

# Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)



Lan hau Creative Commons-en Nazioarteko 3.0 lizentziaren mendeko Azterketa-Ez komertzial-Partekatutako lizentziaren mendean dago. Lizentzia horren kopia ikusteko, sartu <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/es/> helbidean.

## 1. MEKANIKA KUANTIKOAREN OINARRIAK

Gertaera makroskopikoak deskribatzeko erabiltzen ditugun lege fisikoak **mekanika klasikoan** bilduta daude. Mekanika honetan partikulen legeak eta uhinen legeak erabat bereizturik daudela azpimarratu behar da. Hain zuzen, partikulak deskribatzeko legerik ezaguena Newton-ena da, eta uhinen portaera azaltzeko Maxwell-en ekuazioak ditugu aipatzekoak.

XX. mendearen hasieran zenbait gertaera enpiriko aurkitu ziren, zeinetan materiak aldi berean uhin-modura eta partikula-modura jokutzen baitzuen. Gertaera enpiriko horiek sistema mikroskopikoetan suertatzen dira hainbat baldintzaren menpe. Hots, mekanika klasikoa materiaren aldi bereko bi izaera hauek deskribatzeko baliabide aproposa ez denez, lege fisiko berrien beharra sortu zen. Garatu ziren lege horiek osatzen dute **mekanika kuantikoa**.

Bi pentsamolde fisiko hauen arteko desberdintasunak nabariak dira. Aipatu bezala, mekanika kuantikoan partikula eta uhin-izaerak ezin bananduzkoak dira (honi uhin-gorpuzkulu dualtasuna deritzo). Bestalde, mekanika kuantikoan, klasikoan ez bezala, zenbait magnitude fisiko ez dira elkarren independenteak, osagarriak baino. Horren ondorioz sortzen den probabilitatearen kontzeptua ezinbestekoa da mekanika kuantikoan. Azkenik, mekanika klasikoan magnitude jarraitzat jotzen da energia eta mekanika kuantikoan, berriz, kuantizatua dago.

Kapitulu honetan, oso sistema sinplean helduko diegu alderdi hauei: alegia, dimentsio bakarreko kutxa batean dagoen partikula baten kasuan. Geroago, ateratako ondorioak sistema konplexuago batean aplikatuko ditugu: hain zuzen, hiru dimentsioko kutxa batean dagoen partikula baten kasuan. Horrela, hurrengo kapituluetakoa atomoen azterketan erabiliko ditugun mekanika kuantikoaren oinarriak jarriko ditugu kapitulu honetan.

### 1.1. Uhin-gorpuzkulu dualtasuna

Atomoen jokabidea deskribatu nahian, 1913an Bohr-ek eta Rutherford-ek eredu planetario bat proposatu zuten, atomoaren azken eredu klasikoa izango zena. Eredu horren arabera, nukleoaren eta elektroien arteko erakarpen indarra coulombiarra denez, elektroien energia eta ibilbidea ezagunak dira une guztietan. Zer esanik ez, kargaturiko gorpuzkulutzat jotzen ziren elektroiak eredu horretan.

1927an C. J. Davisson-ek eta L. Germer-ek elektroien difrakzioa aurkitu zuten elektroien sorta batek zenbait kristal mineral zeharkatzean. Urte berean, G. P. Thomson-ek fenomeno berbera aurkitu zuen elektroien sorta batek urrezko xafla mehe bat zeharkatzean. Pentsamolde klasikoan, difrakzioa uhinekin zerikusia duen jokabidea da eta ez partikulekin. Beraz, gertaera hauek azaltzeko, partikula-izaera ez ezik, elektroiek uhin-izaera ere adierazten zutela onartu beharra sortu zen.

Era berean, zenbait baldintzatan argi-izpi batek partikula-sorta modura joka dezakeela frogatu zen efektu fotoelektrikoaren bidez. Hain zuzen, metal-xafla baten gainean argi-izpi batek inziditzen duenean, elektroiak erauzi egiten dira, eta erauzitako elektroien energiak inzidituriko argiaren frekuentziarekiko mendekotasuna adierazten du (eta ez intentsitatearekikoa, mekanika klasikoan legez). Efektu hori azaldu ahal izateko, argi-izpia fotoiez (partikulez) osaturik dagoela onartu behar da nahitaez.

## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

**Uhin-gorpuzkulu dualtasuna** ezinbesteko abiapuntua da mekanika kuantikoan. Dualtasunaren printzipio hau honela formulatzen da: baldintza esperimental egokietan,  $m$  masa duen eta  $v$  abiadura higitzen den partikula batek,  $\lambda$  uhin-luzera duen uhin batek bezalaxe jokatzen du.

Magnitude hauen arteko erlazio matematikoa L. de Broglie-k proposatu zuen 1924an (1. ekuazioa):

$$mv = p = \frac{h}{\lambda} \quad (1)$$

$p$ =momentu lineala eta  $h=6.6262 \cdot 10^{-34}$  J·s (Planck-en konstantea)

Beraz, partikularen momentu lineala eta uhin-luzera alderantziz proportzionalak dira. Formulazio hau kontrako zentzuan ere baliagarria da: hots, baldintza esperimental egokietan,  $\lambda$  uhin-luzera duen uhin batek  $h/\lambda$  momentu lineala duen partikula batek bezalaxe jokatzen du. Uhin baten uhin-luzeraren eta frekuentziaren arteko erlazioa  $\lambda \cdot \nu = c$  da, non  $c$  uhinaren hedapen abiadura baita.

## 1.2. Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioa

Esan bezala, mekanika kuantikoan zenbait magnitude elkarren osagarriak dira: partikula baten momentu lineala eta posizioa, esaterako. Hori dela eta, magnitude hauek neurtzean, zehaztasun eza suertatzen da.  $X$  eta  $Y$  magnitude osagarrien neurketari dagokion ziurgabetasuna  $\Delta X$  eta  $\Delta Y$  balioen bidez adierazten da (hurrenez hurren), eta ziurgabetasun hauen arteko erlazio matematikoa 2. ekuazioa da.

$$\Delta X \cdot \Delta Y \geq \frac{h}{4\pi} \quad (2)$$

2. ekuazioaren bidez **Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioa** formulatzen da. Ikus daitekeenez, magnitude baten neurketaren ziurgabetasuna zenbat eta txikiagoa izan, magnitude osagarriaren neurketarena hainbat eta handiagoa izango da.

Partikula baten momentu lineala eta posizioa osagarriak direnez, partikularen posizioa eta abiadura zehatzak aldi berean ezagutzetik ez dagoela ondorioztatzen da Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioaren bidez. Geroago ikusiko dugunez, magnitude bat zehazki determinatzen bada, magnitude osagarriari buruz izango dugun informazioa, zehatza izan beharrean, probabilitatearen kontzeptuarekin erlazionaturik egongo da.

## 1.3. Energiaren kuantizazioa

Mekanika kuantikoan uhin-gorpuzkulu dualtasunaz eta Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioaz gain, nahitaezkoa den beste kontzeptu bat dugu: **energiaren kuantizazioa**, hain zuzen.

Efektu fotoelektrikoa adibidetzat hartuz, uhin-izpiak (erradiozio elektromagnetikoak) elektroi batekin elkarreragin ahal izateko energia minimo bat izan behar du, frekuentziarekin zerkusia duena: hain zuzen, fotoi bati dagokion  $h\nu$  energia, non  $\nu$  erradiozioaren frekuentzia baita. Energia fotoien energi unitatearen multiplo osoetan elkar trukutzen denez, energiaren balio guztiak ez daude baimenduak. Hori adierazteko energia kuantizatua dagoela esaten da. Zer esanik ez, mekanika kuantikoak kuantizazio kontzeptu honetatik hartzen du bere izena.

## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

1.4. Schrödinger-en ekuazioa

Newton-en legea sistema makroskopikoen higidura deskribatzeko zutabea den bezala, sistema kuantikoen oinarriko ekuazio matematikoa Schrödinger-en ekuazioa da, 1926an formulatua.

Mekanika kuantikoan, sistemen propietate fisikoak  $\psi$  uhin-funtzioetatik ondorioztatzen dira, zeinak sistema horren Schrödinger-en ekuazioa ebatziz lortzen diren. Oro har, Schrödinger-en ekuazioen planteamendua eta ebazpena zailak dira, bigarren mailako ekuazio diferentzialak baitira.

Sistema geldikor baterako Schrödinger-en ekuazioa ondoko eran formulatzen da (3. ekuazioa):

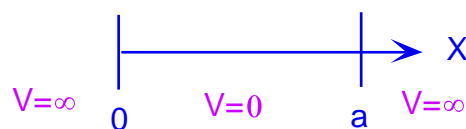
$$H\psi = E\psi \quad (3)$$

non  $H$  operatzaile hamiltondarra bigarren mailako operatzaile diferentziala den eta  $E$ , sistemaren energia osoa (zinetikoa eta potentziala). Operatzaile bat funtzio bati egin behar zaion eragiketa-taldea da. Adibidez, aldagai baten lehen deribatua eta integrala operatzaile matematikoak dira.

Schrödinger-en ekuazioa ebatzi eta gero, emaitzak uhin-funtzio jakin batzuk izango dira. Horrela, sistemaren ezaugarri fisikoak (momentu lineala, energia, ...) uhin-funtzioei egindako eragiketa matematikoen bidez lortzen dira. Magnitude fisiko bakoitzari berezko operatzaileak aplikatzen zaizkiela gaineratu behar da.

1.5. Dimentsio bakarreko kutxan dagoen partikula

Atal honetan sistema kuantiko baten Schrödinger-en ekuazioa ebatziko da. Aukeratutako sistema sinpleenetako bat da: dimentsio bakarreko kutxa batean dagoen partikula bat, hain zuzen. Sistema honi dagokion eredu fisikoa 1. irudian ikus daiteke. Hots, kutxa barruan dagoenean, partikularen energia potentziala zero da, eta kutxatik kanpo dagoenean, infinitoa. Beraz, kutxa barruan dagoenean, partikularen energia bakarra zinetikoa da.



## 1. irudia. Dimentsio bakarreko kutxaren eredu fisikoa.

## 1.5.1. Dimentsio bakarreko kutxako partikulari dagokion Schrödinger-en ekuazioa

Dimentsio bakarreko kutxako partikularen sistema hau deskribatzen duen Schrödinger-en ekuazioa 4. adierazpena da.

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (4)$$

$H$  operatzaile hamiltondarrak (5. ekuazioa) partikularen energia zinetikoa hartzen du kontuan, non  $m$  partikularen masa den eta  $x$ , dimentsio bakarreko kutxaren edozein posizio ( $0 \leq x \leq a$ ).

$$H = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \quad (5)$$

## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

Ekuazio hau ebatziz, sistemaren energi maila baimenduak (6. ekuazioa) eta uhin-funtzio baimenduak (7. ekuazioa) lortzen dira:

$$E(n) = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad (6)$$

$$\psi(n) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (7)$$

E energiak eta  $\psi$  uhin-funtzioak,  $x$  parametroarekikoa ez ezik,  $n$  aldagaiarekiko mendekotasuna ere adierazten dute. Izan ere,  $E$  eta  $\psi$  magnitudeen balio baimenduak,  $n$  balio jakin batzuei dagozkienak dira. Energiak eta uhin-funtzioak  $n$  jakin hauetarako hartzen dituzten balioei ekuazioaren **berezko balio** eta **berezko uhin-funtzio** deritze, hurrenez hurren.

## 1.5.2. Kuantu-zenbakiak

Sistema honetan  $n=1,2,3,\dots$  izan daiteke. Balio hauek eredu fisikoa bete beharrezko ondorioak direla azpimarratu behar da. Hain zuzen, partikula kutxa barruan aurkitzeko ziurtasun osoa izan behar dugunez,  $x=0$  eta  $x=a$  direnean,  $\psi(x)=0$  izan behar du,  $n$  edozein izanda.

Nahitaezko  $n$  magnitude hau **kuantu-zenbaki** bat da. Mekanika kuantikoan, kuantu-zenbakiak sistemaren uhin-funtzio baimenduak ez ezik, energi maila baimenduak ere definitzen dituzte. Beraz, kuantizazioa kuantu-zenbakiak energiari ezarritako ezaugarria da.

Laburbilduz, dimentsio bakarrekotako kutxako partikula  $n$  egoera posibleetan egon daiteke. Egoera bakoitzari uhin-funtzio jakin bat eta energi balio jakin bat dagozkio,  $n$  kuantu-zenbakiaren balioek definitutakoa.

## 1.5.3. Probabilitate-banaketa-funtzioa

Esan bezala, uhin-funtzioak  $n$  kuantu-zenbakiaren araberrako balio desberdinak hartzen ditu. 2. irudian, dimentsio bakarrekotako kutxako partikularen uhin-funtzioak adierazita daude  $n=1$ ,  $n=2$ ,  $n=3$  eta  $n=4$  kasuetan.

Ikus daitekeenez,  $n>1$  denean, uhin-funtzioek balio positiboak eta negatiboak har ditzakete. Horrela,  $x=0$  eta  $x=a$  posizioetan ez ezik, kutxaren zenbait  $x$  posizioetan ere  $\psi=0$  izan behar du  $n>1$  denean. Hitz batean,  $n$  kuantu-zenbakiaren balioa uhin-funtzioak  $a$  luzeran duen erdizikloen kopurua da.  $\psi=0$  direneko posizioei ( $x=0$  eta  $x=a$  posizioei salbu) **nodo** deritze, eta beraz  $\psi(n)$  uhin-funtzio batek  $n-1$  nodo dauzka.

Dimentsio bakarrekotako kutxan dagoen partikularen kasuan uhin-funtzio guztiak errealak izan arren, hainbat sistema kuantiko konplexuagotan uhin-funtzioek balio irudikariak ere har ditzakete. Hau dela eta, uhin-funtzioak ez du inolako esangura fisikorik.

Uhin-funtzioaren karratuak, berriz, badu esangura fisikoa, M. Born-ek postulatu. Dimentsio bakarrekotako kutxako partikulari dagokionez,  $\psi^2(x)$  magnitudearen bidez partikula bat aurkitzeko  $dP$  probabilitate infinitesimala kalkula daiteke  $dx$  luzera infinitesimalean. Hain zuzen,  $dx$  elementu diferentziala  $x_0$  posizioan zentratua baldin badago, probabilitate infinitesimala 8. ekuazioaren bidez kalkulatzen da.

$$dP = \psi^2(x_0) dx \quad (8)$$

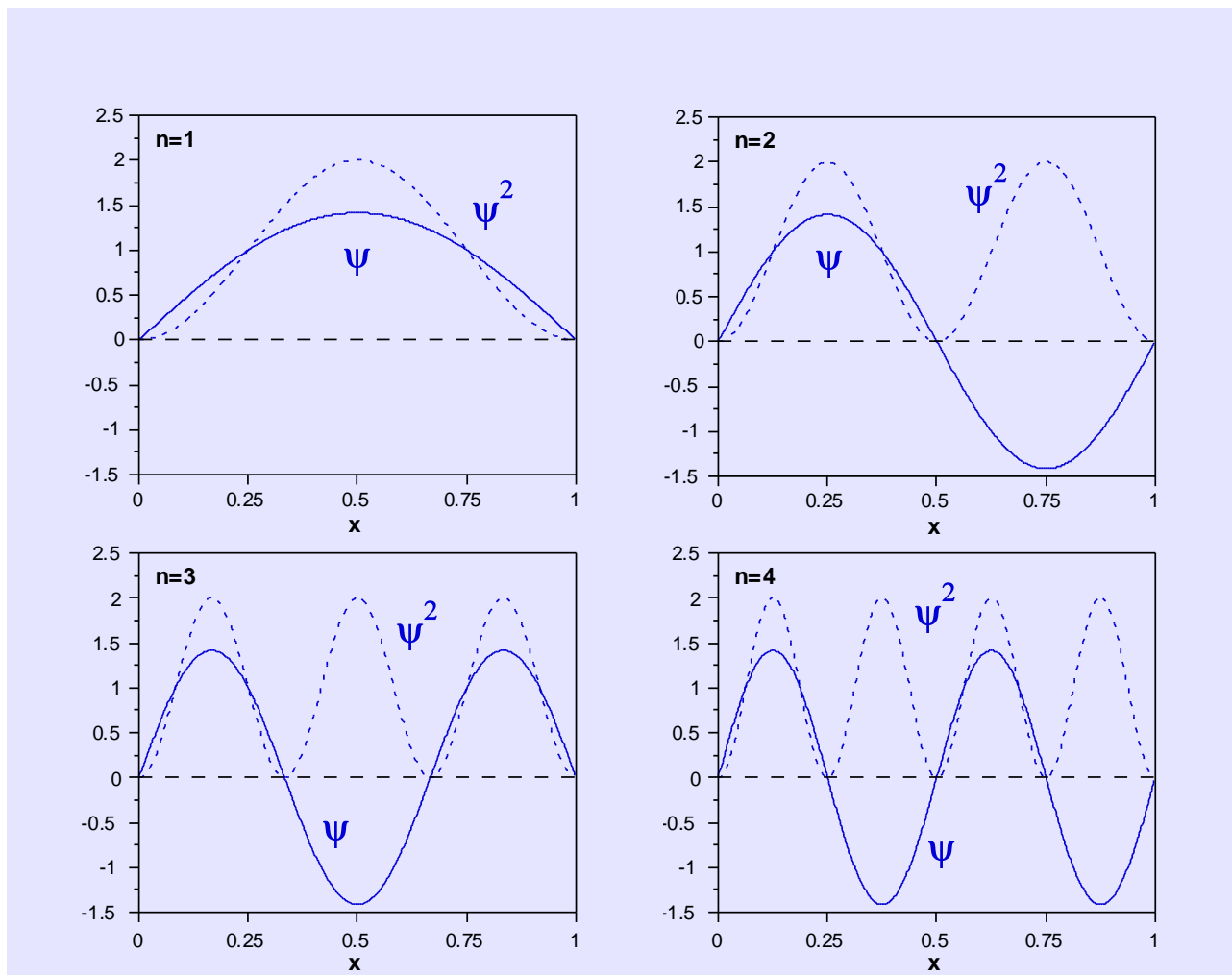
## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

Horrela, partikula  $x_2$ - $x_1$  luzera-tartean aurkitzeko **P probabilitatea**, 9. ekuazioaren bidez kalkula daiteke.

$$P = \int_{x_1}^{x_2} \psi^2(x) dx = \frac{2}{a} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}\right) dx \quad (9)$$

Luzera-tarte osoan integratuz,  $x=0$  baliotik  $x=a$  baliora arte, partikula kutxa barruan aurkitzeko ziurtasun osoa izan beharko genuke. Ziurtasun osoari  $P=1$  balioa egokitzen badiogu, 10. ekuazioa bete behar da.

$$\int_{x=0}^{x=a} \psi^2(x) dx = \frac{2}{a} \int_{x=0}^{x=a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}\right) dx = 1 \quad (10)$$



## 2. Irudia. Dimentsio bakarrekotako kutxan dagoen partikularen uhin-funtzioa ( $\psi$ ) eta probabilitate-banaketaren funtzioa ( $\psi^2$ ), $n=1$ , $n=2$ , $n=3$ eta $n=4$ kuantu-zenbakietarako ( $a=1$ ).

10. ekuazioari normalizazio-baldintza deritzo, non  $\sqrt{\frac{2}{a}}$  bidertzailea **N normalizazio-faktorea** baita. Bai

normalizatu gabeko uhin-funtzioa (11. ekuazioa) eta bai normalizatutakoa (12. ekuazioa) Schrödinger-en ekuazioaren emaitza baimenduak izan arren, normalizazio-baldintza betetzen duen bakarra normalizaturiko uhin-funtzioa da. Horrela, normalizatu gabeko uhin-funtzioaren karratua probabilitateari proportzionala da eta normalizatutako uhin-funtzioaren karratuak probabilitate bera adierazten du.

$$\psi_{NG}(x) = \sin\frac{n\pi}{a} x \quad (11)$$

## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

$$\psi(x) = N \cdot \psi_{\text{NG}} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (12)$$

$\psi^2(x)$  uhin-funtzio normalizatuaren karratuari **probabilitate-banaketaren funtzioa** deritzo. 2. irudian,  $\psi^2(x)$  funtzioak ere irudikatu dira  $n=1$ ,  $n=2$ ,  $n=3$  eta  $n=4$  kasuetan. Ikus daitekeenez, probabilitate-banaketaren funtzio bakoitzak  $n$  maximo dauzka zeinetan partikula aurkitzeko probabilitatea maximoa den. Hots, energia  $n^2$ -ari proportzionala denez (6. ekuazioa), uhin-funtzioak zenbat eta nodo gehiago izan, partikularen energia orduan eta handiagoa da.

Mekanika klasikoan, partikula baten energia zinetikoa  $E=1/2mv^2$  da. Beraz, alde batetik jarraia da eta, beste batetik, abiadurarekiko mendekotasun soila adierazten du. Halaber, ibilbidearen edozein puntutan partikula aurkitzeko probabilitatea bera da. Mekanika kuantikoan, ordea,  $n$  kuantu-zenbakiarekiko mendekotasuna duenez, energia kuantizatua dago. Bestalde, partikula aurkitzeko probabilitatea ibilbidean puntuz puntu aldatuz doa, eta posizio jakin batzuetan maximoa da. Muga-kasuan,  $n$  balioak infinitorantz jotzen duenean ( $n \rightarrow \infty$ ), sistemaren jokabidea egoera klasikorantz hurbiltzen da. Hots, probabilitate-banaketaren funtzioaren maximoen kopuruak infinitorantz jotzen duenez, partikula aurkitzeko probabilitateak ibilbidearen puntu guztietan berbera izatera jotzen du.

Dimentsio bakarrekotako partikularen deskripzio hau eta Heisenberg-en ziurgabetasunaren printzipioa bat datozela azpimarratu behar da. Izan ere, Schrödinger-en ekuazioaren emaitzak energiaren balio zehatzak direnez, partikularen posizio zehatza determinatu gabe geratzen da. Sistema honetan partikularen posizioari buruzko informazio bakarra probabilitate-banaketaren funtzioak ematen duena da. Partikularen posizio zehatza determinatzeko sistemaren deskripzioari heldu bazaio, energia zehatza ezagutzerik ez dago. Hots, sistema kuantiko gehienak energia zehatzak determinatzeko asmoz planteatzen dira.

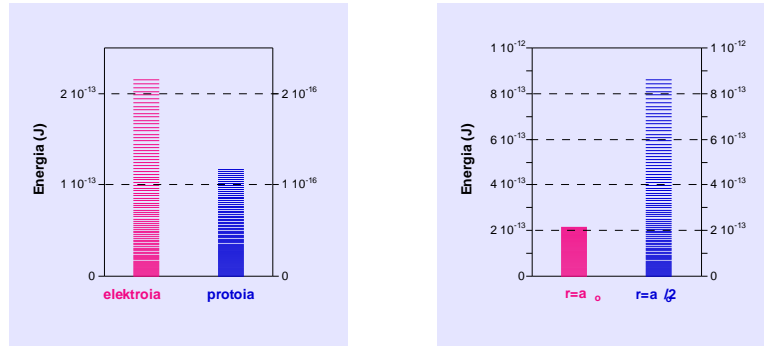
#### 1.5.4. Dimentsio bakarrekotako partikulari dagozkion energi mailak

Demagun  $r$  luzerako dimentsio bakarrekotako kutxa batean dagoen elektroi bat dugula. 6. ekuazioaren bidez, elektroi horren  $n$  balioen arabeko energi maila baimenduak erraz kalkula daitezke ( $m_e=0.91096 \cdot 10^{-30}$  kg). Antzeko beste kutxa batean dagoen protoi baten energi mailak era berean kalkula daitezke ( $m_p=1.672614 \cdot 10^{-27}$  kg). 3. irudian, lehen ehun energi mailak adierazita daude elektroi eta protoiaren kasuetan:  $r=a_0$  da, non  $a_0$  Bohr-en erradioa den. Mekanika kuantikoan Bohr-en erradioa ( $a_0=0.52917 \text{ \AA}$ ) oso unitate erabilia da, Bohr-Rutherford teoriaren arabeko hidrogenoaren lehen orbita elektronikoaren erradioa baita. Elektroiaren kasuan,  $r=a_0$  luzeraz gain,  $r=a_0/2$  luzerako kutxaren kasuan ere egin dira kalkuluak.

Ikus daitekeenez,  $n$  balioa zenbat eta handiagoa izan, orduan eta handiagoa da elkarren segidako bi balioen arteko energi diferentzia ( $E_{n-1}-E_n$ ). Sistema honen berezitasuna da hori, eta ezin da orokortzat hartu. Halaber, protoiaren energi mailak elektroiarenak baino elkarrengandik hurbilago daudela ikusten da. Bestalde, kutxaren dimentsioak konparatzean,  $r=a_0$  luzerako kutxaren diagrama  $r=a_0/2$  luzerako kutxarena baino estuagoa dela aurkitzen da.

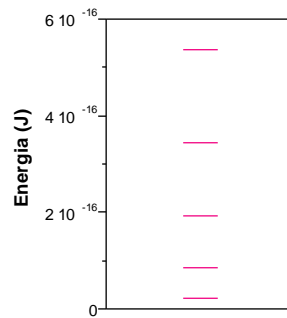
Beraz, sistema 'mikroskopikoagoa' den heinean (partikularen masa eta kutxaren luzera txikiagoak diren heinean), energi mailen taldea hedatuagoa da eta, horren ondorioz, partikulen jokabidea 'kuantikoagoa' da. Orokortzat har daitezkeen ondorioa da azken hau sistema kuantikoetan.

## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)



3. irudia. Lehen ehun energi mailak (ezk.)  $r=a_0$  luzerako dimentsio bakarrekotako kutxan dagoen elektroi eta protoi partikulentzat eta (esk.)  $r=a_0$  eta  $r=a_0/2$  luzerako kutxetan dagoen elektroi batentzat.

3. irudian, diagrametako beheko energi mailak elkarrengandik oso hurbil ikusten dira. Hala ere, eskala egokian jarri gero energi mailen arteko diferentziak igartzen dira. Hots, 4. irudian,  $r=a_0$  luzerako kutxan dagoen elektroiaren lehen bost energi mailak baino ez dira adierazi.



4. irudia. Lehen bost energi mailak  $r=a_0$  luzerako dimentsio bakarrekotako kutxan dagoen elektroi batentzat.

### 1.5.5. Egoeren arteko trantsizioak

Demagun dimentsio bakarrekotako kutxa batean dagoen partikula bat dugula,  $n$  kuantu-zenbakiak definitutako energia duena. Partikula hau  $n+1$  kuantu-zenbakiak definitutako goi-mailako energi egoera batera pasa daiteke, baldin eta partikulak bi egoera hauen arteko energi diferentzia ( $\Delta E$ ) zurgatzen badu. Energi diferentzia hau 13. ekuazioaren bidez kalkula daiteke. Partikulak zurgatu behar duen energia hori erradiazio elektromagnetiko egoki batek eman behar diola gogoan izan behar da.

$$\Delta E_n^{n+1} = E_{n+1} - E_n = (2n+1) \frac{h^2}{8ma^2} \quad (13)$$

Erradiazio elektromagnetiko batek partikula honekin elkarrengandik dezan, ondokoa bete behar da: erradiazio elektromagnetikoaren fotoiaren energia,  $h\nu$ , eta partikulak zurgatu behar duen energia,  $\Delta E$ , berdinak izan behar dute ( $\Delta E = h\nu$ ).

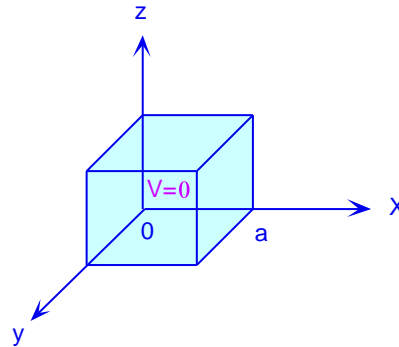
$\Delta E = h\nu$  adierazpenari **Bohr-en frekuentzia-baldintza** deritzen. Baldintza honen arabera, elkarrengandik urrun dauden energi egoeren arteko trantsizioak gerta daitezten, frekuentzia altuko erradiazioaren interakzioa beharrezkoa da, eta alderantziz.



## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

1.6. Hiru dimentsioko kutxa dagoen partikula

1.5. atalean aztertutako sistemaz baliatuz, hiru dimentsioko kutxa batean dagoen partikula batez osatutakoari helduko diogu atal honetan. Kasu honetan ere, kutxa barruan dagoenean, partikularen energia potentziala zero da, eta kutxatik kanpo, infinitoa (5. irudia). Horrela, partikula kutxa barruan aurkitzeko ziurtasun osoa daukagu.

**5. Irudia. Hiru dimentsioko kutxaren eredu fisikoa.**

Hiru dimentsioko kutxa dagoen partikularen Schrödinger-en ekuazioa 14. ekuazioan adierazi da:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E\psi \quad (14)$$

Ekuazio hau ardatz kartesiarren norabideen arabera hiru ekuazio independentetan bana daitezke. Horrela, kutxa kubikoaren aldea  $a$  izanik, lortutako uhin-funtzioak 15. ekuazioak dira. Zer esanik ez, dimentsio bakarrekotako kutxako partikularen kasuan lortutakoa eta  $x$ ,  $y$  eta  $z$  ardatzetako hauek antzekoak dira.

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_x \pi}{a} x \\ \psi(y) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_y \pi}{a} y \\ \psi(z) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_z \pi}{a} z \end{aligned} \quad (15)$$

Hiru dimentsioko kutxa dagoen partikulak hiru askatasun-gradu dituenaz, hiru kuantu-zenbaki suertatzen dira:  $n_x$ ,  $n_y$  eta  $n_z$ . Kuantu-zenbaki hauek har ditzaketen balio posibleak positiboak eta osoak dira 1-etik hasita.

Bestalde, energi balio posibleak 16. ekuazioaren bidez kalkula daitezke.

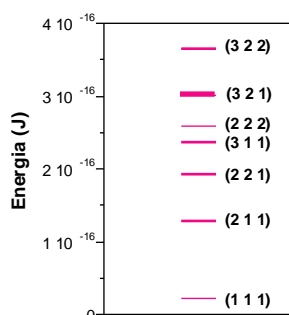
$$E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\hbar^2}{8ma^2} \quad (16)$$

Sistema hau hiru dimentsiokoa denaz, degenerazioaren kontzeptua hartu behar da kontuan. Hots, hiru kuantu-zenbakiak elkarren independenteak direnez, haien arteko konbinazio determinatu batzuk energia bereko egoerei dagozkie. Egoera hauei **degeneratu** deritze. Energia bera badute ere, egoera hauek desberdinak dira. Sistema kuantikoetan hain arruntak diren egoera degeneratuak bereziki azpimarratzekoak izaten dira atomo zein molekulez osatutako sistemetan.

6. irudian  $r=a_0$  aldeko kutxa kubiko batean dagoen elektroi baten lehen hogei energi mailak adierazita daude. Ikus daitezkeenez, (2,1,1) labela duen energi maila hiru aldiz degeneratua da, (2,1,1),

## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

(1,2,1) eta (1,1,2) egoerei baitagokie. Era berean, (2,2,1), (3,1,1) eta (3,3,2) energi mailak ere hiru aldiz degeneratuak dira. (3,2,1) energi maila, ordea, sei aldiz degeneratuta dago. Hots, energi maila ez degeneratu bakarrak (1,1,1) eta (2,2,2) dira, bakoitzari egoera bakarra baitagokio.

6. irudia. Lehen hogeiki energi mailak  $r=a_0$  aldeko hiru dimentsioko kutxan dagoen elektroi batentzat.

Atomoen osagaiak elektroiez osatutako geruza elektronikoa eta nukleoa dira. Atomoaren masa gehiena nukleoan biltzen da, protoiak eta neutroiak bertan baitaude ( $m_p=m_n=1.6725 \cdot 10^{-27}$  Kg eta  $m_e=9.1091 \cdot 10^{-31}$  Kg). Protoiek eta elektroiek kontrako zeinuko eta balio bereberko karga dute ( $c_p=c_e=1.60 \cdot 10^{-19}$  C), eta neutroiak kargarik gabeko partikulak dira. Hots, atomoak neutroak direnez, elektroien kopurua eta protoien kopurua bera da atomo guztietan. Alabaina, atomoek elektroiak gal edo beregana ditzakete ioi bilakatuz. Elektroiak askatzen direnean, ioiari katioi deritzo (positiboki kargaturik) eta elektroiak onartzen direnean, ioiari anioi deritzo (negatiboki kargaturik).

Atomo bateko protoien kopurua (Z) zenbaki atomikoa da, eta protoi eta neutroien kopurua (M) zenbaki masikoa da. Atomoen ezaugarri hauek elementuen ikurraren ezker aldean adierazten dira azpiindize eta goiindize bezala, hurrenez hurren:  ${}^1_1\text{H}$  eta  ${}^4_2\text{He}$ , esaterako.

Elementu baten atomo guztiek Z bera badute ere, M desberdinak izan ditzakete. Horrela, M desberdinetako elementu beraren atomoak isotopoak dira. Elementu baten isotopo guztiek ez dute zertan egonkorak izan. Izan ere, isotopo ezegonkorak erradiazioa askatuz desintegratu egiten dira, eta, horregatik, erradiaktibo deritze. Isotopoen egonkortasunak nukleoan dauden partikulen arteko interakzioekin du zerikusia, baina indar hauen azterketa testuliburu honetatik kanpo geratzen da.

Atomoen egonkortasuna ulertzeko, ikuspuntu kimikotik aztertu behar ditugun indarrak, nukleoaren eta elektroien arteko erakarpenak eta elektroien arteko aldarapenak dira, besteak beste. Lehen atal honetan atomoen deskribapen kuantikoari ekingo diogu, eta, horretarako, kapitulu honetan kasurik sinpleena joko dugu abiapuntutzat: atomo hidrogenoideak, hain zuzen ere.

## 2. ELEKTROI BAKARREKO ATOMOAK: ATOMO HIDROGENOIDEAK

### 2.1. Atomo hidrogenoideen deskribapen kuantikoa

Atomo hidrogenoideek elektroi bakar bat dute. Hau dela eta, atomo hauen jokabidea nukleoaren eta elektroiaren arteko erakarpenean datza soilik; horrela, atomoen deskribapena zeharo sinplifikatzen da, elektroiaren arteko aldarapen indarrek eragiten ez baitute. Praktikan, hidrogenoaz gain, oso atomo hidrogenoide gutxi ezagutzen dira: adibidez,  $\text{He}^+$  atomo-ioia.

#### 2.1.1. Atomo hidrogenoideen energia potentziala

Esan bezala, atomo hidrogenoideetan, nukleoaren erakarpen indarraren menpe dagoen elektroiaren jokabidea deskribatu behar da. Horretarako,  $+Ze$  karga duen nukleoa erreferentzizko koordinatu-sistemaren jatorrian kokatzen da. Elektroiak ( $-e$  karga duen partikulak), energia zinetikoaz gain, 17a. ekuazioaren bidez adierazitako nukleoa eta elektroiaren arteko  $r$  distantziaren arabera energia potentziala ( $V$ ) izango du.

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (17a)$$

17. ekuazioan agertzen den  $\epsilon_0$  konstante unibertsala hutsaren permitibitatea da ( $4\pi\epsilon_0 = 1.11264 \cdot 10^{-10} \text{ C}^2\text{N}^{-1}\text{m}^{-2}$ ). Ikus daitekeenez, adierazitako potentziala kontrako zeinua duten bi kargen arteko erakarpen indarrarekin ( $F$ ) du zerikusia (17b. ekuazioa).

$$F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_+q_-}{r^2} \quad (17b)$$

#### 2.1.2. Atomo hidrogenoideen Schrödinger-en ekuazioa

Edozein sistema mekano-kuantiko deskribatzeko, Schrödinger-en ekuazioa (3. ekuazioa) planteatu eta ebatzi behar da. Atomo hidrogenoideen kasuan, 18. ekuazioa dugu ebatzi behar den Schrödinger-en ekuazioa.

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \psi = E\psi \quad (18)$$

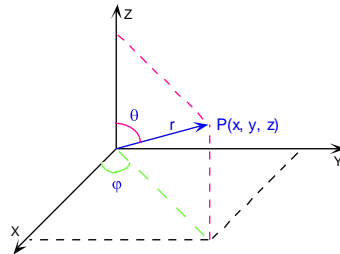
Hiru dimentsioko kutzako partikularen Schrödinger-en ekuazioarekin konparatuz (10. ekuazioa), 18. ekuazioaren operatzaile hamiltondarrea gainerako termino bat dagoela ikus daiteke. Izan ere, 18. ekuazioaren lehen terminoa energia zinetikoari dagokio (19. ekuazioa), eta gainerakoa, energia potentzialari (20. ekuazioa).

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (19)$$

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (20)$$

## 4. Elektroi bakarrekiko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

Elektroiaren energia potentzialari dagokion operatzailearen terminoak simetria esferikoa duenez ( $r$  distantziarekiko mendekotasun soila adierazten duenez), koordenatu kartesiarretatik esferikoetara pasatzea komeni da.



## 7. irudia. Koordenatu esferikoak

Erreferentzizko sistema berri honetan,  $(x, y, z)$  aldagai-hirukotea erabili beharrean,  $(r, \theta, \varphi)$  hirukotea erabiliko dugu. Aldagai hauen arteko erlazioak hurrengoak dira:

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

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

$$z = r \cos \theta$$

Aldaketa hau egin ondoren, 21. ekuazioa dugu.

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[ \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0} \psi = E \psi \quad (21)$$

Ekuazio honek konplexuagoa ematen badu ere, abantaila nabariak ditu 19. ekuazioarekin konparatuz. Izan ere, 21. ekuazioa ebatziz lortzen diren uhin-funtzio bakoitza bi funtzio desberdinen biderkadura izango da (22. ekuazioa):  $R$  funtzio erradiala,  $r$  distantziarekiko mendekotasuna adierazten duena, eta  $A$  funtzio angeluarra,  $\theta$  eta  $\varphi$  angeluekiko mendekotasuna adierazten duena.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot A(\theta, \varphi) \quad (22)$$

## 2.2. Kuantu-zenbakiak

Hiru dimentsioko kutxako partikularen kasuan bezala, atomo hidrogenoideen kasuan ere, hiru kuantu-zenbaki agertzen dira Schrödinger-en ekuazioa ebatzi eta gero. Kuantu-zenbaki hauek nagusia ( $n$ ), azimutala ( $l$ ) eta magnetikoa ( $m_l$ ) dira, eta ez dira elkarren independenteak. Hots,  $n$  kuantu-zenbaki nagusiak balio osoak har ditzake zerotik hasita. Kuantu-zenbaki azimutalak,  $l$  delakoak, zerotik  $(n-1)$ -erako balioak har ditzake, eta  $m_l$  kuantu-zenbaki magnetikoa  $-l$  baliotik  $+l$  baliora artekoa izan daiteke.

Laburbilduz,

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

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

$$m_l = -l, -l+1, \dots, -1, -2, 0, 1, 2, \dots, l-1, l$$

## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

Hiru kuantu-zenbakiaren konbinazio bakoitzak uhin-funtzio bat definitzen du. Uhin-funtzio hauek izendatzeko, ondokoari jarraitzen zaio: n-ren balioaren ondoan, l kuantu-zenbakia adierazten duen letra idazten da.

l	0	1	2	3	4
letra	s	p	d	f	g

Horrela, 3d uhin-funtzioaren kuantu zenbaki nagusia eta azimutala, 3 eta 2 dira, hurrenez hurren. Kuantu-zenbaki magnetikoa adierazi nahi bada, azpiindize modura idazten da: 3d<sub>2</sub>, esaterako. 1. taulan kuantu-zenbakiaren lehen konbinazio posibleak bildu dira. Ikus daitekeenez, l balio bakoitzeko, (2l+1) uhin-funtzio daude: adibidez, l=2 denean, bost nd uhin-funtzio lortzen dira. Bestalde, n balio bakoitzeko, uhin-funtzioaren emaitza baimenduak n<sup>2</sup> dira: esaterako, n=3 denean, bederatzi emaitza lortzen dira (3s bat, hiru 3p eta bost 3d).

## 1. taula. Kuantu-zenbakiaren lehen konbinazio posibleak atomo hidrogenoideentzat

kuantu-zenbakiak			uhin-funtzioak	l balio berbereko hirukote- kopurua	n balio berbereko hirukote- kopurua
n	l	m <sub>l</sub>		2l+1	n <sup>2</sup>
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
2	1	-1,0,1	2p <sub>-1</sub> , 2p <sub>0</sub> , 2p <sub>+1</sub>	3	4
3	0	0	3s	1	9
3	1	-1,0,1	3p <sub>-1</sub> , 3p <sub>0</sub> , 3p <sub>+1</sub>	3	9
3	2	-2,-1,0,1,2	3d <sub>-2</sub> , 3d <sub>-1</sub> , 3d <sub>0</sub> , 3d <sub>+1</sub> , 3d <sub>+2</sub>	5	9
4	0	0	4s	1	16
4	1	-1,0,1	4p <sub>-1</sub> , 4p <sub>0</sub> , 4p <sub>+1</sub>	3	16
4	2	-2,-1,0,1,2	4d <sub>-2</sub> , 4d <sub>-1</sub> , 4d <sub>0</sub> , 4d <sub>+1</sub> , 4d <sub>+2</sub>	5	16
4	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	4f <sub>-3</sub> , 4f <sub>-2</sub> , 4f <sub>-1</sub> , 4f <sub>0</sub> , 4f <sub>+1</sub> , 4f <sub>+2</sub> , 4f <sub>+3</sub>	7	16

## 2.3. Atomo hidrogenoideen energia baimendua

21. ekuazioa ebatzi eta gero, atomo hidrogenoideek izan ditzaketen energi balioak 23. ekuazioaren bidez lortzen dira, non R Rydberg konstantea den.

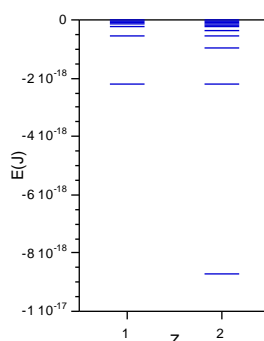
$$E = -\frac{2\pi m e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2 n^2} = -R \frac{Z^2}{n^2} \quad (23)$$

$$\text{non } R = \frac{2\pi m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2} = 2.1798 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13.605 \text{ eV}$$

Baimendutako energi mailak n kuantu-zenbakiarekiko mendekotasun bakarra adierazten dutenez, n balio bakoitzeko n<sup>2</sup> egoera degeneratu daude. Horrela, n=1 egoera izan ezik, beste guztiak degeneratuak dira atomo hidrogenoideetan. Hots, 2s egoeraren energia eta hiru 2p egoerena bera da. Modu berean, n=3 kuantu-zenbakia duten bederatzi egoerek (3s bat, hiru 3p eta bost 3d) energia bera dute. Beraz, n handitzen den heinean, egoeraren degenerazioa gero eta handiagoa da.

## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

23. ekuazioaren bidez kalkulaturako lehen zortzi energi maila baimenduak 8. irudian adierazi dira H atomo ( $Z=1$ ) eta  $\text{He}^+$  atomo-ioi ( $Z=2$ ) delakoentzat. Kontrako zeinuko kargak osatutako sistemaren energia potentziala kargen arteko distantziarekin handitzen dela besterik ez du adierazi nahi energi balioak negatiboak izateak: hain zuzen, distantziak infinitorantz jotzen duenean ( $r \rightarrow \infty$ ), sistemaren energia potentzialak zerorantz jotzen du ( $V \rightarrow 0$ ). Horrela, kuantu-zenbaki nagusiak infinitorantz jotzen duenean ( $n \rightarrow \infty$ ), elektroiaren energia osoak zerorantz jotzen du ( $E \rightarrow 0$ ).



**8. irudia. Lehen zortzi energi maila baimenduak H atomo ( $Z=1$ ) eta  $\text{He}^+$  atomo-ioi ( $Z=2$ ) espezieentzat**

Elkarren segidako energi mailak zerotik gero eta gertuago daudenez, elkarrengandik gero eta hurbilago daude. Kuantu-zenbaki nagusia infinitoa izango balitz ( $n = \infty$ ), elektroia nukleotik zeharo askaturik egongo litzateke, eta atomoa ioi bilakatuko litzakete. Behin nukleoaren eraginetik kanpo egonez gero, elektroi isolatuaren energia ez dago kuantizaturik. Izan ere, elektroiaren energi mailek banda jarrai bat eratzen dute.

H atomoaren eta  $\text{He}^+$  atomo-ioiaren energi mailak konparatzean,  $\text{He}^+$  atomo-ioiaren balioak negatiboagoak direla ikus daiteke, espezie honen karga nuklearra ( $Z$ ) handiagoa baita. Hots, elektroia  $n=1$  egoeran izanik,  $\text{He}^+$  atomo-ioiaren ionizazioak H atomoarenak baino energia gehiago behar du.

## 2.4. Uhin-funtzio hidrogenoideak

Esan bezala, 21. ekuazioa ebatziz, energi mailak ez ezik, atomo hidrogenoideen uhin-funtzioak ere lortzen dira. Hala ere, energiak  $n$  kuantu-zenbakiarekiko mendekotasun soila adierazten badu ere, uhin-funtzioek ( $n, l, m_l$ ) hirukote posibleen arabera hartuko dituzte balio baimenduak.

### 2.4.1. Uhin-funtzioen emaitzak

2. taulan atomo hidrogenoideen lehen bost uhin-funtzioak adierazita daude funtzio erradial eta funtzio angeluar direlakoetan banandurik. 24. ekuazioan ikus daitekeenez (non  $V_{\text{osoa}}$ , espazio osoa den), funtzio hauek dagoeneko normalizaturik daude.

$$\int_{V_{\text{osoa}}} \psi^2(r, \theta, \varphi) dV = \int_{r=0}^{r=\infty} R^2(r) \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} A^2(\theta, \varphi) dV = 1 \quad (24)$$

## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

**2. taula. Lehen bost uhin-funtzio hidrogenoide normalizatuak:  $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \cdot A(\theta,\varphi)$** 

n	l	m <sub>l</sub>	$\psi(r,\theta,\varphi)$	R(r)	A( $\theta,\varphi$ )
1	0	0	1s	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	0	0	2s	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	1	0	2p <sub>0</sub>	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$
2	1	+1	2p <sub>+1</sub>	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{-i\varphi}$
2	1	-1	2p <sub>-1</sub>	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{+i\varphi}$

Z= zenbaki atomikoa eta a<sub>0</sub>=Bohr-en erradioa

3. taulan ikus daitekeenez, n eta l berberak dituzten uhin-funtzioen atal erradiala bera da: adibidez, 2p<sub>0</sub>, 2p<sub>+1</sub> eta 2p<sub>-1</sub>. Halaber, l eta m<sub>l</sub> berberak dituzten uhin-funtzioek atal angeluar bera dute: 1s eta 2s, esaterako. Beraz, R(r)=R(n,l) eta A( $\theta,\varphi$ )=A(l,m<sub>l</sub>).

Bestalde, 2p<sub>+1</sub> eta 2p<sub>-1</sub> uhin-funtzioen atal angeluarrak irudikariak dira. Gertaera hau n>1 mailetan maiz suertatzen denez, uhin-funtzio errealak lortzeko konponbide matematikoa aurkitu behar da. Hain zuzen, normalizatutako funtzio degeneratuen konbinazio matematikoak egiten dira (hauek linealki independenteak izan behar dute). Hots, mekanika kuantikoan, uhin-funtzio degeneratuen konbinazio lineal guztiak Schrödinger-en ekuazioaren emaitza baliagarriak dira.

Aipatutako 2p<sub>+1</sub> eta 2p<sub>-1</sub> uhin-funtzio irudikarien ordean, uhin-funtzio errealak lortzeko egiten diren konbinazio matematikoak hurrengo hauek dira:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2p_{+1}} + \psi_{2p_{-1}}) = \psi_{2p_x} \quad (25)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}i} (\psi_{2p_{+1}} - \psi_{2p_{-1}}) = \psi_{2p_y}$$

Eragiketa matematiko hauek hurrengo erlazioak erabiliz burutzen dira:

$$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$$

$$\frac{1}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \cos\varphi \quad (26)$$

$$\frac{1}{2i} (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) = \sin\varphi$$

Horrela kalkulaturako uhin-funtzio errealak 3. taulan adierazi dira. Kalkulaturako uhin-funtzio berrien ikurak 2p<sub>x</sub> eta 2p<sub>y</sub> izanda (25. ekuazioa), 2. taulako 2p<sub>0</sub> uhin-funtzioari orain 2p<sub>z</sub> ikurra egokitu zaio. Aurrerago ikusiko dugunez, ikur berri hauek uhin-funtzioen geometriarekin eta simetriarekin dute zerikusia.

## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

## 3. taula. Hiru 2p uhin-funtzio hidrogenoide errealak eta normalizatuak

$\psi(r,\theta,\varphi)$	$R(r)$	$A(\theta,\varphi)$
$2p_z$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$
$2p_x$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\varphi$
$2p_y$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \sin\varphi$

$Z$ = Zenbaki atomikoa eta  $a_0$ =Bohr-en erradioa

Aurreko uhin-funtzio guztietan  $a_0$  agertzen denez,  $r$  distantzia Bohr-en erradio-unitateetan adierazi ohi da (alegia,  $a_0=1$ ). Hau eginda, 4 eta 5. tauletan lehen funtzio erradialak,  $R(n,l)$ , eta funtzio angeluarrak,  $A(l,m_l)$ , adierazi dira, hurrenez hurren; guztiak normalizatuak eta errealak.

4. taula.  $R(n,l)$  funtzio erradial hidrogenoide normalizatuak

1s	$2Z^{3/2} e^{-Zr}$
2s	$\frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{2}} (2-Zr) e^{-Zr/2}$
2p	$\frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{6}} Zr e^{-Zr/2}$
3s	$\frac{2Z^{3/2}}{81\sqrt{3}} (27-18Zr+2Z^2r^2) e^{-Zr/3}$
3p	$\frac{4Z^{3/2}}{81\sqrt{6}} (6Zr-Z^2r^2) e^{-Zr/3}$
3d	$\frac{4Z^{3/2}}{81\sqrt{30}} Z^2r^2 e^{-Zr/3}$
4s	$\frac{Z^{3/2}}{786} (192-144Zr+24Z^2r^2-Z^3r^3) e^{-Zr/4}$
4p	$\frac{Z^{3/2}}{256\sqrt{15}} (80Zr-20Z^2r^2+Z^3r^3) e^{-Zr/4}$
4d	$\frac{Z^{3/2}}{768\sqrt{5}} (12Z^2r^2-Z^3r^3) e^{-Zr/4}$
4f	$\frac{Z^{3/2}}{768\sqrt{35}} Z^3r^3 e^{-Zr/4}$

$Z$ = zenbaki atomikoa



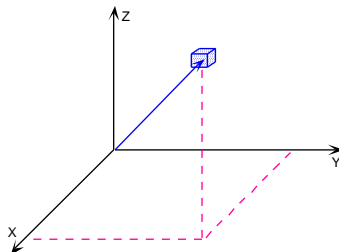
## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

5. taula.  $A(l, m_l)$  funtzio angeluar hidrogenoide normalizatuak

s	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$f_{z^3}$	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}} 5\cos^3\theta 3\cos\theta$
$p_z$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$	$f_{z^2x}$	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}} (5\cos^2\theta - 1)\sin\theta\cos\varphi$
$p_x$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta\cos\varphi$	$f_{z^2y}$	$\frac{\sqrt{42}}{8\sqrt{\pi}} (5\cos^2\theta - 1)\sin\theta\sin\varphi$
$p_y$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta\sin\varphi$	$f_{z(x^2-y^2)}$	$\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{\pi}} \cos\theta \sin^2\theta (2\cos^2\varphi - 1)$
$d_{z^2}$	$\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$	$f_{zxy}$	$\frac{\sqrt{105}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta \sin^2\theta \cos\varphi \sin\varphi$
$d_{zx}$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta\sin\theta\cos\varphi$	$f_{x^3}$	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}} \sin^3\theta (4\cos^2\varphi - 3\cos\varphi)$
$d_{zy}$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta\sin\theta\sin\varphi$	$f_{y^3}$	$\frac{\sqrt{70}}{8\sqrt{\pi}} \sin^3\theta (3\sin\varphi - 4\sin^2\varphi)$
$d_{x^2-y^2}$	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \sin^2\theta(2\cos^2\varphi - 1)$		
$d_{xz}$	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \sin^2\theta\sin\varphi\cos\varphi$		

## 2.4.2. Uhin-funtzioen esangura fisikoa

Espazioko puntu bakoitzean uhin-funtzio batek hartzen duen balioa positiboa, zero nahiz negatiboa izan daiteke. 1.5.3. atalean adierazi den bezala,  $\psi$  uhin-funtzioak inolako esangura fisikorik izan ez arren,  $\psi^2$  funtziotik Born-en interpretazioa egin daiteke. Hots,  $\psi^2$  **probabilitate-banaketaren funtzioak**,  $(x_0, y_0, z_0)$  posizioan zentratutako  $dV$  bolumen diferentzial batean elektroia aurkitzeko probabilitate diferentziala ( $dP$ ) adierazten du (9. irudia): alegia,  $\psi^2(x_0, y_0, z_0)dV = dP$ .

9. irudia.  $(x_0, y_0, z_0)$  posizioan zentratutako  $dV$  elementu diferentziala

## 4. Elektroi bakarrekotako atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

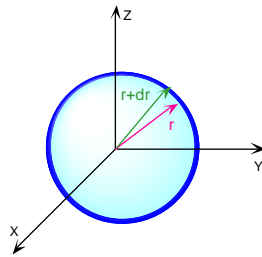
Bolumen jakin batean ( $V$ ) elektroia aurkitzeko probabilitatea ( $P$ ) 27. ekuazioaren bidez kalkula daiteke. Beraz,  $\psi^2(x,y,z)$  probabilitate-banaketa funtzioa espazio osoan integratuz gero, elektroia aurkitzeko ziurtasun osoa izango dugu. Ziurtasun osoari  $P=1$  balioa emanez, normalizazio-baldintza bete behar da.

$$P = \int_V \psi^2(x,y,z) dv = \int_V \psi^2(r,\theta,\varphi) dv \quad (27)$$

Hiru askatasun-gradu dituen, probabilitate-banaketa funtzioaren azterketa ez da erraza. Horren ordez, uhin-funtzioaren atal erradialarekin eta angeluarrarekin erlazionaturik dauden probabilitate-funtzioak bereizturik aztertzea komeni da.

$R(r)$  funtzio erradial batek  $r$  erradioko esfera bateko puntu guztietan balio bera hartzen duenez, funtzio erradial guztiek simetria esferikoa dute. Era berean,  $R^2(r)$  funtzioak ere esferikoa dira. Beraz,  $r_0$  erradioan zentratutako dagoen  $dr$  lodierako koroa esferikoa batean (10. irudia) elektroia aurkitzeko probabilitatea ( $dP$ ) kalkulatzeko, 28. ekuazioa hartu behar da kontuan. Hots,  $r$  erradioko esfera baten bolumena  $(4/3)\pi r^3$  izanik, esferaren erradioa  $dr$  luzeran handitzen bada, esferak duen gainerako bolumena ( $dV$ ),  $4\pi r^2 dr$  izango da.

$$dV = \frac{d\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{dr} dr = 4\pi r^2 dr \quad (28)$$

10. irudia.  $r$  erradioko eta  $dr$  lodierako koroa esferiko diferentziala (zonalde iluna)

Horrela,  $r_0$  erradioko eta  $dr$  lodierako koroa esferikoa batean ( $dV$ ) elektroia aurkitzeko probabilitatea ( $dP$ ), 29. ekuazioaren bidez adierazten da, non  $4\pi r^2 R^2(r)$  **banaketa erradialaren funtzioa** den.

$$dP = R^2(r_0) dV = 4\pi r^2 R^2(r_0) dr \quad (29)$$

Laburbilduz,  $\psi^2$  **probabilitate-banaketa funtzioak** ( $x_0, y_0, z_0$ ) posizioan zentratutako  $dV$  bolumen diferentzial batean elektroia aurkitzeko probabilitatea adierazten du.  $4\pi r^2 R^2$  **banaketa erradialaren funtzioak**  $r_0$  erradioko eta  $dr$  lodierako koroa esferikoa batean elektroia aurkitzeko probabilitatea adierazten du.

Funtzio angeluarrarekin erlazionaturik dagoen probabilitateak geroxeago definituko dugun orbitalaren kontzeptuaren simetria eta orientazioarekin du zerikusia.

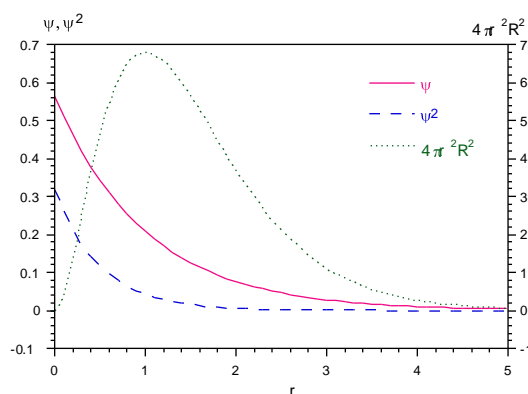
## 4. Elektroi bakarrek atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

2.4.3.  $\psi_{n,0,m_l}$  uhin-funtzioak: s orbitalak

2.4 eta 2.5. tauletan agertzen diren funtzioak erabiliz,  $1s$  uhin-funtzioa idatz daiteke (30. ekuazioa).

$$\psi_{1s} = R_{1s} \cdot A_s = 2Z^{3/2} e^{-Zr} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr} \quad (30)$$

Hots,  $A_s$  funtzio angeluarra konstantea denez,  $4\pi r^2 R_{1s}^2$  funtzioak ez ezik,  $\psi_{1s}$  eta  $\psi_{1s}^2$  direlakoez ere simetria esferikoa dute. 11. irudian, hiru funtzio hauek irudikatu dira  $r$  distantziaren aurrean. Ikus daitekeenez,  $r=0$  denean  $\psi_{1s} \rightarrow \infty$ ,  $\psi_{1s}^2 \rightarrow \infty$  eta  $4\pi r^2 R_{1s}^2 = 0$ . Bestalde,  $r$  distantziak infinitorantz jotzen duenean ( $r \rightarrow \infty$ ), hirurek jotzen dute zerorantz ( $\psi_{1s} \rightarrow 0$ ,  $\psi_{1s}^2 \rightarrow 0$  eta  $4\pi r^2 R_{1s}^2 \rightarrow 0$ ). Hau dela eta,  $4\pi r^2 R_{1s}^2$  funtzioak maximo bat du  $r=1$  distantzian (gogoan izan  $a_0=1$ ). Elektroia aurkitzeko probabilitate maximoa  $a_0$  erradioko eta  $dr$  lodierako koroa esferikoa diferentzial bati dagokiola adierazten du honek.  $\psi_{1s}^2$  funtzioak, ordea,  $dV$  bolumen diferentzialean elektroia aurkitzeko probabilitate maximoa nukleotik gero eta gertuago dagoela adierazten du.  $\psi_{1s}^2$  probabilitate-banaketaren funtzioaren eta  $4\pi r^2 \psi_{1s}^2$  banaketa erradialaren funtzioaren arteko desberdintasun hau azaltzeko,  $r$  zenbat eta txikiagoa izan, koroa esferetako diferentzialaren bolumena orduan eta txikiagoa dela hartu behar da kontuan.



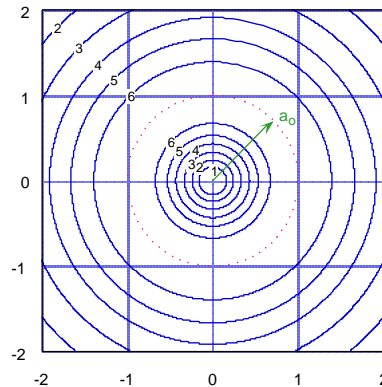
### 11. irudia. $1s$ funtzio erradiala, probabilitate-banaketaren funtzioa eta banaketa erradialaren funtzioa H atomoarentzat

Nahiz eta  $\psi_{1s}$  funtzioak  $r$  distantziarekiko mendekotasun soila adierazi, orokorrean  $\psi(n,l,m_l)$  funtzioek hiru askatasun-gradu dituzte. Hiru aldagaiko funtzioen adierazpen grafiko tridimentsionala zaila suertatzen denez, horren ordeaz **maila-azalak** irudikatzen dira **maila-kurba** gisa. Maila-azal bateko puntu guztietan funtzioaren balioa bera da, eta maila-kurbak azal horien eta plano baten arteko intersekzioak dira (orokorrean aukeratutako plano  $xy$  da). Beraz, maila-kurbetako puntu guztietan ere, funtzioak balio bera hartzen du. Maila-kurbak asko erabiltzen dira mapa topografiko zein meteorologikoetan.

Zer esanik ez,  $\psi_{1s}$ ,  $\psi_{1s}^2$  eta  $4\pi r^2 R_{1s}^2$  funtzioen maila-azalak esferikoak direnez, maila-kurbak zirkunferentziak dira. 12. irudian,  $4\pi r^2 R_{1s}^2$  funtzioaren  $xy$  planoaren gaineko maila-kurbak adierazi dira. Ikus daitekeenez, kota txikiak nukleotik hurbil daude. Zonalde horretan kurbak elkarrengandik oso gertu egoteak kotak azkar handiagotzen direla adierazten du. Bohr-en erradioari dagokion kota maximoa iritsiz gero ( $4\pi r^2 R_{1s}^2 = 0.679$ ), hurrengoak gero eta txikiagoak dira baina jaitziera hau aurreko igoera baino geldoagoa da (kurbak aldenduagoak daude). Hots, irudi honetan eta 11. irudian agertzen den informazioa

## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

bera da. Hala ere, elektroia aurkitzeko probabilitate maximoa duen  $r=a_0$  distantzian zentratutako koroa esferiko diferentziala espresuki ikus daiteke 2. 6. irudian.



**12. irudia. H atomoaren 1s banaketa erradialaren funtzioari dagozkion maila-kurbak, xy planoaren gainean (Bohr-en erradioari dagokion kota maximoa lerro ez jarriaren bidez adierazi da)**

Maila-kurba adierazpen grafiko hauek oso lagungarriak badira ere, kimikariok beste adierazpen mota bat erabiltzen dugu. Hots, elektroia aurkitzeko P probabilitateari balio jakin bat ematen zaio ( $P=0.85-0.90$  tipikoenak dira) eta horrela definitutako bolumena irudikatzen da.

Kimikan ari garela, kontzeptu batzuk argitu beharra dago. Horretarako, Bohr eta Rutherford-en eredu planetarioetan partikulen ibilbideari **orbita** deritzola gogoratu behar dugu. Mekanika kuantikoan, termino horrek ez du inolako zentzurik elektroien ibilbide zehatza ez baitugu ezagutzen. Horren ordez, **orbital** terminoa erabiltzen da. Batzuetan termino hori uhin-funtzioekin identifikatzen da zuzenean: horrela,  $\psi_{1s}$  uhin-funtzioari 1s orbital deritzo. Beste batzuetan, berriz, orbital batek probabilitatearen bidez definitutako bolumen jakin bat dela esaten da: adibidez,  $P=0.85$  harturik, 1s orbitala espazioko bolumentzat jotzen da, non  $n=1$ ,  $l=0$  eta  $m_l=0$  egoeran dagoen elektroia aurkitzeko probabilitatea %85 den. Ikusiko dugunez, erabilera biak dira arruntak.

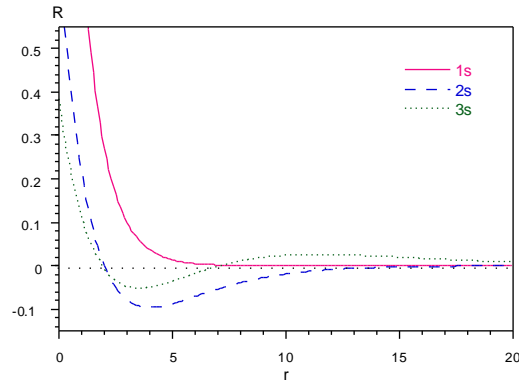
Bigarren erabileran, bolumenaren 'itxurak' probabilitate angeluarrarekin du zerikusia, orbitalaren simetria eta orientazioa definitzen baitu.  $\psi_{ns}$  uhin-funtzioei dagokienez, 31. eta 32. ekuazioetan 2s eta 3s orbitalen uhin-funtzioak adierazita daude, hurrenez hurren. Esan bezala,  $A_s(\theta, \varphi)$  funtzio angeluarra konstantea denez, ns orbitalen itxura esferikoa da.

$$\psi_{2s} = R_{2s} \cdot A_s = \frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{2}} (2 - Zr) e^{-Zr/2} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \quad (31)$$

$$\psi_{3s} = R_{3s} \cdot A_s = \frac{2Z^{3/2}}{81\sqrt{3}} (27 - 18Zr + 2Z^2r^2) e^{-Zr/3} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \quad (32)$$

30, 31 eta 32. ekuazioak erabiliz, 1s, 2s eta 3s orbitalen uhin-funtzioak irudika daitezke r-ren aurrean (13. irudian). Ikus daitekeenez, 2s eta 3s orbitalen uhin-funtzioek (1s orbitalenak ez bezala), balio negatiboak har ditzakete. Hau dela eta, 2s eta 3s uhin-funtzioetan **nodo-azalak** agertzen dira, zeinetan uhin-funtzioak zero balioa hartzen duen. 2s eta 3s orbitalek nodo-azal bat eta bi (hurrenez hurren) dutela ikus daiteke.

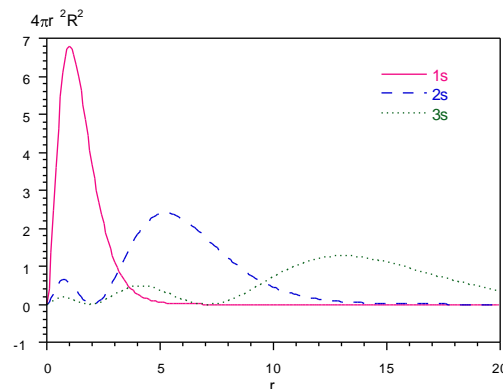
## 4. Elektro bakarrek atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)



13. irudia. 1s, 2s eta 3s orbitalen funtzio erradialak H atomoarentzat

Nodo-azal baten ezker aldean ( $r$  txikiagoetan) eta eskualdean ( $r$  handiagoetan) uhin-funtzioaren zeinuak kontrakoak dira. Zeinu horrek elektroia aurkitzeko probabilitatearekin zerikusirik izan ez arren, lotura kimikoan badu azpimarratzeko eragina (geroago aipatuko dena).

1s, 2s eta 3s orbitalen  $4\pi r^2 R_{ns}^2$  banaketa erradialaren funtzioek bat, bi eta hiru maximo dituzte, hurrenez hurren. 14. irudian ikus daitekeenez,  $n$  handitzean probabilitate maximoa gero eta txikiagoa denez, nukleotik gertu aurkitzeko probabilitaterik handiena 1s elektroiarri dagokio. Hala ere, nahiz eta denboraren batez bestean  $(n+1)s$  elektroia  $ns$  delakoa baino kanpokoagoa izan,  $(n+1)s$  elektroia ez dago une guztietan  $ns$  elektroia baino urrunago nukleotik. Izan ere, 3s orbitalaren lehen maximoa 2s orbitalarena baino nukleotik hurbilago dago eta 2s orbitalarena, 1s delakoarena baino gertuago. Hau adierazteko,  $s$  orbitalak **sarkariak** direla esaten da. Geroxeago ikusiko dugunez,  $s$  orbitalen izaera hau eragin handikoa izango da atomo polielektronikoetan.



14. irudia. 1s, 2s eta 3s orbitalen banaketa erradialaren funtzioak H atomoarentzat

2.4.4.  $\psi_{n,1,m_l}$  uhin-funtzioak: p orbitalak

2.4 eta 2.5. tauletan agertzen diren funtzioak erabiliz, 2p orbitalen uhin-funtzioak idatz daitezke (33. ekuazioa).

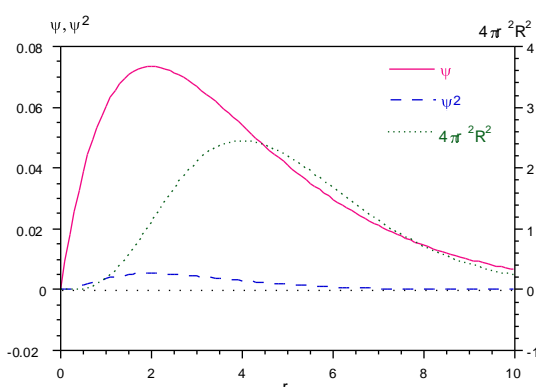
$$\psi_{2p_z} = R_{2p} \cdot A_{p_z} = \frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{6}} Zr e^{-Zr/2} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$$

$$\psi_{2p_x} = R_{2p} \cdot A_{p_x} = \frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{6}} Zr e^{-Zr/2} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cos\varphi \quad (33)$$

$$\psi_{2p_y} = R_{2p} \cdot A_{p_y} = \frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{6}} Zr e^{-Zr/2} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \sin\varphi$$

## 4. Elektroi bakarrek atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

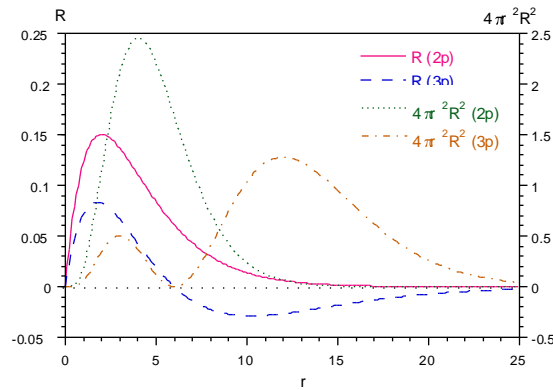
Ekuazio hauen arabera,  $\psi_{2p_z}$ ,  $\psi_{2p_x}$  eta  $\psi_{2p_y}$  funtzioak zenbait norabidetan baliokideak dira: esaterako,  $2p_z$  orbitalaren uhin-funtzioak z ardatzean ( $\theta=0^\circ$  denean,  $\cos\theta=1$ ),  $2p_x$  orbitalaren uhin-funtzioak x ardatzean ( $\theta=90^\circ$  eta  $\varphi=0^\circ$  direnean,  $\sin\theta\cos\varphi=1$ ) eta  $2p_y$  orbitalaren uhin-funtzioak y ardatzean ( $\theta=90^\circ$  eta  $\varphi=90^\circ$  direnean,  $\sin\theta\sin\varphi=1$ ), balio maximoak hartzen dituzte. Hau dela eta, 15. irudian,  $\psi_{2p_z}$  eta  $\psi_{2p_z}^2$  funtzioak adierazi dira  $\theta=0^\circ$  denean (z ardatzean). Zer esanik ez, z ardatzeko puntu guztietan,  $\psi_{2p_x}$  ( $\sin\theta\cos\varphi=0$ ) eta  $\psi_{2p_y}$  ( $\sin\theta\sin\varphi=0$ ) funtzioek zero balioa hartzen dute. Halaber, 2.9. irudian  $4\pi r^2 R_{2p}^2$  funtzioa ere irudikatu da. Ikus daitekeenez,  $2p_z$  uhin-funtzioa, ns uhin-funtzioek ez bezala, zero balioa hartzen du  $r=0$  denean ( $l>1$  duten orbital guztien ezaugarria da hau). Bestalde, r distantziak infinitorantz jotzen duenean,  $2p_z$  uhin-funtzioak zerorantz jotzen du asintotikoki ( $r\rightarrow\infty$ ,  $\psi_{2p_z}\rightarrow\infty$ ).  $\psi_{2p_z}^2$  funtzioak,  $\psi_{ns}^2$  funtzioek ez bezala, zero balioa hartzen du  $r=0$  denean.  $\psi_{2p_z}^2$  eta  $4\pi r^2 R_{2p}^2$  funtzioak konparatuz, ondorioztatzen da dV bolumen diferentzialean elektroia aurkitzeko probabilitate maximoa dr distantzia diferentzialean aurkitzeko probabilitate maximoa baino r distantzia txikiagoan suertatzen dela.



**15. irudia.  $2p_z$  orbitalaren funtzio erradiala, probabilitate-banaketa funtzioa eta banaketa erradialaren funtzioa H atomoarentzat z ardatzean ( $\theta=0^\circ$  denean)**

16. irudian, 2p eta 3p orbitalen funtzio erradialak eta banaketa erradialaren funtzioak irudikatu dira. Ikus daitekeenez, funtzio erradialek  $n-2$  nodo erakusten dituzte eta banaketa erradialaren funtzioek  $n-1$  maximo dituzte. Halaber, batez beste, 2p elektroiak nukleotik hurbil aurkitzeko probabilitatea 3p elektroiak aurkitzekoa baino handiagoa da. Hala ere, une jakin batean 3p elektroia 2p elektroia baino hurbilago egon daiteke nukleotik,  $4\pi r^2 R_{3p}^2$  funtzioaren lehen maximoa  $4\pi r^2 R_{2p}^2$  funtzioarena baino r distantzia txikiagoan baitago.

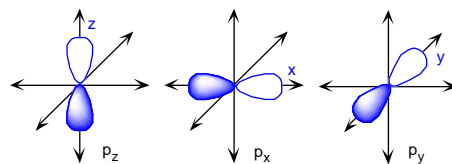
## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)



### 16. irudia. 2p eta 3p orbitalen funtzio erradialak eta banaketa erradialaren funtzioak H atomoarentzat

Funtzio angeluarrei dagokienez,  $np$  orbitalenak simetria zilindrikoa dutela esan behar da. Hori oso erraz froga daiteke  $np_z$  orbitaletan,  $\theta$  koordenatuarekiko mendekotasun soila adierazten baitute. Horrela,  $r$  eta  $\theta$  koordenatu berberak dituzten puntuak (uhin-funtzioaren balio berberak dituztenak),  $z$  ardatzean zentratutako zirkunferentzia batean egongo dira. Orduan  $r$  balio baterako,  $np_z$  orbitalen uhin-funtzioaren baliorik handienak (positiboak eta negatiboak)  $z$  ardatzaren gainean daude ( $\cos\theta=\pm 1$ ). Horrela,  $xy$  planoko puntu guztietan ( $\theta=90^\circ$ ),  $np_z$  orbitalen uhin-funtzioak zero balioa hartzen du ( $\cos 90^\circ=0$ ). Hori dela eta,  $xy$  planoak  $np_z$  orbitalen **nodo-planoa** da. Era berean,  $yz$  eta  $xz$  planoak  $np_x$  eta  $np_y$  orbitalen nodo-planoak dira, hurrenez hurren.

Funtzio erradialak  $n$  eta  $l$  kuantu-zenbakiakiko mendekotasun soila adierazten duela kontuan hartuz,  $np_z$  orbitalen simetria eta orientazioa ( $np_x$  eta  $np_y$  orbitalenak bezalaxe) berberak izango dira  $n$  edozein izanda ere. Horrela, baldin eta  $p$  elektroi bat aurkitzeko  $P$  probabilitate bat finkatzen badugu (adibidez,  $P=0.85$ ),  $p$  orbitalen itxura irudika daiteke  $A_p$  funtzio angeluarrak erabiliz. Hots, 17. irudian  $p_z$ ,  $p_x$  eta  $p_y$  orbitalen ohiko adierazpen grafikoa adierazi da. Ikus daitekeenez, zonalde argiak eta ilunak agertzen dira, uhin-funtzioaren balio positiboak eta negatiboak adierazten dituztenak, hurrenez hurren.

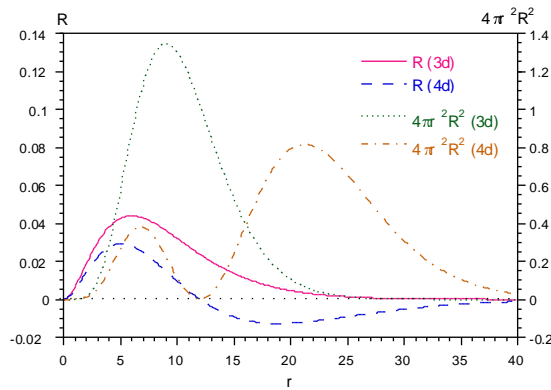


### 17. irudia. Atomo hidrogenoideen $p_z$ , $p_x$ eta $p_y$ orbitalen ohiko adierazpen grafikoa ( $n$ kuantu-zenbakiarekiko independentek)

#### 2.4.5. $\psi_{n,2,m_l}$ uhin-funtzioak: d orbitalak

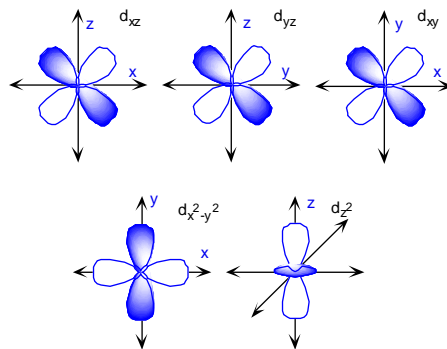
$\psi_{n,2,m_l}$  uhin-funtzioak  $nd$  orbitalak dira. 18. irudian 3d eta 4d orbitalen uhin-funtzioak eta banaketa erradialaren funtzioak adierazi da. Ikus daitekeenez,  $nd$  uhin-funtzioek  $n-3$  nodo dituzte eta banaketa erradialaren funtzioak  $n-2$  maximo. Halaber,  $ns$  eta  $np$  orbitalentzat adierazi den bezala, batez beste,  $nd$  elektroiak nukleotik hurbil aurkitzeko probabilitatea  $(n+1)d$  elektroiak aurkitzekoa baino handiagoa da. Era berean, une jakin batean  $(n+1)d$  elektroia  $nd$  elektroia baino hurbilago egon daiteke nukleotik.

## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)



## 18. irudia. 3d eta 4d orbitalen funtzio erradialak eta banaketa erradialaren funtzioak H atomoarentzat

19. irudian d orbitalen ohiko adierazpen grafikoa ikus daiteke. Orbital hauen funtzio angeluarrek bi nodo-plano dituzte: esaterako,  $d_{xz}$  orbitalen nodo-planoak xy eta yz dira.



## 19. irudia. Atomo hidrogenoideen d orbitalen ohiko adierazpen grafikoa (n kuantu-zenbakiarekiko independenteak)

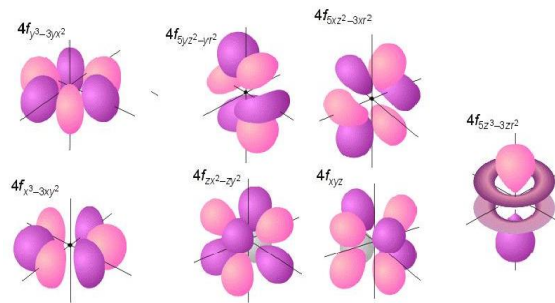
2.4.6.  $\psi_{n,3,m_l}$  uhin-funtzioak: f orbitalak

Kuantu-zenbaki azimutal berbereko orbitalen azterketa amaitzeko, esan beharra dago funtzio erradialari zein funtzio erradialaren banaketari buruz aurreko kasuetarako aipatutakoa  $nf$  orbitaletan ere betetzen dela. Hots,  $R_{n,l}$  funtzio erradialek  $n-l-1$  nodo (nodo-azal esferiko) dituzte eta  $4\pi^2R^2$  banaketa erradialaren funtzioek  $n-l$  maximo dituzte. Kuantu-zenbaki azimutal berbereko elektroiak konparatuz, batez beste,  $n$  elektroiak nukleotik hurbil aurkitzeko probabilitatea  $(n+1)$  elektroiak aurkitzekoa baino handiagoa da. Halaber, une jakin batean  $(n+1)$  elektroia  $n$  elektroia baino nukleotik hurbilago egon daiteke.

20. irudian,  $nf$  orbitalen ohiko adierazpen grafikoa irudikatu da. Ikus daitekeenez, orbitalek definitzen dituzten espazioko zonaldeak zortzira ere iritsi daitezke. Orbital hauen funtzio angeluarrek hiru nodo-plano dituzte: esaterako,  $f_{xyx}$  orbitalen nodo-planoak xy, yz eta xz dira. Laburbiduz, orbital baten funtzio angeluarrak  $l$  nodo-plano ditu eta funtzio erradialak  $n-l-1$  nodo-azal esferiko dituzenez, uhin-funtzioak  $n-1$  nodo-azal ditu.



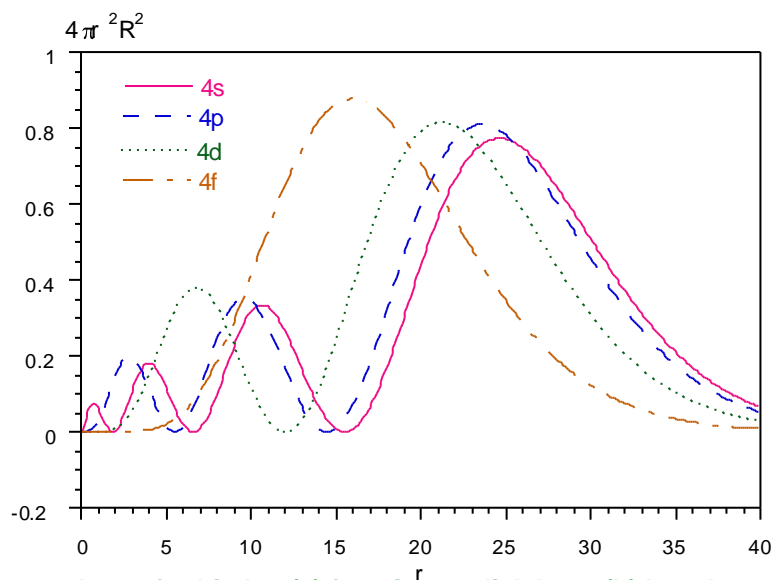
## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)



### 20. irudia. Atomo hidrogenoideen f orbitalen ohiko adierazpen grafikoa (n kuantu-zenbakiarekiko independenteak)

#### 2.4.7. $R_{n,l}$ funtzio erradialen konparazioa (n balio baterako)

Kuantu-zenbaki nagusi berbereko funtzio erradialak konparatzeko, 4s, 4p, 4d eta 4f orbitalei erreparatuko diegu. 4s orbitalarena izan ezik ( $l=0$ ), gainerakoen funtzioa erradialek ( $l>1$ ) zero balioa hartzen dute  $r=0$  denean. Banaketa erradialaren funtzioari dagokionez (21. irudia), esan beharra dago kuantu-zenbaki azimutala handitzen den heinean, probabilitate maximoa distantzia txikiagoetan aurkitzen dela. Beraz, batez beste, 4f orbitala 4d orbitala baino hurbilago dago nukleotik. Hala ere, une jakin batean 4s elektroiak 4p delakoak baino probabilitate handiagoa du nukleotik hurbilen egoteko.



### 21. irudia. 4s, 4p, 4d eta 4f orbitalen (a) funtzio erradialak eta (b) banaketa erradialaren funtzioak H atomoarentzat

Laburbilduz, kuantu-zenbaki nagusi berbereko orbitaletan, nukleotik hurbil egoteko probabilitate maximoa honela aldatzen da:  $ns < np < nd < nf$ . Bestalde, une jakin batean, nukleotik hurbilen egoteko probabilitate handiena duen orbitala  $ns$  da, eta kuantu-zenbaki azimutalaren arabera segida ondokoa da:  $ns > np > nd > nf$ .

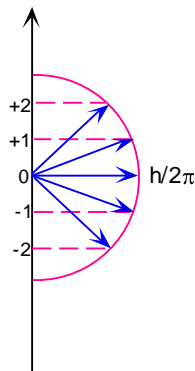
## 4. Elektroi bakarreko atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

2.5. Elektroiaren momentu angeluar-orbitala

Elektroia nukleoaren inguruan higitzen ari denez, **momentu angeluar-orbital** izeneko momentu zinetikoa du. Magnitude bektorial honen moduluak kuantu-zenbaki azimutalarekin du zerikusia (34. ekuazioa). Ekuazio horren arabera,  $s$  elektroi baten momentu angeluar-orbitala zero da.

$$|\text{momentu angeluar-orbitala}| = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi} \quad (34)$$

Momentu angeluar-orbitalaren bektorea espazioan kuantizaturik dago eta orientazio baimenduak aurrez determinatutako norabide baten gaineko proiektzio baten bidez definituta daude. Momentu angeluar-orbitalaren bektorearen proiektzioa aurrez determinatutako norabidean,  $m_l$  kuantu-zenbaki magnetikoarekin erlazionaturik dago. Hain zuzen, momentu angeluar-orbitalaren proiektzioa  $z$  ardatzean  $m_l \frac{h}{2\pi}$  da. 22. irudian ikus daitekeenez,  $d$  elektroi baten momentu angeluar-orbitalaren bektoreak, aurrez determinatutako norabide batekiko bost orientazio ( $m_l = +2, +1, 0, -1, -2$ ) har ditzake.



**22. irudia. Momentu angeluar-orbitalaren proiektzio baimenduak aurrez determinatutako norabide batean,  $d$  elektroi batentzat ( $l=2$ ).**

Elektroia partikula kargatua denez, korrante elektriko bat sorrarazten du higitzean, eta honek, eremu magnetiko bat, elektroiaren momentu zinetikoarekin erlazionatua. Beraz,  $s$  elektroiek ez dute eremu magnetikorik sorrarazten momentu angeluar-orbital nuloa dute eta.

2.6. Elektroiaren spina

Atomo hidrogenoideen azterketa bukatzeko, egoera orbitalarekin zerikusia ez duen elektroiaren ezaugarri bat aztertu behar dugu: **spinaren momentu angeluarra**, alegia. Magnitude honen izaera mekano-kuantikoa da, eta ez du mekanika klasikoarekin inolako parekotasunik.

Askotan, spinaren momentu angeluarra elektroia bere buruaren inguruko errotazio hipotetikoarekin erlazionatzen bada ere, paralelismo hau ez da bat ere zehatza. Izan ere, spinaren momentu angeluarrak, momentu angeluar-orbitalak bezala, elektroiaren momentu magnetikoarekin du zerikusia.

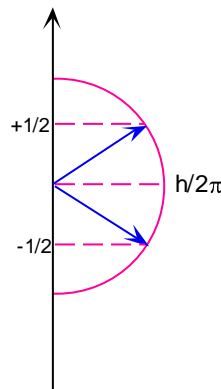
Spinaren momentu angeluarra magnitude bektoriala da; horren moduluak 35. ekuazioan adierazita dago.

$$|\text{spinaren momentu angeluarra}| = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi} \quad (35)$$

## 4. Elektroi bakarrek atomoen ereduak (atomo hidrogenoideak)

35. ekuazioan, **spinaren kuantu-zenbakia** da  $s$ . Spinaren kuantu-zenbakiak  $1/2$  balio bakarra du edozein elektroirentzat. Spinaren momentu angeluarraren bektorea ere espazioan kuantizatua dago. Edozein espaziotako norabidea aurrez determina badaiteke ere, orientazio baimenduak aurrez determinatzen dituen norabidea kanpo-eremu magnetiko baten bidez inposa daiteke spinaren momentu angeluarraren kasuan.

Aurrez determinatutako norabide baten gaineko spinaren momentu angeluarraren bektorearen proiektzioaren balioa  $m_s \cdot \frac{h}{2\pi}$  da, non  $m_s$  **spinaren kuantu-zenbaki magnetikoa** den. Spinaren kuantu-zenbaki magnetikoak  $\pm 1/2$  balio bakarrak dituzenez, spinaren momentu angeluarraren proiektzioaren balioak  $\pm \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$  izan daitezke (23. irudia).



### 23. irudia. Elektroi baten spinaren momentu angeluarraren proiektzio baimenduak, z ardatzean.

Beraz, elektroi baten egoera erabat definitzeko bost kuantu-zenbaki erabili beharko genituzke: hala nola,  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ ,  $s$  eta  $m_s$ . Spinaren kuantu-zenbakiak balio bakarra duenez ( $s=1/2$ ), nahitaezko kuantu-zenbakiak lau dira:  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  eta  $m_s$ . Praktikan, elektroi baten spinaren egoera biak (positiboa eta negatiboa) adierazteko, geziak erabiltzen dira: goranzko bat ( $\uparrow$ ) eta beharanzko bat ( $\downarrow$ ), hurrenez hurren.

Esan bezala, spinaren momentu angeluarrak elektroien momentu magnetikoarekin du zerikusia, eta elektroi guztien momentu magnetikoa bera da. Hots, spinaren kuantu-zenbaki magnetikoaren zeinua momentu magnetikoaren orientazioarekin erlazionaturik dago aurrez determinatutako norabide batean.

Kanpo-eremu magnetiko baten bidez aurrez determinatutako norabidea **kuantizazio-norabidea** da. Spinaren momentu angeluarraren bektorea  $m_s$  spinaren kuantu-zenbaki magnetikoaren bi balioen arabera orientatzen da kuantizazio-norabidean. Horrela,  $m_s=+1/2$  egoera, kuantizazio-norabidearen alde positiboan lerrotatzen da eta  $m_s=-1/2$  egoera, kuantizazio-norabidearen alde negatiboan (23. irudia). Hots, asoziatuak dauden spinaren momentu angeluarraren bektoreak eta momentu magnetikoaren bektoreak norabide bera eta kontrako norantza dituzte. Hau dela eta,  $m_s=-1/2$  egoerari dagokion momentu magnetikoa kanpo-eremu magnetikoaren norabidean (norantza positiboan) dago lerrotatuta, eta alderantziz. Beraz, kanpo-eremu magnetiko baten menpe,  $m_s=\pm 1/2$  egoera biak ez dira degeneratuak. Izan ere, energia txikieneko  $m_s=-1/2$  egoera da.

Hots, eremu-magnetiko batetik kanpo, hidrogeno atomoz osatutako talde batean, elektroien %50 dago  $m_s$  egoera bakoitzean, biak degeneratuak baitira. Kanpo-eremu-magnetiko baten menpe, berriz,  $m_s=-1/2$  egoeran dauden atomo-portzentaia %50 baino handiagoa da. Honen ondorioz, atomo-talde honek kanpo-eremu-magnetikoak sorrarazitako magnetizazio jakin bat lortzen du. Hots, atomo-talde honek **jokabide paramagnetikoa** duela esaten da.