

# Efektu erlatibistak atomoen konfigurazio elektronikoan



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.

## Efektu erlatibistik atomoen konfigurazio elektronikoan

Orain arte, uhin-funtzioaren emaitzak kalkulatzeko ez dugu kontuan hartu Einstein-ek erlatibitatearen teoriaren eragina. Alabaina, bai uhin-funtzioen atal erradialean eta bai angeluarrean ere, erlatibitatearen teoria bada eraginkorra.

Atal erradialean sortzen den efektuari, **murrizpen erlatibista** deritzo. Hots, nukleoaren inguruan higitzen denez, elektroiak azelerazio erradialak jasaten du. Nukleoaren erakarpen-indarra eta elektroien abiadura erradiala proportzionalak direnez, karga nuklearra handitzen den heinean elektroien abiadura gero eta handiagoa izango da. Hain zuzen,  $Z=137.036$  baliorako, abiadura erradialak  $c$  argiaren abiadurarantz jotzen du. Hain zuzen, 1s elektroien baten  $v$  abiadura erradiala 1. ekuazioaren bidez kalkula daiteke (esaterako, Hg atomo baten 1s elektroien  $v=0.58c$  da).

$$v = \frac{Z}{137.036} \cdot c \quad (1)$$

Erlatibitatearen teoriaren arabera,  $v$  abiaduran higitzen den partikula baten masa ( $m$ ) 2. ekuazioaren bidez kalkulatu da.

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad (2)$$

non  $m_0$  partikularen masa den  $v=0$  denean.

Beraz, Hg atomo baten 1s elektroien masa  $m \approx 1.2m_0$  da. Masaren igoera erlatibista honek, orbitalen erradioetan eragina duela azpimarratu behar da, elektroien masa eta erradioa alderantziz proportzionalak baitira. 3. ekuazioan, Bohr-en erradioa kalkulatzeko adierazpen matematikoa dugu zeinean alderantzizko proportzionaltasuna ikus daitekeen. Gogoan izan Bohr-en erradioa Bohr-Rutherford teoriaren araberrako hidrogenoaren lehen orbita elektronikoaren erradioa dela.

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 h^2}{me^2} \quad (3)$$

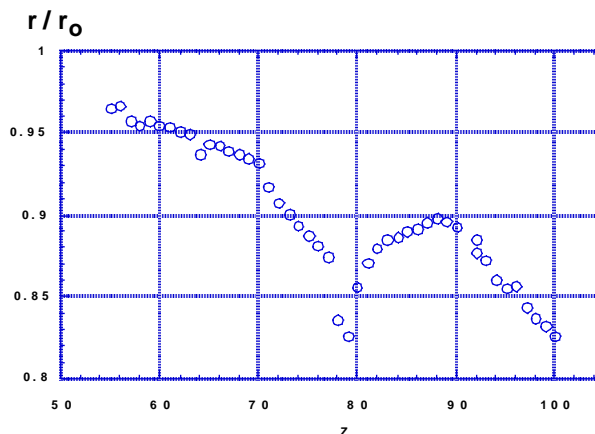
Hau dela eta, Hg-atomoan 1s orbitaleko erradioa espero zitekeena baino %20 txikiagoa da efektu erlatibistik kontuan hartuz eta hauxe murrizpen erlatibistaren ondorioetako bat dugu.

Efektu hau ns gainontzeko elektroietan ere eragina du s orbital guztiek nukleotik hurbil egoteko probabilitatea adierazten baitute. Modu berean, p orbitalek murrizpen erlatibista jasaten dute baina s orbitalena baino txikiagoa. Gainera, s (eta p) orbitalen murrizpenaren ondorioz gero eta pantailatuagoak daudenez, d eta f orbitalek hedapen erlatibista jasaten dute. Esaterako, 5d orbitalen hedapena dela eta, elektroia aurkitzeko probabilitate maximoari dagokion  $r$  balioa eta 6s orbitalena antzekoak dira. Aldi berean, 5d orbitalen energia handitzen da eta horrek elektroien hauen erauzketa erraztarazten du. Horrela, hirugarren trantsiziozko serieko elementuen gaitasuna oxidazio-egoera altuetan agertzeko azal daiteke.

Murrizpen erlatibistik 6. periodoan ditu efekturik nabarienenak. Hots, 1. irudian  $r/r_0$  parametroa  $Z$ -ren aurrean ikus daiteke non  $r$  efektu erlatibista kontsideratuz kalkulatuako atomoen erradio den eta  $r_0$ , efektu hau kontsideratu barik kalkulatuakoa. Ikus daitekeenez, murrizpen maximoa Au ( $Z=79$ ) eta Hg ( $Z=80$ ) elementuen 6s orbitalari dagokio. Hau dela eta, Au ( $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^1$ ) eta Hg ( $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^2$ ) elementuen elektronegatibotasuna beren ingurukoena baino askoz altuagoa da. Hots, 5d orbitalak beteta daudenean, elektronegatibotasuna 6s orbitalek definitzen dute 11. taldean eta ondorengoetan. Hg eta Au elementuetako 6s

## Efektu erlatibistak atomoen konfigurazio elektronikoan

orbitalak oso murriztuak eta erakarriak daudenez, 6p eta 6s orbitalen energia-diferentzia handia da nabarmen. Hau dela eta, Hg eta Au elementuen 6p orbitalak ezin dira balentzia-orbitaltzat onartu. Modu honetan, Hg elementua "likido noble" bezala jokatuko zuen eta Au elementua I halogenoa bezala jokatzen duela onar daiteke (konfigurazio egonkorra lortzeko elektroi bakarren falta egongo balitz bezala). Izan ere, halogenoen AE balioen ostean, urreak du hurrengo baliorik altuena.



### 1. irudia. 6s orbitalen murrizpen erlatibista Cs-tik Fm-ra (Z=55-100)

Au eta Hg elementuen ondorengoak diren Tl, Pb eta Bi direlakoan 6s orbitalak ere ionizagaitzak dira. Horregaitik, hiru elementu hauen oxidazio-egoera egonkorra ez da taldearena bi unitate gutxiagokoa baino. Horri bikote **inertearen efektu** deritzo eta ondorioak hauek dira: espezierik egonkorrenak  $Tl^+$ ,  $Pb^{2+}$  eta  $Bi^{3+}$  dira (eta ez  $Tl^{3+}$ ,  $Pb^{4+}$  eta  $Bi^{5+}$  direlakoak).

Azkenez, efektu erlatibistak eragindakoen artean, **espin-orbita** gainezarketa aipatu besterik ez dugu egin behar zeinak atomo astunetan p, d eta f orbitalen ionizazioa baldintzatzen duen.