

# Atomo polielektronikoak



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

## 5. Atomo polielektronikoak

Elektroi bakarrek atomoetat arduratuz gero, kapitulu honetan gainontzekoei helduko diegu; hain zuzen, atomo polielektronikoak, elektroi bat baino gehiago dituztenak, aztertuko ditugu. Horietako sinpleena helio atomoa da, bi elektroi dituena. Gaur egun, baina, ehun elektroitik gora dituzten atomoak ezagutzen direla esan beharra dago.

Atomo polielektronikoen deskribapenean arituko garenez, atomo hauen konfigurazio elektronikoa determinatzea ezinbestekoa izango da. Hau egiteko, hidrogeno atomoarekin egin bezala, atomo polielektronikoen Schrödinger-en ekuazioak ebatzi behar dira. Ikusiko dugunez, Schrödinger-en ekuazioak oso konplexuak dira atomo polielektronikoen kasuetan. Horregaitik, emaitza zehatzak baino, uhin-ekuazio eta energi maila hurbilduak erabiliko ditugu: hain zuzen, hurbilketa orbitalaren metodoaren bidez lortutakoak.

Behin konfigurazio elektronikoa determinatuz gero, atomoen oinarriko propietate kimikoak sistematizatu saiatuko gara eta, hori lortzeko, eskuragarri daukagun erraminta egokiena erabiliko dugu: taula periodikoa, hain zuzen ere.

### 1. Hurbilketa orbitalaren metodoa

Atomo hidrogenoideen deskribapen kuantikoan, Schrödinger-en ekuazioak elektroi bakarraren hiru koordinatuekiko menpekotasuna adierazten du. Atomo polielektronikoetan, berriz, Schrödinger-en ekuazioak  $3Z$  koordinatuekiko menpekotasuna adierazten du, non  $Z$  elektroiaren kopurua den. Bestalde, atomo polielektronikoen Schrödinger-en ekuazioak, nukleoaren eta elektroi bakoitzaren arteko erakarpen coulombiarra ez ezik, elektroiaren arteko aldarapenak ere izan behar ditu kontuan. Bi alderdi hauen ondorioz, atomo polielektronikoen Schrödinger-en ekuazioa ezin daiteke ebatzi era analitiko baten bidez, ez eta kasurik sinpleenean ere: helio atomoan, hain zuzen ere.

Azken honek ez du esan nahi atomo polielektronikoetarako eredu kuantikorik ez dagoenik; ereduak egon badaude. Hala ere, Schrödinger-en ekuazioa ebazteko, zenbait hurbilketa matematiko egin behar dira nahitaez. Eredu hurbilduen artean kimikarientzat emaitza baliagarrienak lortzen dituen **hurbilketa orbitalaren metodoa** dela esan beharra dago.

Eredu honen arabera, elektroi bakoitzak  $+Ze$  karga duen nukleoak eragindako erakarpena eta gainontzeko ( $Z-1$ ) elektroiak eragindako aldarapena 'sentitzen' dituela onartzen da. Horrela, atomo polielektroniko baten uhin-funtzioa ( $\psi$ ), elektroi guztien uhin-funtzioen biderkadura dela onartzen da (1. ekuazioa). Zer esanik ez, hipotesi hau ez dator bat errealitatearekin, elektroiak elkarrekiko harremanean baitaude.

$$\psi = \psi(1) \cdot \psi(2) \cdot \psi(3) \cdot \psi(4) \cdots \psi(Z) = \prod_Z \psi(i) \quad (1)$$

Errealitatearekin ez adostasunean dagoen beste hurbilketa bat ondokoa da: kalkuluak sinplifikatu nahian, karga-banaketa esferikoa dela onartzen da. Zer esanik ez, hipotesi hau oso urrun dago errealitateatik atomo polielektronikoetan. Are gehiago, hidrogeno atomoaren kasuan ere, s orbitalak ez ezik, beste guztien simetria ez da esferikoa.

Teoria elektrostatikoa klasikoan, banaketa esferiko uniformearen duen karga elektrikoaren jokabidea eta esfera horren inguruan kokaturik dagoen karga puntual batena baliokideak dira. Hau dela eta,  $Z-1$  elektroiak eragindako aldarapenak, nukleoan dagoen karga negatibo puntual batek eragindakoa bezalaxe jokatzen du eredu honetan.

## 5. Atomo polielektronikoak

Bigarren hipotesi honen bidez, atomo polielektronikoen  $V$  energia potentzialaren simetria esferikotzat jotzen da ( $V$  eta  $r$  alderantziz proportzionalak dira, non  $r$  elektroia eta nukleoaren arteko distantzia den). Hipotesi honi esker, atomo hauen deskribapen kuantikoa zeharo sinplifikatzen da.

4. gaiko 1. Ekuazioan atomo hidrogenoideen energia potentziala ikus zitekeen non  $Z_e \cdot e$  magnitudearen bidez nukleoaren kargaren eta elektroien kargaren arteko biderkadura adierazten zen. Hurbilketa orbitalaren metodoan, protoien karga positiboaren eta gainontzeko ( $Z-1$ ) elektroien karga negatiboaren biderkadura  $Z_e \cdot e \cdot e$  izango da, non  $Z_e$  **karga nuklear eraginkorra** den. Horrela, orotara, elektroien bakoitzak sentitzen duen  $F$  nukleoarekiko erakarpen-indarra 2. ekuazioaren bidez kalkula daiteke.

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

Hurbilketa orbitalaren metodoak egindako hipotesien arabera, atomo hidrogenoideen eta atomo polielektronikoen arteko diferentzia bakarra energia potentzialean datza. Kasu bietan eremu elektrostatikoa esferikoa denez, uhin-funtzioak desberdinak  $r$  koordenatu esferikoarekiko menpekotasuna duenak baino ez dira izango. Hots,  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot A(\theta, \varphi)$  dela kontuan izanik,  $A(\theta, \varphi)$  funtzio angeluar hidrogenoideak baliagarriak izango dira atomo polielektronikoetarako eta  $R(r)$  funtzio-erradial berriak kalkulatu beharko dira soilik. Hau dela eta, 1. ekuazioa baino 3. ekuazioa idatz daiteke atomo polielektronikoentzat.

$$R = R(r_1) \cdot R(r_2) \cdot R(r_3) \cdot R(r_4) \cdots R(r_Z) = \prod_Z R(r_i) \quad (3)$$

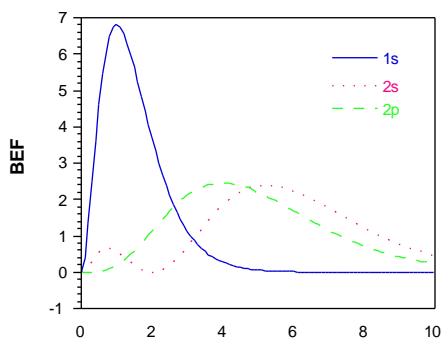
## 1.1. Pantailaketa

Aurrekoaren ondorioz, atomo polielektronikoen  $R(r_i)$  funtzio erradialak kalkulatzeko, funtzio erradial hidrogenoideetan  $Z$ -ren ordean  $Z_e$  jarri baino besterik ez da egin behar. Beraz,  $Z_e$  karga nuklear eraginkorra determinatu behar da. Zer esanik ez, magnitude hau kalkulatzeko, elektroien banaketa espaziala ezinbesteko alderdia dugu.

Hots, 1s, 2s eta 2p orbital hidrogenoideen banaketa erradialak konparatuz da (1. irudia), denboraren batez bestean 1s orbitaleko elektroia 2s orbitalekoa baino nukleotik hurbilago dagoela ikus daiteke. Azken honi **pantailaketa-efektu** deritzen; hau da, 1s orbitalak 2s orbitala pantailatzen duela esaten da. Hala ere, une konkretu batean 2s orbitaleko elektroia 1s orbitalekoa baino nukleotik gertuago egon daiteke. Hau dela eta, 1s elektroien karga 'osoak' ez du pantailatzen 2s elektroia. Beraz, 1s elektroien kontribuzioa 2s orbitaleko karga nuklear eraginkorrean ez da  $-e$  baliokoa, txikiagoa baizik. Bestalde, 2s eta 2p orbitalek jasaten duten pantailaketa konparatzeko, 2s orbitala 2p orbitala baino sarkariagoa dela hartu behar da kontuan. Honen ondorioz, 1s orbitalak eragindako pantailaketa handiagoa da 2p orbitalaren kasuan, 2s orbitalaren kasuan baino.

Laburbilduz, barne-elektroiek kanpokoagoak diren elektroiak pantailatzen dituzte. Halaber, alderantzizko kontribuzioa ere ematen da. Hots, denboraren une jakin batean 2s elektroia 1s delakoa baino nukleotik gertuago egon daitekeenez, 2s elektroien kontribuzioa 1s elektroien karga nuklear eraginkorrean ezin da erabat mexprezatu, oso txikia bada ere.

## 5. Atomo polielektronikoak



1. irudia. 1s, 2s eta 2p orbital hidrogenoideen banaketa erradialaren funtzioa

Atomo polielektronikoen  $Z_e$  karga nuklear eraginkorra kalkulatzeko 4. ekuazioa erabiltzen da non  $\sigma$  **pantailaketa-konstantea** den. Konstante hau elektroiei bakoitzarako ( $R(r_i)$  bakoitzarako) kalkulatu da ( $Z-1$ ) gainontzeko elektroien pantailaketa-efektua kontuan hartuz.

$$Z_e = Z - \sigma \quad (4)$$

Pantailaketa-konstantea balioztatzeko zenbait metodo erabil daitezke. Metodirik zaharrenetako bat Slater-ek proposaturikoa da zeinean  $\sigma$  kalkulatzeko oso arau sinpleak erabiltzen diren. Gaur egun, ordenagailuei esker, kalkulu sofistikatuagoak egin daitezke. Euren artean, eremu autokonsistentearena aipatu beharra dago zeinaren bidez makina bat hurbilketa egiten diren, balio konbergenteak lortu arte.

Eremu autokonsistentearen metodoaren bidez lortutako karga nuklear eraginkorraren balioak 1 taulan bilduta daude lehen hamazortzi elementuetarako. Ikus daitekeenez, helio atomoan 1s elektroiek sentitzen duten karga nuklear eraginkorra ( $Z_e=1.69$ ) protoi biko karga baino txikiagoa da ( $1.69 < 2$ ) elektroiei biek elkarri pantailatzen baitiote ( $\sigma=0.31$ ). Beraz, parekatu dauden elektroien arteko pantailaketa ere gertatzen da. Litoari dagokionez, 2s elektroiak  $Z_e=1.28$  duela ikus daiteke; beraz, 1s elektroiei biek 2s elektroia guztiz pantailatuko balio biko baino balio handiagoa ( $1.28 > 3-2$ ).

Zer esanik ez, pantailatuagoak dauden elektroiak kanpokoagoak dira atomo berean: adibidez, Al atomoan,  $\sigma_{1s}=13-12.59=0.41$  eta  $\sigma_{3p}=13-4.07=8.93$ . Bestalde, elementu desberdinak konparatzen baditugu,  $Z$  handitzean pantailaketa gero eta handiagoa dela ikusten da elektroiei-mota baterako. Igoera hau oso txikia da barneko elektroietarako: adibidez, 1s elektroiei baterako,  $\sigma_{He}=2-1.69=0.31$  eta  $\sigma_{Ar}=18-17.51=0.49$  dira. Kanpo-elektroietarako, aldiz, pantailaketa-konstantearen igoera  $Z$ -arekin askoz nabariagoa da (3p elektroiei baterako,  $\sigma_{Al}=13-4.07=8.93$  eta  $\sigma_{Ar}=18-6.76=11.24$  dira). Hau azaltzeko, balentzia-elektroiei eragindako barne-elektroiekiko pantailaketa nuloa ez dela oroitu behar da.

Laburbilduz, ondokoa daukagu: barne-elektroiei balentzia-elektroiei pantailatzen dituzte eta atomo astun baten elektroiei bat, atomo arin baten elektroiei-mota bera baino pantailatuagoa dago.

## 5. Atomo polielektronikoak

1. Taula.  $Z_e$  karga nuklear eraginkorra, lehen hamazortzi elementuetarako

atomoa	Z	1s	2s	2p	3s	3p
H	1	1				
He	2	1.69				
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		
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

## 1.2. Atomo polielektronikoen energi maila baimenduak

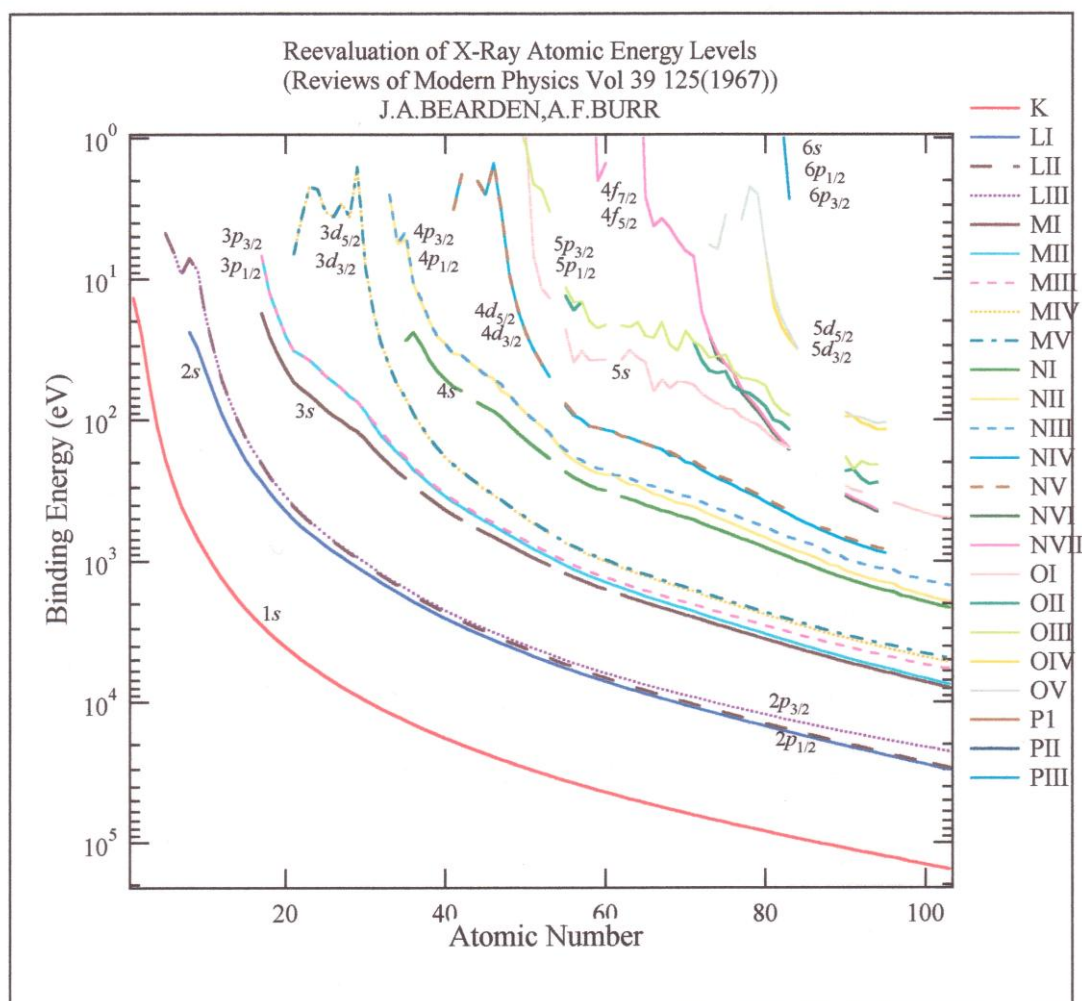
Esan bezala,  $R(r_i)$  funtzio erradialen kalkulatzeko, funtzio erradial hidrogenoideetan  $Z$ -ren ordean  $Z_e$  jarri behar dira. Era berean, energi maila baimenduak 5. ekuazioaren bidez kalkulatu dira.

$$E = -R \frac{Z_e^2}{n^2} \quad (5)$$

5. Ekuazioa eta atomo hidrogenoideetarako antzekoak badira ere, desberdintasun nabariak daude. Hots, atomo hidrogenoideetan  $n$  berberako egoerek energia bera dute. Horrela,  $n=2$  egoera lau aldiz degeneratua da (2s bat eta hiru 2p). Atomo polielektronikoetan, hala badirudi ere (5. ekuazioan  $n$ -rekiko menpekotasuna espreski adierazita delako),  $Z_e$  karga nuklear eraginkorrek  $l$  kuantu-zenbakiarekiko menpekotasuna duela ez da ahaztu behar.

2. irudian, orbitalen energia zenbaki atomikoaren aurrean irudikatu da. Ikus daitekeenez, atomo polielektronikoetan (hidrogenoideetan ez bezala)  $l$  desberdinetako egoerak ez dira degeneratuak (esaterako, 2s eta 2p egoera orbitalek energia desberdina dute). Bestalde, energi egoerak  $Z$ -rekin egonkortzen direla ikus daiteke (hots, 1s orbitalaren energia gero eta negatiboagoa da  $Z$  handitzean). Gehienetan energia  $n$ -rekin handitzen da eta  $n$  egoera baten barruan  $l$ -rekin. Hala ere, zenbait kurbetan orokortasun honi huts egiten dio joera honek. Orokortasunaren aurkako hauek azaltzeko, pantailaketa-efektuak eta orbitalen sarkaritasun-izaerak izan behar dira kontuan.

## 5. Atomo polielektronikoak

2. irudia. Energi mailak  $Z$  zenbaki atomikoaren arabera, atomo polielektronikoetan[2. Atomo polielektronikoen konfigurazio elektronikoa eta taula periodikoa](#)

Atomo polielektronikoen energi mailak kalkulatu eta gero, atomo hauen **konfigurazio elektronikoa** determinatu behar da. Horretarako, orbitalen betetze-ordena finkatzeaz gain, egoera orbital bakoitzean kokaturik egon daitezkeen elektroien kopurua ezagutu beharra dago. Bestalde, orbital degeneratuetan elektroirik bat baino gehiago kokatu behar direnean, konfigurazio egonkorrena identifikatu beharko da.

## 2.1. 'Building-up'-aren printzipioa

Konfigurazio elektronikoa egonkorrena lortzeko, elektroiak hutsik dauden energi maila baxuenetan kokaturik egotea espero liteke. Beraz, 3. irudiko energi mailak behetik gora beteko lirateke. Betetze-logika honi, 'building-up'-aren printzipio (ingelesez) edo eta **Aufbau-ren printzipio** (alemanez) deritzo.

## 5. Atomo polielektronikoak

## 2.2. Pauli-ren esklusioaren printzipioa

Aurreko printzipioa praktikara eramane baino lehen, orbital berean egon daitezkeen elektroien kopurua ezagutu behar da. Hau egiteko, Pauli-ren esklusioaren printzipioa erabiltzen da ondokoa diona: kuantu-zenbaki berberetako bi elektroiei ezin daitezke egon atomo polielektroniko batean.

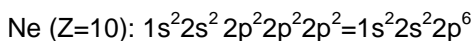
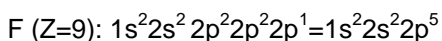
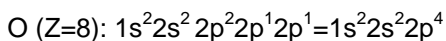
Elektroien egoera definitzeko, lau kuantu-zenbaki beharrezkoak dira ( $n, l, m_l$  eta  $m_s$ ). Lehen hirurak ( $n, l, m_l$ ) elektroien egoera orbitala definitzen dute eta laugarrenak ( $m_s$ ), spinaren egoera. Beraz, bi elektroiek  $n, l$  eta  $m_l$  kuantu-zenbaki berberak eta  $m_s$  kuantu-zenbaki desberdina izan ditzaketenez, **egoera orbital bakoitzean bi elektroiek egon daitezke**:  $m_s = +1/2$  balioa duena eta  $m_s = -1/2$  balioa duena, besteak beste. Hau adierazteko, orbital bakoitzean bi elektroiek **parekatu**tarako lekua dagoela esaten da (elektroiek bien spinak antiparaleloak  $\uparrow\downarrow$  dira).

Hots, 'building-up'-aren printzipioa eta Pauliren printzipioa aplikatuz, He ( $Z=2$ ) atomoaren konfigurazioa elektronikoa  $1s^2$  da eta elektroiei biek energia bera dute. Hutsik dagoen hurrengo egoera orbitala  $2s$  denez, Li ( $Z=3$ ) eta Be ( $Z=4$ ) elementuen konfigurazio elektronikoa ondokoa dira: Li:  $1s^2 2s^1$  eta Be:  $1s^2 2s^2$ . Boroaren kasuan, B ( $Z=5$ ), oinarritzko konfigurazio elektronikoa  $1s^2 2s^2 2p^1$  da, hutsik dagoen hurrengo orbitala  $2p$  baita. Hots, boroaren bostgarren elektroien  $m_s$  balioa ez da adierazi behar hiru  $2p$  orbitalak degeneratuak bait dira.

## 2.3. Hund-en arauak

Karbono atomoak sei elektroiei dituenek, bi posibilitate planteatu daitezke:  $1s^2 2s^2 2p^1 2p^1 2p^0$  eta  $1s^2 2s^2 2p^2 2p^0 2p^0$ . Lehenek,  $2p$  elektroiei biak espazioko zonalde desberdinetan daude eta bigarrenek, zonalde berberetan (ikus 4. gaiko 11. irudia). Zer esanik ez, elektroien arteko aldarapenak txikiagoak dira elektroiek zonalde desberdinetan badaude. Beraz, energia minimoari dagokion konfigurazio elektronikoa  $1s^2 2s^2 2p^1 2p^1$  da. Konfigurazio elektronikoa honetan, bi  $2p$  elektroiek **desparekatu**rik daude (elektroien spinak paraleloak  $\uparrow\uparrow$  dira). Horrela, nitrogenoaren konfigurazio elektronikoa ( $Z=7$ )  $1s^2 2s^2 2p^1 2p^1 2p^1$  da eta hiru  $2p$  elektroiek desparekatuta daude. Orbital degeneratuen betetze-orden hau, Hund-en arauaren bidez adierazten da eta arau horrek ondokoa dio: orbital degeneratuetan elektroiei bat baino gehiago badaude,  $m_l$  egoera orbital desberdinetan kokatzen dira (eta, beraz, desparekatuta).

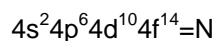
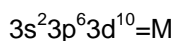
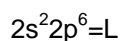
Aurreko printzipioak eta arauak erabiliz, elementuen oinarritzko konfigurazio elektronikoa idatz daitezke. Hurrengo hiru elementuena ondokoa dira:



$Z$  handitzen den heinean, gero eta elektroiei gehiago adierazi behar dira eta konfigurazio elektronikoa ondoko bi era laburbilduetan idatz daitezke:

1) Geruza beteko ikurrak erabiliz.

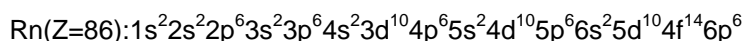
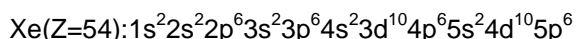
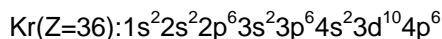
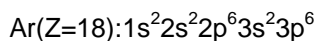
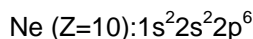
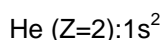
Era honen arabera,  $n=1$  geruza beteta dagoenean K ikurra erabiltzen da,  $n=2$  geruza beteta dagoenean L ikurra erabiltzen da, etabar.



## 5. Atomo polielektronikoak

2) Gas nobleen konfigurazioen ikurrak erabiliz.

Era honen arabera, gas nobleen konfigurazio elektronikoak erabiltzen dira beste elementuena adierazteko.



Horrela, nikelaren konfigurazio elektronikoa (Ni (Z=28):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$ ) ondoko bi eratan adieraz daiteke:  $KL3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$  eta  $[\text{Ar}]4s^2 3d^8$ .

Elementuen konfigurazio elektronikoak liburu honetan dagoen taula periodikoan adierazi dira. **Taula periodiko modernoa** atomoen konfigurazio elektronikoetan oinarritzen bada ere, lehen bertsioak, 1869an Mendeleiev-ek eta Meyer-ek egindakoak, elementuen propietate kimikoetan eta fisikoak, hurrunez hurren, zituzten ordenatzeko kriterio gisa. Dударik gabe, geroztik kimikarientzat elementuak aztertzeke erraminta aproposena izan da taula periodikoa.

#### 2.4. Oinarrizko konfigurazio elektronikoak

Orbitalen betetze-ordena energi-mailen arabera dela onartuz, atomo polielektronikoen oinarrizko konfigurazio elektronikoak determinatzeko orbitalen energi mailak ezagutu behar dira. 2. irudian ikus daitekeenez, maila baxuenetan betetze ordena hau da: 1s, 2s, 2p, 3s eta 3p. Ondoren, K eta Ca elementuetarako izan ezik, 3p orbitalak bete beharko ziren. K eta Ca elementuetarako 4s orbitalaren energia 3d orbitalarena baino txikiagoa denez, elementu hauen konfigurazio elektronikoak  $[\text{Ar}]4s^1$  eta  $[\text{Ar}]4s^2$  dira, hurrenez hurren. 4s eta 3d orbitalen artean gertatzen den bezala, energi-maila altuenetan beste gainezarketa batzuk ere ikus daitezke 2. irudian.

Orbitalen energia oinarrizko konfigurazioaren energiaren partaide bakarra ez dela azpimarratu behar da. Hain zuzen, konfigurazio baten energia osoan, orbitalen energiak ez ezik, elektroien arteko aldarapenei dagokien energiak ere hartzen du parte. Esaterako, Sc elementurako energia txikieneko 3d orbitala bada ere, eskandioaren konfigurazio elektronikoa  $[\text{Ar}]3d^1 4s^2$  da (eta ez  $[\text{Ar}]3d^3$ ), (n-1)d elektroien arteko aldarapena ns elektroien artekoa baino handiagoa baita. Arrazoi beragatik, Z=21 (Sc) eta Z=30 (Zn) balioen arteko elementuek, Z=39 (Y) eta Z=48 (Cd) balioen artekoek eta Z=57 (Y) eta Z=80 (Cd) balioen artekoek  $ns^2(n-1)d^n$  oinarrizko konfigurazioa adierazten dute.

Esandako honek salbuespenak dituela esan beharra dago. Hots, zenbait kasuetan ns orbitalean bi elektroio egon beharrean, elektroio bakarra dago. Esaterako, Cr-aren konfigurazio elektronikoa  $[\text{Ar}]3d^5 4s^1$  da (eta ez  $[\text{Ar}]3d^4 4s^2$ ). Hau azaltzeko, beste kontribuzio bat energia osoan hartu behar da kontuan: alegia, geruza beteko konfigurazioa zein geruza erdi-betearen egonkortasuna. Hots, zenbaitetan (n-1)d<sup>10</sup>ns<sup>1</sup>, (n-2)f<sup>14</sup>(n-1)d<sup>10</sup>ns<sup>1</sup>, (n-1)d<sup>10</sup>ns<sup>0</sup> eta (n-1)d<sup>5</sup>ns<sup>1</sup> konfigurazioak (n-1)d<sup>9</sup>ns<sup>2</sup>, (n-2)f<sup>14</sup>(n-1)d<sup>9</sup>ns<sup>2</sup>, (n-1)d<sup>8</sup>ns<sup>2</sup> eta (n-1)d<sup>5</sup>ns<sup>1</sup> konfigurazioak (hurrenez hurren) baino egonkorrak dira. Hau kontuan hartuz, Cr-arena ez ezik, Cu ( $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^1$ ), Mo ( $[\text{Kr}]4d^5 5s^1$ ), Pd ( $[\text{Kr}]4d^{10}$ ), Ag ( $[\text{Kr}]4d^{10} 5s^1$ ) eta Au ( $[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^1$ ) elementuen konfigurazio elektronikoa azaltzen da.



## 5. Atomo polielektronikoak

Era berean, Gd eta Cm elementuen oinarriko konfigurazioa azaltzeko  $f^7$  geruza erdi-betearen egonkortasuna egonkortasuna hartu behar da kontuan: Gd ( $[Xe]4f^7 5d^1 6s^2$ ) eta Cm ( $[Rn]5f^7 6d^1 7s^2$ ).

Beste kasuetan, (Nb:  $[Kr]4d^4 5s^1$ ) eta Ru ( $[Kr]4d^7 5s^1$ ) esaterako, oinarriko konfigurazio elektronikoa hiru kontribuzio hauen konpromisua da.

Laburbilduz, oinarriko konfigurazioa azaltzeko, orbitalen energia ez ezik, elektroien arteko aldarapenak zein geruza betearen zein erdi-betearen egonkortasuna ere hartu behar dira kontuan.

## 2.5. Taula periodikoa

Taula periodikoan **periodoak** (ilarak) eta **taldeak** (zutabeak) daude. Hain zuzen, zazpi periodo (1etik 7ra arte izendatuta, goitik behera) eta hamazortzi talde (1etik 18ra arte izendatuta, ezkerraldeetik eskumaldera) daude (3. irudia).

Periodoetaz eta taldeetaz gain, taula periodikoan blokeak ikus daitezke. 1. eta 2. taldeetako elementuek **s blokea** osatzen dute, 13.etik 18.era arteko taldeetakoek, **p blokea** eta 3.etik 12.era arteko taldeetakoek, **d blokea**. Hots, s eta p blokekoei, **elementu adierazgarri** deritze eta d blokekoei, **trantsiziozko elementu**. Azken hauen artean hiru periodo daudenez, bakoitza **trantsiziozko serie** bat da (lehena, bigarrena eta hirugarrena). Halaber, 8., 9. eta 10. taldeetako elementuak **hiruko** edo **triada** gisa ezagutzen dira; lehena, **burdinaren hirukoa** da eta beste biak, **platinoren hirukoak**. Talde eta periodo hauetaz gain, beste elementu-multzo bat dago: **f blokea**, hain zuzen ere. Elementu hauei, **lur-arraro** zein **barne-trantsiziozko elementu** deritze. Lur-arraro gehienak artifizialak eta erradiaktiboak direla esan beharra dago.

	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	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
	Fr	Ra	Ac															
s blokea																		
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

s blokea + p blokea = elementu adierazgarriak

d blokea = trantsiziozko elementuak

f blokea = barne-trantsiziozko elementuak

## 3. irudia. Taula periodikoaren antolamendua

Zenbait talde izendatzeko izen arruntak erabiltzen dira. Hots, 1. eta 2. taldeetako elementuei **alkalino** eta **lurralkalino** deritze, hurrenez hurren. Era berean, 17. eta 18. taldeetako elementuen ohiko izenak, **halogenoak** eta **gas nobleak** dira, hurrenez hurren. Beste izen batzuk bibliografian agertzen badira ere, ez dira hain erabiliak: esaterako, 16. taldeko elementuei anfigeno edo kalkogeno deritze zenbaitetan. 1., 2., 17. eta 18. taldeetako elementuak salbu, besteak aipatzeko taldeko lehen elementuaren izena erabiltzen da: adibidez, 16. taldekoei oxigenoaren elementu deritze.

## 5. Atomo polielektronikoak

**Lehen periodoan** H (Z=1) eta He (Z=2) elementuak agertzen dira zeinen elektroiak 1s orbitalean kokatuta daude: H:1s<sup>1</sup> eta He:1s<sup>2</sup>.

**Bigarren periodoan** (Z=3-10), n=1 geruza beteta dagoenez, n=2 geruza betetzen da: Li-tik (1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup>) Ne-era (1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>).

**Hirugarren periodoan** (Z=11-18), n=1 eta n=2 geruzak beteta daudenez, n=3 geruza betetzen da: Na-tik (1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>1</sup>) Ar-era (1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>).

**Laugarren periodoko** lehen elementuak K (Z=19) eta Ca (Z=20) dira zeinek azken elektroia 4s orbitalean duten: K:[Ar]4s<sup>1</sup> eta Ca:[Ar]4s<sup>2</sup>. Ondorengo hamar elementuek **lehen trantsiziozko seriea** osatzen dute. Elementu hauetarako (Z=21-30, Sc-tik Zn-era) 3d orbitalak betetzen dira: Sc:[Ar]3d<sup>1</sup>4s<sup>2</sup> konfiguraziotik Zn:[Ar]3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup> konfiguraziora arte. Hurrengo sei elementuetarako (Z=31-36, Ga-tik Kr-era), 4p orbitalak betetzen dira: Ga:[Ar]3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup>4p<sup>1</sup> konfiguraziotik Kr:[Ar]3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup>4p<sup>6</sup> konfiguraziora arte.

**Bostgarren periodoan**, Rb (Z=37) eta Sr (Z=38) elementuek 5s orbitalean dute azken elektroia: Rb:[Kr]5s<sup>1</sup> eta Sr:[Kr]5s<sup>2</sup>. Jarraian, **bigarren trantsiziozko seriea** agertzen da, Y-tik (Z=40) Cd-ra (Z=48), zeinean 4d orbitalak betetzen diren: Y:[Kr]4d<sup>1</sup>5s<sup>2</sup> konfiguraziotik Cd:[Kr]4d<sup>10</sup>5s<sup>2</sup> konfiguraziora arte. Ondoren, 5p orbitalak betetzen dira (Z=49-54, In-tik Xe-era) zeinen konfigurazio elektronikoa [Kr] 4d<sup>10</sup>5s<sup>2</sup>5p<sup>n</sup> den.

**Seigarren periodoan**, Cs (Z=55) eta Ba (Z=56) elementuen konfigurazioak [Xe]6s<sup>1</sup> eta [Xe]6s<sup>2</sup> dira, hurrenez hurren. Ondoren, 5d eta 4f orbitalak daude erabilgarri. Hurrengo elementurako (La, Z=57) erabiltzen den orbitala 5d da: La:[Xe]5d<sup>1</sup>6s<sup>2</sup>. Horrela, **hirugarren trantsiziozko serieko** lehen elementua La da. Hala ere, ondorengo hamalau elementuetarako (Z=58-71, Ce-tik Lu-era), 4f orbitalak erabiltzen dira. Hots, Gd eta Lu elementuena ezik (Gd:[Xe]4f<sup>7</sup>5d<sup>1</sup>6s<sup>2</sup> eta Lu:[Xe]4f<sup>14</sup>5d<sup>1</sup>6s<sup>2</sup>), beste guztien konfigurazio elektronikoa [Xe]4f<sup>n</sup>5d<sup>0</sup>6s<sup>2</sup> da. Behin 4f orbitalak betez gero, Hf-tik (Z=72) Hg-ra (Z=80) 5d orbitalak betetzen dira: ([Xe]4f<sup>14</sup>5d<sup>n</sup>6s<sup>2</sup>). Ondoren, 6p orbitalak betetzen dira (Z=81-86, Tl-tik Rn-era) [Xe]4f<sup>14</sup>5d<sup>10</sup>6s<sup>2</sup>6p<sup>6</sup> konfigurazio elektronikoa lortu arte.

**Zazpigarren periodoan**, Fr (Z=87) eta Ra (Z=88) elementuek 7s orbitalean dute azken elektroia: Fr:[Rn]7s<sup>1</sup> eta Ra:[Rn]7s<sup>2</sup>. Seigarren periodoan gertatutakoa bezalaxe, ondorengo orbital erabilgarriak 6d eta 5f dira. Hurrengo elementuak, Ac-k (Z=89), 6d orbitala erabiltzen du **laugarren trantsiziozko serieari** hasiera emanez: Ac:[Rn]6d<sup>1</sup>7s<sup>2</sup>. Hurrengo hamalau elementuek (Z=90-103, Th-tik Lr-ra), berriz, 5f orbitalak erabiltzen dituzte. Hauen artean, gehienek [Rn]5f<sup>n</sup>6d<sup>0</sup>7s<sup>2</sup> konfigurazioa dute. Pa (Z=91), U (Z=92), Np (Z=93), Cm (Z=96) eta Lr (Z=103) elementuena, ordea, [Rn]5f<sup>n</sup>6d<sup>1</sup>7s<sup>2</sup> da. Behin 5f orbitalak betez gero, hurrengo bederatzi elementuek (Z=104-112) 6d gainontzeko orbitalak betetzen dituztenek, laugarren trantsiziozko seriea osotzen dute: [Rn]5f<sup>14</sup>6d<sup>n</sup>7s<sup>2</sup>. Ondorengo seiak (Z=113-118), 7p orbitalak betetzen dituzte: [Rn]5f<sup>14</sup>6d<sup>10</sup>7s<sup>2</sup>7p<sup>n</sup>.

Np-tik (Z=93) aurrera, elementu guztiak sintetikoak dira. Hauetaz gain, Tc (Z=43) eta Pm (Z=61) elementuak ere sintetikoak direla aipatu beharra dago.

## 2.6. Balentzia-elektroiak

Ikuspuntu kimikotik, elementuen jokabidea baldintzatzen duten elektroiak kanpokoak dira **balentzia-elektroiak** deritzenak. Konfigurazio elektronikoak era erregular batean aldatzen dutenez, balentzia-elektroien kopuruak ere erregularri aldatzen du taula periodikoan.

Gas nobleek (18. taldekeok) s eta p geruzak beteta dituztenez (ns<sup>2</sup>np<sup>6</sup>), oso elementu geldoak dira kimikoki. Hau dela eta, gas nobleen konfigurazioa egonkorrentzat jotzen da. Beraz, s eta p blokeko elementuen kimika gas nobleen konfigurazioa lortzeko abiatuta dagoela esan daiteke orokorrean.

## 5. Atomo polielektronikoak

Hots, alkalinoek (1. taldekoek) ns balentzia-elektroi bakarra dute eta lurralkalinoek (2. taldekoek) ns bi balentzia-elektroi. Beraz, alkalinoek katioi monobalente modura jokatzen dute elektroi bat galduz gero:  $(n-1)s^2(n-1)p^6ns^1 \rightarrow (n-1)s^2(n-1)p^6$ . Lurralkalinoek, berriz, katioi dibalente modura jokatzen dute gehienetan:  $(n-1)s^2(n-1)p^6ns^2 \rightarrow (n-1)s^2(n-1)p^6$ .

Balentzia-elektroien kopurua  $t-10$  da p blokean (t taldearen zenbakia da): adibidez, 14. taldeko elementuena,  $14-10=4$  da. Izan ere, p blokeko elementuen jokabide kimikoa oso anitza da. 17. taldean, esaterako, zazpi balentzia-elektroietatik sei parekatuta daude eta zazpigarrena, desparekatuta. Honen ondorioz, halogenoek erraz harrapatzen dute beste elektroi bat anioi monobalente bilakatuz:  $ns^2np^5 \rightarrow ns^2np^6$ . Hala ere, beste batzuetan elektroi bat baino gehiago erabil ditzakete gas nobleen konfigurazioa lortzeko (kasu batzuetan zapiak erabil ditzakete). Hau egiten dutenean, elektroiak harrapatu edo galdu baino, partekatu egiten dituzte beste atomo batekin. Hurrengo kapituluetan ikusiko dugunez, posibilitate hauek **loturaren izaera** baldintzatzen dute.

Trantsiziozko elementuei dagokienez, bai ns orbitalean eta bai  $(n-1)d$  orbitaletan daudenak dira balentzia-elektroiak. Beraz, balentzia-elektroien kopurua, taldearen zenbakia da. Era berean, barne-trantsiziozko elementuen balentzia-elektroiak, ns orbitaleko biak,  $(n-1)d$  orbitalekoa eta  $(n-2)f$  orbitaletakoak dira.

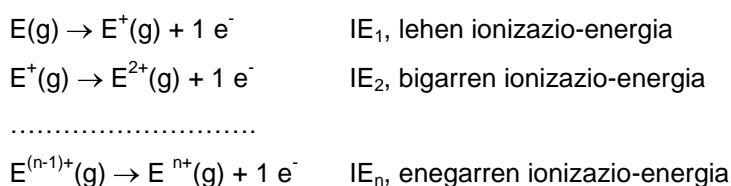
### 3. Propietate periodikoak

Konfigurazio elektronikoek periodoz periodo eta taldez talde erregulariki aldatzen dutenez, konfigurazio elektronikoetan oinarritzen den edozein propietate atomikok (esaterako, dentsitateak, fusio-entalpiak, baporizazio-entalpiak, sublimazio-entalpiak, gogortasunak, erreduziozko potentzial estandarrak, bero-eronkortasunak, erresistentzia elektrikoak, hedapen-koefizienteak, ...) aldaketa periodikoa jasan behar du.

Esan bezala, atomo baten elektroi guztietatik garrantzizkoenak ikuspuntu kimikotik balentzia-elektroiak dira. Hau dela eta, elementuen oinarritzko ezaugarri kimikoak deskribatzeko, elektroiak galtzeko eta onartzeko joerak nolabait kuantifikatzea ezinbestekoa da. Izan ere, joera hauek, ionizazio-energia, afinitate-elektroniko eta elektronegatibotasun magnitudeen bidez defini daitezke. Hiru funtsezko propietateetat gain, atal honetan erradio atomikoa ere aztertuko dugu zeinen bidez atomoen tamainaren eragina ezaugarri kimikoetan aztertuko baitugu.

#### 3.1. Ionizazio-energia

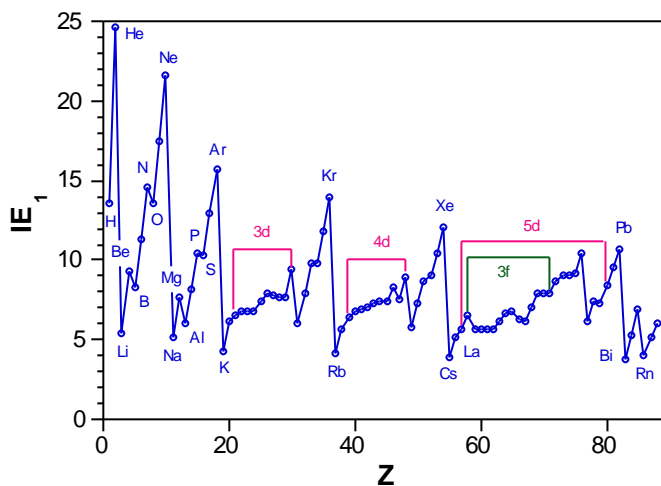
Ionizazio-energia (IE) atomo gaseoso batetik elektroi bat erauzteko behar den energia minimoa da. Prozesu hau atomo guztietarako endotermikoa denez, ionizazio-energia magnitude positiboa da:  $IE > 0$ . IE esperimentalki neurtzen dela esan beharra dago. Bestalde, atomo batean n elektroi baldin badaude, atomoak elektroi guztiak aska ditzake eta, horrela, n ionizazio-energia definitzen dira.



4. irudian **lehen ionizazio-energia** ( $IE_1$ ) irudikatu da Z-ren aurrean. Ikus daitekeenez, baliorik altuenak gas noblei dagozkie eta baxuenak, alkalinoei. Gas nobleak ionizatzerakoan konfiguraziorik egonkorrena galtzen

## 5. Atomo polielektronikoak

dutenez ( $ns^2np^6 \rightarrow ns^2np^5$ ), energia gehien xurgatu behar duten elementuak dira. Alkalinoek, berriz, gas nobleen konfigurazioa lortzen dute elektroiei bat galtzean ( $((n-1)s^2(n-1)p^6ns^1 \rightarrow ((n-1)s^2(n-1)p^6)$ ) eta, horregaitik, energia gutxien xurgatu behar duten elementuak dira.



4. irudia.  $IE_1$  lehen ionizazio-energia (eV) Z zenbaki atomikoaren aurrean.

Alkalinoetatik gas noble batera abiatzen bagara (periodo batean ezkerretik eskumaldera),  $IE_1$  handitzen dela ikusten dugu (adibidez, Li-tik Ne-era). Hau azaltzeko, balentzia-elektroiek jasaten duten karga nuklear eraginkorra hartu behar dugu kontuan. Izan ere,  $Z_e$  gero eta handiagoa denez (ikus 1. taula), balentzia-elektroiek sentitzen duten nukleoarekiko erakarpena handiagoa da eta, horren ondorioz, atomoak gero eta energia gehiago xurgatu beharko du elektroiei horiek askatzeko: esaterako,  $Z_e(\text{Li}, 2s)=1.28$ ,  $Z_e(\text{Be}, 2s)=1.91$ ,  $Z_e(\text{B}, 2p)=2.42$ ,  $Z_e(\text{C}, 2p)=3.14$ ,  $Z_e(\text{N}, 2p)=3.83$ ,  $Z_e(\text{O}, 2p)=4.45$ ,  $Z_e(\text{F}, 2p)=5.10$  eta  $Z_e(\text{Ne}, 2p)=5.76$ .

Taldeetan, berriz, goitik behera goazela (adibidez, Li-tik Fr-era)  $IE_1$  gero eta txikiagoa da. Talde bateko elementua zenbat eta astunagoa izan, balentzia-elektroiak orduan eta pantailatuagoak daude eta, horren ondorioz, balentzia-elektroiek sentitzen duten nukleoarekiko erakarpena gero eta txikiagoa da. Beraz, gero eta energia gutxiago xurgatu beharko du atomoak balentzia-elektroiak askatzeko. 1. taulako datuak erabiliz, Li eta Na elementuen  $\sigma$  balioak konpara daitezke:  $\sigma(\text{Li}, 2s)=3-1.28=1.72$  eta  $\sigma(\text{Na}, 3s)=11-2.51=8.49$ . Laburbilduz, lehen ionizazio-energia ezkerretik eskumaldera eta behetik gora handitzen da taula periodikoan.

Periodoetan joera nagusia gorakorra bada ere, orokortasunaren aurkakoak komentatu beharra dago, bigarren eta hirugarren periodoetan bereziki nabariak direnak. 4. irudian ikus daitekeenez, bigarren periodoko Be eta N elementuak (hirugarren periodoko Mg eta P elementuak bezala) espero zitezkeen baino  $IE_1$  balioak altuagoak dituzte. Hauxe alderantziz ere esan daiteke: alegia, bigarren periodoko B eta O elementuen  $IE_1$  balioak (eta hirugarren periodoko Al eta S elementuena) espero zitezkeen baino baxuagoak dira.

Hau azaltzeko elementu hauen konfigurazio elektronikoa izan behar dugu kontuan. Hots, Be eta Mg elementuen balentzia-geruzaren konfigurazioa elektronikoa  $ns^2$  da; B eta Al elementuena, berriz,  $ns^2np^1$ . B eta Al elementuen np elektroiek jasaten duten pantailaketa, ns elektroiek eragindakoa, nabaria da. Beraz, pantailaketa-efektuak karga nuklear eraginkorraren gorakadak baino eragin handiagoa duela ondorioztatu behar da elementu hauetarako. Bigarren periodoko N eta O elementuei dagokienez (hirugarren periodoko P eta S elementuei dagokien bezala) ondokoa hartu behar da kontuan: N eta P elementuen balentzia-geruzaren konfigurazio elektronikoa  $ns^2np^3$  da eta O eta S elementuena,  $ns^2np^4$ . Hau dela eta, O eta S elementuen np orbital batean bi elektroiei parekatu daude. Honen ondorioz, aldarapen elektrostatikoak handiagoak dira O eta S

## 5. Atomo polielektronikoak

elementuetan, N eta P elementuetan baino. Berrero ere, efektu honek karga nuklearraren igoerak baino handiagoa izan behar du  $IE_1$  balioak azaltzeko.

Trantsiziozko serieetan beste azpimarratzekoak badaude. Laugarren periodoan, Sc elementutik hasita, trantsiziozko metalen ionizazio-energia gorantza joan badoa baina espero zitekeen moduan baino motelago. Izan ere, gehitzen den 3d elektroio bakoitzak sorrarazten duen  $Z_e$  balioaren igoera s eta p elektroiek sorrarazten dutena baino askoz motelagoa da,  $Z=20$  balioaren inguruko 4s eta 3d elektroioen energiak oso antzekoak dira eta. 5. eta 6. periodoetan berrero aurkitzen ditugu aipatutako ezaugarri hauek. Bestalde, joera orokorraren arabera 5. periodoko  $IE_1$  balioak, 4. periodokoak baino txikiagoak dira baina 6. periodokoak 4. eta 5. periodoetakoak baino altuagoak dira. Joera orokorraren aurkako hau azaltzeko, 6d orbitalak bete aurretik lur arraroak (14 elementu) agertzen direla izan behar da kontuan. Beraz, 6. periodoan karga nuklear "estra" agertzen da, lur arraroen elementuei dagokiona eta 6. periodoko elementuen  $IE_1$  balio altuak azaltzen duena.

Hots, ns eta (n-1)d elektroioen energiak antzekotasunaren ondorioz, trantsiziozko metalen oxidazio-egoera ugariak dira mota bietakoak balentzia-elektroiak baitira. Erraz ioniza daitezkeen elementuak metalak dira. Beraz, trantsiziozko eta barne-trantsiziozko elementuak ez ezik, alkalinoak eta lurralkalinoak ere **metalak** dira. Beraz, Taula Periodikoan elementu metalikoen kopurua, ez metalikoarena baino askoz handiagoa da. Are gehiago, p blokean ere zenbait metal daude. Hots, B eta Bi elementuen arteko lerro diagonalatik eskumalderantz metalak daude eta ezkerralderantz, ez metalak. Hala ere, elementu mota bien arteko muga ez dago zehazki definituta: adibidez, Si eta Ge elementuek semimetal modura jokatzeko dute.

$IE_n$  **enegarren ionizazio-energiaren** balioek n balioarekin egite dute gora. Zer esanik ez, gero eta elektroio gutxiago badaude, askoz zailago izango da hurrengo elektroioa eruztea, aldez aurretik eraturiko katioiak gainontzeko elektroioak sendoago erakartzen ditu eta. Adibidez, Li elementurako: a)  $IE_1=520 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ , b)  $IE_2=7300 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  eta c)  $IE_3=11808 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  non a)  $\text{Li}\rightarrow\text{Li}^+$  ( $3p^+3e^-\rightarrow 3p^+-2e^-$ ), b)  $\text{Li}^+\rightarrow\text{Li}^{2+}$  ( $3p^+-2e^-\rightarrow 3p^+-1e^-$ ) eta c)  $\text{Li}^{2+}\rightarrow\text{Li}^{3+}$  ( $3p^+-1e^-\rightarrow 3p^+-0e^-$ ).

5. irudian **enegarren ionizazio-energiak** bildu dira Z-ren aurrean lehen hamabi elementuetarako. Ikus daitekeenez,  $IE_2$  balioen joera orokorra eta  $IE_1$  balioena antzekoak dira, alkalinoetan salbu. Hots, alkalinoen  $IE_2$  balioak oso altuak dira, lehen ionizazioaren ostean ( $ns^1\rightarrow ns^0$ ) askatu behar den (n-1) elektroioa askoz erakarriagoa baitago.

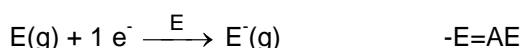
	1	2	3	4	5	6	7	8
H	1312							
He	2372	5250						
Li	520	7297	11810					
Be	899	1757	14845	21000				
B	800	2426	3659	25020	32820			
C	1086	2352	4619	6221	37820	47260		
N	1402	2855	4576	7473	9442	53250	64340	
O	1314	3388	5296	7467	10987	13320	71320	84070
F	1680	3375	6045	8408	11020	15160	17860	92010
Ne	2080	3963	6130	9361	12180	15240		
Na	496	4563	6913	9541	13350	16600	20113	25666
Mg	737	1450	7731	10545	13627	17995	21700	25662

5. irudia.  $IE_n$  enegarren ionizazio-energia (kJ/mol) Z zenbaki atomikoaren aurrean.

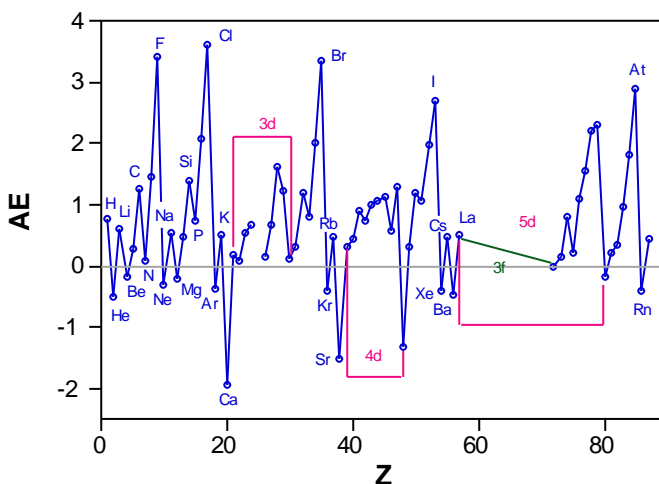
## 5. Atomo polielektronikoak

## 3.2. Afinitate elektronikoak

Afinitate elektronikoak (AE) atomo gaseoso batek elektroi bat onartzean askatu edo xurgatu behar duen energia minimoa da. Prozesu hauek exotermikoak dira gehienetan eta, beraz, negatibotzat jo beharko liriateke. Hala ere, kimikariek tradizioz akordio honen aurkako zeinuak erabiltzen ditugu AE balioak adierazteko eta testu honetan azken honi jarraituko diogu. Beraz, AE balio positiboak, prozesu exotermikoei dazgokie (atomoak anioi bilakatzean energia askatzen duela adieraziz) eta AE balio negatiboak, prozesu endotermikoei dazgokie (atomoak anioi bilkatzean energia xurgatzen duela adieraziz).



6. irudian, AE balioak irudikatu dira Z-ren aurrean. Propietate honen periodikotasuna azaldu baino lehen, 6. irudiko balio guztiak zehatzak ez direla esan beharra dago. Zehaztasun eza, afinitate elektronikoaren neurketa esperimentalean datza, elementu batzuetarako oso zaila baita. Are gehiago, zenbait elementutarako dauzkagun balioak ez dira esperimentalki neurtu; ordea, erlazonaturik daude magnitude fisikoen bidez kalkulatu egin dira.



6. irudia. AE afinitate elektronikoak (eV) Z zenbaki atomikoaren aurrean.

6. irudian ikus daitekeenez, AE balioek periodikotasuna adierazten badute ere, joera orokorrak finkatzea askoz zailagoa da. IE-rekin gertatzen den ez bezala, AE negatiboak eta positiboak dituzten elementuak daude. Gas nobleek (18. taldekoek), lurralinoek (2. taldekoek) eta 12. taldeko Cd eta Hg elementuek, AE balio negatiboak dituzte. Beste elementu guztietarako, berriz, elektroien onartze-prozesua exotermikoa da. Gas nobleen balioak negatiboak dira, elektroia onartzean  $ns^2np^6$  konfigurazio egonkorra galtzen baitute (He-aren kasuan  $1s^2$ ). Onartzen den elektroia  $(n+1)$  geruzan sartzen denez, ez dago oso erakarria eta onartze prozesua ez da faboragarria. 2. taldeko atomoek  $ns^2$  konfigurazioa galtzen dute onartzen den elektroia  $np$ ,  $(n-1)d$  edo  $(n-2)f$  geruzan kokatzen baita. Hots,  $ns$  elektroiek eragindako pantailaketak elektroien berria beragantzearen aurka jokatzen du. Cd ( $[Kr]4d^{10}5s^2$ ) eta Hg ( $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^2$ ) elementuetan efektu bera suertatzen da, elektroien berria  $np$  azpigeruzan kokatzen baita. Hala ere, Zn elementua ( $[Ar]3d^{10}4s^2$ ) 12. taldekoa izan arren, AE positiboa du. Beraz, erabiltzen ari garen kontzeptu sinple hauek ez dira nahikoak

## 5. Atomo polielektronikoak

elementu guztien ezaugarriak azaltzeko. Izan ere, elementu batzuren ezaugarrien azalpenari ez diogu hemen helduko, erabili beharko genituzkeen kontzeptuak liburu-honetatik kanpo geratzen baitira.

Beste taldeetan, goitik behera goazela AE balio positiboak gero eta txikiagoak dira oro har. Onartzen den elektroia gero eta kanpago dagoen geruza batean sartzen da eta, horregatik, nukleoak gero eta erakarpen txikiagoa eragiten du. Periodoetan, eskumalderantz goazela, gas nobleenak eta lurralkalinoenak ezik AE balioak gero eta handiagoak dira,  $Z_e$  balioen igoerarekin adostasunean. Halogenoek AE baliorik altuenak dauzkate, gas nobleen konfigurazioa lortzeko elektroi bakarra falta baitzaie.

## 3.3. Elektronegatibotasuna

Orain arte azaldutakoaren arabera, elementu metalikoek IE eta AE txikiak dituzte eta ez metalikoek, berriz, IE eta AE altuak. Elementuen izaera nolabait kuantifikatzeko asmoz, kimikariek parametro enpiriko bat erabiltzen dugu:  $\chi$  **elektronegatibotasuna**, atomo baten kanpo-elektroi bat erakartzeko joera adierazten duena. Zer esanik ez, atomoak isolatuak badaude joera hau AE-ren bidez kuantifika daiteke. Alabaina, kanpo-elektroi bat erakartzeko joera bereziki adierazgarria da atomoa isolatuak ez daudenean; hau da, loturan parte hartzen dutenean. Molekuletan, atomo bakoitzaren elektronegatibotasunak molekulen elektroiak kontrolatzeko gaitasuna adierazten du. Horrela, balentzia-elektroiak atomo elektronegatiboen menpe daudela esan daiteke.

Definizioz joera bat denez, elektronegatibotasuna kuantifikatzeko kriterio desberdinak erabil daitezke, horrenbeste eskala sorraraziz. Pauling-ek lehen elektronegatibotasunen eskala proposatu zuela oroitu behar da.

**Pauling-en eskala** 6. ekuazioan datza non  $\chi_P(A)$  eta  $\chi_P(B)$ , A eta B atomoen elektronegatibotasunak diren eta  $\Delta_{AB}$  parametroa 7. ekuazioan adierazita dagoen ( $D_{AB}$  AB molekularen lotur energia da,  $D_{AA}$   $A_2$  molekularen lotur energia da eta  $D_{BB}$   $B_2$  molekularen lotur energia da). Beraz, Pauling-en eskalaren arabera, bi atomoen arteko elektronegatibotasun-diferentziak atomo hauek eratzen dituzten molekulen egonkortasunarekin du zerikusia.

$$|\chi_P(A) - \chi_P(B)| = 0.102 \sqrt{\Delta_{AB}} \quad (6)$$

$$\Delta_{AB} = D_{AB} - \frac{1}{2} [D_{AA} + D_{BB}] \quad (7)$$

6. ekuazioaren bidez elektronegatibotasun-diferentziak lortzen direnez, eskala absolutu bat lortu ahal izateko, H atomoari  $\chi_P=2.2$  balioa egokitzen zaio eta, konparazioz, beste gainontzeko atomoen balio absolutuak egokitzen zaizkie.

Oso erabilia den beste eskala bat **Mulliken**-ena da. Eskala hau absolutua da (8. ekuazioa) elektronegatibotasuna IE eta AE balioen arteko batez beste aritmetikotzat jotzen baita. Mulliken-en eskala atomoen ondoko bi joeren arteko konpromisua adierazten du: balentzia-elektroiak askatzeko joera eta kanpo-elektroiak bereganatzekoa.

$$\chi_M = \frac{IE + AE}{2} \quad (8)$$

**Allred-Rochow**-en ustez, elektronegatibotasunak eta nukleoak eragiten duen erakarpen indar elektrostatiakoak ( $F_{\text{elek}}$ ) proportzionalak izan behar dute. Hots,  $F_{\text{elek}}$  indarra karga nuklear eraginkorrarekin zuzenean proportzionala eta atomoaren erradioaren karratuarekin alderantziz proportzionala denez, Allred-ek eta Rochow-ek, 9. ekuazioa asmatu zituzten elektronegatibotasuna kalkulatzeko. Ekuazioan agertzen diren konstanteak, Allred-Rochow-en eta Pauling-en eskalaren bidez lortutako balioak konparagarriak izan daitezten

## 5. Atomo polielektronikoak

erabiltzen dira.

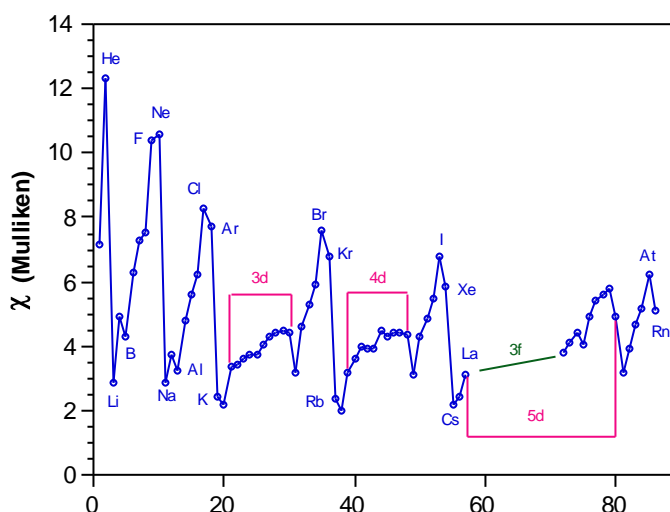
$$\chi_{A-R} = \frac{0.3590 Z_e}{r^2} + 0.744 \quad (9)$$

Askenez, kimikariok erabiltzen ditugun artean **Allen**-en elektronegatibotasun espektroskopikoak aipatuko ditugu, 10. ekuazioan oinarritutakoak.

$$\chi_A = \frac{N_e \epsilon_e + N_p \epsilon_p}{N_e + N_p} \quad (10)$$

10.ekuazioan,  $\epsilon_e$  eta  $\epsilon_p$  datu espektroskopikoen bidez lortutako elektroien eta protoien energiak dira, hurrenez hurren, eta N partikula hauen kopurua da. Allen-en definizioa bereziki baliagarri suertatu da gas nobleen elektronegatibotasunaren balioak kalkulatzeko, elementu hauetarako datu termokimiko erabilgarririk ez dago eta. Nahiz eta Pauling-ek 1933.an aurkakoa aldarrikatu, XX. mendearen lehen erdian, elementu hauek erreakzionatzeko gaitasuna ez zutela onartzen zen. Izan ere, denbora luzea itxaron behar izan zen lehen konposatua gas noble batekin lortu ahal izateko (Bartlett-ek<sup>1</sup> XePtF<sub>6</sub> molekula 1962.an sintetizatu zuen). Geroztik, Kr eta Rn konposatuak ere karakterizatu dira. Lehen konposatua Ar elementuarekin(HArF)<sup>2</sup> 2000.urtean lortu dela esan behar dago. Beraz, He eta Ne konposatuak sintetizatzeke erronka hor dago.

7. irudian, Mulliken-en elektronegatibotasuna adierazi da Z-ren aurrean. Ikus daitekeenez, periodoetan elektronegatibotasuna alkalinoetatik halogenoetara handitzen da etengabe. Trantsiziozko eta barne-trantsiziozko serieetan  $\chi_M$  balioen Z-rekiko aldaketa hain monotonoa ez dela ohartu behar da. Taldeetan, elektronegatibotasunaren baliorik altuenak elementu arinek dituzte, IE eta AE txikia baitituzte. Laburbilduz, elektronegatibotasun altua duten elementuak, IE eta AE altuak dituztenak, elektronegatiboak eta ez-metalikoak dira eta elektronegatibotasun baxua duten elementuak, IE eta AE baxuak dituztenak, elektropositiboak eta metalikoak dira.



7. irudia. Mulliken-en elektronegatibotasuna Z zenbaki atomikoaren aurrean.

### 3.4. Erradio atomikoa

Kimikan beste parametro erabilgarrienetako bat bolumen atomikoa da erradio atomikoaren bidez definitzen dena. Zer esanik ez, ziurgabetasunaren printzipioa dela eta, erradio atomikoaren kontzeptua ez da zehatza,

<sup>1</sup> N. Bartlett, "Xenon hexafluoroplatinate(V), Xe<sup>+</sup>[PtF<sub>6</sub>]<sup>-</sup>". *Proc. Chem. Soc.*, **1962**, 218.

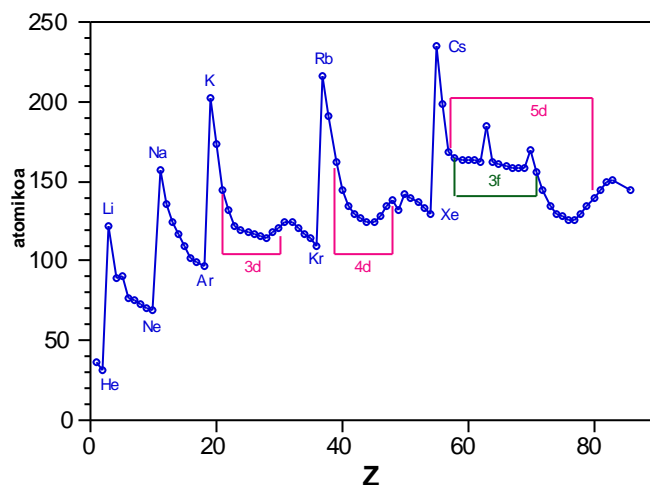


## 5. Atomo polielektronikoak

atomo isolatuetan geruza elektronikoa infinitorantz hedatzen baita (gogoan izan uhin-funtzioek zerorantz jotzen dutela asintotikoki,  $r$  parametroak infinitorantz jotzen duenean). Beraz, atomo isolatuetan ez dago erradioa neurtzerik. Orduan, zelan defini daiteke erradio atomikoa?

Zenbait atomok molekula diatomikoak ( $\text{Cl}_2$ ,  $\text{O}_2$ , ...) eratzen dituzte eta, beraz,  $d_{\text{kob}}$  nukleoen arteko distantzia esperimentalki neur daiteke. Izan ere, nukleoen arteko distantzia horren erdia erradio kobalentea da, erradio atomikotzat jotzen dena ( $r_{\text{atom}}=r_{\text{kob}}=1/2 d_{\text{kob}}$ ) erradio kobalenteari baitdagokio. Bestalde, metal gehienek paketaketa trinkoen bidezko sare kristalinoak eratzen dituzte non nukleoen arteko distantzia guztiak berberak diren. Kasu hauetan ere,  $d_{\text{met}}$  nukleoen arteko distantzia esperimentalki neur daiteke. Distantzia honen erdia erradio metalikoa da, erradio atomikotzat jotzen dena ( $r_{\text{atom}}=r_{\text{met}}=1/2 d_{\text{met}}$ ).

8. irudian, erradio atomikoak irudikatu dira  $Z$ -ren aurrean. Ikus daitekeenez, periodoetan erradio atomikoak alkalinoetatik gas nobleetara egiten du behera  $Z_e$  magnitudea gora joan ahala. Elektroien kopurua gero eta handiagoa izateak ez du karga nuklear eraginkorraren igoera konpensatzen, periodo bateko elektroi guztiak maila energetiko beran kokatuta daudelako eta euren arteko pantailaketa oso txikia delako. Izan ere, eskumalderantz goazela balentzia-elektroiak gero eta erakarriagoak daude, atomoak gero eta trinkoagoak dira eta. Taldeetan erradio atomikoa goitik behera handituz doa balentzia-elektroien  $n$  maila gero eta altuagoa baita.

8. irudia. Erradio atomikoa (pm)  $Z$  zenbaki atomikoaren aurrean.

Beraz, elementu elektropositiboek erradio atomiko handienak dituzte eta elektronegatiboenak, aldiz, txikiak. Horrek elementuen erreaktibilitatean eragin handia du **polarizazioaren** kontzeptuaren bidez. Hots, atomo baten **polarizagarritasuna** altua denean, erraz deformatzen da kanpo-eremu elektriko baten barne. Zer esanik ez, kimikan kanpo-eremu elektriko hori beste atomo batek eragindakoa da gehienetan. Geruza elektronikoko trinkoak deformatzea zaila denez, atomo txikiak polarizagarritasun baxua dute eta atomo **gogor** deritze (gogortasun kimikoa, noski). Ostera, polarizazioa jasaten duten atomoak handiak dira eta kimikoki **bigunak** direla esaten da. Hots, atomo txikiak (polarizatzaileak) atomo handiak (polarizagarriak) deformatzeko gauza dira. Solido ionikoen kapituluan ikusiko dugunez, kontzeptu hauek ioietan ere erabiltzen dira,

Trantsiziozko serieetan zenbait ezaugarri azpimarratzekoak dira. Hain zuzen, erradio atomiko txikiena hurrengo hirukoteen partaideren bati dagokio (Fe-Co-Ni, Ru-Rh-Pd eta Os-Ir-Pt). Hots,  $(n-1)d$  azpigeruza erdi-beteta baino gehiago dagoenean,  $(n-1)d$  elektroiek gehiago pantailatzen dituzte  $ns$  elektroiak eta, horregaitik,  $(n-1)d$  azpigeruza bete arte  $Z_e$ -k behera egiten du eta erradio atomikoak, gora. Bestalde, bigarren (Y...Cd) eta

<sup>2</sup> L. Khriachtchew, M. Petterson, N. Runeberg, J. Lunden, M. Räsänen, "A stable argon compound", *Nature*, **2000**, 406, 874.

## 5. Atomo polielektronikoak

hirugarren (La...Hg) trantsiziozko serieetako elementuen erradio atomikoak konparagarriak dira balentzia-elektroiak  $n$  maila desberdinetan izan arren. Hau azaltzeko, **lantanidoen murrizpenaren** efektura jo behar dugu. Hots, La elementutik aurrera lehen barne-trantsiziozko seriea agertzen da zeinean  $Z_e$ -ren efektuak erradio atomikoaren gainean eragin handia duen. Hain zuzen, gehitzen diren hamalau elektroiak  $f$  orbitaletan kokatuta daude eta orbital hauek eragiten duten pantailaketa oso txikia da. Honen ondorioz, atomoen tamainak espero litezkeenak baino askoz txikiagoak dira.