

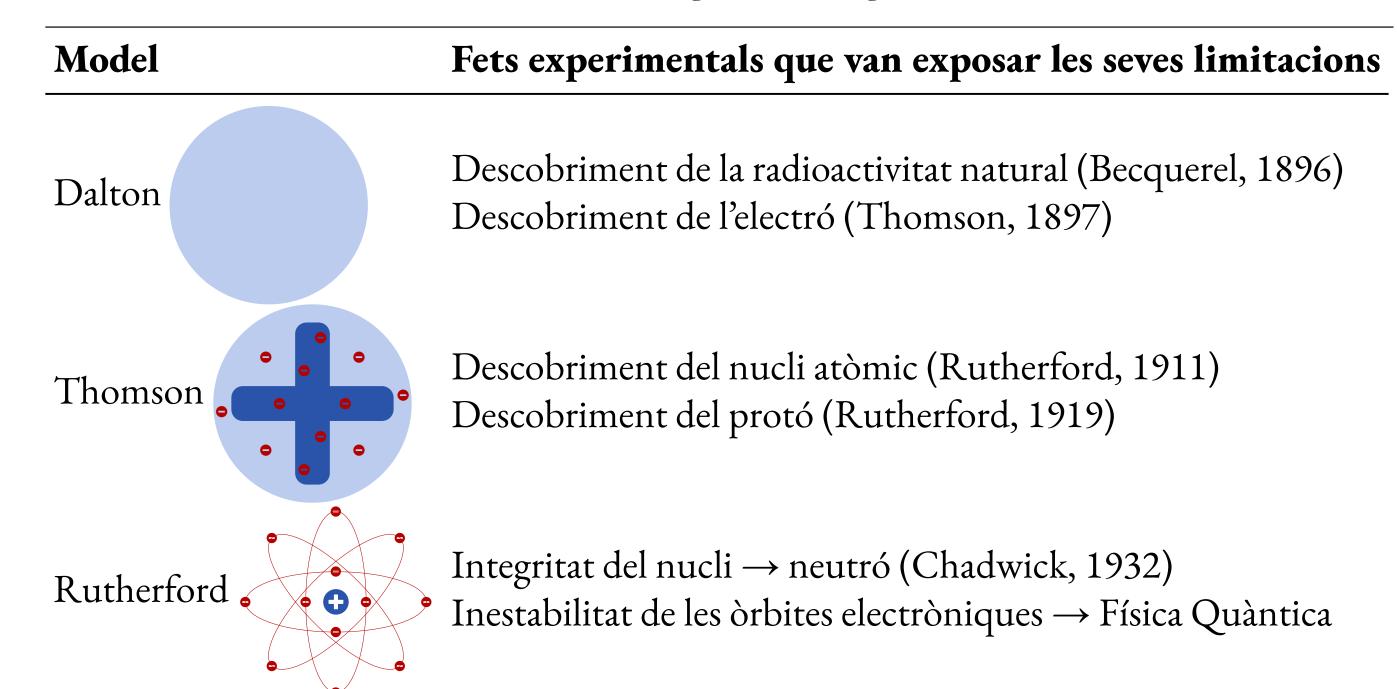
# ESTRUCTURA DE LA MATERIA

# Química 2n Batx

Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar ( 9 @ocolomar )



# Models atomics



## Model atòmic de Bohr

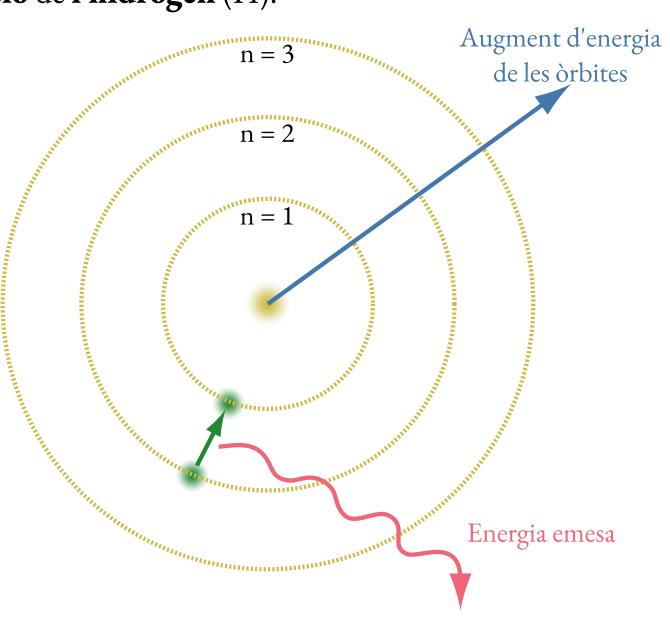
Proposat el 1913 per Niels Bohr per explicar l'estabilitat de la matèria i els característics espectres d'emissió i absorció dels gasos.



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.



Traduïda i adaptada de
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:
Bohr\_atom\_model\_English.svg.

L'equació de Rydberg ens dóna la longitud d'ona de les línies espectrals de molts elements químics:

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

on  $\lambda$  és la longitud d'ona de la radiació emesa al buit,  $R = 1.097 \times 10^7 \,\mathrm{m}^{-1}$  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,  $\Delta E$ :

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

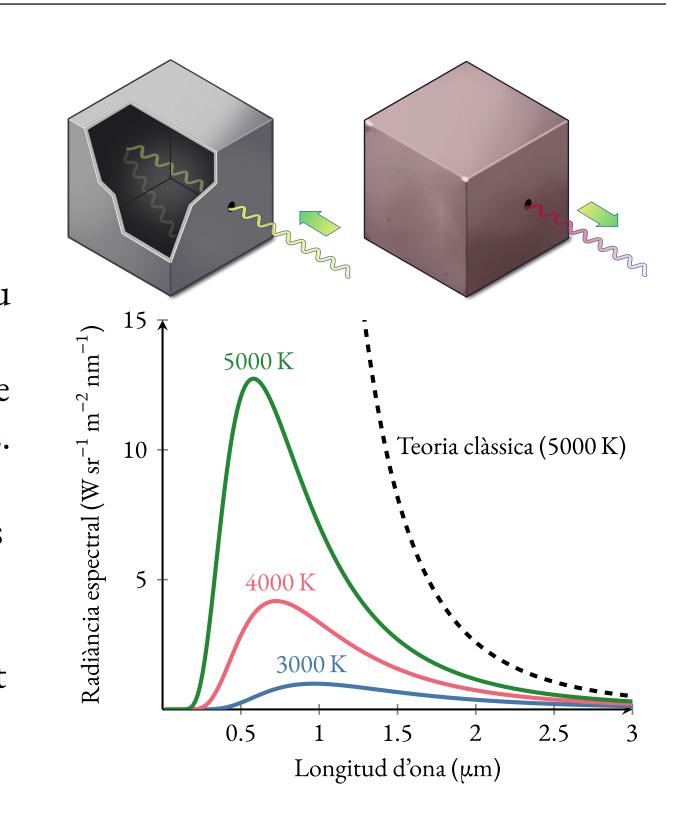
on c = 299792458 m/s és la velocitat de la llum al buit.

# Origens de la teoria quantica

## 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 **fo-tons**, múltiples de la freqüència v de la radiació electromagnètica associada:

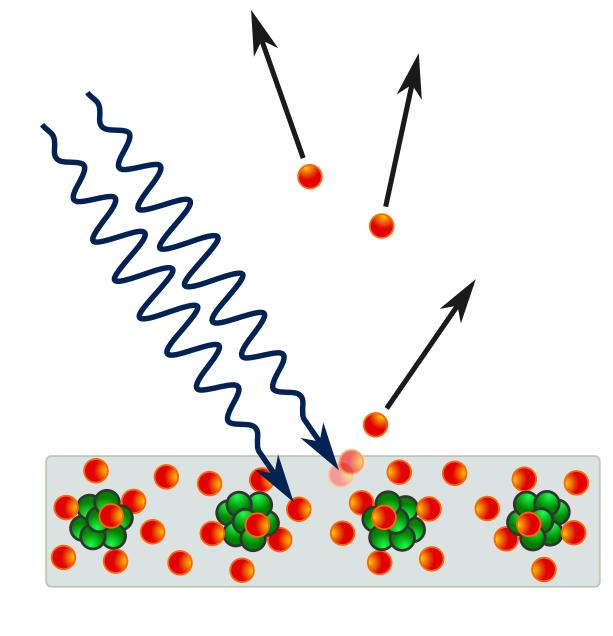
$$E = h\nu$$
,

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

## Efecte fotoelèctric

L'efecte fotoelèctric consisteix en l'emissió de (foto)electrons quan una radiació electromagnética, 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 llindar o de tall,  $\nu_0$ , 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.

$$E = \phi + E_{c}$$

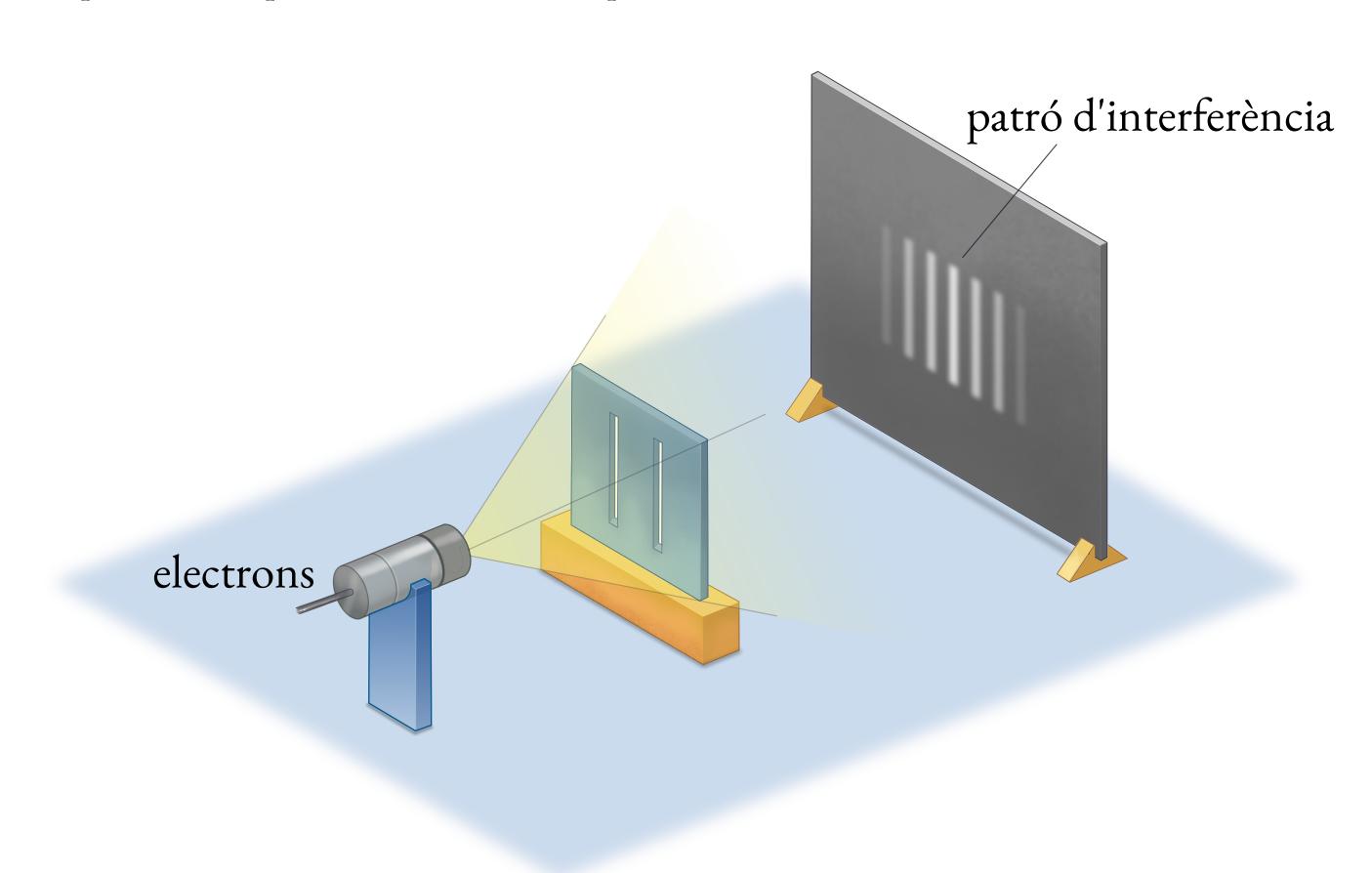
$$h\nu = h\nu_{0} + E_{c} \Longrightarrow E_{c} = h(\nu - \nu_{0}),$$

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

# Mecanica quantica

## Dualitat ona-corpuscle

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 ond ulatori, gràcies al famós experiment de la doble escletxa. 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.

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

# Principi d'incertesa de Heisenberg

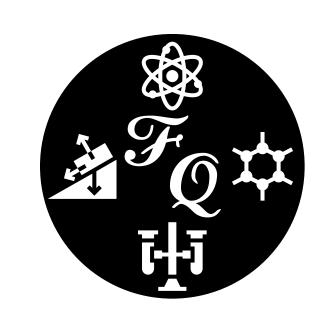
Hi ha certs parells de magnituds físiques (aquelles les qual el seu producte té dimensions de  $ML^2T^{-1}$ ), que no poden ser determinades simultàniament amb total exactitud, ja que el producte de les seves incerteses ha de ser major o igual que  $h/(4\pi) = \hbar/2$ .

#### Exemples de tals magnituts són:

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

on  $\Delta$  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 MATERIA

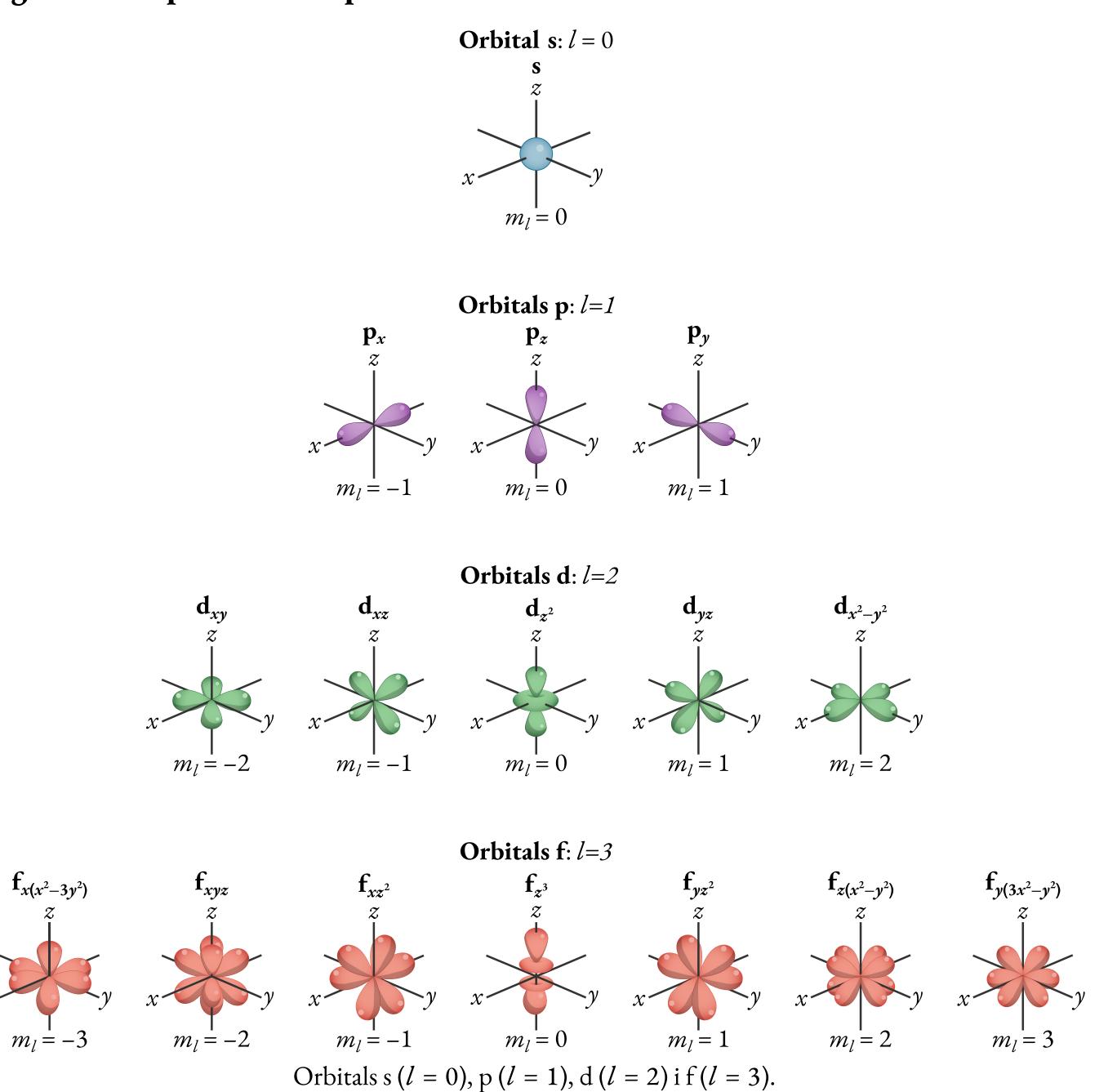
# Química 2n Batx

Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Óscar Colomar ( 9 @ocolomar )



## Orbitals atomics

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.



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 quantics, 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	$0 \le l \le n - 1$	per $n = 3$ $l = \{0, 1, 2\}$
Magnètic	$m_l$	orientació del orbital	$-l \le m_l \le l$	per $l = 2$ $m_l = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$
Spin	$m_s$	moment angular intrínsec	$-s \le m_s \le s$	per un electró $s = 1/2$ $m_s = \{-1/2, 1/2\}$

#### Estructura electronica

#### Principi d'exclusió de Pauli

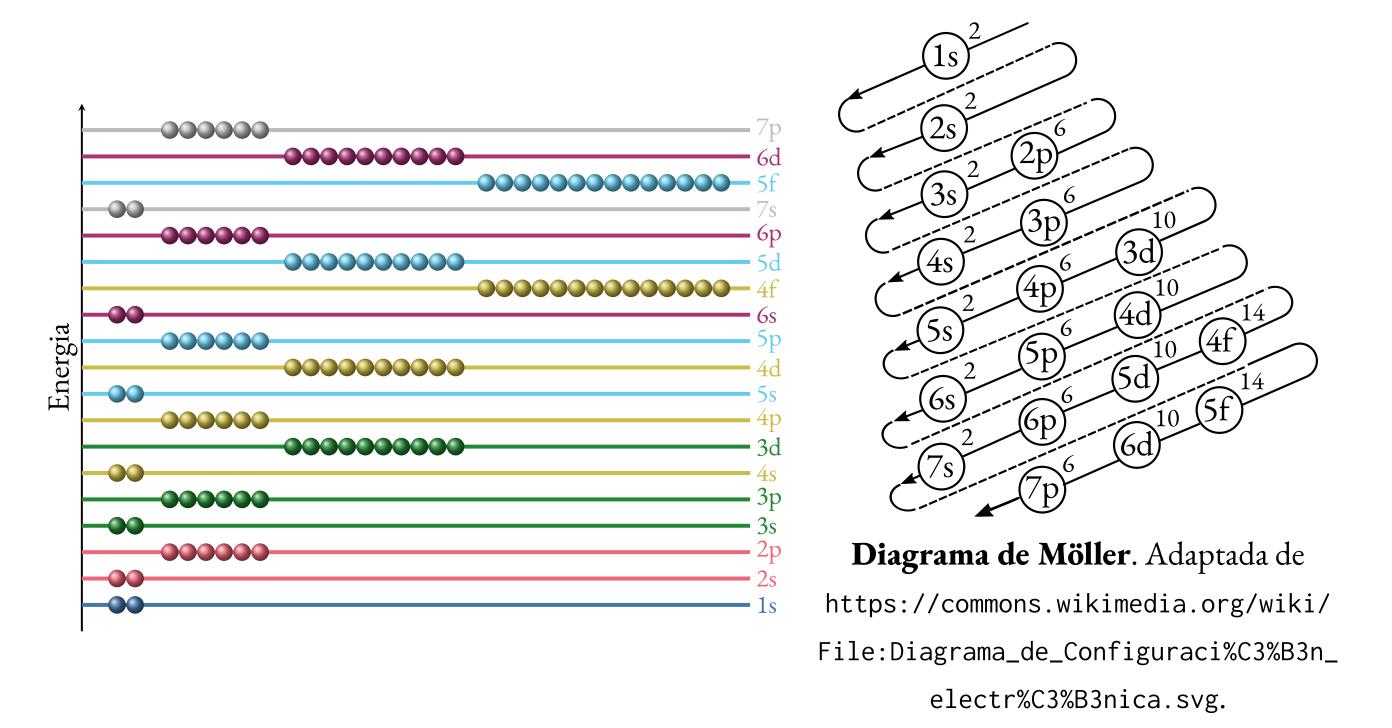
Dos o més electrons no poden tenir tots els nombre quàntics idèntics (ocupar el mateix estat quàntic) dins del mateix sistema quàntic (àtom).

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).



#### Regla de Hund de la màxima multiplicitat

 $m_{s} = 1/2$ 

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)

•	1	,
Nitrogen: 7N	Oxigen: 8O	Neó: 10Ne
2p 1 1 1	2p 1 1 1	2p $1$ $1$ $1$
$2s \left  1 \right $	$2s \left  1 \right $	$2s \left  1 \right $
	23 17	
1s	1. 1	1. 1
	1s[1]	1s[1]
$1s^22s^22p^3$	$1s^22s^22p^4$	$1s^22s^22p^6$
n=2	n=2	n=2
l=1(p)	l=1(p)	l=1(p)
$m_l = 1$	$m_l = -1$	$m_l = 1$
$\nu$	u	V

 $m_s = -1/2$ 

 $m_{s} = -1/2$ 

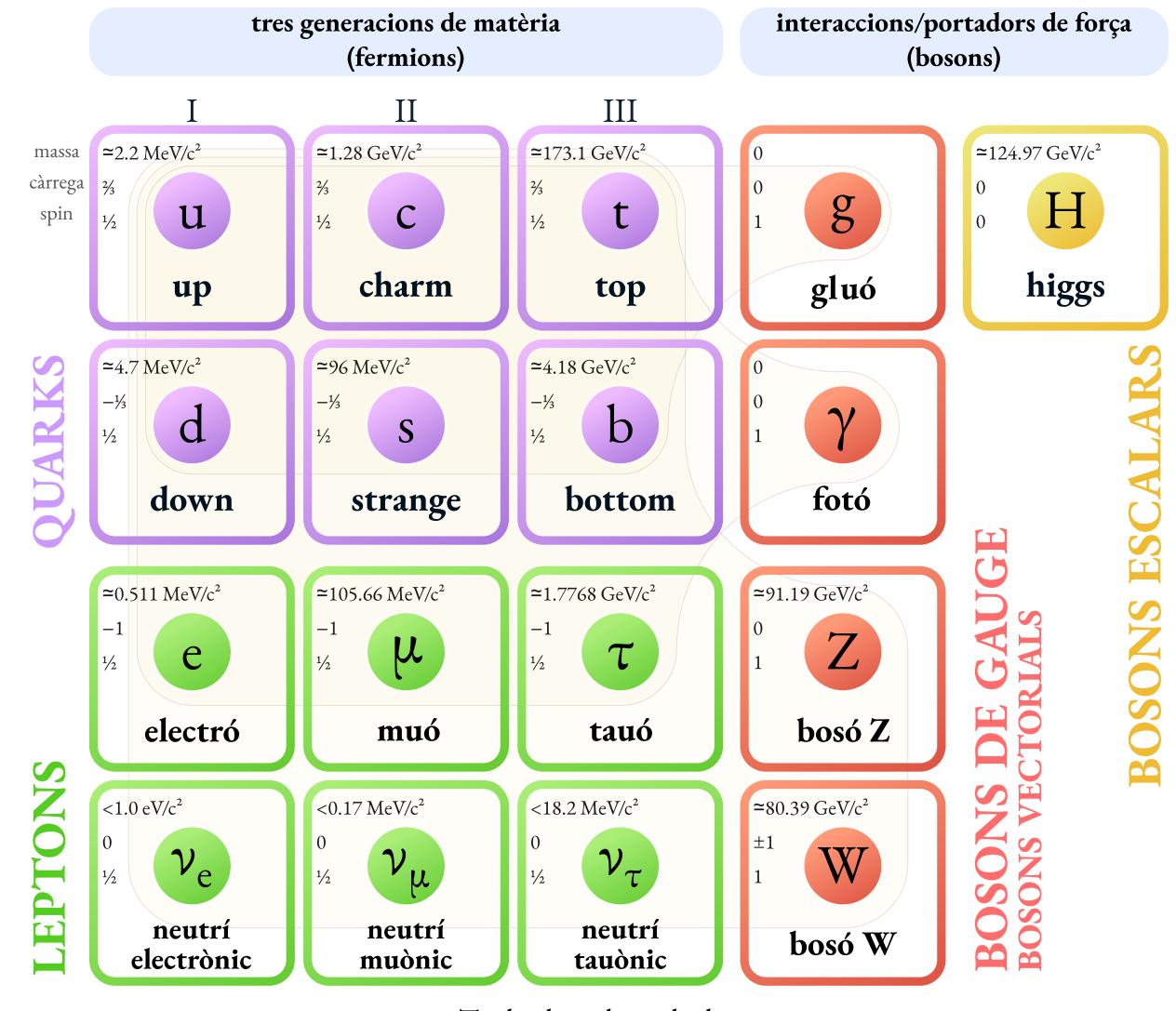
# Particules subatomiques

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	<b>Massa/</b> kg	Càrrega/C
Protó	$1.673 \times 10^{-27}$	$1.602 \times 10^{-19}$
Neutró	$1.675 \times 10^{-27}$	0
Electró	$9.109 \times 10^{-31}$	$-1.602 \times 10^{-1}$
$m_{ m proto}$	$m_{\rm neutró} \sim 20$	$000m_{ m electró}$
	$q_{\text{prot}\acute{o}} = -q_{\text{ele}}$	octró

#### Model estàndard

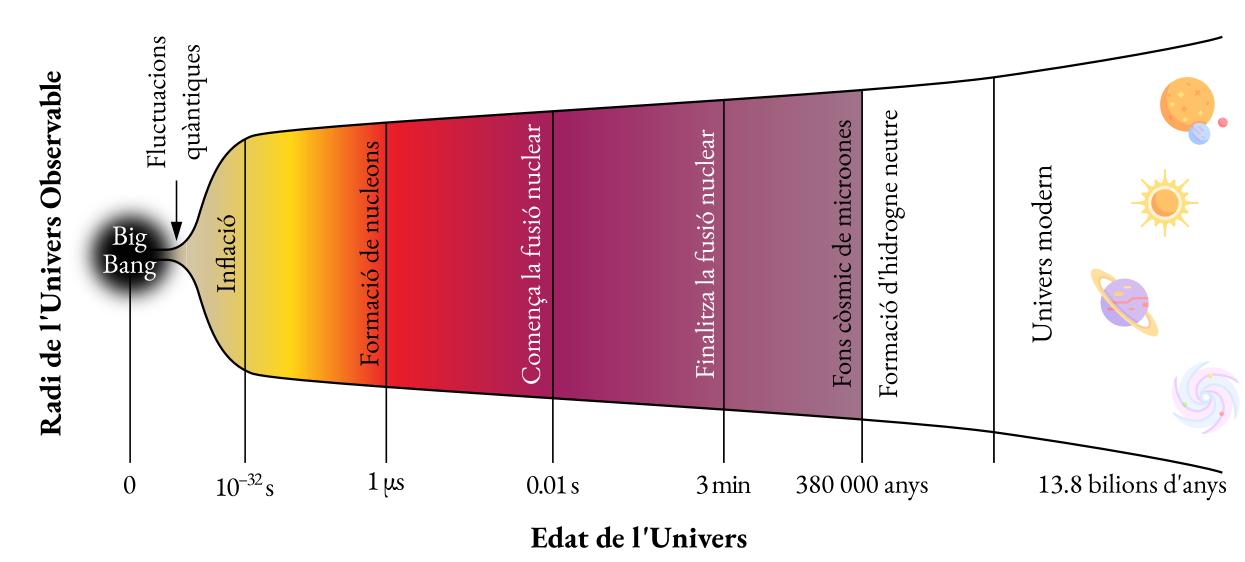
És la teoria que descriu tres de les quatre interaccions fonamentals de la natura conegudes (electromagnètica, nuclear forta i nuclear feble), a més de classificar totes les partícules elementals conegudes.



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/.