



ESTRUCTURA DE LA MATÈRIA

Química 2n Batx

Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (🐦 @ocolomar)



Models atòmics

Model	Fets experimentals que van exposar les seves limitacions
Dalton	Descobriment de la radioactivitat natural (Becquerel, 1896) Descobriment de l'electró (Thomson, 1897)
Thomson	Descobriment del nucli atòmic (Rutherford, 1911) Descobriment del protó (Rutherford, 1919)
Rutherford	Integritat del nucli → neutró (Chadwick, 1932) Inestabilitat de les òrbites electròniques → Física Quàntica

Model atòmic de Bohr

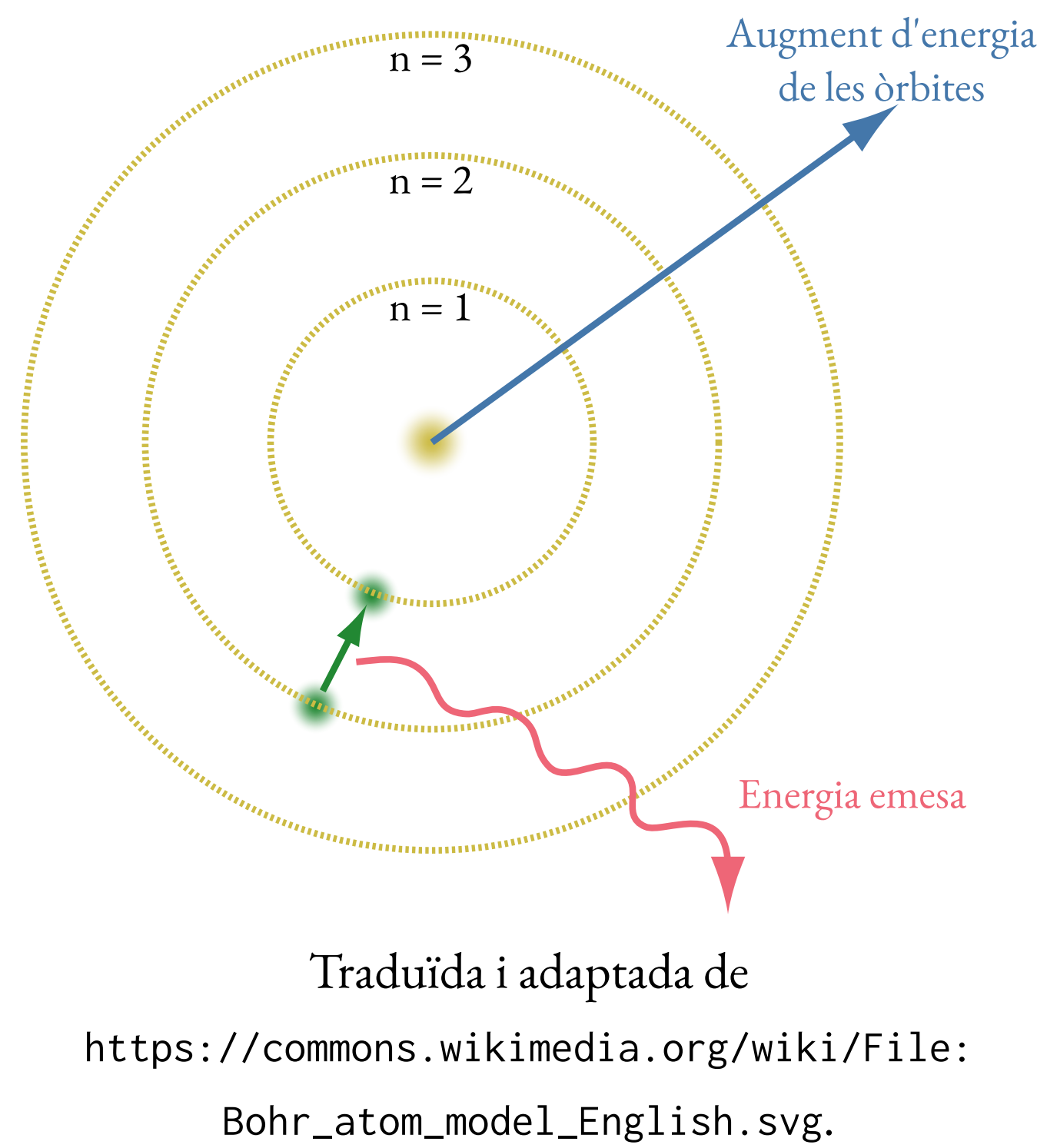
Proposat el **1913** per Niels **Bohr** per **explicar l'estabilitat** de la **matèria** i els **característics espectres** d'emissió i absorció dels **gasos**.



Espectre discret d'emissió de l'hidrogen (H).

Aquest model es basa en **tres postulats fonamentals**:

1. Els **electrons** descriuen **òrbites circulars** al voltant del nucli **sense irradiar energia**.
2. Només estan **permeses** aquelles **òrbites** en les quals l'electró té un **moment angular múltiple** sencer de $\hbar = h/(2\pi)$.
3. L'**electró** només **emet** o **absorbeix energia** en els **salts** d'una òrbita permesa a una altra, sent l'energia emesa/absorbida la diferència d'energia entre els dos nivells.



L'**equació de Rydberg** ens dóna la **longitud d'ona** de les **línies espectrals** de molts elements químics. Pel cas de l'**hidrogen**:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

on λ és la longitud d'ona de la radiació emesa al buit, $R_H = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ és la constant de Rydberg i n_1 i n_2 són els nombres quàntics principals de les òrbites involucrades en el salt (amb $n_2 > n_1$).

Aquesta equació també ens permet calcular el **valor energètic** corresponent a una **transició electrònica** entre dos nivells donats, ΔE :

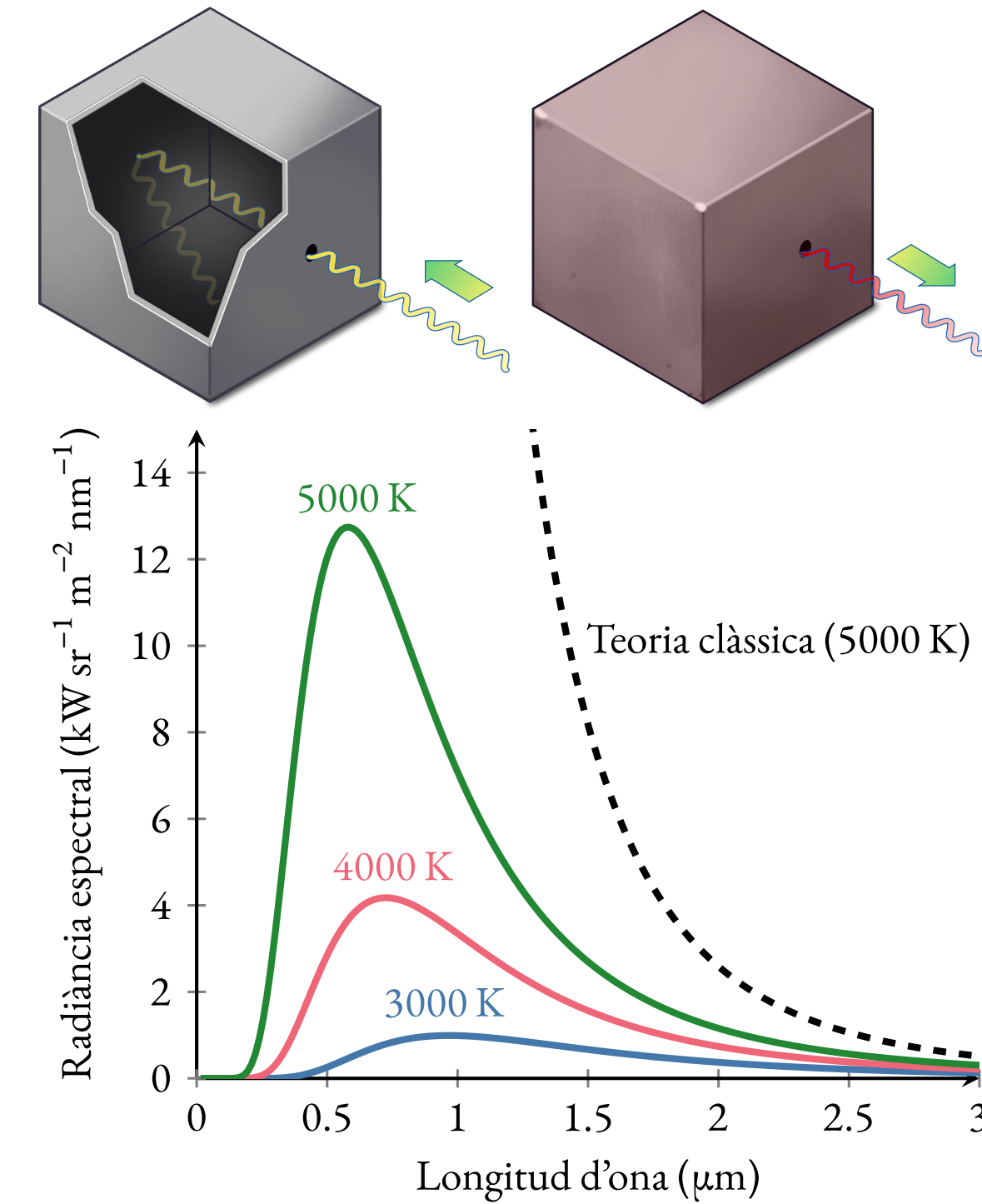
$$\Delta E = hcR_H \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

on $c = 299\,792\,458 \text{ m/s}$ és la velocitat de la llum al buit.

Orígens de la teoria quàntica

Radiació de cos negre

És la **radiació electromagnètica re-emesa** per un cos ideal que absorbeix tota la radiació que incideix sobre ell (**cos negre**), estant en **equilibri** termodinàmic amb el seu **entorn**. Té un espectre molt característic, inversament relacionat amb la intensitat, que depèn únicament de la temperatura de el cos. La **decisió** de la **teoria clàssica** vigent a l'hora d'explicar la forma d'aquest espectre es coneix com la **catàstrofe ultraviolada**. **Max Planck** va ser qui va aconseguir, el 1900, explicar l'espectre de cos negre, donant així **origen** a la **teoria quàntica**.



Hipòtesi de Planck

*L'energia només pot ser emesa / absorbida en paquets discrets anomenats quants o **fotons**, múltiples de la freqüència ν de la radiació electromagnètica associada:*

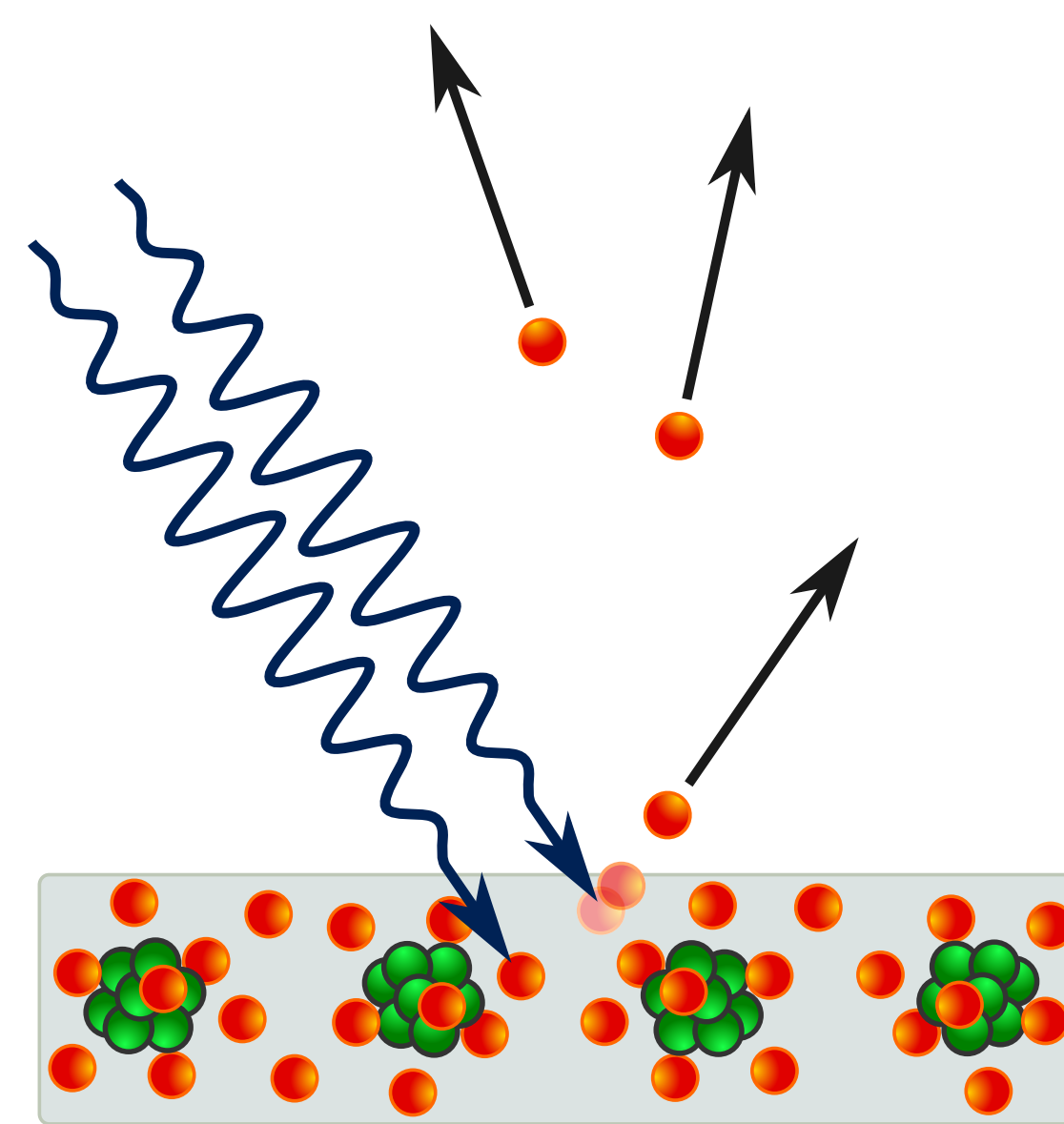
$$E = h\nu,$$

on $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ és la constant de Planck.

Efecte fotoelèctric

L'**efecte fotoelèctric** consisteix en l'**emissió** de (**foto**)**electrons** quan una radiació electromagnètica, com per exemple la llum ultraviolada, incideix sobre un material, típicament metàl·lic. Aquesta emissió compleix les següents **característiques**:

- La **quantitat** de **fotoelectrons** emesos és directament **proporcional** a la **intensitat** de la **radiació** incident.
- L'**emissió** de **fotoelectrons** només es produeix quan la radiació incident té una **freqüència més gran o igual** que una certa freqüència mínima, anomenada **freqüència lliandar** o **de tall**, ν_0 , que és característica de cada material.
- L'**energia cinètica** dels **fotoelectrons** **depèn** únicament de la **freqüència** de la **radiació** incident.
- L'**emissió** de **fotoelectrons** es realitza **instantàniament**, sense existir cap retard entre l'absorció d'energia i l'emissió dels fotoelectrons.



https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Photoelectric_effect_in_a_solid_-_diagram.svg

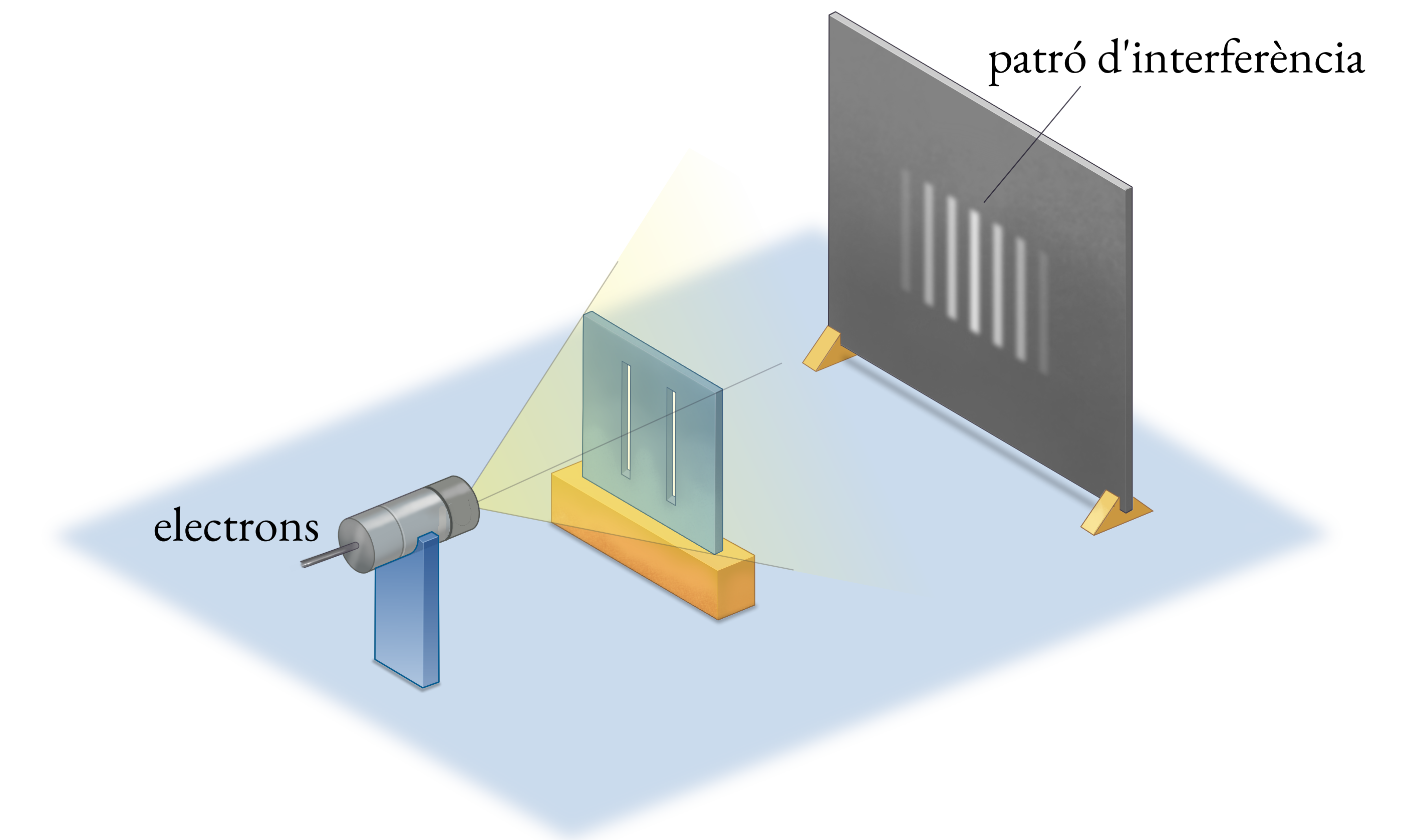
$$E = \phi + E_c$$
$$h\nu = h\nu_0 + E_c \Rightarrow E_c = h(\nu - \nu_0),$$

on $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ és la constant de Planck, ν és la freqüència de la radiació incident, ν_0 és la freqüència lliandar (l'energia associada, $\phi = h\nu_0$ s'anomena **funció** de **treball** o treball d'extracció) i $E_c = h(\nu - \nu_0)$ és l'energia cinètica màxima dels fotoelectrons, emesos sempre que es compleixi $\nu \geq \nu_0$.

Mecànica quàntica

Dualitat ona-corpúscle

Consisteix en que el comportament dels **objectes quàntics** no pot ser descrit considerant a aquests com a partícules o ones, sinó que tenen una **naturalesa dual**.



Electrons mostrant un **comportament** clarament **ondulatori**, gràcies al famós **experiment** de la **doble esclatxa**. Traduïda de [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Map%3A_Physical_Chemistry_\(McQuarrie_and_Simon\)/01%3A_The_Dawn_of_the_Quantum_Theory/1.07%3A_de_Broglie_Waves_can_be_Experimentally_Observed](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Map%3A_Physical_Chemistry_(McQuarrie_and_Simon)/01%3A_The_Dawn_of_the_Quantum_Theory/1.07%3A_de_Broglie_Waves_can_be_Experimentally_Observed).

A partir d'**experiments** de **difracció d'electrons**, **Louis de Broglie** va ser el primer que va proposar la següent **hipòtesi**:

Tota partícula de massa m movent-se a una velocitat v té associada una ona (de matèria) amb una longitud d'ona, λ , donada per

$$\lambda = \frac{h}{mv},$$

sent $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ la constant de Planck.

Principi d'incertesa de Heisenberg

Hi ha certs parells de magnituds físiques (aquelles les qual el seu producte té dimensions de ML^2T^{-1}), que no poden ser determinades simultàniament amb total exactitud, ja que el producte de les seves incerteses ha de ser major o igual que $\hbar/(4\pi) = \hbar/2$.

Exemples de tals magnituds són:

$$\text{Posició } x \text{ i moment lineal } p: \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$
$$\text{Energia } E \text{ i temps } t: \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

on Δ denota la incertesa associada i $\hbar = h/(2\pi)$.

El **principi d'incertesa d'Heisenberg** implica que, tot i que s'especifiquin totes les condicions inicials, no és possible predir el valor d'una quantitat amb total certesa, donant així pas a una **interpretació probabilística** de la **mecànica quàntica**.



ESTRUCTURA DE LA MATÈRIA

Química 2n Batx

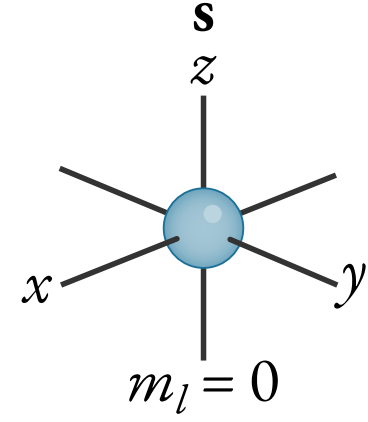
Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (🐦 @ocolomar)



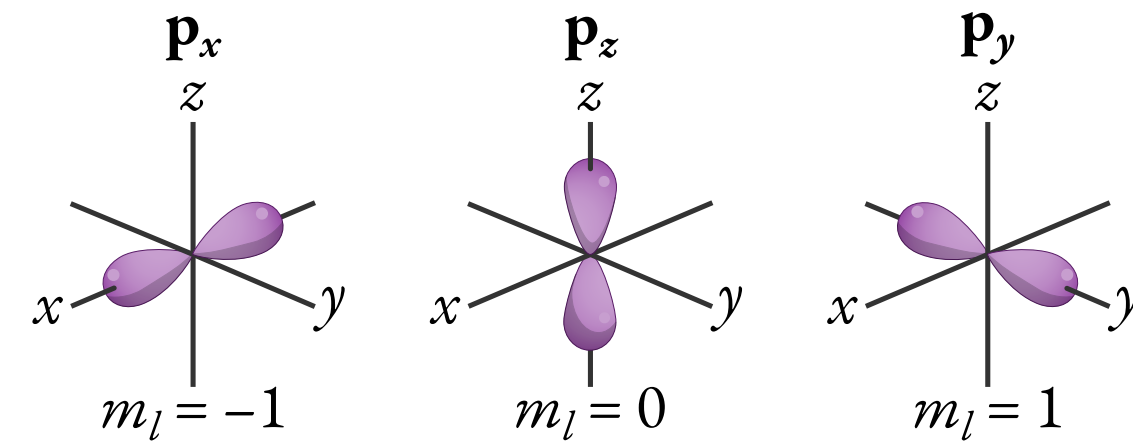
Orbitals atòmics

Són **funcions matemàtiques** que **descriuen** el **tamany**, la **forma** i l'**orientació** de les **regions** de l'**espai** on és **més probables** trobar l'**electró**.

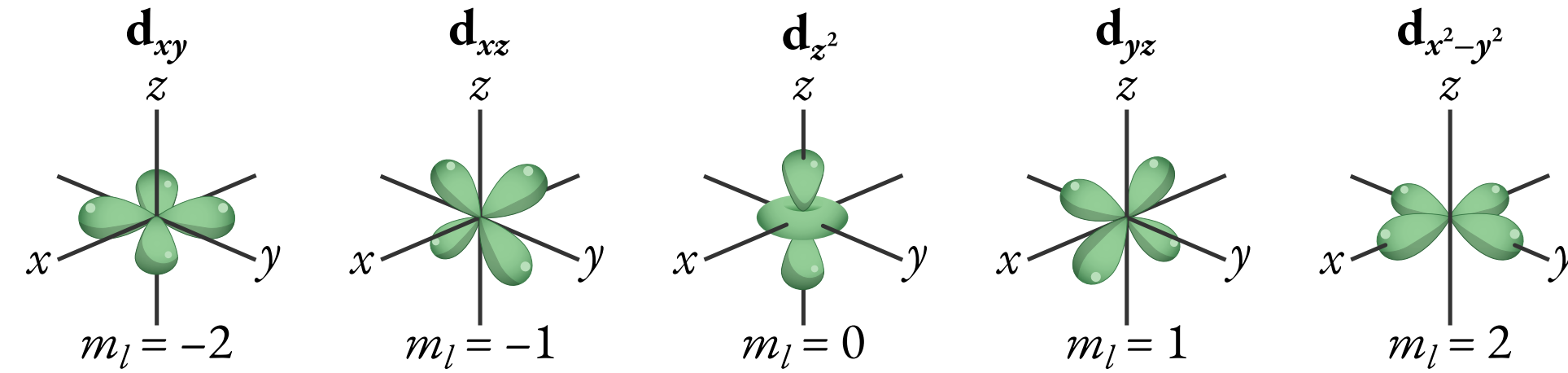
Orbital s: $l=0$



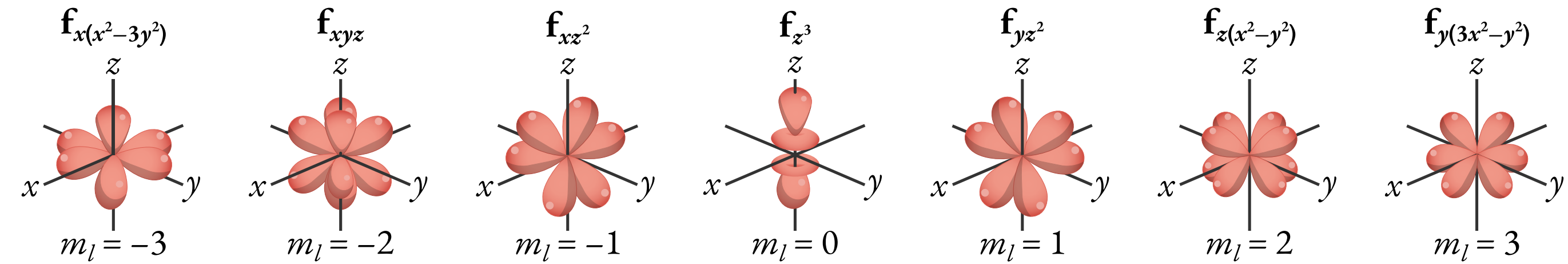
Orbitals p: $l=1$



Orbitals d: $l=2$



Orbitals f: $l=3$



Orbitals s ($l=0$), p ($l=1$), d ($l=2$) i f ($l=3$).

Adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/general-chemistry/quantum-theory/>.

Nombres quàntics i la seva interpretació

Els **nombres quàntics** descriuen **valors** de **magnituds físiques** que es **conserven** en la dinàmica d'un sistema quàntic, tals com l'**energia** o el **moment angular**, les quals estan **quantitzades** i per tant prenen **valors discrets**.

Per **descriure** completament l'**estat quàntic** d'un **electró** necessitem **quatre nombres quàntics**, els quals tenen un significat orbital concret:

Nombre quàntic	Símbol	Significat orbital	Rang de valors	Exemples
Principal	n	tamany i energia de l'orbital	$1 \leq n$	$n = 1, 2, 3, \dots$
Secundari	l	energia i forma de l'orbital	$0 \leq l \leq n-1$	per $n=3$ $l = \{0, 1, 2\}$
Magnètic	m_l	orientació del orbital	$-l \leq m_l \leq l$	per $l=2$ $m_l = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$
Spin	m_s	moment angular intrínsec	$-s \leq m_s \leq s$	per un electró $s = 1/2$ $m_s = \{-1/2, 1/2\}$

Estructura electrònica

Principi d'exclusió de Pauli

Dos o més electrons no poden tenir tots els nombre quàntics idèntics (ocupar el mateix estat quàntic) dins del mateix sistema quàntic (àtom).

Gràcies a aquest principi podem determinar el **nombre màxim d'electrons** que **caben** a cada tipus d'**orbital**:

Tipus d'orbital	s	p	d	f
Nombre d'orbitals	1	3	5	7
Nombre màxim d'e ⁻	2	6	10	14

Ordre energètic creixent

La **configuració electrònica** és la **distribució** dels **electrons** d'un **àtom** en **orbitals atòmics** (s, p, d i f). El **diagrama** de **Möller** ens ajuda a saber en quin **ordre** han d'**omplir-se** els diferents **orbitals**, seguint les **fletxes** (ordre energètic creixent).

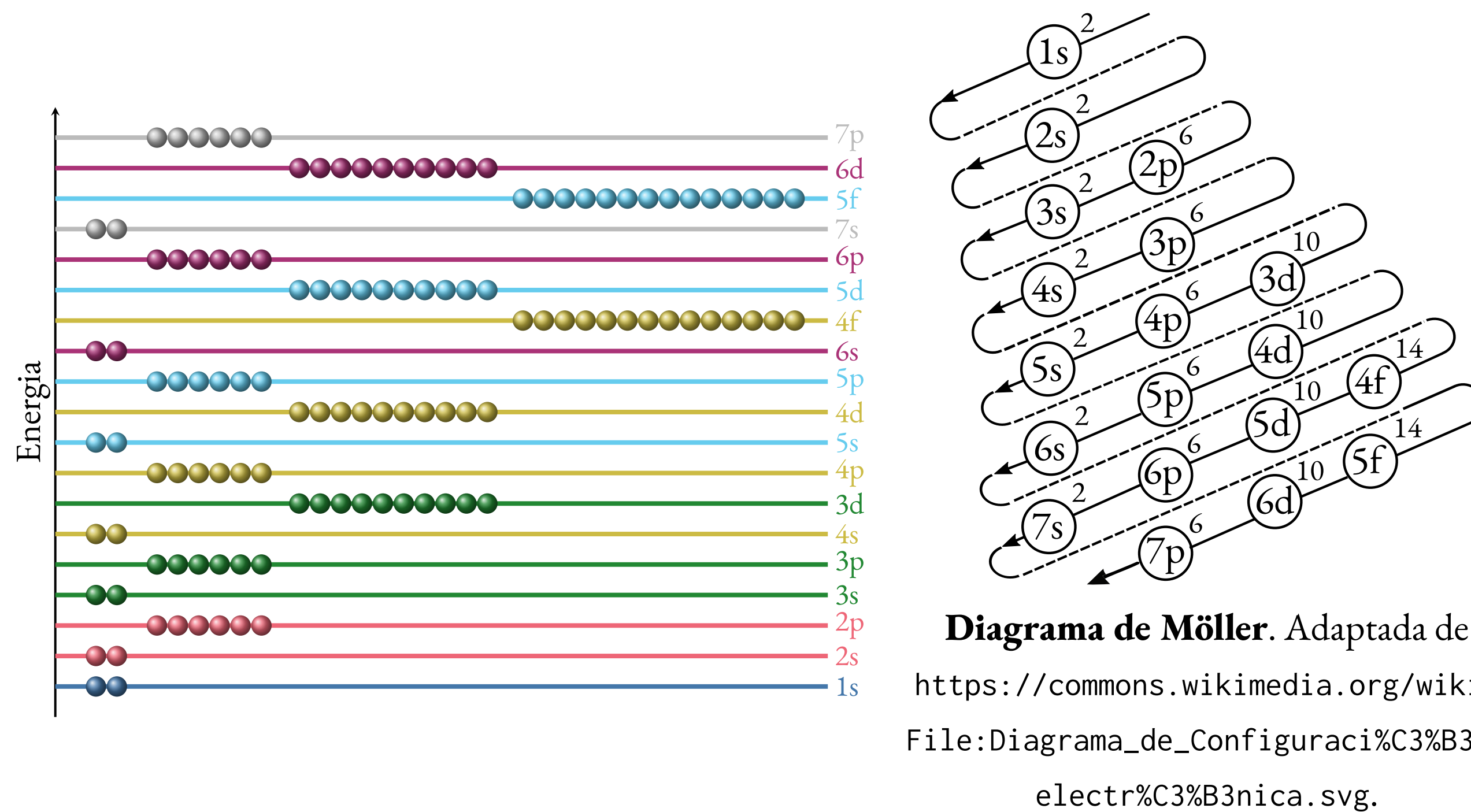


Diagrama de Möller. Adaptada de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diagrama_de_Configuraci%C3%B3nica.svg.

Regla de Hund de la màxima multiplicitat

A l'omplir orbitals de la mateixa energia (per exemple els tres orbitals p) els electrons es distribueixen, sempre que sigui possible, amb els seus spins paral·lels, omplint els orbitals amb la multiplicitat més gran.

EXEMPLES (es mostren també els **nombres quàntics** del **darrer electró**)

Nitrogen: ${}_7\text{N}$	Oxigen: ${}_8\text{O}$	Neó: ${}_{10}\text{Ne}$
$2p$ $\boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow}$	$2p$ $\boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow}$	$2p$ $\boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow}$
$2s$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$	$2s$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$	$2s$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$
$1s$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$	$1s$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$	$1s$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$
$1s^2 2s^2 2p^3$ $n=2$ $l=1$ (p) $m_l=1$ $m_s=1/2$	$1s^2 2s^2 2p^4$ $n=2$ $l=1$ (p) $m_l=-1$ $m_s=-1/2$	$1s^2 2s^2 2p^6$ $n=2$ $l=1$ (p) $m_l=1$ $m_s=-1/2$

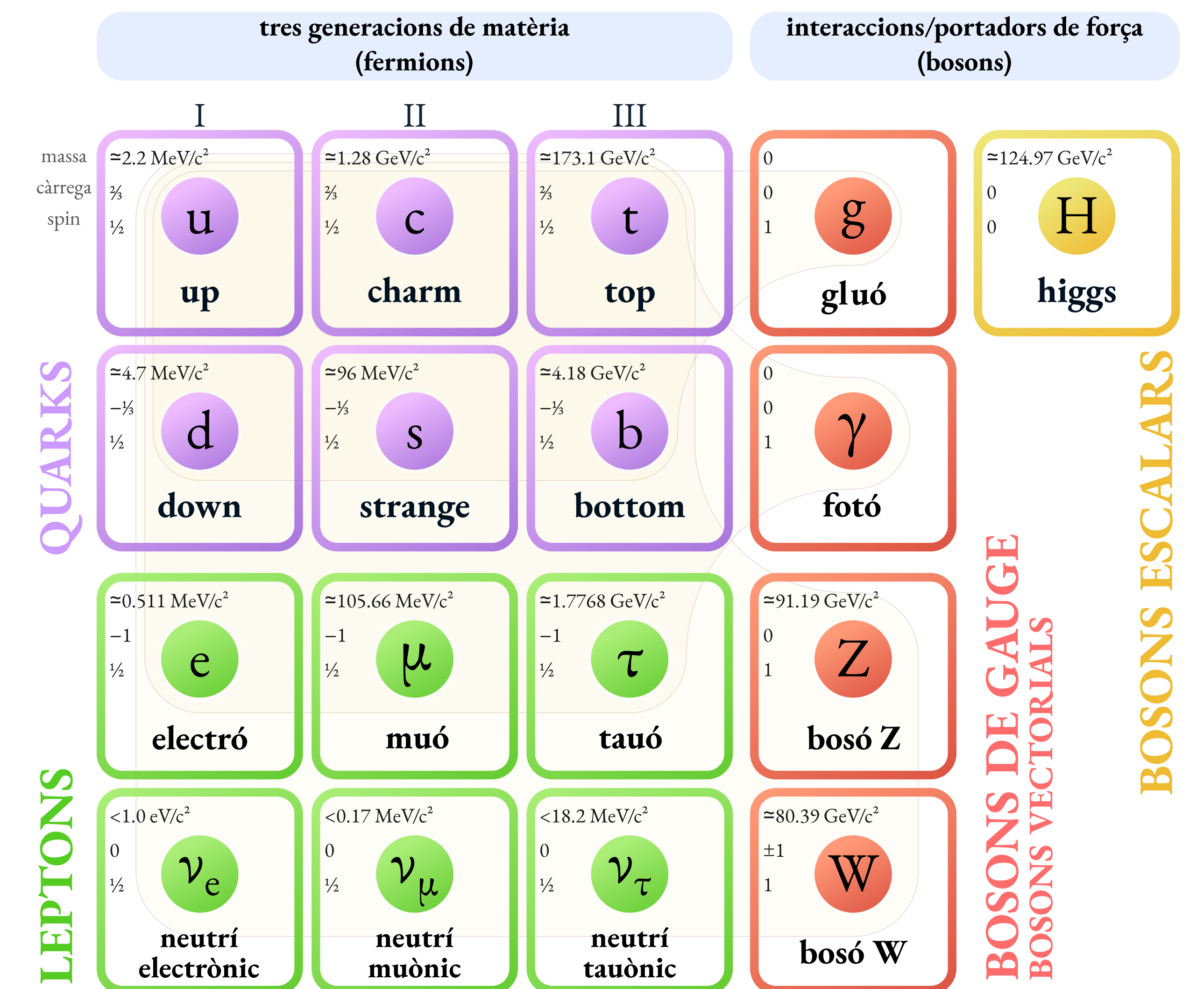
Partícules subatòmiques

Després dels descobriments de **Thomson**, **Rutherford** i **Chadwick** a principis de segle XX, semblava clar que l'àtom estava format per **protons** i **neutrons** en el seu nucli i una escorça on hi havia els **electrons**.

Partícula	Massa/kg	Càrrega/C
Protó	1.673×10^{-27}	1.602×10^{-19}
Neutró	1.675×10^{-27}	0
Electró	9.109×10^{-31}	-1.602×10^{-19}
$m_{\text{protó}} \approx m_{\text{neutró}} \sim 2000 m_{\text{electró}}$		
$q_{\text{protó}} = -q_{\text{electró}}$		

Model estàndard

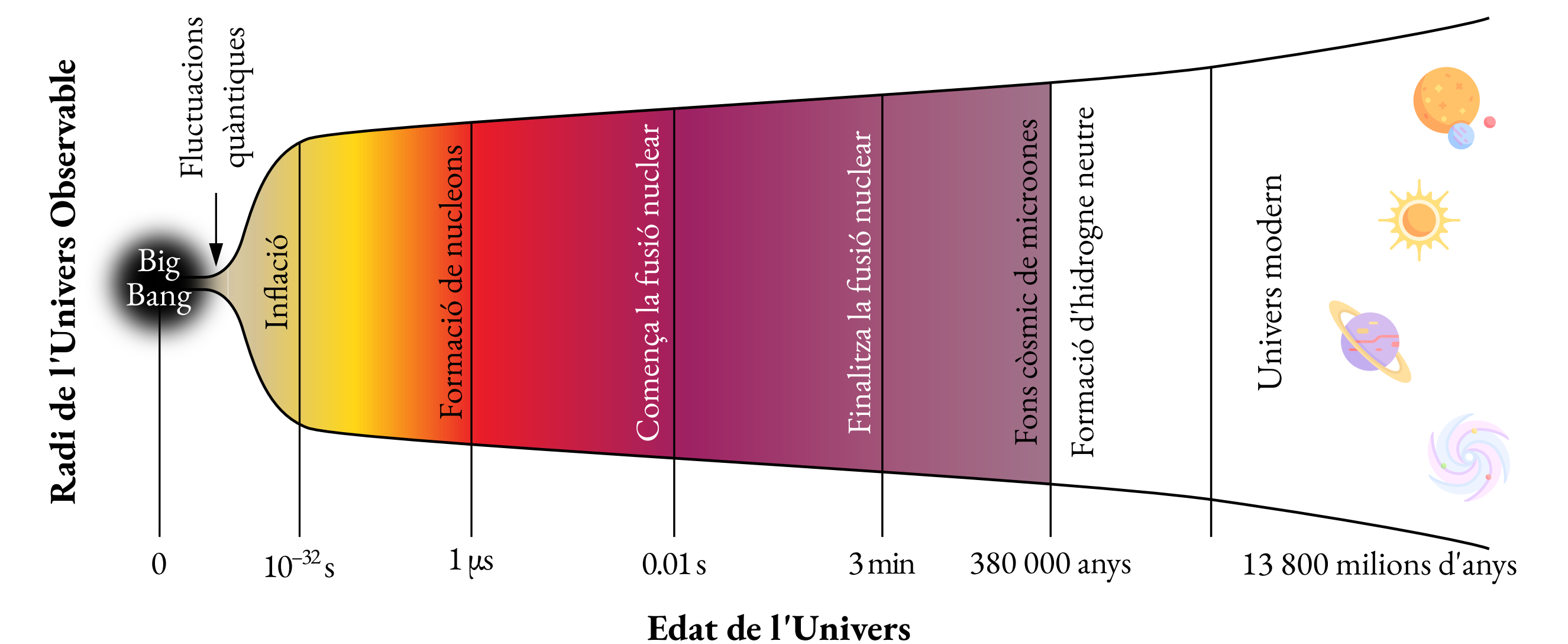
És la teoria que **descriu tres de les quatre interaccions fonamentals** de la natura conegudes (electromagnètica, nuclear forta i nuclear feble), a més de **classificar** totes les **partícules elementals** conegudes.



Traduïda i adaptada de

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Standard_Model_of_Elementary_Particles.svg.

Evolució de l'Univers



Traduïda i adaptada de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:History_of_the_Universe.svg.

Icones disenyades per Freepik de <https://www.flaticon.es/>.