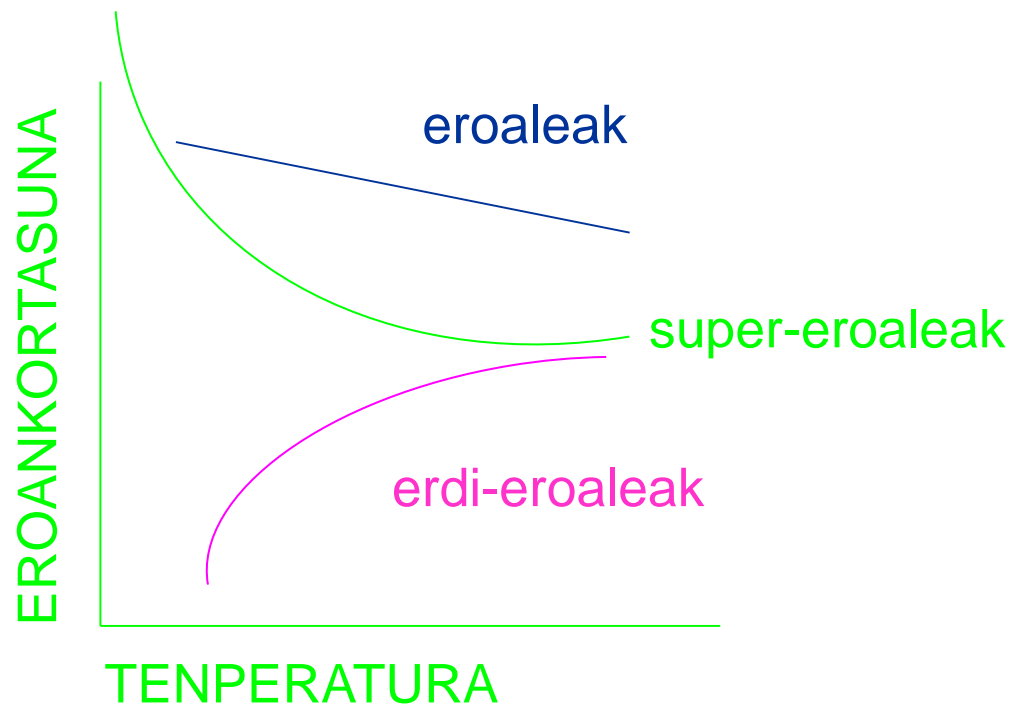
#### Tenperaturaren eragina



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Tenperaturaren eragina



#### Super-eroaleak

- eroankortasuna izugarri handitzen da tenperatura jaistean
- zero absolututik hurbileko tenperaturan, solidoak ez dio ea erresistentziarik jartzen korrontearen garraioari.



## **06.GAIA: LOTURA KIMIKOA**

### **06.3: LOTURA METALIKOA**

**6.3. 1. Solido metalikoen ezaugarriak**

**6.3. 2. Sare metalikoak**

**6.3. 3. Lotura metalikoaren ereduak. Banden teoria**

**6.3. 4. Erdieroaleak eta supereroaleak**

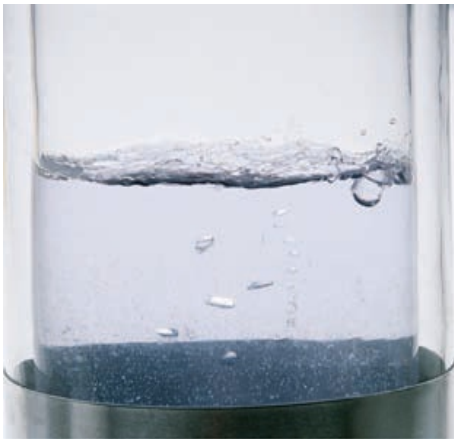
**6.3. 5. Portaera magnetikoa**

# 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

## 06.3: LOTURA METALIKOA



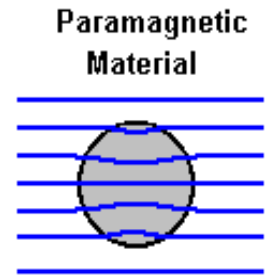
oxigenoa es likidotzen da  $N_2$  (l)-tan murgilduta  $T = -195.8\text{ }^\circ\text{C}$



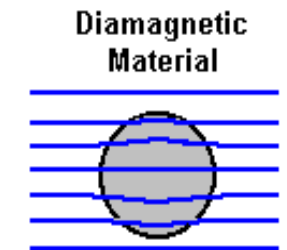
$O_2$  likidoa urdina da eta bere  $T_e = -183\text{ }^\circ\text{C}$



$O_2$ , paramagnetikoa, Nd iman bati "itsatsi" egiten dira



$N_2$ , aldiz, diamagnetikoa, ez du imanaren erakarpena jasan, aldarapena baizik



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

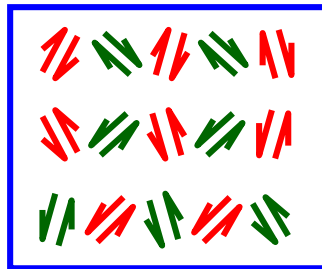
- Atomoetan elektroiak kontrako spinak dituzte eta mugitzean eremu magnetikoak eratzen dituzte
- Elektroiak eremu honekiko antolatzeko modu desberdinak daukate eta honen arabera bereizten dira:
  - Material Diamagnetikoak
  - Material Paramagnetikoak
  - Material Ferromagnetikoak
  - Material Antiferromagnetikoak

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### DIAMAGNETIKOAK

- Partikula guztiek elektroi parekatuta dute
- Haien egindako eremu magnetikoak ezabatzen dira
- Kanpoko eremu magnetikoetan aldaratuta dira, ez dago interakziorik

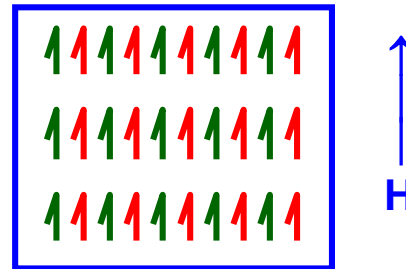
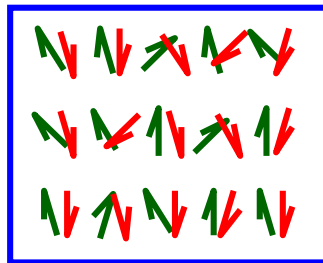


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### PARAMAGNETIKOAK

- Parekatu gabeko elektroiak daukate
- Kanpoko eremua ez badago spinak zoriz antolatzen dira
- Eremu magnetikopean spinak eremu honekiko paraleloki norabideratze dira
- Eremu honek erakartuta dira

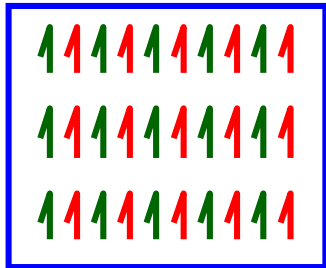


## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA


### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### FERROMAGNETIKOAK

- Parekatu gabeko elektroiak daukate
- Kanpoko eremua ez badago spinak zoriz antolatzen dira
- Eremu magnetikopean spinak eremu honekiko paraleloki norabideratze dira
- Tenperatura baxuetan nahiz eta kanpoko eremua ez izan spinak lerrotatuta daude eta momentu magnetiko iraunkorra aurkezte dute



$$T < T_c$$

ferromagnetikoa  paramagnetikoa  
↑  
Curie-temperatura baino altuagotan

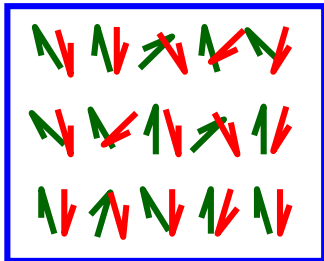
- Bakarrik elementu gutxi daukate propietate hau
- Fe, Co, Ni eta Lantanido batzuk

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### Curie-Tenperatura ( $T_c$ )

- Tenperatura honen gainera sustantzia ferromagnetikoak paramagnetikoak bezalaxe portatzen dira
- $T_c$  baino tenperatura handiagoetan kristaleko bibrazio termikoak spinak deslerrokatzeko beharrezkoa den energia ematen du
- Ereku magnetikoak zoriz norabideratzen dira
- Materialak ferromagnetiko izaera galtzen du



$$T > T_c$$

#### Curie-Tenperaturak

- Fe: 1043 K
- Co: 1404 K
- Ni: 631 K

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

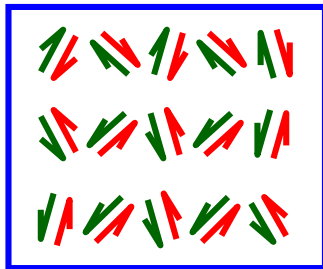
#### ANTIFERROMAGNETIKOAK

Elektroi parekatu gabekoak ditu

Tenperatu baxuetan

Spinak antiparaleloak daude

Portaera diamagnetiko dute



$$T < T_n$$

#### Néel-tenperatura, $T_N$

Tenperatura honen gainera antiferromagnetikoak paramagnetikoak bezalaxe portatzen dira.

Energia termikoari esker eremu magnetikoak zoriz orientatzen dira *eta metala diamagnetikoa izaten uzten da*

diamagnetikoa  paramagnetikoa

↑  
Neel-tenperatura baino altuagotan



## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### LABURPENA

- Solido metalikoek desberdintasun itzela adierazten dute beraien propietateak
- Eskuarki, lotura metalikoa gainontzeko loturak baino ahulagozat hartzen da
- Banden teoriak metalen propietaterik nagusienak ondo azatzen du
- Metalek hainbat portaera magnetikoak aurkezten dutenez aplikazio teknologikoetan oso erabilgarriak dira

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.3: LOTURA METALIKOA

#### BIBLIOGRAFIA

1. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*; 11<sup>a</sup> Ed. McGraw-Hill, Mexico, D. F. (2013)
2. Petrucci, R. H.; Herring, F. G., Madura, J.D.: *Química General*. Ed. Pearson Education, 10<sup>a</sup> Edición, Madrid (2011)
3. Shivers & Athkins: *Química Inorgánica*. Ed. Mac Graw Hill, México (2008)
4. Smith, W. y Hashemi, J.: *Fundamentos de la Ciencia e Ingeniería de los materiales*, 4<sup>a</sup> Edición, Ed. Mac Graw Hill, Madrid ( 2006)

## *06.GAIA: LOTURA KIMIKOA*

### *06.1: LOTURA IONIKOA*

### *06.2: LOTURA KOBALENTEA*

### *06.3: LOTURA METALIKOA*

### *06.4: KOHESIO-INDARRAK*

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.4: KOHESIO-INDARRAK

#### 6.4.1.Sarrera

#### 6.4.2.Van der Waals indarrak

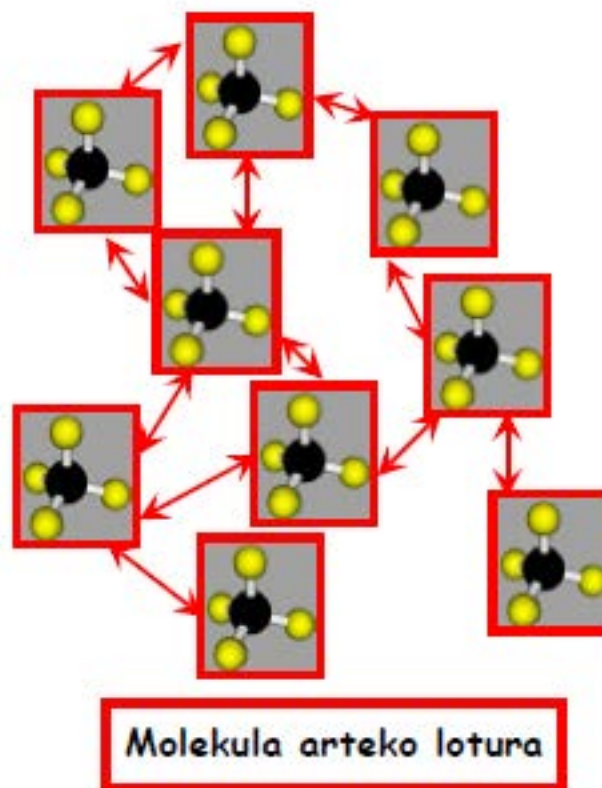
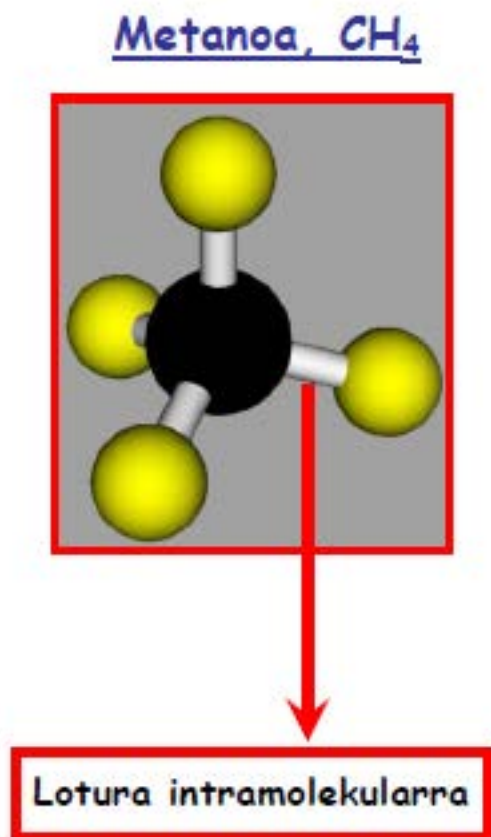
#### 6.4.3. Hidrogeno- Lotura

#### 6.4.4. Solido Molekularrak

#### 6.4.5. Ariketak

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.1. Sarrera



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.1. Sarrera

Existitzen dira gertaera esperimentalak honako ondorio honetara zuzentzen dutenak

### ATOMOEN ARTEKO EZEZIK, MOLEKULEN ARTEKO INTERAKZIOAK, ERE, EXISTITZEN DIRA

1. Gasen portaera ez ideala (ezta gas batek ere ez du portaera ideala )
2. Joule–Thomson efektua  
Bapateko hedapena jasanez gero gasak hozten dira, molekulen arteko indarren kontra lana dela eta
3. Gas geldoek ezin dute lotura egonkorak eratu, baina bai jasaten dutela kondentsazioa , bai egoera solidoan(0K-etan) bai egoera likidoan(4K-etan)

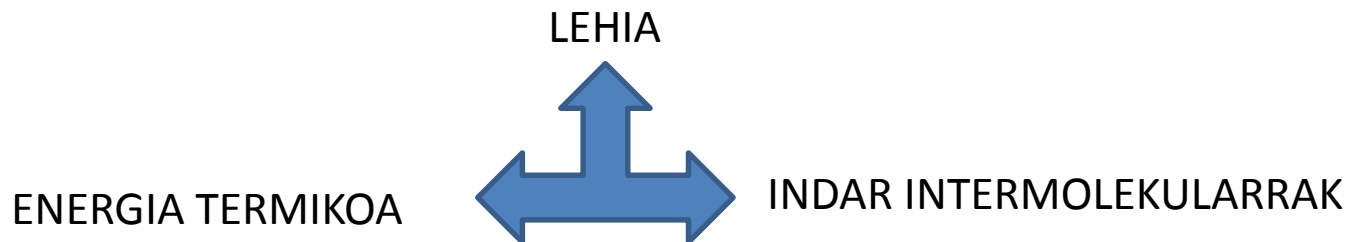
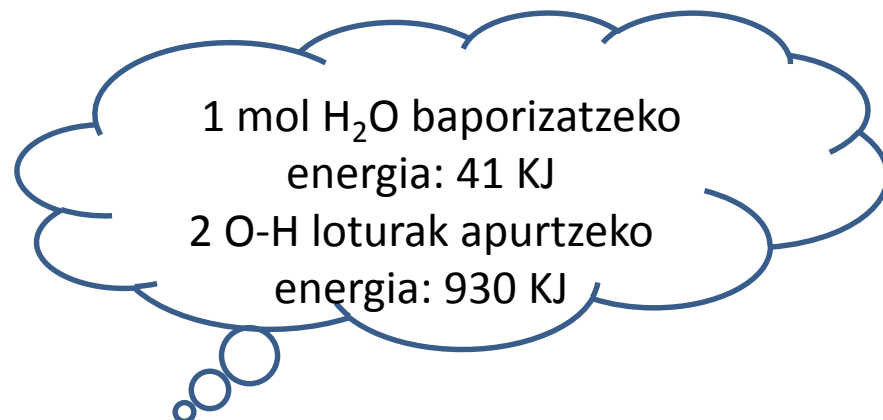
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.1. Sarrera

Indar hauek....

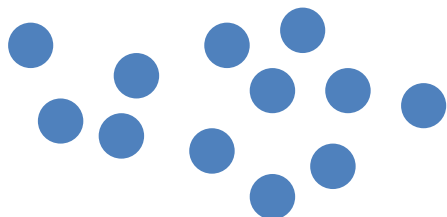
1. Ahulak dira, lotura intramolekularrak baino ahulagoak
2. Bere sendotasuna partikulen arteko distantziarekin bortizki murrizten da
3. Ez-zuzenduak dira
4. Portaera kimikoan ez daukate inolako eraginik
5. Indar hauek eta egoera fisikoak erabat erlazionatuta daude

Horregatik egoera fisiko desberdinen ezaugarriak birpasatuko ditugu



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

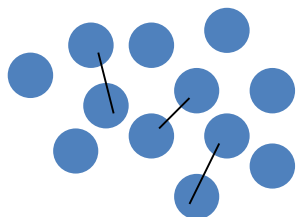
### 06.4.1. Materiaren egoera fisikoak



gas egoera: molekula isolatuak

$V \neq kT$   
 $itxura \neq kT$

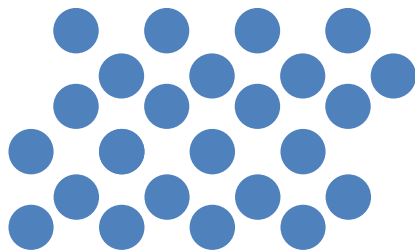
irakite-puntua



likido egoera: molekulen arteko kohesioak hasten dira sortzen; kohesioa behin-behinekoak dira

$V = kT$   
 $itxura \neq kT$

Fusio-puntua (izozte-puntua)



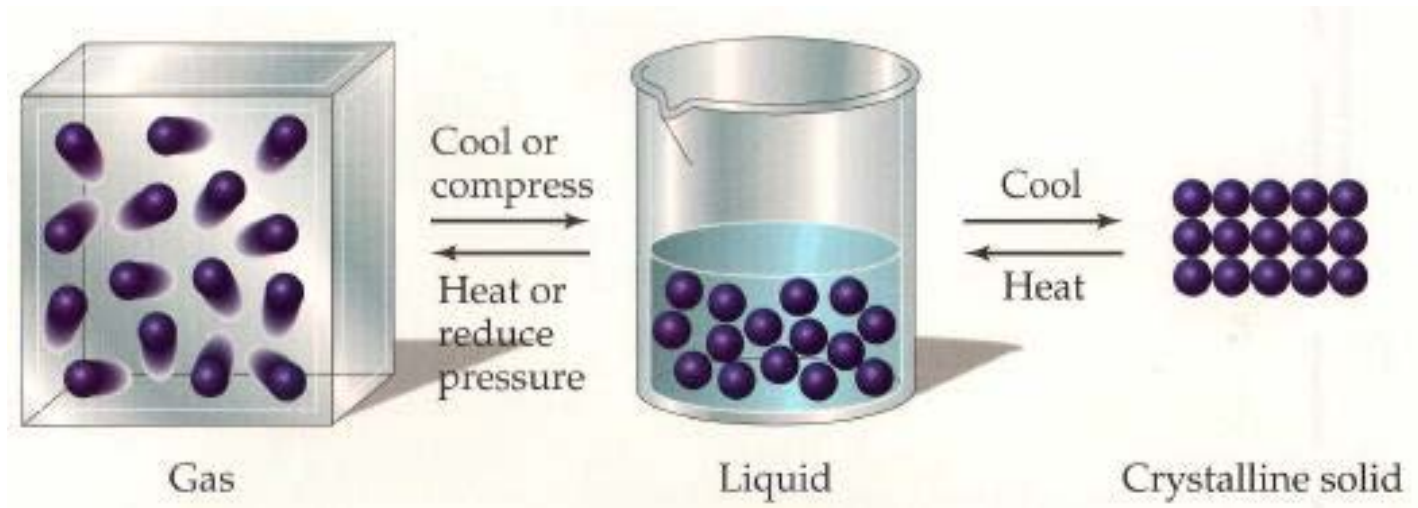
solido egoera: molekulen arteko behin betiko kohesioa dago

$V = kT$   
 $itxura = kT$



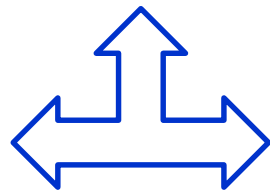
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.1. Materiaren egoera fisikoak



Lehia

Energia termikoa



Indar intermolekularrak

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.1. Sarrera

#### ATOMOEN ARTEKO EZEZIK, MOLEKULEN ARTEKO INTERAKZIOAK, ERE, EXISTITZEN DIRA

- . Indar hauek molekulen polarizabilitatea eta tamainaren menpekotasuna dute
- . Molekulen polartasunarekin zerikusia dute
- . Bi mota nagusiak bereizten dira
  - A. Van der Waals indarrak
  - B. Hidrogeno - lotura

## **06.GAIA: LOTURA KIMIKOA**

### **06.4: KOHESIO-INDARRAK**

6.4.1.Sarrera

#### **6.4.2.Van der Waals indarrak**

6.4.3. Hidrogeno- Lotura

6.4.4. Solido Molekularrak

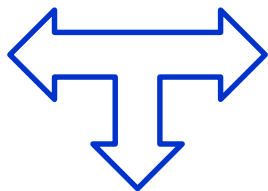
6.4.5. Ariketak

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.4: KOHESIO-INDARRAK

- . Dipoloen arteko interakzioei sor diogu
- . Distantzia laburretan agerian daude eta hainbat motatakoak dira

Dipolo mota



Indar intermolekularra

- . Behin betiko dipoloak
- . Dipolo induzituak
- . Bat-bateko dipoloak

$\Delta \text{E.N.} \geq 0,5$  bada

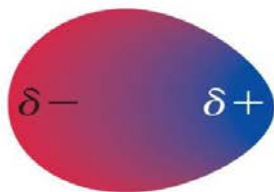
## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.4: KOHESIO-INDARRAK



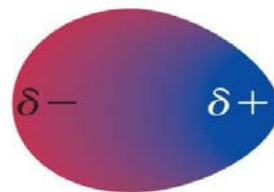
(a)

Molekula  
apolarra



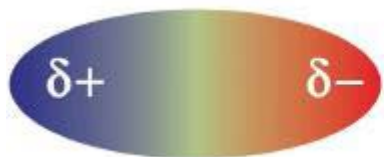
(b)

Molekula  
polarra



(c)

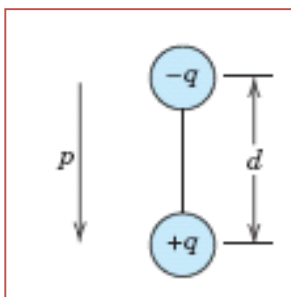
dipolo-dipolo  
interakzioa



Bat-bateko dipoloa

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak



$$\mu = q \times d$$

$\mu$  = momento dipolarra

$$\mu = \alpha \cdot E$$

$\alpha$  = polarizabilitatea

Molekula neutroaren  $\delta$  deformatzeko gaitasuna

Momento dipolarrak polarizabilitatearen arabera aldatzen dira

N.S.[ $\mu$ ] = C m, baina “Debye “ gehiago erabitzen da ( $1 \text{ D} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ C m}$ )

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Van der Waals -indarrak

- . Polarizabilitatearekin erlazionatzen dira
- . Hala polaritasuna nola tamaina/masa molekularren menpekoak dira

Konposatua	Polarizabilitatea, $10^{-24} \text{ cm}^3$	Masa molarra, u	Irakite-puntua, K
<b>H<sub>2</sub></b>	<b>7,90</b>	<b>2,0158</b>	<b>20,35</b>
O <sub>2</sub>	16,0	31,9988	90,19
N <sub>2</sub>	17,6	28,0134	77,35
CH <sub>4</sub>	26,0	16,04	109,15
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	44,7	30,07	184,55
Cl <sub>2</sub>	46,1	70,906	238,25
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	62,9	44,11	231,05
<b>CCl<sub>4</sub></b>	<b>105</b>	<b>153,81</b>	<b>349,95</b>

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

Lau motakoa izan daitezke

1. Dipolo-dipolo indarrak: **Keesom-indarrak**
2. Dipolo-dipolo induzituta :**Debye- indarrak**
3. Berehalako dipoloa-berehalako dipoloa: **London-indarrak**

Kohesio-indarrak



4. Aldarapen-indarrak: **Pauli- indarrak**



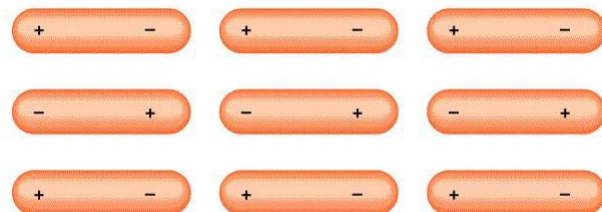
Dispersio -indarrak



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

1. Dipolo  $\leftrightarrow$  dipolo indarrak: **Keesom-indarrak**
  - Orientazio-indarrak
  - Dipolo iraunkorra behar da
  - Molekula polarretan agertzen dira:  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ , kloroformoa, azetona,...
  - Hauei esker hurrengo erakarpenak sortuta dugu :
    - Disoluzioan dauden ioien artekoak
    - Disolbatzailearen molekula polarren artekoak



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

2. Dipolo iraunkorra  $\leftrightarrow$  dipolo induzituta :**Debye- indarrak**

- Indukzio indarrak
- Molekula polarrak eta apolarrak nahasten direnean, polarrek apolarren karga-banaketan daukate eragina, induzituriko dipoloak sorrarazten baitituzte.
- Aurrekoak baino ahulagoak dira
- Adibidez: uretan disolbatuta dagoen  $O_2$

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

3. bat-bateko dipolo  $\leftrightarrow$  bat bateko dipolo edo bat-bateko dipolo  $\leftrightarrow$  dipolo induzitu

#### :London- indarrak

- Dispertsio-indarrak dira
- **Molekula guztietan** ager daitezke
- Karga-banaketa esferikoan **elektroi desplazamenduagatik** bat-bateko dipoloak sor daitezke
- Dipolo hauek ondoko molekulak polarizatze dute, dipolo induzituta sorrarazten
- Gas nobleen atomoen arteko loturak azaltzen dute, bai solido bai likido egoeran
- **Handitzen dira tamainarekin** eta elektroi-kopuruarekin batera, honela polarizabilitatea areagotzen delako

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

3. bat-bateko dipolo  $\leftrightarrow$  bat bateko dipolo edo bat-bateko dipolo  $\leftrightarrow$  dipolo induzitu: **London- indarrak**

#### IDEIA NAGUSIA

- Handitzen dira:
  - . Atomo edo molekulen tamainarekin
  - . Elektroikopuruarekin
  - . Hodei elektronikoa difusoa



polarizabilitatea handitzen baita

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

#### 4. Aldarapen-indarrak: **Pauli-ren Indarrak**

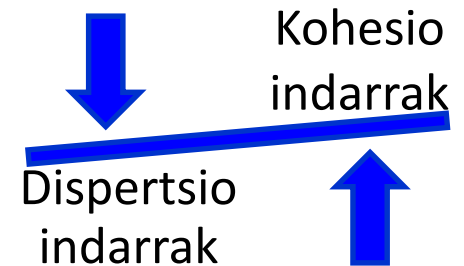
Nukleoen arteko aldarapenei esker sortzen dira, karga positiboek zor diogu.

Atomo eta molekula

Van der Waals-en indarrei esker lotzen dira

Pauli- indarrei esker aldarapeneratzen dira

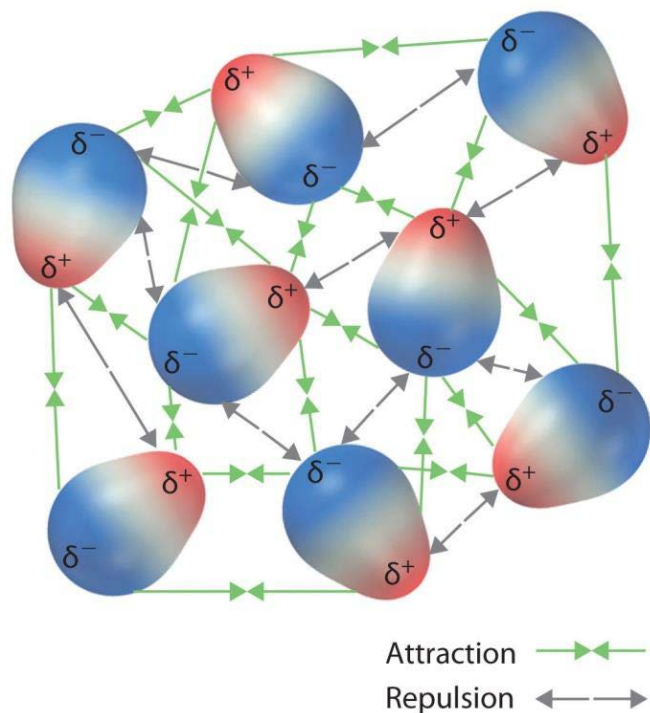
Bi indar hauen artean OREKA lortzen da



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

Molekula arteko indarrak: kohesio-indarrak eta dispersio-indarrak



Van der Waals-en erradioak defini daitezke:

- Lotura eratu gabe dauden bi atomoen arteko distantziaren erdia
- Ez dira erradio kobalenteak bezain konstanteak

Likido batean dauden dipolo-dipolo indarrak eta hauen ondorioz sortutako erakarpen eta aldarapen indarrak

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

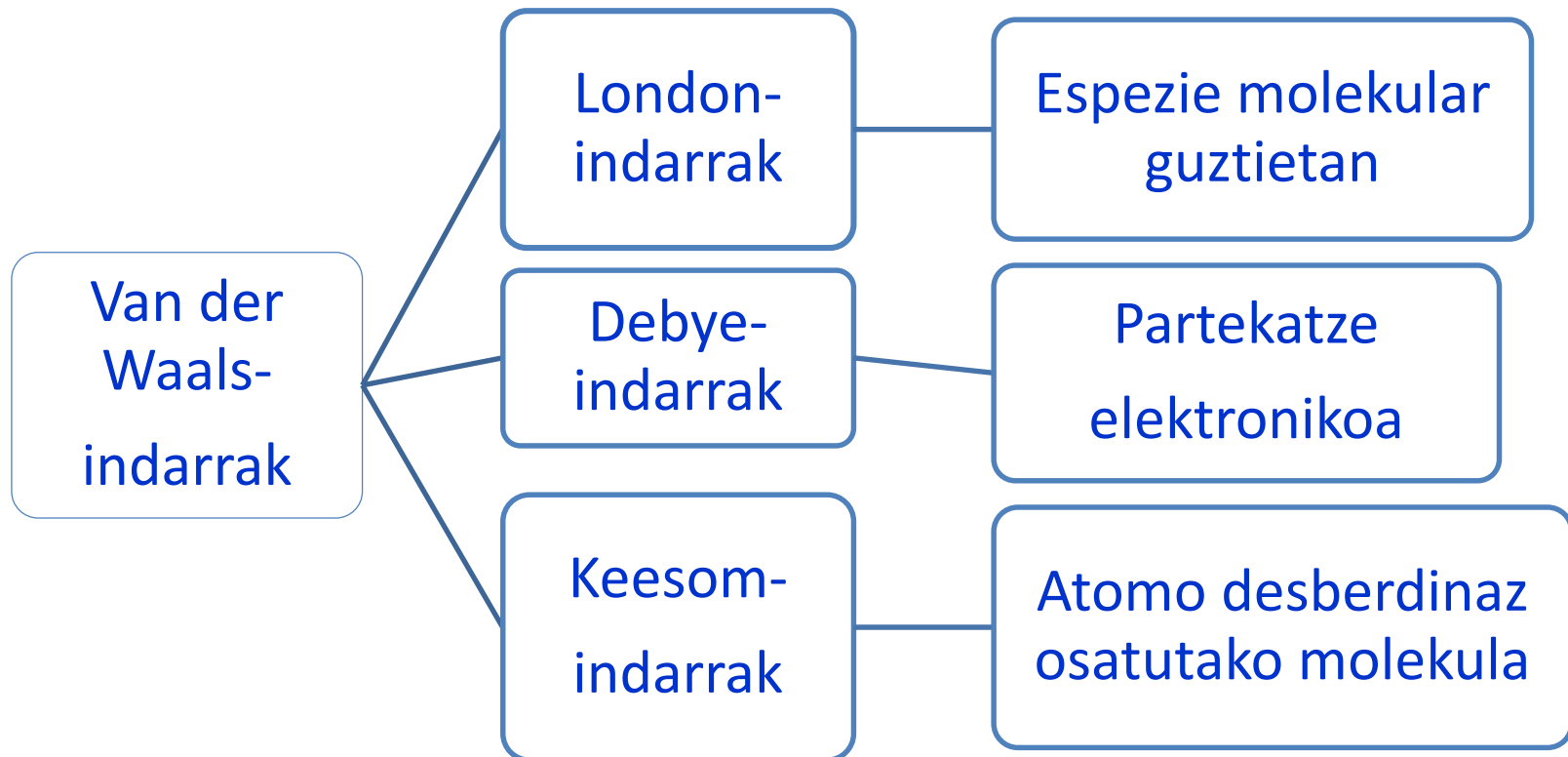
#### Kohesio-indarrak gehigarriak dira

Mota batekoa baita askotarikoa ere ager daitezke

- . Bat-bateko dipoloak : espezie kimiko guztietan agertzen dira
- . Induzitutako dipoloak: kargaren konpartizioa duten espezie guztietan agertzen dira
- . Dipolo iraunkorrak: AB motako molekuletan daude, atomo desberdinaz osatuta egon behar dira

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak





## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

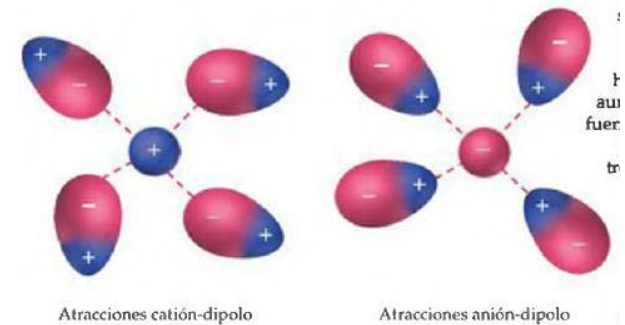
#### IDEIA NAGUSIAK

Zeren menpe daude?

1. Atomo/Molekula Tamaina
2. Karga iónica (Z)
3. Momento dipolarra ( $\mu$ )
4. Polarizabilitatea ( $\alpha$ )

Lotura ionikoa.....	$E \propto 1/r$
loi-dipolo.....	$E \propto 1/r^2$
Dipolo-dipolo.....	$E \propto 1/r^3$
loi-dipolo induzituta.....	$E \propto 1/r^4$
Dipolo-dipolo induzituta.....	$E \propto 1/r^6$
Dipolo-dipolo induzituta berehalakoa.....	$E \propto 1/r^6$

Indarren magnitudea distantziarekiko alderantzizko proportzionaltasuna



loi-dipolo erakarpena

## **06.GAIA: LOTURA KIMIKOA**

### **06.3:Hidrogeno - lotura**

6.4.1.Sarrera

6.4.2.Van der Waals indarrak

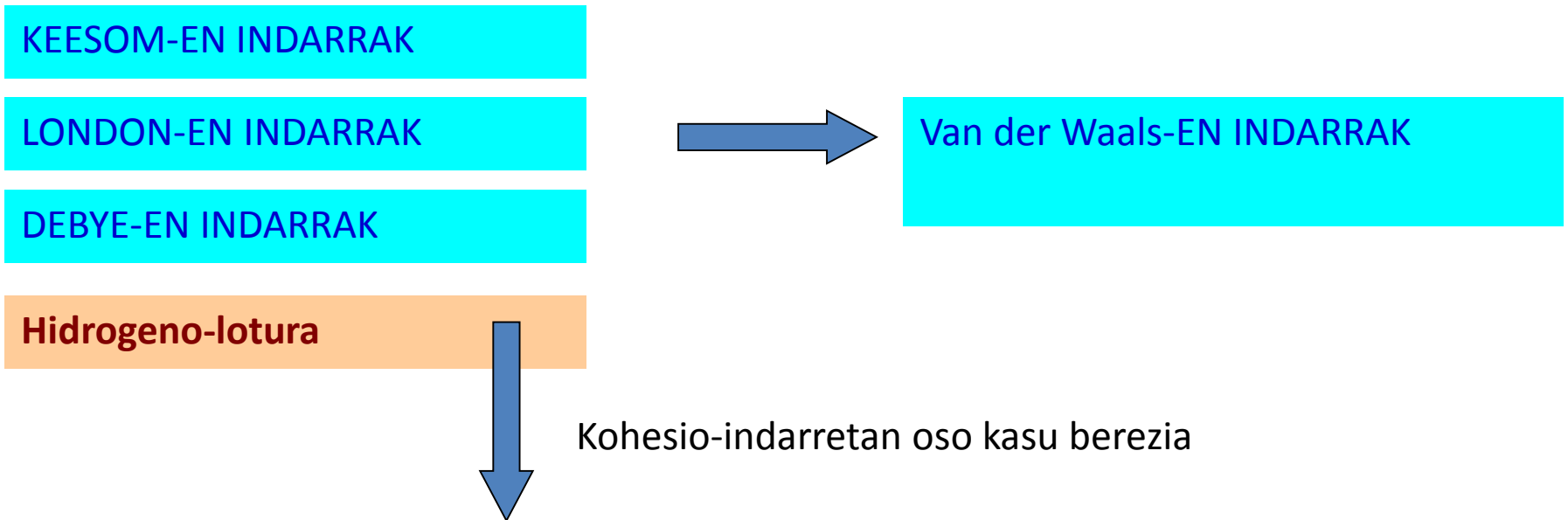
### **6.4.3. Hidrogeno- Lotura**

6.4.4. Solido Molekularrak

6.4.5. Ariketak

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.2. Van der Waals -indarrak

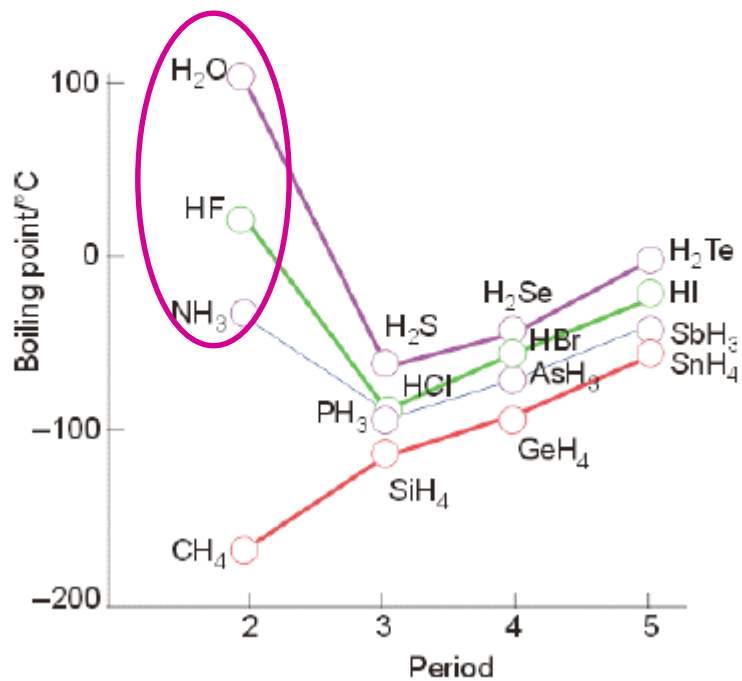


- . Hidrogeno-lotura lotura kobalentea baino askoz ahulagoa da
- . Gainontzeko Van der Waals-en indarrak baino sendoagoa da
- . Intermolekularra zein intramolekularra izan daiteke

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

#### PERIODOETAN IRAKITE-TENPERATURAN JASANDAKO ALDAKETA



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno- Lotura

Lotura intermolekularra sendoa baino sendoagoa

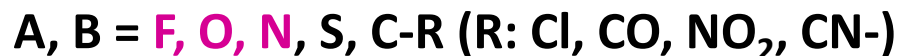
Honen arabera azalduta dugu:

1. Likidoen arteko elkartea: ura, amoniakoa..
2. Fluidoaren likatasuna
3. Hainbat likidoen konstante dielektrikoa
4. Likido batzuen irakite-puntu altuak

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno- Lotura

#### NOIZ ERATZEN DA?

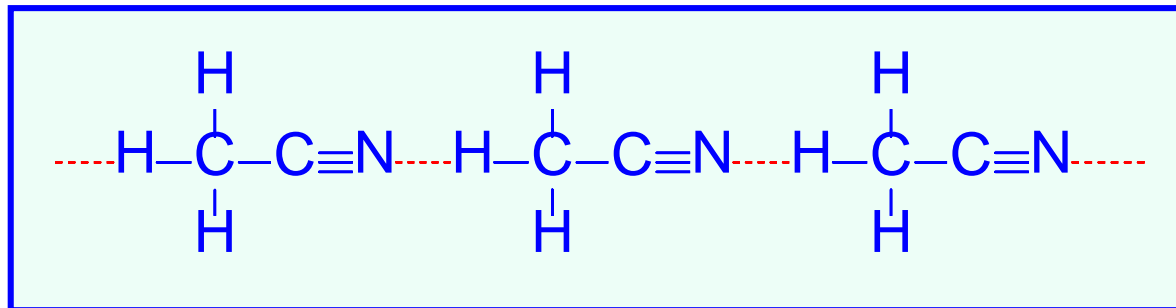


1. H atomoa, elektronegatibotasun altukoa eta oso txikia den beste atomo bati(A) lotuta egon behar da
2. H atomo honek, loturaren polarizazioa dela eta karga positiboa bereganatzen du
3. Bikote bakartiaren beste atomo bat beharrezkoa da(B), dentsitate elektronikoa H atomoari emateko moduan, lotura eratuz

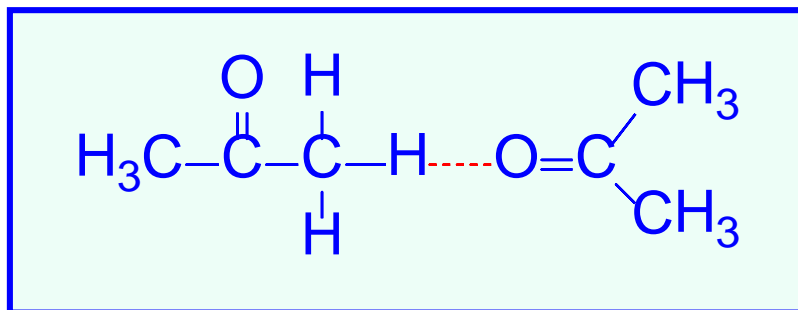
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno- Lotura

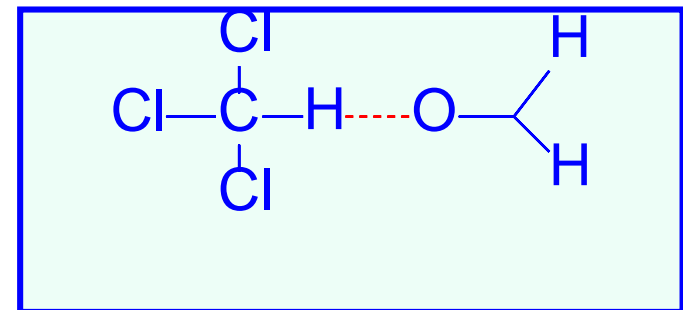
Adibideak: C – H ... Y



Azetonitrilo



Azetona



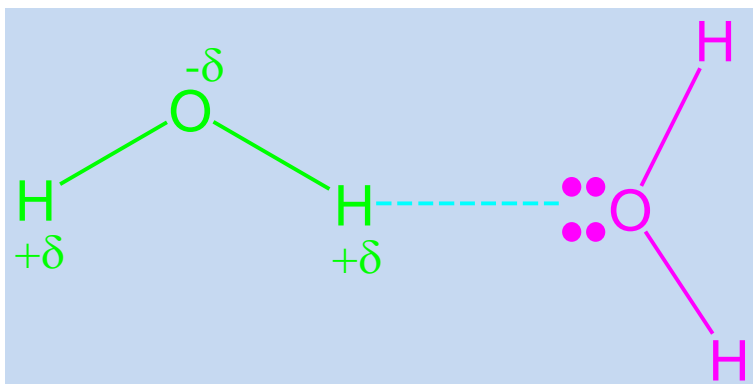
Kloroformo – ura

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

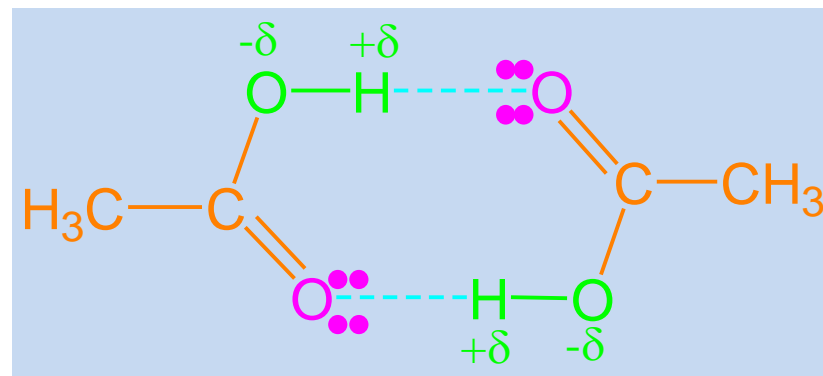
### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Molekula berean beharrezkoak diren baldintza biak (A eta B) izatea ohikoa da, A atomo elektronegatiboa askotan izaten baitu bikote bakarti bat

ura



azido azetikoa

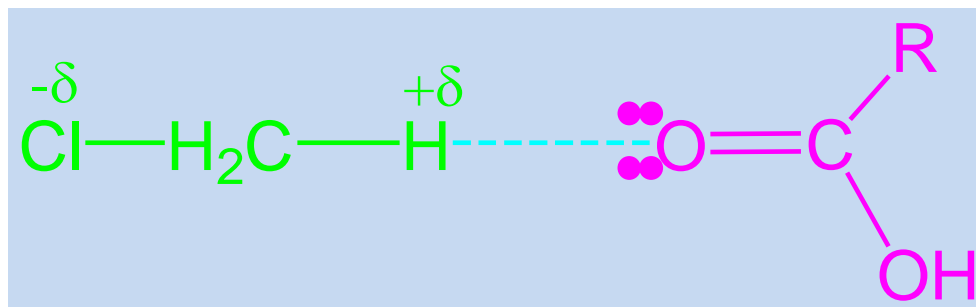




## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Hidrogeno-loturak lagungarriak dira likidoen nahasteak egiten direnean sustantzia bietako molekulen arteko kohesioa sor dadin

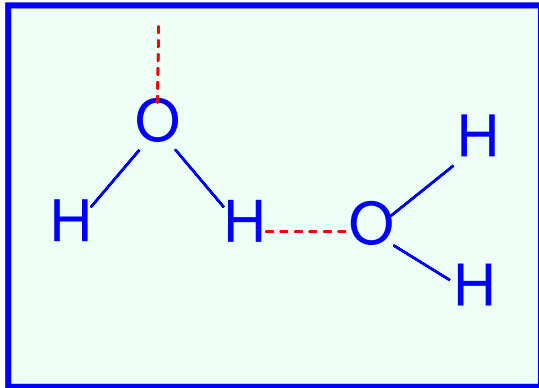


Azido organikoak kloroformotan disolbatzen dira hidrogeno-loturari esker

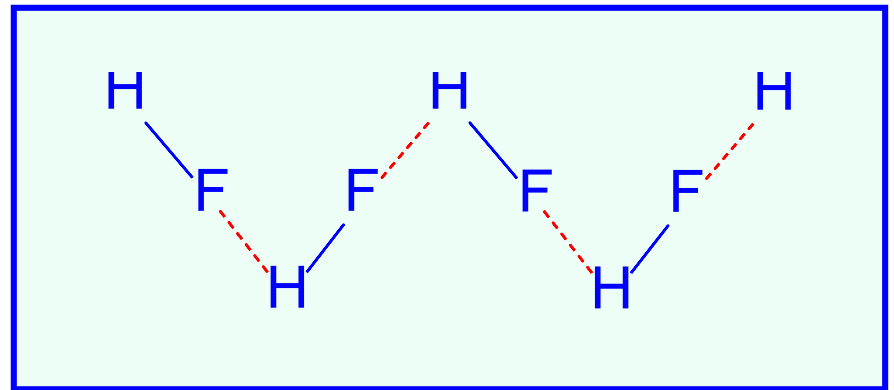
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno- Lotura

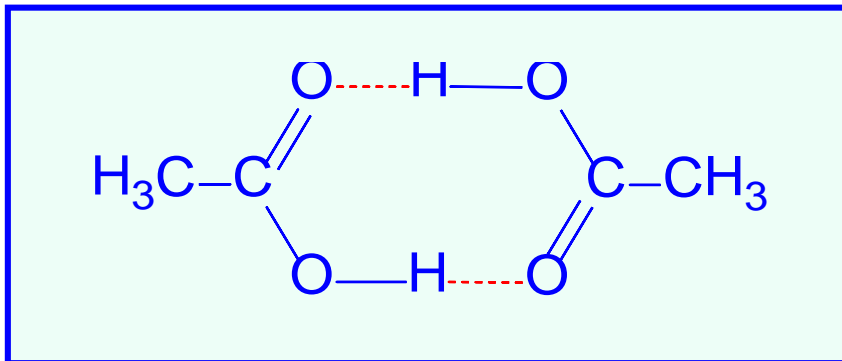
Hidrogeno-lotura intermolekularra: molekula desberdinetako atomoen artean



Ura



Hidrogeno fluoruroa

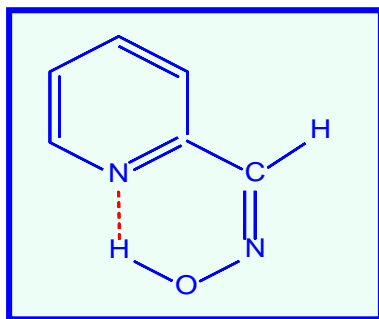


Azido azetiko

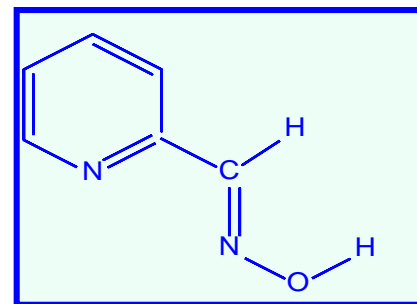
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

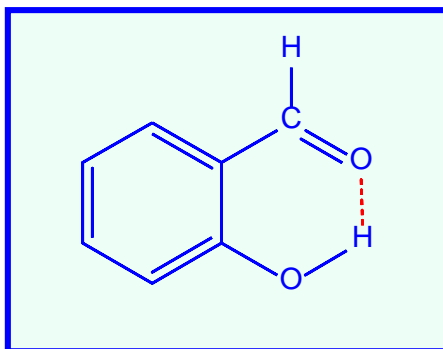
- . Intermolekularra ez ezik, hidrogeno-lotura **intramolekularra** ere izan daiteke.
- . Hori gerta dadin 5 edo 6 muturreko eraztun lauak eratzeko aukera egon behar da



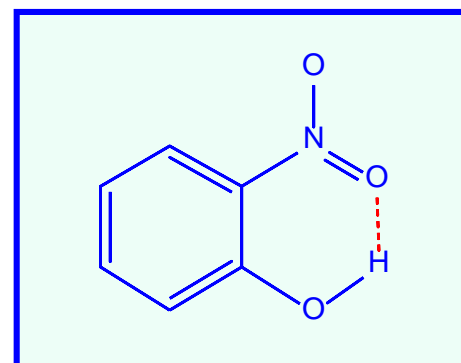
*anti*-piridina-2-carboxaldoxima



*sin*-piridina-2-carboxaldoxima



Aldehido salizilikoa

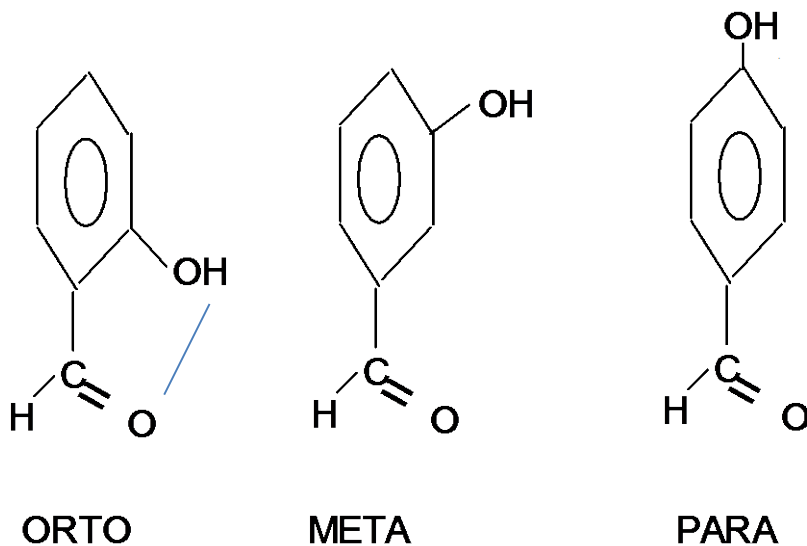


*o*-nitrofenol

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

- Fenolak orto-posizioan ordezkaturata cis-egitura, trans egitura baino egonkorragoa da , lotura intramolekularra baitu (% 91 cis eta % 9 trans)
- A eta B atomoak ez dira H atomoarekiko lerrotaturata izan behar: **hidrogeno-lotura angeluarrak suertatzen dira (angelua  $<30^\circ$ )**



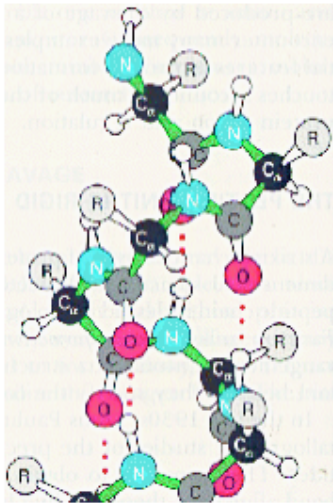
“INTRA” loturak beti molekulari egonkortasuna ematen dio

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

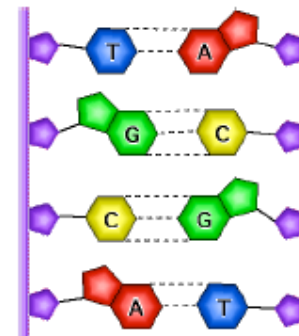
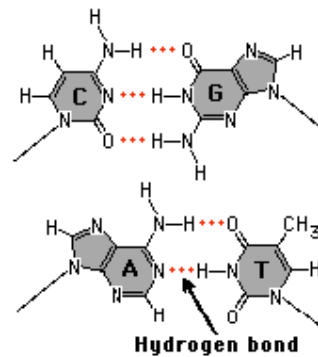
### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

GARRANTZI BIOLOGIKOA:  
ADN molekulan sortutakoak

Conformación tridimensional proteínas



Doble hélice del ADN:



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

#### LOTURA HONEN ONDORIOAK

1. Fusio-tenperaturaren eta Irakite-tenperaturaren handipena.  
**Molekulen elkartearen** ondorioa da. Fusio-entalpia eta baporizazio-entalpia, ere, areagotzen dituzte
2. Egitura kristalinaren aldaketak
3. Uraren ezohiko dentsitatea.  
Izotzak egitura zabala du eta ondorioz izotzaren hedapena suertatzen da, hutsuneak sortuz eta dentsitatea gutxituz
4. Fluidoaren likatasuna aldaketak
5. Uretan konposatu organikoen disolbaketak
7. Hainbat likidoen konstante dielektrikoa

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Hidrogeno-loturak eragin nabaria dauka irakite-puntuetan eta fusio-puntuetan.

	NH <sub>3</sub>	PH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> S	HF	HCl
FP(K)	195.5	139	273	187.5	190	159
IP (K)	240	185	373	212.9	293.1	188

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Hidrogeno-loturak eragin nabaria dauka irakite-puntuetan eta fusio-puntuetan.

	NH <sub>3</sub>	PH <sub>3</sub>
FP(K)	195.5	139
IP (K)	240	185

$\chi(A)\uparrow$   $\delta\uparrow$

Hidrogeno-loturaren sendotasuna $\uparrow$

FP $\uparrow$  eta IP $\uparrow$



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Hidrogeno-loturak eragin nabaria daukate irakite-puntuetan eta fusio-puntuetan.

	NH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	HF
FP(K)	195.5	273	190
IP (K)	240	373	293.1

Teorikoki...

$\chi(A) \uparrow$   $\delta \uparrow$  H-loturaren sendotasuna  $\uparrow$

Baina ....

Fluorren  $\chi$  handiagoa izan arren, irakite- eta fusio- tenperaturak txikiagoak dira urarekin konparatuta

Arrazoia:

H-loturen kopurua  $\downarrow$  eta kohesio orokorra  $\downarrow$

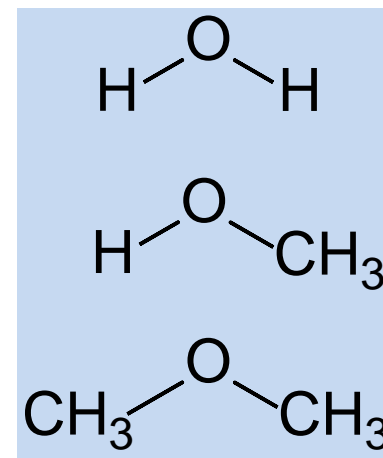
Molekulak aukeratzen du konpromisorik hobe bi faktoreak ikusita

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Hidrogeno-loturak eragin nabaria dauka irakite-puntuetan eta fusio-puntuetan.

	H <sub>2</sub> O	CH <sub>3</sub> OH	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O
IP (K)	373	336	268
H azidoen kopurua	2	1	0



Esperagarria? Masa handiagoa izatean IP handiagoa

Gertatzen dena: H atomoak -CH<sub>3</sub> taldeaz ordezkatzean H-loturaren eraketa ekiditen du eta IP txikiagoa da

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

#### PORTAERA AZEOTROPIKOA

Likido batzuk (L) nahasten direnean  $\Rightarrow$  fenomeno berezia

$L_1 + L_2 = L_3$  egitean...

OHIKOA:  $L_3$ -ren propietate fisikoak  $L_1$  eta  $L_2$  likidoen propietateen batez bestea izatea da

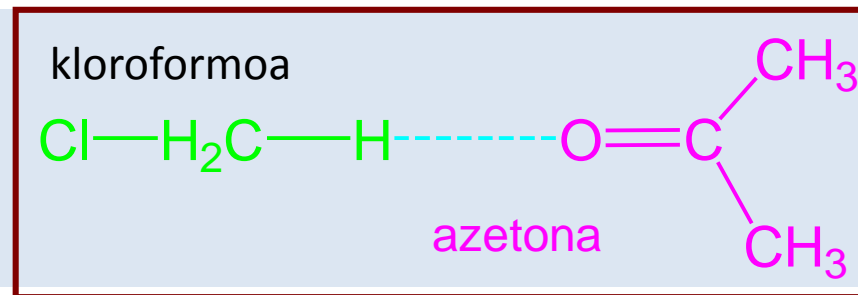
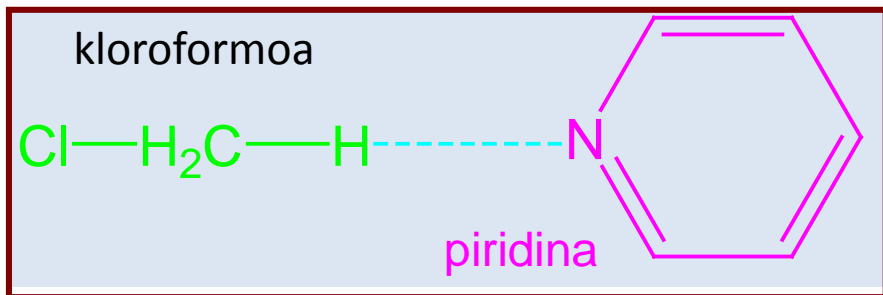
EZ OHIKOA:  $L_3$ -ren propietate fisikoak  $\neq$   $L_1$  eta  $L_2$  likidoen propietateen batez bestea baino handiagoa, IP-rekin gertatzen den bezala

EZ OHIKOA gertatzen denean  **$L_3 = \text{AZEOTROPO BAT}$**

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

PORTAERA AZEOTROPIKOA



$$IP(L_3) > \frac{IP(L_1) + IP(L_2)}{2}$$

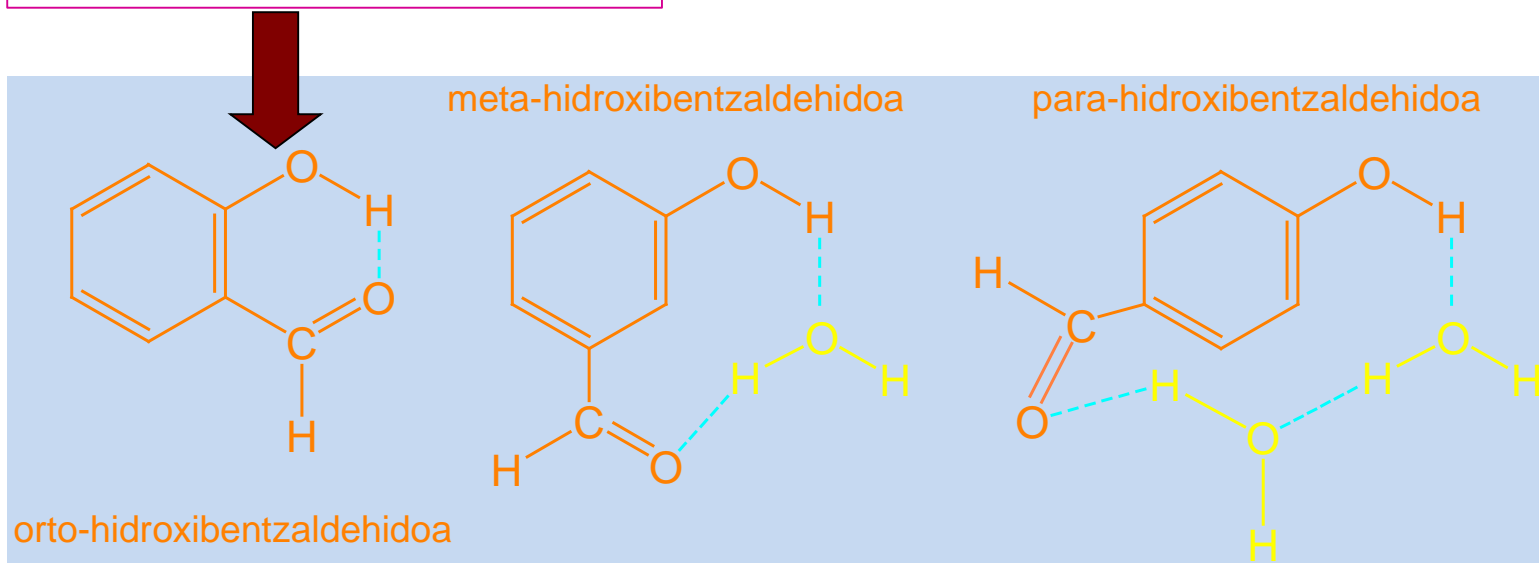
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Disolbagarritasuna

Solutuaren eta disolbatzailearen arteko hidrogeno-loturak lagungarriak izan daitezke solutuaren disolbagarritasuna areagotzeko

Disolbagarritasun txikiagoa?



Osatzen dira H-lotura intramolekularrak  $\rightarrow$   $\text{H}_2\text{O}$ -k ezin ditu H-loturak osatu  $\rightarrow$  disolbagarritasuna txikiagoa du

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

#### URETAN KONPOSATU ORGANIKOEN DISOLBAGARRITASUNA

Hidrogeno-loturak disolbatzaile eta solutuen arteko elkarrekintza areagotzen du

Eter dimetilikoa	$\text{CH}_3\text{OCH}_3$	Urarekin nahaskorra
Sulfuro dimetilikoa	$\text{CH}_3\text{SCH}_3$	Partzialki nahaskorra
Piridina	$\text{C}_5\text{H}_6\text{N}$	Urarekin nahaskorra
Bentzenoa	$\text{C}_6\text{H}_6$	Partzialki nahaskorra

“S” handitzen da H-loturaren kausa

N -ak H-loturak ahalbideratzen du

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

#### LIKIDOEN LIKATASUNAREKIKO ERAGINA

Hidrogeno-loturak geruza desberdinetan arteko eragiten du



GERUZEN ARTEKO MUGIMENDUA OZTOPOTZEN DU

Zenbat eta H gutxiago izan likatasuna orduan eta txikiagoa da

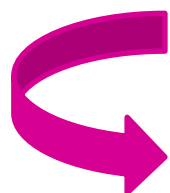
	$\text{H}_2\text{O}$	$\text{CH}_3\text{OH}$	$\text{CH}_3\text{OCH}_3$
Likatasuna(milipoises)	10,05	5,97	2,33

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

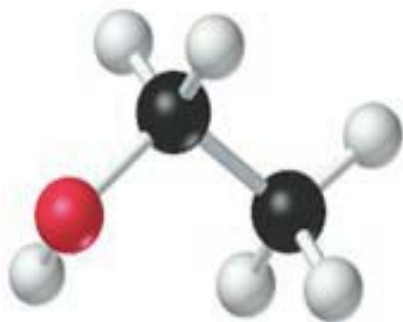
#### LIKIDOEN LIKATASUNAREKIKO ERAGINA : BESTE ADIBIDE BAT

Hidrogeno-loturak geruza desberdinen arteko elkarrekintza areagotzen du

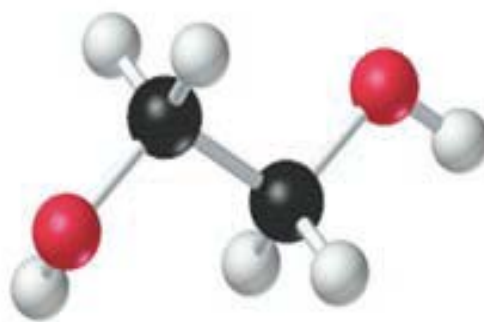


GERUZEN ARTEKO MUGIMENDUA OZTOPOTZEN DU ETA LIKATASUNA MURRIZTUTA DAGO

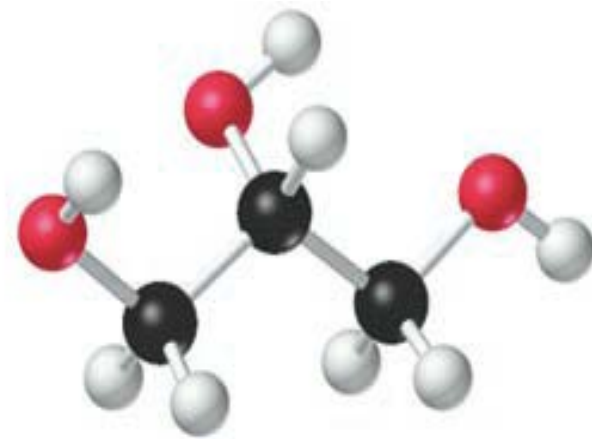
Zenbat eta **OH talde gutxiago** izan orduan eta likatasun **txikiagoa dago**



Alkohol Etilikoa  
(etanola)  
20°C:  $\eta = 1.20 \text{ cP}$



Etilenglikol  
(1,2-etanodiol)  
20°C:  $\eta = 19.9 \text{ cP}$

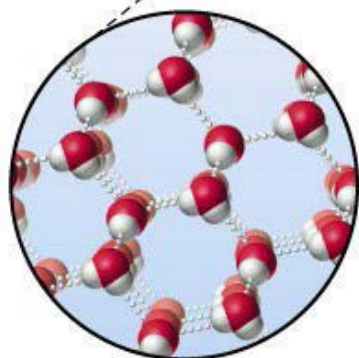


Glicerol  
(1,2,3-propanotriol)  
20°C:  $\eta = 1490 \text{ cP}$

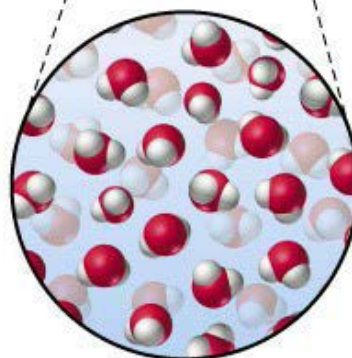


## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

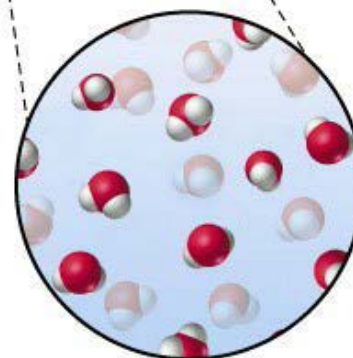
### 06.4.3. Hidrogeno-lotura



Egoera solidoa



egoera likidoa



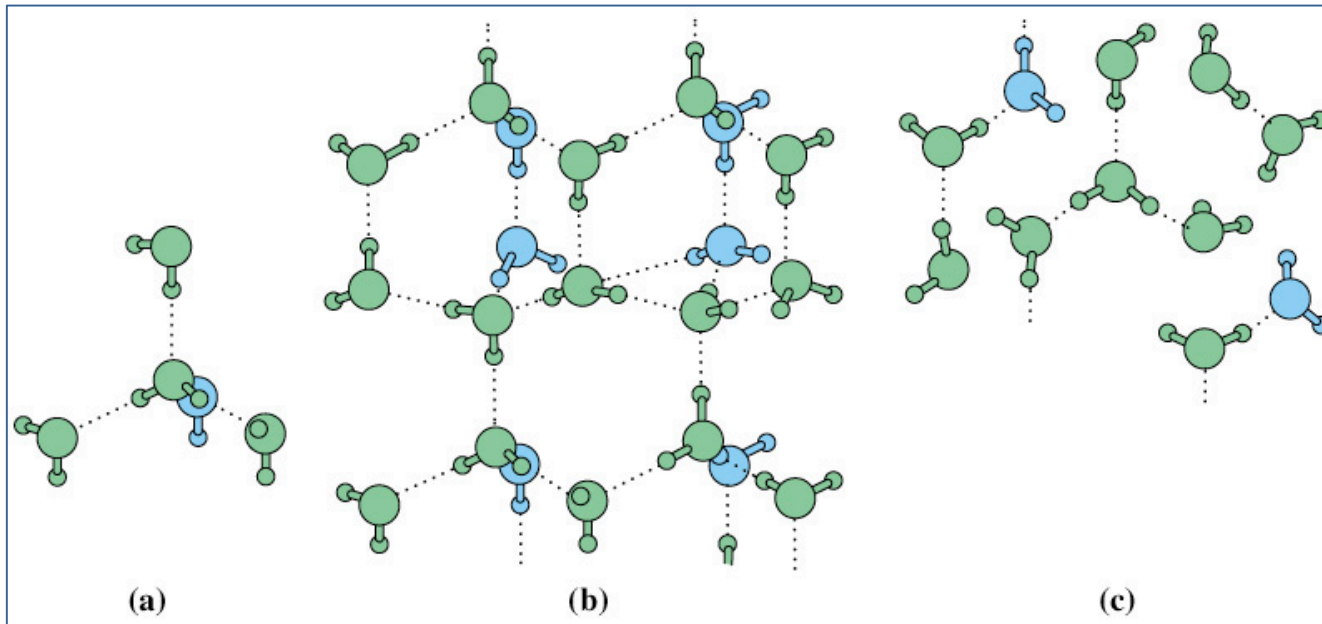
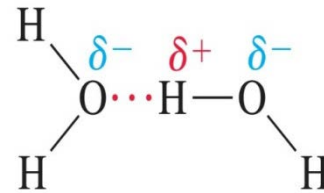
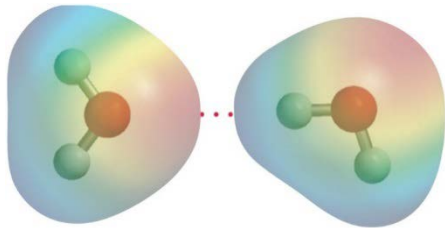
inguru molekularra

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

#### URAREN DENTSITATEAREKIKO ERAGINA

[uraren hidrogeno-loturak](#)



Inguru molekularra

egoera solidoa

egoera likidoa

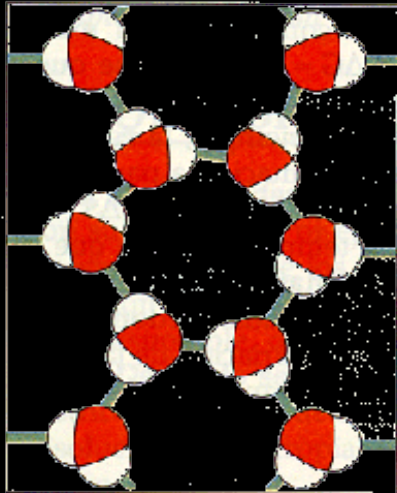
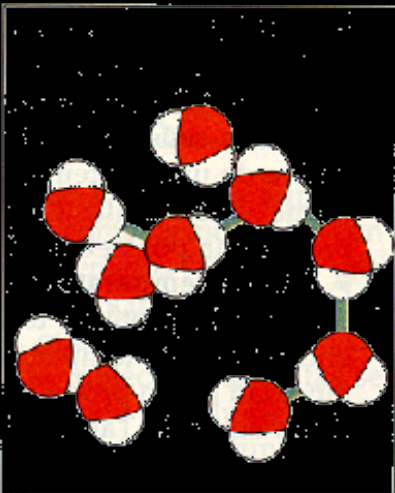
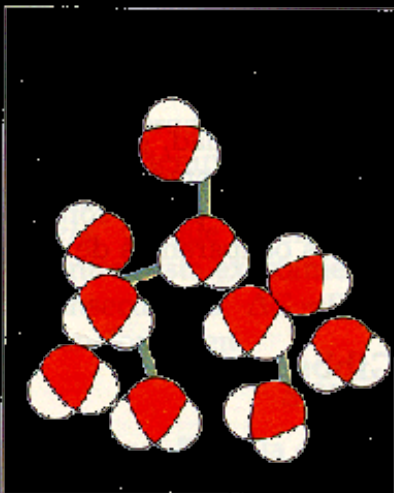
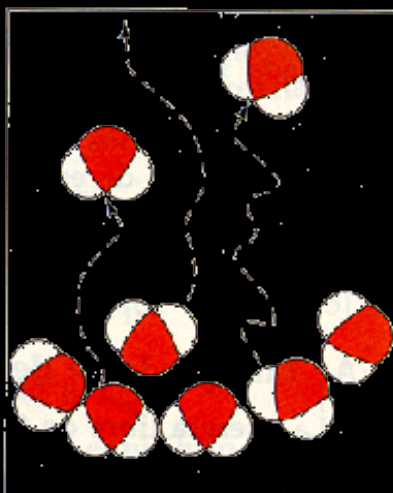
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

H<sub>2</sub>O IP (100°C); FP (0°C)

$V_s$  handiagoa baina masa bera →  
dentsitate (m/V) txikiagoa

Uraren portaera fisikoa berezi-berezia da

			
Hielo	Hielo fundente	Agua líquida	Agua en ebullición
Izotza ( $T < 0^\circ\text{C}$ )	izotza+ur likidoa ( $T = 0^\circ\text{C}$ )	ur likidoa ( $T > 0^\circ\text{C}$ )	ur- baporea ( $T > 100^\circ\text{C}$ )

$V_s$

>

$V_l$

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

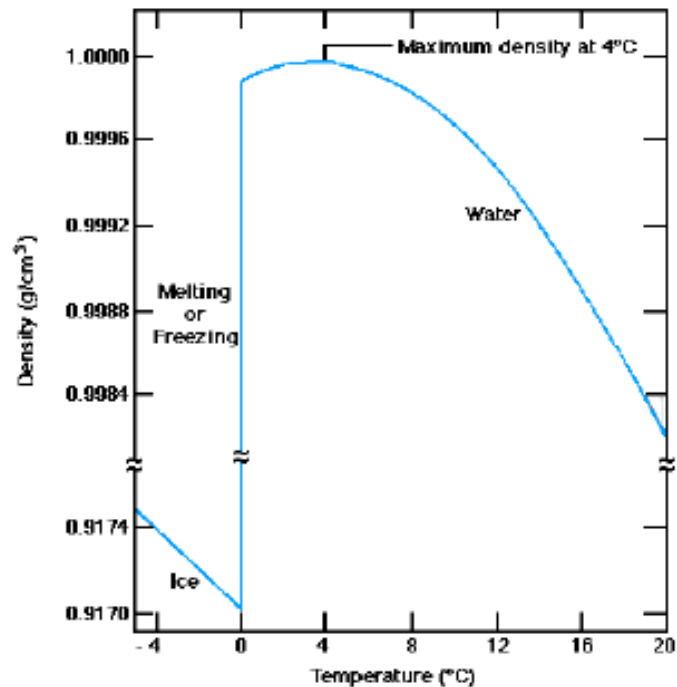
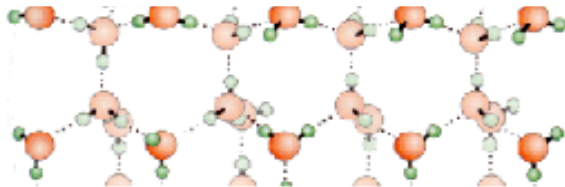
### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

#### URAREN DENTSITATEAREKIKO ERAGINA

Dentsitate maximoa 4º C-tan

Horregatik izotzak (0 º C) ur likidoak baino dentsita txikiagoa du eta uraren gainean dago

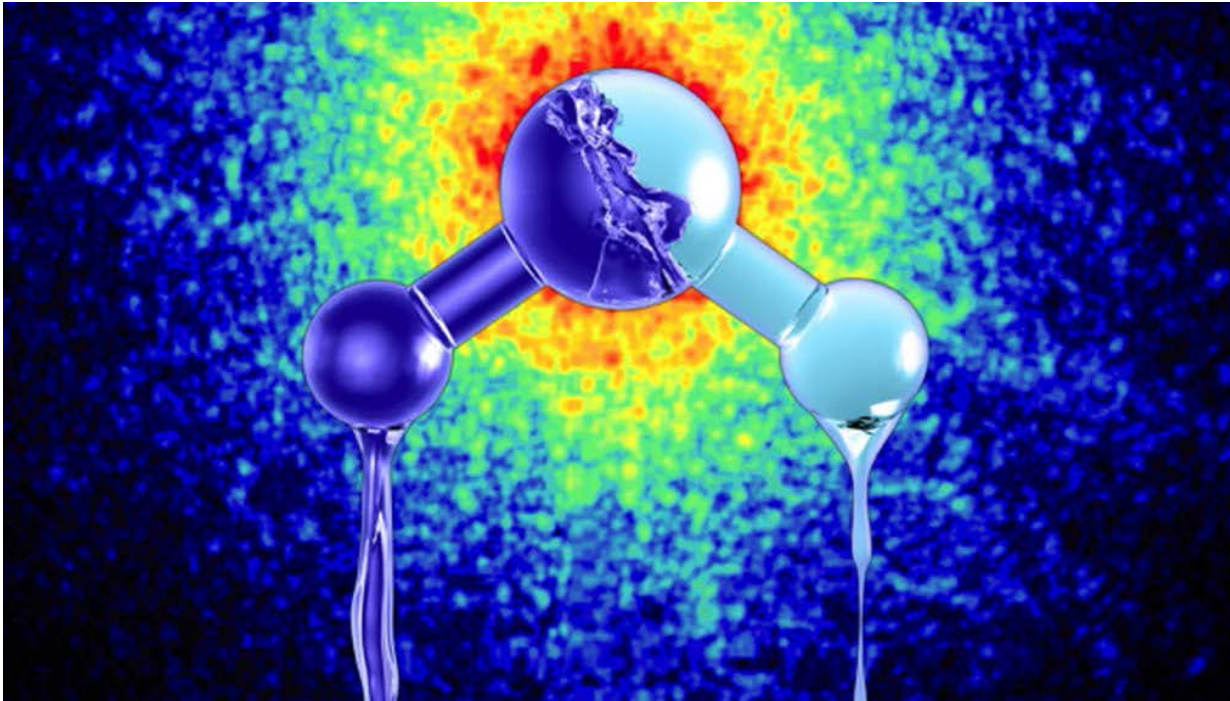
Izugarrizko eragina ozeanoko espezieen iraunkortasunean



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Azken aurkikuntza: Urak bi egoera likidoa ditu



Fivos Perakis, Katrin Amann-Winkel, Felix Lehmkuhler, Michael Sprung...,2017.  
**Diffusive dynamics during the high-to-low density transition in amorphous ice.** *Proceedings of the National Academy of Science PNAS*, June 26

DOI: [10.1073/pnas.1705303114](https://doi.org/10.1073/pnas.1705303114)



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.3. Hidrogeno-lotura

Azken aurkikuntza: Urak bi egoera likidoa ditu

- $H_2O$ -k bi egoera likido dauzka
- Urak likido egoeran bi fase ditu, biak oso propietate desberdinak izaten dentsitateari eta egiturari dagokionez
- 2017.urtean Estokolmon, Suedian, zientzialariek aurkitu dute hau, ura oso motela den kristalizazio-prozesuan
- Aurkitu duten likidoa dentsitate txikiagoa eta likatasuna handikoa da
- Agian.....

*URA EZ DA OSO BEREZIA DEN LIKIDOA BAIZIK ETA.....*

*BERE BARRUKO BEREZITASUNA BI LIKIDO DESBERDINAK IZATEAN DATZA*

## **06.GAIA: LOTURA KIMIKOA**

### **06.4: KOHESIO-INDARRAK**

6.4.1.Sarrera

6.4.2.Van der Waals indarrak

6.4.3. Hidrogeno- Lotura

**6.4.4. Solido Molekularrak**

6.4.5. Ariketak

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

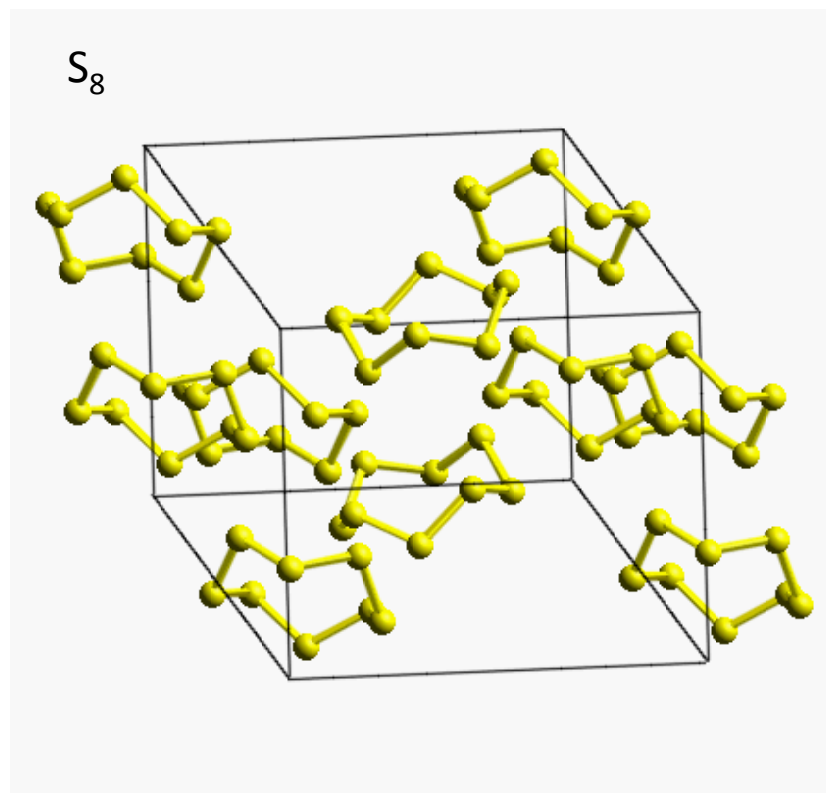
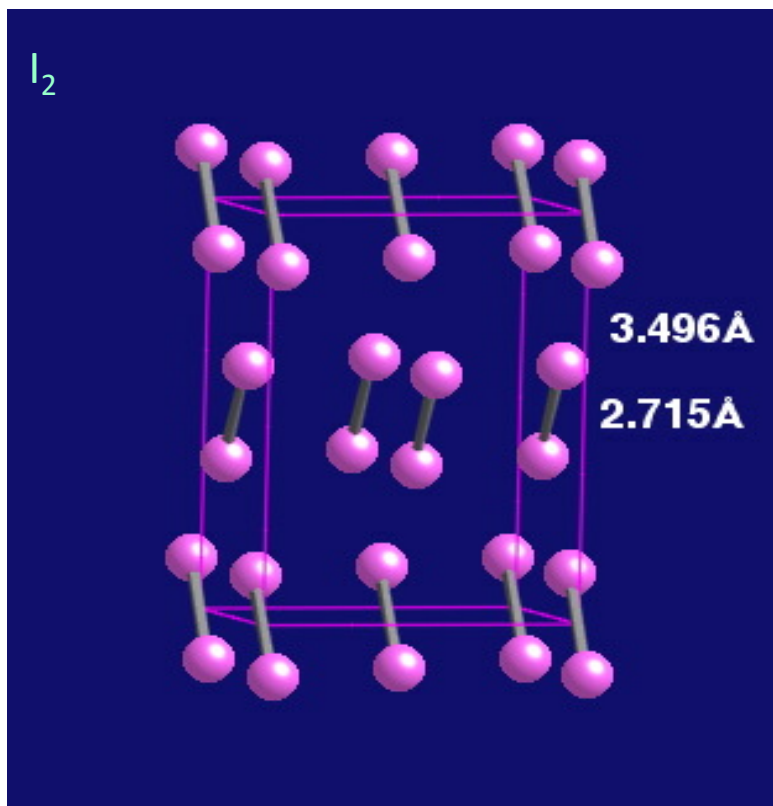
- Tenperaturak behera egin ahala, agitazio termikoa gero eta txikiagoa da.
- Hori dela eta, tenperatura jakin batetik behera likidoak izoztu egiten dira, eta **solido molekularrak** eratzen dira
- Sustantzia bakoitzak badauka bere izozte-puntua, eta **gehienetan** sustantzia molekularrak likido eta gas egoeretan daude giro-tenperaturan, kohesio-indarrak ez baitira oso sendoak
- Halere, beste batzuk **solido egoeran daude giro-tenperaturan**: iodoa eta sufre esaterako



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

Giro-tenperaturan solido egoeran dauden molekularak



Solido molekularrak



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

*GOGOETA BAT.....*

- Hidrogeno-loturak gainontzeko Van der Waals-en indarrak baino sendoagoak dira
- Sufrean eta iodoan behin behineko dipoloen arteko indarrek baino ez dute jokutzen, eta horiek ahulak dira
- Iodoa eta sufrea solido-egoeran daude giro-tenperaturan; ura, likido egoeran; eta, amoniakoa, gasa da

*KONTRAESANA???*  EZ, MOLEKULEN TAMAINAN DAGO ERANTZUNA

- *Oktasufrea ( $S_8$ ) eta diiodoa ( $I_2$ ) pisu molekular altuko molekulak direnez, **giro tenperaturan dagoen agitazio termikoa ez da nahikoa molekulen arteko kohesioak desegiteko, indar hauek ohiko ez den bezala sendo samarrak baitira***
- *Tamainak kohesio-indarraren sendotasuna areagotzen du nahiz eta berez indar hauek hidrogeno-lotura baino ahuleko izaera izan*

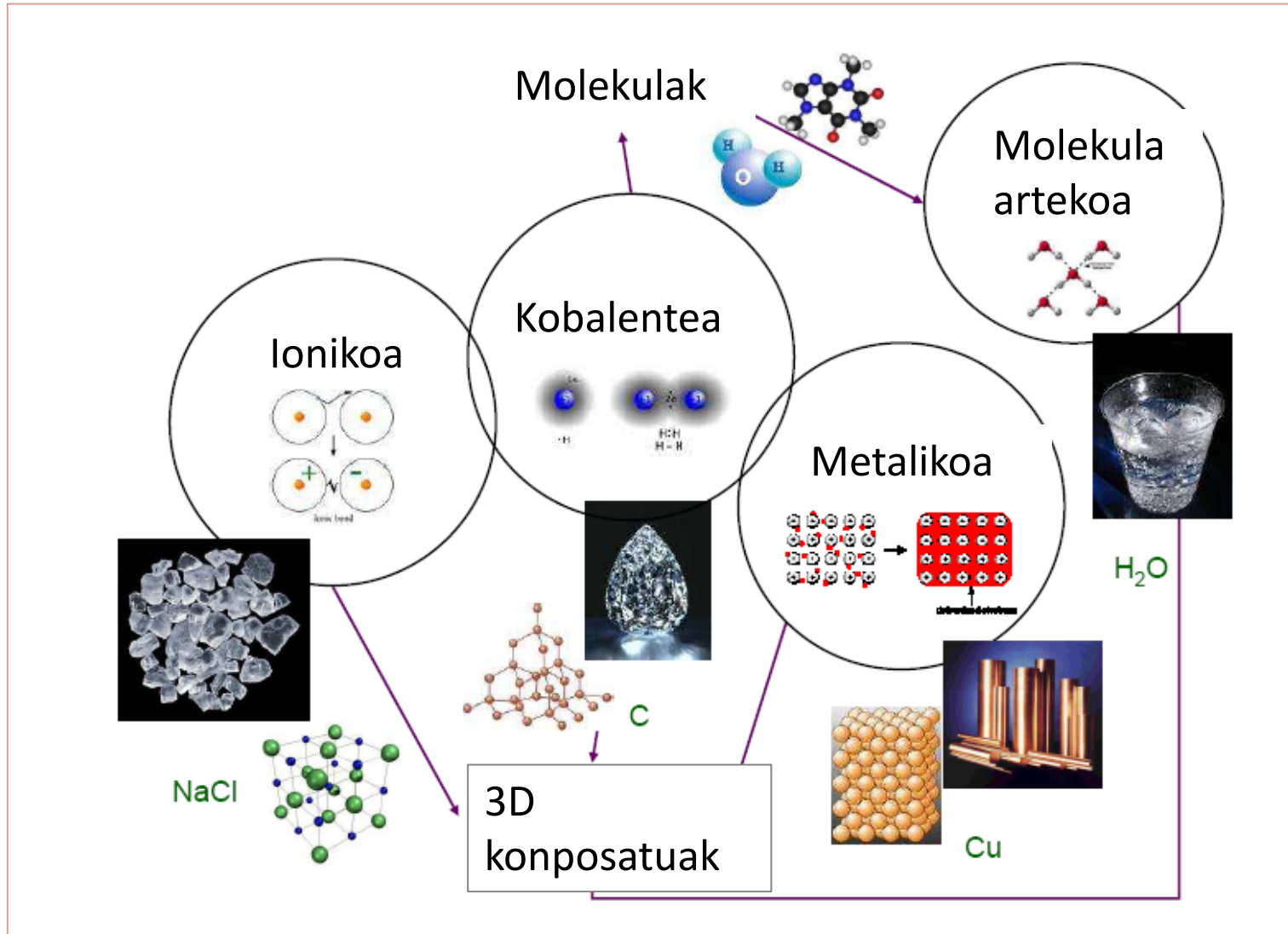
## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

Molekulen tamainaren eragina erraz ikus daiteke hidrokarburoetan tamainak  $\uparrow \Rightarrow$  FP  $\uparrow$  eta IP  $\uparrow$

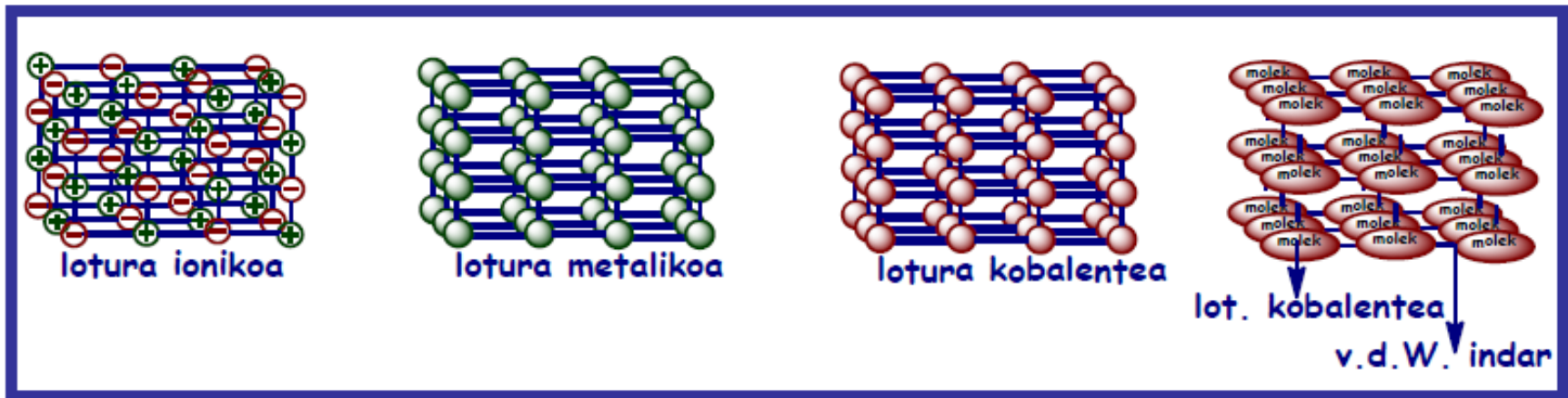
	Irakite-puntua (°C)
Butanoa (g) (C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> )	-0.5
Pentanoa (l) (C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> )	36.1
Hexanoa (l) (C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> )	68.7

# LOTURA -MOTA



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak



SOLIDO MOTA DESBERDINAREN BARRUKO EGITURA

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

Solido-mota	Egituraren osagaiak	Partiulen arteko indarrak	Propietateak
Molekula apolarra	molekula	London-dispertsio indarrak	<ul style="list-style-type: none"><li>. Bigunak</li><li>. <math>P_f</math> oso baxuak edo ertainak</li><li>. Disolbagarritasuna (polarretan)</li></ul>
Sare kobalentea	Atomoak kobalenteki konektatuta	Lotura kobalentea	<ul style="list-style-type: none"><li>. Oso gogorrak</li><li>. <math>P_f</math> altua</li><li>. <math>\sigma</math> askotarikoa</li></ul>
Ionikoa	ioiak	Erakarpen elektrostati-koak	<ul style="list-style-type: none"><li>. Gogorrak-hauskorrak</li><li>. <math>P_f</math> altua</li><li>. <math>\sigma</math> baxua</li></ul>
Metalikoa	Katioiak posizio zehatzetan eta elektroiak deslektutuak	Lotura metalikoak	<ul style="list-style-type: none"><li>. Askotariko gogortasuna</li><li>. <math>P_f</math> oso aldakorak</li><li>. <math>\sigma</math> altua</li></ul>

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

Solido-mota	Egituraren osagaiak	Partiulen arteko indarrak	Propietateak
Molekula apolarra	Atomoak molekula apolarrak	London-dispertsio indarrak	<ul style="list-style-type: none"><li>. Bigunak</li><li>. <math>P_f</math> oso baxuak edo ertainak</li><li>. Disolbagarritasuna(polarretan)</li></ul>
Molekula polarra	molekula polarrak	London-dispertsio indarrak; dipolo-dipolo indarrak	<ul style="list-style-type: none"><li>. Oso gogorrak</li><li>. <math>P_f</math> baxuak edo ertainak</li><li>. Disolbagarritasuna(polarretan eta ez-polarretan)</li></ul>
H-zubiekin molekulak	H-N,H-O, H-F duten molekulak	London-dispertsio indarrak; dipolo-dipolo indarrak; H-zubiak	<ul style="list-style-type: none"><li>. <math>P_f</math> baxuak edo ertainak</li><li>. Disolbagarritasuna(polarretan eta ez-polarretan)</li></ul>

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

#### Laburpena

- . Kohesio-indarrak atomoen arteko loturak baino ahulagoak dira, baina ez garrantzi gutxikoak.
- . Van der Waals-en indarrak ere deritze
- . Espezie molekularren polaritasuna eta polarizabilitatearen arabera desberdinak dira
- . Indar hauen balore handiagoak beti F.P. eta I.P. handiagoak sorrarazten dituzte
- . Molekula natura polarraren edo apolarraren arabera desberdinak dira
- . Hidrogeno-loturak bere ezaugarriagatik garrantzi berezia eskatzen du
- . Eraginkorra da ildo kimiko askotan



## **06.GAIA: LOTURA KIMIKOA**

### **06.4: KOHESIO-INDARRAK**

6.4.1.Sarrera

6.4.2. Van der Waals indarrak

6.4.3. Hidrogeno-Lotura

6.4.4. Solido Molekularrak

**6.4.5. Ariketak**

## 06.GAIA: LOTURA KIMIKOA

### 06.4: KOHESIO-INDARRAK

#### **Ariketak egiteko kontua hartzekoa**

- . London-indarrak molekula guztietan daude eta masarekiko menpekotasuna dute
- . Keesom-indarrak behin betiko dipoloekin zerikusia dute.
- . Masa desberdinetako molekulekin aritzean London indarra nagusiak dira
- . Antzeko masako molekulekin aritzean Keesom indarrak nagusiak dira
- . Arrazoa: guztiak masarekin batera areagotzen dira, baina London indarretan gehiago nabaritzen da eragin hau, polarizabilitatea gertatu behar baita

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.5. Ariketak

#### ARIKETA 1

Hurrengo konposatuen F.P .eta I.P-ren aldaketak justifika ezazu:

a) Gas geldoen F.P. hurrengoak dira:

He:4.2K Ne:27.1K Ar:87.7K Kr:119.7 Xe:165K Rn:211K

b) CH<sub>3</sub>SH: F.P.= 150 K I.P.= 279.2 K

CH<sub>3</sub>OH: F.P.= 179.1K I.P.= 337.9 K

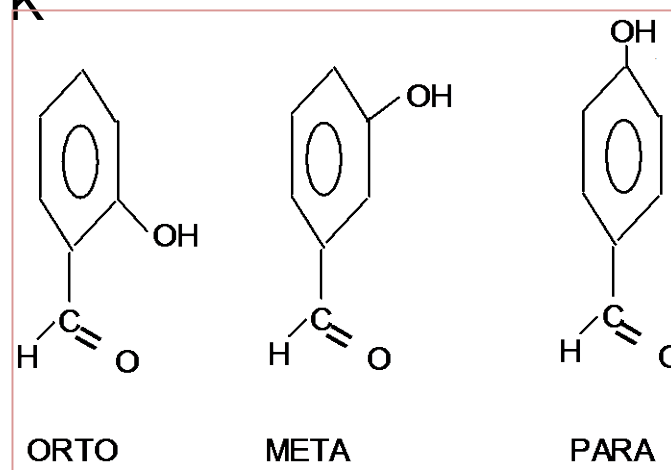
c) N<sub>2</sub>: F.P.: 64K I.P.: 77.2K

CO: F.P.: 74K I.P.: 81.5K

d) o-hidroxibenzaldehido: F.P.= 280K

m-hidroxibenzaldehido: F.P.= 380K

p-hidroxibenzaldehido: F.P.: = 389K



## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.5. Ariketak

#### ARIKETA 2

Zer nolako indar-mota agertzen dira honako konposatu hauetan?

a) HBr eta  $\text{H}_2\text{S}$

b)  $\text{Cl}_2$  eta  $\text{CBr}_4$

c)  $\text{I}_2$  eta  $\text{NO}_3^-$

d)  $\text{NH}_3$  eta  $\text{C}_6\text{H}_6$

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

- . Polarizabilitatea
- . Kondentsazioa
- . Fusio-puntua
- . Irakite-puntua
- . Dipolo iraunkorra
- . Dipolo induzitua
- . Bat-bateko dipoloa
- . Azeotropoa
- . Likatasuna

## 06.4. KOHESIO-INDARRAK

### 06.4.4. Solido Molekularrak

1. Chang, R., Goldsby, K. A.: *Química*; 11ª Ed. McGraw-Hill; Mexico, D. F., (2013)
2. Petrucci, R. H., Herring F. G.; Madura, J.D.: *Química General*. Ed: Pearson Education, 10ª Ed., Madrid, (2011)
3. Valenzuela, C.: *Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia*. Ed. Universidad de Granada, Granada, (2002)
4. Lothar Beyer: *Química Inorgánica*. Ed. Ariel Ciencia, Barcelona(2000)
5. Martinez, R., Rodriguez, Mª J., Sánchez, L.: *Química. Un proyecto de la ACS*. Ed. Reverté, Barcelona (2005)



Universidad  
del País Vasco

Euskal Herriko  
Unibertsitatea



# 07.GAIA

## HAINBAT ESPEZIE KIMIKOEN AZIDOTASUNA

Farmaziako graduaren 1.maila  
Kimika Orokorra eta Ez-organikoa  
2019/20 ikasturtea

# AURKIBIDEA

## 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

1.1. ioi metalikoak

1.2. hidruro bitarrak

1.3. oxoazidoak

1.4. oxidoak

## 2. Lewisen azidotasuna

2.1. “p” blokeko Lewisen azidotasuna

2.2. katioi metalikoen Lewisen azidotasuna

## 3. Pearson-irizpideak (ABDB)



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

1.1. ioi metalikoak

1.2. hidruro bitarrak

1.3. oxoazidoak

1.4. oxidoak

## 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

- Farmazia-arloan erreakzio gehienak uretan egiten dira



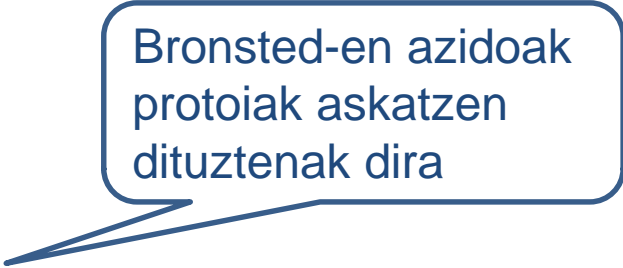
pH-ren menpekoak dira

- Gai honetan: hainbat espezieen azidotasun-indarra aztertzekeo irizpideak ematen dira.

### *MOLEKULA-EGITURAREN ETA AZIDOTASUNAREN ARTEKO ERLAZIOA AZTERTU BEHAR DA*

- Espezie azidoaren **indartasun azidoan** eragina duten faktoreak
  1. H-A lotura-energia
  2. loturen polaritatea
  3. hidratazio-energia

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasauna



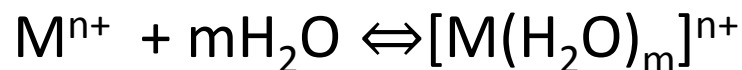
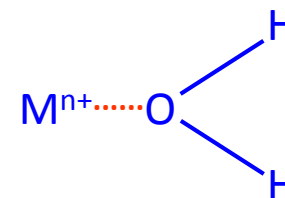
Bronsted-en azidoak  
protoiak askatzen  
dituztenak dira

- Bronsted-espezieen azidotasauna uretan aztertzen da
- Kontuan hartzeko: zeinek diren irizpide nagusiak nahiz eta emaitzak BETI datu esperimentalekin bat egin behar dute
- Hurrengo espezie hauek ikasten dira
  1. katioi metalikoak
  2. hidruo bitarrak/Hidrazidoak
  3. oxoazidoak
  4. oxidoak

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. Ioi metalikoak: $M^{n+}$

- Ioiak karga-dentsitate altua dute
- Ohikoa da ioiak uretan solbatatuak agertzea:



- $\Delta H_s$  OSO ALTUA da
- Espezieek nahiago dute H-a galtzea ur-molekula osoa baino



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. Ioi metalikoak: $M^{n+}$

- Demagun  $Al^{3+}$



$K_a = 1,1 \times 10^{-5}$       Azido azetikoarenarekin konparagarria ( $1,8 \times 10^{-5}$ )

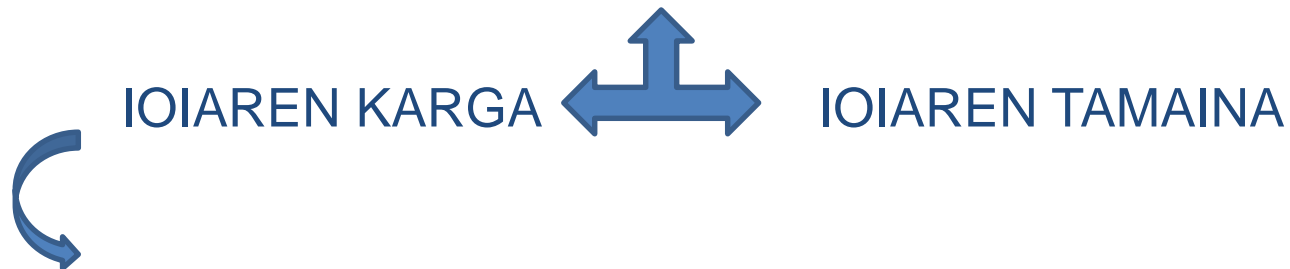
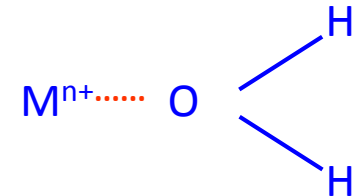


- Azido protoianitzekoak bezalako portaera du

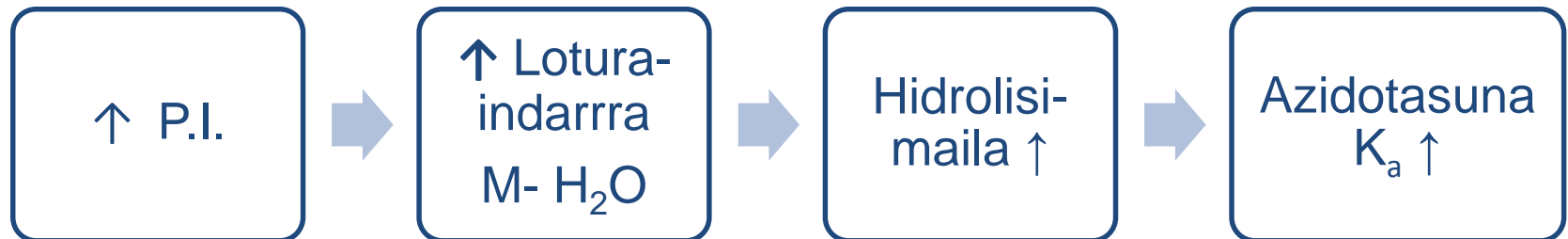
# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. loi metalikoak: $M^{n+}$

AZIDOTASUN INDARRA

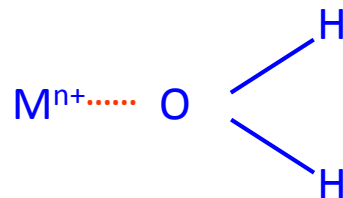


**POTENTZIAL IONIKOA (P.I.) = KARGA / ERRADIO IONIKOA**



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. Ioi metalikoak: $M^{n+}$

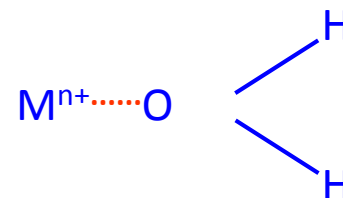
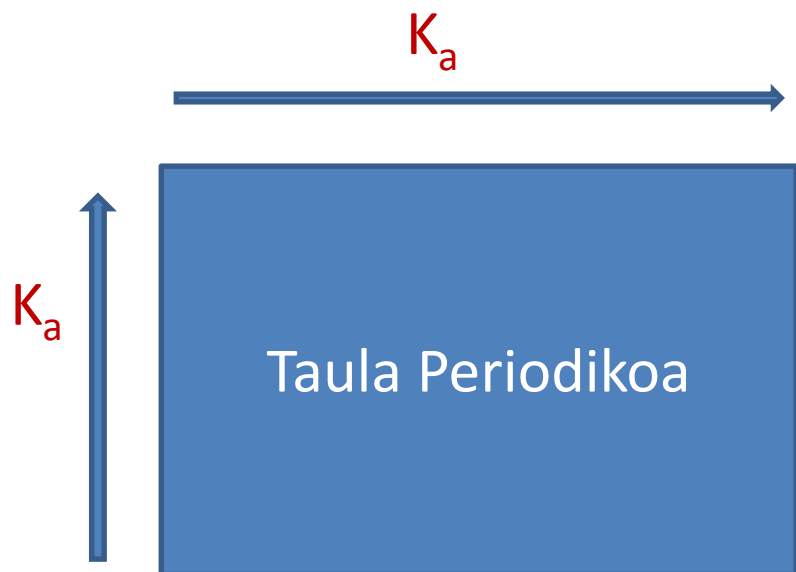


- Katioi polarizazaileak (karga handia eta tamaina txikia) oxigenoaren dentsitate elektroniko gehiago bereganatzen dute eta orduan O-H lotura polarragoa izango da, H atomoa erraz galduz. Beraz, azidoagoak dira.
- Fe(3+) katioa Fe(2+) delakoa baino azidoagoa da

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. loi metalikoak: $M^{n+}$

### Joerak orokorrak taula periodikoan



Talde batean gorantz

- . P.I. handitzen da
- . Azidotasuna handitzen da

Periodo batean eskuinerantz

- . P.I. handitzen da
- . Azidotasuna handitzen da

★ Aurrekoa betetzen da ioien konfigurazio elektronikoa  $ns^2 np^6$

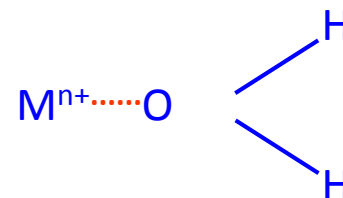


# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. Ioi metalikoak: $M^{n+}$

### Taldeetako joerak

- Taldeetan  $\downarrow$  , P.I. ???
- Karga bera baina erradio handiagoa  $\longrightarrow$  P.I. txikiagoa



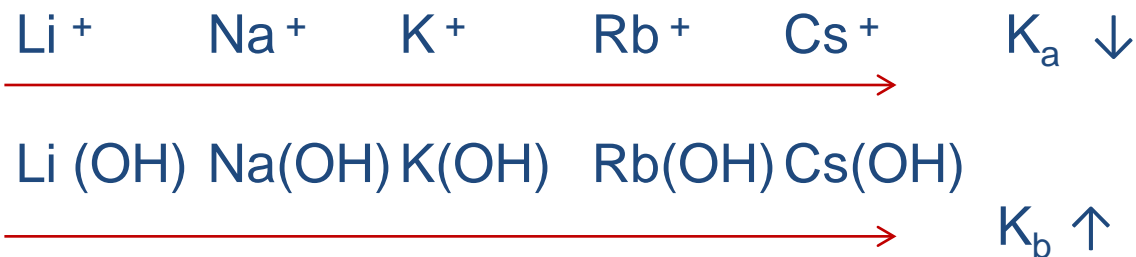
Taldeetan  $\downarrow$   $\longrightarrow$  P.I.  $\downarrow$   $\longrightarrow$   $K_a$   $\downarrow$

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

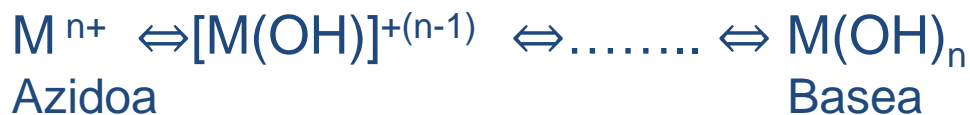
## 1.1. Ioi metalikoak: $M^{n+}$

### Taldeetako joerak

- . Espezie azidoa eta bere espezie konjokatuen arteko erlazioa: azidotasuna gutxitu ahala, dagokion hidroxido konjokatuaren indar basikoa handiagoa da



- .  $M^{n+}/M(OH)_n$  protolito-sistema dagokion oreka



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. loi metalikoak: $M^{n+}$

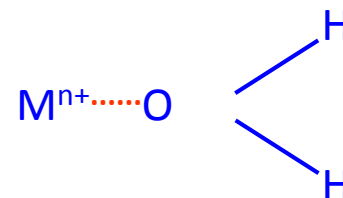
### Periodoetako joerak

➤ Periodoetan  $\rightarrow$  P.I.???

➤ Karga handiagoa baina erradio txikiagoa  $\rightarrow$  P.I. handiagoa



$K_a$  handiagoa



Periodoetan  $\rightarrow$   $\rightarrow$  P.I.  $\uparrow$   $\rightarrow$   $K_a$   $\uparrow$

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasauna

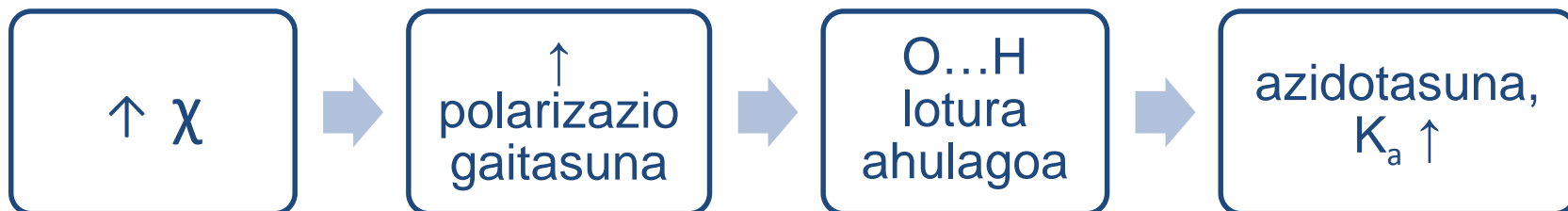
## 1.1. loi metalikoak: $M^{n+}$

Konfigurazio elektronikoa ez baldin bada gas geldoarena?

. Faktore nagusiak:

- Elektronegatibitatea
- M-O loturaren kobalentzia

. Potentzial ionikoa ez da esanguratsua



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. loi metalikoak: $M^{n+}$

### Joerak orokorrak taula periodikoan

Konfigurazio elektronikoa  $\neq ns^2 np^6$

Loturen polarizazioa

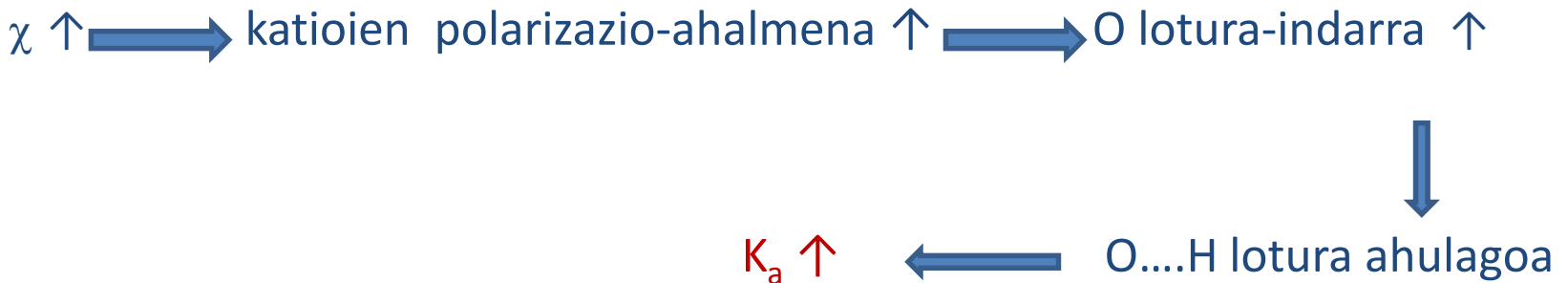
$\chi(\text{Mg}) = 1.3$   
 $\chi(\text{Hg}) = 2.0$

$\text{Mg}^{2+}$  : P. I. = 3,1  
 $\text{Hg}^{2+}$  : P. I. = 1,8

$\downarrow K_a$

Elektronegatibitatea

Nola azaldu?



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.1. Ioi metalikoak: $M^{n+}$

Katioiak	POTENTZIAL IONIKO = $Q/r$
$Mg^{2+}$	3,1
$Cu^{2+}$	2,9
$Zn^{2+}$	2,7
$Cd^{2+}$	2,1
$Hg^{2+}$	1,8

↓  
indar azidoa handitzen da

Kasu honetan azidotasunaren ordena azaltzeko P.I.a ez da kontuan hartu behar

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1. 2. Hidruo Bitarrak

- Hidruo horien azidotasuna aztertzen ari garenez, ondoko erreakzio orokorra hartu behar dugu kontuan



- Ikus daitekeenez, eratzen den **anioia zenbat eta egonkorragoa** izan, oreka orduan eta eskumalderantz desplazatuago egongo da eta  $\text{XH}_n$  hidruoaren **azidotasuna hainbat eta handiagoa** da
- Faktoreak:
  - Anioiaren egonkortasuna  $\leftrightarrow Z_e \leftrightarrow$  Protoi-afinitatea
  - Elektronegatibitatea
  - Tamaina, karga-dentsitatea

1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.2. Hidruro Bitarrak

Zeren menpe dago anioiaren egonkortasuna ???

1. Atomo zentralaren kanpo-elektroien karga nuklear eraginkorra

Izan ere, **karga nuklear eraginkorra handitzen** den heinean (periodoetan eskumalderantz), eratzen den **anioia** hainbat eta **egonkorragoa** izango da.

2. Anioiaren **karga-dentsitatea**

**Behera** doan heinean, **anioia gero eta egonkorragoa** da karga negatiboa oso hedatua egongo baita molekula osoan.



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1. 2. Hidruro Bitarrak

Zenbait hidruroen  $pK_a$  balioak:

<b>CH<sub>4</sub> (52)</b>	<b>NH<sub>3</sub>(35)</b>	<b>H<sub>2</sub>O(14)</b>	<b>HF(3.17)</b>
	PH <sub>3</sub> (27)	H <sub>2</sub> S(7)	HCl(-7.4)
		H <sub>2</sub> Se(3.8)	HBr(-9)
			HI(-9.5)

Azidotasuna

Azidotasuna

NOLA AZALDU DATU HAUEK?



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1. 2. Hidruro Bitarrak



### Periodoetako joerak

Periodoetan  $\rightarrow$

Atomo zentralaren  $Z_e \uparrow \Rightarrow$  nukleoak karga positibo gehiago jasaten du  $\Rightarrow$  ioiaren egonkortasuna  $\uparrow$

Protoi-afinitatea  $\downarrow \Rightarrow$  protoia errazago askatzen du



**Azidotasuna  $\uparrow$**

Periodoetan  $\rightarrow \Rightarrow$  Afinitate protonikoa  $\downarrow \Rightarrow$   $K_a \uparrow$

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1. 2. Hidruro Bitarrak

### Periodoetako joerak ( $\chi$ )

- Periodoetan  $\rightarrow \chi$ ???
- Atomoaren  $\chi$  handiagoa bada  $\rightarrow$  loturaren polaritatea handiagoa  
 $\rightarrow$  H-lotura ahulagoak  $\rightarrow$  joera gehiago protoiak askatzeko



$K_a$  handiagoa

Periodoetan  $\rightarrow$   $\chi$   $\uparrow$   $\rightarrow$   $K_a$   $\uparrow$

$\Delta\chi$  N-H: 0,8  
 $\Delta\chi$  F-H: 1,8

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.2. Hidruro Bitarrak

Zenbait hidruroen  $pK_a$  balioak:

CH <sub>4</sub> (52)	NH <sub>3</sub> (35)	H <sub>2</sub> O(14)	HF(3.17)
	PH <sub>3</sub> (27)	H <sub>2</sub> S(7)	HCl(-7.4)
		H <sub>2</sub> Se(3.8)	HBr(-9)
			HI(-9.5)

Azidotasuna

Azidotasuna

DATUAK ETA ONDORIO TEORIKOAK BAT DAUDE

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1. 2. Hidruro Bitarrak

Zenbait hidruroen  $pK_a$  balioak:

CH <sub>4</sub> (52)	NH <sub>3</sub> (35)	H <sub>2</sub> O(14)	HF(3.17)
	PH <sub>3</sub> (27)	H <sub>2</sub> S(7)	HCl(-7.4)
		H <sub>2</sub> Se(3.8)	HBr(-9)
			HI(-9.5)

Azidotasuna

Azidotasuna

- $\chi$  ? : kontrakoa esperagarria da
- Karga-dentsitatea? : beherantz anioia egonkorragoa da, adostasuna
- Bi faktore kontrako joera azaltzen dute
- Lotura-entalpia?

ADOSTASUNA,

Lotura-entalpia garrantzia duen faktorea da

$$\Delta H_{\text{H-I}} < \Delta H_{\text{H-Br}} < \Delta H_{\text{H-Cl}} < \Delta H_{\text{H-F}}$$

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak. Sailkapena

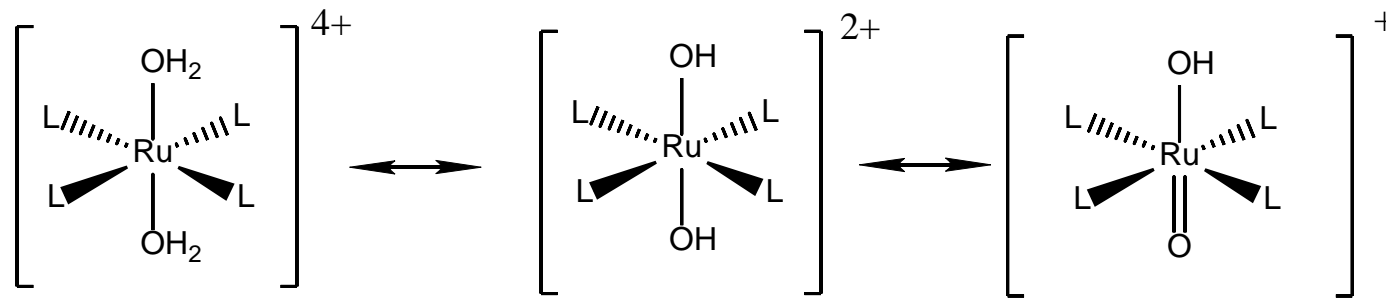
Hiru oxoazido-mota daude

1. **“akuo”- azidoak:**  $H^+$  azidoa, ioi metaliko zentralari koordinatuta dagoen ur-molekula batean dago, esaterako  $[A(OH_2)_n]^+$
2. **Hidroxoazidoak:**  $H^+$  azidoa, ondoan “oxo” talderik ez duen hidroxilo talde batean dago, esaterako  $Te(OH)_6$
3. **Oxoazidoak:**  $H^+$  azidoa ondoan “oxo” taldea duen hidroxilo talde batean dago, esaterako:  $SO_2(OH)_2$

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak. Sailkapena

- Hiru espezie hauek “akuo”-azidoen desprotonazioan jarraiak gertatzen diren urratsak kontsidera daitezke



- “Akuo”-azidoren: erdiko atomoak E.O. baxuak dituztenek eratzten dira, “s” eta “d” blokeko metalak
- Oxoazidoak: O.E. altuko metalak eratu ohi dira

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak. Faktoreak



- Funtsezko faktorea: O----H loturaren polaritatea
- Azidotasun handia sorrarazten duten faktoreak:
  - Elementu zentralaren **elektronegatibitatea**
  - Anioiaren egonkortasuna **karga-deslekupenagatik** sortuta



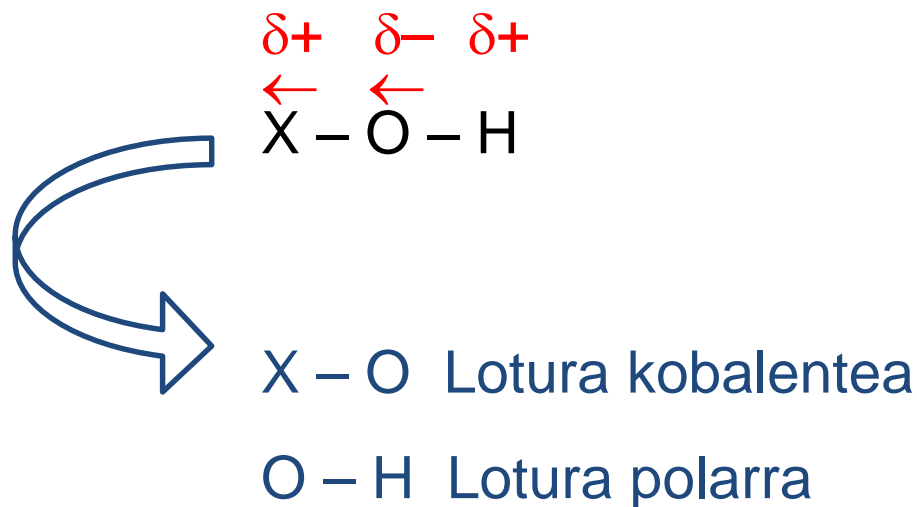
**balio handiagoak, azidotasun handiagoa**



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak. Faktoreak

- Lotura-energiari buruzko datu gutxi dago
- Loturaren polaritatea oinarritzen da

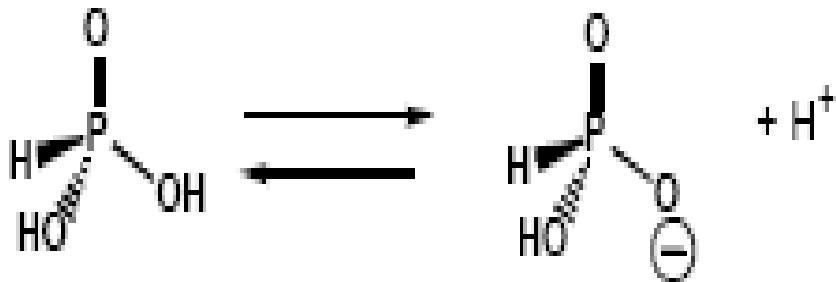


- O-H loturaren polaritate altuak azidotasun handiaren ondorioa dauka

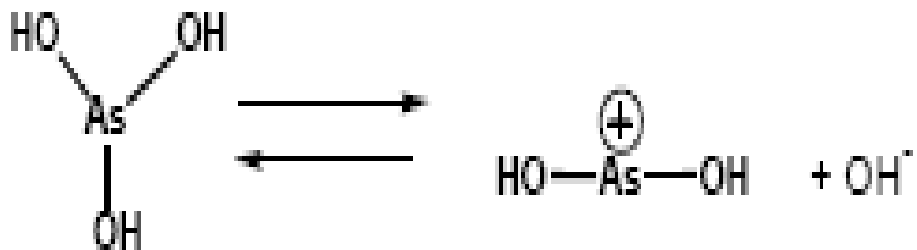
# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak loturen polartasuna

$\text{H}_3\text{AsO}_3/\text{As}(\text{OH})_3$  eta  $\text{H}_3\text{PO}_3$  formulak antzekoak direnez,  $\text{H}_3\text{AsO}_3/\text{As}(\text{OH})_3$  molekularako azido artsenioso izena erabiltzen dugu baina espezia honek base modura jokatu du, **As...OH loturak O...H loturak baino polarragoak dira** eta.



$$\text{pK}_a(\text{H}_3\text{PO}_3/\text{H}_2\text{PO}_3^-) = 1.51$$

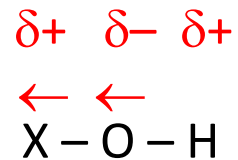


$$\text{pK}_a(\text{As}(\text{OH})_2^+/\text{As}(\text{OH})_3) = 9.2$$

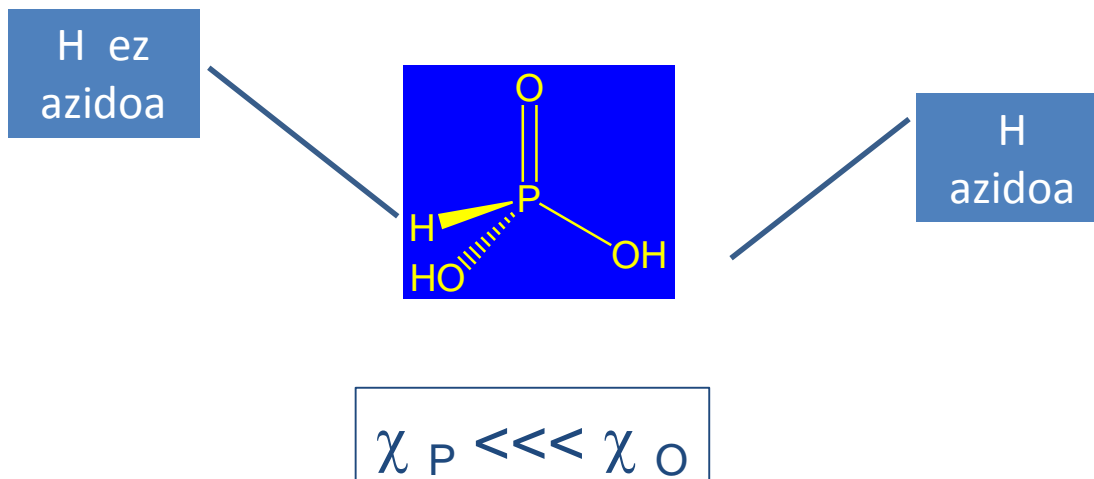
# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak. hidrogeno azidoak

Espezie baten H-a azidoa zein da?



O-H loturaren polaritate altua  $\longrightarrow$  H oso azidoa



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

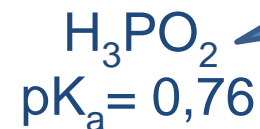
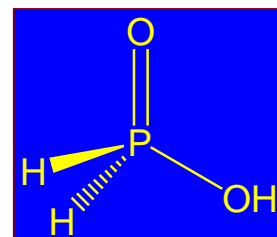
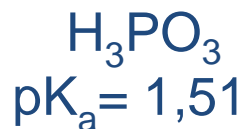
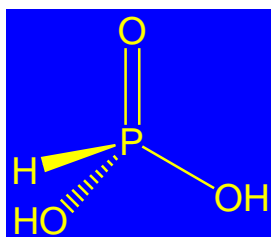
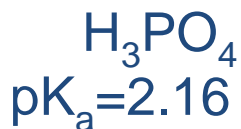
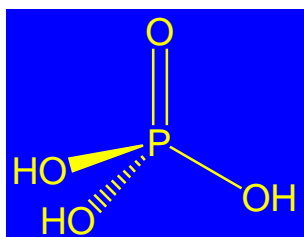
## 1.3. Oxoazidoak.hidrogeno azidoak

- Atomo zentralaren inguruan zein **H** eta **O** atomoak zein **hidroxilo** taldeak egon daitezke lotuta atomo zentralari
- **Bi** motako protoiak daude: **zuzenean** atomo zentralari **lotuta** daudenak eta **hidroxilo taldekoak**.
- Oxoazidoek askatzen dituzten protoiak **oxigeno atomoei lotuta** daudenak dira  $O \cdots H$  lotura oso polarra baita.

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak. hidrogeno azidoak

Hurrengo irudian fosforoaren oxoazidoak irudikatu dira



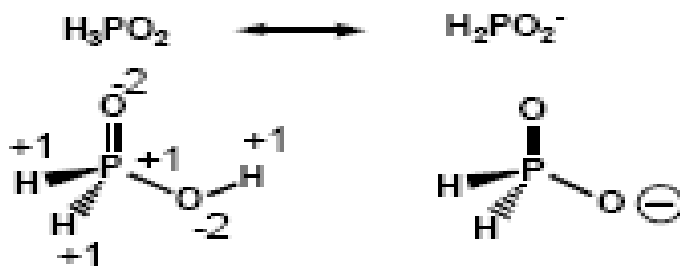
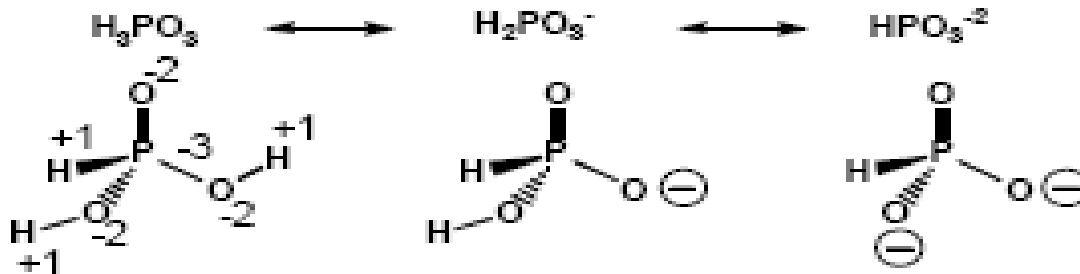
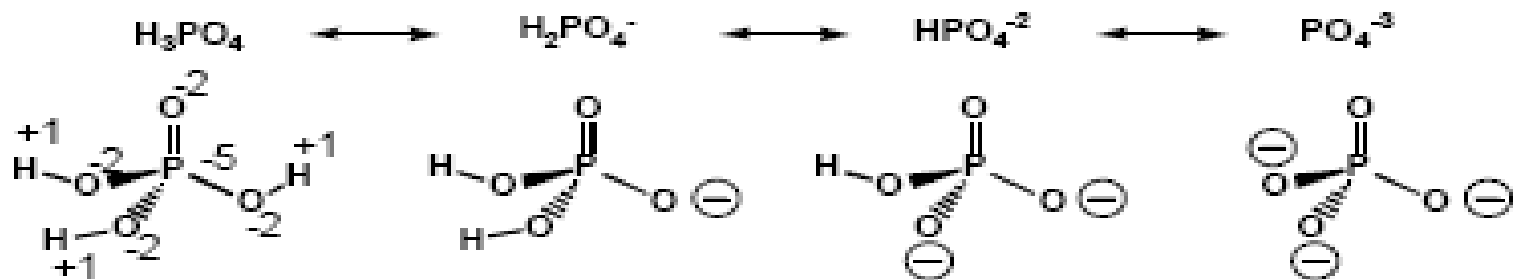
Zergatik?

- azido ortofosforikoan ( $\text{H}_3\text{PO}_4$ ) hidrogeno atomo guztiak azidoak dira
- azido ortofosforosoan ( $\text{H}_3\text{PO}_3$ ), hiruretatik bi
- azido ortohipofosforosoan ( $\text{H}_3\text{PO}_2$ ), hiruretatik bat baino ez.

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3. Oxoazidoak.hidrogeno azidoak

Hurrengo irudian fosforoaren oxoazidoak eta oxoanioiak irudikatu dira.



## 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

### 1.3. Oxoazidoak. Azidotasunaren ekarpenak

Formula orokorra:  $XO_x(OH)_y$

Konposatu hauen azidotasunean lau ekarpen bereizgarriak ditugu

#### 1.3.1. atomo zentralaren eragina

- . Elektronegatibitatea
- . Oxidazio-egoera

#### 1.3.2. hidroxilo taldeen eragina

#### 1.3.3. oxo taldeen eragina

#### 1.3.4. molekulen estereokimika

## 1.3. Oxoazidoak.Azidotasunaren ekarpenak

Konposatu hauen azidotasunean lau ekarpen bereizgarriak ditugu

### 1.3.1. atomo zentralaren eragina

- . Elektronegatibitatea

- . Oxidazio-egoera

### 1.3.2. hidroxilo taldeen eragina

### 1.3.3. oxo taldeen eragina

### 1.3.4. molekulen estereokimika



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.1: atomo zentralaren eragina

- Demagun: atomo zentral desberdina eta O kopuru bera duten oxoazidoak: oxoazido hipohalogenosoak



- Azidotasuna hurrengo ordenean handituz doa

	HClO	>	HBrO	>	HIO
$\text{pK}_a =$	7,2		8,69		10,64

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.1: atomo zentralaren eragina

	HClO	>	HBrO	>	HIO
pK <sub>a</sub>	7,2		8,69		10,64

**Cl atomoa** elektronegatiboagoa da  $\longrightarrow$  O-ren elektroiak beregana erakartzen ditu  $\longrightarrow$  Efektu inductiboagatik O bereganatzen du O-H loturaren bikote elektronikoa  $\longrightarrow$  H askatzeko erraztasun handiagoa

 **AZIDOTASUN HANDIAGOA**

$\chi \uparrow \longrightarrow$  O-H polarragoa  $\longrightarrow$  K<sub>a</sub>  $\uparrow$

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.1: atomo zentralaren eragina

- Oxidazio-egoera handitu ahala, azidotasuna baita ere handituz doa
- Demagun: atomo zentral bera baina O.E. desberdina duten kloro oxoazidoak



- Azidotasuna hurrengo ordenean handituz doa



$$\text{pK}_a = \quad -8 \quad -1 \quad 2 \quad 7,5$$

## 1.3. Oxoazidoak.Azidotasunaren ekarpenak

Konposatu hauen azidotasunean lau ekarpen bereizgarriak ditugu

1.3.1. atomo zentralaren eragina

- . Elektronegatibitatea

- . Oxidazio-egoera

1.3.2. hidroxilo taldeen eragina

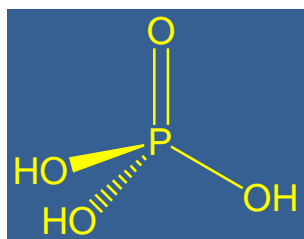
1.3.3. oxo taldeen eragina

1.3.4. molekulen estereokimika

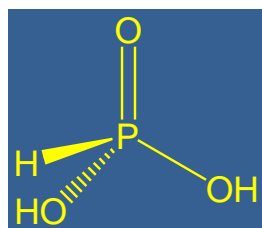
# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.2: hidroxilo taldeen eragina

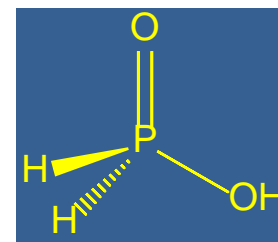
Hurrengo irudian fosforoaren oxoazidoak agerian daude



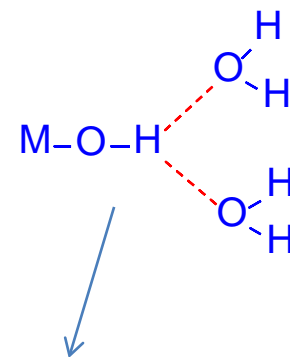
$$\text{pK}_a = 2,16$$



$$\text{pK}_a = 1,51$$



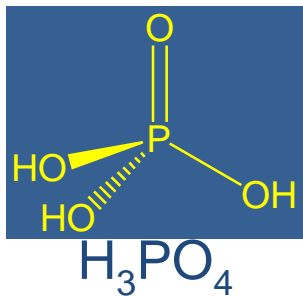
$$\text{pK}_a = 0,76$$



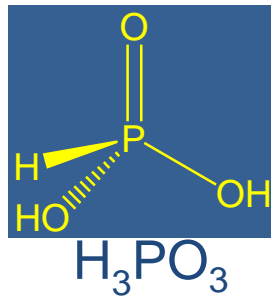
**OH<sup>-</sup> gehiago** badago **solbatazio gehiago** eta ur molekulek O-H talderi ematen diote karga negatiboa. Orduan O-H lotura ez da izango hain ionikoa/polarra eta **K<sub>a</sub> txikiagotu**

### 1.3.2:hidroxilo taldeen eragina

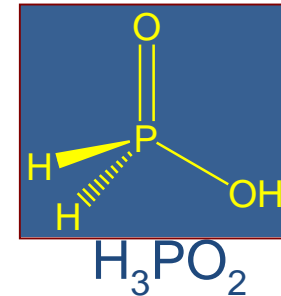
Hurrengo irudian fosforoaren oxoazidoak agerian daude



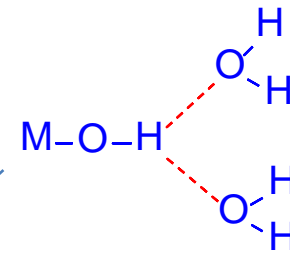
$\text{pK}_a=2.16,$



$\text{pK}_a= 1,51$



$\text{pK}_a= 0,76$



- **$\text{OH}^-$  talde gutxiago** izanez gero solbatazioa ere txikiagoa izango da eta **dauden  $\text{OH}^-$  taldeen polaritatea handitzen da, azidotasuna handituz**
- Are gehiago, efektu honek protoi azido gutxi izateak konpensatzen du

## 1.3. Oxoazidoak.Azidotasunaren ekarpenak

Konposatu hauen azidotasunean lau ekarpen bereizgarriak ditugu

1.3.1. atomo zentralaren eragina

- . Elektronegatibitatea
- . Oxidazio-egoera

1.3.2. hidroxilo taldeen eragina

1.3.3. oxo taldeen eragina

1.3.4. molekulen estereokimika

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasauna

## 1.3.3. oxo taldeen eragina

Kontuan hartzeko...

- Oxigeno atomoaren “elektroi-hartzaile” bezalak propietateak
- **O atomoak elektroiak erakartzen ditu eta ondorioz O-H lotura ahultzen dute**
- Hidrogenioia errazago askatzen da
- Edozein oxoazidoaren segidarako, O-kopurua zenbat eta handiagoa izan orduan eta azidotasaun handiagoa izango da
- $\text{HClO}_4$  -  $\text{HClO}_3$  -  $\text{HClO}_2$  -  $\text{HClO}$   
 $\text{H}_2\text{SO}_4$  -  $\text{H}_2\text{SO}_3$   
 $\text{HNO}_3$  -  $\text{HNO}_2$

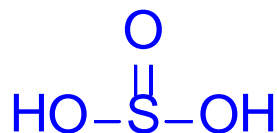




# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

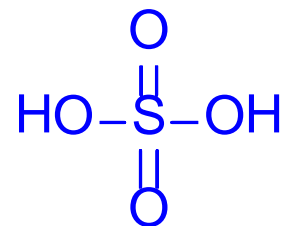
## 1.3.3: oxo taldeen eragina

$\text{H}_2\text{SO}_4$  molekula oso azido sendoa den bitartean,  $\text{H}_2\text{SO}_3$  espeziea ahulagoa da.



$\text{pK}_a$

1,81



-2,00



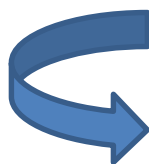
Zergatik?

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.3: oxo taldeen eragina

### *1. Faktorea: Elektronegabitatea edo elektroihartzailearen propietatea*

- Oxigeno atomoak oso elektronegatiboak direnez, **zenbat eta oxo talde gehiago** egon, **atomo zentralak** jasaten duen **karga partzial positiboa** hainbat eta **handiagoa** da
- Horren ondorioz,  $S^{+\delta}\dots O^{-\delta} \dots H^{+\delta}$  loturetako karga partziala handiagoa  $\implies$  **loturak polarragoak**  $\implies$  H atomoak azidoagoak da



**AZIDOTASUN HANDIAGOA**

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.3: oxo taldeen eragina

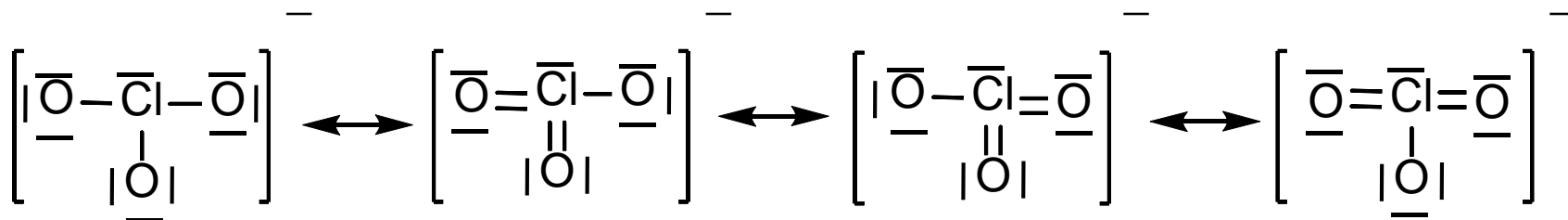
### 2. Faktorea : Karga-deslekupena

- Anioiaren karga negatiboaren deslekupenak egonkortasuna areagotzen du
- Afinitate protonikoak gutxitu egiten du



AZIDOTASUN HANDIAGOA

$=O \uparrow \longrightarrow$  karga deslekupena  $\longrightarrow K_a \uparrow$



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.3: oxo taldeen eragina

### *LABURBILDUZ....*

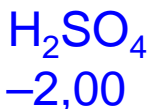
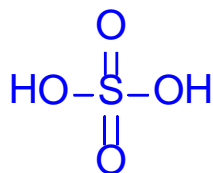
- Atomo zentralaren elektronegatibitatea eta azidotasuna zuzenki proportzionalak dira
- OH<sup>-</sup> taldearen kopurua eta azidotasuna alderantzizko proportzionalak dira
- =O taldearen kopurua eta azidotasuna zuzenki proportzionalak dira

- =O taldeak ↑
  - OH taldeak ↓
  - Elektronegatibitatea ↑
  - Oxidazio-egoera ↑
- }  $K_a$  ↑

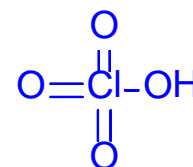
# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.3: hainbat faktoreen aldirerako eragina

$\text{H}_2\text{SO}_4$  eta  $\text{HClO}_4$  molekulek oxigeno - atomo kopuru bera dute, baina azido perklorikoa azkoz sendoagoa da



$\text{pK}_a$



- Cl atomoaren elektronegativitatea eta O.E. S-arena baino handiagoa da
- Oxo-taldearen kopuru handiagoa
- OH-kopuru txikiagoa



Faktore guztiak batera eragina egiten dute azidotasuna  
oso altua **efektu kooperatiboagatik**  $\longrightarrow$

## 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

### 1.3.4: Estereokimika. Paulingen arauak

- Oxoazido baten formula orokorra abiatuta



- Existitzen dira bi arau enpirikoak “x” eta “y” balioak azidoen pK<sub>a</sub>-rekin erlazionatzeko

1. Oxoazido neutro batean:  $\text{pK}_a \approx 8 - 5x$

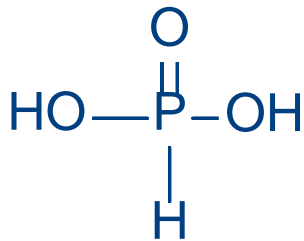
2. Azido protoianitzekoetan: pK<sub>a</sub> 5 unitatetan handitzen da galtzen den protoi bakoitzeagatik

- Orokorrean **x handitzean  $\Rightarrow$  indar azidoa handitzen da**  
**y handitzean  $\Rightarrow$  indar azidoa gutxitzen da**

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.4: Estereokimika. Paulingen arauak

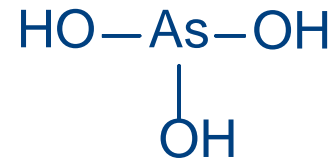
Demagun  $\text{H}_3\text{PO}_3$  eta  $\text{H}_3\text{AsO}_3$



$$x = 1, y = 2$$

$\text{pK}_a$

1,5



$$x = 0, y = 3$$

9,2

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.4: Estereokimika. Paulingen arauak

Formula orokorra  $XO_x(OH)_y$

1. Oxoazido neutro batean :  $pK_a \approx 8 - 5x$

$X = 0, pK = 8$	pK	$X = 1, pK = 3$	pK	$X = 2, pK = -2$	pK	$X = 3, pK = -7$	pK
Cl(OH)	7,2	OC(OH) <sub>2</sub>	3,6	O <sub>2</sub> Cl(OH)	-1,0	O <sub>3</sub> Cl(OH)	-10
Te(OH) <sub>6</sub>	7,8	OCi(OH)	2,0	O <sub>2</sub> N(OH)	-1,4		
B(OH) <sub>3</sub>	9,2	Oi(OH) <sub>5</sub>	1,6	O <sub>2</sub> S(OH) <sub>2</sub>	-2,0		
Si(OH) <sub>4</sub>	10,0	OP(OH) <sub>3</sub>	2,1				
		OHP(OH)	1,5				
		OSe(OH)	2,6				
		OAs(OH) <sub>3</sub>	2,3				



## 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

### 1.3.4: Estereokimika. Paulingen arauak

Formula orokorra  $O_xX(OH)_y$

2. Azido protoianitzekoetan: pKa 5 unitatetan handitzen da galtzen den protoi bakoitzeagatik

	pK <sub>1</sub>	pK <sub>2</sub>	pK <sub>3</sub>		pK <sub>1</sub>	pK <sub>2</sub>		pK <sub>1</sub>	pK <sub>2</sub>
Te(OH) <sub>6</sub>	7,8	11,2		OSe(OH) <sub>2</sub>	2,6	8,0	O <sub>2</sub> S(OH) <sub>2</sub>	-2,0	1,9
OP(OH) <sub>3</sub>	2,1	7,4	12,7	OP(OH) <sub>2</sub> H	1,8	6,6			
OAs(OH) <sub>3</sub>	2,3	6,9	11,5	OI(OH) <sub>5</sub>	1,6	7,0			

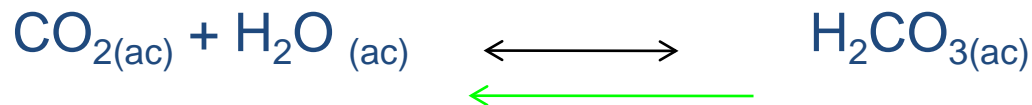
# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.4: Estereokimika. Paulingen arauak

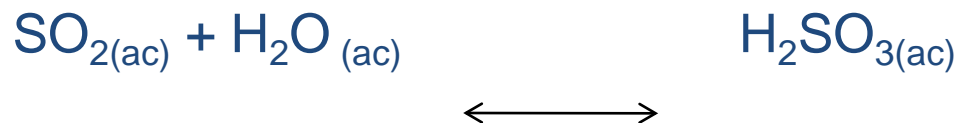
### Pauling-arauak betegabeak

- Egiturazko arazoekin erlazionatzen dira

- $\text{H}_2\text{CO}_3$ ,  $K \sim 1,7 \cdot 10^{-3}$



- $\text{H}_2\text{SO}_3$   $K < 10^{-9}$



Ácido	pK <sub>a</sub> de Pauling	pK <sub>a</sub> experimental
$\text{H}_2\text{CO}_3$	3	6,4
$\text{H}_2\text{SO}_3$	3	1,8

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.4: estereokimika. Ricciren formula

- Lortu zuen honako erlazio enpirikoa

$$pK_a = 8 - 9m + 4n$$

non,

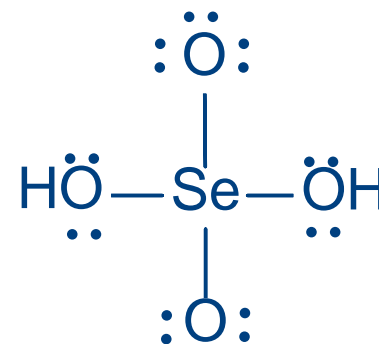
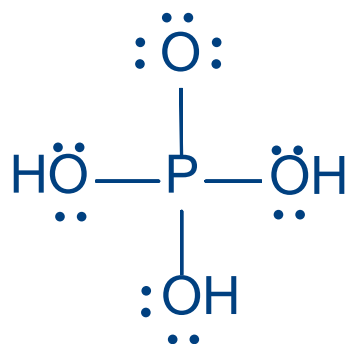
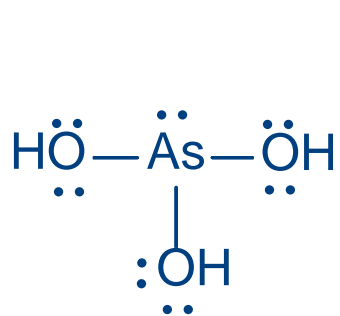
m = metalaren karga formala

n = O ez hidrogenatuen kopurua

- Lortzen den emaitzak ez dira Paulingenak bezain fidagarriak

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.3.4: Estereokimika. Ricciren formula



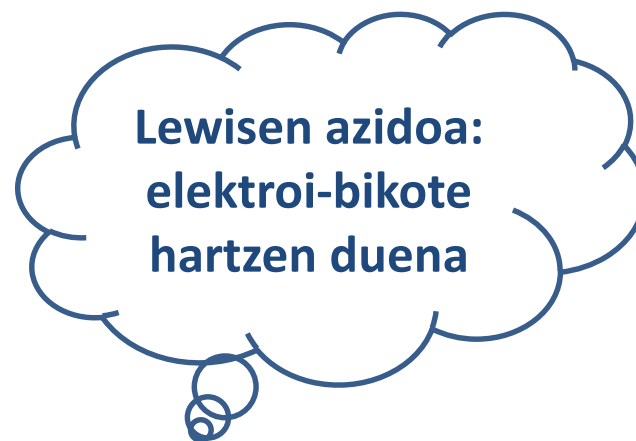
Azidoa	m	n	pK(exp.)	pK(cal.)
$\text{H}_3\text{AsO}_3$	$5-2-3 = 0$	0	9,23	8
$\text{H}_3\text{PO}_4$	$5-0-4 = 1$	1	2,12	3
$\text{H}_2\text{SeO}_4$	$6-0-4 = 2$	2	-2,00	-2

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.4: oxidoak

Uretan disolbagarriak diren oxidoak bertan erreakzionatzen dira hurrengo espezie hauek emanaz

- . hidroxidoak,  $X(OH)_n$
- . oxoazidoak,  $XO_x(OH)_y$
  
- . Bereizten dira
  - . Oxido basikoak
  - . Oxido azidoak
  - . Oxido anfoteroak



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.4: oxidoak

### . Oxido basikoak

- OH<sup>-</sup> taldea sorrarazten dutenak
- Eskuarki metalenak dira



### . Oxido azidoak

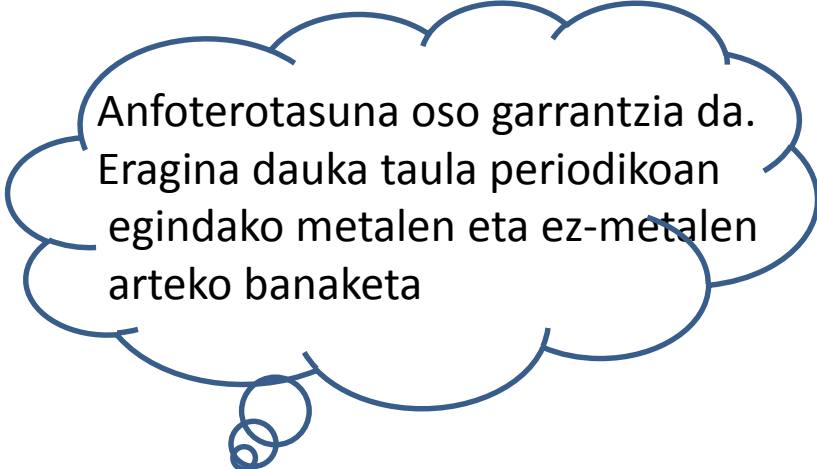
- Oxoazidoak sorrarazten dituztenak
- Eskuarki ez-metalenak eta erdimetalenak dira



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.4: oxidoak

- . Oxido anfoteroak
  - . Portaera azidoa baseekiko
  - . Portaera basikoa azidoekiko



Anfoterotasuna oso garrantzia da. Eragina dauka taula periodikoan egindako metalen eta ez-metalen arteko banaketa



- . Talde honetakoak: Al-Ga-Ge-In-Sn-Pb-As-Sb-Bi

# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.4: oxidoak

- . Ez da existitzen arau orokorra izaera anfoteroa aurreratzeko
- . Eskuarki trantsizio-metalezko oxidoetarako betetzen da:

Oxidazio-egoera handia dutenak: azidoak

Erdi-mailako oxidazio-egoera dutenak: neutroak

Oxidazio-egoera baxuena dutenak: basikoak

$Mn^{7+}$	$Mn^{6+}$	$Mn^{4+}$	$Mn^{3+}$	$Mn^{2+}$
Azidoak		Anfoteroak		Basikoak



# 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

## 1.4: oxidoak

																			18
1	2												13	14	15	16	17		He
Li	Be												B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl		Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As*	Se	Br		Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb*	Te	I		Xe	
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi*	Po	At		Rn	

azido
  anfotero
  basiko
  ezezaguna

As, Sb eta Bi\*: As<sup>III</sup>, Sb<sup>III</sup>, Bi<sup>III</sup>: anfoteroak; As<sup>V</sup>, Sb<sup>V</sup>, Bi<sup>V</sup>: azidoak

# AURKIBIDEA

## 1. Bronsted-Lowryren azidotasauna

1.1. ioi metalikoak

1.2. hidruro bitarrak

1.3. oxoazidoak

1.4. oxidoak

## 2. Lewisen azidotasauna

2.1. "p" blokeko Lewisen azidotasauna

2.2. katioi metalikoen Lewisen azidotasauna

## 3. Pearson-irizpideak (ABDB)

## 2.Lewisen azidotasuna

### . Gogoratu...

- . Lewisen azidoa:elektroi-bikotea onartzen duena
- . Lewisen base: elektroi-bikotea ematen duena

### - Lewisen azidotasuna areagotzen da:

- . Atomo zentralaren ordezkatzailerak gero eta elektronegatiboak direnean
- . Atomo zentralaren karga dentsitatea txikiagoa izango delako
- . Bikote elektronikoa errazago onar dezake, katioia azidoagoa delako

### - Boro trihaluroak dituzten aplikazioagatik Lewisen azidorik garrantzitsuen artean daude

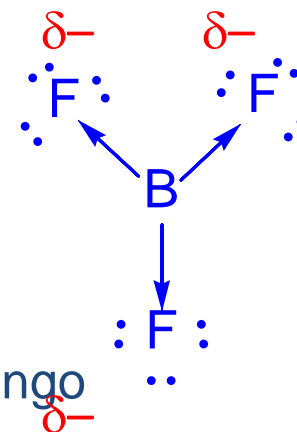
## 2.1. “p” blokeko Lewisen azidotasuna

- Boro halogenuroak aztertuta:
- Azidotasuna ordena honi jarraituz handitzen da



Elektronegatibitatea: eskumalderantz gutxitzen da

- Azidotasuna eskumalderantz gutxitzea esperagarria iazango litzateke
- Datu esperimentalak: kontrakoa gertatzen da
- KONTRAESANA?

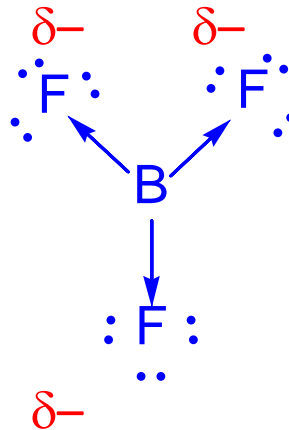


## 2.1. "p" blokeko Lewisen azidotasuna

- Fluor atomoa
  - Halogenorik txikiena da
  - Halogenoen elektronegatiboagoa
  - Bere dentsitate elektronikoa handiagoa da

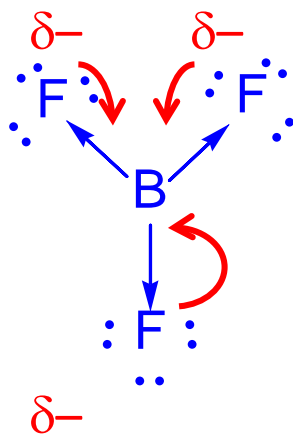


Boro atomoak karga-dentsitate positibo txikiagoa du



## 2.1. “p” blokeko Lewisen azidotasauna

- Boro atomoak  $p_z$  orbitala libre du eta egokia da halogenoen dentsitate elektroniko negatiboa onartzeko
- Fluor atomoak bere bikote bakartia boro atomoari ematen dio, horren orbital hutsan kokatuz
- B–F lotura lotura bikoitza izaera dauka, neurri batean:  $\pi$  lotura
- Boro atomoaren dentsitate elektroniko negatiboa handitzen da, ez da hain positiboa
- Bere izaera azidoa gutxitu egiten da
- Aurrekoa **Atzerako lotura faktorea** da, boro haluroen azidotasauna erabiltzen duguna



## 2.1. “p” blokeko Lewisen azidotasauna

- Gauza bera gertatzen da beste halogenuroekin baina elektronegatibitatea txikiagoa izanik ez du horrenbeste eraginik
- $\pi$  lotura ez da hain nabaria eta indar azidoa neurri txikiagotan gutxitzen da
- Fluor atomoa elektronegatiboagoa izanda, p motako interakzio hau handiagoa izango da eta ondorioz fluorren kasuan haluroa azidotasan txikieneko da
- Ebidentzia: haluro guztietan, atomoen arteko distantziak, B-X loturako esperagarriak baino txikiagoak dira
- Aztertzen badugu Silizioaren halogenuroak???

$\text{SiF}_4 > \text{SiCl}_4 > \text{SiBr}_4 > \text{SiI}_4$  azidotasanaren ordena esperagarria da

## 2.1. “p” blokeko Lewisen azidotasuna

Praktikatzeko...

Ordenatu hurrengo espezie hauek azidotasun-ordenaren (ordena hazkorrean):  $\text{BF}_3$ ,  $\text{BH}_3$  edo  $\text{BCl}_3$

Ordenatu behar dira boro atomoarekin lotuta dagoen atomoaren elektronegatibitatearen arabera:





## 2.2. “katioi metalikoen Lewisen azidotasuna

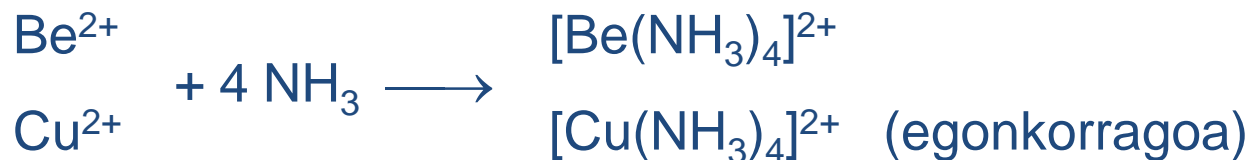
. Bi katioi azido ditugu:  $\text{Be}^{2+}$  eta  $\text{Cu}^{2+}$

. Nola erreakzionatzen dira  $\text{F}^-$  baseren aurrean ?



$\text{Be}^{2+}$  ioia  $\text{Cu}^{2+}$  ioia baino azidoagoa dela ematen du Indar gehiagoz  $\text{F}^-$  aseari lotuta dago

. Nola erreakzionatzen dira  $\text{NH}_3$  baseren aurrean ?



$\text{Cu}^{2+}$  ioia  $\text{Be}^{2+}$  ioia baino azidoagoa dela ematen du Indar gehiagoz  $\text{NH}_3$  baseari lotuta dago

## 2.2. “katioi metalikoen Lewisen azidotasauna

- . Nola azaldu portaera ezberdina?
- .  $\text{Cu}^{2+}$  ioia handiagoa da eta estekatzaille handiagoekin konplexu egonkorragoak eratzen ditu
- .  $\text{Be}^{+}$  ioia tamaina txikikoa da eta estekatzaille txikiagorekin konplexu egonkorragoak eratzen ditu
- . Katioi metalikoen azidotasunak basearen menpekotasuna du
- . Formazio-konstanteen baloreak isladatzen dute azidotasun-indarra

# AURKIBIDEA

## 1. Bronsted-Lowryren azidotasuna

1.1. ioi metalikoak

1.2. hidruro bitarrak

1.3. oxoazidoak

1.4. oxidoak

## 2. Lewisen azidotasuna

2.1. "p" blokeko Lewisen azidotasuna

2.2. katioi metalikoen Lewisen azidotasuna

## 3. Pearson-irizpideak (ABDB)

### 3. Pearson-irizpideak(ABDB)

↶	⊖	⊙	⊕	▽	⊖	⊖	SM	♁	♂	♁	♀	☾	♂	♁	▽
⊖	♂	♂	♁	⊕	⊕	⊕	⊖	⊖	⊙	☾	♂	♁	♂	♁	▽
⊖	♁	♀	⊖	⊙	⊙	⊙	⊕	♂	☾	♀	PC	♀	♂	♂	⊖
▽	♀	♁	⊖	⊖	⊖	⊖	♀	♁							
SM	☾	♂	▽		♁		♁	♁	♀						
	♂	☾	♂		♁		☾	♁							
			♀					♁	♁						
			☾					♂							
	⊙							⊙							

Zutabe bakoitzaren hasierako sustantzia behean daudenekin konbina daiteke

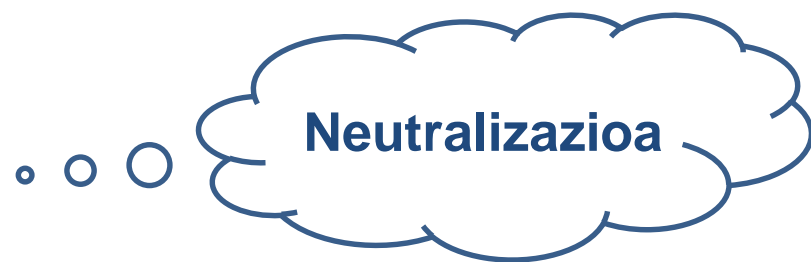
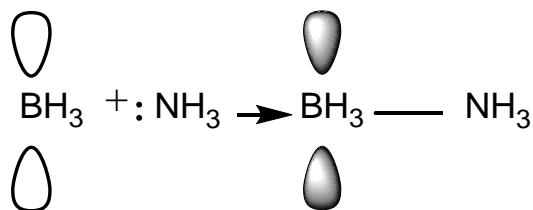
- |                       |                           |                        |                               |
|-----------------------|---------------------------|------------------------|-------------------------------|
| ↶ Esprits acides.     | ▽ Terre absorbante.       | ♁ Cuivre.              | ♁ Soufre mineral. [Principe.  |
| ⊖ Acide du sel marin. | ♁ Substances metalliques. | ♂ Fer.                 | ♁ Principe huileux ou Soufre  |
| ⊙ Acide nitreux.      | ♂ Mercure.                | ♁ Plomb.               | ♁ Esprit de vinaigre.         |
| ⊕ Acide vitriolique.  | ♁ Regule d'Antimoine.     | ♁ Etain.               | ▽ Eau.                        |
| ⊖ Sel alcali fixe.    | ⊙ Or.                     | ♂ Zinc                 | ⊖ Sel. [dents                 |
| ⊖ Sel alcali volatil. | ⊙ Argent.                 | PC Pierre Calaminaire. | ▽ Esprit de vin et Esprits ar |

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

- Koordinazio-Kimika arloan erabilia
- Estekatzaile batzuk nahiago dute hainbat ioi metalikoak konplexu egonkorragoak eratzeko
- Metodo enpirikoa da
- Datu mineralografikoek egiaztatzen dute
- R. G. Pearsonek (1963) “gogorra” eta “biguna” proposatu zituen

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

- . Lewisen arabera azido baten indarra osatutako konplexuaren eraketa konstanteak zehazten du:  $A \leftarrow :B$



- . B erreferentziako basea da
- . Hamaika base izanik ezin da eskala unibertsal bat zehaztu
- . Arau kualitatiboak garatuak ditugu, eta hauei esker base zehatz batekiko azido baten afinitatea aurreesan daiteke
- . Arau hauen oinarria azidoen sailkapenean datza

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

Azido gogorrak

Halogenuro ioiekin lotzen direnak indar-orden honi jarraituz



Azido ahulak

Halogenuro ioiekin osatzen den konplexua indar-orden honi jarraituz



### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

#### Elementu gogorra

Tamaina txikia

Karga altua

Polarizabilitate baxua

#### Elementu ahula

Bolumen handikoa

Polarizabilitate altukoa

- . Pearson –araua ez da teoria bat
- . Aduktoen egonkortasuna erlatiboari buruzko informazioa
- . “*ABDB kontzeptua*” kuantitatiboa ez izan arren lagungarria da ioi konplexuen egonkortasuna azaltzeko
- . Ez da existitzen bereizketa argia espezieen artean
- . Erdi-mailako espezieak definitzen dira





### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

Azidoen sailkapena

#### Azido gogorrak

Katioi polarizatzaileen artean daude ( $q \uparrow$  eta  $r \downarrow$ )

$\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Be}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{In}^{3+}$ ,  $\text{Si}^{4+}$ ,  $\text{Sc}^{3+}$ ,  $\text{Ti}^{4+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{SO}_3$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{AlCl}_3$

#### Ertaineko azidotasunako katioak

$\text{Sn}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Sb}^{3+}$ ,  $\text{Bi}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$

#### Azido ahulak

Katioi ez-polarizatzaileen artean daude ( $r \uparrow$  eta  $q \downarrow$ )

$\text{Tl}^+$ ,  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{BH}_3$

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

#### Base gogorrak

Baseek azido gogorrekiko afinitate handia izanez gero, gogorrak ere deritze,  $F^-$  kasu.

Ez dira erraz polarizatzen

Atomo-emaile txikia dute eta elektronegatibitate altukoa dira

N, O, F

#### Base ahulak

Elektronegatibitate txikikoa eta tamaina handikoa

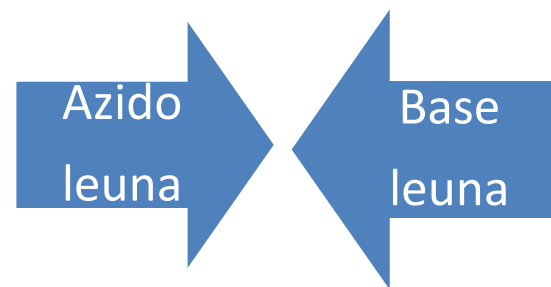
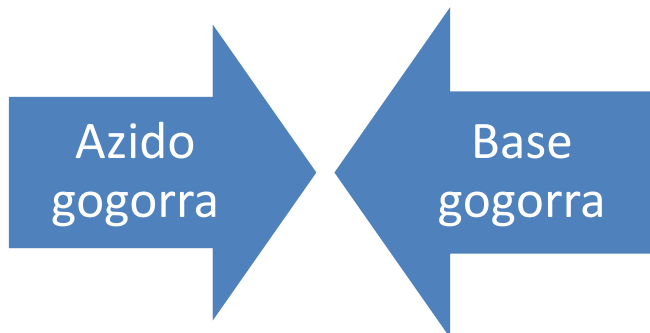
Oso polarizagarriak

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

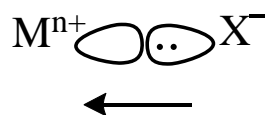
Ondorioz esan ahal da

*“Azido gogorrak base gogorrekiko afinitatea dute eta beraiekin lotzeko joera aurkezten dute”*

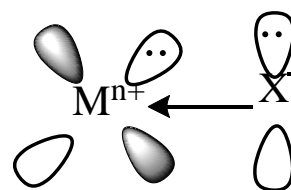
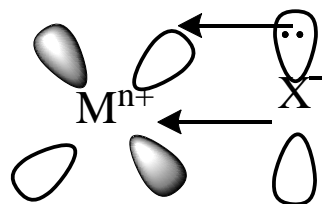
*“Azido ahulak base ahulekiko afinitatea dute eta beraiekin lotzeko joera aurkezten dute”*



### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)



Lotura  $\sigma$



$\pi$ -interakzio egonkortzailea     $\pi$ -interakzio desegonkortzailea

$M^{n+}$  : azido gogorra  
 $X^-$  : base gogorra

$M^{n+}$  : azido ahula  
 $X^-$  : base gogorra

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

Nola erabili “gogortasun “ kontzeptua loturan?

Loturaren eredu ioniko-kobalentea

- . Base gogorrek gutxi polarizatzen dira eta osatzen dituzten loturak nagusiki elektrostatikoak dira  
Lotura hauek sendoagoak izango dira azido gogorrekin burutzean
- . Azido eta base ahulak hobeto polarizatzen dira eta haien arteko elkarrekintzak ekarpen kobalente nagusi izango du

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

Nola erabili “gogortasun” kontzeptua loturan?

AZIDO GOGORRA-BASE GOGORRA

Loturak ionikoak eta intentsitate handikoak

AZIDO AHULA-BASE AHULA

London indarrak eta/edo kobalenteak

### 3. Pearson – irizpideak (ABDB)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H															<b>BASE ERTAINAK</b>		He
Li	Be														<b>BASE GOGORRAK</b>		Ne
Na	Mg																Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Ln	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi			Rn
Fr	Ra	Ac															

**AZIDO GOGORRAK** (Red text, covering Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)

**AZIDO BIGUNAK** (Blue text, covering Rh, Pd, Ag, Cd, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb)

**AZIDO ERTAINAK** (Red text, covering Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb)

**BASE ERTAINAK** (Green text, covering O, F)

**BASE GOGORRAK** (Light green text, covering O, F)

**BASE BIGUNAK** (Teal text, covering S, Cl)

**BASES +** (White text, covering As, Se, Br)

**BLANDAS** (White text, covering Te, I)

**Charge values:** +3 (Mn, Fe, Co, Ni, Rh, Pd, Ag, Cd, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb), +2 (Cu, Zn), +1 (Cu, Ag, Cd, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb), +4 (Pd, Ag, Cd, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb)



FARMAZIA FAKULTATEA  
KIMIKA EZORGANIKOAREN SAILA

## 08.GAIA

# KIMIKA BIOEZORGANIKOAREN OINARRIAK

Farmaziako gradua.1.kurtsoa  
Kimika Orokorra eta Ez-organikoa



# KIMIKA BIOEZORGANIKOAREN OINARRIAK

---

1. BIOEZORGANIKOA KONTESTUAN
2. BIO-ELEMENTUAK: EZAUGARRIAK,  
FUNTZIOAK ETA BIZITZARAKO MUGAK
3. NAHITAEZKO ELEMENTUEN BARNERATZEA  
SISTEMA BIOLOGIKOETAN

# KIMIKA BIOEZORGANIKOAREN OINARRIAK

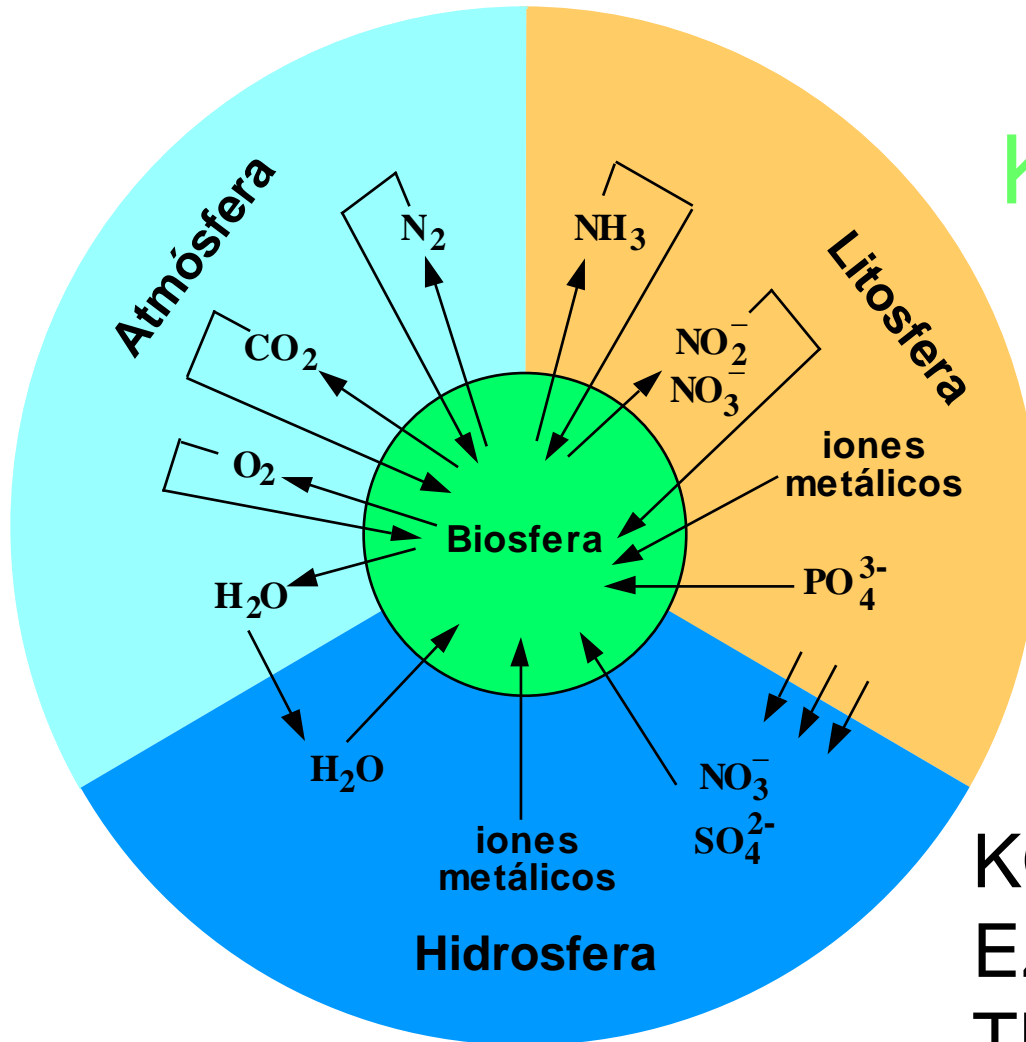
---

1. BIOEZORGANIKOA KONTESTUAN

2. BIO-ELEMENTUAK: EZAUGARRIAK, FUNTZIOAK  
ETA BIZITZARAKO MUGAK

3. NAHITAEZKO ELEMENTUEN BARNERATZEA  
SISTEMA BIOLOGIKOETAN

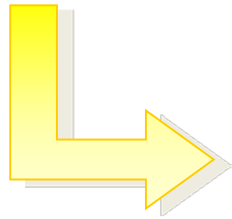
# BIO- EZORGANIKOA



KONTRAESANA?

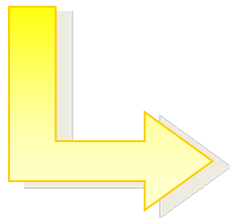
KONPOSATU  
EZORGANIKOEN  
TRUKEA EKOSFERAN

- Konposatu ezorganiko ugari dira nahitaezkoak bizitzarako
- loi metalikoak eta euren konplexuak entzima eta proteina askoren ko-faktoreak dira



### Bioezorganikoaren definizioa

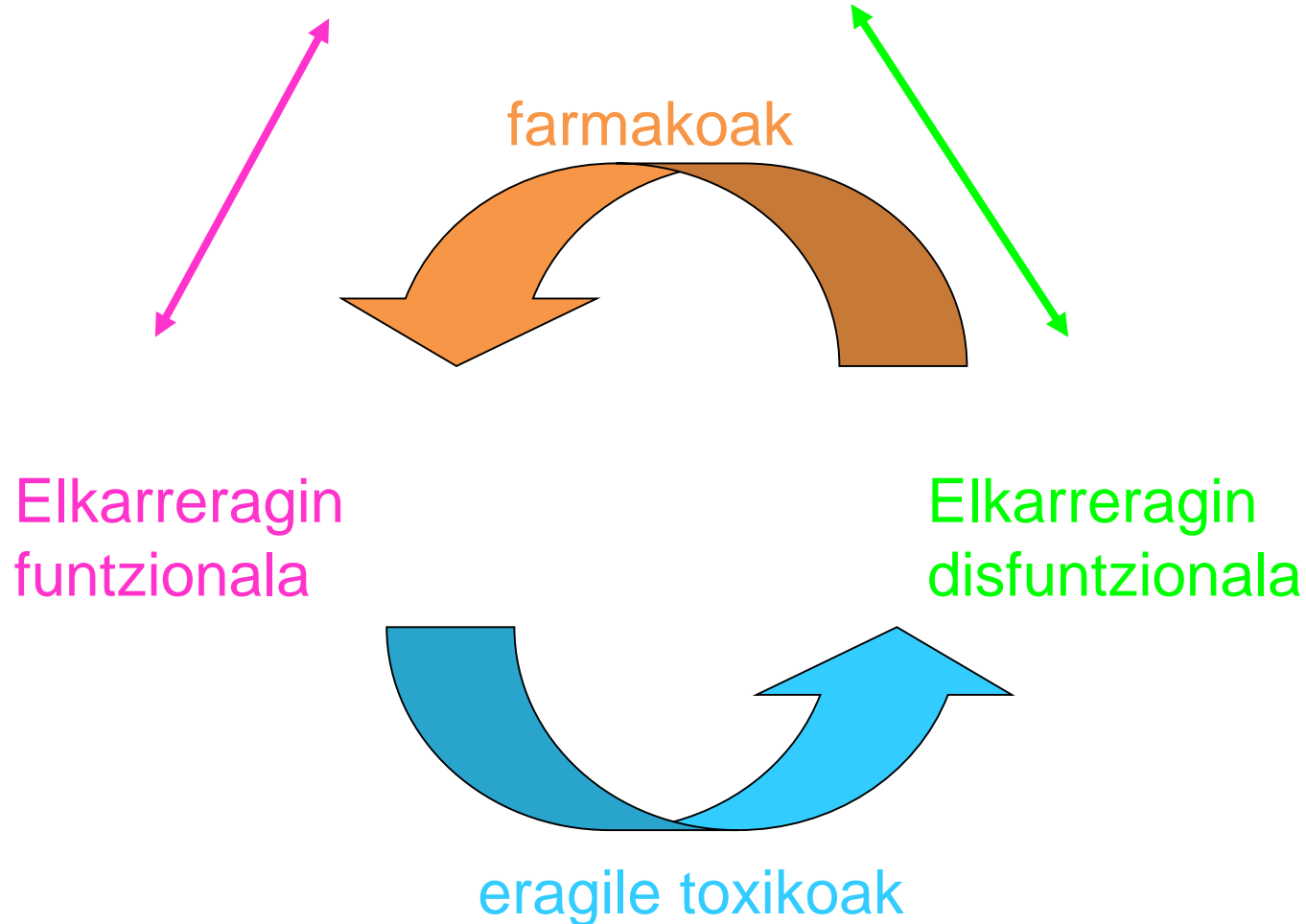
Elementu eta konposatu ez-organikoak dauzkaten sistema biologikoak hala nola euren eredu-sistemen arteko erlazioa aztertzen den zientzia zabala da



### Bioezorganikoaren arloak

Konposatu ezorganikoak dauzkaten sistema biologikoen egiturak, propietateak eta funtzioak aztertzea

# SISTEMA BIOLOGIKOEN ETA INGURUKOAREN ARTEKO ELKARRERAGINA



# Kimika bioezorganikoaren helburuak

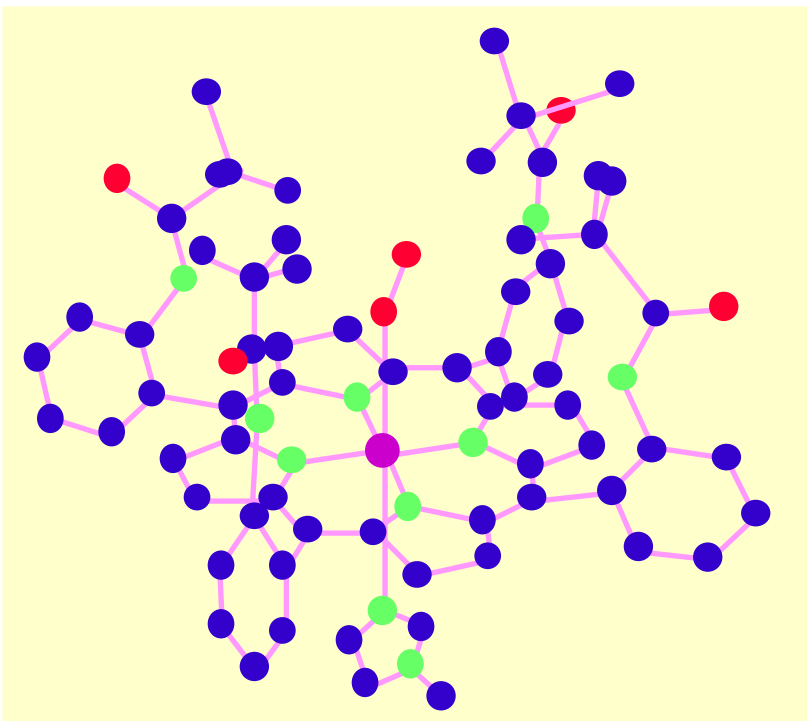
---

- Sistema biologikoak ulertu
- Ereduak garatu
- Ezaguerak aplikatu

# Eredu-sistemak

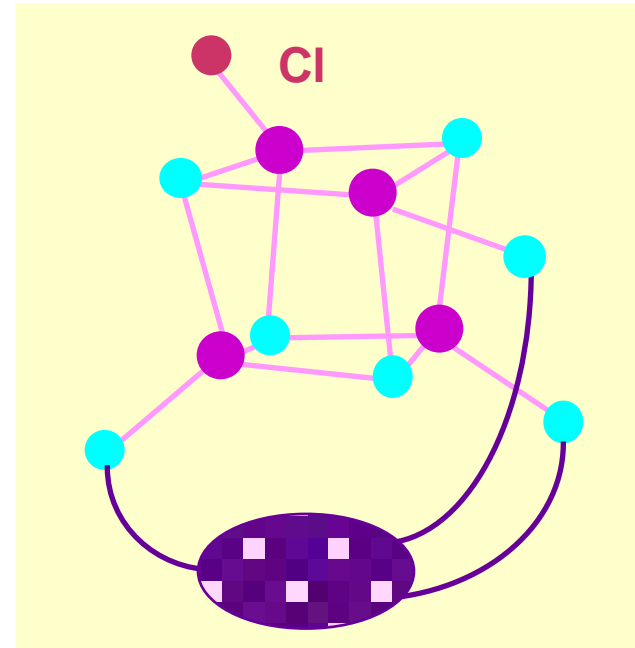
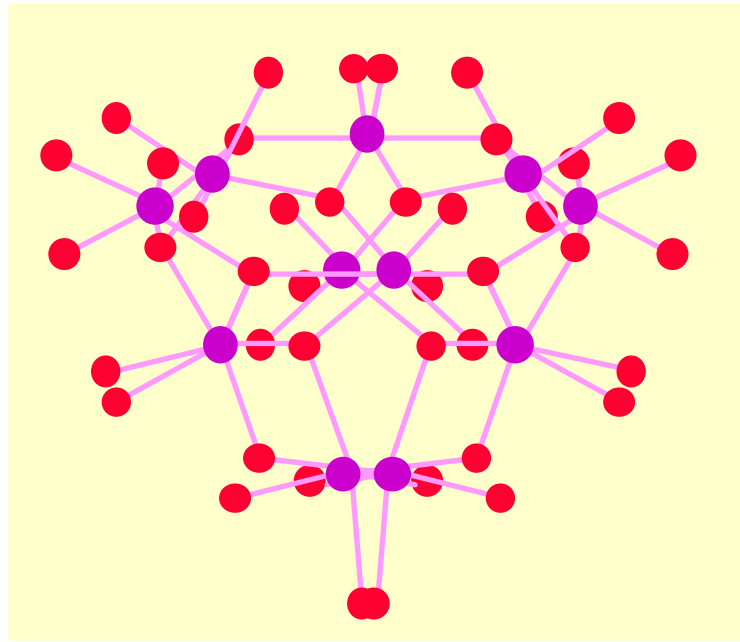


oxigenoaren garraioa



elektroien garraioa

# Burdinaren bilketa

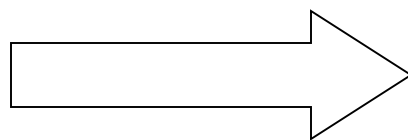


# Kimika bioezorganikoaren aplikazioak

---

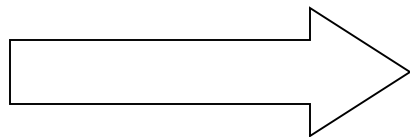
1.3

Medikuntz  
diagnosia



Radio-diagnosia  
bestelakoak

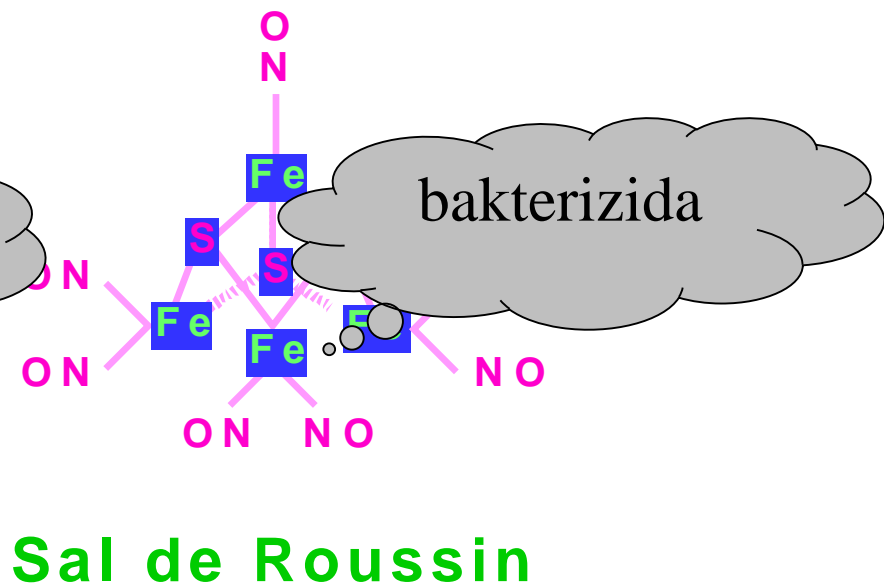
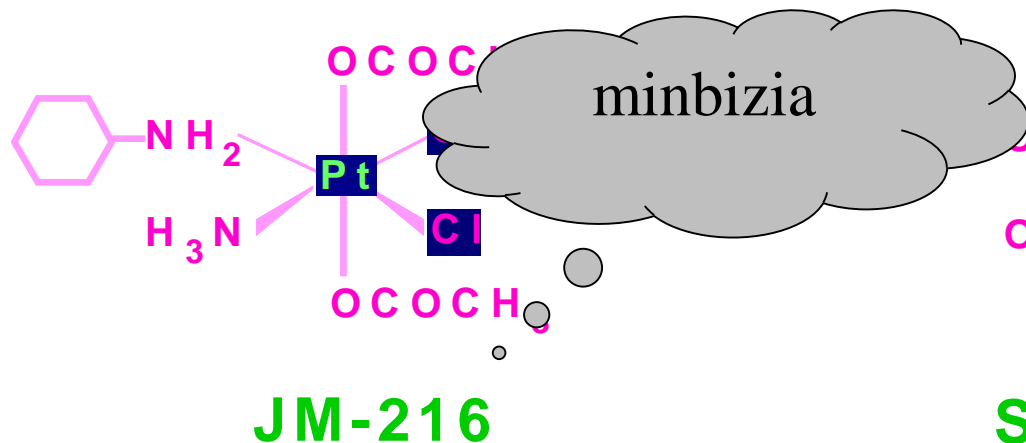
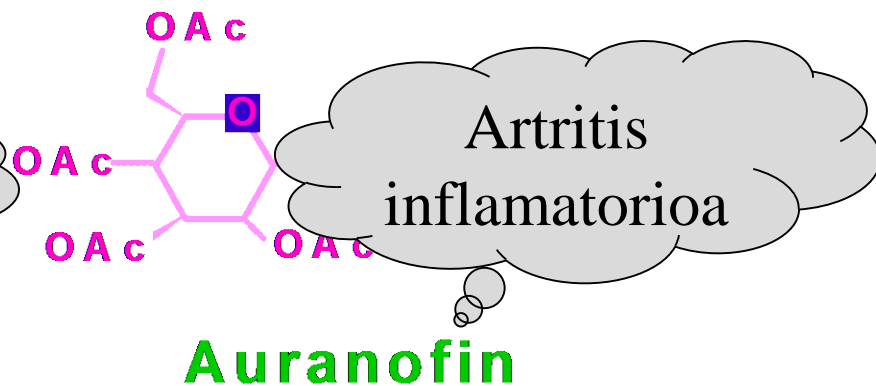
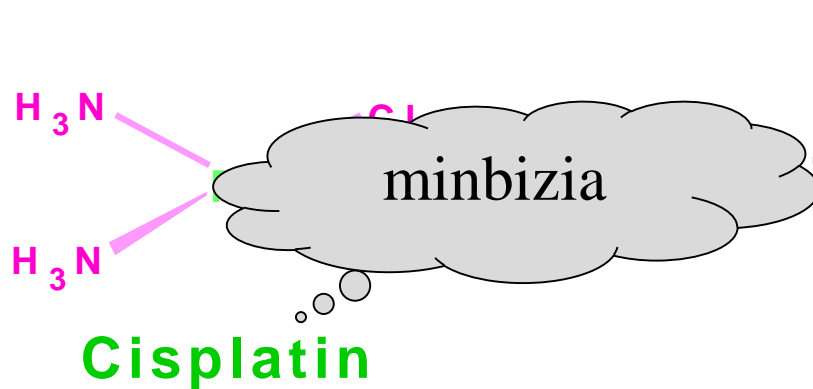
Terapia-  
tratamendua



onkologia  
buruko osasuna  
arthritis reumatoidea  
bestelakoak



# Farmako ezorganikoak zenbait adibide 1.3



## Minbiziaren aurkako farmakoak

---

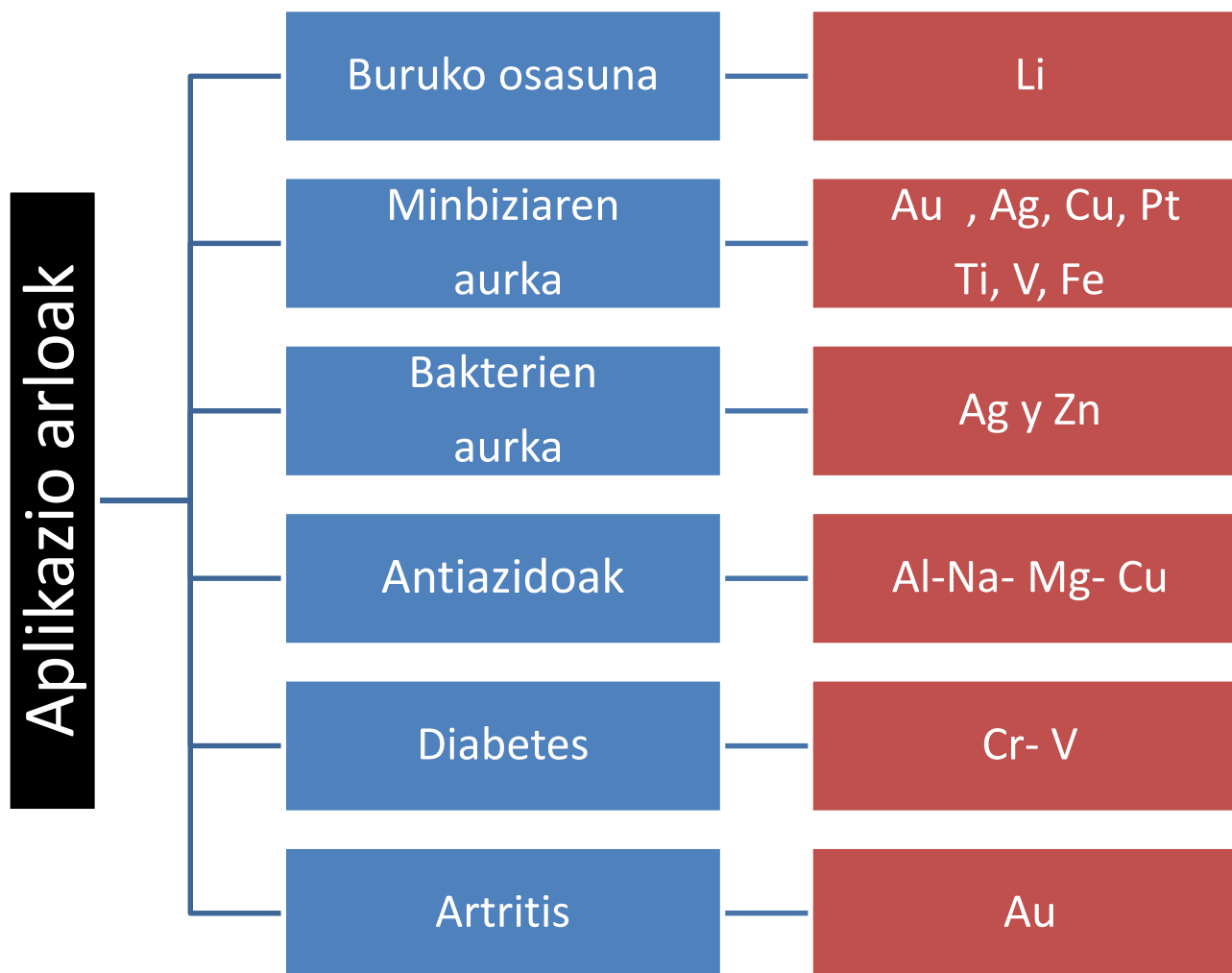
- . Pt-konposatuak , haluro eta aminekin
- . Metalozeno eta beraien haluroak (Ti, V, Fe)
- . fosfina metalikoak( Au, Ag Cu)
- . Besteak(Gd, Zn, Pd, Ru, Rh)

## Bakterien aurkako eta birusen aurkako eragileak(Zn)

- . azidoen aurkakoak (Al, Mg, Cu)
- . diabetesaren kontrakoak (V, Cr)
- . erredurak (Ag)

# Metal ezorganikoaren aplikazioak

1.3



# KIMIKA BIOEZORGANIKOAREN OINARRIAK

---

1. BIOEZORGANIKOA KONTESTUAN

2. BIO-ELEMENTUAK: EZAUGARRIAK, FUNTZIOAK  
ETA BIZITZARAKO MUGAK

3. NAHITAEZKO ELEMENTUEN BARNERATZEA  
SISTEMA BIOLOGIKOETAN

# •BIO-ELEMENTUAK: EZAUGARRIAK, FUNTZIOAK ETA ESPEZIEETAN DAUDEN MUGAK

---

## 2.1 • EZAUGARRIAK

Nahitaezkotasuna

Nahitaezko elementuen sailkapena

## 2.2 • FUNTZIO OROKORRAK

egituran, elektrokimikan, truke ionikoan, azido/base katalisian, erredox katalisian...

## 2.3 • ESPEZIEN MUGAK

ur-ingurunea : pH-a, erredukzio-potentziala, tenperatura

## Nahitaezkotasunaren kontzeptua

---

Nahitaezko elementu bat behar-beharrezkoa da bizitzak iraun dezan: alegia, bere gabeziak heriotza zein disfuntzioren bat sorrarazten du izaki bizidunean

Nahitaezko elementu baten ezaugarriak:

- espezie jakin bateko ale guztietan dago
- bere gabeziak dietan gaixotasuna, anormaltasun metabolikoak zein hazte-prozesuarenak sorrarazten ditu
- bere presentziak zuzentzen ditu anormaltasun horiek
- beste elementu batek ezin dezake erabat ordezkatu nahitaezko elementu baten funtzioa

## Nahitaezko elementuak:

## Nahitaezkoatasunaren kontzeptua

Nahitaezko elementu bat behar-beharrezkoa da bizitzak iraun dezan: alegia, bere gabeziak heriotza zein disfuntzioren bat sorrarazten du izaki bizidunean



Eboluzio-prozesuan suertatutako sekuentzia

## Nahitaezko elementuak:

## Nahitaezkotasunaren kontzeptua

---

### Bioelementuen sailkapena

- . Nagusiak

Egiturazkoak: H, C, N, O, P, S

Makromineralak: Na, K, Mg, Ca, Cl

- . Aztarna: Fe, Zn, Cu

- . Ultra-aztarna: Ez-metalak: F, Br, I, Se, Si, As, B  
metalak: Mn, Mo, Co, Cr, V, Ni,  
[Li, Cd, Sn, Pb]

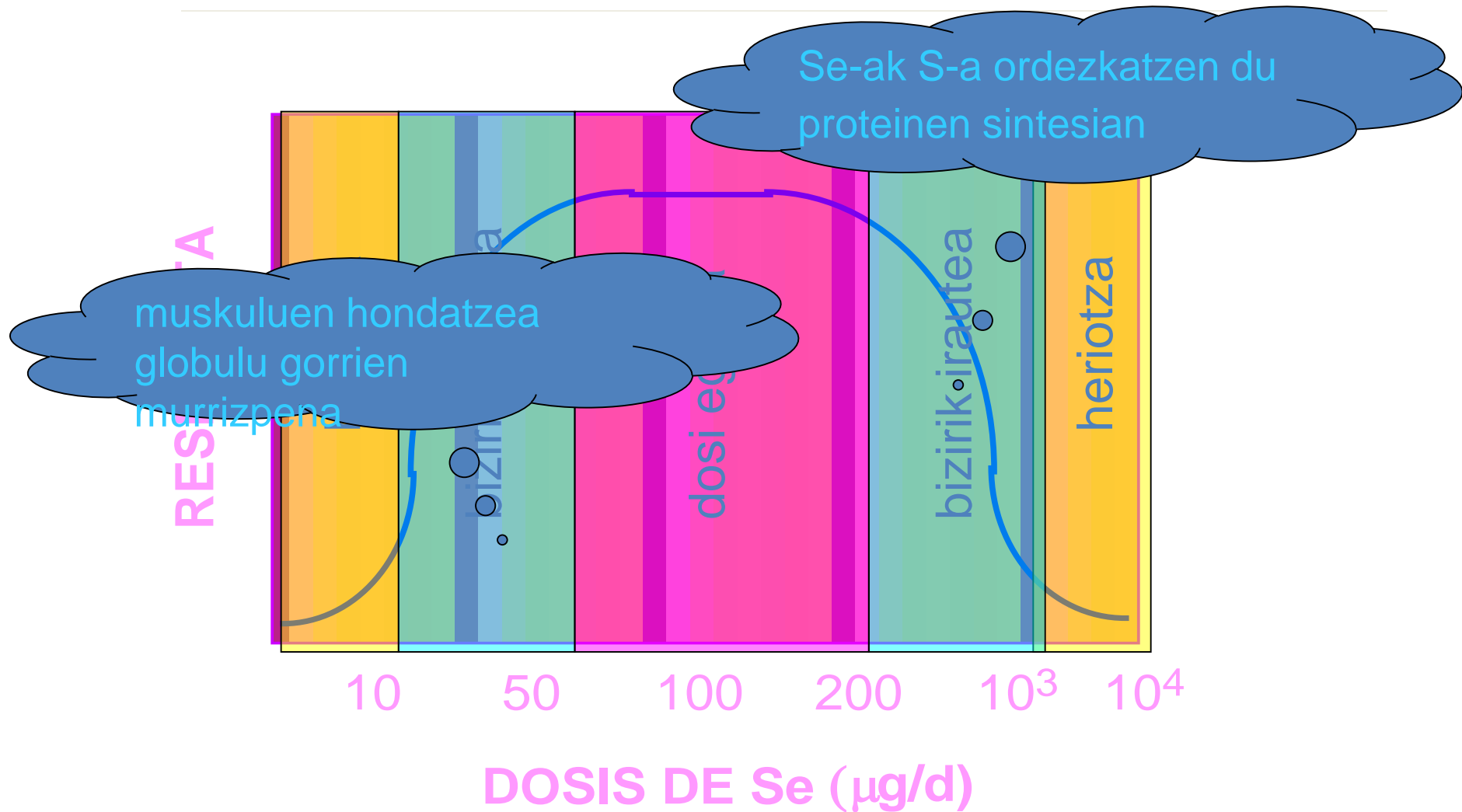




# Nahitaezko elementuak:

2.1

## Dosia-erantzuna




# Nahitaezko elementuak espezie biologikoetan

2.1

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H																	He	1
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	2
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	3
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	4
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	5
Cs	Ba	Ln	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	6
Fr	Ra	Ac																7

	Esenciales en todas las especies biol—gicas
	Esenciales para la mayor'a de las especies
	Esenciales para algunas especies
	Elementos con alguna funci—n biol—gica

# Nahitaezko elementuak espezie biologikoetan

2.1

~ 30 elementu baino ez dira nahitaezkoak

H, p blokeko **C, N, O, P, S, Cl** eta **Mg, K, Ca** metalak nahitaezkoak dira aztertutako espezie guztietan

**Na, B, Si** elementuak eta lehen trantsiziozko seriearen **Mn, Fe, Co, Ni, Cu** eta bigarrenaren **Mo** metalak espezie gehienentzat dira nahitaezkoak

Ondorioak:

1. Bioelementu gehienak arinak dira (ez dago lantandorik edo aktinidorik) ( $Z < 35$ )
2. 3., 4. eta 18. taldeetako elementurik ez dago nahitaezkoen artean

# Nahitaezko elementuak espezie biologikoetan

2.1

70 kg –ko persona baten elementuen masa totalak(batez bestean) \*

Estructurales		Macrominerales		Traza		Ultratraza	
O □	45,5 kg	Ca Δ	1,0 kg	Fe	4,2 g	I	30 mg
C □	12,6 kg	K Δ	140 g	Zn	2,3 g	V	20 mg
H □	7,0 kg	Na Δ	105 g	Si	1,4 g	Mn	20 mg
N □	2,1 kg	Cl Δ	105 g	F	0,8 g	Se	20 mg
P Δ	0,7 kg	Mg Δ	35 g	Br	0,2	Ni	10 mg
S Δ	0,17 kg			Cu	0,1	As	10 mg
						B	10 mg
						Cr	5 mg
						Mo	5 mg
						Co	3 mg

\* E. J. Baran, “Química Bioinorgánica”, McGraw-Hill, Madrid, 1995.

□ 97%

Δ = 99.9%

Gizakien gorputzaren nahitaezko elementuak

- . Oxigenozko bonbona bat, beste bat hidrogenozko eta nitrogenozko beste bat
- . Karbono eta Kaltzio kilogramo batzuk
- . Sufre, fosforoa, burdina eta magnesio gramoen bat
- . Beste 20 elementu kimiko-apur bat

Hau baino ez gara!!!!

# Nahitaezko elementuak gizakietan

2.1

Elementu nagusiak ( $\% > 0.01$ ): euren ugaritasun osoa (erlatiboa, %-tan) 70 kg-ko lagun batean (batez besteko balioak)\*.  $\%0.01 = 100\text{ppm}$

Egiturazko elementuak (kg)      Makromineralak (g)

O	45.5 (65)	Ca	1050 (1.5)
C	12.6 (18)	K	140 (0.20)
H	7 (10)	Na	105 (0.15)
N	2.1 (3)	Cl	105 (0.15)
P	0.70 (1)	Mg	35 (0.05)
S	0.17 (0.24)		

\* E. J. Baran, "Química Bioinorgánica", McGraw-Hill, Madrid, 1995

# Nahitaezko elementuak gizakietan

2.1

Elementu aztarnak (100 > ppm > 1): euren ugaritasun osoa g-  
tan (erlatiboa, ppm-tan) 70 kg-ko lagun batean (batez besteko  
balioak)\*

Fe	4.2 (60.0)
Zn	2.3 (32.8)
Si	1.4 (20.0)
F	0.8 (11.4)
Br	0.2 (2.8)
Cu	0.1 (1.4)

---

\* E. J. Baran, "Química Bioinorgánica", McGraw-Hill, Madrid, 1995

# Nahitaezko elementuak gizakietan

2.1

Elementu ultra-aztarnak ( $1 > \text{ppm}$ ): euren ugaritasun osoa mg-tan (erlatiboa ppm-tan) 70 kg-ko lagun batean (batez besteko balioak)\*

I	30 (0.42)	As	10 (0.14)
V	20 (0.28)	B	10 (0.14)
Mn	20 (0.28)	Cr	5 (0.07)
Se	20 (0.28)	Mo	5 (0.07)
Ni	10 (0.14)	Co	3 (0.04)

---

\* E. J. Baran, "Química Bioinorgánica", McGraw-Hill, Madrid, 1995



# Nahitaezko elementuak: gizakiok eta beste espezieak

2.1



## Nahitaezko elementuak: gizakiok eta beste espezieak

- Elementu nagusiak (ugarienak) gizakientzat zein bestelako izaki bizidunentzat dira nahitaezkoak.
- Gizakientzat aztarna moduan dauden sei elementuetatik lau (Fe, Cu, Zn eta Si) izaki gehienentzat dira nahitaezkoak.
- Are gehiago, gizakientzat ultra-aztarna moduan dauden sei elementu (Mn, Co, Ni eta Mo metalak eta B y Se ez metalak) izaki gehienentzat ere dira nahitaezkoak.

**Bioanizkoitasuna itzela izan arren, espezieen osagai nagusiak 20 bat elementu dira**

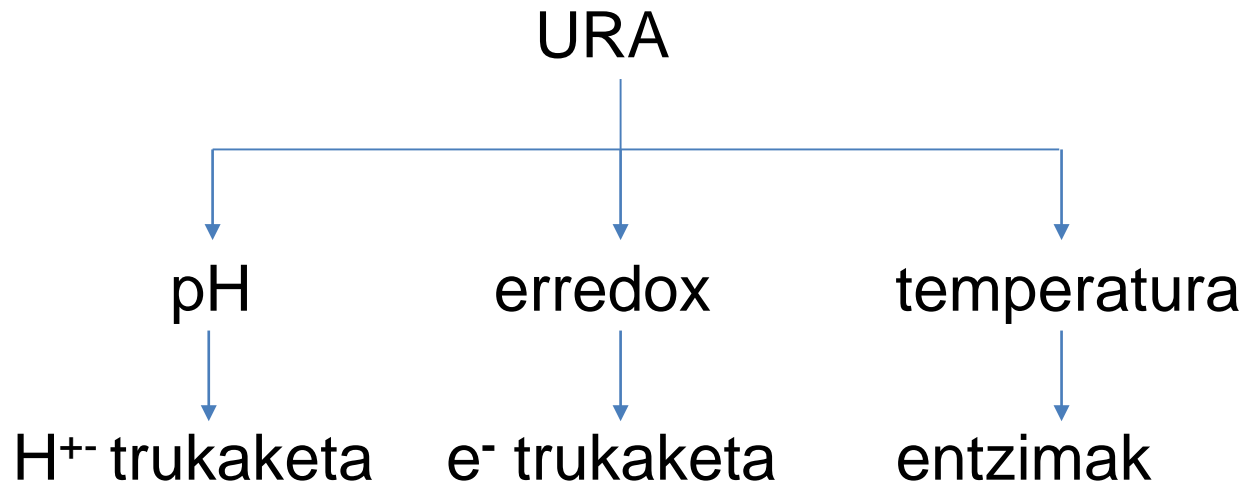
Propietate  
fisiko-kimikoak



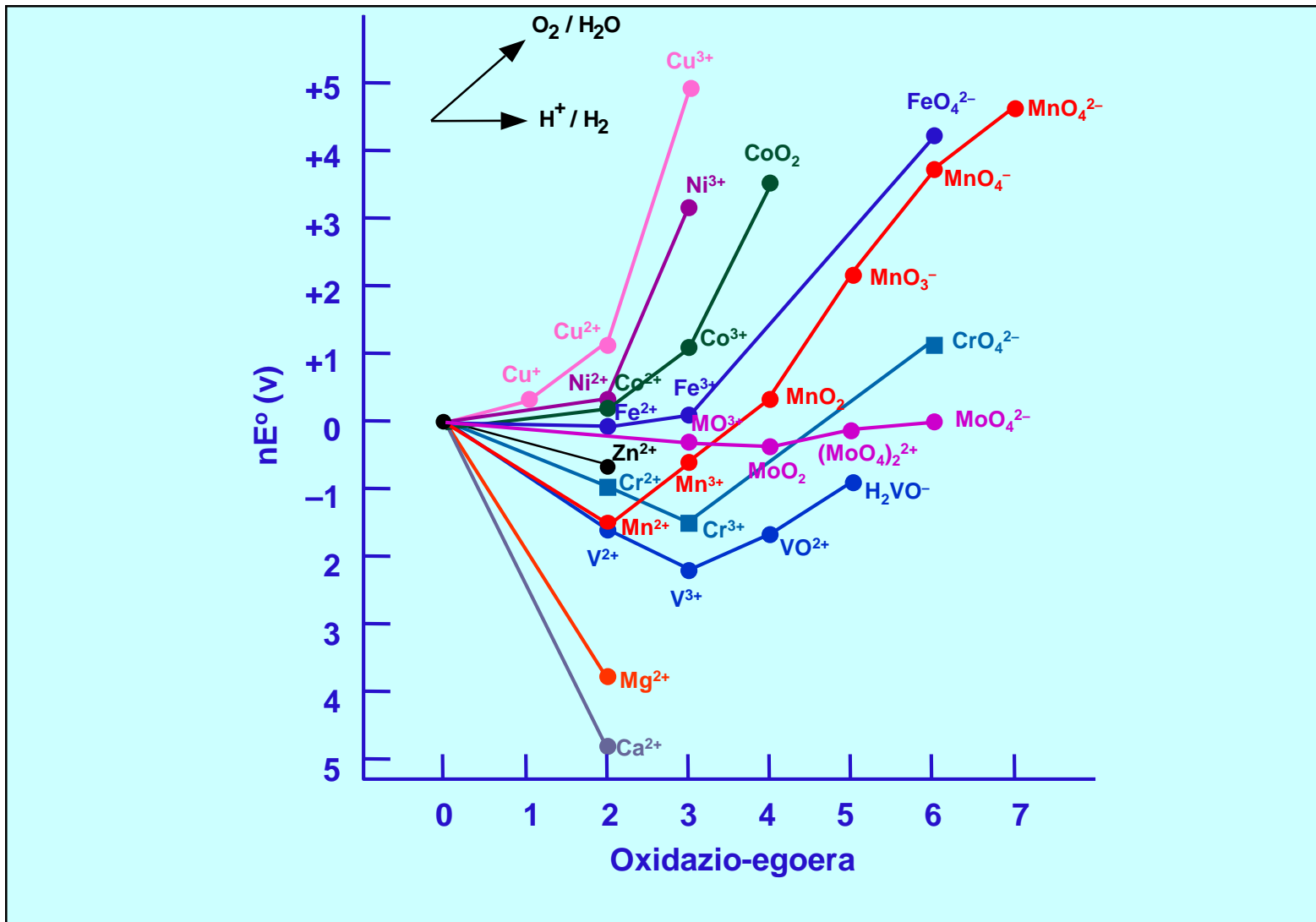
funtzioak

- Egitura biologikoetan (**H, C, N, P, O, S, F, Ca**, Mg, Zn): hezurdura, ehunak, mintzak eta bestelako barne-egitura disolbagaitzak.
- Erreakzio elektrokimikoetan (H, P, Cl, Na, K, Mg, Ca): adib., nerbio-garraioan eta energia-ekoizpenean
- Truke ionikoan (P, Ca, Mg): adib., muskulu-uzkurdura
- Azido-base katalisian (Mn, Fe, Ni, Zn): adib., urearen hidrolisia eta elikagaien digestioa
- Erredox katalisian (Se, V, Mn, Fe, Co, Ni, Mo): adib. oxigenoaren erreakzioak

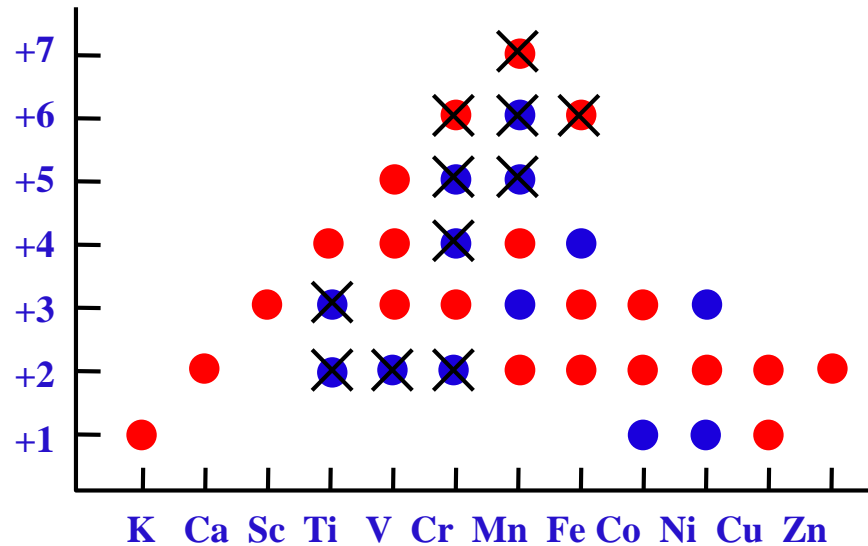
## Ur-inguruan bizitza



- Bakarrik urarekin bateragarrriak diren prozesuak posibleak dira
- Ur-inguruak bio-elementuen duten izaera eta forma baldintzatzen dituzte



- Frost-en diagramak, pH = 7



- Kimikan ohiko samarrak
- Kimikan ez hain ohikoak
- × Biologian ez eskuragarriak

Elementu metalikoen oxidazio-egoerak

# KIMIKA BIOEZORGANIKOAREN OINARRIAK

---

1. BIOEZORGANIKOA KONTESTUAN
2. BIO-ELEMENTUAK: EZAUGARRIAK, FUNTZIOAK  
ETA BIZITZARAKO MUGAK
3. NAHITAEZKO ELEMENTUEN BARNERATZEA  
SISTEMA BIOLOGIKOETAN

# Nahitaezko elementuen barneratzea sistema biologikoetan

---

- **3.1.HAUTAKETA: HIRU ARAUAK**
- **3.2.ESKURAGARRITASUNA**
- **3.3.BARNERATZE-MEKANISMOAK**



Izaki bizidunek funtzio  
baterako egokiak diren  
elementuak hautatzen  
dituzte



**EGOKITASUNA**

ERAGINKORTASUNA

UGARITASUNA

Izaki bizidunek  
hautatzen dituzten  
elementuak modu  
eraginkorrenean  
betetzen du funtzio  
jakin bat

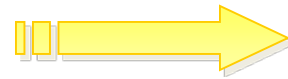


EGOKITASUNA

**ERAGINKORTASUNA**

UGARITASUNA

Funtzio bat egiteko eraginkorrek diren elementuen artean izaki bizidunek hautatzen dute elementu ugariena



EGOKITASUNA

ERAGINKORTASUNA

**UGARITASUNA**

**1. UGARITASUNA**

**2. ESPEZIE KIMIKOA**

**3. SOLBAGARRITASUNA**



---

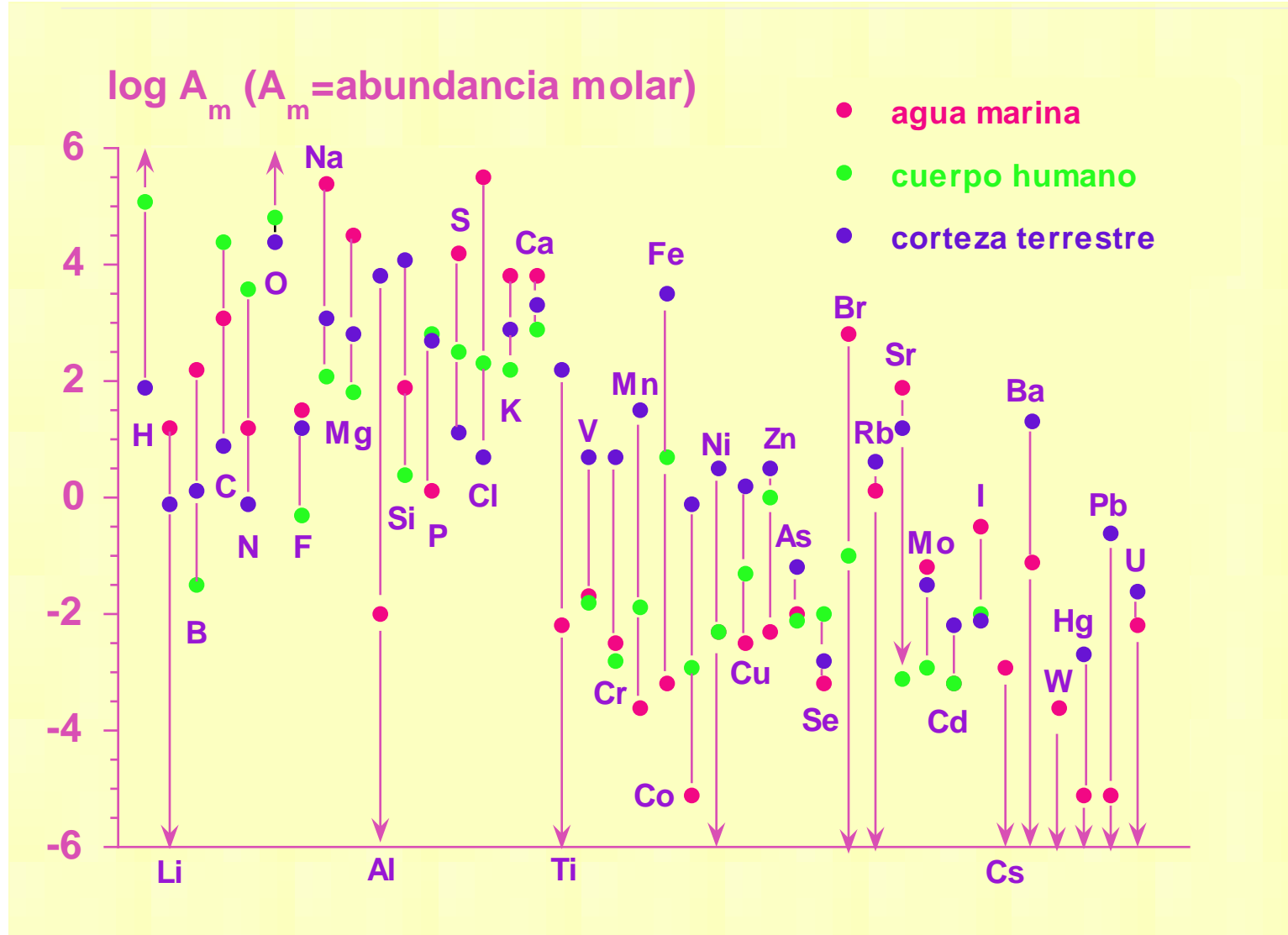
Si, Al eta Fe: oso ugariak lurrazalean baina eskasak gizakietan eta itsasuretan (Al ez da nahitaezkoa)

C: nagusia gizakietan baina oso eskasa lurrazalean

**Gizakien eta itsas-uren konposizioa antzekoak dira**

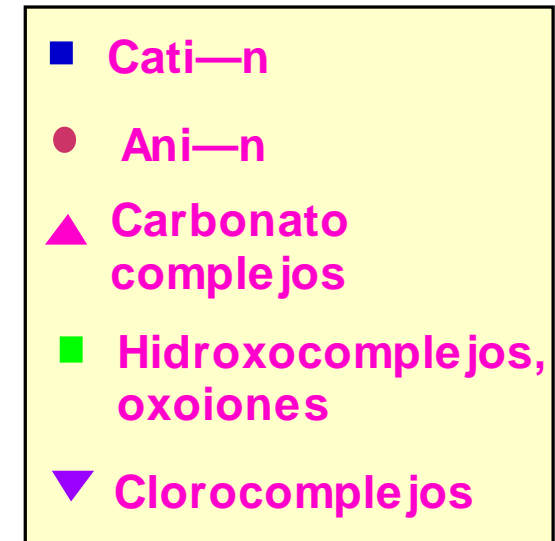
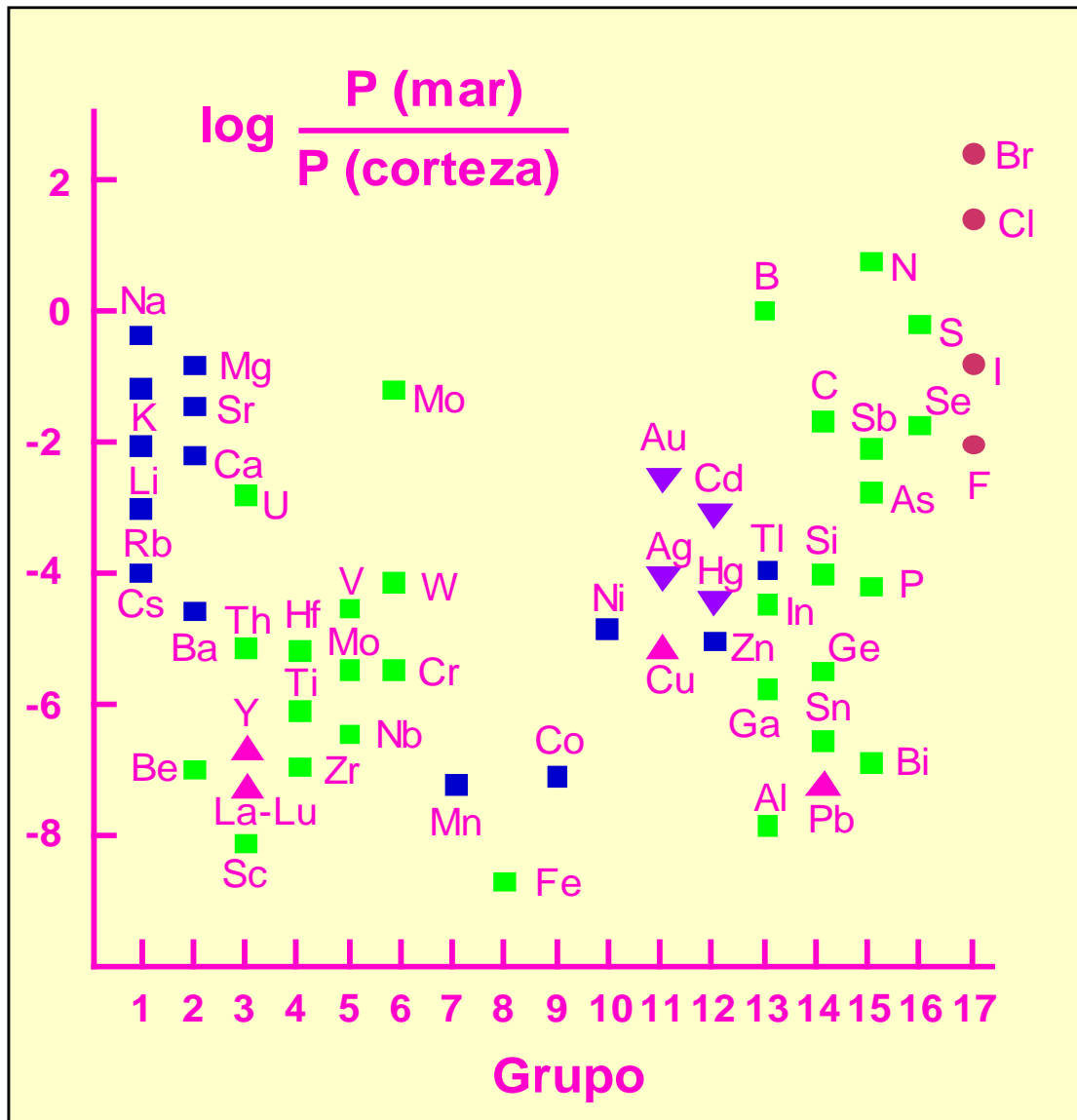
# Elementuen ugaritasuna

3.2



# Eskuragarri dagoen espezie kimiko nagusia

3.2



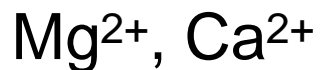
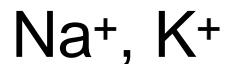
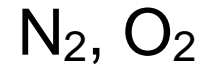
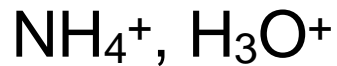


e. egituralak eta  
makromineralak

  
espezie  
disolbagarriak

Eskuragarritasun  
altua

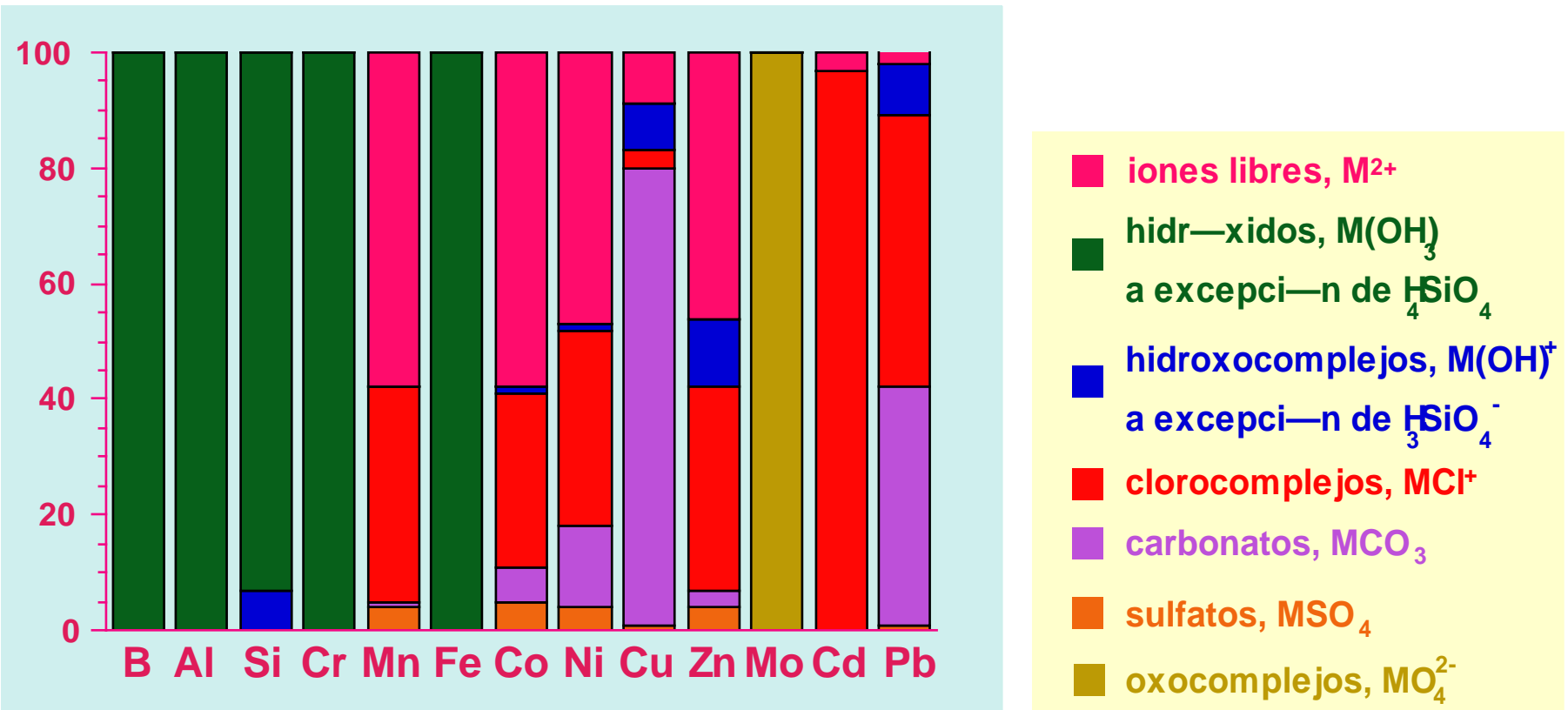




# Elementu aztarnen eta ultra-aztarnen eskuragarritasuna

3.2

## % ESPEZIE NAGUSIAK



# Elementu aztarnen eta ultra-aztarnen eskuragarritasuna

3.2

$Mn^{II}$ ,  $Co^{II}$ ,  $Ni^{II}$  eta  $Zn^{II}$ : batez ere,  $M^{2+}$  katioi disolbagarriak modura; beraz, eskuragarri

$Cu^{II}$ : karbonato disolbagaitzak modura, batez ere; baina eskuragarri dago hidroxokonplexu, klorokonplexu eta  $Cu^{2+}$  katioi disolbagarrietan (proportzio txikietan).

$B^{III}$ ,  $Al^{III}$ ,  $Cr^{III}$  eta  $Fe^{III}$  hidroxido disolbagaitzak eratzten dituzte (Fe: aztarna, B eta Cr: ultra-aztarna, Al: ez da nahitaezkoa)

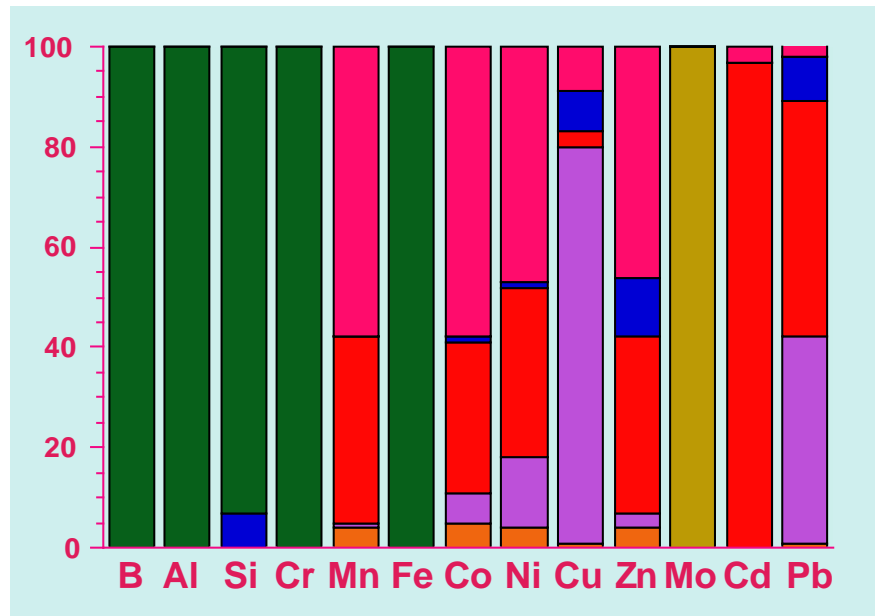
Orduan zelan azal daiteke Fe-aren kasua?

# Burdinaren arazoa

3.2

Fe trantsiziozko elementu ugariena da gizakietan (Ni-aren proportzioa baino 400 aldiz handiagoa, Fe-aren eskuragarritasuna askoz txikia izanik)

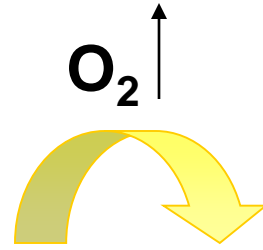
Fe, aztarna: 4.2g (60.0ppm) Ni, ultra-azarna: 10mg (0.14ppm)



- iones libres,  $M^{2+}$
- hidroxidos,  $M(OH)_3$   
a excepci—n de  $H_4SiO_4$
- hidroxocomplejos,  $M(OH)^+$   
a excepci—n de  $H_3SiO_4^-$
- clorocomplejos,  $MCl^+$
- carbonatos,  $MCO_3$
- sulfatos,  $MSO_4$
- oxocomplejos,  $MO_4^{2-}$

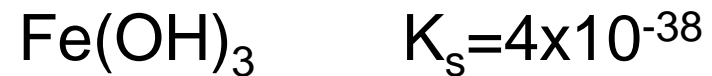
# Fe eta Cu elementuen eskuragarritasuna 3.2

Antzinako atmosfera  
 $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{S}$ ,  $\text{CH}_4$   
giro erreduzitzailea



Egungo atmosfera  
 $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$   
giro oxidatzailea

FeS	altua	$\text{Fe}(\text{OH})_3$	altua
Cu, CuS	baxua	$\text{Cu}(\text{OH})_2$	ertaina
$\text{HS}^-$	altua	$\text{SO}_4^{2-}$	altua



Antzinako atmosferan hidrogeno sulfuro, sufre, amoniako eta metano gasak oso ugariak ziren: atmosfera erreduzitzailea non burdina, FeS modura zegoen.

FeS-aren disolbagarritasuna ertaina da ( $K_s=6 \times 10^{-18}$ ) eta izaki bizidunak burdina erabiltzen hasi ziren, nahitaezko elementu bilakatu eraziz.

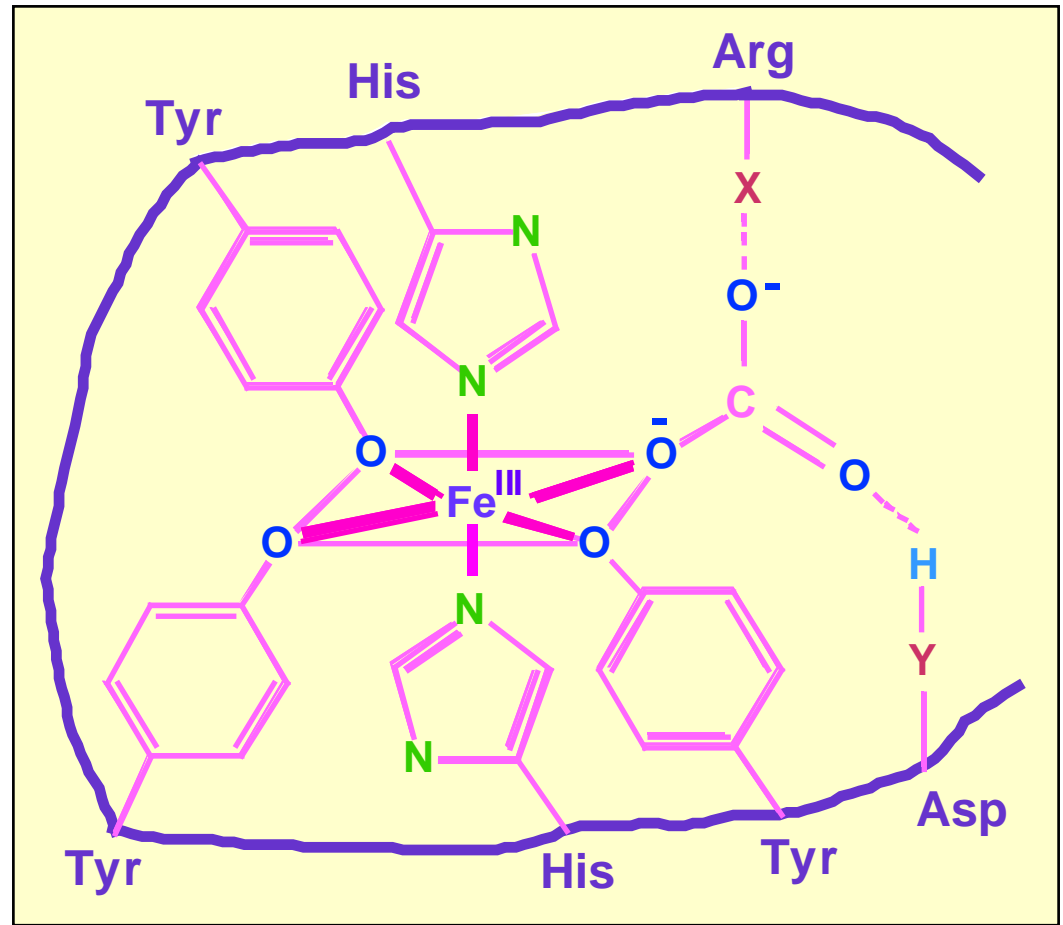
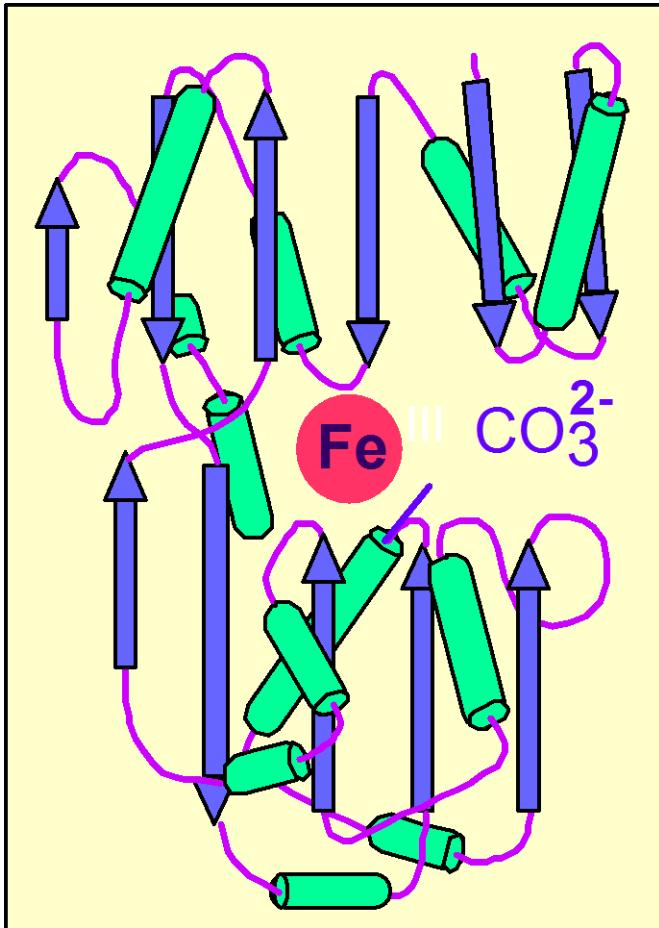
Espezie biologikoen eraginez, atmosferaren oxigenoaren edukia gero eta handiago bilakatu zen eta, gaur egun, atmosferaren izaera oxidatzailea da.

Hau dela eta, burdina  $\text{Fe}(\text{OH})_3$  hidroxido disolbagaitza modura azaltzen da ( $K_s=4 \times 10^{-38}$ ).

Gizakiok asko zaintzen dugu gure burdina:

$\text{Fe}^{\text{III}}$  modura garraiatzen da (transferrinetan) baina  $\text{Fe}^{\text{II}}$  modura lan egiten du antzitan bezala (hemoglobina, mioglobina, zitokromoak eta ferredoxinak).

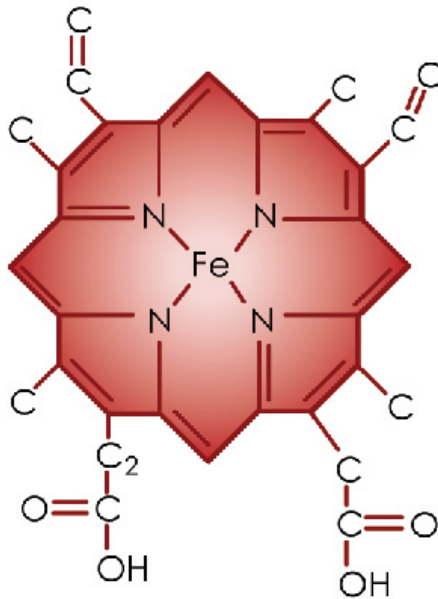
## APOTRANSFERRINOA



# Eboluzioaren egokitze-prozesua

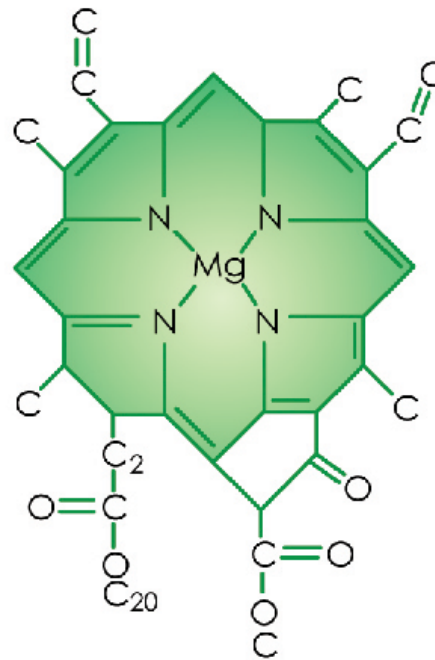
3.2

Mg-a klorofilaren nukleoa da.  
Fe-a hemoglobinarean nukleoa da:  
Biak porfirinaren nukleoak dira



HEMOGLOBINA

Fe = HIERRO



CLOROFILA

Mg = MAGNESIO

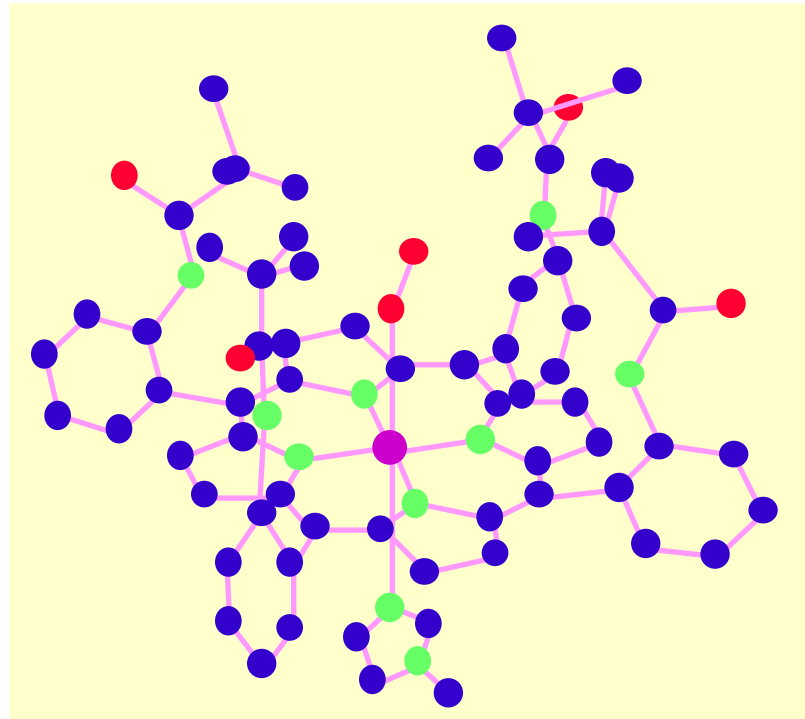


# Eboluzioaren egokitze-prozesua

3.2

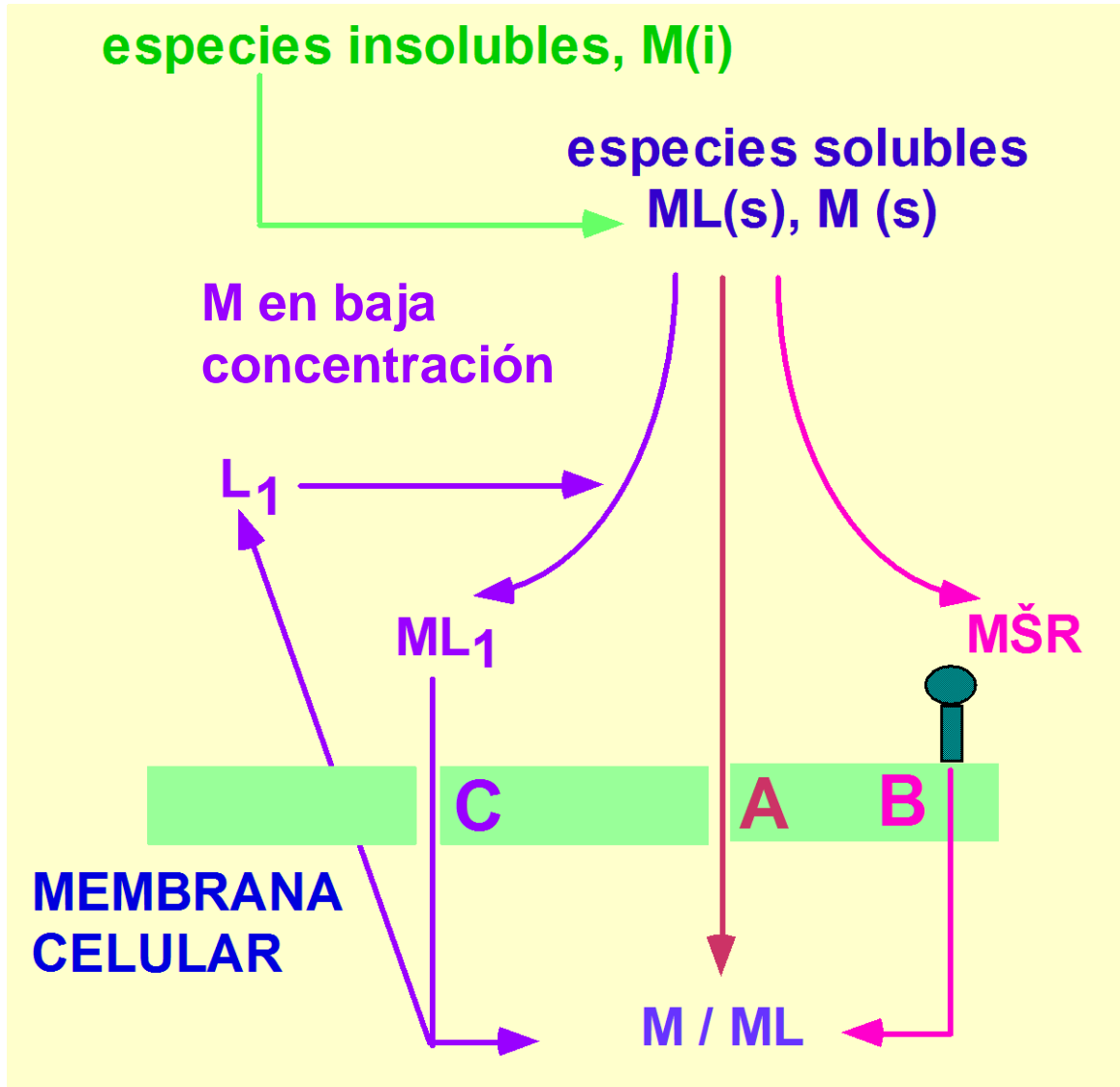
## HEMOGLOBINA

oxigenoaren garraioa



# Barneratze-mekanismoak

3.3



- A. Difusio zuzena
- B. Gune-hartzaileei lotura
- C. Konplexuen formazioa

# Metalen gehitzeko Mekanismoen hautakortasuna

---

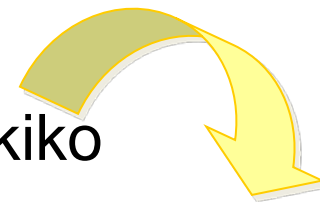
Aldagai nagusienak

- loi metalikoen ugaritasuna
- Katioen afinitatea

anioi hartzaileekiko

estekatzaile konplexatzaileekiko

- koordinazio-geometria
- loien tamaina

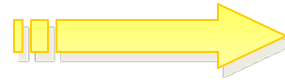


Kimika Ezorganikoaren  
oinarrizko kontzeptuak  
(Koordinazio - Kimika )

# Difusio zuzenean uagaritasuna eta ioien tamaina:

3.3

Uretan kontzentrazioak	
Na <sup>+</sup> , K <sup>+</sup>	10 <sup>-1</sup> M
Mg <sup>2+</sup> , Ca <sup>2+</sup>	10 <sup>-3</sup> M
Zn <sup>2+</sup>	< 10 <sup>-9</sup> M
Cu <sup>2+</sup>	< 10 <sup>-12</sup> M
Fe <sup>2+</sup>	< 10 <sup>-17</sup> M



a<sup>2+</sup>

Modu zuzenean difunditzen dira



loi hidratatuaren erradioa

Ad: nerbio-zelulak

K<sup>+</sup> - bideak

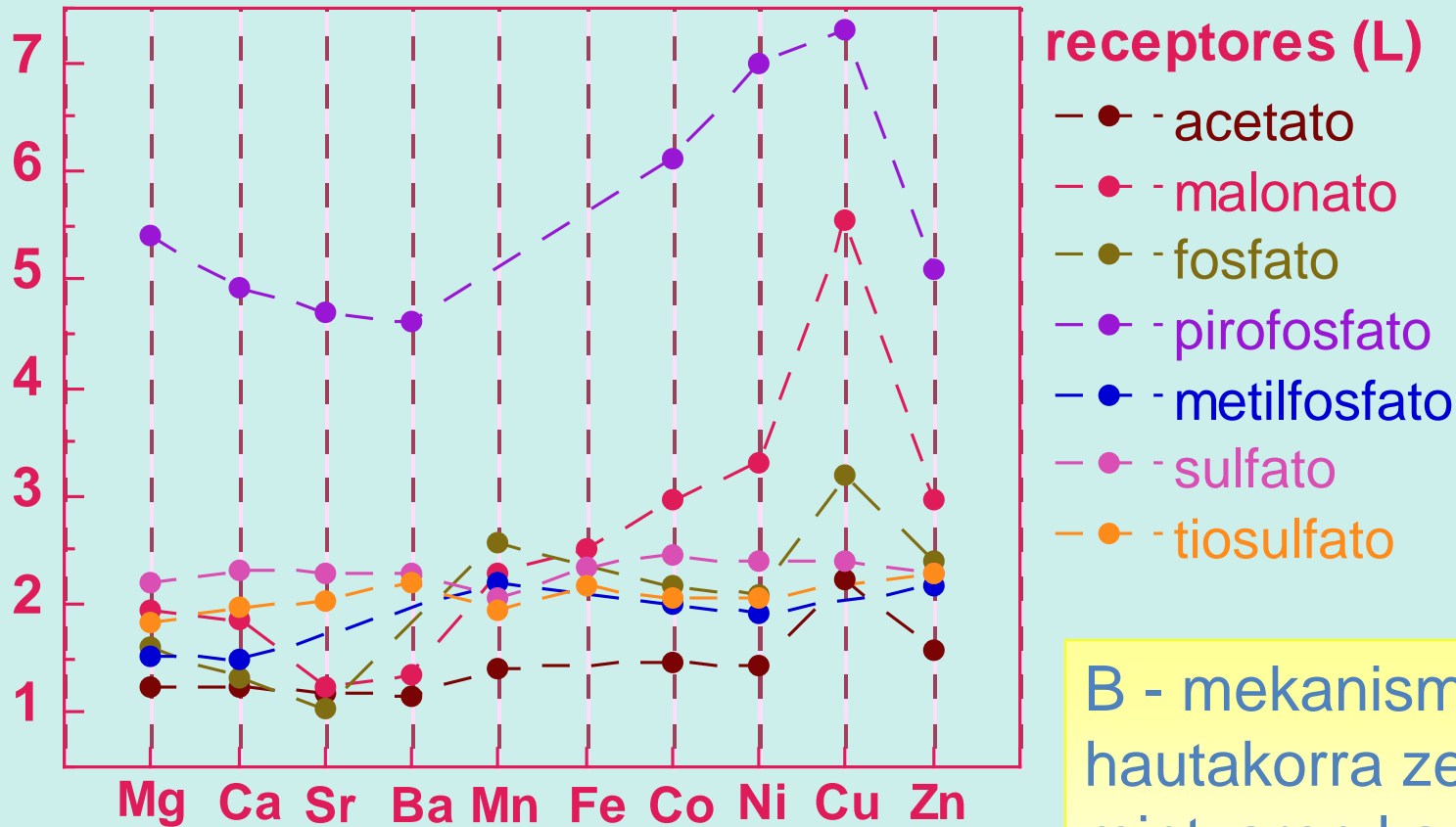
Li < Na < < K > Rb > Cs

Ca<sup>2+</sup> - bideak

Mg < < Ca > Sr > Ba

# Konposatu hartzailearen egonkortasuna

$\log K_{ML} (M^{2+})$



B - mekanismoa ez da  
hautakorra zelula-  
mintzaren kanpoaldean

# Estekatzaileekin gehitze hautakorra: Pearson- irizpideak

---

3.3

## Faktoreak

1. Katioarekiko afinitatea
2. Koordinazio-geometria
3. Ioiaren tamaina

# Estekatzaileekin gehitze hautakorra: Pearson- irizpideak

3.3

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H 2.20													Bases de Lewis Bases Intermedias					He
Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne	
Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar	
K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83 +2	Co 1.88 +2	Ni 1.91	Cu 1.90 +2 +1	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr	
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.20 +3	Rh 2.28 +1	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78 +3	Sn 1.96 +4	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.6	
Cs 0.79	Ba 0.89	Ln 1.1-1.3	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2 +3	Ir 2.20 +1	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 2.04	Pb 2.33	Bi 2.02				
Fr 0.7	Ra 0.89	An 1.1-1.5																
												Ácidos Duros						
												Ácidos Blandos						
												Ácidos Intermedios						
												Bases Blandas						
												Bases Duras						

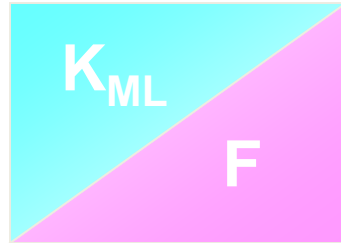
# Estekatzaileekin gehitze hautakorra: lehentasunak

3.3

m. alcalinoAK Na <sup>+</sup> , K <sup>+</sup>	O-neutroak, (O-emailea) <sup>-1</sup> Estekatzaile O-makroziklikoak
m. Alcalinoterreoak Mg <sup>2+</sup> Ca <sup>2+</sup>	O-neutroak, (O-emaileak) <sup>-2</sup> karboxilatoak, poli eta monofosfatoak, fosfatoak eta hainbat O- neutroak
Trantzisiozko m Cr <sup>3+</sup> , Mn <sup>3+</sup> Fe <sup>3+</sup> , Co <sup>3+</sup> Mn <sup>2+</sup> , Fe <sup>2+</sup> Fe <sup>2+</sup> Ni <sup>2+</sup> Cu <sup>2+</sup> , Cu <sup>+</sup> Zn <sup>2+</sup>	N-, P-, O-, S- emaileak O-emaileak (karboxilato, fenolato) O-emaileak (fenolato, hidroxamato, hidróxido) N- eta P-emaile konbinatuak amina asegabetuak (porfirinas), tiolatoak, polipirrolak aminak, peptido ionizatuak R <sub>2</sub> N <sup>-</sup> ,



# Estekatzaileekin gehitze hautakorra: erauzketa-faktoreak



$K_{ML}$ , egonkortasun -konstantea

F, erauzketa faktorea

$$F = K_{ML} \cdot [M]$$

	$Na^+, K^+$	$Mg^{2+}, Ca^{2+}$	$Zn^{2+}, Cu^{2+}$
O-macroziklikoak	$> 10$ $> 1$	$< 10^2$ $< 10^{-1}$	$< 10^6$ $< 10^{-1}$
O-policarboxilatioak	$1$ $< 10^{-1}$	$> 10^3$ $> 1$	$< 10^6$ $< 10^{-1}$
N eta S-emaileak	$10^{-1}$ $< 10^{-1}$	$< 10^2$ $< 10^{-1}$	$> 10^6$ $> 1$

# Gehitze hautakorra:

3.3

## Odoletan garraiatzaileak

metala	[M <sup>n+</sup> ]	garraiatzailea	hautakortasuna
Fe	10 <sup>-16</sup>	transferrinoa	fenolato erradikalak RO <sup>-</sup>
Cu	10 <sup>-14</sup>	albumina	peptidoa >N- Cu <sup>2+</sup> lotuta (g. tetraedrikoa)
Co	<<10 <sup>-10</sup>	proteina garraiatzailea	txertatze-kontrola
Zn	10 <sup>-8</sup>	albumina	N,S-emaileak (g. tetraedrikoa)
Ca	10 <sup>-3</sup>	fosfoproteinak (behar izanez gero))	lotura ahula gainontzeko metalentzat
Mg, K, Na	10 <sup>-3</sup> 10 <sup>-1</sup>	bakar bat ere	ioi solbatatuak

# Gehitze hautakorra:

## Koordinazio-geometria

---

$\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{3+}$  plano-karratua > pentakoord. > tetraedrikoa

$\text{Zn}^{2+}$  tetraedrikoa > octaedrikoa > pentakoordinatua

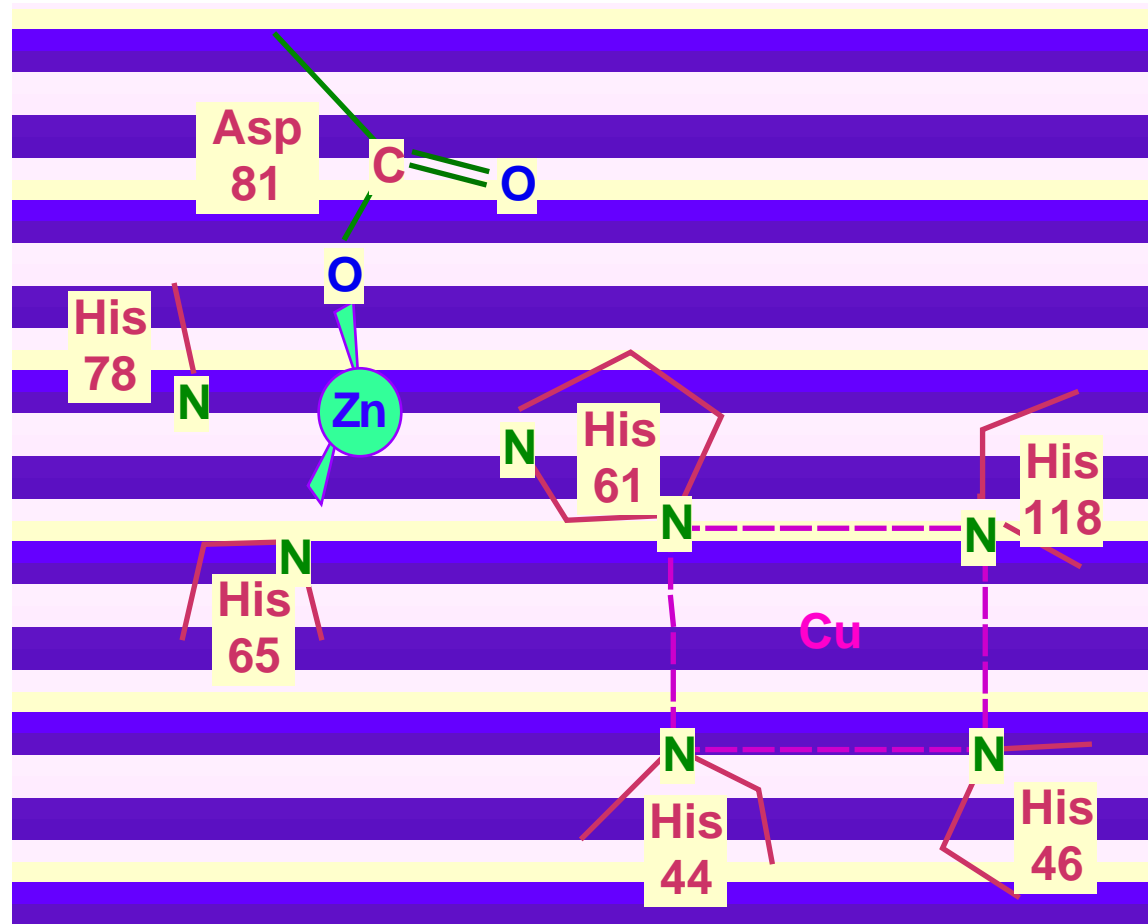
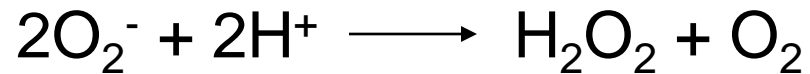
$\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$  octaedrikoa > tetraedrikoa > besteak

$\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{3+}$

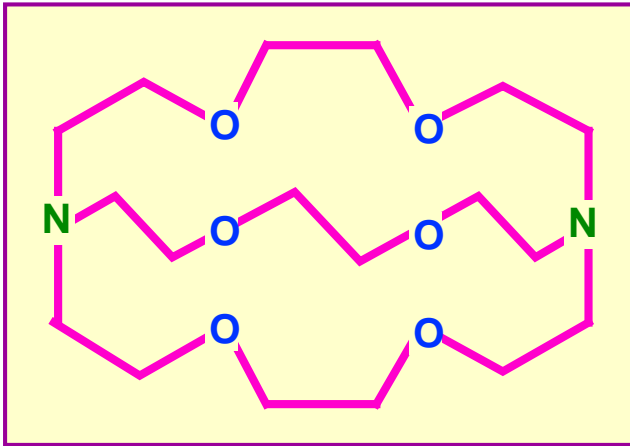
# Gehitze hautakorra: Koordinazio-geometria

3.3

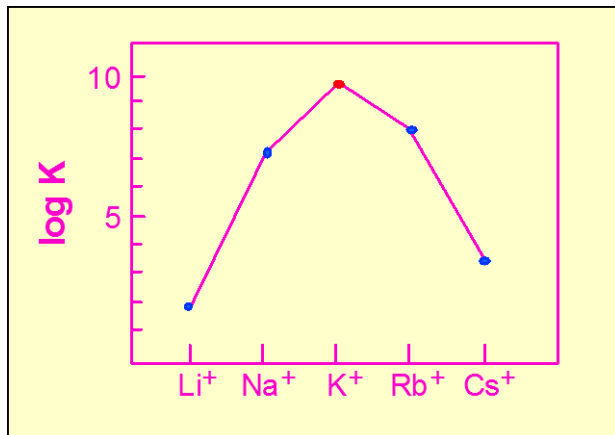
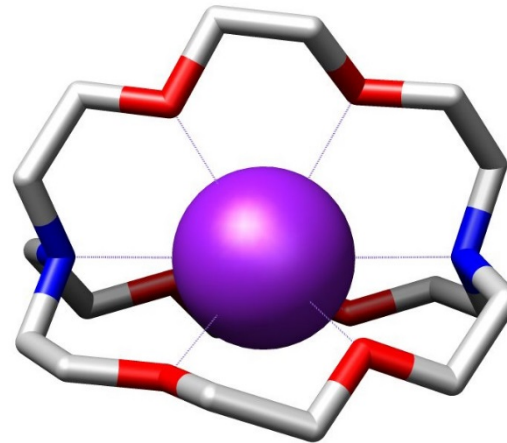
kobre-zink superoxido dismutasa (SOD)



# Gehitze hautakorra: loiaren tamaina



Kriptatoak

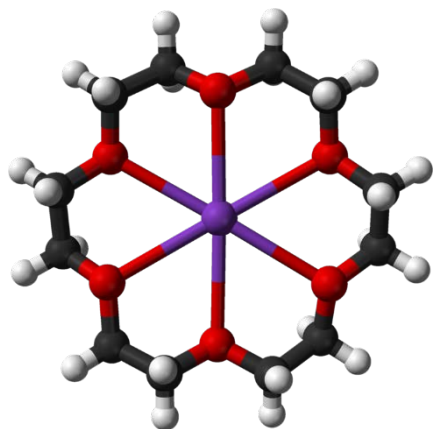


## (2,2,2)-diamina kriptatoa

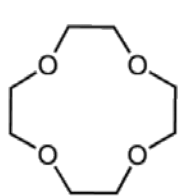
- . Hautakortasuna hirudimentsionala
- . Poliziklikoak
- . N-dunak dira

# Gehitze hautakorra: loiaren tamaina

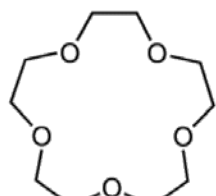
3.3



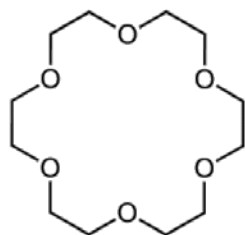
Eter-koroa	Afinitatea duen katioia
12-corona-4	Li <sup>+</sup> katioia
15-corona-5	Na <sup>+</sup> katioia
18-corona-6	K <sup>+</sup> katioia



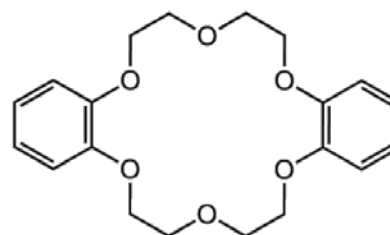
a



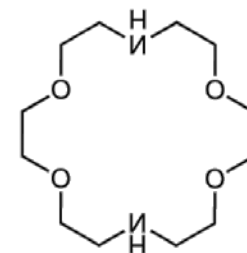
b



c



d

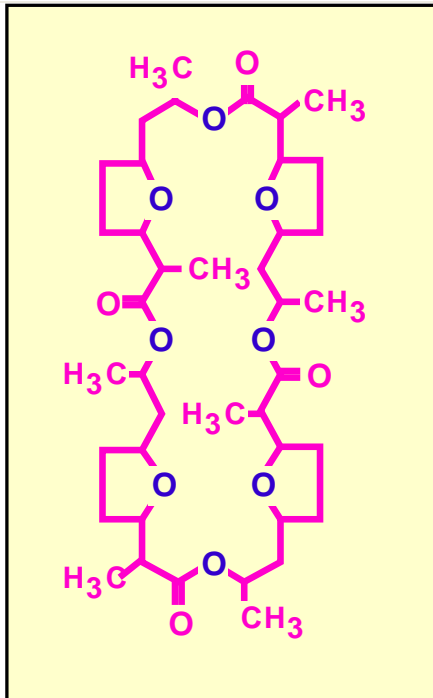


e

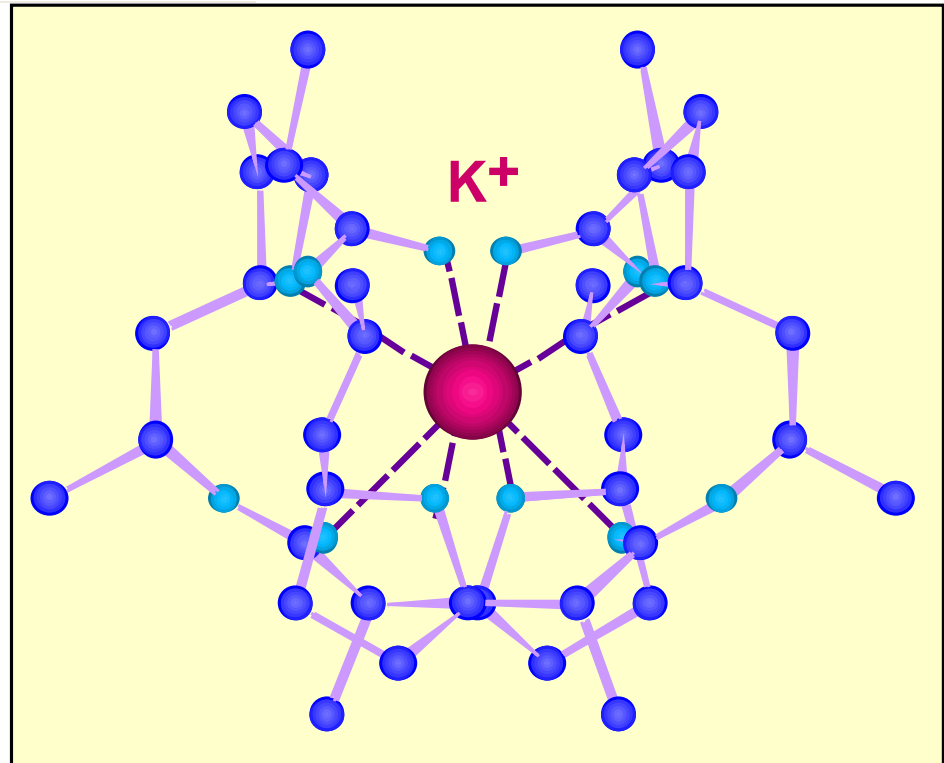
Hainbat “eter-koro”: a)12-corona-4; b)15-corona-5; c) 18-corona-6; d)difenil-18-corona-6; e)diaza-18-corona-6

# Gehitze hautakorra: loiaren tamaina

3.3

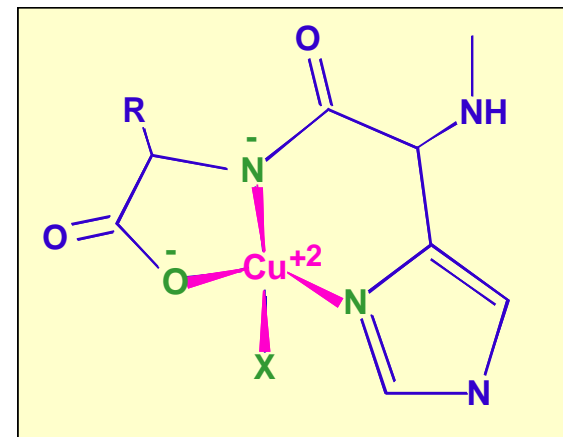
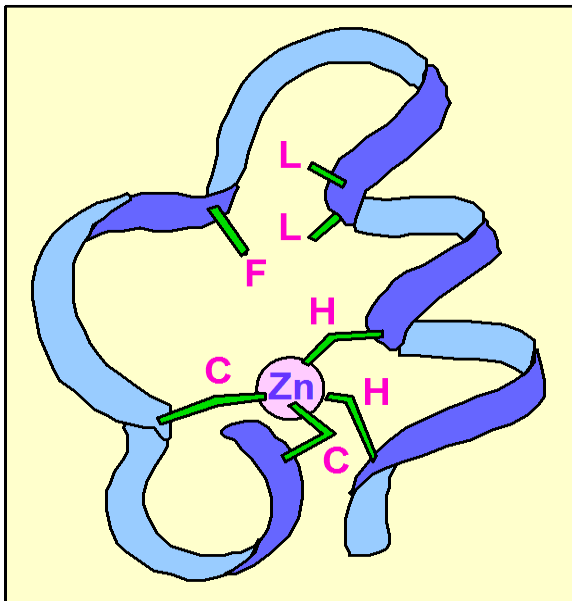


Nonaktinoa

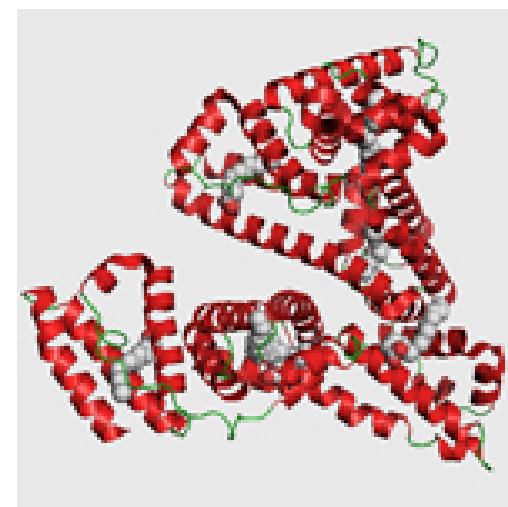
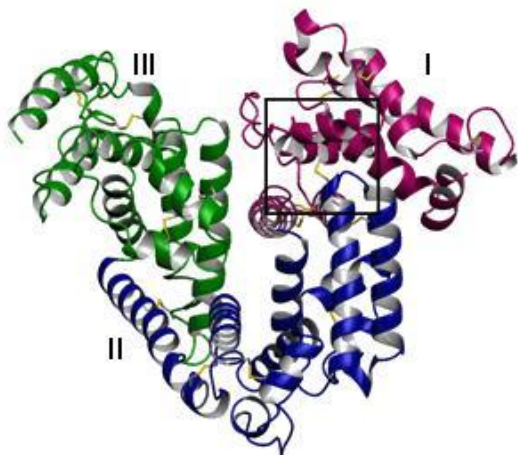


- . Ionoforo ziklikoak antibiotiko gisa erabiltzen dira
- . Kriptatoak, koro-eterrak eta nonaktinoa horrelakoak dira
- . Nonaktinoak K<sup>+</sup> ioia bahitzen du

# Gehitze hautakorra: loiaren tamaina



ALBUMINAK  
odolaren proteina  
globularrak

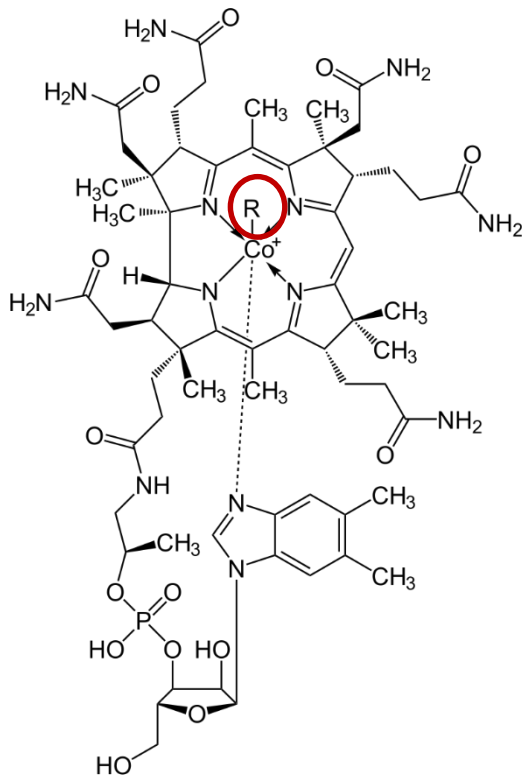




# Gehitze hautakorra: loiaren tamaina

## Funtzioak

- Globulo gorrien sormena
- Nerbio-bultzada



Kobalamina/ko-entzima B12

Kobalamina fisiologikoki B12 bitaminaren forma aktiboa da

- . R= CH<sub>3</sub>: metilkobalamina
- . R= OH<sup>-</sup>: hidroxikobalamina
- . R= CN<sup>-</sup>: zianokobalamina (forma nagusia, elikaduran, gehigarri gisa)

## Erabilerak

- . B12 bitaminaren eskasia
- . anemia
- . neuropatia diabetikoa
- . esklerosia

# Gehitze hautakorra: loiaren tamaina

## Hidroxikobalamina: zianuroz pozoitzaren kontrako farmakoa

- . hidroxikobalamina zianokobalaminaren aitzindaria da
- . hidroxikobalaminak zianuro ioirekin erreakzionatzen du zianocobalamina sortarazten
- . azken hau geroago giltzaurretik kanporatzen da
- . Frantzian erabilitako produktua da
- . 2006 FDA-k onartu zuen (*Cyanokit*)



FDA: Estatu Batuetako elikagai eta sendagai administraritza

# IDEIA NAGUSIAK

- . Gizakiok inguru ezorganikoan garatzen dira eta bertan nahitaezkoak diren elementuak eskuratzen dituzte
- . Nahitaezko Elementuak arinak dira eta taula periodikotik ia talde guztietakoak dira
- . Nahitaezko elementuen funtzioak ur-inguruko ezaugarriak baldintzatzen dute
- .Gizakiok bere inguruko eskuragarriak dituzte elementuen artean egokiak, eraginkorrak eta ugariak direnak aukeratzen dituzte
- . Nahitaezko Elementuen gehitzeak Kimika Ezorganikoari dagozkion oinarrizko kontzeptuei jarraitzen die

Web-orria:

<http://pidcienciainteract.wixsite.com/pid2016>