

Espekto elektromagnetikoa eta espektroskopia atomikoa



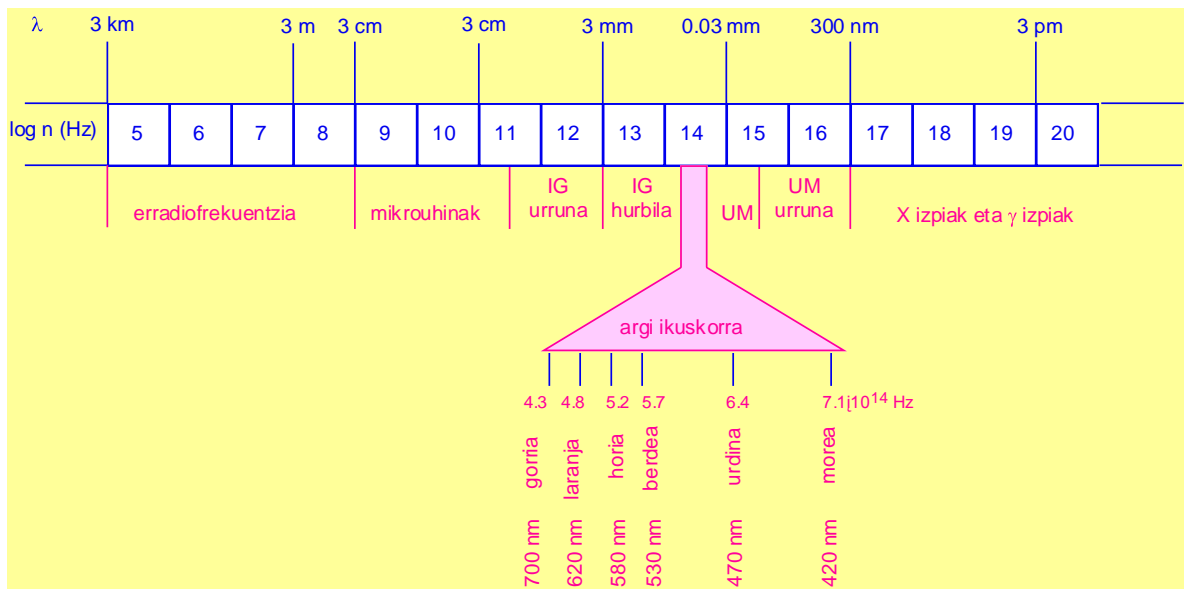
Lan hau Creative Commons-en Nazioarteko 3.0 lizentziaren mendeko Azterketa-Ez komertzial-Partekatu lizentziaren mende dago.
Lizentzia horren kopia ikusteko, sartu <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/es/> helbidean.

1. Espektro elektromagnetikoa

Erradiazio elektromagnetikoak elkarren perpendikularki oszilatzen diren eremu elektriko eta magnetikoak dira, hutsean argiaren c abiaduran hedatzen direnak. Hots, erradiazioen arteko diferentzia ν frekuentzian (edota λ uhin-luzeran) datza, eta bi magnitude hauen arteko erlazio matematikoa $\lambda \cdot \nu = c$ da. Frekuentziaren unitatea den s^{-1} delakoari Hertz (Hz) deritzo. Askotan, $\bar{\nu}$ uhin-zenbakia ere erabiltzen da, non $\bar{\nu} = (\lambda)^{-1}$.

Erradiazio elektromagnetiko guztien multzoari **espektro elektromagnetiko** deritzo (1. irudia). Espektro elektromagnetikoaren frekuentzia txikieneko (uhin-luzera handieneko) erradiazioak telekomunikazioetan erabilitako erradiofrekuentziak dira. Frekuentzia handieneko (uhin-luzera txikieneko) erradiazioak, ordea, X eta γ izpiei dagozkie.

Gizakiak ikus dezakeen erradiazioak oso atal txikia okupatzen du espektro elektromagnetikoan; hots, argi ikuskorra gorritik morerako atalari dagokio (700-420 nm). Erradiazio ultramorea (UM), argi ikuskorrena baino frekuentzia handiagokoa da, eta erradiazio infragorria (IG), argi ikuskorrena baino frekuentzia txikiagokoa.



1. irudia. Espektro elektromagnetikoa

2. Espektroskopia atomikoaren hastapenak

2.1. Mekanika estatistikoa

Hidrogeno atomo isolatu baten elektroien n kuantu-zenbaki nagusia, elektroien energiari dagokiona da. Energia minimoa duen egoera $n=1$ dela kontuan izanik, hidrogeno atomoz osatutako talde batean, elektro guztiak $n=1$ egoeran ez daudela azpimarratu behar da, atomoen arteko talkak suertatzen direlako (baita atomoen eta ontziaren hormen artekoak ere). Talken ondorioz, atomoek energia elkar trukatzeko dute elektroien hasierako energia aldatuz. Energi truke hau dela eta, elektroiek energi maila baimendu guztiak okupatzen dituzte sistema oreka termodinamikoan egonik. Oreka honek denboran zehar dirau tenperatura konstante mantentzen bada.

Tenperatura konstante batean, energi maila bakoitzean dagoen elektro-populazioa (N_i) **populazio-**

banaketa da. Hala ere, populazio-banaketaren denborarekiko iraunkortasunak ez du esan nahi elektroiek energi maila aldatzen ez dutenik. Izan ere, atomoen arteko talkak direla eta, elektroiek goranzko zein beheranzko "saltoak" egiten dituzte une guztietan, energi maila aldatzen dutela. Hots, gora-behera hauek gertatu arren, energi maila bakoitzean dagoen elektroien portzentaiak konstante dirau.

Esan bezala, populazio-banaketak tenperaturarekiko mendekotasuna adierazten du. Tenperatura baxuetan, populatuta dauden energi egoerak beheko mailak dira, eta tenperatura goraka doan heinean, goi-mailako energi egoerak gero eta populatuagoak daude. Horrela, oso tenperatura altuetan maila guztietako populazioa bera izan behar da.

Energi mailen populazioen arteko erlazioa (N_i/N_j), Maxwell-Boltzman-en legearen bidez kalkula daiteke (1. ekuazioa).

$$\frac{N_i}{N_j} = \frac{q_i}{q_j} e^{-(E_i - E_j)/kT} \quad (1)$$

non k , Boltzman-en konstante unibertsala den ($k=1.3806 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$); T , tenperatura absolutua; eta q_i eta q_j , i eta j egoeren degenerazioa, hurrenez hurren.

Hidrogeno atomoz osatutako talde bateko $n_i=2$ eta $n_j=1$ egoeren populazioen arteko erlazioa kalkulatzeko, egoera hauen degenerazioa (n^2) izan behar dugu kontuan. Hots, $n=1$ egoera ez da degeneratua ($q_i=1$), n , l , m_l kuantu-zenbakien konbinazio posible bakarra (1,0,0) delako. $n=2$ egoera, berriz, lau aldiz degeneratua da ($q_i=4$), lau konbinazio posible baitaude: (2,0,0), (2,1,-1), (2,1,0) eta (2,1,+1). 2.8. ekuazioaren bidez kalkulaturako energiaren balioak (4. gaiako 2.2. irudian irudikatu direnak), 1. taulan adierazi dira. Ikus daitekeenez, $n=2$ eta $n=1$ egoeren arteko energi diferentzia ($E_2 - E_1 = 10.2037 \text{ eV} = 1.365 \cdot 10^{-18} \text{ J}$), giro-tenperaturako kT balioa ($0.02 \text{ eV} = 3.77 \cdot 10^{-21} \text{ J}$) baino askoz handiagoa da. Horren ondorioz, giro-tenperaturan dagoen hidrogeno atomoz osatutako talde batean, ia maila populatu bakarra $n=1$ egoera dugu ($T=273 \text{ K}$ etan, $N_2/N_1 = 1.1 \cdot 10^{-22}$). Beraz, giro-tenperaturan energia minimoa duen $1s$ egoera, hidrogeno atomoen **oinarrizko egoera** da. Bigarren maila, $n=2$ delakoa, populatua izan dadin, oso tenperatura altuak behar dira. Adibide gisa, $T=5000 \text{ K}$ denean, $N_2/N_1 = 2.0 \cdot 10^{-10}$ da ($kT = 0.43 \text{ eV} = 6.90 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ dela kontuan hartu behar da).

1. taula. Lehen zortzi energi maila baimenduak hidrogeno atomoan ($Z=1$)

n	$E(\text{J})$	$E(\text{eV})$
1	$-2.18 \cdot 10^{-18}$	-13.605
2	$-5.45 \cdot 10^{-19}$	-3.4013
3	$-2.42 \cdot 10^{-19}$	-1.5117
4	$-1.36 \cdot 10^{-19}$	-0.8503
5	$-8.72 \cdot 10^{-20}$	-0.5442
6	$-6.06 \cdot 10^{-20}$	-0.3779
7	$4.45 \cdot 10^{-20}$	-0.2777
8	$-3.41 \cdot 10^{-20}$	-0.2126

2.2. Energi mailen arteko trantsizioak

Elektroiak oinarrizko egoeratik goi-mailetara kitzika daitezten, aktibazio termikoa ez da baliabide bakarra. Izan ere, erradiazio elektromagnetikoa askoz eraginkorragoa da. Esan bezala, erradiazio elektromagnetikoaren fotoien energia ($h\nu$) eta elektroien bi egoera baimenduen arteko energi diferentzia ($\Delta E = E_j - E_i$) bera bada (hau da, Bohr-en frekuentzia-baldintza, $\Delta E = h\nu$, betetzen bada), energi trukea gertatuko da, elektroia n_i egoeratik n_j egoerara pasatuz.

2. taulan, $n_i=1$ eta n_j egoeren arteko hainbat energi diferentzia ($\Delta E = E_j - E_1$) bildu dira. Adierazi dira, halaber, trantsizio bakoitzeko Bohr-en frekuentzia-baldintza betetzen duten erradiazio elektromagnetikoaren frekuentzia (ν) eta uhin-luzera (λ) ere.

2. taula. Oinarrizko egoeratik goi-mailako egoeratarako trantsizioen energia ($\Delta E = E_j - E_1$) eta asoziatutako erradiazio elektromagnetikoen frekuentzia (ν) eta uhin-luzeera (λ).

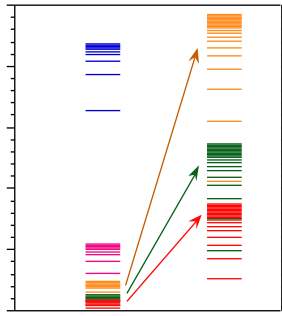
j	$\Delta E(\text{J})$	$\nu(\text{Hz})$	$\lambda(\text{\AA})$
2	$1.63 \cdot 10^{-18}$	$2.47 \cdot 10^{15}$	1215.09
3	$1.94 \cdot 10^{-18}$	$2.92 \cdot 10^{15}$	1025.23
4	$2.04 \cdot 10^{-18}$	$3.08 \cdot 10^{15}$	972.07
5	$2.09 \cdot 10^{-18}$	$3.16 \cdot 10^{15}$	949.29
6	$2.12 \cdot 10^{-18}$	$3.20 \cdot 10^{15}$	937.35
7	$2.14 \cdot 10^{-18}$	$3.22 \cdot 10^{15}$	930.30
8	$2.15 \cdot 10^{-18}$	$3.24 \cdot 10^{15}$	925.78
∞	$2.18 \cdot 10^{-18}$	$3.29 \cdot 10^{15}$	911.31

2. taulan agertzen diren datuen arabera, oinarrizko egoeratik goi-mailako egoeratarako trantsizioak gerta daitezten erabili behar den erradiazio elektromagnetikoa ultramorearen delako ondorioztatzen da. Izan ere, hidrogeno atomoaren ionizazioa lortu ahal izateko ($j=\infty$), $\lambda=911.31 \text{ \AA}$ duen argi ultramorearen erabili beharko zen.

Elektroiak goi-mailetara kitzikarazteko, deskarga elektrikoak ere erabili daitezke. Honela, elektroien populazio-banaketa ezegonkorra lortzen da, elektroiak atomo-taldearen tenperaturari dagozkion egoeretan baino energi maila altuagoetan daudelako. Kitzikatutako elektroiak berehala hasten dira deskitzikatzen, populazio-banaketa egonkorra lortu nahian. Hau egitean, elektroiak soberako energia askatzen dute erradiazio elektromagnetikoa emitituz (lanpara halogenoak era berebean dabilta). Zer esanik ez, emititutako erradiazio elektromagnetiko honek Bohr-en frekuentzia-baldintza bete behar du. Beraz, atomo-talde batek emititutako erradiazio elektromagnetikoa ezinbesteko baliabidea da elektroien energi egoerei buruzko informazioa lortzeko. Hain zuzen, hauxe dugu espektroskopia atomikoaren oinarria.

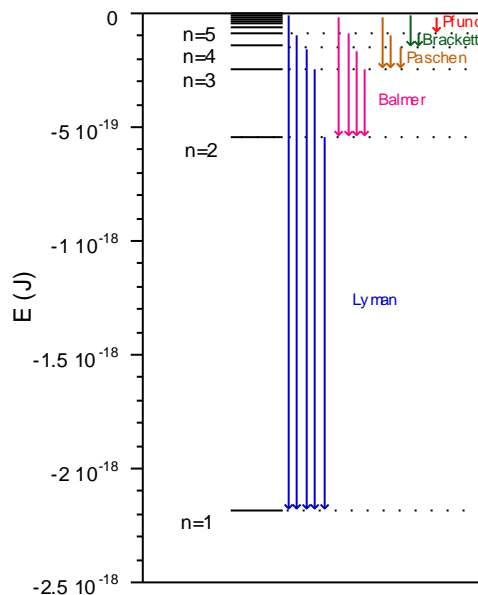
2.3. Espektroskopia atomikoa

Espektroskopia atomikoa aurrez kitzikatutako atomo-talde batek emititutako erradiazio elektromagnetikoaren azterketan datza. Emititutako erradiazio elektromagnetikoa era desberdinetan 'graba' daiteke; metodorik tipikoenetako bat xafila fotografikoa da. Hidrogeno atomoari dagokionez, grabatutako xafila fotografiko baten itxura 2. irudian adierazi da.



2. irudia. Hidrogenoaren lerro espektralak xafla fotografiko baten gainean

Ikus daitekeenez, energiaren araberako zenbait lerro agertzen dira, **lerro espektral** deritzenak. Lerro espektral bakoitza emititutako erradiazio bati dagokio. Halaber, lerro hauek taldekaturik agertzen dira, aurkitu zituen zientzialariaren izena duten segida diskretoetan. Honela, Lyman-en segida, 2. taulan agertzen diren oinarrizko egoetatik goi-mailako egoeratarako trantsizioen energiarekin asoziatuak dauden erradiazioei dagokie. Balmer-en segidak, berriz, bigarren egoetatik goi-mailako egoeratarako trantsizioen berri ematen du. Horrela, Paschen, Brackett eta Pfund-en segidek $n=3$, $n=4$ eta $n=5$ egoetatik (hurrenez hurren) goi-egoeratarako trantsizioak adierazten dituzte. (3. irudia). Esan bezala, Lyman-en segida espektro elektromagnetikoaren zonalde ultramorean agertzen da, Balmer-ena ikuskorrean eta hurrengoak, zonalde infragorrian eta infragorri urrunean. Zer esanik ez, segida bakoitzean agertzen den lerroen kopurua infinitoa da ($j \rightarrow \infty$, n_i egoetatik n_j egoeratarako trantsizio elektronikoetan).



3. irudia. Lyman-en segidako $n_1 \rightarrow n_j$ trantsizio elektronikoak