

Atomoa eta mekanika kuantikoa



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) Zer sistematan aplikatzen da ondoko ekuazioa, eta zertarako?

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

ERANTZUNA: Schrödinger-en ekuazioa da, atomo hidrogenoideetan aplikatuta. Mekanika kuantikoan, atomoa egoera jakin batzuetan egon daiteke, egoera horiek kuantu-zenbakien bidez definitzen direlarik. Hots, ekuazioa ebatziz gero, egoera bakoitzari dagokion uhin-funtzioa eta energia kalkulatu dira. Izan ere, sistemaren uhin-funtzio eta energia baimenduak lortzen dira.

2) Aurreko ekuazioaren batugaien esangura azaldu.

ERANTZUNA: Atomo hidrogenoide bat honela deskribatzen da mekanika kuantikoan: elektroi bat nukleo baten karga positiboaren erakarpem elektrostatikoaren menpe dagoena. Sistema honetan, beraz, elektroiaren energia zinetikoa eta potentziala hartu behar dira kontuan. Izan ere, lehenengo batugaia energia zinetikoari dagokio; eta, bigarrena, energia potentzialari.

3) Aurreko ekuazioan oinarrituz, Schrödinger-en ekuazioa idatzi 3Dko kutxan dagoen partikularen kasuan.

ERANTZUNA: 3Dko kutxan dagoen partikularen energia potentziala zero da. Beraz.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] \Psi = E\Psi$$

4) Hurrengo esaldiak egiazkoak edo gezurrezkoak diren azaldu laburki.

“Atomo polielektronikoetan, funtzio erradialak kalkulatu dira kontuan hartuz karga nuklear eraginkorrek duen eragina elektroi bakoitzaren gainean.

ERANTZUNA: EGIA. Atomo polielektronikoetan elektroiaren arteko aldarapena dago, eta horrek energia potentzian du eragina. Elektroi bakoitzaren karga nuklear eraginkorren bidez, aldarapen hori hartzen da kontuan. Kontuan hartu behar da atomo polielektronikoetan orbitalen energiak n eta l kuantu-zenbakien arabera direla: alegia, funtzio erradial berberetako orbitalek energia bera dutela.

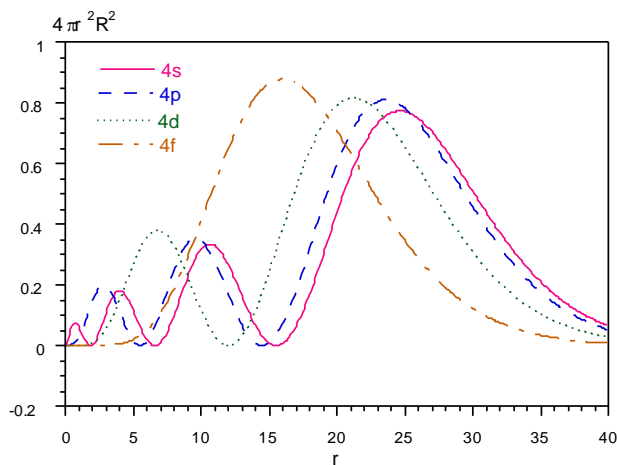
“Orbital atomikoen energiak zenbaki atomikoaren mendekotasuna adierazten du”

ERANTZUNA: EGIA. Orbital bakoitzaren energia kalkulatu ahal izateko karga nuklear eraginkorra hartzen da kontuan, eta horrek zenbaki atomikoaren mendekotasuna adierazten du.

5) Ondoko grafikoa komentatu

ERANTZUNA: Grafiko honetan 4s, 4p, 4d eta 4f orbitalen banaketa erradialak daude irudikatuta, r-ren aurrean (r, nukleoarekiko distantzia izanik).

Banaketa erradialaren funtzioak nukleotik distantzia batera dagoen elektroiak aurkitzeko probabilitatearen berri ematen du, funtzioak hartzen duen balioa r jakin batean eta probabilitate hori proportzionalak baitira.



Ikus daitekeenez, maximo altuenei erreparatuz, batez bestean nukleotik hurbilen egoteko probabilitate handiena duena 4f elektroia da. Eta ondoren, 4d, 4p eta 4s elektroiak. Hala ere, nukleotik gertuen dagoen maximo guztiei erreparatuz, ondorioztatzen da une jakin batean, nukleotik hurbilen egoteko probabilitate handiena duena 4s elektroia da.

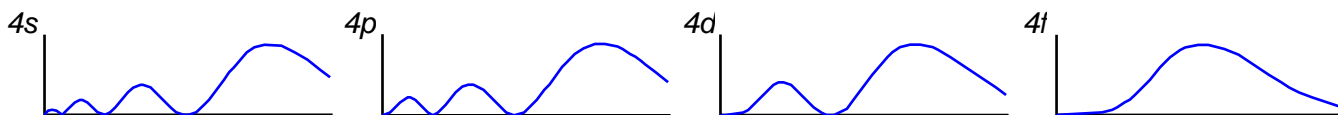
6) Ondokoak hidrogeno atomoaren funtzio angeluarrak dira. Funtzio hauek kontuan hartuta, nolakoa da s orbitalen geometria? Azaldu zergatia (laburki).

$$s: \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \quad p_x: \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cos\varphi \quad p_y: \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \sin\varphi \quad p_z: \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$$

ERANTZUNA: Ekuazioei erreparatuz, argi ikusten da s orbitalen funtzio angeluarrak ez duela adierazten θ eta φ angeluen mendekotasunik. Hori dela dela eta, r distantziarekiko mendekotasun bakarra adierazten du, eta esferikoa da.

r elektroien eta nukleoaren arteko distantzia da

7) Ondokoak 4. geruzako banaketa erradialaren funtzioak dira hidrogeno atomoan. Zein da x ardatzeko parametroa? Zein da grafiko hauetatik ateratzen den informazio nagusia?



ERANTZUNA: x ardatzeko parametroa r da; alegia, elektroien eta nukleoaren arteko distantzia.

Grafiko hautetatik ateratzen den informazio nagusia ondokoa da: orbital bakoitzean dagoen elektroiak duen probabilitatea r distantzia batera egoteko. Ikus daitekeenez, batez bestean hurbilen egoteko probabilitate handiena 4f elektroiak dauka. Hala ere, une jakin batean s orbitalak dauka nukleotik hurbil egoteko probabilitate handiena.