

# TEORIES ATÒMIQUES

Al final del segle V aC va sorgir a l'antiga Grècia un moviment conegut com a **escola atomista** o **escola pluralista** l'objectiu del qual fou contradir l'**escola monista**. Els representants principals de l'escola pluralista (Leucip, Anaxàgores i Dèmocrit) entenien la matèria com a plural, és a dir, formada per diverses substàncies, mentre que els de l'escola monista (el principal fou Tales), l'entenien com quelcom format per una sola substància.

- **Leucip** és considerat el mestre de Dèmocrit.
- **Anaxàgores** és citat com el precursor de Dèmocrit per la **teoria de les homeomeries**, que diu:
  - ✓ Els cossos estan constituïts per *homeomeries* (àtoms) de diverses classes.
  - ✓ Un cos es diferencia d'un altre per la quantitat de *partícules homeomèriques* (àtoms) que conté.
  - ✓ La intel·ligència ordenadora fa que les homeomeries s'agrupin per donar lloc a tipus de cossos diversos.
- **Dèmocrit** ha passat a la història de la ciència i la filosofia gràcies a la **introducció de la idea d'àtom**, un terme que en grec significa 'indivisible'. Els **principis en que es basa la seva teoria atòmica** són els següents:
  - ✓ Els àtoms es mouen en el buit i l'atzar provoca un remolí que fa que xoquin entre ells. Segons els xocs es formen diferents cossos.
  - ✓ Els cossos es diferencien per la forma, la posició i la mida dels àtoms que els constitueixen.  
*Ex.* Els àtoms d'aigua són suaus i rodons; els àtoms de foc, punxeguts . . .

Aquesta teoria, tal i com podem observar, no inclou cap connotació divina i per aquesta raó, és a dir, el fet d'estar més d'acord amb el vessant científic, **és inclosa dins el grup de teories mecanicistes**.

Durant molts segles, la teoria atòmica no va ser acceptada i va caure en l'oblit fins que la idea d'àtom esdevingué imprescindible, el segle XVIII, per explicar la ciència moderna. Isaac Newton ja va fer les primeres propostes però fou **John Dalton** qui va proposar, al principi del segle XIX, una teoria atòmica basada en les lleis fonamentals de la química que en aquell moment es coneixien:

1. *Llei de conservació de la massa.*
2. *Llei de les proporcions definides o llei de Proust.*
3. *Llei de les proporcions recíproques o llei de Richter.*
4. *Llei de les proporcions múltiples o llei de Dalton.*

Els **postulats de la teoria atòmica de Dalton** són:

- ✓ Els elements que constitueixen la matèria estan formats per partícules indivisibles i indestructibles anomenades àtoms.
- ✓ Els àtoms d'un element determinat tenen les mateixes propietats i la mateixa massa.
- ✓ Els àtoms de diferents elements no comparteixen propietats i tenen masses diferents.
- ✓ Els compostos es formen per la unió d'àtoms d'elements en una relació constant i senzilla de nombres enters.
- ✓ La relació fixa d'àtoms que formen un compost fa que aquest tingui unes propietats característiques i que la massa de combinació atòmica del compost sigui constant.

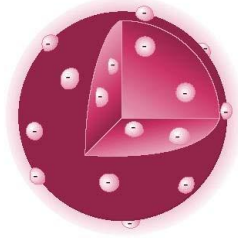
Al final del segle XIX la idea de l'existència de l'àtom era generalitzada entre la comunitat científica però encara no era del tot acceptada. Els treballs d'investigació al final del segle XIX i l'evolució científica de principis del segle XX van facilitar l'acceptació del fet que la matèria estigués formada d'àtoms.

# MODELS ATÒMICS

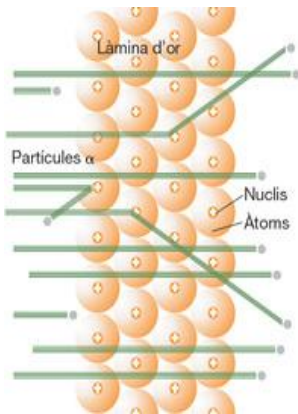
Després de que Dalton recuperés la idea d'àtom, molts científics van començar a imaginar com estaria format un àtom i començaren a proposar models a partir de les dades recollides de forma experimental. Els models atòmics més remarcables des que va iniciar a fer-se recerca al voltant del tema són, de més primitiu a més actual, els següents:

## 1. Model de Kelvin (1902) i model de Thomson (1903)

Tots dos imaginaven l'àtom com una esfera de càrrega positiva amb electrons incrustats com si fossin llavors d'una síndria.

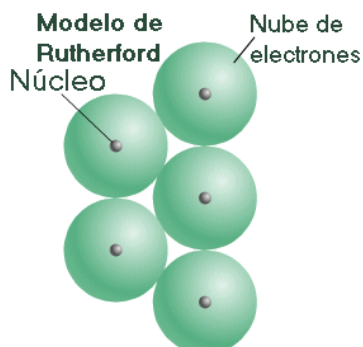


## 2. Model de Rutherford (1911)



Rutherford formava, a Manchester, un equip d'investigació integrat per un parell d'investigadors més que es dedicava a experimentar la dispersió de partícules alfa (nuclis d'heli de càrrega positiva) en bombardejar làmines d'or molt fines. La majoria de partícules travessaven el metall sense patir cap desviació en la trajectòria rectilínia però d'altres, modificaven la seva trajectòria. Com que els models De Kelvin i Thomson no aconseguien explicar aquest fenomen, Rutherford en proposà un de nou que es resum en els punts següents:

- ✓ La massa dels àtoms està pràcticament concentrada en el nucli.
- ✓ L'àtom té un nucli carregat positivament.
- ✓ Els electrons circulen en òrbites circulars al voltant del nucli.
- ✓ La major part de l'àtom és un gran espai buit.



**El model de Rutherford no podia explicar alguns dels esdeveniments que van descobrir-se poc després:**

- Segons la teoria electromagnètica, quan una partícula carregada elèctricament es mou, emet una quantitat determinada d'energia. **Si un electró girés al voltant del nucli aniria perdent energia i acabaria precipitant-se cap al nucli de l'àtom.**
- **Els diferents espectres d'emissió i d'absorció dels àtoms són discontinus.** La mecànica clàssica no pot explicar la discontinuïtat de l'energia de l'electró en el seu moviment podria tenir qualsevol valor i hi hauria una emissió contínua d'energia.

## 3. Model de Bohr (1914)

El model de Rutherford no aconseguia fonamentar les dades que s'estaven obtenint experimentalment i Bohr, amb sols 28 anys, va haver d'establir un nou model per a l'àtom d'hidrogen basant en dues consideracions prèvies i tres postulats no demostrables referits exclusivament a l'electró.

### CONSIDERACIONS PRÈVIES

- ✓ El nucli atòmic és molt petit.
- ✓ El nucli de l'àtom està carregat de forma positiva.
- ✓ El nucli atòmic concentra gairebé la totalitat de la massa de l'àtom.

**POSTULATS**

Primer postulat

- ✓ L'electró gira al voltant del nucli en òrbites circulars ben definides sense emetre ni absorbir energia.
- ✓ La velocitat de l'electró no varia.
- ✓ L'electró no es precipita sobre el nucli.
- ✓ L'electró té un radi constant.

Segon postulat

- ✓ Els valors de l'energia dels electrons estan quantitzats ja que només són permeses per a l'electró les òrbites circulars l'energia de les quals té uns valors determinats.
- ✓ No hi poden haver òrbites amb valors d'energia intermedis entre les permeses per l'electró.
- ✓ L'electró té una energia determinada i diferent en cada òrbita.
- ✓ L'estat de mínima energia (**ESTAT FONAMENAL**) de l'àtom d'hidrogen correspon a l'electró situat en la primera òrbita.
- ✓ L'electró es troba en **ESTAT EXCITAT** quan absorbeixi energia i passi a una òrbita més allunyada del nucli.
- ✓ Com més distanciades estiguin del nucli, menys separació hi haurà entre òrbita i òrbita.



**IMPORTANT !**

Designem qualsevol òrbita permesa per a situar l'electró amb la lletra **n** i un nombre enter al costat que designi la seva posició ( $n = 1, n = 2, n = 3 \dots n = \infty$ ). Aquestes òrbites també poden conèixer-se com **nivells d'energia**.

- El nivell 1 ( $n=1$ ) s'indica amb la K.
- El nivell 2 ( $n=2$ ) s'indica amb la L.
- El nivell 3 ( $n=3$ ) s'indica amb la M.
- El nivell 4 ( $n=4$ ) s'indica amb la N.

Tercer postulat

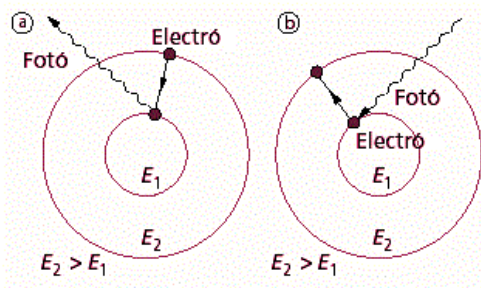
- ✓ El pas d'un electró d'una òrbita a una altra provoca emissió o absorció d'energia d'acord amb la diferència entre els dos nivells energètics:

- Perquè l'electró pugui passar d'una òrbita inferior a una de superior, cal que absorbeixi l'energia en forma de radiació electromagnètica (per un fotó).

$$\Delta E = \mathcal{E} = h \cdot \nu = h \cdot f \quad (\text{equació de Plank})$$

← Energia emesa per un fotó      Constant de Plank

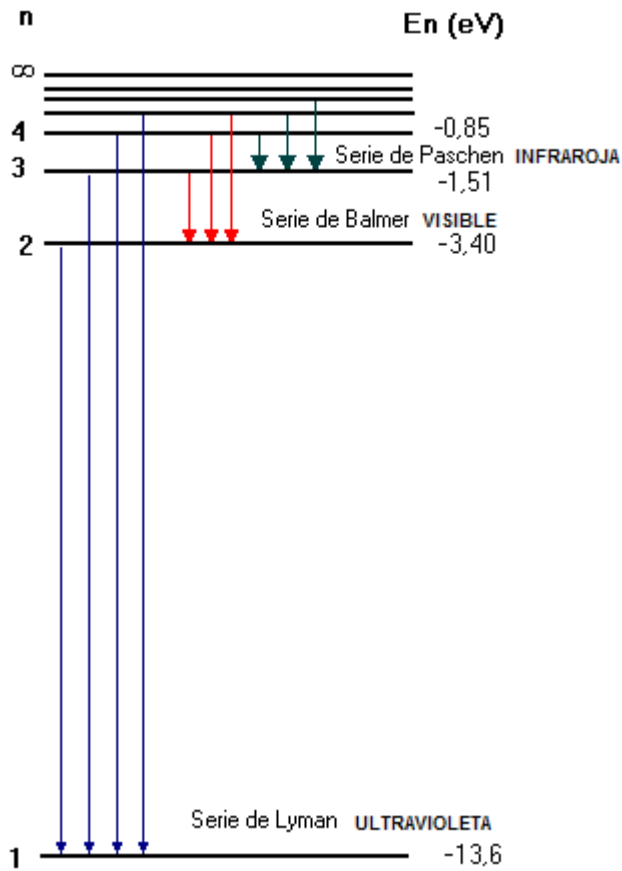
- Perquè l'electró passi d'una òrbita superior a una d'inferior ha d'emetre energia en forma de radiació electromagnètica.



El model de Bohr és capaç d'interpretar correctament l'espectre d'emissió de l'hidrogen. (Les línies d'espectre estan relacionades amb els canvis d'energia de l'electró en passar d'una òrbita a una altra de menys energia en àtoms excitats prèviament)

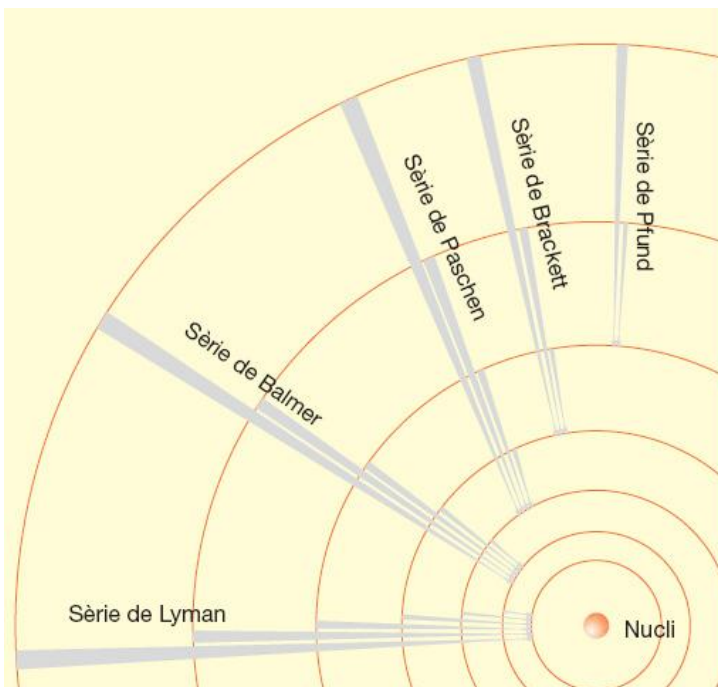
L'energia rebuda perquè l'electró passi d'un nivell a un altre serà equivalent a l'energia emesa per aqueta partícula subatòmica en tornar a la seva posició inicial.

El model de Bohr és capaç d'interpretar correctament l'espectre d'emissió de l'hidrogen, que està relacionat amb els canvis d'energia de l'electró en passar d'una òrbita a una altra de menys energia en àtoms excitats prèviament. No gaire després de l'exposició pública d'aquest model, van aparèixer espectrògrafs de més resolució. **El model de Bohr va explicar les sèries espectrals següents:**



**SÈRIES ESPECTRALS EXPLICADES PEL MODEL DE BOHR**

Totes aquestes sèries espectrals expliquen l'emissió energètica que els electrons de l'hidrogen efectuen al passar d'un nivell energètic més excitat a un altre de menys. La única que es tradueix com a llum visible per als nostres ulls és la de Balmer, que inclou tots els electrons de decauen fins a la segona òrbita. Les demès sèries, tal i com podem veure als esquemes, capten la caiguda energètica dels electrons d'hidrogen a nivells més elevats que n=2 o inferiors a aquest (n=1).



### 3. Model quàntic o d'orbitals (MODEL ACTUAL)

El model de Bohr barrejava la mecànica clàssica (*teoria general del moviment en sistemes macroscòpics i velocitats petites comparades a la de la llum*) amb la nova mecànica quàntica (*teoria general sobre el comportament de la matèria en els sistemes microscòpics*).

**Broglie** va inaugurar el camí cap al model quàntic actual formulant la hipòtesi següent:

- ✓ *Qualsevol partícula en moviment té una ona associada, la longitud d'ona de la qual està relacionada amb la massa i la velocitat de la partícula.*

Més endavant, **Heisenberg** va elaborar un model matemàtic per completar i millorar el model de Bohr. El punt més sorprenent fou, segurament, el **principi d'incertesa**, el qual assegura la impossibilitat de conèixer amb exactitud la posició i la velocitat dels electrons d'un àtom a la vegada.

En determinar la posició de l'electró en modifiquem la velocitat en una quantitat determinada i desconeguda. Donat que la determinació exacta de posició i la velocitat d'un electró és imprescindible per poder descriure la seva trajectòria, el principi d'incertesa afirma, doncs, que no és possible arribar a conèixer-la.

Observar un sistema és alterar-lo. Això ens porta a un món de probabilitats.

Acceptant aquest principi, el model de Bohr deixa de ser vàlid.

El científics, però, continuaven amb l'afany de determinar la posició i la velocitat de l'electró per determinar la seva trajectòria donat que, aquesta, els hi donaria informació sobre el lloc on el podrien trobar en un temps futur.

**Schrödinger** va trobar una equació matemàtica, basant-se en la hipòtesi de Broglie sobre l'electró i la consideració d'aquest com una ona, per explicar allò que Heisenberg tractava d'inconcebible. Aquesta equació (**equació d'ona o funció d'ona**) és una mena de carnet d'identitat quàntic de l'electró, incorpora tot el que se sap i tots els seus moviments i posicions possibles. Cada funció d'ona està associada a un estat energètic de l'electró i, a més, l'energia de l'electró de l'àtom d'hidrogen no pot prendre el valor que li vingui de gust sinó que està quantitzada (*tal i com afirmava Bohr en el seu model atòmic*). Interpretant l'equació de Schrödinger arribem a la conclusió que hem de parlar de zones de probabilitat de trobar l'electró o no de la certesa de trobar-lo. Es pot determinar on hi ha una densitat de càrrega més gran en el torn del nucli i, per tant, a quina *zona de l'espai és més probable que es pugui trobar l'electró*, és a dir, on són els **orbitals**. Tal i com podem deduir, a prop del nucli és on trobem una densitat electrònica més elevada i, per tant, la probabilitat de trobar-hi un electró augmenta. A mesura que ens allunyem del nucli, disminueix la densitat electrònica i, conseqüentment, la probabilitat de trobar-hi l'electró.

Cada orbital està determinat per tres **nombres quàntics**:

**A. Primer nombre quàntic principal ( $n$ )**

El seu valor determina la grandària de l'orbital: ens informa sobre els nivells energètics ( $n=1$ ,  $n=2$ ,  $n=3$ ...). Pren *valors* enters que van de  $n=1$  a  $n=\infty$ .

**B. Nombre quàntic secundari ( $l$ )**

Determina la forma de l'orbital. El seu valor depèn del nombre quàntic principal i pren *valors* que van de  $0$  a  $n-1$ .

**C. Nombre quàntic magnètic ( $m_l$ )**

Determina l'orientació de l'orbital en l'espai segons un eix arbitrari de referència, la direcció del qual està determinada per un camp magnètic extern. El seu *valor* depèn del nombre quàntic secundari i va de  $-l$  a  $+l$ .

**D. Nombre quàntic d'espín ( $m_s$ )**

Dona informació sobre el sentit de rotació de l'electró i està associat a les seves propietats magnètiques.

Es diu que els electrons tenen els **espins paral·lels** quan aquests tenen el mateix valor i es diu que els tenen **antiparal·lels**, quan són oposats.

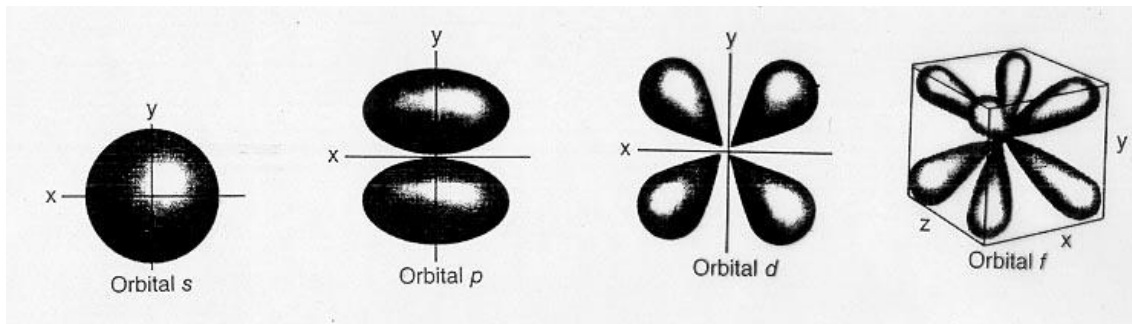
**CAP ELECTRÓ POT TENIR TOTS ELS NOMBRES QUÀNTICS IGUALS.** *Els electrons que estan a l'interior del mateix orbital tenen els tres primers nombres quàntics ( $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ ) iguals. Com no poden tenir els quatre nombres quàntics idèntics així que han de tenir els espins necessàriament antiparal·lels.*

## ENERGIA DELS ORBITALS

### Aspectes generals

- ✓ Per a  $n=1$  (primer nivell energètic) tenim l'estat de mínima energia o estat fonamental, que és el més estable. Si l'àtom és excitat l'electró pot passar a nivells d'energia superiors i, fins i tot, pot ser arrencat de l'àtom.
- ✓ Els subnivells energètics tenen menys energia i, en conseqüència, més estabilitat com més a prop es troben del nucli.
- ✓ Els orbitals d'un mateix subnivell tenen la mateixa energia.

### Tipus d'orbitals



### A. Àtom d'hidrogen

En el cas d'aquest àtom, l'energia dels orbitals depèn només del nombre quàntic principal ( $n$ ). Tots els orbitals que corresponen a un mateix valor del nombre quàntic principal tenen la mateixa energia i en augmentar  $n$ , augmenta l'energia. És per això que, al referir-nos als diferents valors de  $n$ , parlem de nivells energètics.

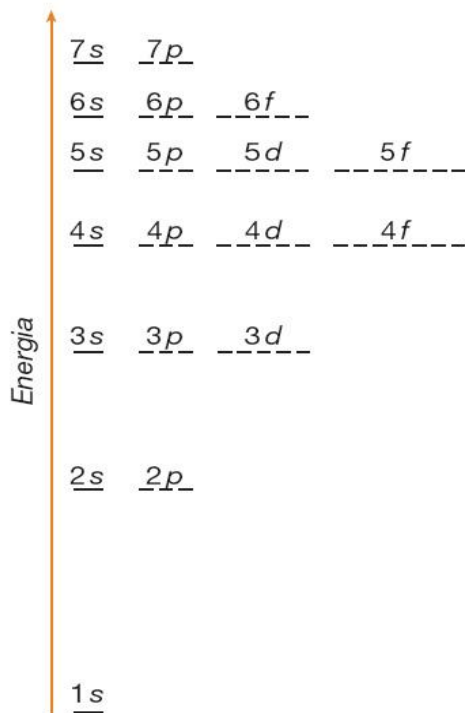


Diagrama de nivells d'energia de l'àtom d'hidrogen

## B. Àtoms polieletrònics

La resta d'elements tenen més d'un electró als seus àtoms i, per tant, l'energia no només depèn de  $n$  sinó també de  $l$  (dels subnivells d'energia). Hem de parlar de **configuracions electròniques**, que ens indiquen la distribució dels electrons dels àtoms dels diversos elements en els orbitals corresponents. Per establir-les cal:

1. Conèixer el nombre d'electrons que té l'àtom de l'element en que estiguem interessat.
2. Tenir en compte el diagrama d'energies relatives dels diferents orbitals. Podem fer servir el **diagrama de Moeller** com a eina mnemotècnica:

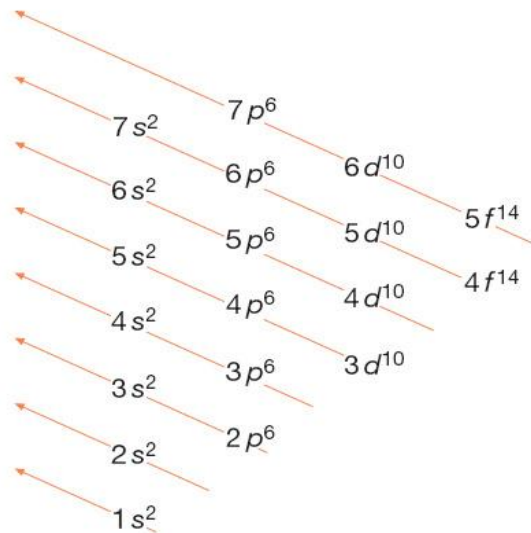


Diagrama de Moeller

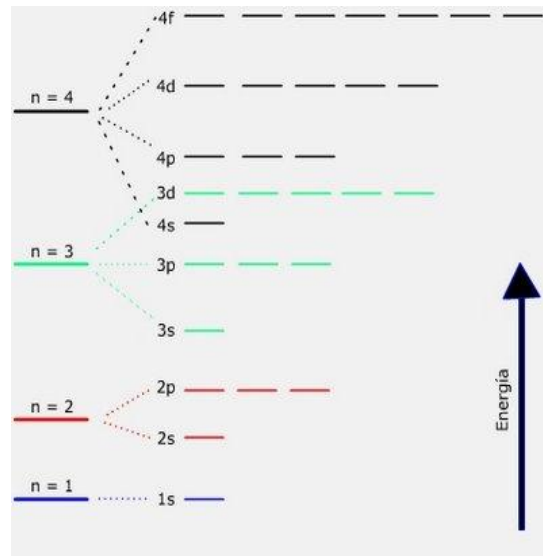


Diagrama de nivells d'energia d'àtoms polieletrònics

S'han de respectar les **normes** següents:

- ✓ En un mateix orbital hi caben com a màxim dos electrons, que han de tenir necessàriament espins oposats (**PRINCIPI DE PAULI**).
- ✓ Els orbitals s'ocupen començant pel que té menys energia i continuant pels altres orbitals en ordre energètic creixent (**PRINCIPI D'AUFBAU**).
- ✓ En ocupar els orbitals de la mateixa energia, els electrons han d'estar desaparellats sempre que sigui possible (*els començarem a desaparellar quan arribem a l'últim subnivell que siguin capaços d'omplir*). Aquesta és la **REGLA DE HUND**.
- ✓ S'ha de cercar el màxim nivell d'estabilitat energètica així que, un cop passat l'element de nombre atòmic 20 (Calci), l'ordre dels orbitals  $d$  i  $s$  s'inverteix.

Hi ha un parell de **formes per representar la configuració electrònica d'un element**:

1. **Forma abreujada**: s'indiquen quins són els orbitals ocupats i, en forma de superíndex a la part superior dreta, quin és el nombre d'electrons que conté cadascun.

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^n$  (on  $n$  és un nombre inferior a la quantitat d'electrons que caben dins el subnivell i que podria haver estat més o menys a prop dependent del la quantitat d'electrons de l'element que s'estigui treballant)

2. **Amb diagrames de caixes orbitàliques**: representació gràfica mitjançant quadradets que simbolitzen els orbitals i fletxes que representen els electrons.



Orbital buit



Orbital amb 1 electró



Orbital ple

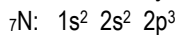
**Exemple i FORMES D'ESCRIURE LES CONFIGURACIONS ELECTRÒNIQUES:**

CONFIGURACIÓ ELECTRÒNICA EN ESTAT FONAMENTAL DE L'ÀTOM DE NITROGEN (Z = 7)

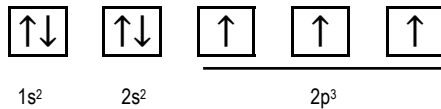
Hem d'analitzar com estarien distribuïts els 7 electrons tenint en compte les normes anteriors. L'orbital de menys energia és l' 1s. En aquest orbital hi caben dos electrons, que tenen espins oposats, tal com afirma la regla de Pauli. Segons l'ordre d'energia, l'orbital següent és el 2s. També conté dos electrons amb espins oposats. Encara hem d'acabar de col·locar tres electrons més. Estan situats en els tres orbitals 2p, que tenen la mateixa energia. Podríem imaginar-nos dos electrons col·locats a un dels orbitals i un a un altre però d'aquesta manera no es compliria el principi de Hund. Per això, hi ha un electró a cadascun dels orbitals 2p.

Podrem representar la configuració electrònica del nitrogen, tal i com hem vist anteriorment, de dues formes:

**1. Forma abreujada**

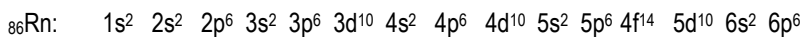
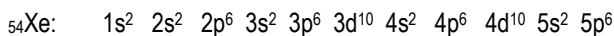
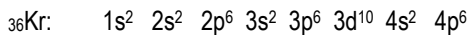
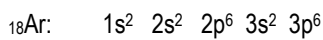
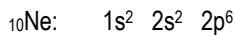


**2. Amb diagrames de caixes orbitals**



Els **gasos nobles** són molt poc reactius ("no reaccionan ni con su padre") a causa del nivell d'estabilitat que els proporciona la seva configuració electrònica, que és de tipus  $ns^2 np^6$  on n representa un nivell energètic.

**CONFIGURACIÓ ELECTRÒNICA DELS GASOS NOBLES**



**IMPORTANT !**

Ser estable (poc reactiu) vol dir tenir la mínima energia possible.

**La natura, de manera espontània, busca tenir el màxim nivell d'entropia** (desordre microscòpic) **però el mínim nivell d'energia.**

**ES CERCA ENTROPIA MÀXIMA I ENERGIA MÍNIMA.**

Com podem observar, tots aquests elements tenen els orbitals s i p de l'últim nivell d'energia ocupats plens i, per aquesta raó, **són especialment estables.**

Algunes vegades, per comoditat i rapidesa, **s'utilitzen les configuracions electròniques dels gasos nobles per expressar-ne d'altres de manera abreujada.** El procediment, un cop sabut la quantitat d'electrons del nostre àtom, és senzill i ràpid:

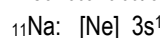
1. Seleccionar el gas noble que tingui una quantitat d'electrons semblant a la de l'àtom del qual volem representar la configuració electrònica però que no la superi.
2. Restar els electrons del gas noble als del nostre àtom.
3. Acabar de col·locar la quantitat d'electrons que resulten de l'operació anterior als seus orbitals corresponents.

**Exemple:**

${}^{11}\text{Na}$  1. El neó és el gas noble que queda més a prop (però per sota) de la quantitat d'electrons del sodi. El selecciono resto el seu valor electrònic al del sodi tot obtenint el resultat següent:

$$e^{-}\text{Na} - e^{-}\text{Ne} = 11e^{-} - 10e^{-} = 1e^{-}$$

2. Col·loco l'electró restant al següent orbital i represento la configuració electrònica de forma abreujada.



Ara que sabem això podem començar a entendre el perquè de l'afany de molts elements per transformar-se en ions. Tot element vol aconseguir el màxim nivell d'estabilitat. De forma planera i per entendre'ns: **el desig de tot element és esdevenir quelcom tant estable com els gasos nobles.**

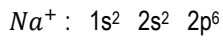
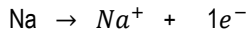


La **configuració electrònica dels ions** també pot trobar-se i representar-se de la mateixa manera que es fa amb la dels elements neutres. Vegem-ne algun exemple:

Exemple 1

**Sodi**

*El sodi és un element de nombre atòmic 11 que vol, de forma natural i espontània, ser tant estable com el gas noble de quantitat electrònica més semblant a la seva (el Neó). Per aconseguir-ho ha de desfer-se d'un electró ja que ell en té 11 Neó, 10. Al desfer-se'n queda carregat positivament i passa a anomenar-se catió sodi:*



Exemple 2

**Clor**

*El clor és un altre element, de nombre atòmic 17. El seu somni, al igual que el de la resta d'àtom poliatòmics que no són gasos nobles, és esdevenir tant estable com un gas noble, en concret, com el que té el nombre atòmic més semblant al seu (l'argó). Per aconseguir el seu propòsit ha de guanyar un electró ja que ell en té només 17 i en necessita 18 per ser igual que l'argó. Al captar-ne un queda carregat negativament i passa a ser l'anió clorur:*

