

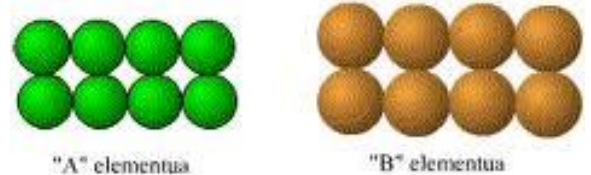
EREDU ATOMIKOAK

Historian zehar, atomoari buruzko eredu desberdinak sortu dira. Teknologia hobetzen duen neurrian datu gehiago lortzen ziren atomoaren izaera ezagutzeko, Beraz, beharrezkoa da aztertzea, behintzat gaineratik, nola garatu diren eredu atomiko desberdinak garai bakoitzean.

Dalton-en eredu atomikoa.(1808)

Bere abiapuntua erreazio kimikoari buruzko lege kuantitatiboak izan ziren. Daltonentzat:

- 1.- Materia atomo deitutako partikulaz osatuta dago.
- 2.- Atomoak **zatiezinak** dira eta **aldae**zinak.
- 3.- Atomoak, molekulak osatzeko proportzio finkoen arabera konbinatzen dira.

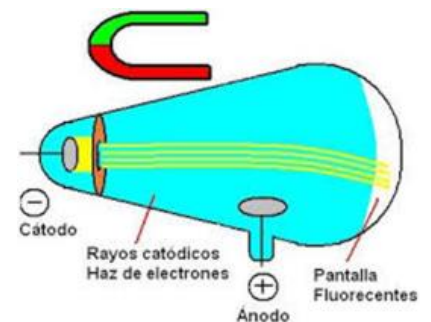


THOMSON-EN EREDUA.

Garai horietan, **FARADAY-ek**, elektrolisiaren bidez elektrizitatea partikulaz osatuta zegoela frogatu zuen. Aurrerago, Thomson-ek aurkitu zituen elektroioak izpi katodikoak aztertuz

Honen ondorioz, Faraday-en teoria baieztatuta geratu zen.

Gasak, tentsio elektriko txikian, korrante elektrikoaren isolatzaileak dira; ordea, tentsio handiarekin eroale bilakatzen dira. Beirazko hodi batean oso presio txikian gas bat jartzen bada eta milaka boltioko tentsioa jartzen bazaio, korrante elektriko pasako da eta gasak kolore argia igorriko du, argi honi izpi katodikoa esaten zaio, katodoan sortzen delako eta izpi hauek aztertzean konproba daiteke:



-karga negatiboa dutela.

-partikulaz osatuta eta korrante elektrikoaren unitateak direla (tartean objekturen bat sartuta itzala agertzen da).

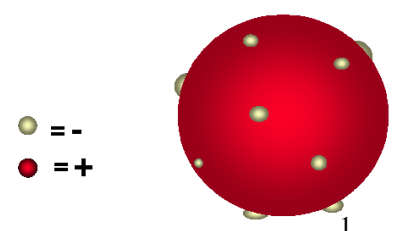
-partikulak oso masa txikia dute eta atomoa baino txikiagoak dira.

-gaur egun deitzen zaie elektroioak (hau dela eta, atomoa zatigarria da)

-Karga eta masaren arteko erlazioa neurtu zuen $q/m = 1,78 \cdot 10^8 \text{ C/gr}$.

Thomsonen atomoaren barne egitura (1897) :

Elektroioak, karga elektriko negatiboa dutenez eta materia (atomoa) neutroa denez, karga negatiboa konpentsatuta egongo da. Horrek esan nahi du, atomoan karga positiboa ere egongo dela, materia neutroa izan ahal izateko.



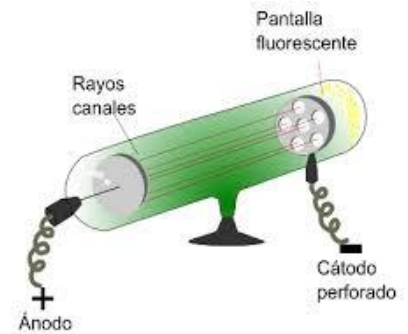
EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOAK

Elektroiak oso txikiak direnez masa gehiena zati positiboak edukiko luke. Berarentzat, atomoa esfera bat da, gehiena karga positiboa izango da eta e-ak barruan egongo dira txertatuta, elektrostatikoki egonkorra izanik, hau da neutroa. (Plumk cake eredua).

1909.urtean Millikan-ek beste saiakuntza baten bidez elektroien karga eta masa lortu zituen ($Q = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{c}$ $m = 8,98 \cdot 10^{-28} \text{gr}$).

PROTOIAK GOLDSTEIN 1886

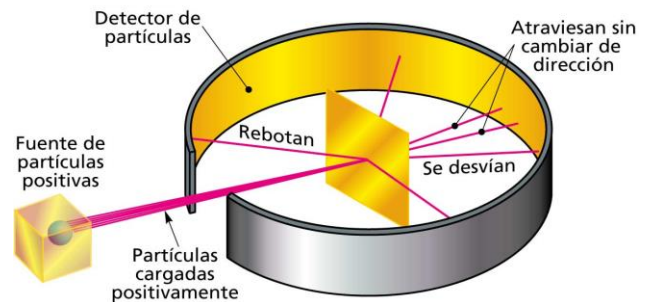
- deskarga -hodia hidrogeno gasarekin.
- katodo zulatuta
- kanal izpiak (izpi katodikoaren kontrakoak)
- partikula positiboz osatuta. protoiak.
- elektroien adinako karga dute baina kontrakoak.
- masa elektroiaarena baino 1837 aldiz handiagoa.
- elementu guztietan daude.



RUTHERFORD-EN EREDUA (1911).

Experimentu bat egin zuen:

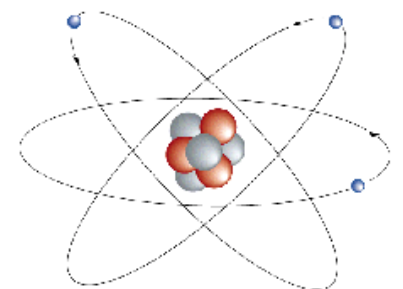
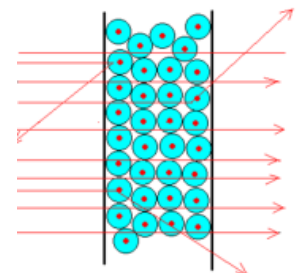
Urrezko xafla bat a (positiboak eta masadunak) partikulekin bonbardatu zuen eta hurrengoa ikusi zen:



- Partikula gehienek xafla zeharkatzen zuten desbideratu gabe.
- Beste batzuk desbiderapen txikia jasaten zuten.
- Gutxi batzuk atzerantz higitzen ziren erabat errebotatuta.

Ondorioak:

1. Atomoa ez da uniformea (horregatik partikula batzuk ez dira desbideratzen ez baitute talka egiten ezerekin)
2. Atomoaren karga positibo guztia kontzentratuta dago atomoaren erdiko partean, eta bertan egongo da atomoaren ia masa guztia beraz, atomoak nukleoa bat dauka. Horregatik, α partikulak desbideratzen dira masa eta karga positiboa edukitzeagatik (talka egitean nukleoaren kontra errebotatzen dute).
3. Sartzen da nukleoaren ideia (Nukleoan karga positiboa duten partikulak daude: protoiak)
4. **Nukleoaren masaren** neurriak egitean bertan dauden protoi guztien masarena baino handiagoa zela ikusi



EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOA

zuten,ondorioz, beste zerbait zegoela nukleoan kargarik gabekoa
: **neutroiak** (Chadwick-ek 1932) aurkitu zuen bonbardatzean
berilioa α partikulekin)

5. **Atomoa sistema planetarioa izango balitz bezala planteatzen du.**
6. Eredu honek ez du azaltzen e -ak zergatik ez diren nukleoaren kontra erortzen.

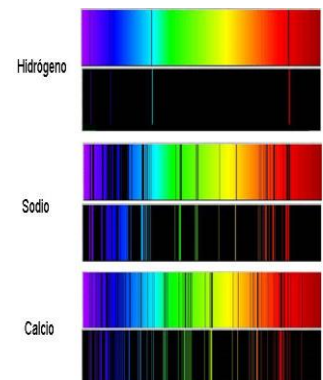
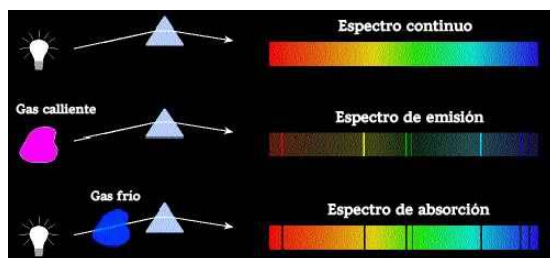
	Protón	Electrón	Neutrón
Masa	$1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$	$9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	$1,675 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Carga	$+1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	$-1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	0

BOHR-en EREDUA.

Sustantzia guztiek, gas egoeran berotzean argia igortzen dute. Sustantzia bakoitza, igortzen duen argiarengatik, bereiz daiteke. Erradiazioak aztertzeko erabiltzen den tresna "espektroskopia" da.

PROZESUA

.-Elementua berotu__ igorritako argia__ prisma(beirazkoa)batetik pasa_____ argia difraktatzen da (erradiazioa)_____ argazki plakan__espectroa agertzen da.



Espektroak agertzen dira argazki plakan eta igorpen espektroa izena du (espektro atomikoa). Honek elementu bakoitza identifikatzeko balio du, elementu bakoitzaren "huella dactilar" da.

Planck-en ideia eta Einstein-en teoría:

Teoria kuantikoak energia igorpenek izaera ez jarraitua zutela aldarrikatzen zuen. Teoria honen arabera argia eta beste edozein erradiazio era ez jarraian igorri edo zurgatzen dira, hau da, kuantotan. Kuantu hau energia zati edo puska bat izan daiteke eta zati bakoitzak izango du bere frekuentzia, hau dela eta, zati bakoitzaren energia izango da :

$$E = h \cdot \nu \qquad h = \text{Planck-en konstantea } 6,6225 \cdot 10^{-34}$$

Bohr-ek aurreko ideia eta teoria erreferentziatza hartu zuen eta bere ereduan hiru postulatu hauek biltzen dira:

- 1.- Elektroiak nukleoaren inguruan orbita zirkularretan biraka dabilta, orbita hauek ez dira edozein, finkatuta daude. (n= 1,2,3,...)
- 2.- Orbita bakoitzean elektroien energia konstantea da eta orbital hauetan elektroiek ez dute energiarik igortzen edo Xurgatzen.
- 3.- Baldintza normaletan elektroiek guztiak energi maila txikienean daude (funtsezko egoera) eta ez dute energiarik igortzen.

EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOAK

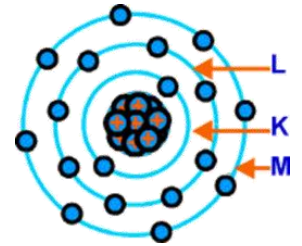
Kanpoko eraginen batengatik (ematen badiogu energia elektroiarri) posiblea da elektroia pasatzea orbita batetik energia handiagoko orbita batera (e- kitzikaturik dagoela esaten da). Kanpoko eragin hori amaitzean elektroia bere lekura bueltatuko da, horretarako lehen hartutako energia igortzen duelarik. ($E=h.u$).



Guzti honen ondorioz, atomoan, energia mailaren arabera geruza elektronikoak sortzen dira.

Letra batzuekin adierazten dira (K,L,M...).

Zenbat elektroia sartzen diren gehienez orbita bakoitzean zehaztu zuten; $2n^2$; n=orbita kopurua .



	ORBITAK(BOHR)	ELEKTROI kopuru maximoa ($2n^2$)
ENERGIA ↓	K 1.GERUZA	2e-
	L 2. "	8e-
	M 3. "	18e-
	N 4. "	32e-

Teoria honek oso ondo azaltzen zuen hidrogenoaren espektro atomikoa baina atomo polielektronikoetan ez da betetzen.

BOHR-en EREDUAREN ZUZENKETAK : ZENBAKI KUANTIKOAK

a) Zenbaki atomiko azimutala (Sommerfeld):

Espektroetan Bohrren marra bakoitza marra txikiagoz osatuta zeudela behatu zen, horrek esan nahi du, aurreko geruza bakoitzean azpimailak daudela (energia maila berriak). azpimaila hauek zenbaki kuantiko berri baten bidez adierazi daitezke, l, zenbaki azimutala eta bere balioak 0,1,2,...,(n-1).(forma eta batez ere energiaz arduratzen da)

b) Zenbaki kuantiko magnetikoa (ml) (Zeeman):

Sommerfeld-en azpimailak orientazio desberdinak hartzen zituztela espazioan ikusi zuten, hau adierazteko beste zenbaki kuantiko bat sortu zuten, ml, balioak -l...0...+l Dirak. (orientazio espazialaz arduratzen da).

c) Zenbaki kuantiko Spin-ekoa (ms):

Espektroskopioaren hobekuntzaren ondorioz lerro guztiak bikoiztuta azaltzen zirela konturatu ziren. Horrek esan nahi du, elektroiek nukleoaren inguruan biratzeaz aparte, bere ardatzarekiko ere biratzen dutela. Biraketa honek bi noranzkoa posible dituen zenbaki honen balioak +1/2 eta -1/2 izango dira. (elektroiaren biraketaz bere ardatzarekiko arduratzen da).

EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOA

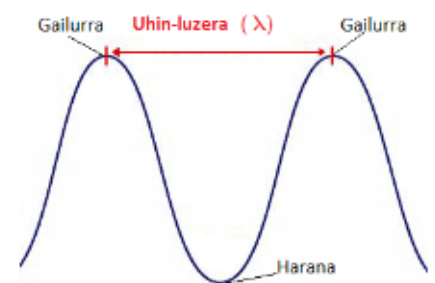
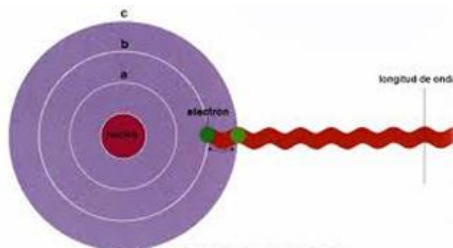
Mekanika klasikoan zenbaki kuantikoak erabat esperimentalak dira, hau da, erabiltzen dira espektroetan agertzen dena azaldu ahal izateko.

(n) ENERGIA MAILA n=1,2,3.....	(l) ORBITALEN FORMA l= 0,1,2,.....(n-1)	(ml) orbitalaren orientazioa ml= -l...0...+l	(ms) e-ren biraketa ms= +1/2 eta -1/2
1	0	0	+1/2
			-1/2
2	0	0	+1/2
			-1/2
	1	-1	+1/2
			-1/2
		0	+1/2
			-1/2
1	+1/2		
	-1/2		
3	0	0	+1/2
			-1/2
	1	-1	+1/2
			-1/2
		0	+1/2
			-1/2
		1	+1/2
			-1/2
	2	-2	+1/2
			-1/2
		-1	+1/2
			-1/2
0		+1/2	
		-1/2	
1	+1/2		
	-1/2		
2	+1/2		
	-1/2		

GAUR EGUNGO EREDUA: Mekanika kuantikoa (atomoaren nukleoa mantentzen da)

Bohrren teorian e-aren posizioa erabat definituta dago. Teoria honetan konprobatzen da matematikoki ezin dugula hitz egin orbita finkoari buruz elektroarentzat. Horregatik, kontuan hartuko ditugu hiru proposamen:

a) Uhinak eta partikulak (De Broglie): Higitzen ari den edozein gorputz batek uhin bat darama asoziatuta, horrek esan nahi du, e-ek ere badutela. Formula baten bidez erlazionatu zuen partikula baten masa, bere abiadura eta asoziatutako uhinaren uhin luzera:



$$\lambda = h / m \cdot v$$

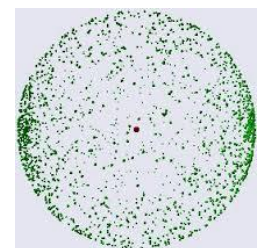
- λ: uhin asoziatuaren luzera
- m: partikularen masa
- v: partikularen abiadura
- h: Planck-en konstantea

b) Ziurtagabetasunaren printzipioa (Heisenberg):

Ezinezkoa da ezagutzea elektro baten posizioa eta abiadura zehaztasun osoz, honen ondorioz, ezin da zehatz -mehats ezagutu e-aren bidea eta posizioa (Bohrren ereduan azaltzen den orbitak, teoria honen arabera, ez du zentzurik).

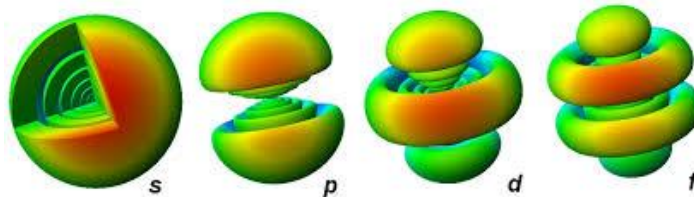
c) Uhin ekuazioa (Schrodinger)

- Aurreko bi printzipioak jaso eta partikula bakoitzarentzat uhin ekuazio matematiko bat atera eta deitu zuen ψ (ψ : uhin ekuazioa).
- Funtzio honek partikula baten egoera energetiko posibleen balioak ematen dizkigu, hau da, elektroaren egoera energetikoa atomoan. (non dagoen atomoan)
- Matematikoki, ψ Funtzioa zenbaki kuantikoen menpe dago, hau da, hemen **zenbaki kuantikoak agertzen dira baldintza matematiko** bezala, funtzioaren emaitzak eman ahal izateko (berrir emaitzak izan ziren hidrogenoarentzat).



EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOA

ψ^2 esanahi fisikoa du karratzen denean: eskualde batean e-ak aurkitzeko probabilitatea. Hemendik ateratzen da oso kontzeptu garrantzitsua. Orain arte esaten genuen **elektroia** orbita konkretu batean zegoela biratzen. Orain ordea, ez dakigu non dagoen elektroia, dakiguna bakarrik izango da, non dagoen probabilitaterik handiena elektroia aurkitzeko, probabilitate honi deitzen zaio **ORBITALA**. Orbital batean %90eko probabilitatea elektroia aurkitzeko izango dugu



- Orbital bat zehazteko behar ditugun zenbaki kuantikoak izango dira: n, l, m_l
- Elektroia bat zehazteko behar ditugun zenbaki kuantikoak : n, l, m_l, m_s

Zenbaki kuantikoaren izena	Balioak	Zertaz arduratzen den
zenbaki kuantiko nagusia	$n = 1, 2, 3, 4$	mailaren zenbakia
zenbaki kuantiko orbitala edo momentu angeluarra	$l = 0, 1, 2, \dots (n - 1)$	orbitalaren forma edo azpi-maila
zenbaki kuantiko magnetikoa	$m = -l, \dots, 0, \dots, l$	orbitalaren orientazioa edo orbitala
spinaren zenbaki kuantikoa	$S = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	elektroiaren errotazioaren spina

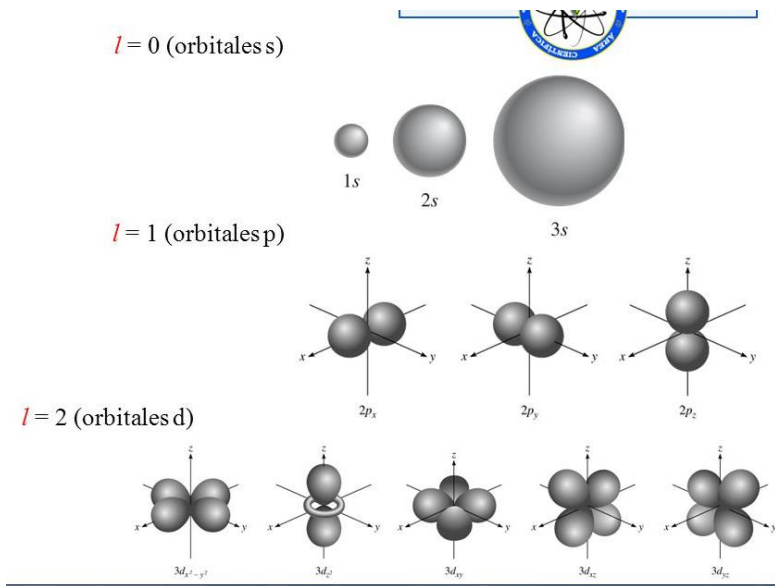
EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOA

(n) ENERGIA MAILA n=1,2,3.....	(l) AZPIMAILAK l= 0,1,2,.....(n-1)	(ml) orbitalaren orientazioa ml= -l...0...+l	(ms) e-ren biraketa ms= +1/2 eta -1/2	Orbitalak	Elektroi kopurua	
1	0	0	+1/2 -1/2	1s ²	2e	
2	0	0	+1/2 -1/2	2s ²	6e	
		1	-1	+1/2 -1/2		2p ²
			0	+1/2 -1/2		2p ²
3	1	1	+1/2 -1/2	2p ²	6e	
		0	-1	+1/2 -1/2		3p ²
			0	+1/2 -1/2		3p ²
	2	0	1	+1/2 -1/2	3p ²	10e
			-2	+1/2 -1/2	3d ²	
			-1	+1/2 -1/2	3d ²	
			0	+1/2 -1/2	3d ²	
1	0	1	+1/2 -1/2	3d ²	10e	
		2	+1/2 -1/2	3d ²		

ONDORIOAK:

1. -orbital bakoitzean gehienez 2e kabitzen dira.
2. - Orbitalak desberditzten dira orientazioaren arabera. Ikusi irudiak
3. -"s" orbitaletan asko jota 2e kabitzen dira.
4. - "p" orbitaletan asko jota 6e kabitzen dira.(hiru direlako eta bakoitzean 2e,degeneratuak dira,hau da, energia berdina dute)
5. - "d" orbitaletan asko jota 10e kabitzen dira.(bost orbital degeneratuak eta bakoitzean gehienez 2e).
6. - "f" orbitaletan asko jota 14e kabitzen dira.(7 orbital degeneratuak eta bakoitzean gehienez 2e).Orbital hauek lortzeko ,Zeintzuk dira zenbaki kuantikoak?

ORBITALEN FORMA ETA ORIENTAZIOA



$$\begin{array}{l}
 n = 1 \quad \left\{ \begin{array}{l} l = 0 \\ m_l = 0 \end{array} \right. \quad 1s \\
 \\
 n = 2 \quad \left\{ \begin{array}{l} l = 0 \\ m_l = 0 \\ \\ l = 1 \\ \left\{ \begin{array}{l} m_l = 1 \\ m_l = 0 \\ m_l = -1 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} 2s \\ 2p \end{array} \\
 \\
 n = 3 \quad \left\{ \begin{array}{l} l = 0 \\ m_l = 0 \\ \\ l = 1 \\ \left\{ \begin{array}{l} m_l = 1 \\ m_l = 0 \\ m_l = -1 \end{array} \right. \\ \\ l = 2 \\ \left\{ \begin{array}{l} m_l = 2 \\ m_l = 1 \\ m_l = 0 \\ m_l = -1 \\ m_l = -2 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} 3s \\ 3p \\ 3d \end{array}
 \end{array}$$

MAILA ELEKTRONIKOAK	1(K)	2(L)	3(M)	4(N)
Maila elektronikoko bakoitzaren orbitalak (AZPIMAILAK)	s	s, p	s, p, d	s, p, d, f
GEHIENEZ KABITZEN DIREN ELEKTROIAK	2	8	18	32

ATOMO POLIELEKTRONIKOEN BANAKETA ELEKTRONIKOA

Schrodingerren ekuazioaren ebazpena nahiko erreza da atomoak elektroi bakarra duenean (hidrogenoan gertatzen dena), baina elektroi gehiago badaude (kasu guztietan) ebazpena ateratzeko, eragozpen handiekin topo egingo dugu.

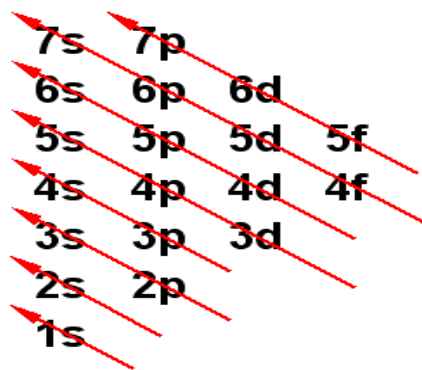
Horregatik beharrezkoa da hurrengo printzipioak kontuan hartzea:

EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOA

1.- Aufbau-ren printzipioa:

Atomoek, funtsezko egoeran, energia minimoa dute. Horrela, atomoen elektroiek beteko dituzten orbitalak izango dira **energia txikia dutenetatik energia handia dutenetara**. Hau dela eta, orbitalen antolamendua energiaren arabera MOELLERren diagramaz baliotuz egiten da.

MOELLER-ren DIAGRAMA



Átomo	Z	Configuración electrónica
Li	3	$1s^2 2s^1$
Be	4	$1s^2 2s^2$
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$

2.- Pauli-ren Printzipioa:

Atomo batean dauden elektroiek zenbaki kuantiko desberdinak izan behar dituzte. Hau da, orbital batean asko jota 2 elektroiek egon daitezke eta da 5 zenbakiak desberdintzen dituen bi elektroiek hauek.

Elektroi baten egoera adierazteko erabiltzen den notazioa, hau da, (n, l, m_l, S) .

Adibidez:

$(1, 0, 0, +1/2)$ adierazten du elektroiek baten egoera $1s$ orbitalean, baina beste aukera bat dugu orbital honetan, $(1, 0, 0, -1/2)$. Printzipio honen arabera,

lehenengo hiru zenbaki kuantiko izan daitezke

berdinak baina laugarrenak, derrigorrez, desberdina izan behar du.

Ez da posible edukitzea atomo batean bi elektroiek 4 zenbaki kuantiko berdinekin.

	n	l	m	s
$1s$	1	0	0	$\pm 1/2$
$2s$	2	0	0	$\pm 1/2$
$2p$	2	1	-1, 0, 1	$\pm 1/2$
$3s$	3	0	0	$\pm 1/2$
$3p$	3	1	-1, 0, 1	$\pm 1/2$
$3d$	3	2	-2, -1, 0, 1, 2	$\pm 1/2$
$4s$	4	0	0	$\pm 1/2$
$4p$	4	1	-1, 0, 1	$\pm 1/2$
$4d$	4	2	-2, -1, 0, 1, 2	$\pm 1/2$
$4f$	4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	$\pm 1/2$

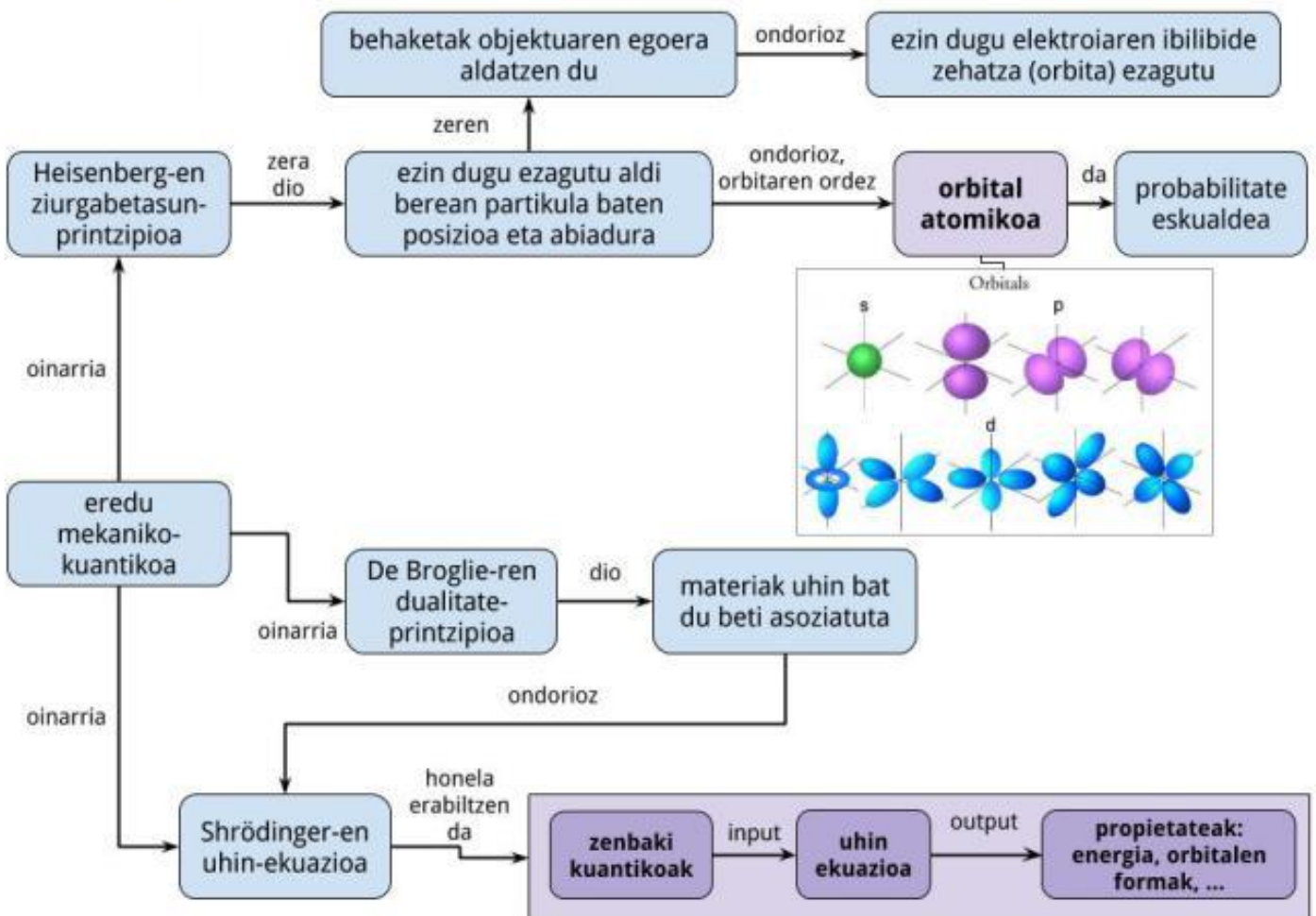
3.- Hund-en printzipioa

Energi berdineko orbital guztiak elektroiek batekin bete behar dira, bigarren elektroia sartu baino lehen.

Spinek (gezi baten punta) orbital bakoitzean kontrakoak izan behar dira.

Diagrama de orbital de caja - II B \rightarrow Ne						
B (5 e ⁻)	$1s^2 2s^2 2p^1$					
C (6 e ⁻)	$1s^2 2s^2 2p^2$					
N (7 e ⁻)	$1s^2 2s^2 2p^3$					
O (8 e ⁻)	$1s^2 2s^2 2p^4$					
F (9 e ⁻)	$1s^2 2s^2 2p^5$					
Ne (10 e ⁻)	$1s^2 2s^2 2p^6$					

LABURPENAK



EREDU ATOMIKOAK.- ZENBAKI KUANTIKOAK.- KONFIGURAZIO ELEKTRONIKOA

