

A close-up photograph of several pink lotus flowers in a body of water. The water is clear, and there are many small, bright bubbles rising from the bottom of the frame. The flowers are in various stages of bloom, with some showing vibrant pink petals and others still as buds. The background is a soft, out-of-focus light grey.

Teoria atomica

Dr. Lucia Tonucci
l.tonucci@unich.it
Ingegneria delle Costruzioni

Teoria atomica

Cenni storici

V Sec. a.C. **Democrito:** la materia è costituita da corpuscoli indivisibili, gli **"atomi"** (atomo = indivisibile)

XVIII Sec. **Antoine Lavoisier: Legge sulla conservazione della massa**

John Dalton (1766 – 1844)

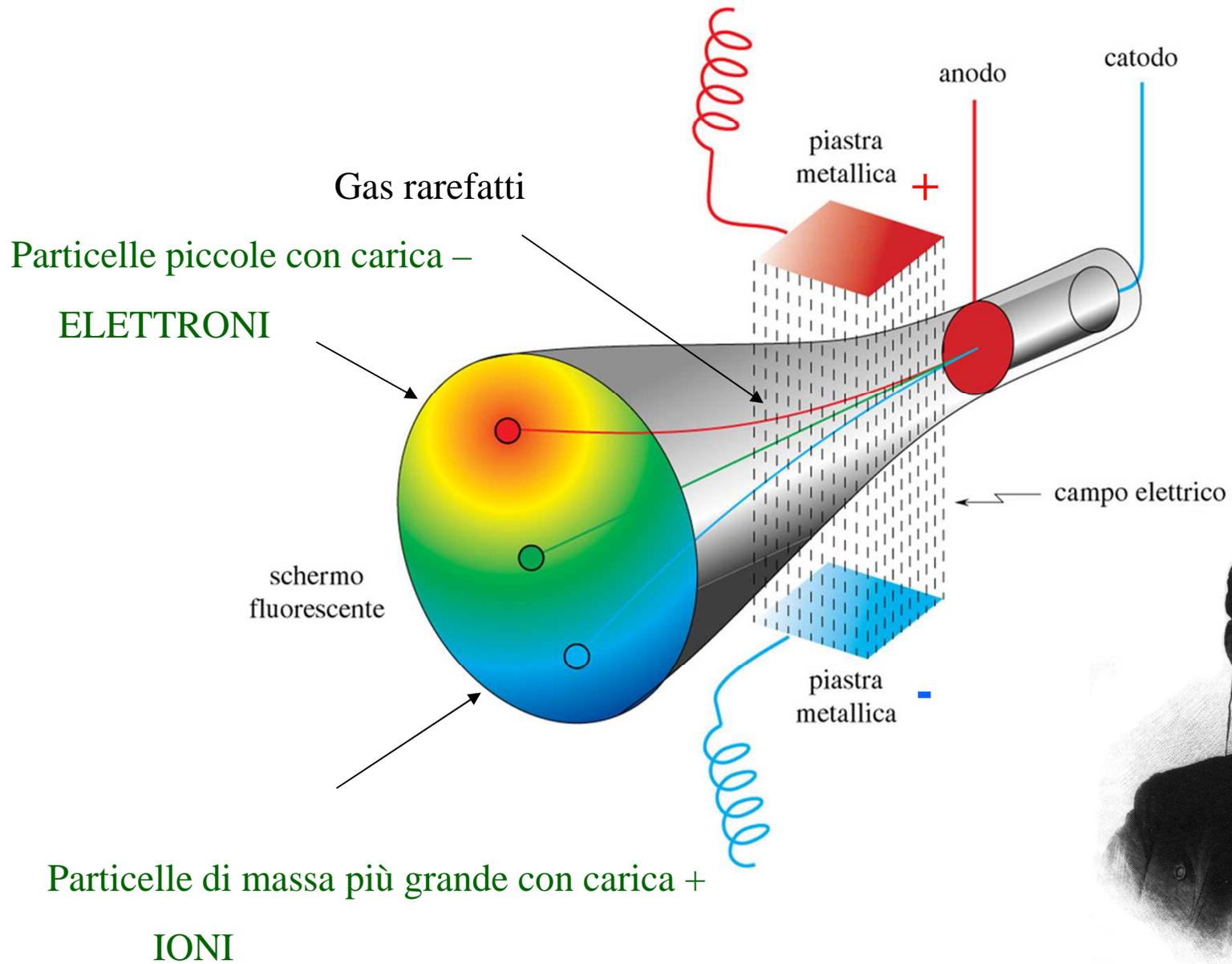
Intuì la **teoria atomica**:

**Tutta la materia è composta da piccole
particelle chiamate atomi**

L'**atomo** è la particella più
piccola di un elemento



ESPERIMENTO DI J.J. THOMSON (1897)

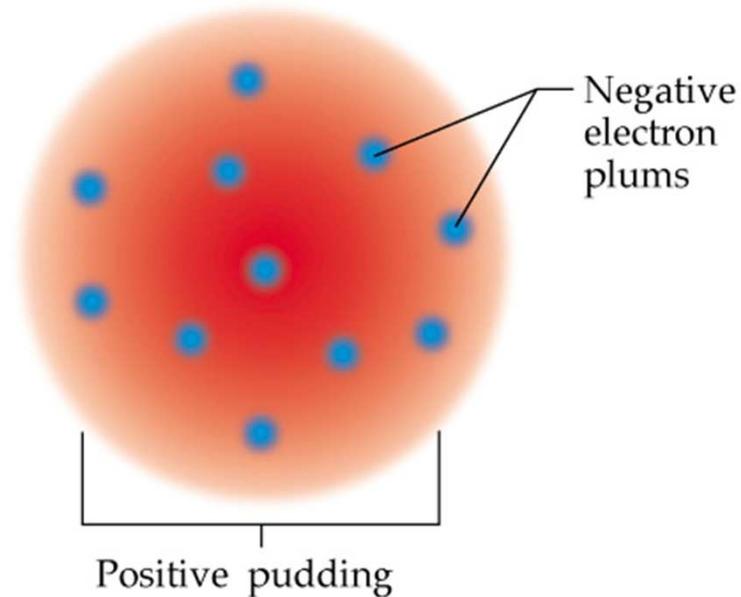


Atomo di Thomson

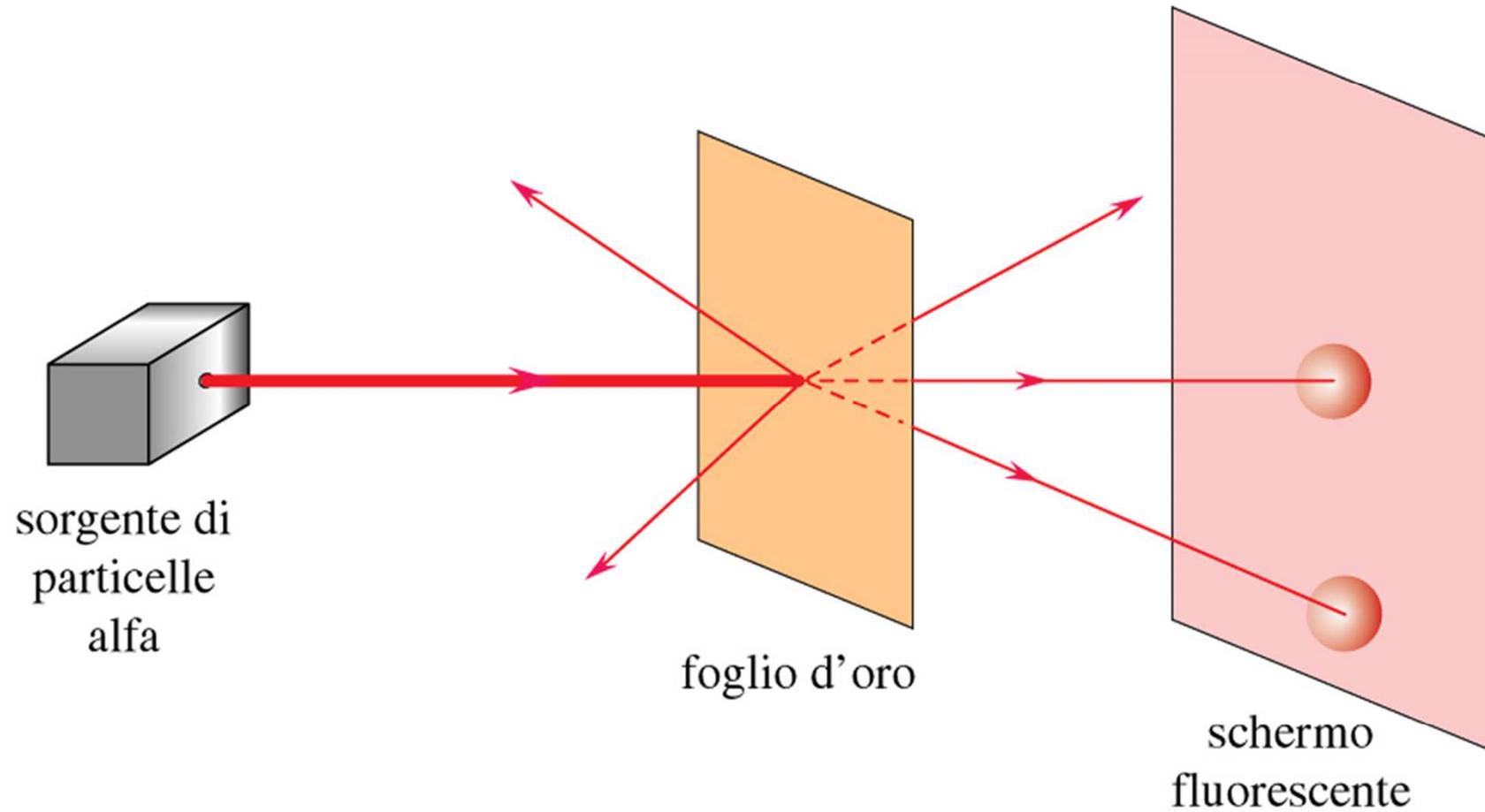
Nel 1904 Thomson propose un modello di atomo, detto "a panettone". Immaginò l'atomo come una sfera piena di una sostanza elettricamente positiva mescolata con elettroni negativi, come un panettone con l'uva passa



Christmas pudding



ESPERIMENTO DI E. RUTHERFORD (1911)



Atomo di Rutherford

Atomi hanno molto spazio vuoto

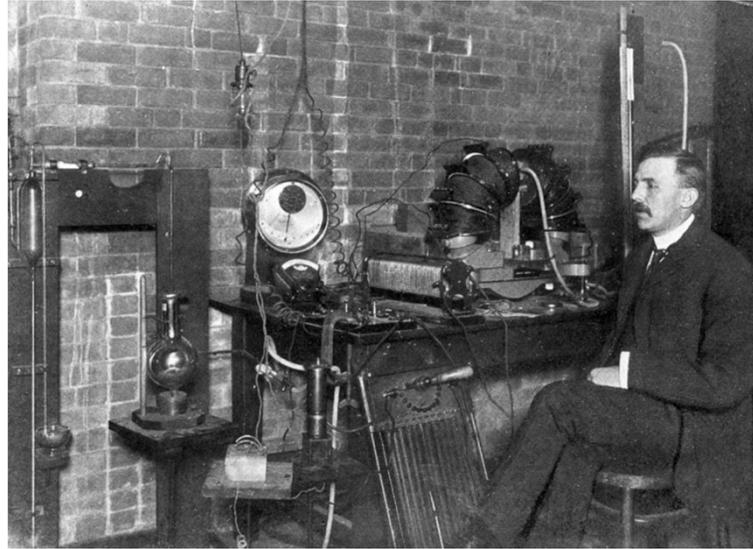
Possiedono una parte piccola e densa (nucleo)

Nucleo è costituito da protoni (+) e neutroni

Esternamente al nucleo vi sono particelle chiamate elettroni (-)

Modello planetario

Ernest Rutherford



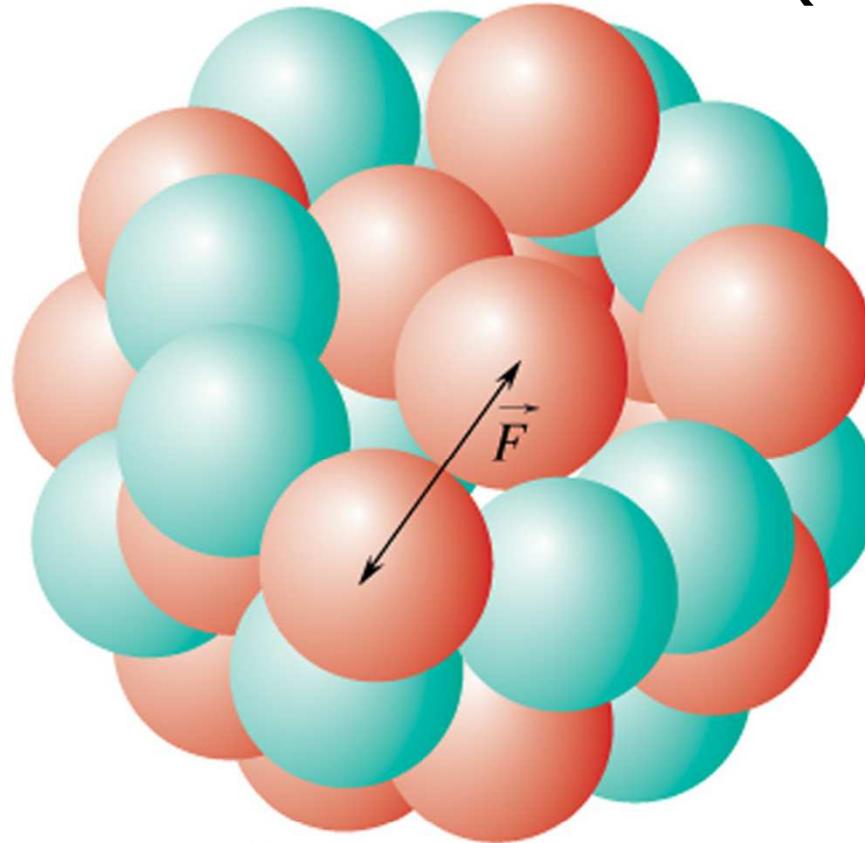
"Nella scienza esiste solo la Fisica. Tutto il resto è solo collezione di francobolli"

...

Vinse il Premio Nobel per la ... CHIMICA !!!!

Diametri atomici medi = 10^{-10} m (1 Å)

Diametro medio nucleo = 10^{-15} m (10^{-5} Å)



● protoni
● neutroni

L'atomo è costituito da molto spazio vuoto. Se il **nucleo dell'atomo di idrogeno** avesse le dimensioni di una palla da tennis, l'**elettrone** si troverebbe ad una distanza di circa **2000 m**



2 Km



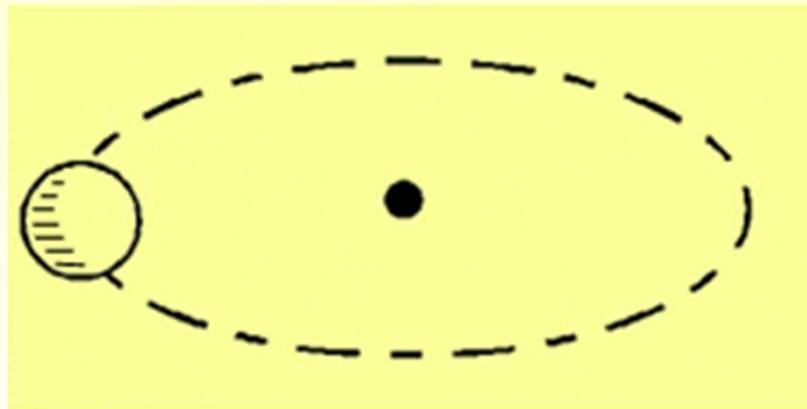


**DOVE SI TROVANO GLI ELETTRONI E COME SI
MUOVONO ?**

Modello atomico planetario di Rutherford (1910)

Elaborato a seguito di esperimenti che avevano dimostrato come tutta la carica positiva dell'atomo e tutta la sua massa fossero concentrate in un nucleo centrale molto piccolo

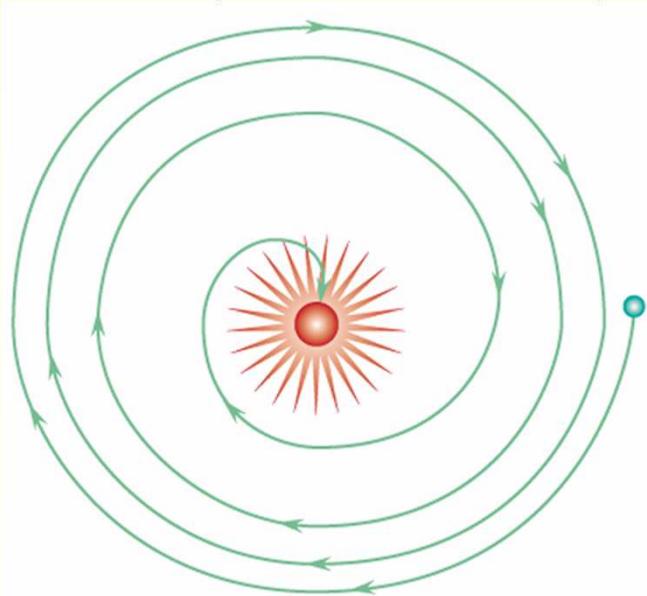
Gli elettroni secondo Rutherford si muovono intorno al nucleo ad **imitazione di un sistema planetario**



Limiti del modello planetario

Secondo le leggi della fisica classica tale modello è **instabile**

Infatti cariche elettriche ruotanti intorno al nucleo emetterebbero radiazioni elettromagnetiche avvicinandosi progressivamente al nucleo secondo un percorso a spirale e cadendo su di esso in tempi brevissimi (10^{-11} s)



Radiazioni elettromagnetiche

La **luce** è una radiazione elettromagnetica che si propaga mediante onde a velocità **$c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$** (nel vuoto)

$$\lambda v = c \quad \lambda = c / v$$

λ = lunghezza d'onda (m)

v = frequenza (s^{-1})

c = velocità della luce

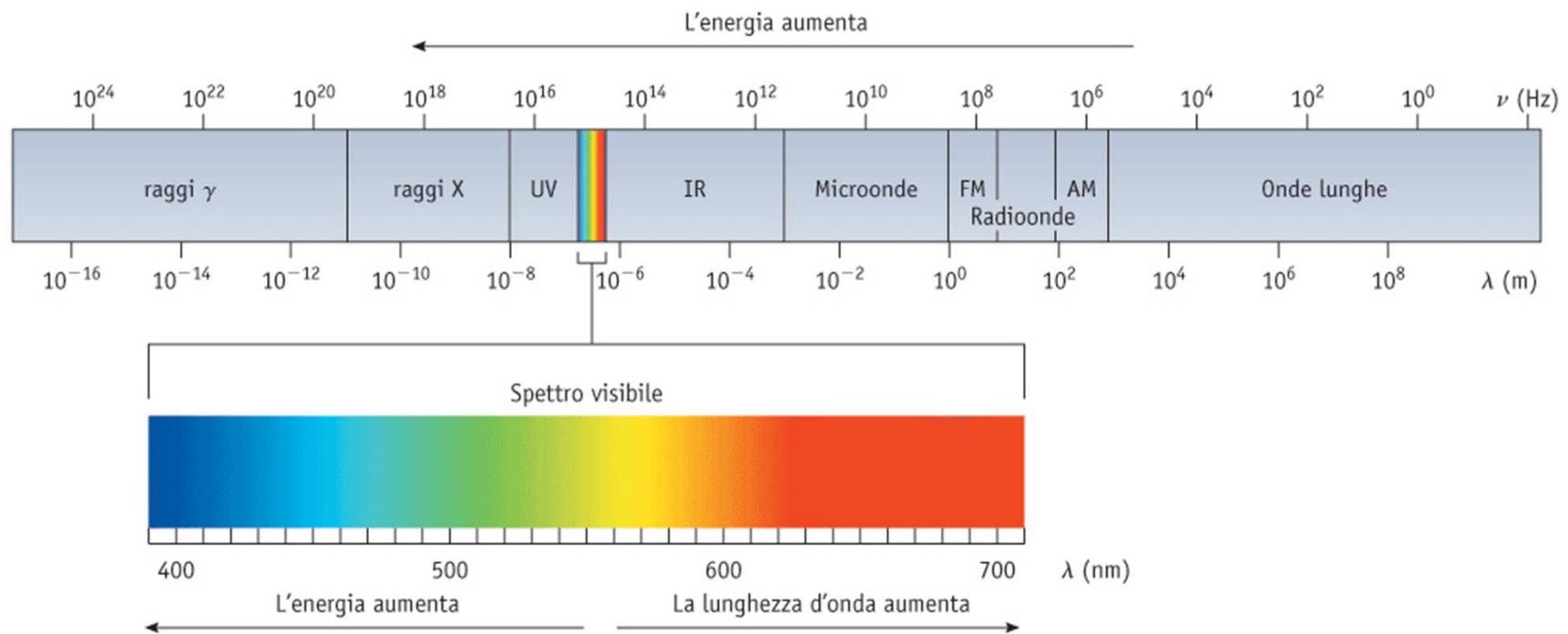
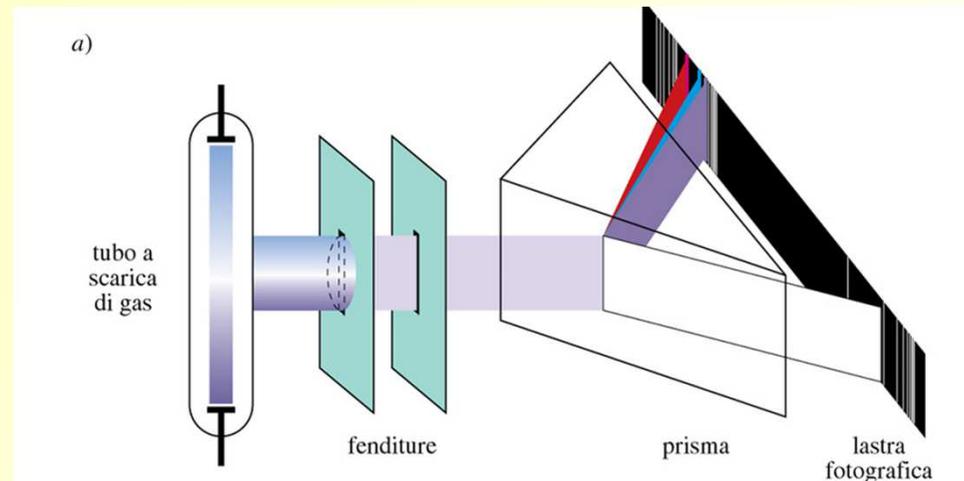


Figura 7.3 Lo spettro elettromagnetico. La luce visibile (porzione allargata) è una piccolissima parte dell'intero spettro. L'energia delle radiazioni aumenta dalle onde radio (bassa frequenza, ν , ed elevata lunghezza d'onda, λ) ai raggi gamma (alta frequenza e bassa lunghezza d'onda).

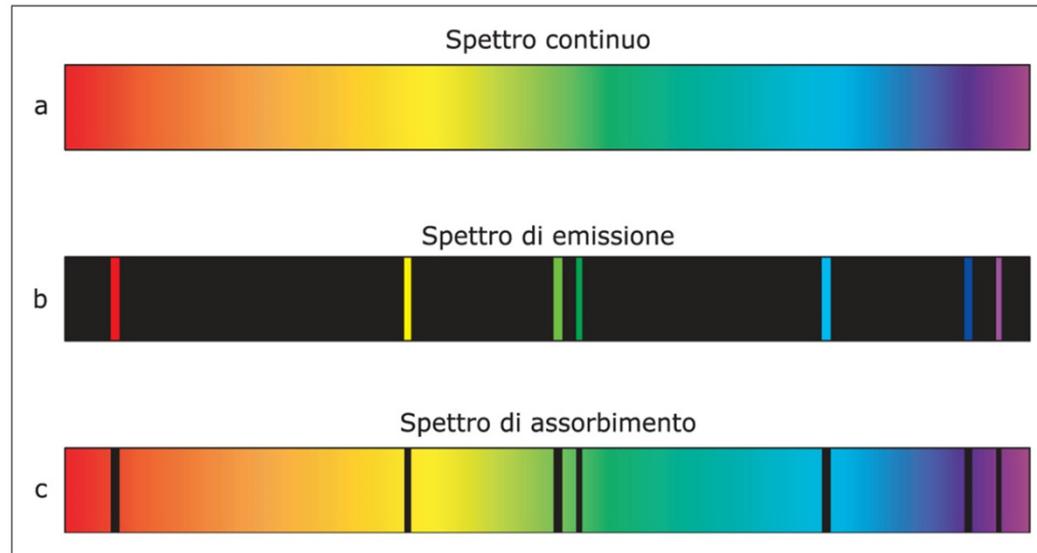
La luce visibile rappresenta una piccola parte (dai 400 nm, viola ai 700 nm, rosso) dello **SPETTRO ELETTRONMAGNETICO**

Alla fine del 1800 vennero studiati gli spettri di emissione ed assorbimento dell'idrogeno



Facendo passare corrente elettrica attraverso un tubo contenente idrogeno gassoso (H_2) questo si dissocia in atomi (H) che emettono una luce blu; attraverso un prisma la luce viene scomposta in alcune serie di righe (*spettro di emissione*).

Le stesse righe 'mancano' dallo spettro quando una luce visibile viene fatta passare su idrogeno (*spettro di assorbimento*).



Righe spettrali distinte rappresentano i valori energetici che
l'atomo può avere

Dualismo onda – particella

Studi di **Max Planck** e **Albert Einstein** portarono a evidenziare una doppia natura per la luce

Einstein postulò che la luce consisteva **di particelle di energia elettromagnetica** (**quanti** o **fotoni**) con energia E proporzionale alla frequenza della luce osservata

h = costante di Planck

$$E = h\nu = hc/\lambda$$

$h\nu$ = quanto di radiazione elettromagnetica

NIELS BOHR (1913)

Cercò di spiegare gli spettri dell'idrogeno e contemporaneamente di perfezionare il modello atomico planetario con il concetto di **quantizzazione** dell'energia

Nell'atomo di Bohr il nucleo e gli elettroni sono tenuti insieme da **forze elettrostatiche**:

$$F = (q_e \times q_p) / r^2$$

dove q_e è la carica dell'elettrone, q_p è la carica nucleo e r la distanza fra essi

Postulati di Bohr sull'atomo

- L'elettrone si muove su **orbite circolari** intorno al nucleo. **L'energia di un elettrone** dipende dalla distanza dal nucleo (r , raggio)
- Gli elettroni possono trovarsi solo in determinate **orbite stabili (stati stazionari ad energia costante)** che possono avere solo alcuni valori di energia (**l'energia è quantizzata**)
- Gli elettroni possono **passare da un'orbita all'altra (transizione)** assorbendo o emettendo un **quanto di energia** pari alla differenza energetica tra le due orbite

L'atomo secondo Bohr ha n orbite nelle quali si trovano elettroni con energia costante ed in dipendenza dalla distanza dal nucleo

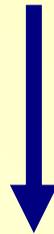
Limiti della teoria atomica di Bohr

Il modello atomico di Bohr riesce a descrivere bene solo l'atomo di idrogeno o atomi con un solo elettrone (idrogenoidi)

Per atomi più complessi è necessario utilizzare modelli atomici moderni

Principio di Heisenberg

Non è possibile conoscere contemporaneamente, con la precisione voluta, **posizione e velocità** di una particella



Perde significato la teoria di Bohr secondo cui l'elettrone compie orbite ben definite attorno al nucleo

Relazione di Louis De Broglie

$$\lambda = h / mv$$

A qualsiasi corpo è associata un'onda → ogni corpo ha una natura ondulatoria

Tabella 3.1 Le lunghezze d'onda di alcuni corpi

Corpo	Massa (kg)	Velocità (m/s)	λ (m)
Elettrone veloce	$9,11 \cdot 10^{-31}$	$2,18 \cdot 10^6$	$3,34 \cdot 10^{-10}$
Palla da tennis	0,200	50,0	$6,63 \cdot 10^{-35}$
Automobile	1000,0	28,0	$2,37 \cdot 10^{-38}$

Anche l'elettrone ha natura ondulatoria

Con gli studi sul dualismo onda - particella si entra nella visione moderna dell'atomo che deriva dalla

MECCANICA QUANTISTICA

Entra in gioco la **statistica** ed il concetto di

PROBABILITA'

di **trovare l'elettrone in una determinata zona di spazio** (a discapito dell'esatta posizione)

Dalla **teoria ondulatoria**:

- 1) l'elettrone** perde la sua individualità come **corpuscolo** e si trasforma in un'**onda di probabilità**
- 2)** si considera l'elettrone come una **carica elettrica** piuttosto che un corpuscolo
- 3)** alla possibilità di determinare in modo certo ed assoluto la posizione dell'elettrone si sostituisce il realistico concetto **di avere elevata probabilità di trovarlo in un certo spazio (proporzionale a Ψ^2)**

Equazione di Schrödinger

Pensando l'elettrone non come corpuscolo ma come onda, il problema della struttura dell'atomo viene affrontato con un *altro linguaggio*:

**COME SONO DISPOSTE QUESTE ONDE (ELETTRONI)
INTORNO AL NUCLEO ?**

Il problema è **prettamente matematico**

Bisogna trovare:

- 1) le **condizioni necessarie** affinché queste onde siano stazionarie, ossia persistenti nel tempo dal momento che gli elettroni permangono intorno al nucleo indefinitamente
- 2) quali sono le regioni dello spazio, disposte intorno al nucleo, in cui possono sussistere queste onde stazionarie

Equazione di Schrödinger

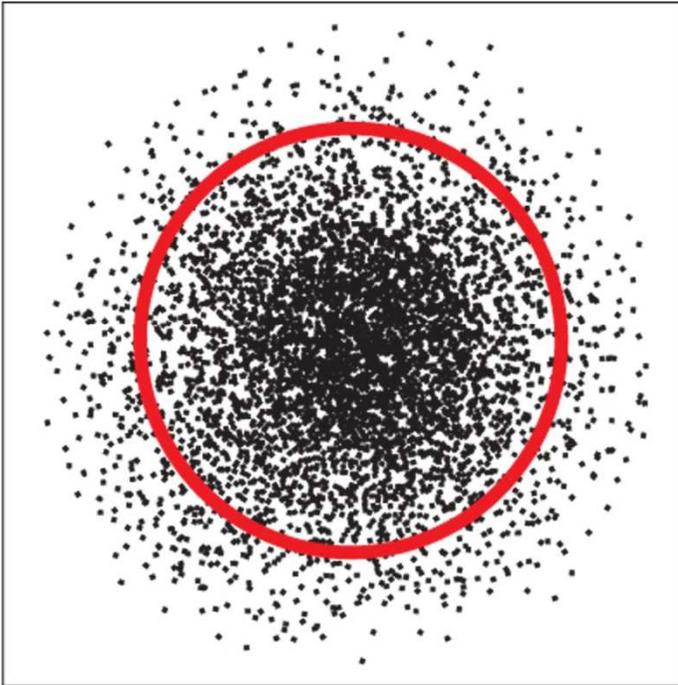
Questa complessa equazione, sviluppata da Schrödinger, è risolvibile esattamente solo per l'atomo d'idrogeno (per ora)

Le soluzioni sono funzioni d'onda (Ψ_n) che descrivono gli stati possibili dell'elettrone

- Ad ogni funzione d'onda (Ψ_n) corrisponde un'energia quantizzata (E_n)
- L'elettrone può assumere solo valori discreti di energia (livelli energetici con $n = 1, 2, 3, \dots$)
- La densità di probabilità di trovare l'elettrone in un dato punto dello spazio è direttamente proporzionale al quadrato di Ψ_n

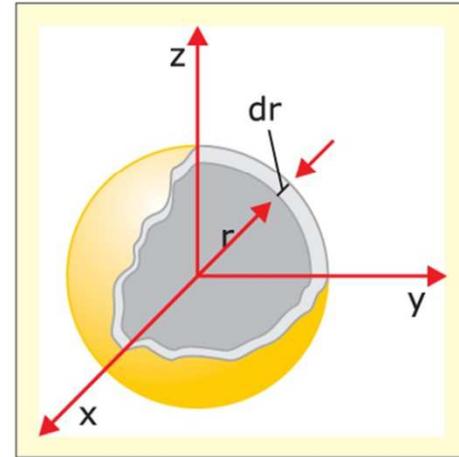
Non si assegnano all'elettrone posizioni fisse e orbite determinate ma si specifica solo dove è più probabile localizzarlo

**QUESTE FUNZIONI D'ONDA (Ψ_n) SONO CHIAMATE
ORBITALI**



F. Nobile - P. Mastrorilli

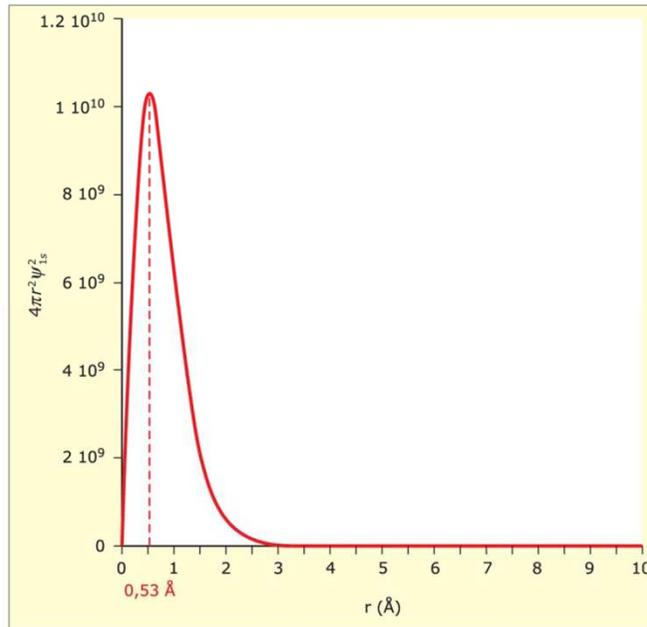
La chimica di base



F. Nobile - P. Mastrorilli

La chimica di base con esercizi

Copyright 2006 Casa Editrice Ambrosiana



F. Nobile - P. Mastrorilli

La chimica di base con esercizi

Copyright 2006 Casa Editrice Ambrosiana

NUMERI QUANTICI

Ogni elettrone è rappresentato da 4 numeri quantici

I primi tre derivano dalla risoluzione dell'equazione di Schrodinger

Numeri quantici: n l m_l m_s

Numero quantico principale (n)

Può avere qualsiasi valore positivo intero diverso da zero:

1, 2, 3 ...

Da n dipendono:

- **l'energia dell'elettrone**
- **le dimensioni dell'orbitale**

Orbitali con lo stesso numero quantico n appartengono allo **stesso strato elettronico**

Numero quantico del momento angolare (l)

Può avere qualsiasi valore intero **da 0 a (n - 1)**

Distingue gli orbitali appartenenti allo stesso strato nelle loro **diverse forme**

I diversi sottolivelli (orbitali) sono indicati con le lettere:

l	0	1	2	3	4	...
Sottoliv.	s	p	d	f	g	...

Numero quantico magnetico (m_l)

I valori permessi sono **i numeri interi da $-l$ a $+l$**

Distingue gli orbitali con n e l (cioè con energia e forma) definite ma **con diverse orientazioni nello spazio**

Per $l=0$ (sottostrato s) il valore m_l permesso è solo 0 , c'è solo un orbitale nel sottostrato s

Per $l = 1$ (sottostrato p) $m_l = -1, 0$ e $+ 1$ vi sono tre diversi orbitali nel sottostrato p . Gli orbitali hanno la stessa forma ma diverso orientamento spaziale

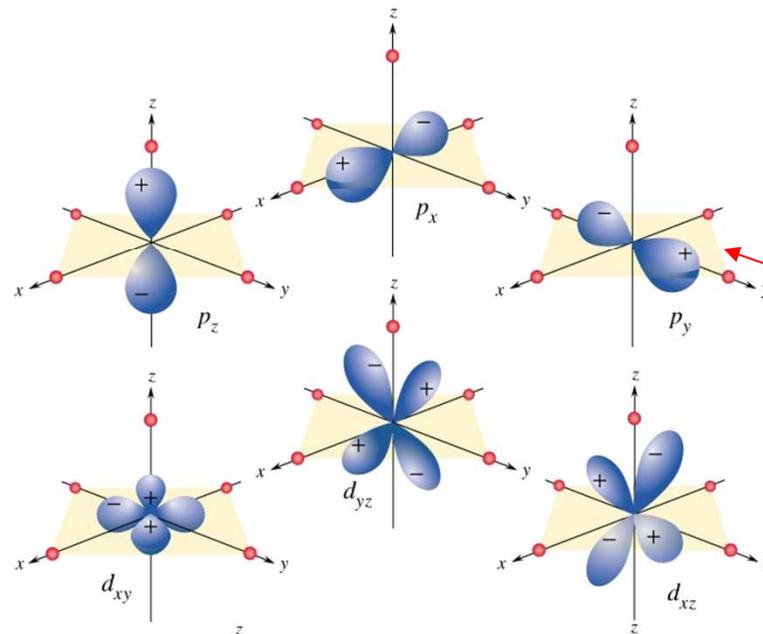
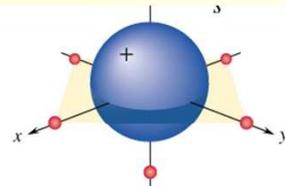
L'orbitale con $l = 0$, chiamato **orbitale s**, ha forma sferica

Per $l = 1$ gli **orbitali p** hanno forma "a 8" ed orientati secondo gli assi cartesiani

Per $l = 2$ abbiamo gli **orbitali d** (sono 5) che hanno forme particolari

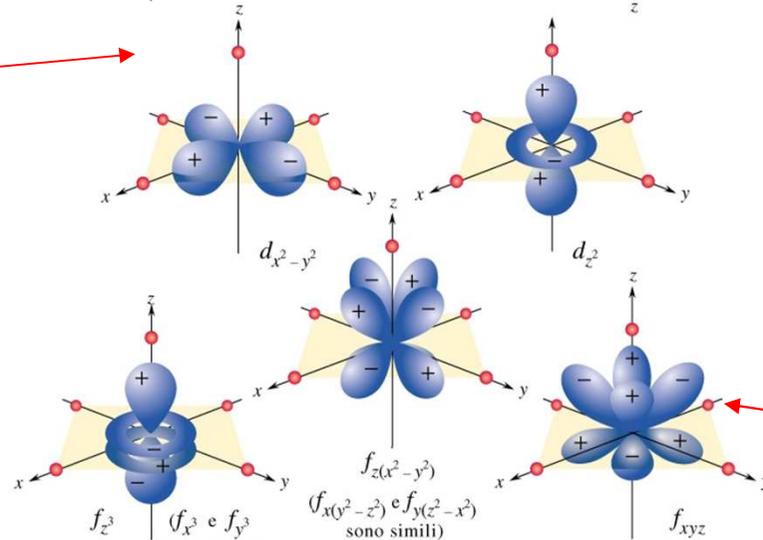
Gli orbitali di uno stesso sottolivello (2p, 3d, ecc) hanno uguale energia e vengono chiamati degeneri

Orbitale s



Orbitali p

Orbitali d



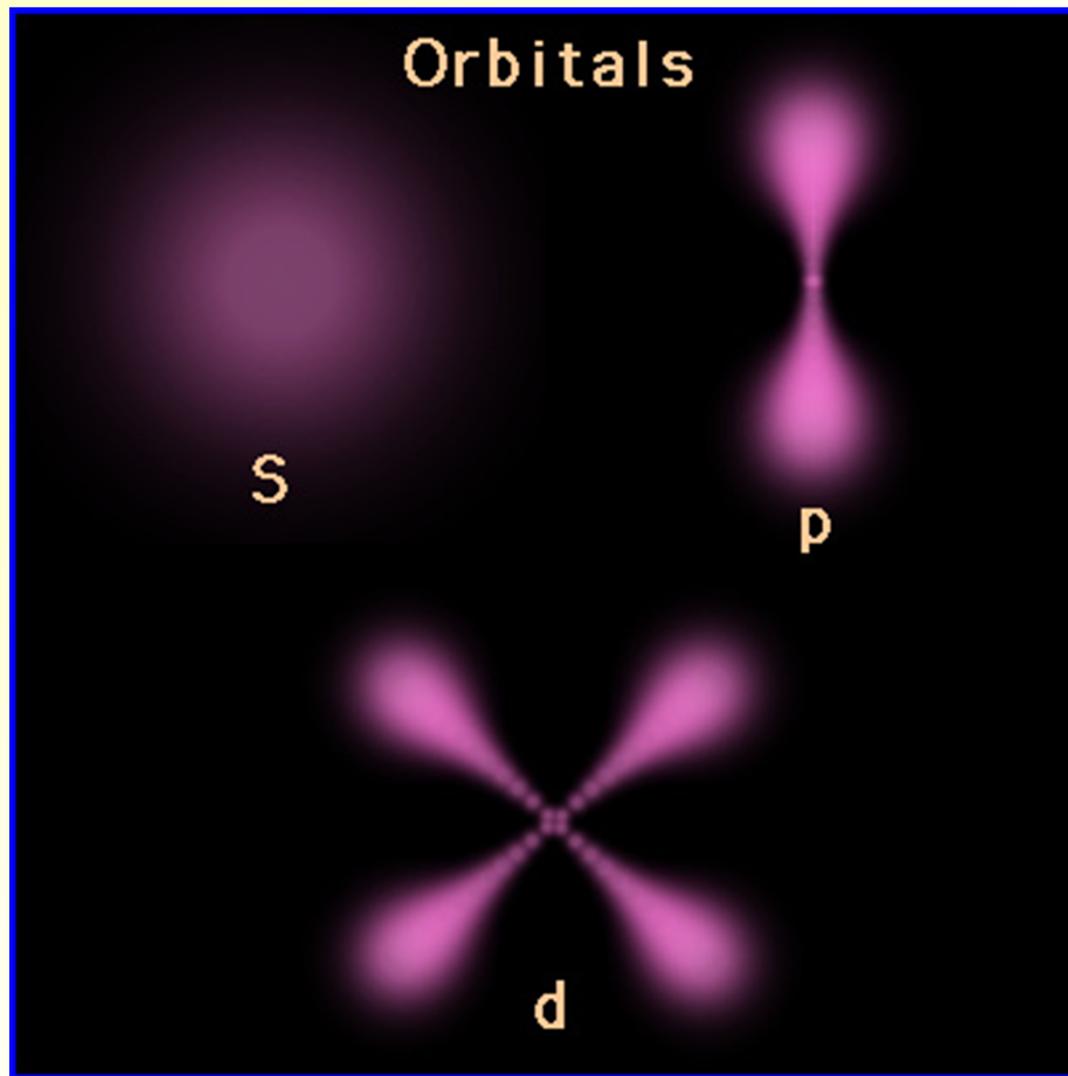
Orbitali f

Orbitals

s

p

d



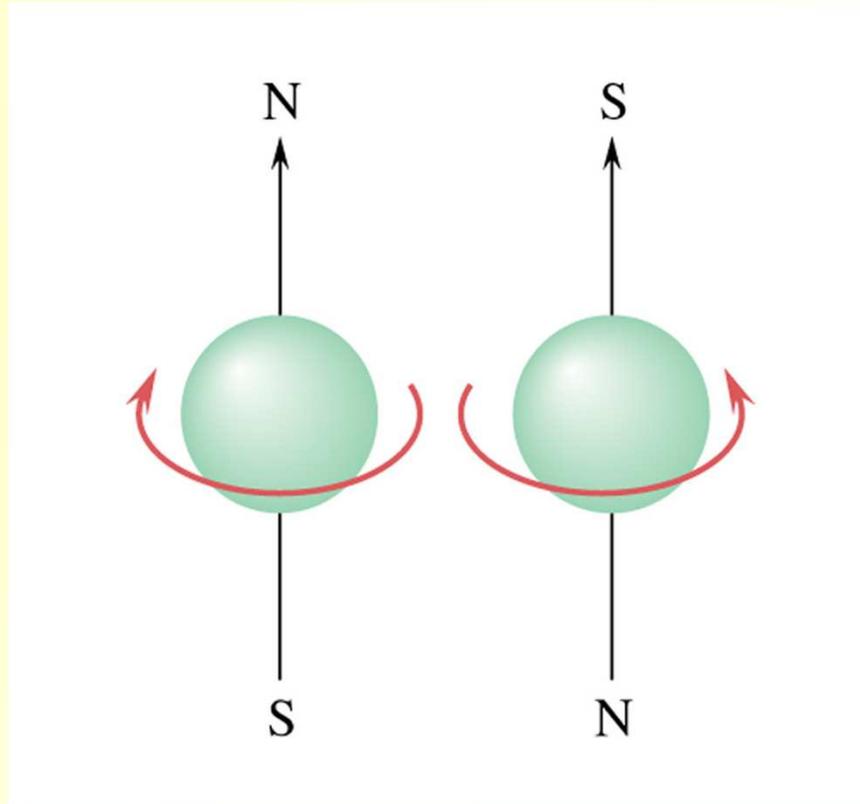
Numero quantico di spin (m_s)

Possibili valori = $+1/2$ e $-1/2$

Indica i due possibili orientamenti dell'asse di spin di un elettrone

Un elettrone si comporta come se ruotasse sul proprio asse
Lo spin elettronico dà origine ad una corrente elettrica che genera un campo magnetico

L'elettrone si comporta come un **piccolo magnete**



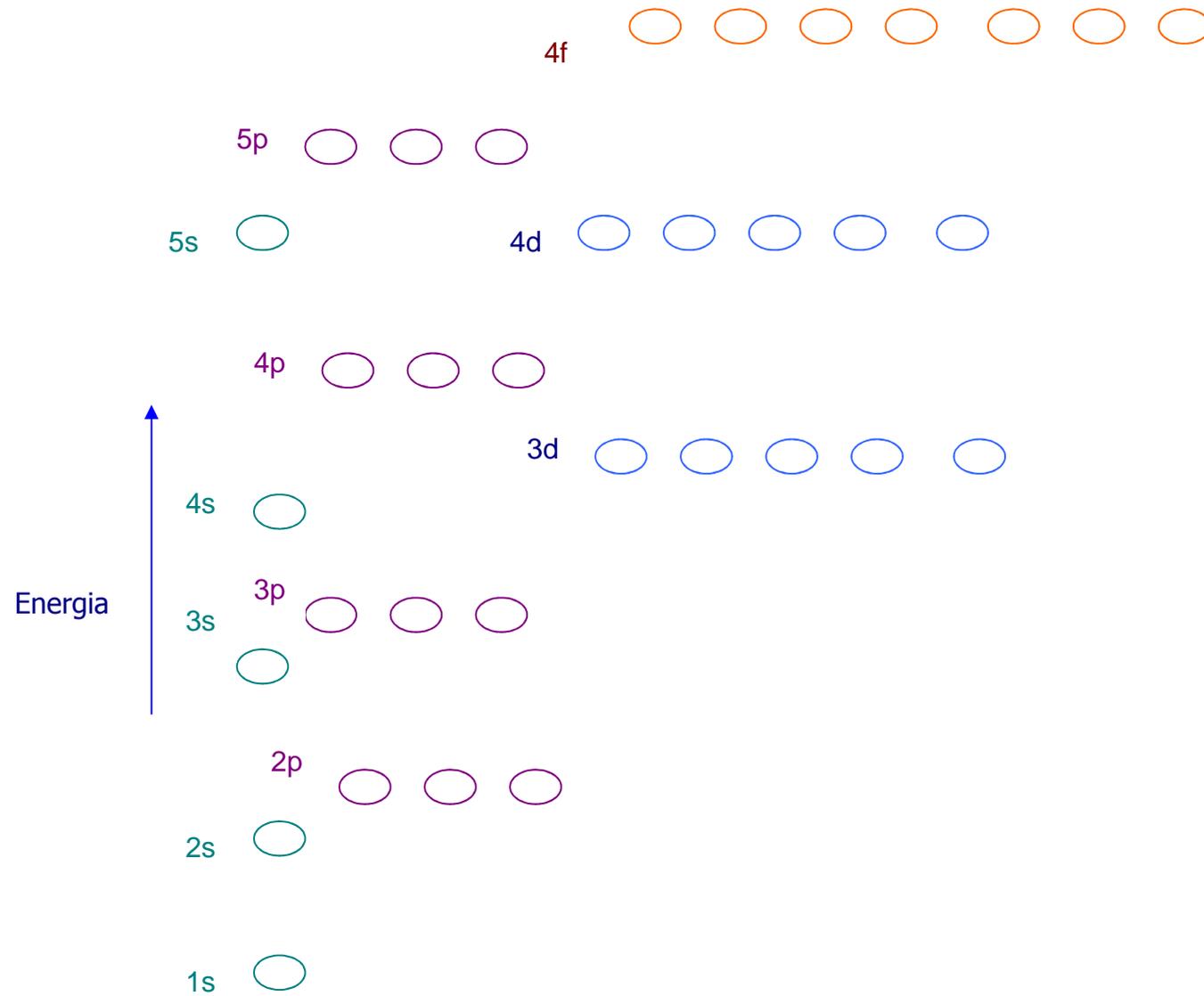
Elettroni **appaiati** → a spin opposto

Elettroni **paralleli** → spin concordi

Simboli degli orbitali, loro numeri quantici e numero di nodi presenti.

Simbolo orbitale	Numeri quantici			Numero orbitali n^2
	n	l	m	
1s	1	0	0	1
2s	2	0	0	1 } 4 3 }
2p	2	1	0, ± 1	
3s	3	0	0	1 } 9 3 } 5 }
3p	3	1	0, ± 1	
3d	3	2	0, ± 1 , ± 2	
4s	4	0	0	1 } 16 3 } 5 } 7 }
4p	4	1	0, ± 1	
4d	4	2	0, ± 1 , ± 2	
4f	4	3	0, ± 1 , ± 2 , ± 3	

CONFIGURAZIONE ELETTRONICA



La **configurazione elettronica** di un atomo consiste nella disposizione degli elettroni nei vari orbitali

Principio dell'Aufbau

Gli elettroni di ciascun atomo si posizionano negli orbitali secondo un ordine di energia crescente

La sequenza degli orbitali in ordine crescente di energia è:

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < \dots$

Principio di esclusione di Pauli

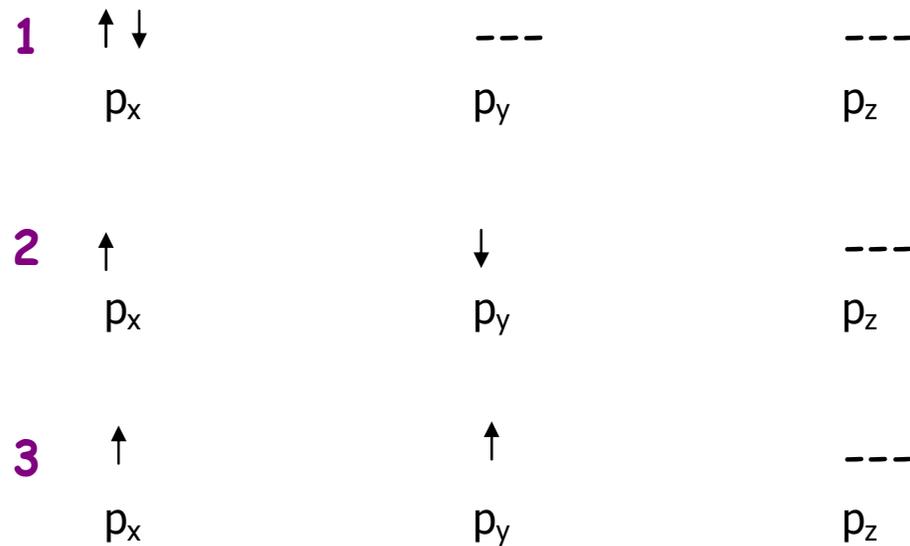
Nello stesso atomo non possono esserci due elettroni con i quattro numeri quantici uguali. In ogni orbitale possono stare dunque solo 2 elettroni, con spin opposto $\uparrow\downarrow$

Regola di Hund o della massima molteplicità

Nel riempimento di un gruppo di orbitali degeneri gli elettroni si posizionano uno per orbitale a spin parallelo; formano coppie solo se in tutti gli orbitali dello stesso livello è già presente un elettrone

Esempio

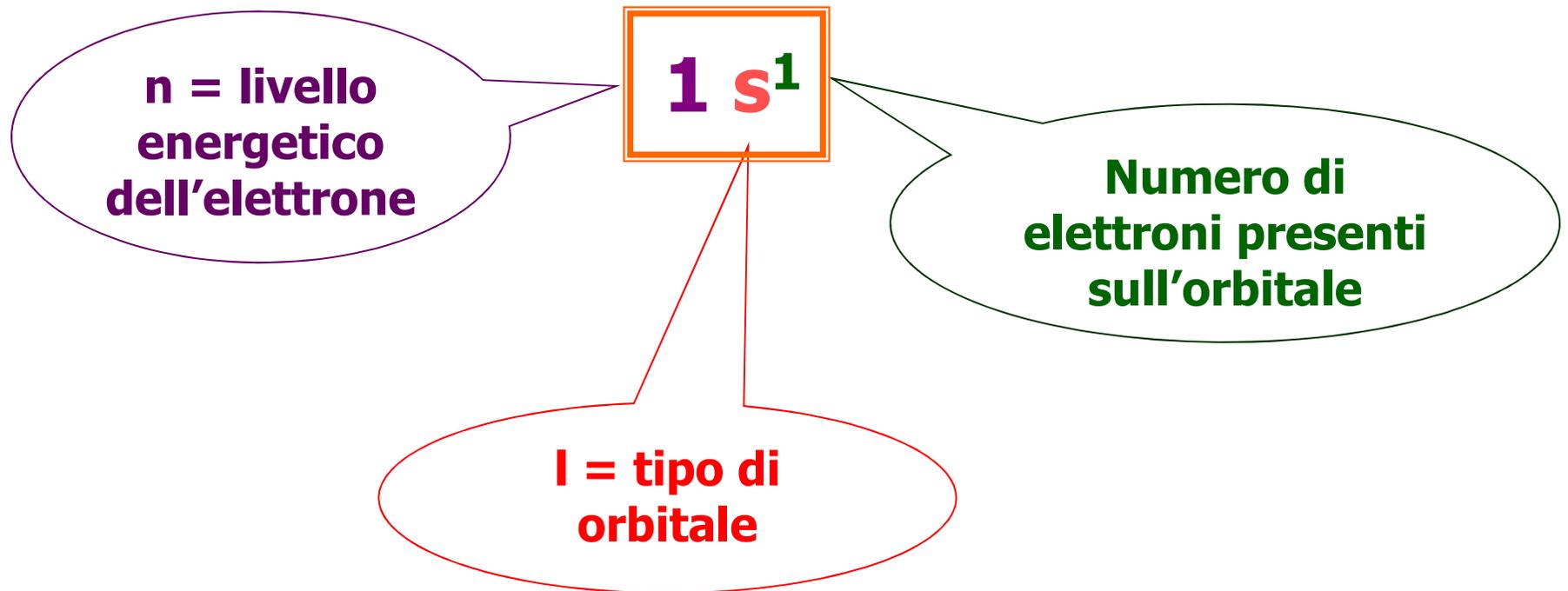
Posizionare 2 elettroni nel sottolivello 2p. Quale sarà la giusta configurazione ?



L'atomo di idrogeno possiede un solo elettrone →
orbitale 1s numeri quantici

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad m_s = \frac{1}{2}$$

La sua configurazione elettronica fondamentale



Costruzione della configurazione elettronica (Aufbau)

Elemento	N. tot. elettr.	Diagramma di orbitali				Configurazione elettronica
		1s	2s	2p	3s	
H	1	↑				1s ¹
He	2	↑↓				1s ²
Li	3	↑↓	↑			1s ² 2s ¹ = [He] 2s ¹
Be	4	↑↓	↑↓			1s ² 2s ² = [He] 2s ²
B	5	↑↓	↑↓	↑		1s ² 2s ² 2p ¹ = [He] 2s ² 2p ¹

Elettroni interni: occupano i livelli energetici a minore energia e appartengono alla configurazione del gas nobile precedente

Elettroni esterni o di valenza: si trovano nei livelli energetici più alti e sono coinvolti nei legami chimici

Elemento	N° e ⁻	Conf. elettr. gusci esterni
K	19	[Ar] 4s ¹
Ca	20	[Ar] 4s ²
Sc	21	[Ar] 3d ¹ 4s ²

Ar (18 e⁻) 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶

Esempio di configurazione elettronica

Elemento	N° e ⁻	Conf. elettr. gusci esterni
K	19	[Ar] 4s ¹
Ca	20	[Ar] 4s ²
Sc	21	[Ar] 4s ² 3d ¹

Ar (18 e⁻)

1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶

