

# Teories atòmiques

## A. Teoria atòmica de Demòcrit (V aC)

Demòcrit va ser el màxim representant de l'escola atomista, la qual va intuir l'existència d'unes partícules anomenades àtoms (indivisibles).

- ◆ La teoria de l'atomisme físic es basa en:
  - ◆ \* Els àtoms es mouen en el buit i és l'atzar el que provoca el remolí que fa que xoquin entre elles. Segons aquests xocs es formen els diferents cossos.
  - ◆ \* La diferència entre els cossos prové de la forma, la posició i la mida dels àtoms que els constitueixen. Per exemple, els àtoms que formen l'aigua són suaus i rodons, els de foc, punxeguts; els de terra, aspres i dentats, per poder unir-se i formar roques.

## B. Teoria atòmica de Dalton (s XIX)

Primera teoria que té en compte els resultats experimentals de la química que en aquell moment es coneixia.

Els postulats de la teoria atòmica són:

- ♦ Els elements que constitueixen la matèria estan formats per partícules indivisibles i indestructibles, anomenades àtoms.
- ♦ 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 presenti unes propietats característiques i que la massa de la combinació atòmica en el compost sigui constant.

# Models atòmics

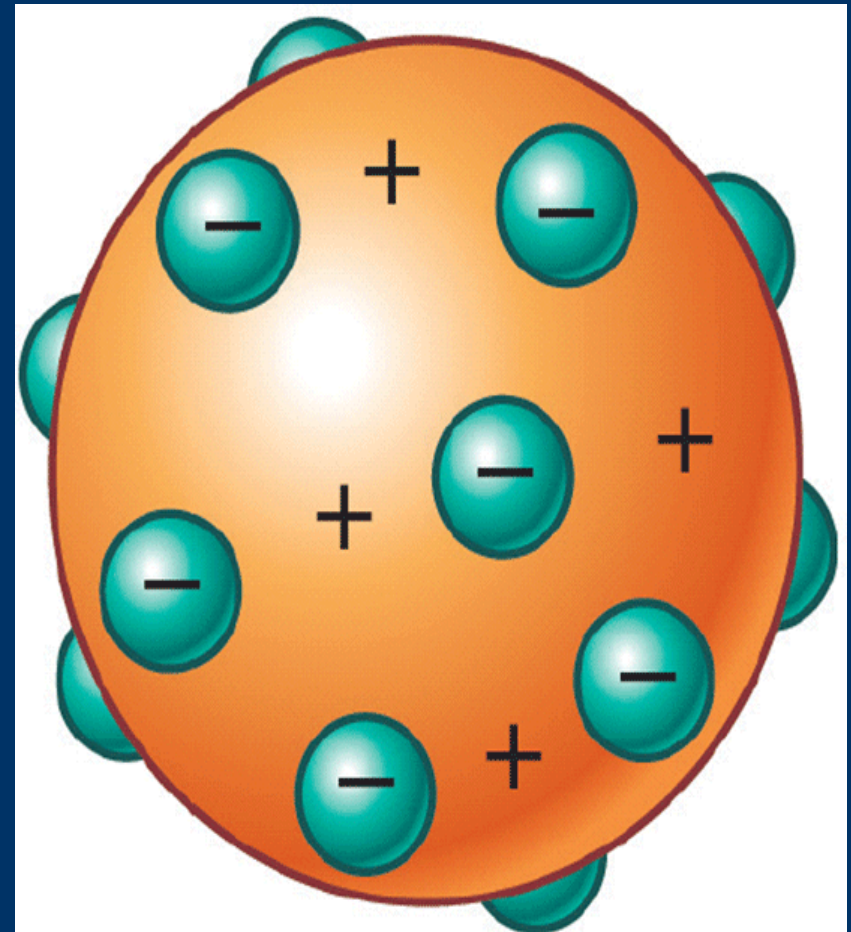
A finals del segle XIX la idea de l'existència de l'àtom era acceptada per tota la comunitat científica.

El descobriment de l'electró el 1897 va marcar l'inici dels primers models atòmics moderns

## A. Model de Thomson

L'àtom és una gran esfera amb càrrega

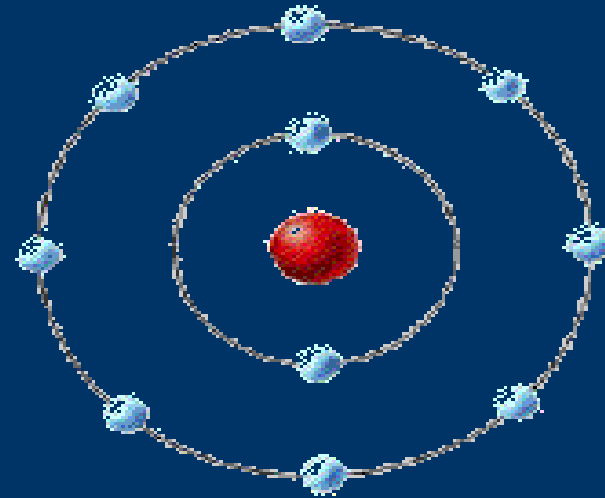
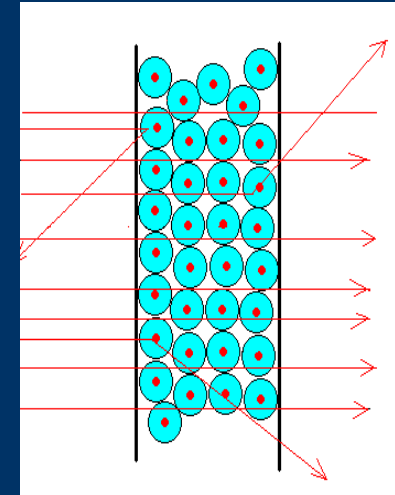
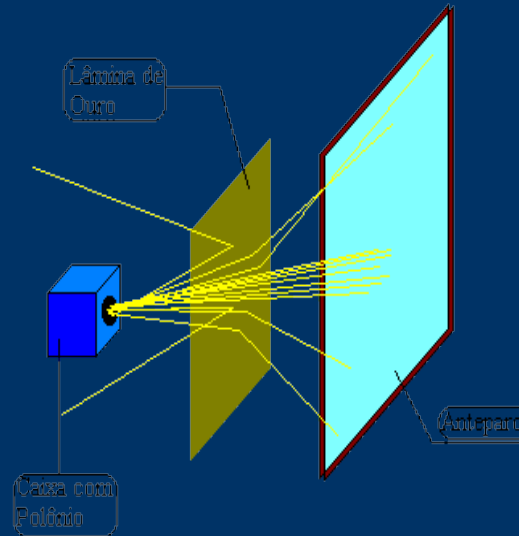
positiva i els electrons es troben encastats en ella com si fossin panses d'un pastís.



## B. Model atòmic de Rutherford

Rutherford, Geiger Mardsen van experimentar amb partícules alfa, amb les quals van bombardejar làmines d'or.

- Els models atòmics existents en aquell moment no podien explicar els resultats.
- Rutherford va proposar un nou model anomenat nuclear-planetari basat en:
  - \* La massa dels àtoms està concentrada en el nucli.
  - \* La càrrega positiva també està en el nucli.
  - \* Els electrons circulen en òrbites circulars al voltant del nucli.
  - \* La major part de l'àtom és un gran espai buit.



# Nocions bàsiques d'ondulatória

Des de finals del segle XIX se sap que moltes formes d'energia són del mateix tipus: la llum, la radiació infrarroja, la ultravioleta, les ones de ràdio, els raigs X, la radiació gamma, són formes d'energia electromagnètica.

Les magnituds que caracteritzen una ona són.

Longitud d'ona ( $\lambda$ ), és la distància mínima entre dos punts en concordança de fase. En el cas de la llum, aquestes distàncies són molt petites.

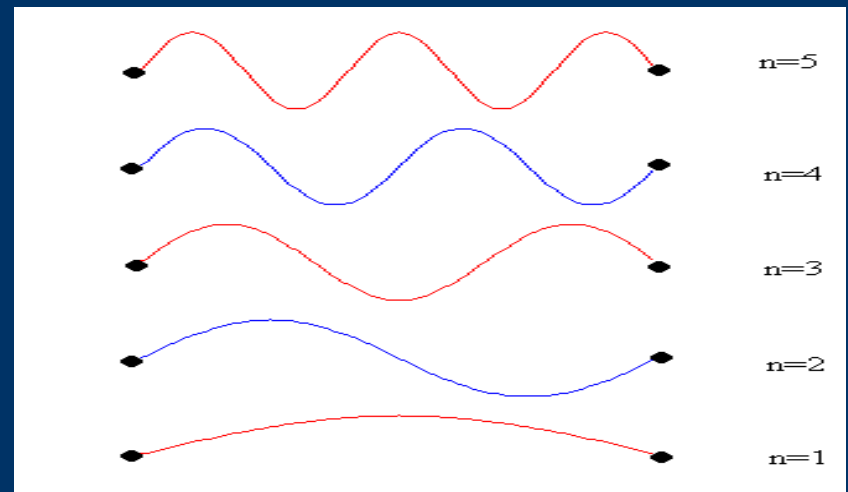
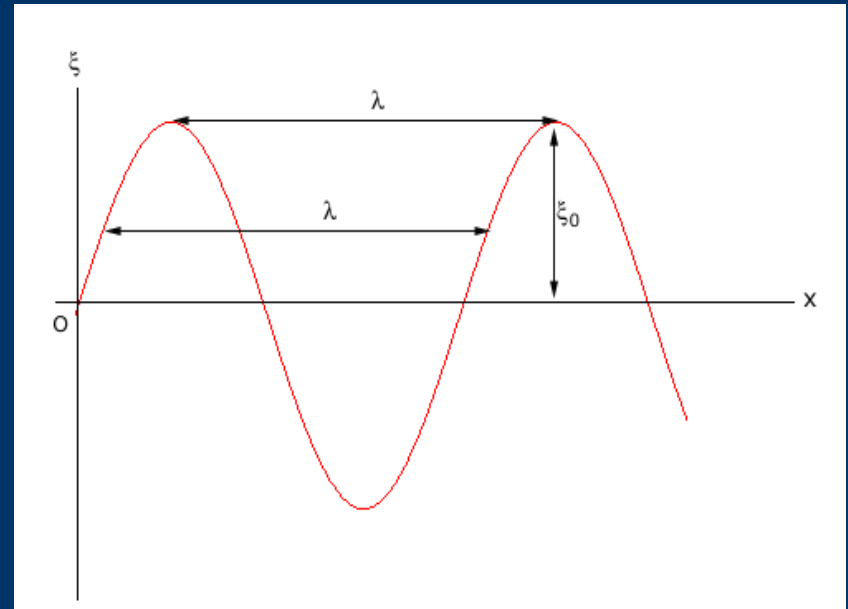
Període (T): és el temps que triga una ona a recórrer una distància igual a la longitud d'ona. Es mesura en segons (s).

Freqüència ( $\nu$ ) és el nombre de longituds d'ona que passen per un punt determinat en un segon. S'expressa en Hz

Es verifica que

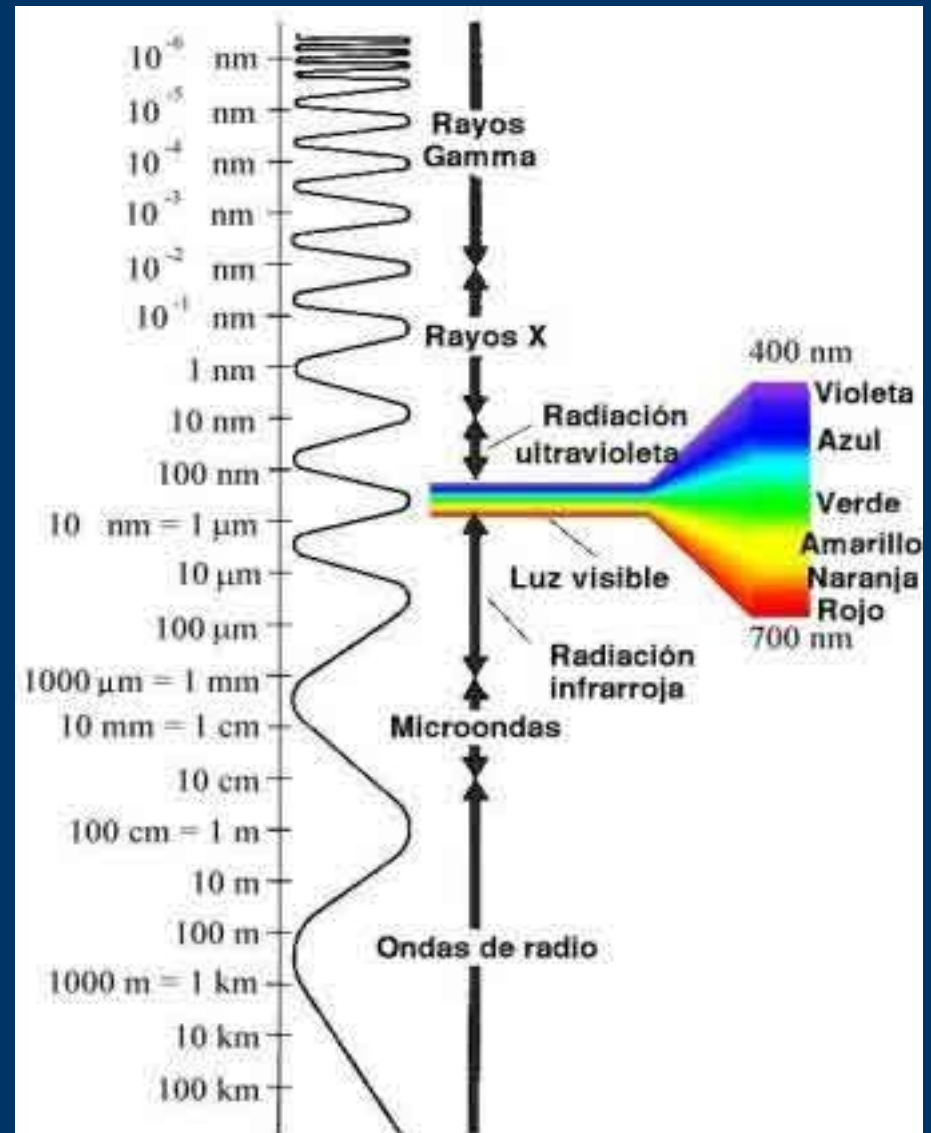
$$T = 1/\nu$$

$$\lambda\nu = c$$



# Espectre electromagnètic de la llum

- La descomposició de qualsevol radiació electromagnètica en les radiacions de diferents longituds d'ona que la constitueixen s'anomena espectre, l'aparell que s'utilitza és un espectroscopi.
- L'ull humà només és sensible a la radiació electromagnètica amb longitud d'ona compresa entre  $4 \cdot 10^{-7}$  m i  $7,5 \cdot 10^{-7}$  m. És el que anomenem visible .
- Els espectres poden ser continus o discontinus (contenen certes radiacions)
- També poden ser d'emissió si provenen de la font emissora o d'absorció, si han travessat una matèria determinada.



# Espectres d'emissió

- Un fenomen que es va estudiar molt a finals del segle XIX i principis del XX va ser l'espectre d'emissió dels elements.
- Quan els àtoms d'un element determinat són excitats, s'observa experimentalment l'emissió per part de l'element d'un feix de llum que conté determinats colors, característics de l'element.
- Aquest fenomen no es podia explicar, ja que si un element absorbeix energia suficient, hauria de poder emetre qualsevol freqüència o hauria de contenir una franja contínua de colors, en contra del que s'observa en la realitat.



# Hipòtesi de Planck

Planck el 1900 va arribar a la següent conclusió:

*La radiació no pot ser emessa ni absorbida de forma contínua, només ho pot fer en quantitats definides que han de ser múltiples d'algun factor fonamental, sent aquest factor la freqüència de la llum (cosa que explicaria les ratlles discontinües dels espectres).*

Així doncs, l'energia electromagnètica no s'absorbeix o s'emet de forma contínua, sinó que ho fa en un nombre definit de la unitat anomenada quàntum o fotó.

Segons Planck es pot calcular l'energia d'un quàntum amb l'expressió:

$$E = h\nu$$

$h$  és la constant de Planck i val  $6,63 \cdot 10^{-34}$  J.s

La hipòtesi de Planck és la base de la mecànica quàntica i senyala el començament de la química moderna.

---

---



## C. Model de Bohr

El model de Rutherford no podia explicar alguns dels fets que s'havien descobert:

Una partícula carregada elèctricament que es mou està emetent una quantitat d'energia, així doncs, si l'electró girés al voltant del nucli, aniria perdent energia i cauria sobre aquest.

Els diferents espectres d'emissió i absorció dels àtoms són discontinus. La mecànica clàssica no pot explicar aquest fet, ja que l'energia de l'electró en el seu moviment al voltant del nucli podia tenir qualsevol valor. Per tant l'emissió d'energia seria contínua i l'espectre també.

El 1913 Bohr, basant-se en el model de Rutherford va establir un nou model d'àtom basant-se en tres postulats que no es podien demostrar:

**1r. Postulat:** L'electró gira al voltant del nucli en òrbites circulars, però sense emetre energia. Per tant no varia la seva velocitat.

**2n. Postulat:** Només estan permeses per a l'electró les òrbites circulars que tenen un valor determinat. Es diu que l'energia dels electrons està quantitzada.

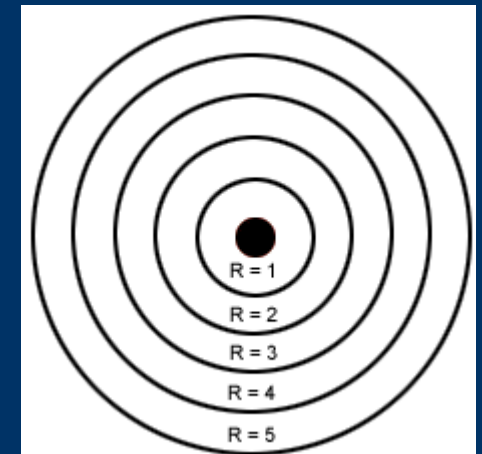
Es designa per  $n$  qualsevol òrbita permesa i s'assigna un nombre enter a cadascuna d'aquestes òrbites. L'electró té una energia diferent en cada òrbita.

Per  $n = 1$  tenim l'òrbita més petita i on l'electró té la mínima energia.

L'estat de mínima energia es coneix com **estat fonamental**.

$n = 2$  segona òrbita o segon nivell energètic

$n = 3$  tercera òrbita o tercer nivell energètic



3r. Postulat: El pas d'un electró d'una òrbita a una altra provoca l'emissió o l'absorció d'energia igual a la diferència d'energia entre els dos nivells energètics.

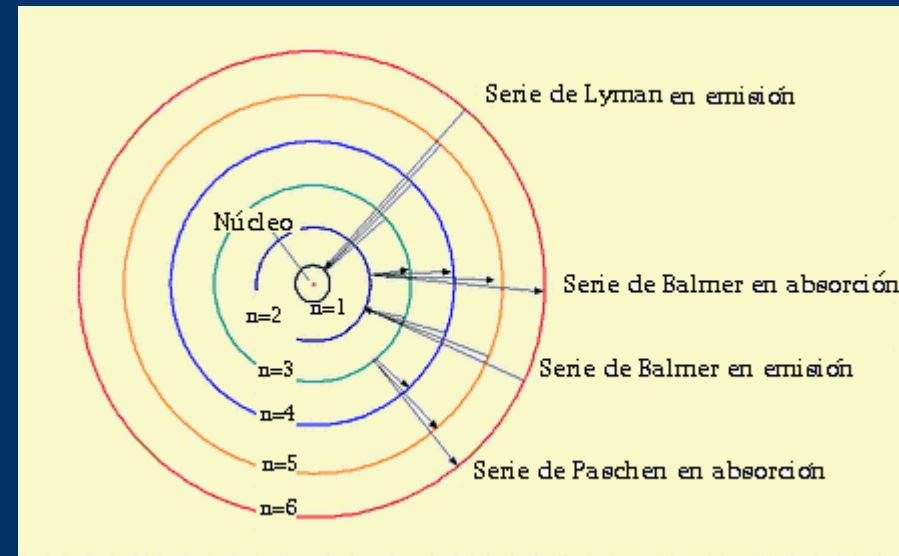
El model de Bohr incorpora la hipòtesi de Planck i interpreta els espectres d'emissió de l'hidrogen..

Les línies que s'observen a l'espectre d'aquest element estan relacionades amb els canvis d'energia de l'electró en passar d'una òrbita a una altra de menys energia en àtoms excitats prèviament

## Efecte Zeeman

Anys més tard es van construir espectrògrafes amb més poder de resolució i es va observar que les línies gruixudes dels espectres originals eren en realitat diverses línies molt primes i properes.

Zeeman va observar que si a més els àtoms es sotmetien a un camp magnètic, apareixien noves línies i l'espectre es complicava molt, aquest fet es coneix com efecte Zeeman.



## Correcció de Sommerfeld

Sommerfeld, a partir dels fets anteriors, va deduir que existien en una mateixa òrbita, diferents nivells d'energia, la qual cosa provocava que les ratlles de l'espectre es desdoblessin. Per tant el model de Bohr es veu modificat per la correcció anterior i la interpretació va ser que dintre d'una mateixa òrbita existeixen diferents trajectòries el·líptiques a més de la circular.

Per caracteritzar una el·lipse es necessiten dos valors, el del semieix principal i el del semieix menor.

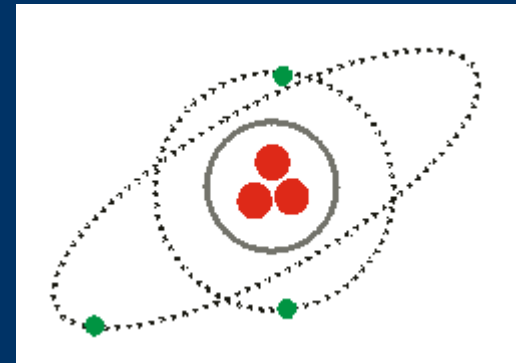
Sommerfeld va introduir la següent correcció:

Per cada òrbita principal  $n$ , hi ha  $n$  subòrbites, de les quals 1 és circular i  $n-1$  el·líptiques.

$n = 1$  una subòrbita circular

$n = 2$  dues subòrbites, 1 circular i 1 el·líptica

$n = 3$  tres subòrbites, 1 circular i 2 el·líptiques



# *Model actual de l'àtom.*

## *Model quàntic o d'orbitals*

El model de Bohr barrejava la mecànica clàssica amb la nova mecànica quàntica.

La mecànica clàssica només és aplicable a velocitats i distàncies molt grans, per distàncies a escala subatòmica i grans velocitats cal recórrer a la mecànica relativista.

El camí cap a la construcció d'un nou model quàntic arrenca amb la hipòtesi de De Broglie i continua amb Heisenberg i Schrödinger.

---

---

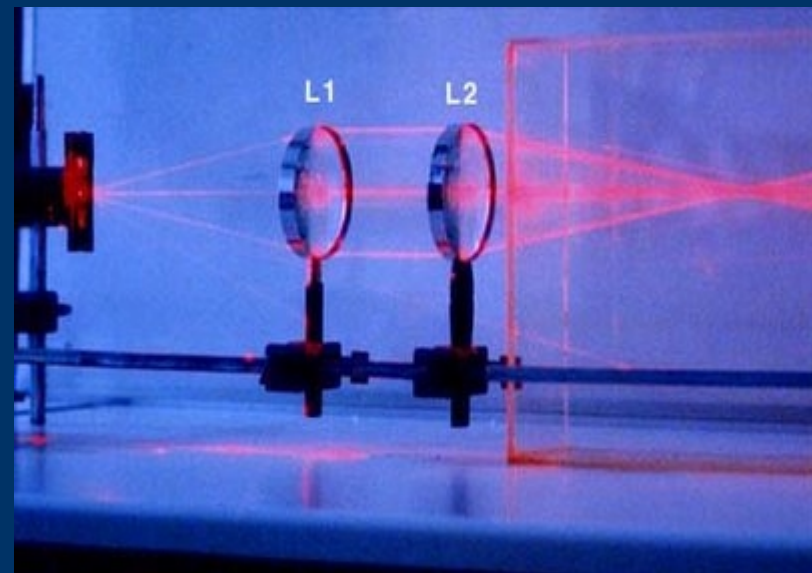
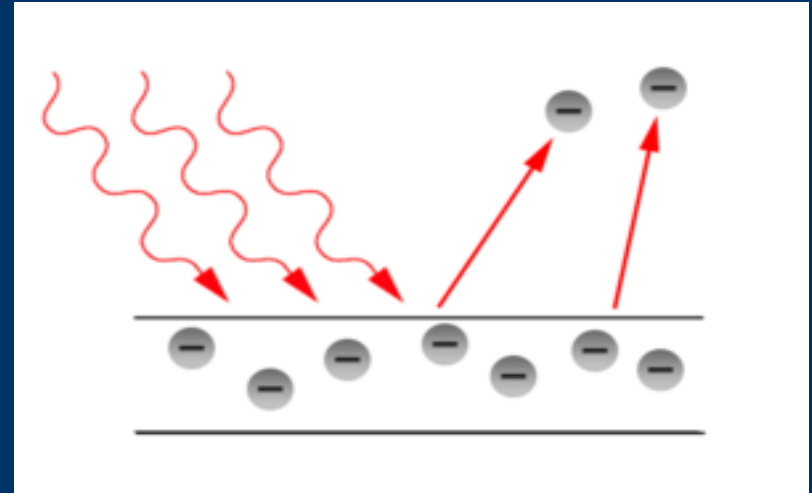
## Hipòtesi de De Broglie

La llum presenta d'una banda fenòmens de caràcter corpuscular com si fós un conjunt de partícules (efecte fotoelèctric), mentre que altres vegades es comporta com una ona (fenòmens d'interferència o de difracció).

Per tant hem de considerar la llum amb una doble naturalesa: unes vegades es comporta com una ona i altres vegades com una partícula formada per fotons amb una energia determinada..

De Broglie va arribar a aquesta conclusió i la va extendre a tota la matèria. No només els fotons portarien associada una ona, sinó que tota la matèria presentaria aquesta dualitat, qualsevol partícula material en moviment porta associada una ona.

Aquesta teoria es va confirmar plenament amb la difracció d'electrons.



## Principi d'incertesa de Heisenberg

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

Podem imaginar que per observar un àtom d'hidrogen tenim un aparell ideal, com que per observar-ho necessitem il.luminar-ho amb una llum que té aproximadament una longitud d'ona equivalent al seu tamany. Se sap que el tamany de l'àtom és 1 angström, l'energia que correspon a aquesta longitud d'ona és  $286 \cdot 10^3$  kcal/mol.

D'altra banda l'energia d'ionització de l'àtom d'hidrògen és 314 kcal/mol, per tant en il.luminar l'àtom s'ionitza i no el podem observar.

Aquest exemple extrem, explica com quan s'intenta fer una mesura s'introdueix un error i que aquesta modifica l'estat de l'objecte, és a dir es produirà sempre una inexactitud en la mesura, al marge de la precisió de l'aparell.

El concepte d'òrbita en l'àtom de Bohr, ja no té validesa, ja que ara sabem que és impossible conèixer amb exactitud la posició i la velocitat de l'electró.

S'inicia la construcció d'un nou model on el concepte d'òrbita es substitueix per el d'orbital que indica la probabilitat de trobar l'electró en una regió de l'espai.

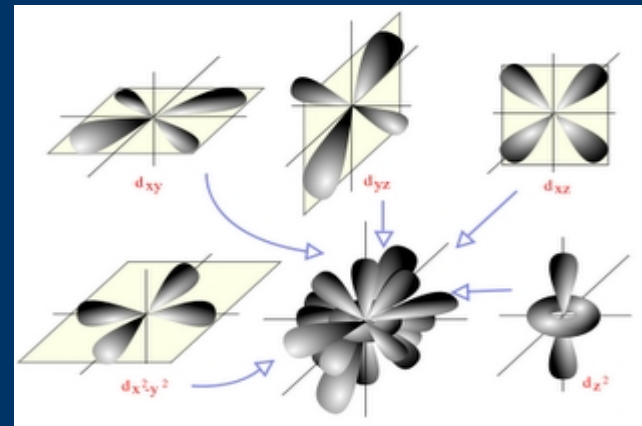
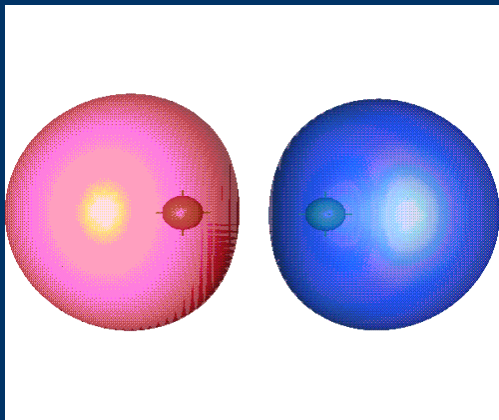
## Equació de Schrödinger i concepte d'orbital

Schrödinger, partint de la idea que tota partícula en moviment porta associada una ona, va trobar una equació d'ona que permetia descriure el moviment de l'electró; les solucions a aquesta equació són les funcions d'ona i defineixen la partícula.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

$\psi$  és la funció d'ona. A partir de la funció d'ona es pot calcular  $\Psi^2$  que és la probabilitat de trobar l'electró en una regió de l'espai.

L'equació de Schrödinger és una equació diferencial que representa el moviment de l'electró. Només té solució per determinats valors de paràmetres procedents de l'àtom de Bohr, que s'anomenen nombres quàntics



## Conclusions del model atòmic actual.

### Nombres quàntics

Cada orbital està caracteritzat per 3 números quàntics.

Cada electró per 4 nombres quàntics:

$n$  o nombre quàntic principal

$l$  nombre quàntic secundari

$m_l$  nombre quàntic magnètic

$m_s$  nombre quàntic d'espín

#### A. Nombre quàntic principal

Especifica el nivell energètic en què es troba l'electró i determina la grandària de l'orbital. Pot prendre valors de la sèrie de nombres naturals

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$$

#### B. Nombre quàntic secundari

Describeix la forma geomètrica de l'orbital, els valors que pot prendre per cada valor de  $n$  van des de 0 fins a  $(n - 1)$

Per exemple: per  $n = 2$  podem trobar valors de  $l = 0$  i  $l = 1$

Els valors de  $l$  que podem trobar en tota la taula periòdica són  $l = 0$ ,  $l = 1$ ,  $l = 2$  i  $l = 3$ . Cada un d'ells té assignats els següents orbitals

$l = 0$  orbital s

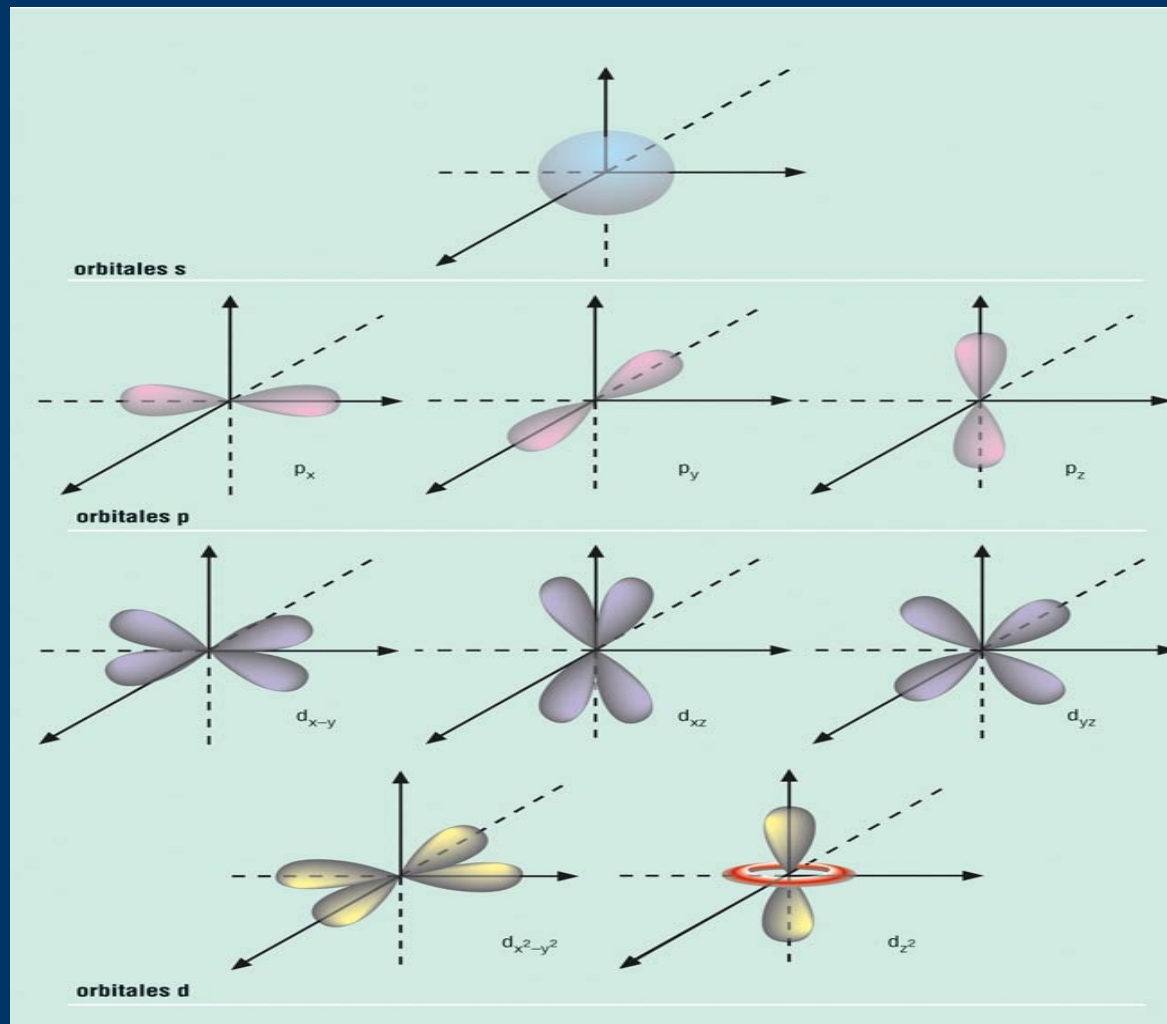
$l = 1$  orbital p

$l = 2$  orbital d

$l = 3$  orbital f



# Representació dels orbitals s, p, d



### C. Nombre quàntic magnètic ( $m_l$ )

Ens informa de l'orientació de l'orbital en l'espai pot tenir valors des de +l fins a -l, passant per zero.

$$l = 1 \text{ valors de } m_l (+1, 0, -1)$$

### D. Nombre quàntic d'espín ( $m_s$ )

Està associat al sentit de gir de l'electró al seu voltant. Pot prendre 2 valors +1/2 i -1/2

**Aplicació:**

Indiqueu raonadament si cadascuna de les combinacions de nombres quàntics següents és possible o no. En cas que sigui possible designeu l'orbital

a) (4, 3, 0 -1)

b) (3, 2, -1, -1/2)

c) (2, 3, 0, +1/2)

d) (2, 1, 1, 1/2)

# Configuració electrònica dels àtoms.

## Regles de construcció

Per expressar la configuració electrònica d'un àtom s'indiquen quins són els orbitals ocupats i, en forma de superíndex a la part superior dreta, quin és el nombre d'electrons que conté cadascun.

Per exemple: el nitrogen N té  $Z = 7$ , la seva configuració electrònica serà:  $1s^2 2s^2 2p^3$

### A. Principi d'exclusió de Pauli

En un àtom no hi poden haver 2 electrons amb els 4 nombres quàntics iguals. Per tant a cada orbital hi caben com a molt 2 electrons.

### B. Principi d'Aufbau

Els orbitals s'omplen en ordre creixent d'energia.

### C. Regla de Hund o de màxima multiplicitat

Mentre sigui possible els electrons es col.loquen en cada orbital amb els espins desaparellats.

### D. Regla de Madelung

Quan dos orbitals tenen el mateix valor per  $n+l$ , és més estable el de menor  $n$

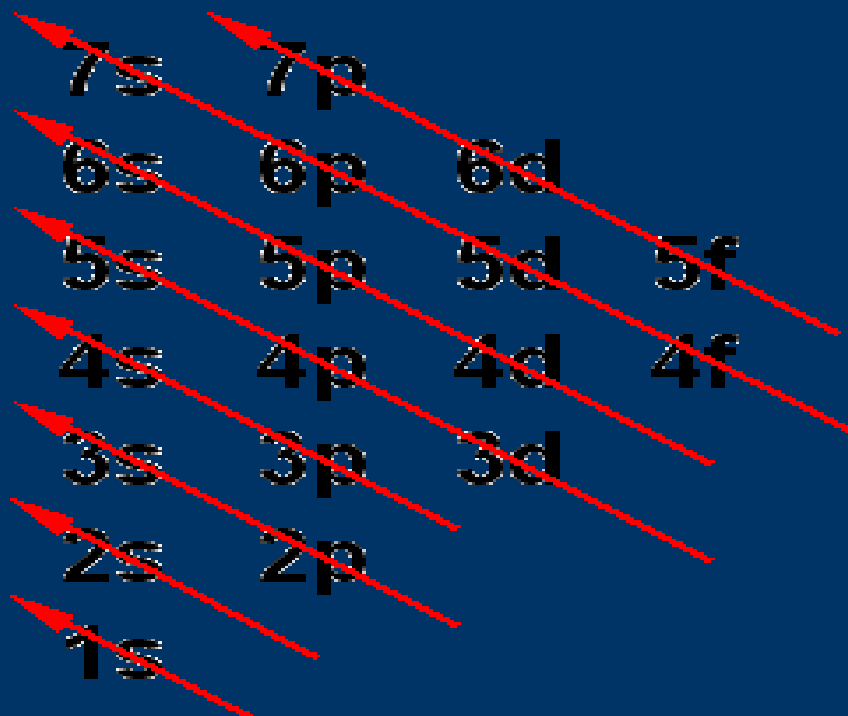
---

---

## Diagrama de Möeller

Ens indica l'ordre en què hem d'omplir els orbitals.

Diverses expressions de la configuració electrònica



Configuración estándar  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$

Configuración condensada  $[Ar] 4s^2 3d^4$

Configuración desarrollada

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑
1s	2s	2p <sub>x</sub>	2p <sub>y</sub>	2p <sub>z</sub>	3s	3p <sub>x</sub>	3p <sub>y</sub>	3p <sub>z</sub>	4s	3d	3d	3d	3d	3d

Configuración semidesarrollada

	↑↓	↑	↑	↑	↑	
[Ar]	4s	3d	3d	3d	3d	3d

