

Recorda que:

- Un **orbital** és la regió de l'espai al voltant del nucli de l'àtom que ocupa cada electró amb una energia característica.

Nombres quàntics

L'estat energètic d'un e⁻ queda determinat per quatre nombres quàntics.

- Nombre quàntic principal n:** designa el **nivell** d'energia i la **mida** de l'orbital (tots dos augmenten quan n augmenta). Pot prendre qualsevol valor enter positiu $n=1,2,3,\dots,7$
- Nombre quàntic secundari ℓ :** determina la **forma** de l'orbital i l'energia dins de cada nivell. Pren els valors enters de 0 a $n-1$. $\ell = 0$ correspon a un orbital s; $\ell = 1$ correspon a un orbital p; $\ell = 2$ correspon a un d; $\ell = 3$ correspon a un orbital f
- Nombre quàntic magnètic m_ℓ :** determina l'orientació de l'orbital a l'espai, o sigui, ens diu el nombre d'orbitals que hi ha de cada tipus. Pren els valors enters de $-\ell$ a $+\ell$.

Un orbital queda determinat pels tres nombres quàntics. Per determinar un e⁻ que es troba en un orbital, necessitem un altre nombre quàntic, el quart:

- Nombre quàntic d'espín m_s :** indica el sentit de rotació de cada e⁻. Té valors de $+1/2$ i $-1/2$. Dos e⁻ amb espins contraris s'anomenen **electrons desaparellats**.

La mecànica quàntica en els àtoms polieletrònics

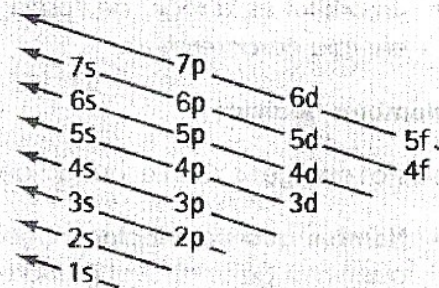
nivell (n)	subnivell (ℓ)	orbital (m_ℓ)	m_s	nº e ⁻ subnivell(n, ℓ, m_ℓ, m_s)	nº e ⁻ nivell ($2n^2$)
1	0 (1s)	0	$+1/2, -1/2$	2 (1,0,0,+1/2) 2 (1,0,0,-1/2)	2
2	0 (2s)	0	$+1/2, -1/2$	2 (2,0,0,+1/2)	8
	1 (2p)	-1, 0, +1 (2p _z 2p _x 2p _y)	$\pm 1/2$ per a cada valor de m_ℓ	6: (2,1,-1,+1/2) (2,1,0,+1/2) (2,1,+1,+1/2)	
3	0 (3s)	0	$+1/2, -1/2$	2 (3,0,0,+1/2)	18
	1 (3p)	-1, 0, +1 (3p _z 3p _x 3p _y)	$\pm 1/2$ per a cada valor de m_ℓ	6: (3,1,-1,+1/2) (3,1,0,+1/2) (3,1,+1,+1/2)	
	2 (3d)	-2, -1, 0, +1, +2 (d _{x-y}) (d _z) (d _{xy}) (d _{xz}) (d _{yz})	$\pm 1/2$ per a cada valor de m_ℓ	10 (3,2,-2,+1/2) (3,2,-1,+1/2) (3,2,0,+1/2) (3,2,+1,+1/2) (3,2,+2,+1/2)	

Configuracions electròniques

Indica com estan distribuïts als orbitals els e⁻ d'un àtom. Per obtenir-la, hem de tenir en compte que a cada orbital només hi caben dos e⁻ (amb espins oposats, P. exclusió Pauli).

Els orbitals es van ocupant de menys energia a més energia i, quan s'ocupen orbitals de la mateixa energia (per exemple, 2p_x, 2p_y, 2p_z), els e⁻ es col·loquen mantenint els espins desaparellats, sempre que sigui possible.

L'ordre en què s'omplen els orbitals s'obté amb el diagrama de Moeller. Alguns elements poden desviar-se d'aquesta regla per formar configuracions especialment estables.



- Hem vist que els e⁻ dels àtoms tenen diversos nivells d'energia. L'energia de l'electró només pot tenir uns valors permesos, que corresponen a nivells energètics que s'anomenen amb un nombre natural $n = 1, 2, 3, \dots$. El nivell d'energia més baix (**estat fonamental**) correspon a un àtom estable. Els altres estats energètics s'anomenen **estats excitats**. Un **estat prohibit** és aquell que no segueix les normes ($1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^6 4s^2$).
- La transició entre dos nivells d'energia es realitza per absorció o emissió d'un fotó. Si un e⁻ passa d'una òrbita a una altra de n més alt, absorbeix **energia**. Si passa a una òrbita de n més baix, emet energia.
- Es considera que una partícula material emet o absorbeix energia radiant de manera discontinua mitjançant **grànuls o corpuscles**.
- Cada un d'aquests corpuscles s'anomena **quàntum d'energia o fotó**.

2

Energia d'un fotó: $\varepsilon = h\nu$

Constant de Planck: $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$

Quantitat d'energia si tenim "n" fotons: $E = n\varepsilon = nh\nu = \frac{nhc}{\lambda}$

La taula periòdica

Conté tots els elements químics ordenats pel seu nombre atòmic Z , distribuïts en 7 períodes (files) i 18 grups (columnes). Els grups contenen elements amb propietats químiques similars, a causa de la semblança entre les seves configuracions electròniques.

El grup i el període d'un element el podem deduir de la seva configuració electrònica. El període l'indica el nivell n més alt que s'omple. El grup l'obtenim del nombre d'e⁻ que hi ha a l'últim nivell que s'omple.

Bloc d'elements de la taula periòdica

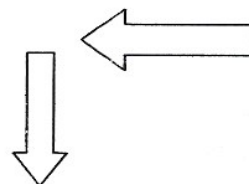
- **Elements representatius:** grups 1, 2 i els que van del 13 al 17. Tenen els e⁻ de l'últim nivell en orbitals s i p: $(ns^1, ns^2, ns^2 np^1, ns^2 np^2, \dots, ns^2 np^5 \text{ amb } n \geq 2)$. Per saber el grup: $(x+y)$ essent x i y: $ns^x np^y$
- **Elements de transició:** grups del 3 al 12. Tots els e⁻ de més energia en orbitals d del penúltim nivell energètic $(ns^2 (n-1)d^1, \dots, ns^2 (n-1)d^{10} \text{ amb } n \geq 4)$. Per saber el grup: $(x+y)$ essent x i y: $ns^x (n-1)d^y$.
- **Elements de transició interna o de doble transició:** són els lantànids i actínics. Tenen els e⁻ de més energia en orbitals f de l'antepenúltim nivell d'energia: $(ns^2 (n-1)d^1 (n-2)f^1, \dots, ns^2 (n-1)d^1 (n-2)f^{14} \text{ amb } n \geq 6)$.
- **Gasos nobles:** tenen 8 e⁻ a l'últim nivell $(ns^2 np^6, n \geq 2)$, excepte l'heli ($1s^2$).

Propietats periòdiques**Radi atòmic i volum atòmic**

El volum atòmic depèn del radi de l'àtom. La variació del radi per als elements representatius és la següent:

En un període, disminueix quan anem cap a la dreta (en augmentar la càrrega, el nucli atrau més els e⁻).

En un grup, augmenta quan anem cap avall (s'omplen nivells amb n més gran).

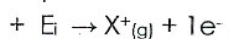


3

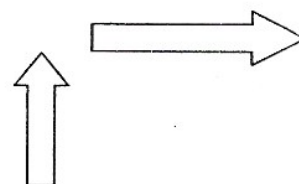
Energia d'ionització o potencial d'ionització EI

És l'energia necessària per arrencar un e⁻ d'un àtom en estat gasós.

Es pot mesurar en eV/àtom o kJ/mol ($1 \text{ eV} = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$). $X_{(g)}$



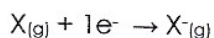
- En un període, augmenta cap a la dreta.
- En un grup, augmenta cap amunt.



Varia al revés del radi atòmic. Quan disminueix el radi i augmenta la càrrega del nucli, els e⁻ són atrets amb més intensitat i cal més energia per arrencar-los.

Afinitat electrònica o electroafinitat EA

És la variació d'energia que comporta el procés d'addició d'un e⁻ a un àtom en estat gasós. Es produeix la formació d'un anió en estat gasós.



$$\Delta E = E_{af} \text{ (en les mateixes unitats que } E_i)$$

Pot tenir valors positius o negatius. En valor absolut, varia de la mateixa manera que l' E_i . Els valors de les E_{af} dels halògens són alts i negatius, perquè en guanyar un e⁻ passen a una configuració d'un gas noble, i per tant, més estable.

Electronegativitat EN

Mesura la tendència d'un àtom a atreure els e^- quan està enllaçat a un àtom d'un altre element i forma part d'una molècula. Varia igual que la E_i .

Caràcter metàl·lic

Els elements no metàl·lics són molt electronegatius, tenen una E_i alta i tendeixen a formar anions. Els metalls són poc electronegatius, tenen una E_i baixa i tendeixen a formar cations.