

UNITAT 7

ESTRUCTURA DE LA MATÈRIA

QUÍMICA
1 BATXILLERAT

Teories atòmiques

Anaxàgonos

- Els cossos o mons estan constituïts per **homeomerics** (àtoms) de diverses classes.
- El que diferencia un cos d'un altre és la quantitat de cada tipus de partícules homeomèriques que conté.
- La intel·ligència ordenadora, anomenada **noûs**, propicia l'agrupació d'*espermatas* (molècules) per donar lloc als diferents tipus de cossos o mons.

Demòcrit

- Els àtoms es mouen en el buit i és l'atzar el que provoca un remolí que fa que xoquin entre ells.
- La diferenciació entre els cossos està determinada per la forma, la posició i la mida dels àtoms que els constitueixen.

Teories atòmiques

Dalton

- Els elements que constitueixen la matèria estan formats per partícules indivisibles i indestructibles.
- Els àtoms d'un element determinat són iguals en massa i propietats.
- Els àtoms de diferents elements són diferents en massa i propietats.
- Els compostos es formen per la unió d'àtoms dels elements corresponents en una relació constant i senzilla de nombres enters.
- La relació fixa d'àtoms que constitueixen un compost fa que aquest compost presenti unes propietats característiques i que la massa de la combinació atòmica en el compost sigui constant.

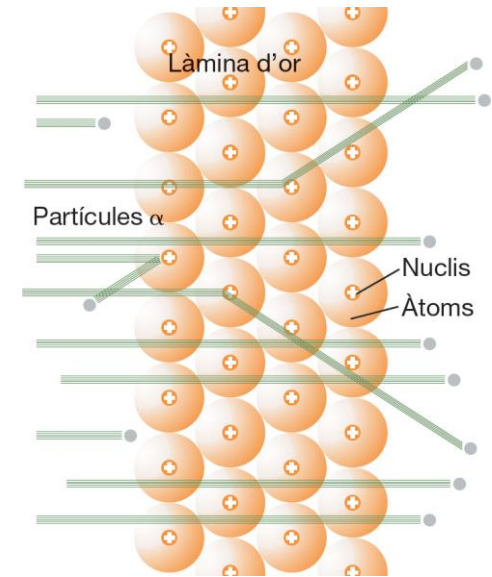
Models atòmics

Precursors dels models atòmics

| <i>Model de Kelvin (1902)</i> | <i>Model de J. J. Thomson (1903)</i> | <i>Model de Nagaoka (1904)</i> |
|--|---|--|
| L'àtom era una esfera carregada positivament i els electrons estaven incrustats en l'esfera com si fossin llavors d'una síndria. | L'àtom era una esfera amb càrrega elèctrica positiva i electrons encastats, com si fossin panses d'un pastís, o cireres d'un gelat de nata. | L'àtom era un conjunt d'electrons que giren al voltant d'un cos central positiu, igual que els anells al voltant de Saturn. Es va anomenar <i>model saturnià</i> . |

Model atòmic de Rutherford

- La massa dels àtoms està pràcticament concentrada en el nucli.
- La càrrega positiva també rau en el nucli.
- Els electrons circulen en òrbites circulars al voltant del nucli.
- La major part de l'àtom és un gran espai buit.



Experiment de Rutherford

Conceptes bàsics d'ondulatòria (I)

Mecànica ondulatòria

Longitud d'ona (λ)

És la distància mínima entre dos punts en concordança de fase, és a dir, amb el mateix estat de vibració. Es mesura en:

$$1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m} \quad 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m} \quad 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} \quad 1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$$

Període (T)

És el temps que triga una ona a recórrer una distància igual a la de la longitud d'ona. Es mesura en s.

Freqüència (ν)

És el nombre de longituds d'ona que passen per un punt determinat en un segon. Es mesura en s^{-1} o en hertz (Hz).

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

Conceptes bàsics d'ondulatòria (II)

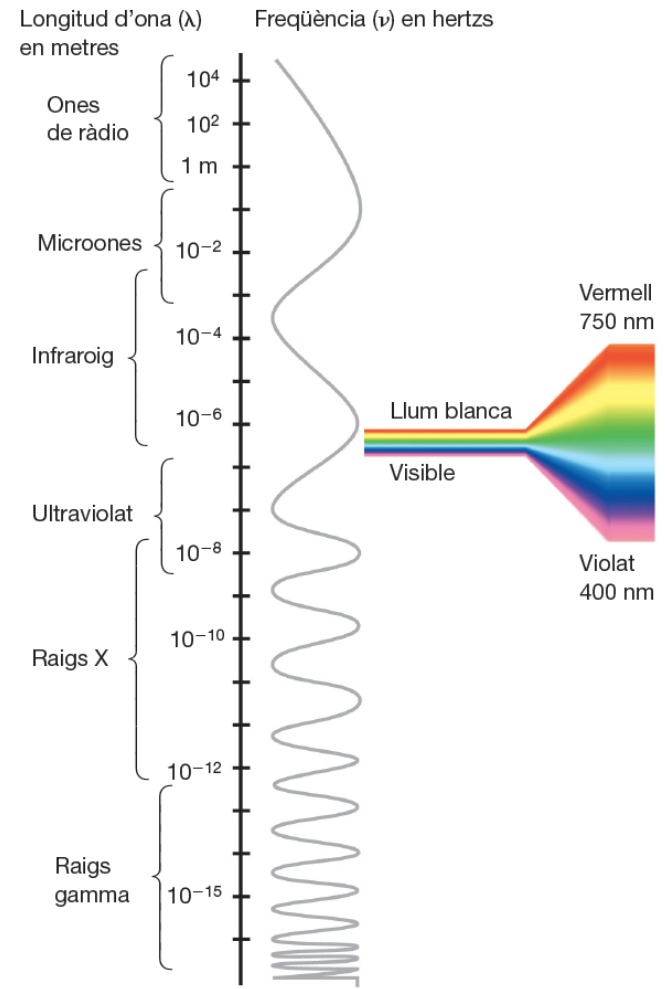
Classificació dels espectres atòmics

Segons les radiacions que continguin

- **Espectres continus:** els que abasten totes les radiacions compreses entre dos extrems, passant de les unes a les altres gradualment.
- **Espectres discontinus:** Només contenen certes radiacions de determinades longituds d'ona.

Segons el tipus de causa que els origina

- **Espectres d'emissió:** provenen directament de la font emissora.
- **Espectres d'absorció:** provenen de la font emissora, però han travessat una matèria determinada.



Espectre de les radiacions electromagnètiques

Model de Bohr

Primer postulat

L'electró gira al voltant del nucli en òrbites circulars ben definides sense emetre energia ni absorbir-ne. Per tant, no varia la seva velocitat ni es precipita sobre el nucli. El radi atòmic és constant.

Segon postulat

- Només són permeses per a l'electró les òrbites circulars l'energia de les quals té uns certs valors determinats.
- L'estat de mínima energia (estat fonamental) de l'àtom d'hidrogen correspon a l'electró situat en la primera òrbita.
- Si l'electró absorbeix energia i passa una òrbita més enllà del nucli, l'electró es troba en estat excitat.

Tercer postulat

- El pas d'un electró d'una òrbita a una altra provoca l'emissió o l'absorció d'energia d'acord amb la diferència d'energia entre els dos nivells energètics.
- Perquè un electró pugui passar d'una òrbita inferior a una de superior cal que absorbeixi energia; i si passa d'una de superior a una d'inferior emet energia en forma de radiació electromagnètica.

Sommerfeld va introduir una modificació i va suggerir que els electrons es movien seguint **trajectòries el·líptiques**.

Model actual de l'àtom

Hipòtesi de De Broglie

Qualsevol partícula en moviment té una ona associada, la longitud de la qual està relacionada amb la massa i la velocitat de la partícula.

Principi d'incertesa de Heisenberg

És impossible conèixer simultàniament i amb exactitud la quantitat de moviment i la posició d'una partícula.

Equació de Schrödinger

Si l'electró té una ona associada, se n'ha de poder descriure el comportament mitjançant les equacions matemàtiques de les ones.



L'**orbital** és la zona de l'espai a l'entorn del nucli en la qual hi ha una gran probabilitat de trobar l'electró.



Equació d'ona de Schrödinger:

$$\Delta^2 \psi + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

en què ψ és la funció d'ona, m és la massa de l'electró, h és la constant de Planck, E és l'energia de l'electró i V és el potencial a què està sotmès l'electró.

Els nombres quàntics (I)

Nombre quàntic principal (n)

- El seu valor determina la grandària de l'orbital. Com més gran és n , més voluminós és l'orbital corresponent.
- Pot prendre qualsevol valor de la sèrie de nombres naturals: $n = 1, 2, 3, 4, 5...$

Nombre quàntic secundari (l)

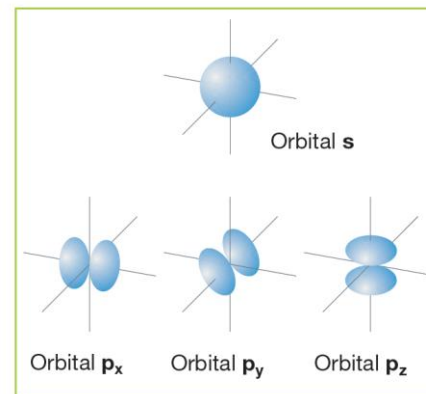
- Determina la forma de l'orbital.
- El seu valor depèn del nombre quàntic principal n i, per a cada valor de n , pren valors enters, des de 0 fins a $n-1$.

$l = 0 \rightarrow$ orbital s

$l = 1 \rightarrow$ orbital p

$l = 2 \rightarrow$ orbital d

$l = 3 \rightarrow$ orbital f



Els nombres quàntics (II)

Nombre quàntic magnètic (m_l)

- Determina l'orientació de l'orbital en l'espai segons un eix arbitrari de referència.
- El seu valor depèn del nombre quàntic secundari l , per a cada valor de l , pren tots els valors enters que van des de 2 fins a 1 .
- La direcció d'aquest eix està determinada per un camp magnètic extern.

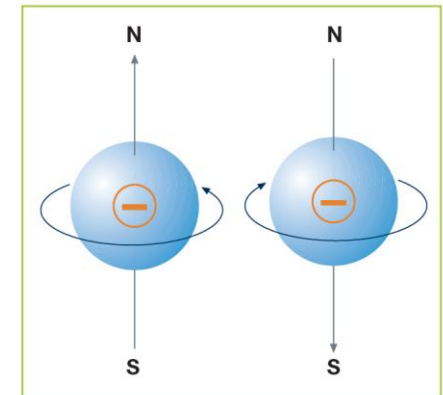


És important que no oblidis:

- Un orbital és determinat per tres nombres quàntics (n, l, m_l).
- Un electró és determinat per quatre nombres quàntics: n, l i m_l que determinen l'orbital on es troba, i m_s , propi de l'electró.

Nombre quàntic d'espín (m_s)

- Està associat a les propietats magnètiques de l'electró.
- Pot prendre dos valors (independentment de l'orbital on es trobi l'electró): $+1/2$ i $-1/2$.
- Dels electrons amb el mateix valor de m_s es diu que tenen els espins paral·lels; en cas contrari, tenen espins oposats o antiparal·lels.



Energia dels orbitals

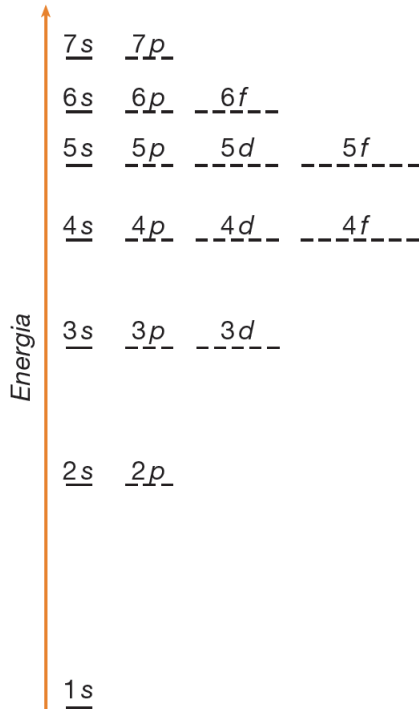


Diagrama de nivells d'energia de l'àtom d'hidrogen

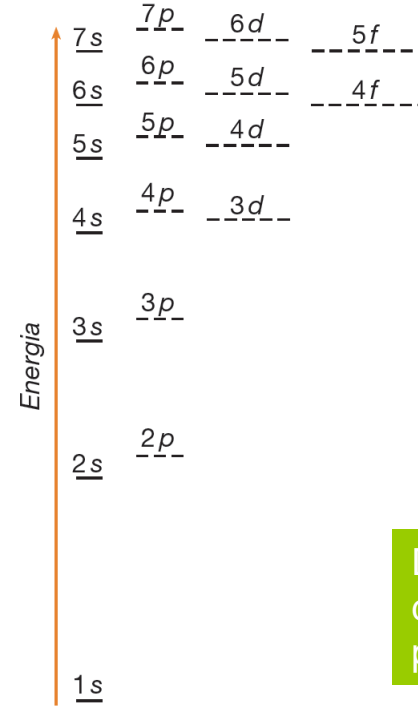


Diagrama de nivells d'energia d'àtoms polieletrònics

Regles que segueix l'energia relativa dels orbitals corresponents a àtoms polieletrònics

- En augmentar el valor de $n + l$, també augmenta l'energia dels orbitals.
- **Regla de Madelung:** quan dos orbitals diferents tenen el mateix valor de $n + l$, és menys energètic el que té un valor de n .

Configuracions electròniques (I)

La **configuració electrònica dels àtoms** d'un element ens indica com estan distribuïts els electrons dels seus àtoms en els orbitals corresponents.

Per establir la configuració electrònica...

- S'ha de conèixer el nombre d'electrons que té cadascun d'aquests àtoms.
- Cal tenir en compte el diagrama d'energies relatives dels diferents orbitals (diagrama de Moeller).
- **Principi d'exclusió de Pauli:** en un àtom no hi pot haver dos electrons amb els quatre nombres quàntics iguals.
- **Principi d'Aufbau:** els electrons sempre ocupen els orbitals de menys energia a més.
- **Regla de Hund:** en ocupar orbitals de la mateixa energia, els electrons han d'estar desaparellats sempre que sigui possible.
- S'ha d'indicar quins són els orbitals ocupats i quin és el nombre d'electrons que conté cadascun d'ells.

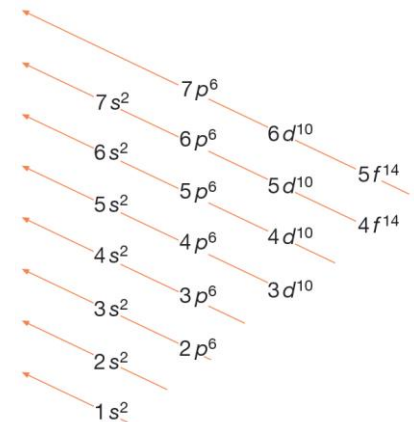
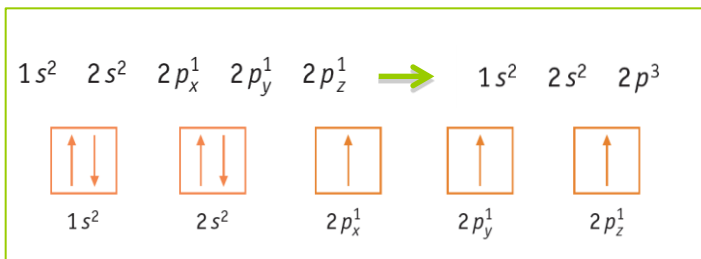


Diagrama de Moeller

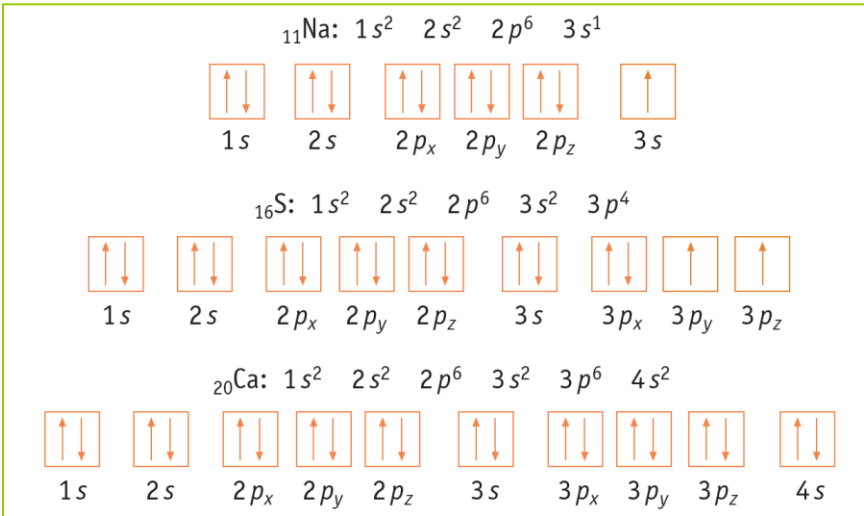
Configuracions electròniques (II)

Exemples:



Configuració electrònica del nitrogen

| | | | |
|----------------------|--------|--------|--------|
| ${}_1\text{H}$: | $1s^1$ | | |
| ${}_2\text{He}$: | $1s^2$ | | |
| ${}_3\text{Li}$: | $1s^2$ | $2s^1$ | |
| ${}_4\text{Be}$: | $1s^2$ | $2s^2$ | |
| ${}_5\text{B}$: | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^1$ |
| ${}_6\text{C}$: | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^2$ |
| ${}_7\text{N}$: | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^3$ |
| ${}_8\text{O}$: | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^4$ |
| ${}_9\text{F}$: | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^5$ |
| ${}_{10}\text{Ne}$: | $1s^2$ | $2s^2$ | $2p^6$ |



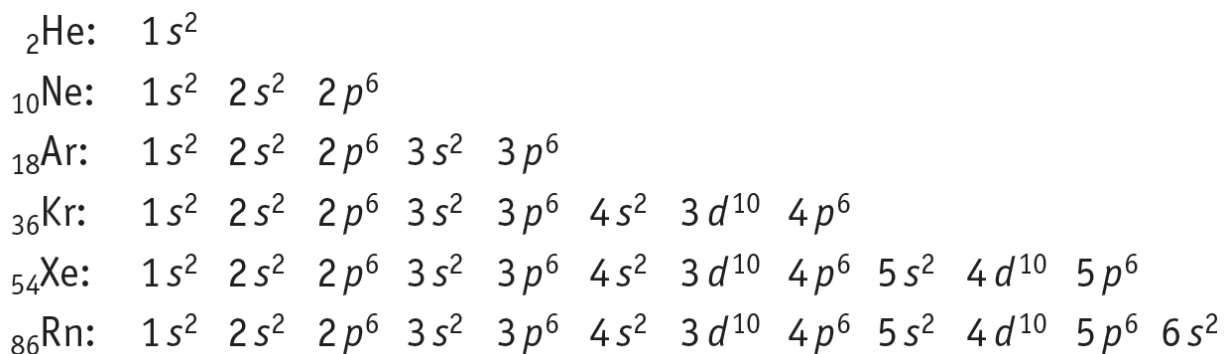
Configuració electrònica del Na, el S i el Ca

Configuracions electròniques dels 10 primers elements de la taula periòdica

Configuracions electròniques (III)

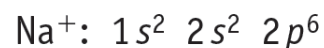
Configuracions electròniques especialment estables

Els elements que tenen la configuració electrònica $ns^2 np^6$ són especialment estables i, generalment, manifesten poca tendència a reaccionar amb altres elements o espècies químiques.

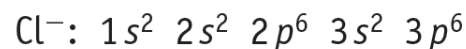


Configuracions electròniques d'ions

Catió sodi Na^+



Anió clorur Cl^-



Catió magnesi Mg^{2+}

