

Bohr:

Bohr aplica noves idees sobre la quantització d'energia. Diu que l'energia de l'electró està **quantitzada**: L'electró ocupa unes posicions o estats *estacionaris* al voltant del nucli amb uns valors d'energia determinats. Hi ha diferents postulats:

- L'electró es mou al voltant del nucli en capes o òrbites circulars anomenades nivells energètics principals o **nivells quàntics principals**.
Mentre l'electró es mou en un mateix nivell energètic, **no absorbeix ni emet energia**: es diu que l'electró es troba en estat estacionari.
- L'energia total de l'electró no pot tenir valors qualsevol, sinó només certs valors. Això equival a dir que l'energia de l'electró dins de l'àtom està quantitzada.
A cada nivell energètic principal li correspon un nombre natural $n=1,2,3,\dots$ anomenat nombre quàntic principal. **El nivell més proper al nucli és el $n=1$, al qual correspon l'energia menor.**
- Quan l'electró absorbeix energia, "salta" a un nivell de més energia. Com que aquest estat excitat és inestable, hi roman un temps molt breu i torna a nivells energètics inferiors emetent energia radiant. El pas d'un electró d'un nivell a un altre d'energia s'anomena transició electrònica.

Elements químics i isòtops

Nombre atòmic, Z :

Nombre de protons del nucli. Càrrega positiva de l'àtom. p^+

Nombre màssic, A :

Suma de protons i neutrons. Nombre de nucleons del nucli. $p^+ + n$. $Z + n$

Isòtops:

Àtoms amb diferent nombre de neutrons. El nombre màssic difereix.

Nombre màssic
 $^{14}_7\text{N}$
Nombre atòmic

Nombre màssic
 $^{15}_7\text{N}$
Nombre atòmic

Isòtop del carboni	Nombre màssic	Nombre atòmic	Nombre de protons	Nombre de neutrons	Nombre d'electrons
$^{12}_6\text{C}$	12	6	6	6	6
$^{13}_6\text{C}$	13	6	6	7	6
$^{14}_6\text{C}$	14	6	6	8	6

Massa atòmica/pes atòmic

Massa mitjana d'un àtom d'un determinat element.

Es calcula multiplicant la massa isotòpica (nombre màssic) per abundància isotòpica **de cada isòtop**, llavors sumem tots els resultats de cada isòtop.

La teoria dels quanta

Orígens:

Maxwell proposa que la llum és una ona electromagnètica amb aquestes característiques:

- **Longitud d'ona, λ :** Distància entre crestes/valls (màxims d'ona). Metres
- **Amplitud, A :** Distància entre la cresta i el punt mig.
- **Freqüència, ν :** Nombre de cicles per unitats de temps. Hz
- **Període, T :** Temps invertit a efectuar una vibració completa. Segons

El període i la freqüència són inversos, per tant:

$$T = \frac{1}{\nu} \qquad \nu = \frac{1}{T}$$

La **velocitat**, la **longitud d'ona** i la **freqüència** es relacionen mitjançant:

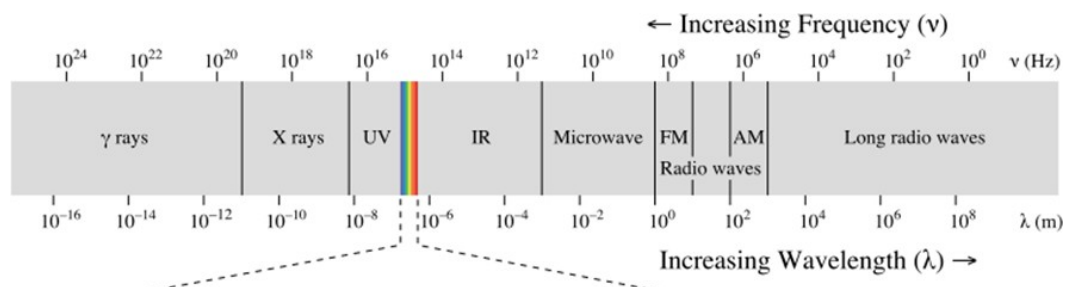
$$V = \lambda \cdot \nu$$

La **freqüència**, la **velocitat de la llum** i la **longitud d'ona** es relacionen mitjançant:

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

Espectre electromagnètic:

Format pel conjunt de totes les ones electromagnètiques ordenades per freqüència i longitud d'ona



Espectres atòmics d'emissió:

Un espectre d'emissió és la radiació emesa per un element determinat quan, en estat gasós, se li comunica prou energia. Un element emet sempre el mateix espectre, i aquest és únic per cada element.

La llum solar emet radiació en totes les freqüències, en canvi els elements només emeten en freqüències determinades (espectres discontinus)

Teoria dels quanta de Planck:

Planck diu que la matèria emet o absorbeix energia de manera discontinua en forma de paquets o quàntums d'energia (o fotons)

L'energia d'un quàntum (o fotó) es calcula:

$$E = h \cdot \nu$$

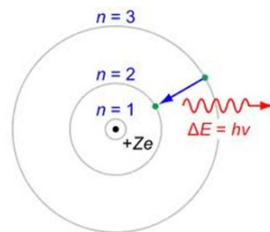
Constant de Planck: $6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

Efecte fotoelèctric:

En fer incidir una radiació electromagnètica sobre una superfície metàl·lica se'n desprenen electrons. Tots els metalls tenen una determinada freqüència que, quan superada, produeixen l'efecte fotoelèctric. S'utilitza la equació: $E = h \cdot \nu$.

Explicació de l'espectre d'emissió de l'hidrogen:

Si passem corrent en un tub que conté hidrogen en gas, els electrons de l'hidrogen absorbeixen energia, s'exciten i salten a nivells d'energia superiors momentàniament. Quan els electrons tornen a l'estat fundamental, emeten fotons.



Model mecanicoquàntic de l'àtom (teoria actual)

Es va observar que els nivells d'energia de Bohr es subdividien en subnivells. Les equacions del model mecanicoquàntic descriuen el **caràcter ondulatori** dels electrons, i la **impossibilitat de predir-ne les seves trajectòries** exactes.

Això estableix el concepte d'**orbital**:

La regió o volum de l'espai de l'àtom on la probabilitat de trobar l'electró amb una energia determinada és del 90%.

Nombres quàntics:

4 paràmetres per precisar l'estat energètic de l'electró:

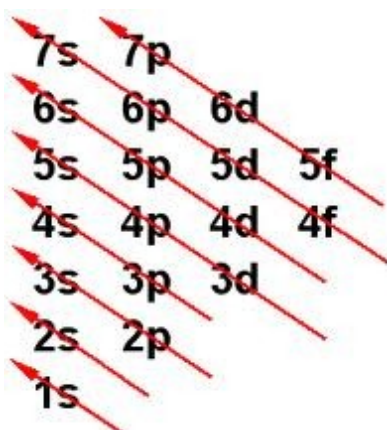
1. **Nombre quàntic principal, n :** Designa el nivell d'energia i la mida de l'orbital. Qualsevol nombre enter (1,2,3,4...)
2. **Nombre quàntic secundari, l :** Determina la forma de l'orbital. Pren els valors entre 0 i $n - 1$ (si $n=2 \rightarrow l=0$ o 1). Els valors 0,1,2,3 de l equivalen als orbitals s,p,d,f
3. **Nombre quàntic magnètic, m_l :** Determina la orientació de l'orbital. Pren els valors compresos entre $-l$ i $+l$ (si $l=2 \rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2$)
4. **Nombre quàntic de l'espín, m_s :** Propietats magnètiques de l'electró. Pren els valors $+\frac{1}{2}$ i $-\frac{1}{2}$

Configuracions electròniques:

Representació de la distribució dels electrons en els diferents orbitals dels àtoms

Hem de tenir en compte aquestes regles:

- **Principi d'exclusió de Pauli:** En un àtom no hi poden haver dos electrons amb els nombres quàntics iguals
- **Principi d'Aufbau:** Els orbitals s'omplen començant pel que té menys energia i seguint pels altres orbitals en ordre creixent d'energia
- **Regla de Hund:** Dos orbitals amb mateix n i l tenen mateixa energia. Per omplir-los primer es col·loca un electró en cada orbital i llavors es completen amb el segon



Classificació periòdica dels elements

Taula periòdica i estructura electrònica:

Les columnes són **grups**, i les files són **períodes**.

En comparar la configuració electrònica amb la seva posició a la taula periòdica, veiem que:

- Els elements **d'un mateix període** tenen el mateix nombre quàntic principal i aquest coincideix amb el nombre del període.
- Els elements **d'un mateix grup** presenten la mateixa estructura electrònica

Diagrama de la taula periòdica amb els blocs s, p, d i f colorats i etiquetats.

Columnes: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

Files: s¹ s², d¹ d² d³ d⁴ d⁵ d⁶ d⁷ d⁸ d⁹ d¹⁰, p¹ p² p³ p⁴ p⁵ p⁶, f¹ f² f³ f⁴ f⁵ f⁶ f⁷ f⁸ f⁹ f¹⁰ f¹¹ f¹² f¹³ f¹⁴

Legenda:

- Bloque "s" (violeta)
- Bloque "d" (groc)
- Bloque "p" (verd)
- Bloque "f" (blau)

Propietats periòdiques:

Abans de parlar de les propietats dels elements de la taula periòdica, parlarem del concepte de **càrrega nuclear efectiva**:

- És la força real d'atracció que realitzen els protons del nucli sobre un electró, en el nostre cas en particular ens fixarem en els electrons de l'última capa.

$$Z^* = Z - \sigma$$

nº de protons del

Apantallament: els electrons de les capes internes exerceixen una força de repulsió sobre els electrons de l'última capa.

Considerarem que els electrons de la mateixa capa pràcticament no s'apantallen entre si.

- La càrrega nuclear efectiva serà un concepte essencial per la discussió i comparació de diferents elements i les seves propietats.

- Recordem que en la comparació es sol comparar 2 elements del mateix període (electrons de l'última capa amb el mateix nombre quàntic principal) o bé 2 elements del mateix grup (mateix nombre d'electrons a l'última capa, diferent nombre quàntic principal)

Un altre concepte a tenir en compte quan es fan comparacions és el de l'**estabilitat** o de quines configuracions electròniques són més estables. Així doncs, recordem:

- La configuració més estable és la del gas noble (s^2p^6) i que també són estables s^2 , d^5 , d^{10} , p^3 (capa o semi-capa plena).

Tot això, és perquè els elements ens permeten comparar les seves propietats en funció del nombre d'electrons i la modificació del nombre d'electrons de l'última capa.

Propietats taula periòdica

1 Radi atòmic

$$V = \frac{4\pi r^3}{3}$$

Per tant, el radi atòmic és directament proporcional a la mida de l'àtom. Així doncs:

- En augmentar en el període, augmenta la càrrega nuclear efectiva, mantenint els electrons a la mateixa capa.
- El radi disminueix degut a la major força d'atracció que exerceix el nucli.
- En el cas dels elements del mateix grup, el radi augmentarà a mesura que baixem en el grup, ja que el afegir electrons estem afegint capes que cada cop es situaran més lluny del nucli.

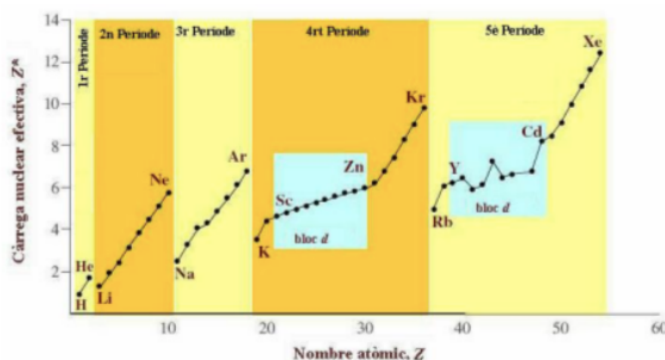


Figura 1.47. Càrrega nuclear efectiva en funció del nombre atòmic
Figura adaptada d'E. de Jesús. *Enlace Químico y Estructura de la Materia*. Universidad de Alcalá, 2003.

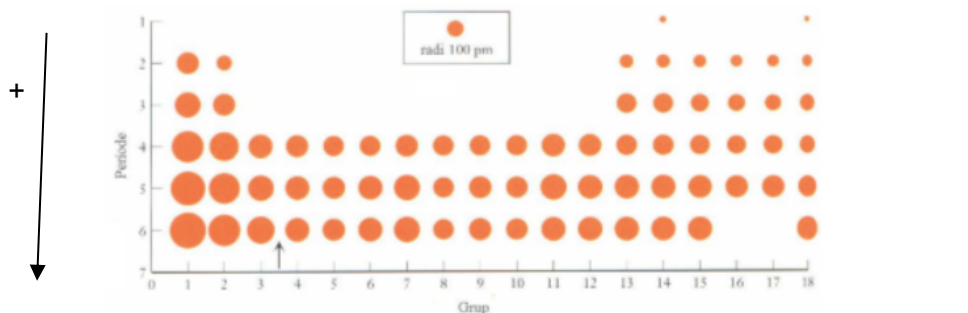
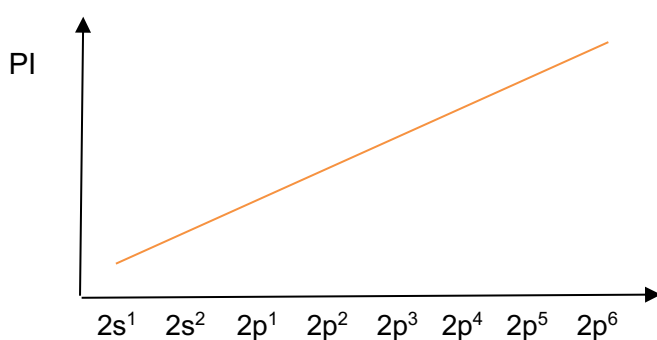


Figura 1.48. Radi atòmic al llarg de la taula periòdica
Figura adaptada de Química. *Un proyecto de la American Chemical Society*. Barcelona: Reverté, 2005.

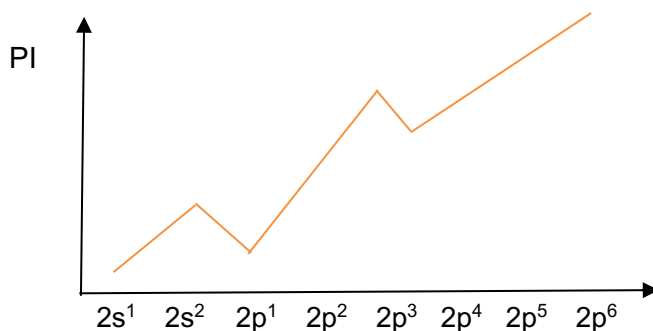
2 Potencial de ionització

És l'energia mínima necessària per extreure un electró de l'última capa. Per dir-ho diferent, és l'energia que hem de donar per vèncer la força d'atracció que exerceix el nucli sobre un electró, per tant, anirà lligat a la càrrega nuclear efectiva.

- En un període al augmentar augmenta Z^* i per tant, el potencial de ionització serà major.
- En 2 elements d'un mateix grup, la càrrega nuclear disminueix quan augmentant el nombre quàntic principal, degut en part, a l'apantallament.
- Excepció:** Aquí és on intervé l'estabilitat. Si ens fixem amb el què hem dit anteriorment pels elements del segon període.



Hauria de ser així



Realment és així.

Això és degut que els elements s^2 i p^3 són més estables que el següent element i per tant, necessitem més energia.

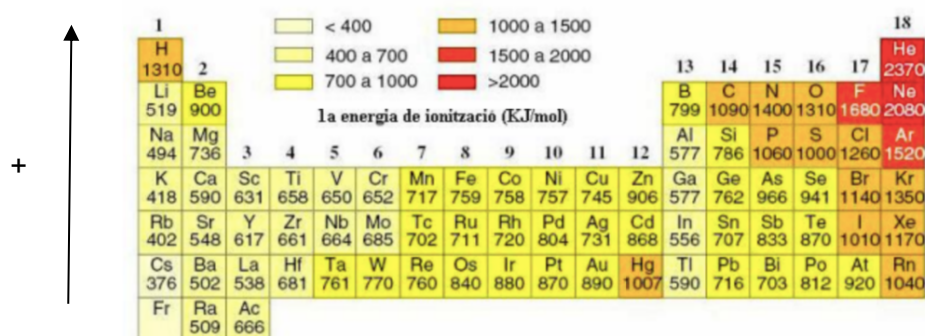


Figura 1.52. Primera energia d'ionització

Figura adaptada d'E. de Jesús. *Enlace Químico y Estructura de la Materia*. Universidad de Alcalá, 2003.

3 Electronegativitat

L'**electronegativitat** és la capacitat d'un àtom d'atraure un electró compartit amb un altre àtom.

- L'electronegativitat augmenta en avançar en un període, ja que cada vegada està més a prop de la configuració de gas noble, i com hem dit abans, és la configuració més estable.
- En dos elements d'un mateix grup, l'electronegativitat disminueix en baixar del grup, ja que guanya un electró i aquest al disposar-se molt més lluny del nucli, no hi ha tanta diferència d'estabilitat.

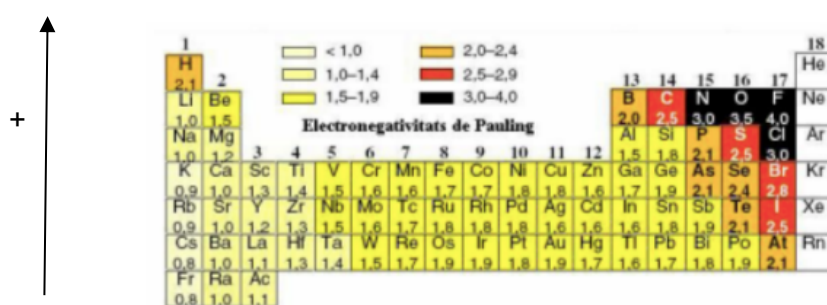


Figura 1.55. Electronegativitats de Pauling

Figura adaptada d'E. de Jesús. *Enlace Químico y Estructura de la Materia*. Universidad de Alcalá, 2003.

4 Afinitat electrònica

L'**afinitat electrònica** és l'energia que s'allibera quan un electró és captat del medi, per un element en estat gasós.

- L'afinitat electrònica augmenta en avançar en un període, ja que cada vegada està més a prop de la configuració de gas noble, i com hem dit abans, és la configuració més estable.
- En dos elements d'un mateix grup, l'afinitat electrònica disminueix en baixar del grup, ja que guanya un electró i aquest al disposar-se molt més lluny del nucli, no hi ha tanta diferència d'estabilitat.

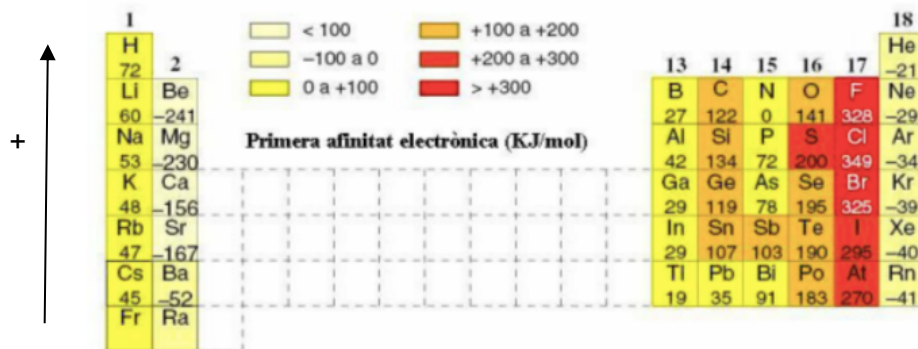


Figura 1.54. Primera afinitat electrònica

Figura adaptada d'E. de Jesús. *Enlace Químico y Estructura de la Materia*. Universidad de Alcalá, 2003.

Possible nombres d'oxidació

Per predir els possibles nombres d'estats d'oxidació, hem de tenir en compte varis factors:

1. Si es tracta d'un no-metall, que té una elevada electronegativitat. Hem de veure quants electrons li falten per arribar a la configuració de gas noble.
2. En el cas dels metalls, hem de veure quants electrons han de cedir per arribar a la configuració de gas noble.
3. En el cas dels elements del grup 13, 14 i 15 hem de veure quants electrons poden cedir per tenir una capa plena o semiplena.