

1 L'àtom segons Dalton

Àtom no divisible.

- Tota la matèria estaria formada en última instància per unes partícules indivisibles que anomenà àtoms.
- Un àtom és la part més petita de la matèria que conserva les propietats de la matèria.
- Els àtoms d'un mateix element són iguals (tenint en compte l'existència d'isotops).
- Els àtoms es combinen entre ells per donar lloc a compostos (molècules)

2 Experiències de Crookes

Va experimentar amb descàrregues elèctriques d'alt voltatge entre els extrems d'un tub que contenia gasos a baixes pressions. El resultat fou la conductivitat del gas en aquestes condicions i fenòmens de fluorescència.

2.1 Ratjs catòdics. Thompson

Els ratjs catòdics són de naturalesa negativa i comuns a tots els gasos amb els que experimenta Thompson. Les partícules que componen els ratjs reberen el nom d'electró. Thompson descobreix l'electró. Aquest experiment questiona que els àtoms siguin indivisibles.

2.2 Ratjs anòdics. Goldstein

El seu experiment és semblant al de Thompson però els ratjs venen del ànode. Descobreix els ratjs anòdics, que venen del ànode, amb la naturalesa positiva. Segons amb el gas que treballava obtenia diferents partícules. Les partícules + del ratjs eren diferents segons el gas emprat. Les més petites venien del hidrògen i les anomenà protons. Això retarda el 1^o model atòmic fins al 1911.

Experiment i Model atòmic de Rutherford (1911)

Les partícules alfa van travessar la làmina, van arribar a la pantalla, però la làmina no estava trencada. Després van situar una pantalla a la part del davant; algunes ni travessaven la làmina i eren refusades. Rutherford va formular el primer model atòmic. Va proposar el següent: l'àtom és pràcticament buit i en el centre (nucli) s'hi troba pràcticament tota la massa del àtom formada per protons (de signe +). A l'entorn del nucli (escorça), pràcticament buit, giren el e⁻. Les forces centrífugues del moviment de gir compensen les forces electroestàtiques d'atracció. Si al radi del nucli li dic 1 el radi del àtom li dic 10000 o 100000. Nucli: molt gran en massa però petit en volum. Escorça petit en massa però gran en volum.

1^o Crítica: si en el nucli només hi ha protons aquest es trencaria i el nucli és estable. Inestabilitat teòrica del nucli amb tants protons en tant poc volum.

2^o Crítica: els electrons, en perdre energia, caurien sobre el nucli i en canvi no és així.

3 Nombre atòmic (Z) i nombre màssic (A)

Chadwick descobreix el neutró: aquestes partícules es troben en el nucli acompanyant els protons i disminuint les forces repulsives entre les càrregues +. La massa del neutró és aprox. Igual a la del protó i unes 2000 vegades més gran que la del e⁻. Z ve donat pel n^o de protons de l'àtom mentre que A s'obté com a suma dels protons i neutrons del àtom. Cada Z dona lloc a un element químic.

Isòtops: àtoms d'igual nombre atòmic i diferent nombre màssic. Té igual n° de protons i diferent n° de neutrons.

Element Químic: barreja d'isòtops. La massa atòmica dels elements és un nombre fraccionari degut a que és una mescla d'isòtops.

Unitat de massa atòmica: l'element patró és el carboni-12. El valor és 1/12 de l'àtom de carboni-12. Per trobar un valor dividim la massa del isòtop per la 12 part de la massa de la substància patró; així obtenim la massa del isòtop en U.M.A.. A partir de la massa dels isòtops, i tenint en compte la seva proporció en l'element químic, obtenim la massa del element químic. Al fer la inversa del n° d'avogadro s'obté el valor d'U.M.A. en grams i és $1,66 \cdot 10^{-24}$.

4 Equació d'Einstein

La conversió de massa en energia és visible en les reaccions nuclears, es a dir, les que modifiquen el nucli atòmic.

4.1 *Radioactivitat*:

És la transformació del nucli del àtom de manera espontània (radioactivitat natural). L'aparició d'un e^- en el nucli atòmic ve donada per la conversió d'un neutró en un protó, que roman en el nucli, i d'un e^- , que s'allibera. Per tant, el nucli obtingut pertany al element següent de la taula periòdica. Molts elements radioactius encadenen una sèrie de reaccions mitjançant la emissió de partícules α i β . Així, per exemple, l'urani 238 realitza una cadena de reaccions per tal d'arribar al plom 206.

Isòbars: els àtoms, el nucli dels quals, emet una partícula β , constitueixen exemples d'isòbars pq tenen la mateixa massa atòmica però pertanyen a elements químics diferents.

Període de Semidesintegració: és el temps que tarda la massa d'un isòtop a reduir-se a la meitat. Aquests valors varien segons la substància estudiada.

Reaccions nuclears provocades: La immensa majoria de nuclis atòmics són estables però alguns d'ells poden desestabilitzar-se mitjançant el bombardeig de partícules de gran velocitat. El 1932 Chadwick va descobrir el neutró amb una d'aquestes reaccions.

Radioactivitat artificial: Algunes de les reaccions nuclears provocades donen isòtops estables. Quan en un bombardeig de partícules sobre els nuclis s'obtenen isòtops radioactius ens trobem davant d'una radiació artificial. Aquest és el cas del fòsfor-30. Així es va descobrir el positró (és l'antipartícula del electró). Si un positró i un electró es troben s'aniquilen mutuament i s'obté energia. S'han trobat antipartícules dels neutrons i dels protons però com que són antipartícules es troben ràpidament amb un altre neutró o un altre protó i només deixen un rastre energètic.

5 La fissió nuclear:

Consisteix en que un nucli pesant es trenqui en dos o tres i alliberi una gran quantitat d'energia. És una energia molt gran ja que es produeix al destruir la massa d'un nucli. Aquesta reacció pot donar un procés en cadena. Per fer la reacció en cadena cal frenar al neutrons ràpids i així iniciar noves reaccions. Una reacció controlada s'obté en un reactor situat en una planta nuclear. La fissió nuclear es pot donar en cadena, sempre que s'aconsegueixi frenar el neutrons ràpids. En els reactors nuclears es controlen aquestes reaccions i s'obté energia en disposició per ser transformada en altres tipus d'energia: l'elèctrica.

6 La fusió nuclear:

És la inversa de la fisió nuclear, i extracta de l'unió de nuclis petits per la formació de nuclis grans. L'únic cas que s'ha fet fins ara és el d'isòtops d'hidrogen que es combinen per donar isòtops d'heli. Aquesta reacció es dona a partir de temperatures de 105 °C, temperatura a la qual la matèria es troba en forma de nuclie de àtoms i e⁻ (estat de plasma). Abanç però, a 5000 °C, les molècules gasoses s'han descomposat en àtoms que després donen el plasma. Per fer la fisió nuclear és necessita molta energia i per tant, primer, es fa una fisió nuclear. Per realitzar la fisió nuclear en un laboratori es fan servir imans. S'ha aconseguit crear la bomba d'hidrogen (energia de fisió no controlada).

TEMA 2: ESPECTRES ATÒMICS

1 Radiació electromagnètica (rem) i espectre

Les radiacions suposen la propagació de l'energia (energia radiant) sense que hi hagi transport de matèria. En el cas de la REM les ones tenen un doble caràcter elèctric i magnètic i biren en plans perpendiculars. Totes les REM tenen en comú la seva velocitat $v = 3 \cdot 10^8$ m/s

Les ones venen caracteritzades per la freqüència (distància entre dos punts consecutius en la mateixa fase) y la longitud d'ona (número de cicles efectuats per espai de temps).

2 Espectre electromagnètic

És la sensibilització de l'energia d'un objecte o d'una radiació. El el cas de la REM anem des del cas de la radio i TV (frec. min.) fins a les radiacions X (frec. max.), tot passant per la llum blanca.

En el cas de la llum blanca a través d'un prisme òptic obtenim la descomposició en els colors de l'arc de st. Martí.

Els espectres poden ser continus (no hi ha separació en colors) o bé discontinus (radiació de salt. Gas incandescent a baixa pressió dona lloc a una serie de bandes brillants i aïllades).

3 Emisió o absorció

Els espectres també es poden classificar entre els d'emisió i els de absorció.

4 Espectre atòmic

En general els àtoms són estables i no emeten energia; per tal d'obtenir l'espectre d'un àtom cal excitar-lo de manera que els e⁻ que es troben en les orbites interiors passin a orbites exteriors (+ energia). Quan cesa l'energia els e⁻ tornen a la posició inicial i emeten energia radiant. L'alliberació d'energia ens mostrarà els espectres atòmics.

5 Evolució sobre l'energia

Planch anuncia que l'energia s'emetia o s'absorbia com a multiple d'una unitat elemental que s'anomena quàntum. L'energia d'un quàntum s'obté multiplicant la freqüència de la radiació per la constant de Planch.

6 Model atòmic de Rutherford-Bohr

Bohr va estudiar els espectres atòmics dels quals va obtenir un resultat excelent en el cas de l'hidrogen; utilitzant l'espectrograf va obtenir un espectrograma amb 7 bandes clarament delimitades.

Cadascuna de les 7 bandes és interpretada per Bohr com un nivell energètic, es desidna per d i és el que

coneixem com a nombre quàntic principal. La primera filera de la taula periòdica correspon a 1 nombre quàntic principal. Els 7 nivells d'energia estan representats en la taula periòdica en els 7 períodes d'aquesta. Per tant el períodes de la taula donen lloc a les capes electròniques.

Bohr enuncià l'existència de 7 orbitals estacionaris en els quals els e^- no emetien energia radial, Estaba justificant l'estabilitat de l'escorça ja que els e^- no perden energia i no cauen en el nucli. Eren òrbites de tipus circular. Aquesta formulació donava estabilitat a l'escorça atòmica i reafirmava el model planetari.

TEMA 3: ESTRUCTURA ATÒMICA

1 Ampliació de la teoria de Bohr-Somefield

En la mesura que la tècnica dels aparells evoluciona s'observà que les 7 bandes podien subdividir-se. Així donç, parlaren de subnivells d'energia i orbitals que podrien ser elíptics. Somefield elaborà el 2º nombre quàntic (l) anomenat azimutal i que es troba relacionat amb el 1º nombre quàntic per la següent fórmula $l=0,1,2,...,n-1$. El descobriment de l dona lloc a l'idea d'orbital que configura un segon model atòmic basat en la mecànica quàntica.

2 Orbital

és la zona de l'espai on és més probable trobar un e^- . El l ens indica el tipus d'orbital. $L=0$ orbital esfèric o s , $l=1$ orbital helicoidal o p , per $l=2$ tenim 5 orbitals d , $l=3$ tenim 7 orbitals f .

Els orbitals poden estar ocupats, semioocupats o buits. La situació dels elements en la taula periòdica ens indica quin és l'últim orbital que està ple d' e^- .

3º Nombre quàntic m (magnètic)

L'electró quan gira al voltant del nucli genera un camp magnètic i les diferents possibilitats d'orientar-se l'orbital en aquest camp dona lloc als diferents valors de m . Els valors de m depenen de l i van de $-l$ fins a l passant pel 0.

4º Nombre quàntic s (spin)

Neix l'espín que es justifica per un segon camp magnètic creat per la rotació del e^- sobre sí mateix.

Quan l' e^- gira sobre sí mateix en el mateix sentit que ho fa l'entorn del nucli té un espín paral·lel i a s li fem correspondre el valor de $+1/2$. Si gira en sentit contrari té l'espín antiparal·lel i valor $-1/2$.

5 Principis de l'Aufbau

- *Regla de Hund*

Els e^- dins d'un mateix tipus d'orbital es desaparellen amb la tendència de tenir els espins paral·lels.

- *Regla de l'exclusió de Pauli*

Dins d'un mateix àtom no poden haver-hi dos e^- amb els 4 nombres quàntics iguals ja que estarien situats en el mateix lloc.

- *Regla de la mínima energia*

Els e⁻ dins d'un àtom tendeixen a ocupar les posicions d'energia més petites, es a dir, situar-se en els orbitals propers al nucli.

La regla nemotècnica de la diagonal descendent ens indica l'ordre energètic dels orbitals.

6 Configuracions electròniques

Les configuracions electròniques dels àtoms i els ions ens indiquen com els e⁻ omplen ordenadament els orbitals segons les regles del Aufbau.

6.1 L'orbital híbrid

L'electró del orbital 2s pot salvar la barrera energètica i anar al 2p; tindrem 4 orbitals semi-ocupats i quedaria explicada la tetravalència del carboni. Això donaria lloc a tres valències iguals i a una de diferent cosa que no es compleix a la realitat. Formació del orbital híbrid sp³. Aquest conté un 75% p i un 25% s. La seva forma és entre esfèric i helicoidal. Els quatre orbitals s'orienten de la forma més regular possible.

Els solapaments frontals entre els orbitals donen lloc als enllaços covalents del tipus sigma.

L'orbital híbrid sp² també existeix (ex: l'etè) i està format per un 33,3% s i un 66,6% p. És més arrodonit. Els tres orbitals híbrids sp² s'orienten en un pla (120°) mentre que l'orbital p serà perpendicular.

Els orbitals p dels dos àtoms de carboni es solapen lateralment donant lloc a un enllaç pi de naturalesa + i més feble que el sigma.

Les insaturacions són enllaços laterals que són propensos a ser trencats en algunes reaccions degut a que són més dèbils.

L'orbital híbrid sp és més arrodonit que sp² i té el 50% de s i el 50% de p. La base de la molècula és lineal i cada carboni tindrà dos orbitals p col·locats perpendicularment a la base de la molècula.

TEMA 4: SISTEMS PERIÒDIC I ENLLAÇ QUÍMIC

1 Classificació dels elements segons Mendeleiev

Mendeleiev ordenà els elements químics en una taula que recollia grups i períodes segons la massa creixent dels elements.

Els elements d'un mateix grup compleixen propietats físico-químiques semblants i per tant les propietats es repeteixen periòdicament.

La taula actual incorpora en el centre els elements de transició a diferència de la de Mendeleiev que incorporava els elements de transició com un subgrup.

El volum atòmic augmenta al llarg d'un grup en la taula periòdica però disminueix dins del propi període de la taula. Dins d'un mateix grup els àtoms tenen cada vegada 1 capa + d'e⁻ i per tant queda justificat l'augment de volum. En canvi, en un mateix període, en augmentar el nombre d'e⁻ i protons, la càrrega augmenta i per tant les F electroestàtiques són més grans; així el volum va disminuint molt gradualment.

2Potencial d'ionització (pi) i afinitat electrònica (ae): electronegativitat (E)

Pi: és l'energia que cal donar a un àtom per tal que perdi un e⁻. Augmenta en la taula de baix a dalt i

d'esquerra a dreta. Això és per l'efecte d'aparellament que les capes plenes d'e⁻ exerceixen entre els nuclis i el e⁻ de valència. També és per l'augment de densitat que dificulta cedir e⁻.

Ae: tendència d'un element a captar e⁻. És sempre exotèrmic i augmenta en la taula igual que el pi.

La mitjana aritmètica entre pi i ae és la E i augmenta igual que pi.

3 Enllaç químic

Els àtoms es troben, a la natura, units formant compostos. Aquests compostos poden ser moleculars, atòmics o iònics. Els principals són: metàl·lic, iònic, covalent.

3.1 Enllaç iònic

Les substàncies són sals o òxids metàl·lics. La seva formació es dona per cesió guany d'e⁻ (metàl·lic cedeix i sal guanya). Cada ió s'envolta de 6 ions de signe contrari formant una xarxa cristal·lina que es manté unida per les forces electroestàtiques. Les substàncies iòniques són sòlids amb punts de fusió i ebullició alts que condueixen el corrent elèctric en estat de fusió o bé en dissolució. Són solubles en dissolvents polars (aigua).

Ex: NaCl

3.2 Enllaç metàl·lic

És l'enllaç propi dels metalls i aliatges. Les substàncies metal·liques presenten xarxes cristal·lines tridimensionals als nusos de les quals estan ocupats per cations d'aquests metalls, mentre que els e⁻ es mouen lliurement al exterior de la xarxa (mar electrònica). Les substàncies metal·liques són sòlids amb punts de fusió i ebullició alts que condueixen el corrent i el calor degut a la mar electrònica. Solubles en els àcids i insolubles en dissolvents apolars o en l'aigua.

3.3 Enllaç covalent

Es dona per compartició d'e⁻ que normalment té lloc per solapament d'orbitals semioocupats. És el propi d'elements no-metal·lics. Per tal de simplificar, considerem el segment modul en la qual no es diferencia el tipus d'orbital però sí es té en compte els e⁻ de la darrera capa dels àtoms. Observem que tant els àtoms d'H com els de Cl en les molècules tenen estructura de gas noble. Això és la regla del octet de Lewis. En el cas de que les molècules estiguin formades per tres àtoms diferents, col·locarem el no-metall al centre, l'oxigen al entorn i l'hidrogen unit al oxigen.

3.4 Enllaç covalent datiu

Els dos e⁻ compartits procedeixen d'un mateix àtom, es a dir, un solapament entre un orbital ple i un de buit. En la representació de les molècules només fem servir aquest enllaç quan hem esgotat totes les altres possibilitats. De totes maneres hi ha alguns compostos que no queden justificats per la regla del octet de Lewis tot i la seva estabilitat. **Ex:** PCl₅