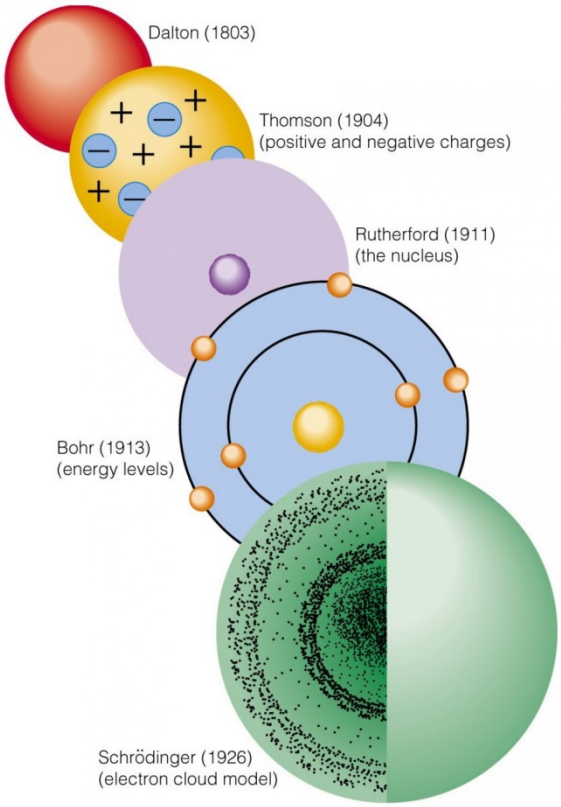
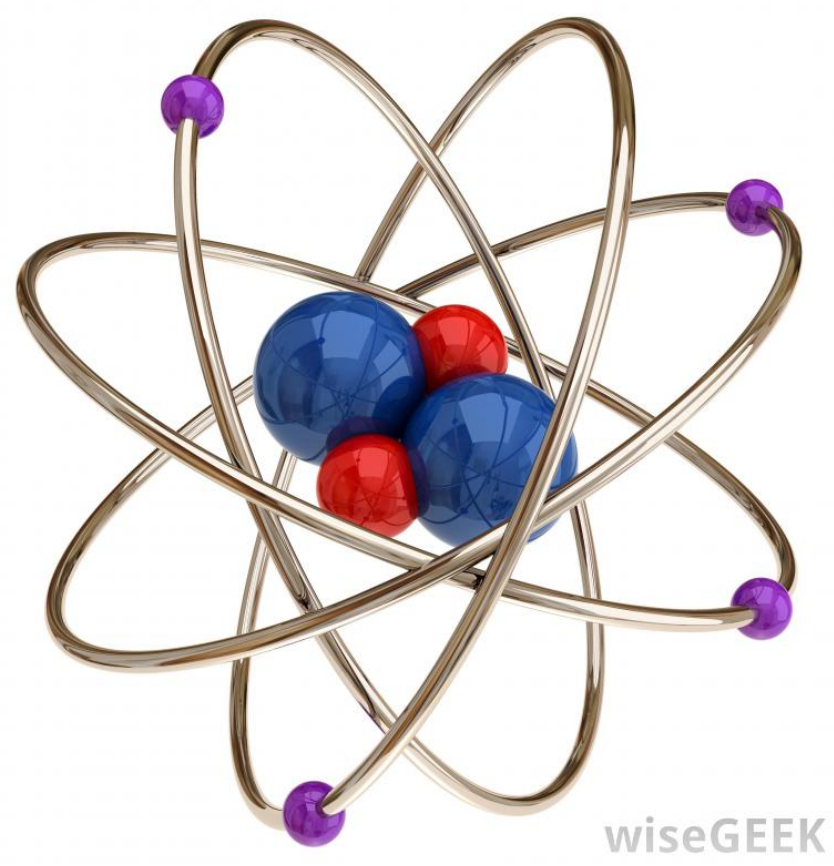
Gli atomi e la teoria atomica





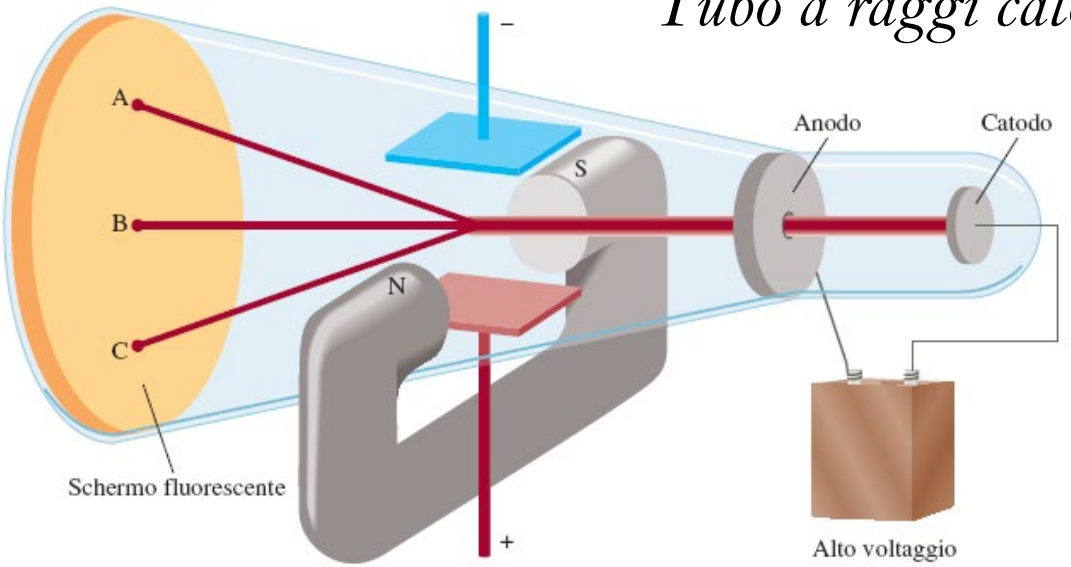
Congresso Solvay 1927

Fino alla fine del XIX secolo gli atomi erano considerati come particelle materiali omogenee, compatte ed indivisibili.

Importanti scoperte sperimentali avvenute tra la fine del XIX e l'inizio del XX secolo suggerirono che gli atomi sono invece sistemi con struttura complessa.

Joseph John Thomson
1856-1940, UK

Tubo a raggi catodici

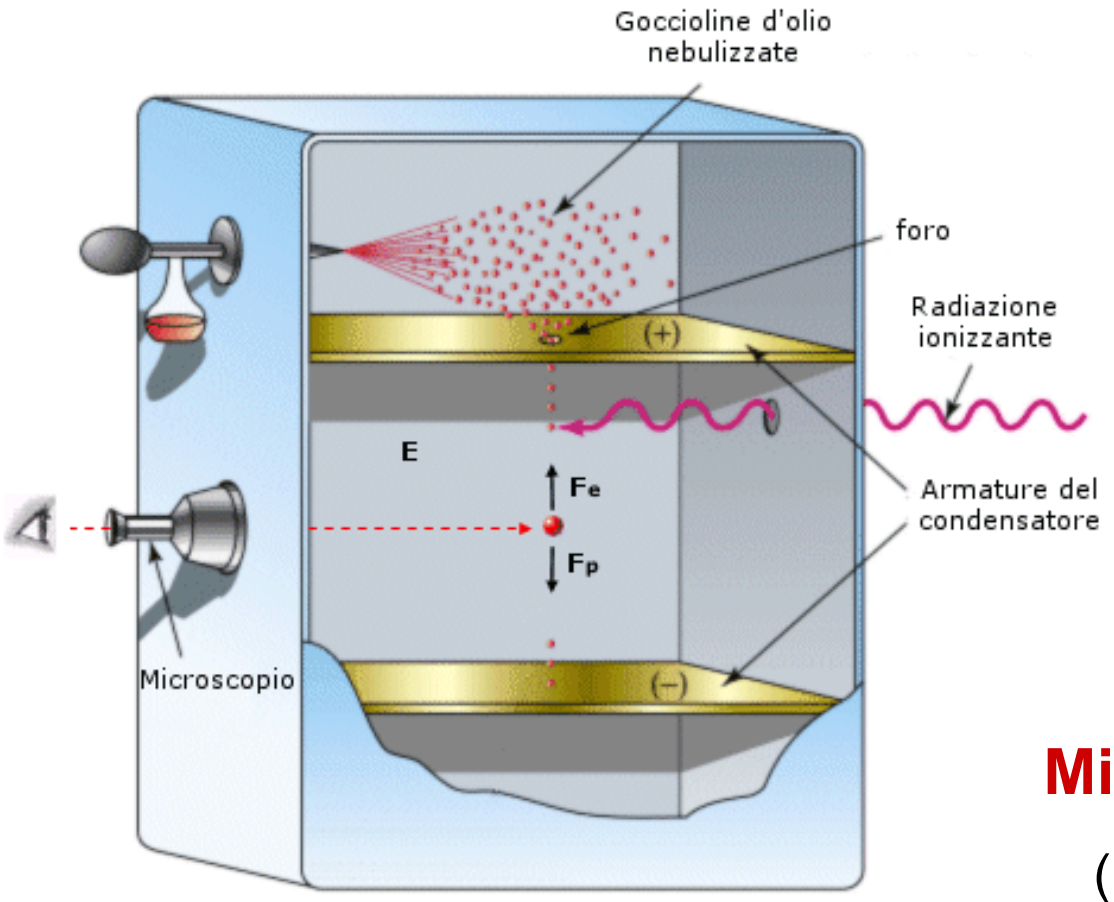


J.J. Thomson, misurò massa/carica di un e^-

(1906 Premio Nobel in Fisica)

ANIMAZIONE

Esperimento di Millikan



Robert Andrews Millikan

1868-1953, U.S.A.

Misurò la massa di un e^-

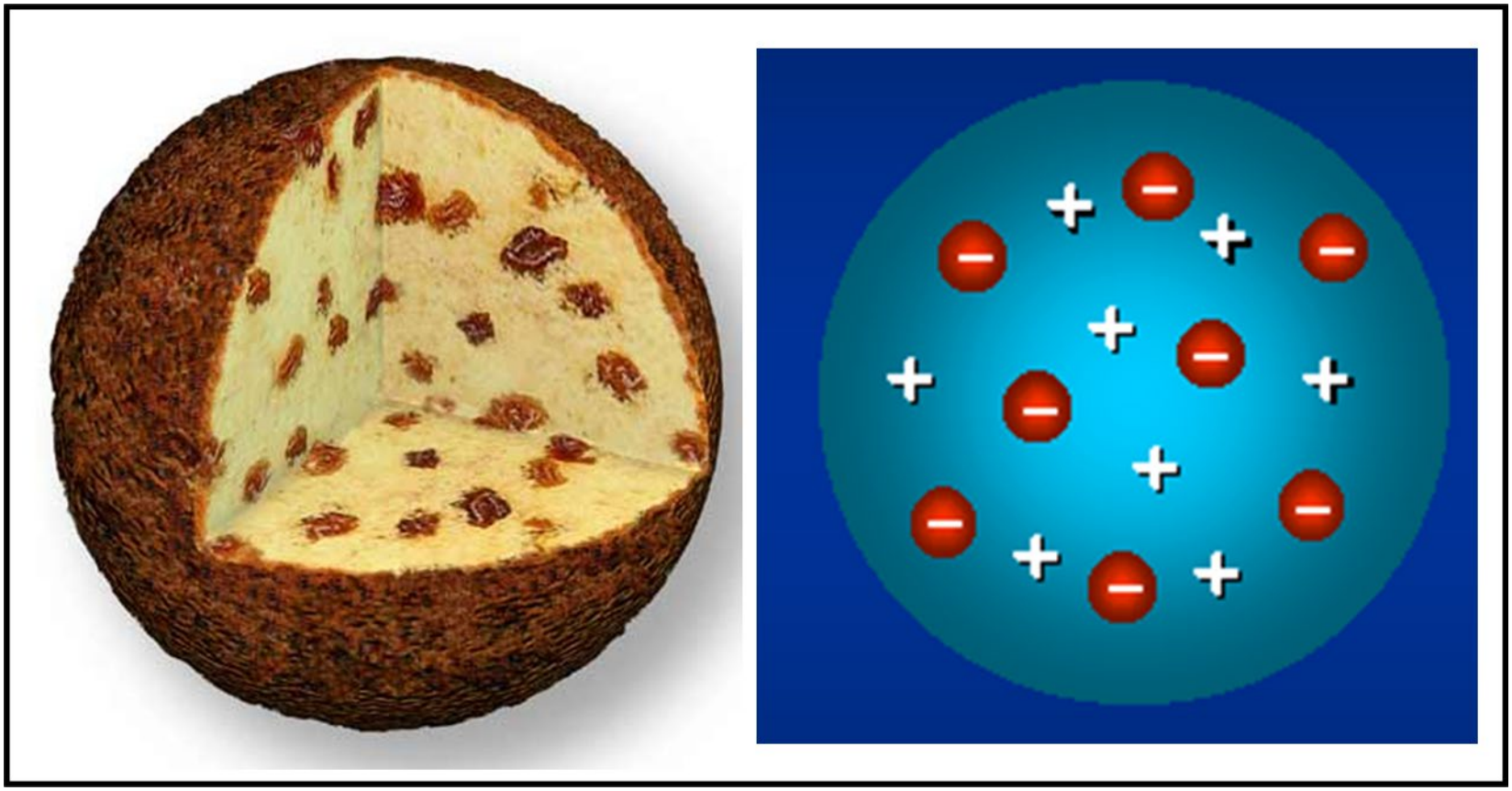
(1923 Premio Nobel in Fisica)

e^- carica = -1.60×10^{-19} C

(Thomson) carica/massa di un e^- = -1.76×10^{8} C/g

e^- massa = 9.10×10^{-28} g

Il modello atomico a “panettone” di J.J. Thomson



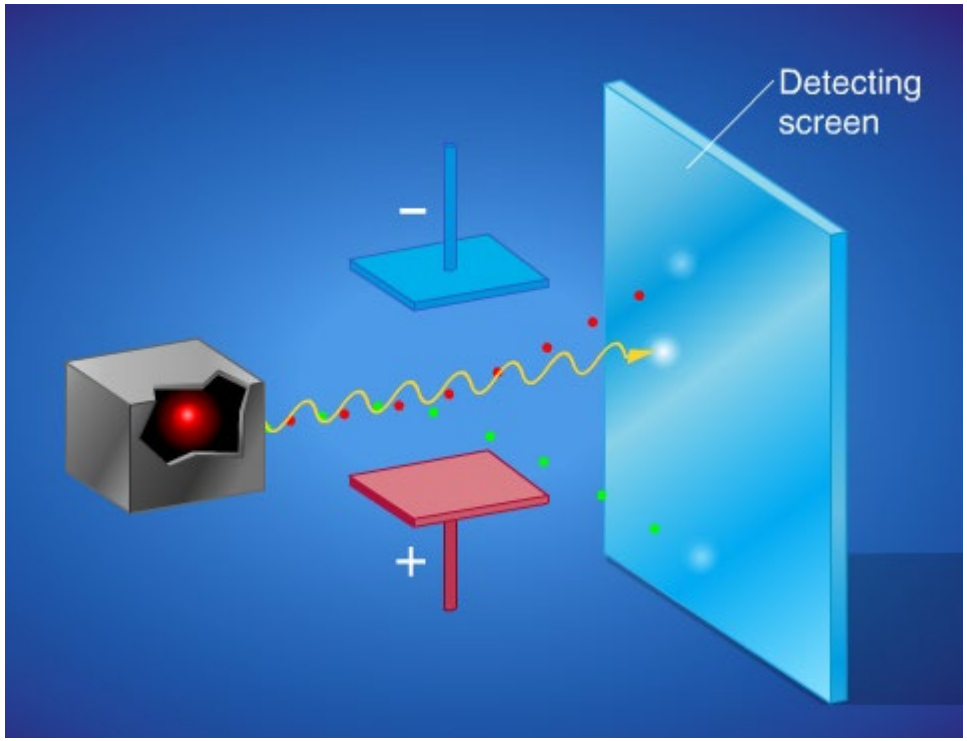
Modello atomico da perfezionare

Modello di Rutherford ⇨ incompatibile con le leggi "classiche" della meccanica e dell'elettromagnetismo in cui si inquadrano i fenomeni del mondo macroscopico

Necessità di interpretare gli spettri di emissione caratteristici degli atomi ed altri aspetti dell'interazione radiazioni-materia

N.B. Importanza dello studio dell'interazione tra radiazione elettromagnetica e materia per ottenere informazioni sulla struttura microscopica di quest'ultima e sulla sua composizione

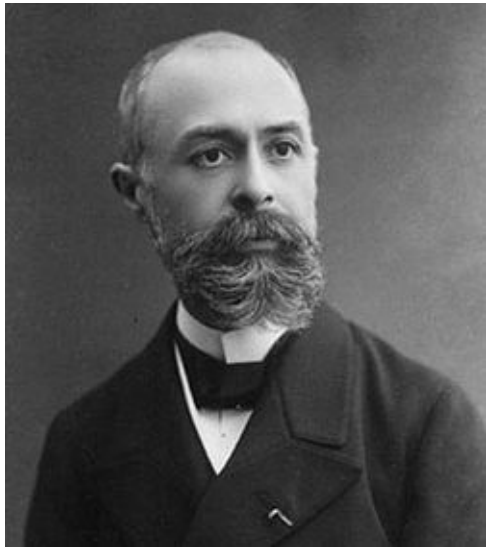
Radioattività



α particelle, ${}^{4}_{2}He^{2+}$

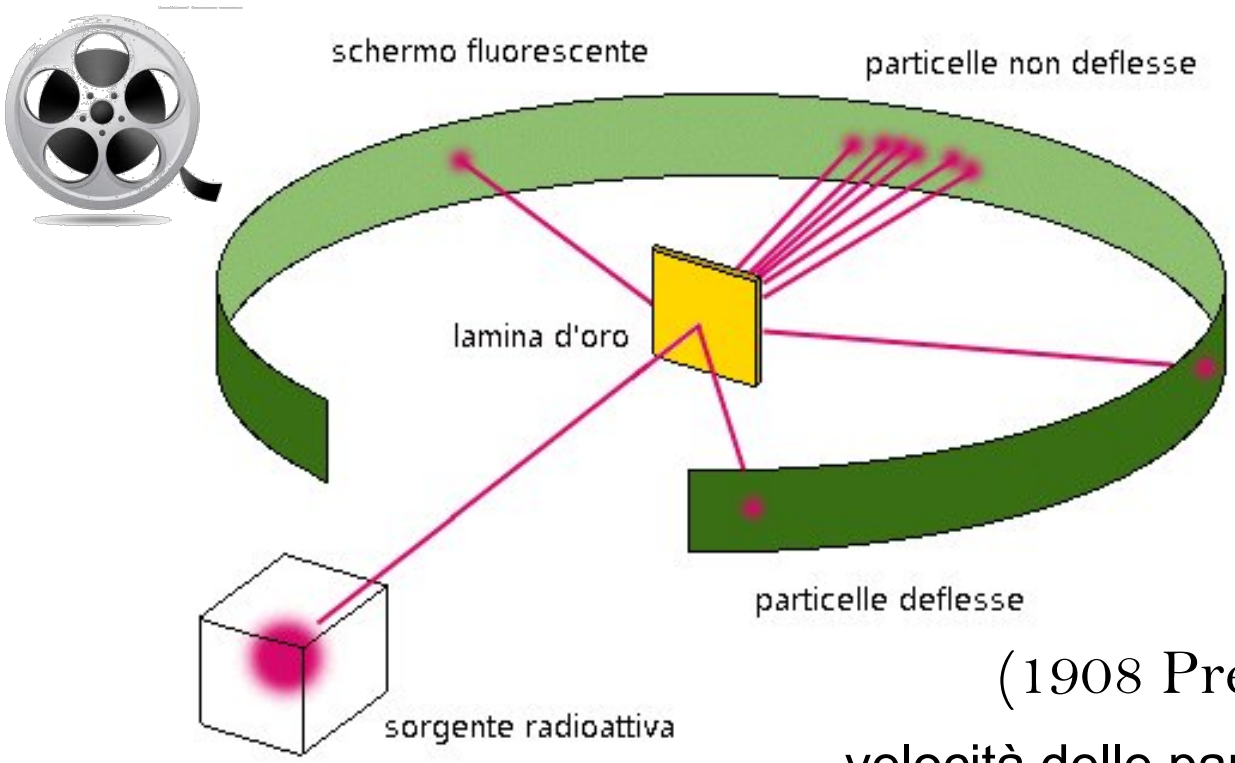
γ particelle

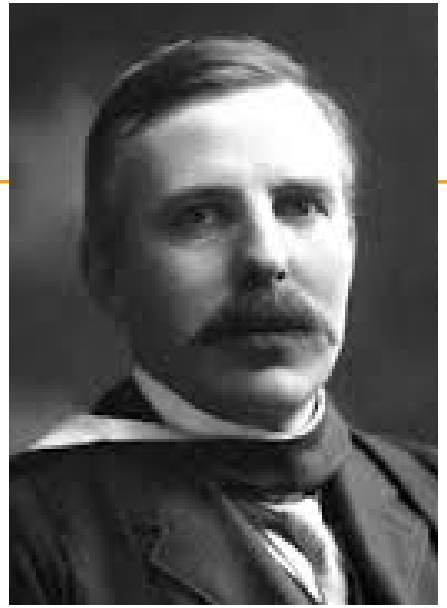
β particelle, e^{-}



Antoine Henri Becquerel
1852-1908, FR

L' esperimento di Rutherford





Ernest Rutherford
1871-1937, U.K.

(1908 Premio Nobel in Chimica)

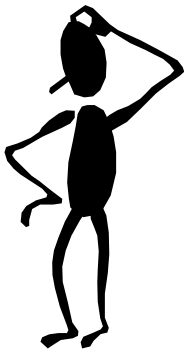
velocità delle particelle α ~ 1.4×10^7 m/s
(~5% velocità della luce)

1. La carica positiva dell'atomo è concentrata nel nucleo
2. Il protone (p) ha carica opposta (+) rispetto all'elettrone (-)
3. La massa di p è 1840 x massa di e^- (1.67×10^{-24} g)

Esperimento di Chadwick

(1935 Premio Nobel in Fisica)

1891-1974, U.K.



H atomi (1 p) He atomi (2 p)

massa He/massa H dovrebbe essere = 2

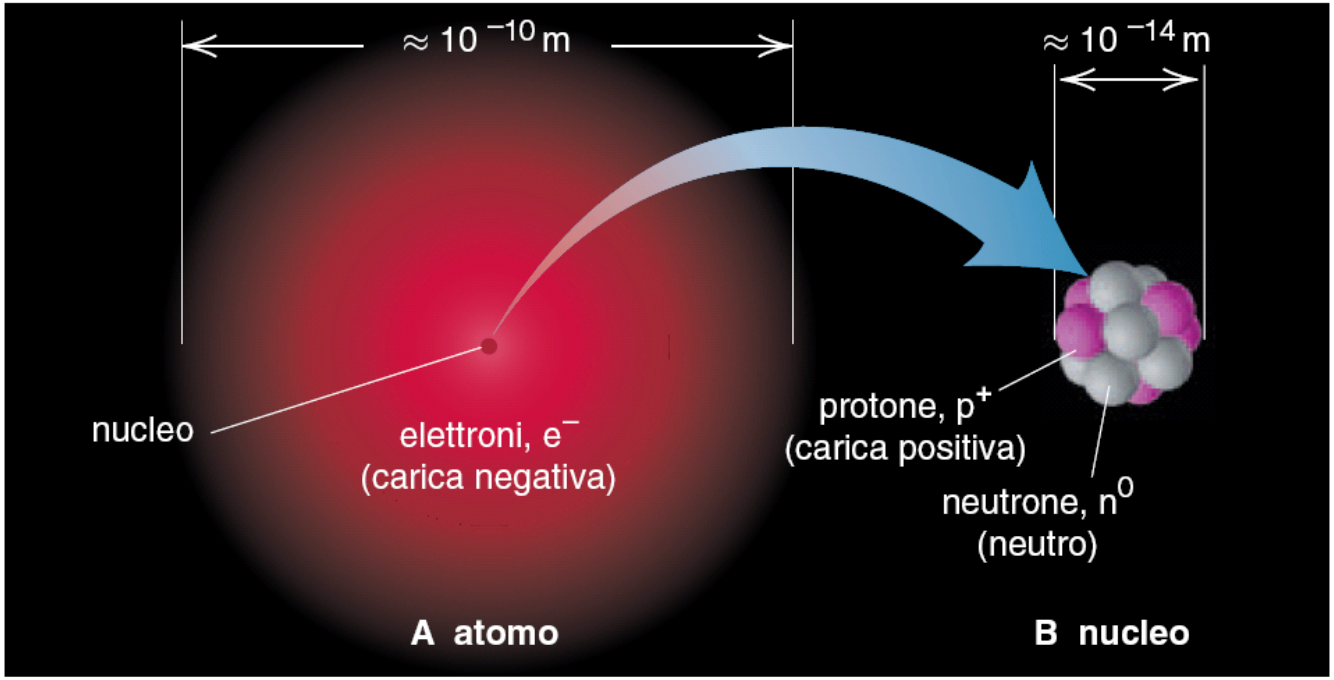
invece massa He/massa H = 4

$$\alpha + {}^{9}Be \longrightarrow {}^{1}n + {}^{12}C + \text{energia}$$

neutrone (n) è neutro (carica = 0)

massa n ~ massa p = 1.67×10^{-24} g

Evoluzione della teoria atomica



Il modello atomico di Rutherford

raggio atomico ~ 100 pm = 1 x 10^{-10} m

raggio nucleare ~ 5 x 10^{-3} pm = 5 x 10^{-15} m

Se l'atomo avesse le dimensioni di uno stadio, il volume del suo nucleo sarebbe confrontabile con quello di una piccola biglia

Nome (Simbolo)	Carica Relativa	Carica Assoluta (C)*	Massa Relativa (u)†	Massa Assoluta (g)	Posizione nell'atomo
Protone (p^+)	1+	$+1{,}60218 \times 10^{-19}$	1,00727	$1{,}67262 \times 10^{-24}$	Nucleo
Neutrone (n^0)	0	0	1,00866	$1{,}67493 \times 10^{-24}$	Nucleo
Elettrone (e^-)	1-	$-1{,}60218 \times 10^{-19}$	0,00054858	$9{,}10939 \times 10^{-28}$	All'esterno del nucleo

massa p ≈ massa n = 1840 x massa e^-

p e n sono a loro volta sono fatti da *quark* tenuti insieme da *gluoni*

	carica
Up-quark (u)	+ 2/3 e^-
Down-quark (d)	- 1/3 e^-

p = uud

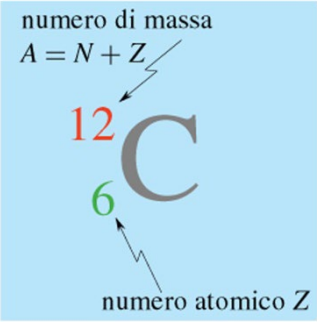
n = udd

Il numero atomico, il numero di massa e gli isotopi

numero atomico (**Z**) = numero di protoni nel nucleo

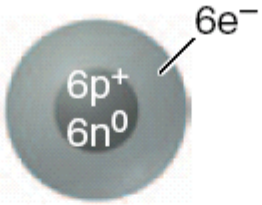
numero di massa (**A**) = numero di protoni + numero di neutroni

= numero atomico (Z) + numero di neutroni



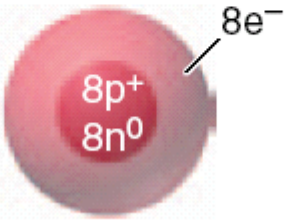
Numero di Massa → $^{A}_{Z}X$ ← Simbolo dell'elemento

Numero Atomico →



$^{12}_{6}C$

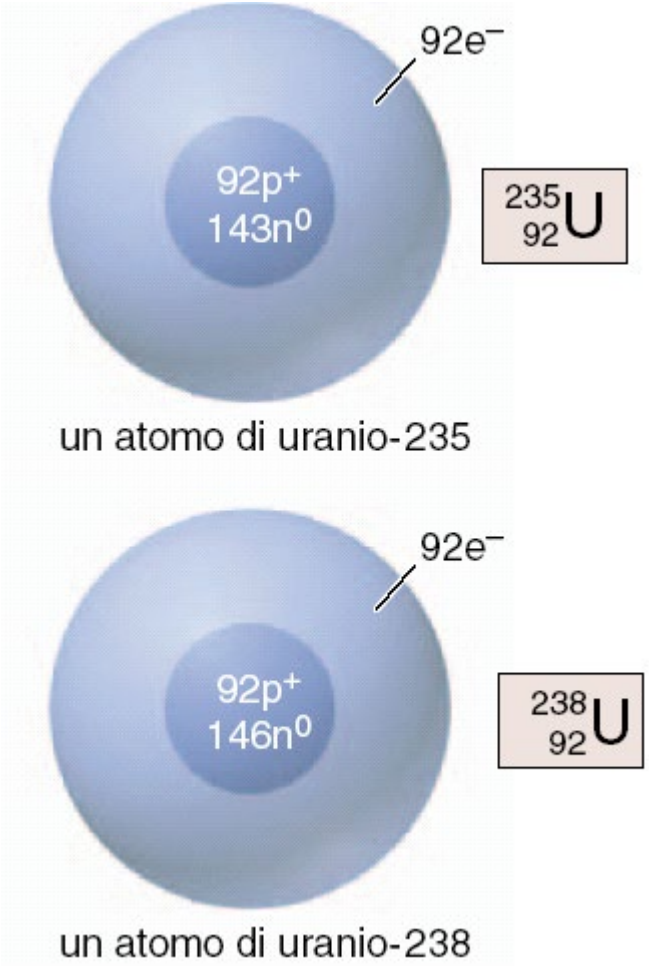
un atomo di carbonio -12



$^{16}_{8}O$

un atomo di ossigeno -16

Isotopi



Gli **isotopi** sono atomi di un elemento con lo stesso numero di ***protoni***, ma con diverso numero di ***neutroni***.

Gli isotopi hanno lo stesso numero atomico, ma diverso numero di massa.

Hai capito cos'è un isotopo?

Quanti protoni, neutroni, ed elettroni ci sono in $^{14}_{6}C$?

6 protoni, 8 (14 - 6) neutroni, 6 elettroni

Quanti protoni, neutroni, ed elettroni ci sono in $^{11}_{6}C$?

6 protoni, 5 (11 - 6) neutroni, 6 elettroni

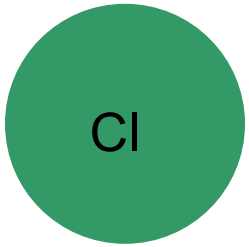
Uno ***ione*** è un atomo, o un gruppo di atomi, che presenta una carica positiva o negativa

catione – ione con una carica positiva
*Se un atomo neutro **perde** uno o più elettroni diventa un catione.*

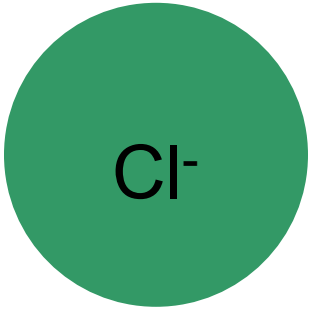
11 protoni
11 elettroni

11 protoni
10 elettroni

anione – uno ione con una carica negativa
*Se un atomo neutro **guadagna** uno o più elettroni diventa un anione.*



17 protoni
17 elettroni



17 protoni
18 elettroni

Uno ***ione monatomico*** è costituito da un singolo atomo: Na^+, Cl^-, Ca^{2+}, O^{2-}, Al^{3+}, N^{3-}

Hai capito cos'è uno ione?

Quanti protoni ed elettroni ci sono in $^{27}_{13}Al^{3+}$?

13 protoni, 10 **(13 – 3)** elettroni Al^{3+}

Quanti protoni ed elettroni ci sono in $^{78}_{34}Se^{2-}$?

34 protoni, 36 **(34 + 2)** elettroni Se^{2-}

Elenca il numero di protoni e di elettroni in ciascuno dei seguenti ioni comuni: Na^+, Ca^{2+}, Al^{3+}, Fe^{2+}, I^-, F^-, S^{2-}, O^{2-}, N^{3-}.

R = 0.082 L atm mol^{-1} K^{-1}
8.314 J mol^{-1} K^{-1}
***F* = 96485 C mol^{-1}**

1.0079 H 1																	4.0026 He 2
6.941 Li 3	9.0122 Be 4											10.811 B 5	12.011 C 6	14.007 N 7	15.999 O 8	18.998 F 9	20.180 Ne 10
22.990 Na 11	24.305 Mg 12											26.982 Al 13	28.086 Si 14	30.974 P 15	32.066 S 16	35.453 Cl 17	39.948 Ar 18
39.098 K 19	40.078 Ca 20	44.956 Sc 21	47.867 Ti 22	50.942 V 23	51.996 Cr 24	54.938 Mn 25	55.845 Fe 26	58.933 Co 27	58.693 Ni 28	63.546 Cu 29	65.39 Zn 30	69.723 Ga 31	72.61 Ge 32	74.922 As 33	78.96 Se 34	79.904 Br 35	83.80 Kr 36
85.468 Rb 37	87.62 Sr 38	88.906 Y 39	91.224 Zr 40	92.906 Nb 41	95.94 Mo 42	98.906 Tc 43	101.07 Ru 44	102.91 Rh 45	106.42 Pd 46	107.87 Ag 47	112.41 Cd 48	114.82 In 49	118.71 Sn 50	121.76 Sb 51	127.60 Te 52	126.90 I 53	131.29 Xe 54
132.91 Cs 55	137.33 Ba 56	138.91 La 57	178.49 Hf 72	180.95 Ta 73	183.84 W 74	186.21 Re 75	190.23 Os 76	192.22 Ir 77	195.08 Pt 78	196.97 Au 79	200.59 Hg 80	204.38 Tl 81	207.2 Pb 82	208.98 Bi 83	209.98 Po 84	209.99 At 85	222.02 Rn 86
223.02 Fr 87	226.03 Ra 88	227.03 Ac 89															

140.12 Ce 58	140.91 Pr 59	144.24 Nd 60	146.92 Pm 61	150.36 Sm 62	151.96 Eu 63	157.25 Gd 64	158.93 Tb 65	162.50 Dy 66	164.93 Ho 67	167.26 Er 68	168.93 Tm 69	173.04 Yb 70	174.97 Lu 71
232.04 Th 90	231.04 Pa 91	238.03 U 92	237.05 Np 93	239.05 Pu 94	241.06 Am 95	244.06 Cm 96	249.08 Bk 97	252.08 Cf 98	252.08 Es 99	257.10 Fm 100	258.10 Md 101	259.10 No 102	262.11 Lr 103

2.33

Ione	Na^+	Ca^{2+}	Al^{3+}	Fe^{2+}	I^-	F^-	S^{2-}	O^{2-}	N^{3-}
No. protoni	11	20	13	26	53	9	16	8	7
No. elettroni	10	18	10	24	54	10	18	10	10

L'isotopo di un elemento metallico ha numero di massa 65 e ha 35 neutroni nel nucleo. Il catione che deriva dall'isotopo ha 28 elettroni. Scrivi il simbolo di questo catione.

2.51 Il numero di protoni è = 65 − 35 = 30. L'elemento che contiene 30 protoni è lo zinco, Zn. Ci sono due elettroni meno dei protoni, quindi la carica del catione è +2. Il simbolo per questo catione è $\mathbf{Zn^{2+}}$.

R = 0.082 L atm mol^{-1} K^{-1}
8.314 J mol^{-1} K^{-1}
***F* = 96485 C mol^{-1}**

1.0079 H 1																	4.0026 He 2
6.941 Li 3	9.0122 Be 4											10.811 B 5	12.011 C 6	14.007 N 7	15.999 O 8	18.998 F 9	20.180 Ne 10
22.990 Na 11	24.305 Mg 12											26.982 Al 13	28.086 Si 14	30.974 P 15	32.066 S 16	35.453 Cl 17	39.948 Ar 18
39.098 K 19	40.078 Ca 20	44.956 Sc 21	47.867 Ti 22	50.942 V 23	51.996 Cr 24	54.938 Mn 25	55.845 Fe 26	58.933 Co 27	58.693 Ni 28	63.546 Cu 29	65.39 Zn 30	69.723 Ga 31	72.61 Ge 32	74.922 As 33	78.96 Se 34	79.904 Br 35	83.80 Kr 36
85.468 Rb 37	87.62 Sr 38	88.906 Y 39	91.224 Zr 40	92.906 Nb 41	95.94 Mo 42	98.906 Tc 43	101.07 Ru 44	102.91 Rh 45	106.42 Pd 46	107.87 Ag 47	112.41 Cd 48	114.82 In 49	118.71 Sn 50	121.76 Sb 51	127.60 Te 52	126.90 I 53	131.29 Xe 54
132.91 Cs 55	137.33 Ba 56	138.91 La 57	178.49 Hf 72	180.95 Ta 73	183.84 W 74	186.21 Re 75	190.23 Os 76	192.22 Ir 77	195.08 Pt 78	196.97 Au 79	200.59 Hg 80	204.38 Tl 81	207.2 Pb 82	208.98 Bi 83	209.98 Po 84	209.99 At 85	222.02 Rn 86
223.02 Fr 87	226.03 Ra 88	227.03 Ac 89															

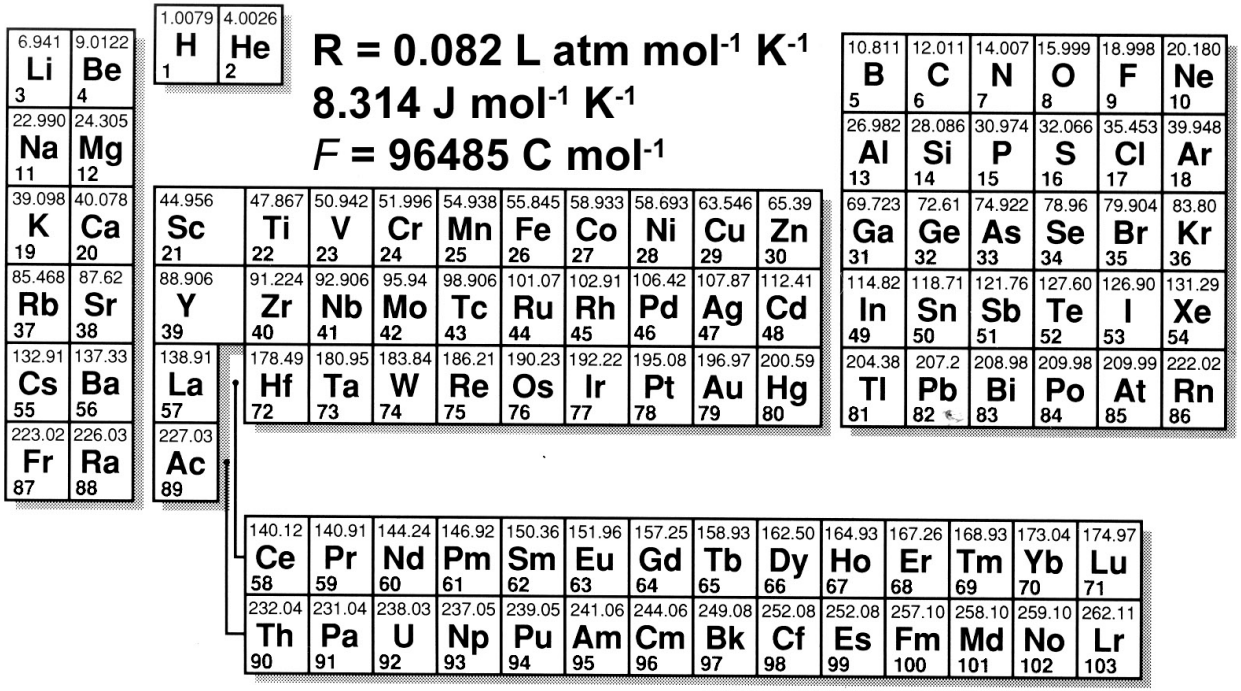
140.12 Ce 58	140.91 Pr 59	144.24 Nd 60	146.92 Pm 61	150.36 Sm 62	151.96 Eu 63	157.25 Gd 64	158.93 Tb 65	162.50 Dy 66	164.93 Ho 67	167.26 Er 68	168.93 Tm 69	173.04 Yb 70	174.97 Lu 71
232.04 Th 90	231.04 Pa 91	238.03 U 92	237.05 Np 93	239.05 Pu 94	241.06 Am 95	244.06 Cm 96	249.08 Bk 97	252.08 Cf 98	252.08 Es 99	257.10 Fm 100	258.10 Md 101	259.10 No 102	262.11 Lr 103

La seguente tabella indica il numero di elettroni, protoni e neutroni per atomi o ioni di un certo numero di elementi. (a) Quali di queste specie sono neutre? (b) Quali hanno carica negativa? (c) Quali hanno carica positiva? Qual è il simbolo convenzionale per ciascuna di queste specie?

Atomo o ione dell'elemento	**A**	**B**	**C**	**D**	**E**	**F**	**G**
Numero di elettroni	5	10	18	28	36	5	9
Numero di protoni	5	7	19	30	35	5	9
Numero di neutroni	5	7	20	36	46	6	10

Atomo o ione dell'elemento	B A	N^{3-} B	K^+ C	Zn^{2+} D	Br- E	B F	F G
Numero di elettroni	5	10	18	28	36	5	9
Numero di protoni	5	7	19	30	35	5	9= Z
Numero di neutroni	5	7	20	36	46	6	10
	0	3-	+	2+	-	0	0

R = 0.082 L atm mol^{-1} K^{-1}
8.314 J mol^{-1} K^{-1}
***F* = 96485 C mol^{-1}**



Identifica ciascuno dei seguenti elementi: (a) l'alogeno il cui anione contiene 36 elettroni, (b) il gas nobile radioattivo che possiede 86 protoni, (c) l'elemento del Gruppo 16 il cui anione contiene 36 elettroni, (d) il catione di un metallo alcalino che contiene 36 elettroni, (e) il catione del gruppo 14 che contiene 80 elettroni.

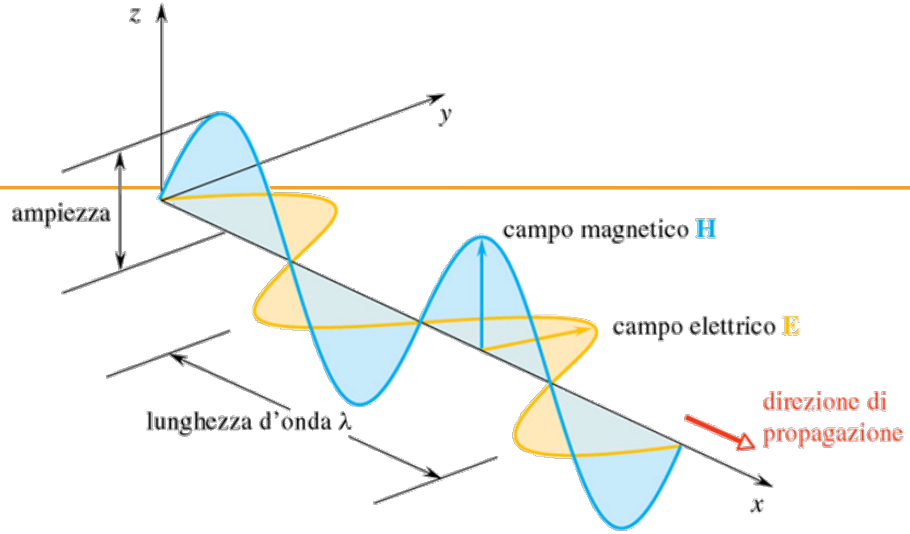
$R = 0.082$ L atm mol^{-1} K^{-1}
8.314 J mol^{-1} K^{-1}
$F = 96485$ C mol^{-1}

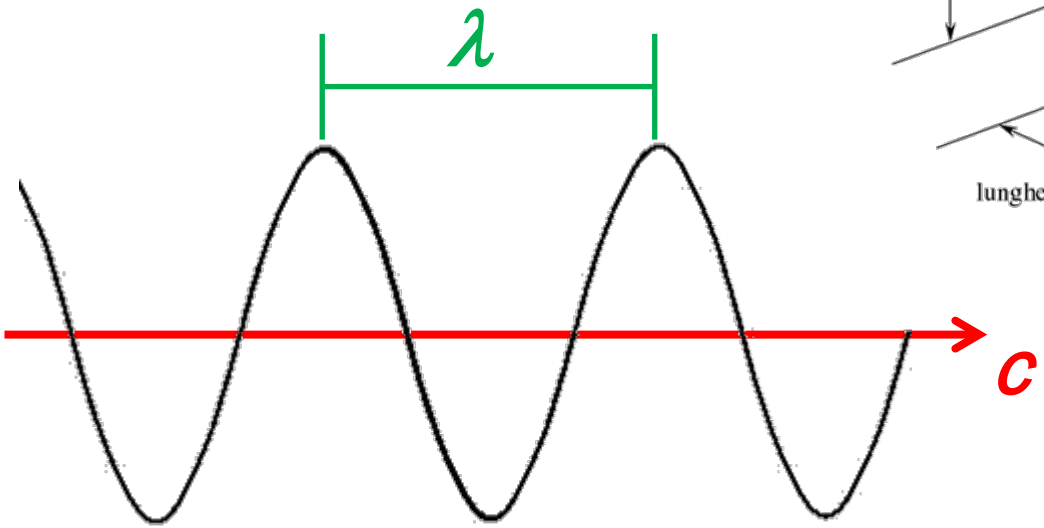
1.0079 H 1																	4.0026 He 2
6.941 Li 3	9.0122 Be 4											10.811 B 5	12.011 C 6	14.007 N 7	15.999 O 8	18.998 F 9	20.180 Ne 10
22.990 Na 11	24.305 Mg 12											26.982 Al 13	28.086 Si 14	30.974 P 15	32.066 S 16	35.453 Cl 17	39.948 Ar 18
39.098 K 19	40.078 Ca 20	44.956 Sc 21	47.867 Ti 22	50.942 V 23	51.996 Cr 24	54.938 Mn 25	55.845 Fe 26	58.933 Co 27	58.693 Ni 28	63.546 Cu 29	65.39 Zn 30	69.723 Ga 31	72.61 Ge 32	74.922 As 33	78.96 Se 34	79.904 Br 35	83.80 Kr 36
85.468 Rb 37	87.62 Sr 38	88.906 Y 39	91.224 Zr 40	92.906 Nb 41	95.94 Mo 42	98.906 Tc 43	101.07 Ru 44	102.91 Rh 45	106.42 Pd 46	107.87 Ag 47	112.41 Cd 48	114.82 In 49	118.71 Sn 50	121.76 Sb 51	127.60 Te 52	126.90 I 53	131.29 Xe 54
132.91 Cs 55	137.33 Ba 56	138.91 La 57	178.49 Hf 72	180.95 Ta 73	183.84 W 74	186.21 Re 75	190.23 Os 76	192.22 Ir 77	195.08 Pt 78	196.97 Au 79	200.59 Hg 80	204.38 Tl 81	207.2 Pb 82	208.98 Bi 83	209.98 Po 84	209.99 At 85	222.02 Rn 86
223.02 Fr 87	226.03 Ra 88	227.03 Ac 89															

140.12 Ce 58	140.91 Pr 59	144.24 Nd 60	146.92 Pm 61	150.36 Sm 62	151.96 Eu 63	157.25 Gd 64	158.93 Tb 65	162.50 Dy 66	164.93 Ho 67	167.26 Er 68	168.93 Tm 69	173.04 Yb 70	174.97 Lu 71
232.04 Th 90	231.04 Pa 91	238.03 U 92	237.05 Np 93	239.05 Pu 94	241.06 Am 95	244.06 Cm 96	249.08 Bk 97	252.08 Cf 98	252.08 Es 99	257.10 Fm 100	258.10 Md 101	259.10 No 102	262.11 Lr 103

Luce come onda

Radiazione elettromagnetica





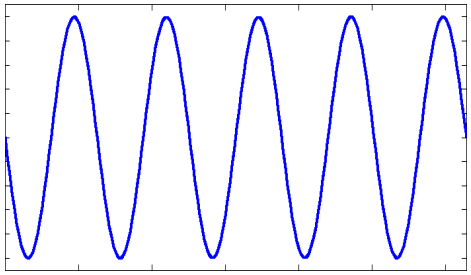
c: *velocità*

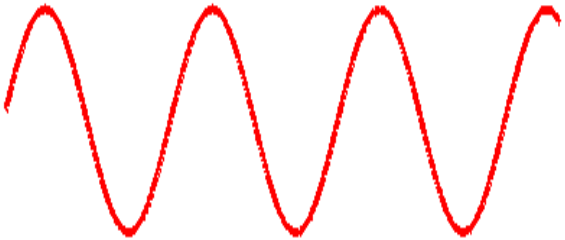
$c = 3\times 10^8$ m/s

λ: *lunghezza*

ν : *frequenza*

$\lambda \times \nu = c$

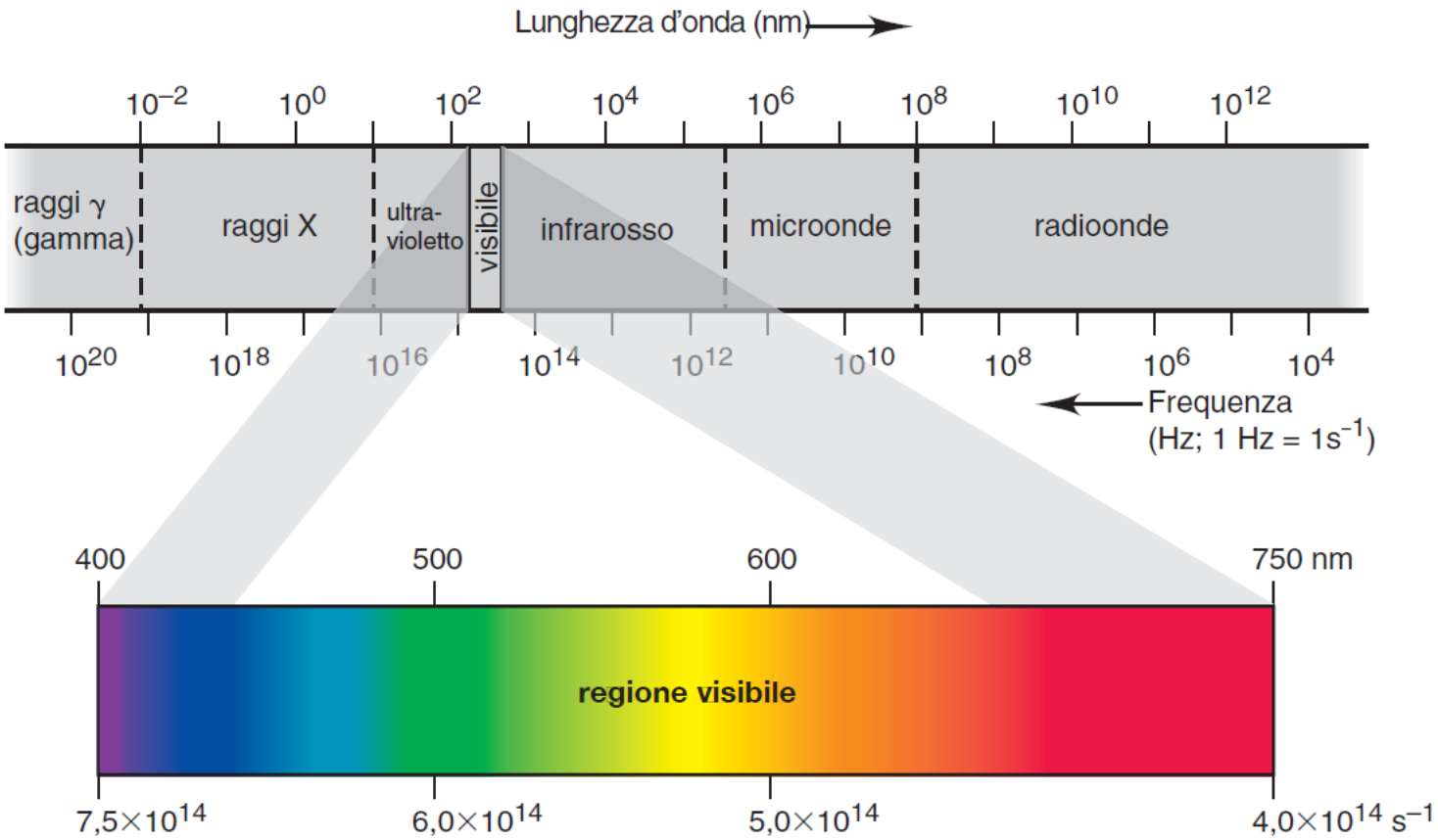


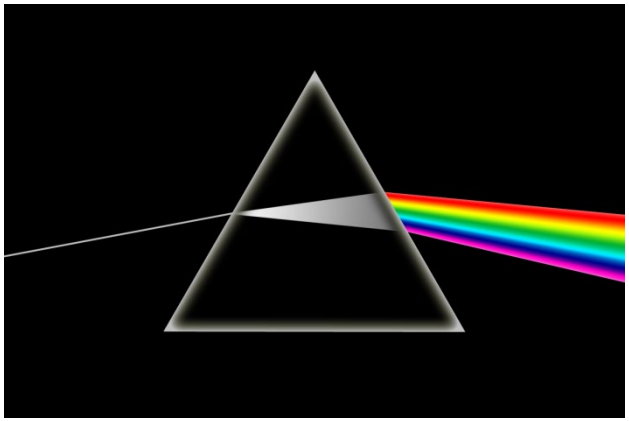


$\lambda = 400$ nm

$\lambda = 700$ nm

Regioni dello spettro elettromagnetico

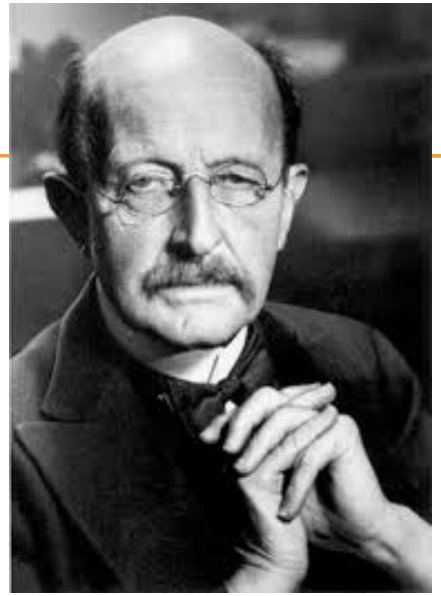




Diffrazione

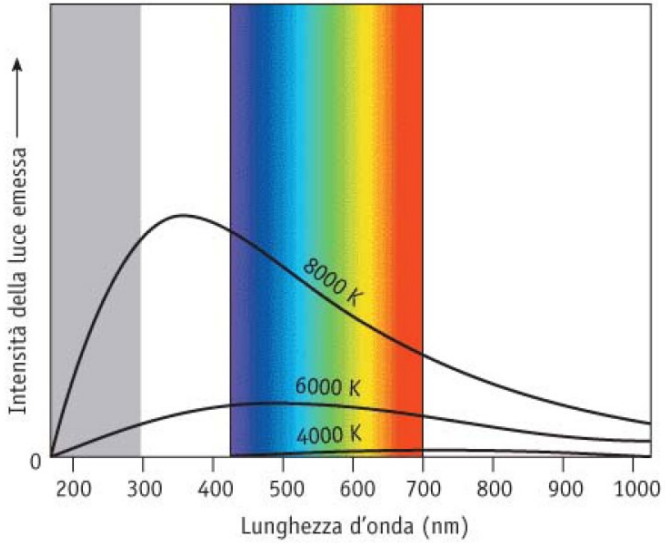
La ***diffrazione*** è un fenomeno associato alla deviazione della traiettoria di propagazione delle onde quando queste incontrano un ostacolo sul loro cammino

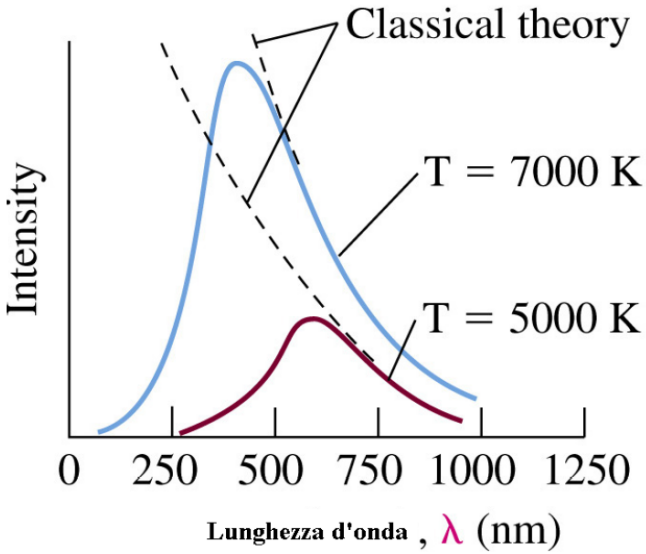
#1 “Il problema del Corpo Nero”



1858-1947, DE

Un solido scaldato ad alte temperature diventa rovente ed emette luce nel visibile, inizialmente rossa e poi bianca a temperature maggiori





Planck 1918 – Premio Nobel

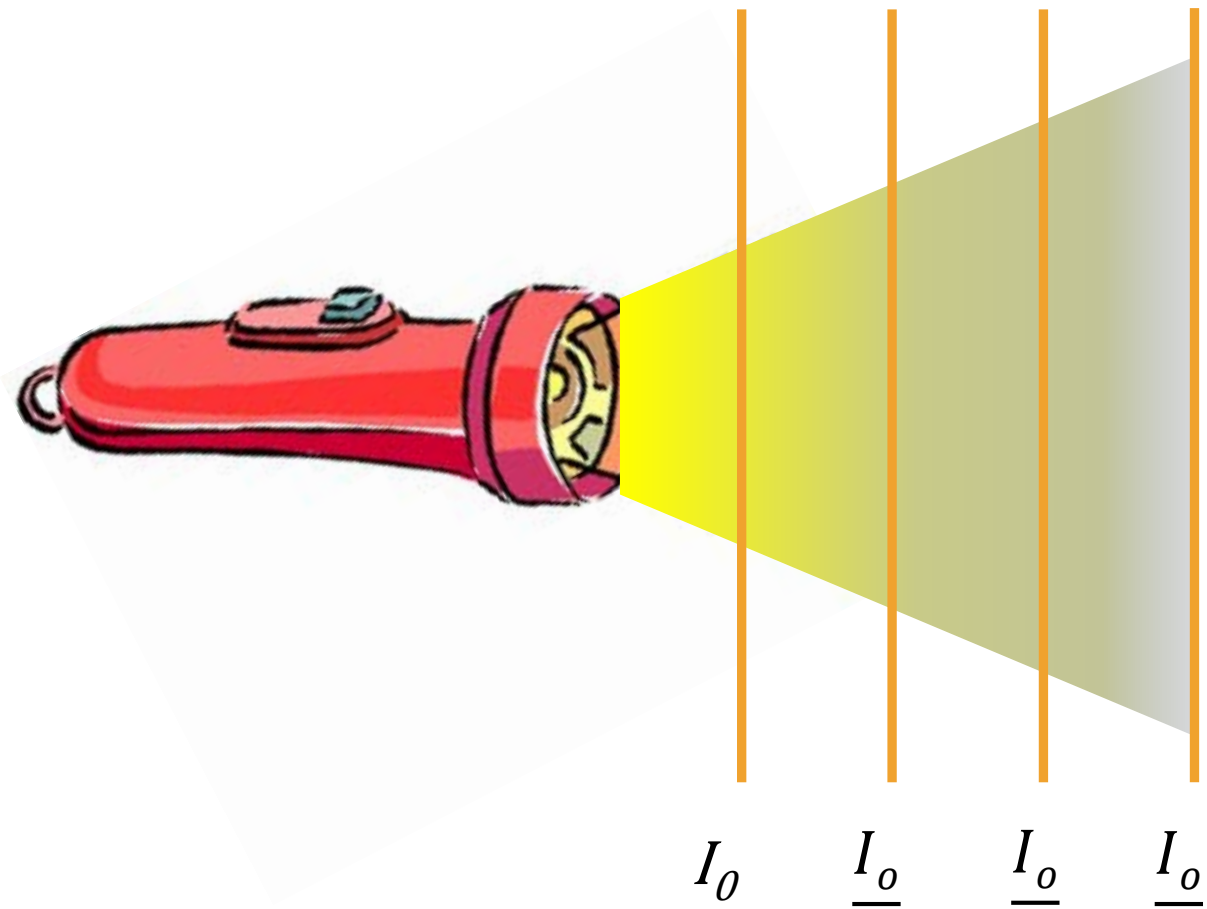
L’energia (luce) è emessa o assorbita sotto forma di unità discrete (quanto).

$$E = n\,h\,\nu$$

Costante di Planck (h)

$h = 6.63 \times 10^{-34}$ J•s

Intensità della luce. Natura corpuscolare della luce.

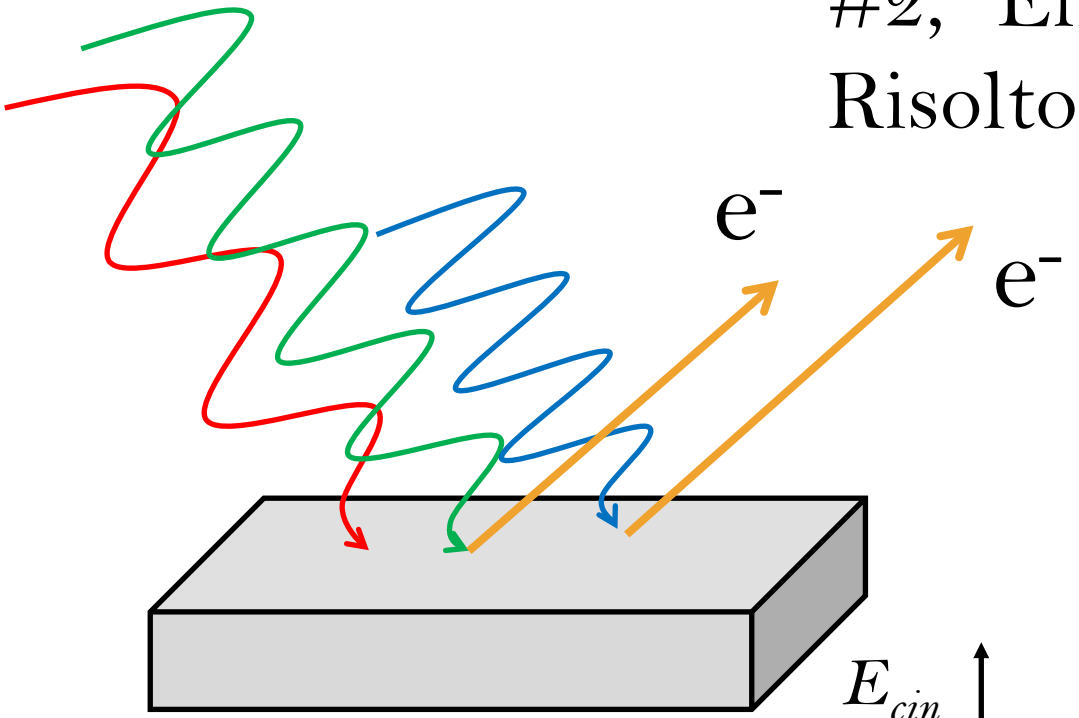


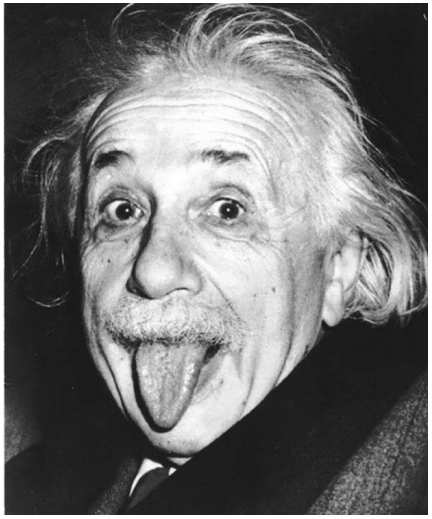
I_0 $\frac{I_o}{2}$ $\frac{I_o}{4}$ $\frac{I_o}{8}$

$\ldots$ fotone

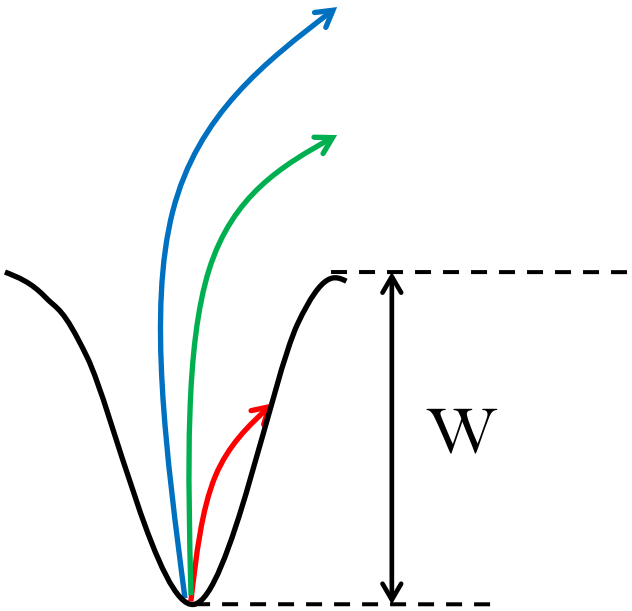
$$E_f = h \times \nu$$

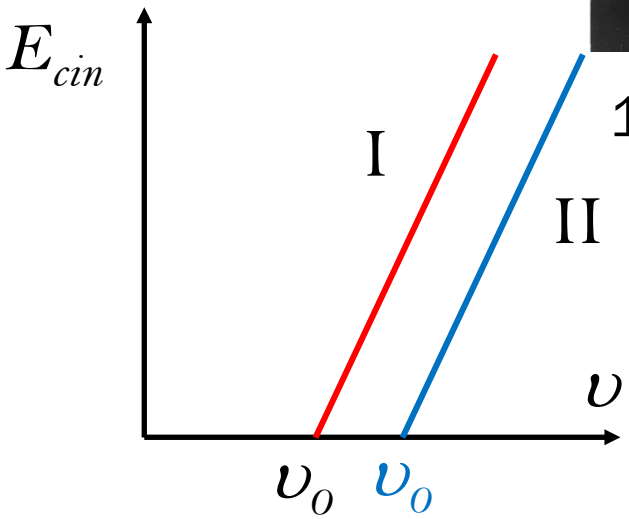
#2, "Effetto Fotoelettrico"
Risolto da Einstein nel 1905





1879-1955, U.S.





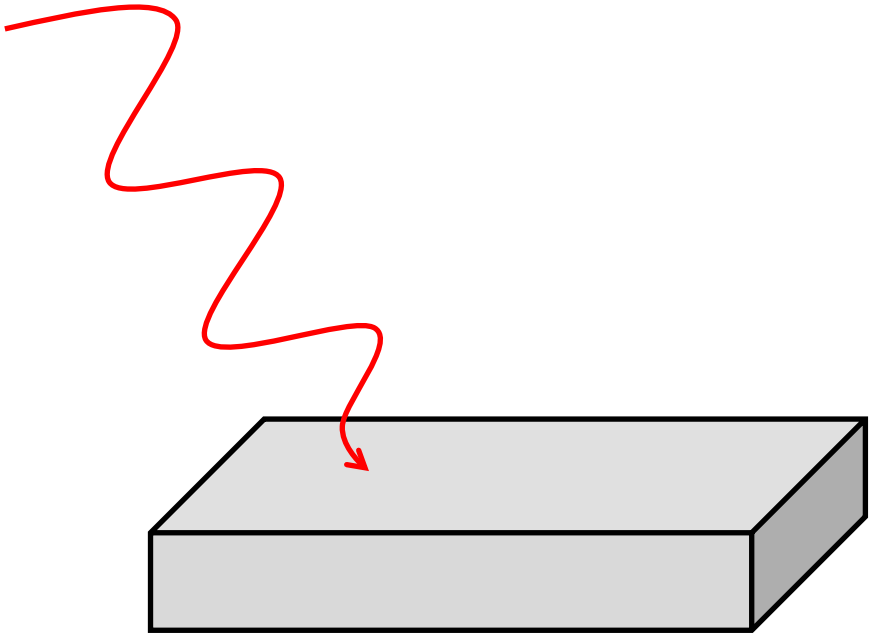
$$E_f = h \times \nu$$

$$E_{cin} = h\nu - W = h\nu - h\nu_0$$

Esponendo un pezzo di metallo alla luce monocromatica non si verifica effetto fotoelettrico. Cosa bisogna fare per osservarlo?

$$E_f = h \times \nu = h \times c/\lambda$$

$\uparrow$ E = $\downarrow$ λ

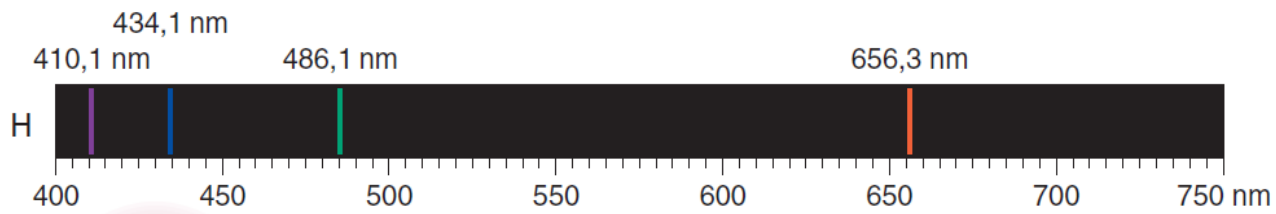


a) Aumentare I

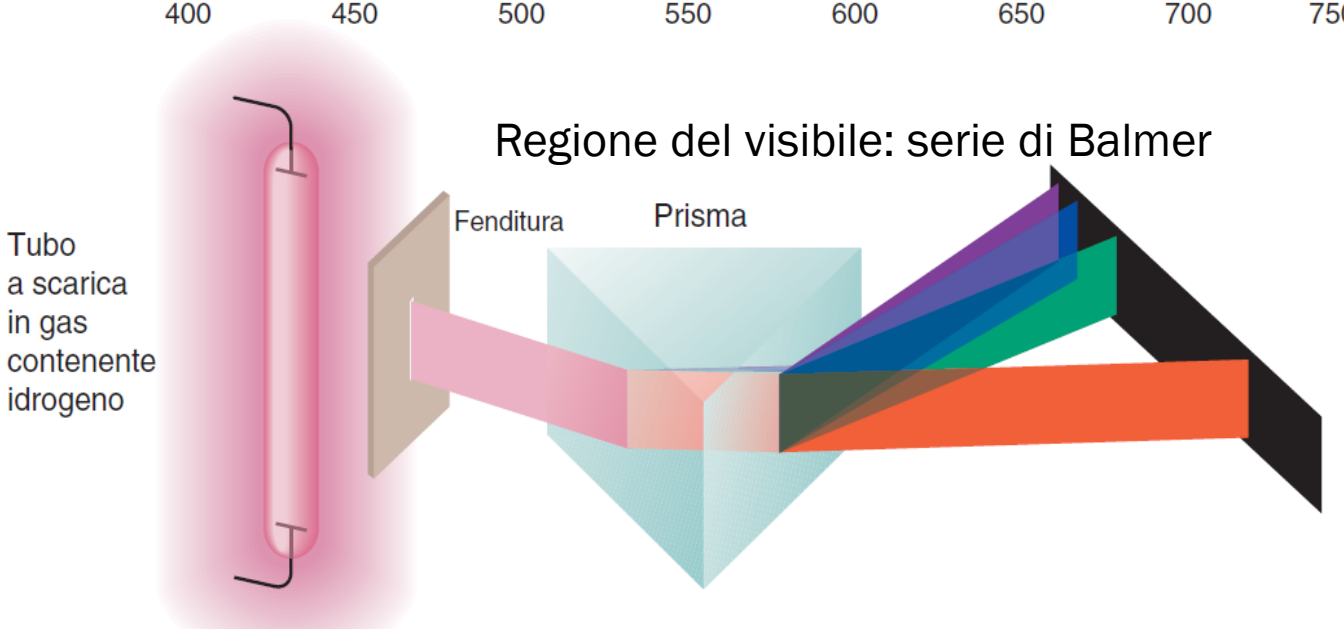
b) Aumentare E

c) Diminuire λ

Spettro di emissione dell'atomo di idrogeno



Regione del visibile: serie di Balmer



Spettro discontinuo, formato da serie di righe spettrali ben distinte

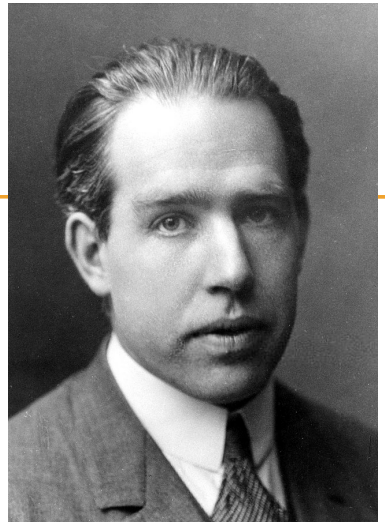
$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

n>2

R = costante = $1.0974 \times 10^7\ m^{-1}$

Equazione di Balmer (atomo di idrogeno): correlazione dei dati sperimentali con un'equazione matematica

Il modello atomico di Bohr (1913) – atomo di idrogeno



L'elettrone descrive un'orbita circolare attorno al nucleo secondo le leggi della meccanica classica

Viene aggiunta una condizione restrittiva, che tiene conto della teoria di Planck sulla quantizzazione dell'energia

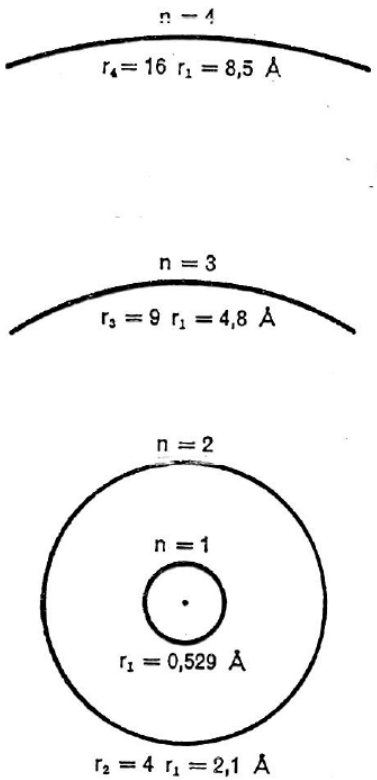
I raggi delle orbite circolari possibili per l'elettrone dell'atomo di idrogeno sono quantizzati

$$r_n = n^2 \cdot r_1$$

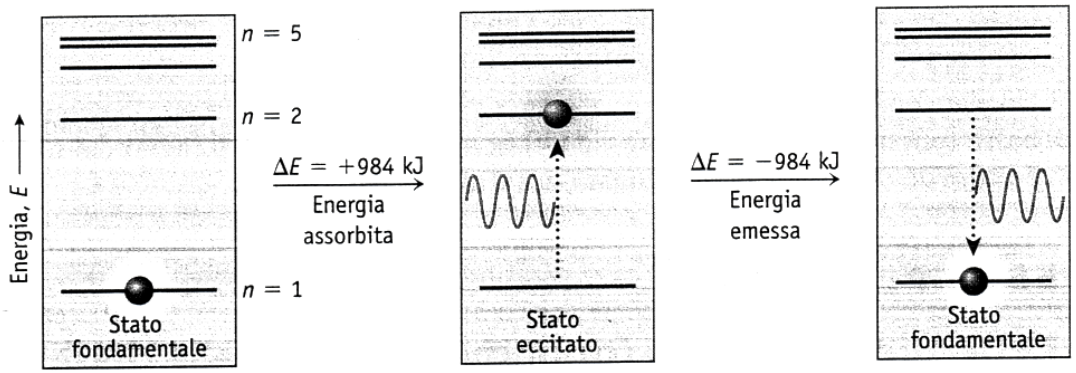
$$r_1 = 0.53 \text{ Å}$$

n = numero intero = 1,2,3,....

Numero quantico di Bohr

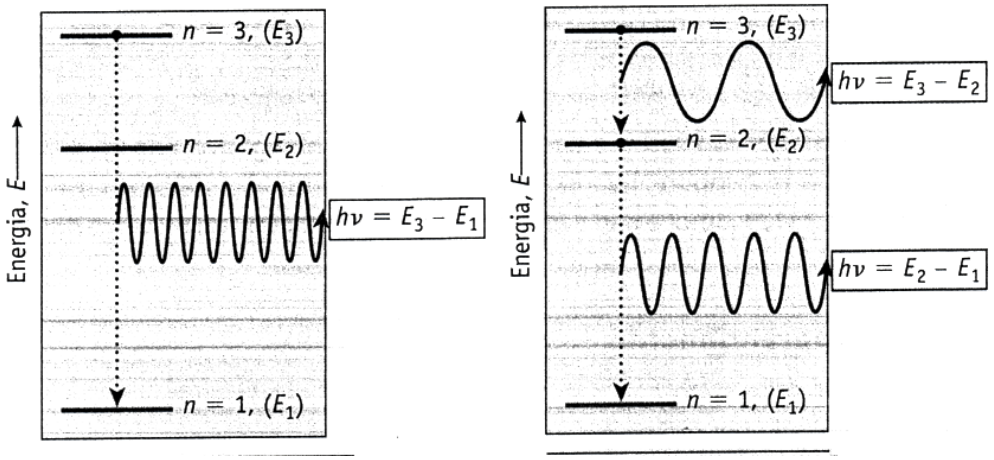


Il modello atomico di Bohr (1913) – atomo di idrogeno



Meccanismo all'origine dello spettro di emissione

Lo spostamento di un elettrone da un livello energetico ad un altro comporta assorbimento (se l'elettrone si sposta su un livello superiore) o emissione (se l'elettrone si sposta su un livello inferiore) di energia

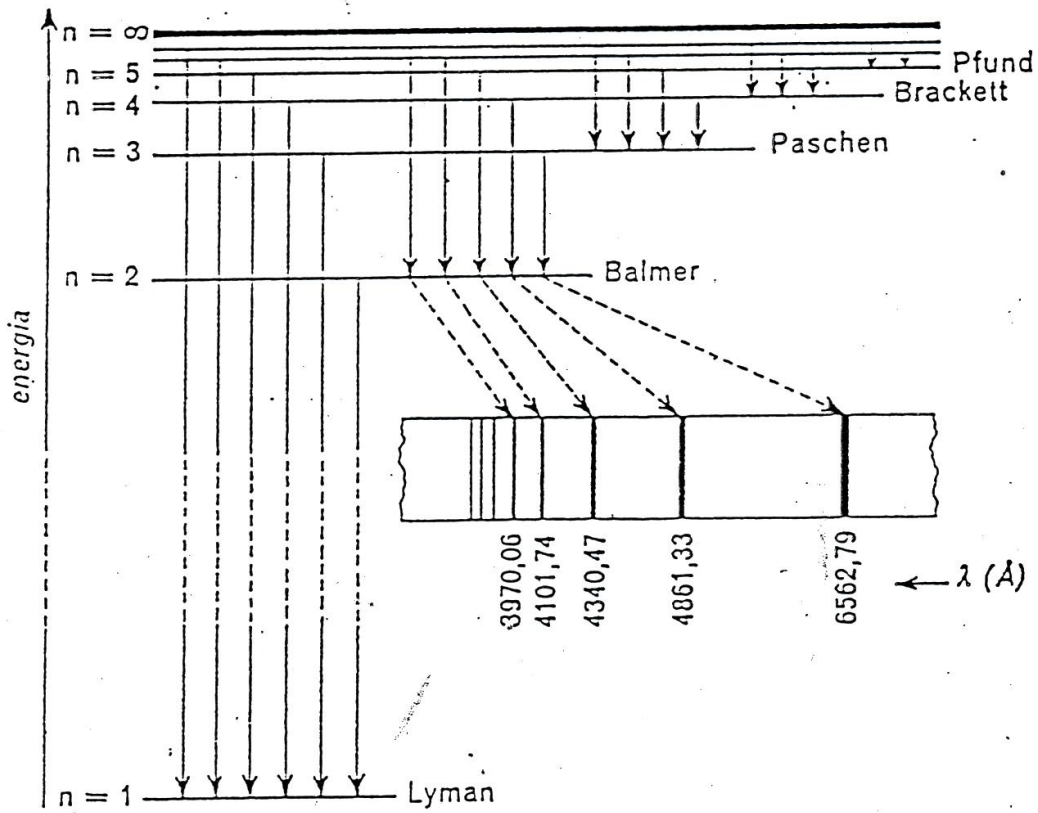


Il modello atomico di Bohr (1913) – atomo di idrogeno

Serie di Lyman
(regione dell'ultravioletto)
⇨ transizioni verso il livello corrispondente a n = 1

Serie di Balmer
(regione del visibile)
⇨ transizioni da livelli con n> 2 verso il livello corrispondente a n = 2

Serie di Paschen
(regione dell'infrarosso)
⇨ transizioni da livelli con n>3 verso il livello corrispondente a n = 3

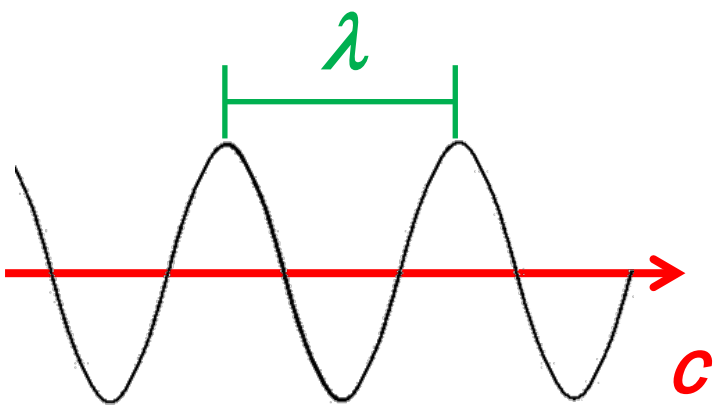


Il modello atomico di Bohr permette di interpretare lo spettro di emissione dell'atomo di idrogeno, ma non quelli di atomi con più elettroni

Luce. Dualismo onda – particella (Relazione di De Broglie)

1892-1987, FR

Onda, *lunghezza*



Particella, *quantità di moto*

$E = mc^2 \qquad E_f = h \times \nu$

$h\nu = mc^2$

$h\nu/c = mc = p$

$\boxed{p = h/\lambda}$

Particella	*De Broglie, λ* (nm)
Fotone (giallo)	~ 600
e^- (υ ~10^5 m/s)	~ 6
Na (80 K, υ ~ 300 m/s)	~ 0.06
Pallina da baseball (170g, υ ~ 40 m/s)	~ 6×10^{-26}

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

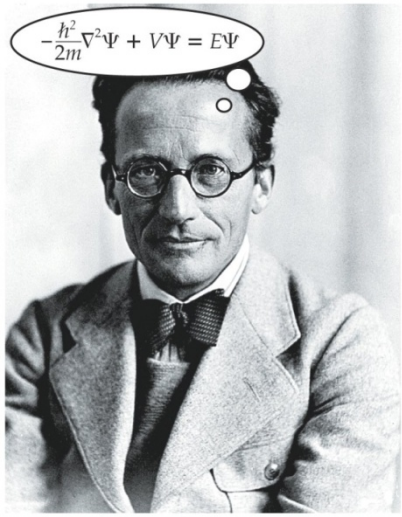
Relazione di de Broglie
⇨ è possibile descrivere un elettrone come un'onda
Principio di Heisenberg
⇨ non si può conoscere con precisione la traiettoria di una particella elementare

Teoria del modello atomico sviluppata da Erwin Schrödinger (1926)

Teoria quanto-meccanica
o
Meccanica ondulatoria

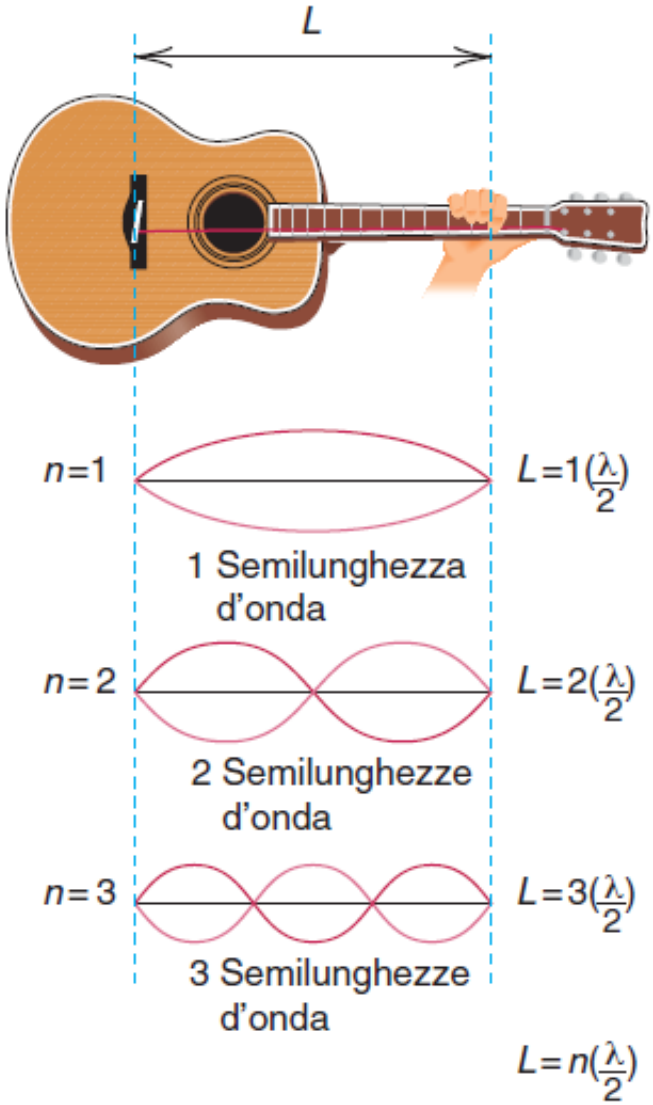
Comportamento di un elettrone in un atomo

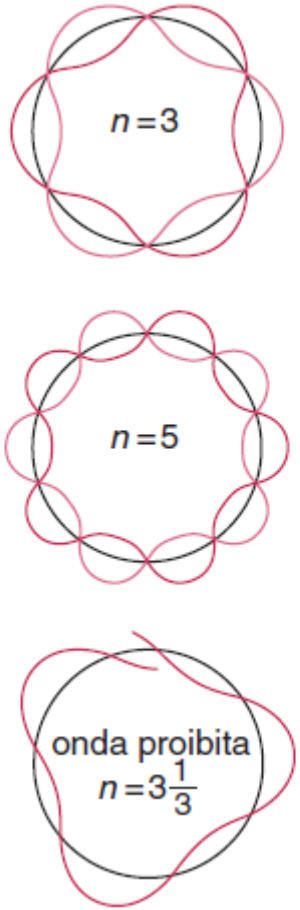
→ Onda stazionaria



Erwin Schrödinger
1887-1961, AT

Elettrone come onda stazionaria attorno all`atomo





Onda stazionaria

Una corda i cui estremi siano fissati può vibrare solo con determinate lunghezze d'onda:

le sue vibrazioni sono quantizzate

I punti ad ampiezza nulla (chiamati "nodi") sono i punti della corda che rimangono fissi durante la vibrazione

Energie degli orbitali.

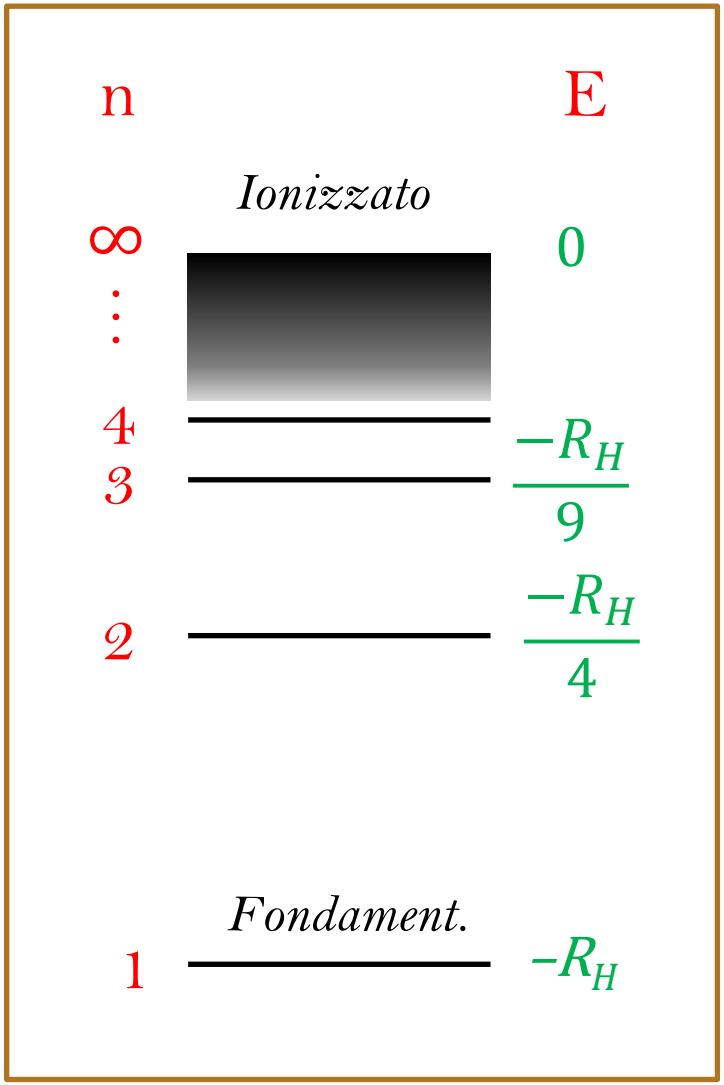
Sistemi con un elettrone, monodimensionali

$$E_n = \frac{-Zeff^2}{n^2} \times R_H$$

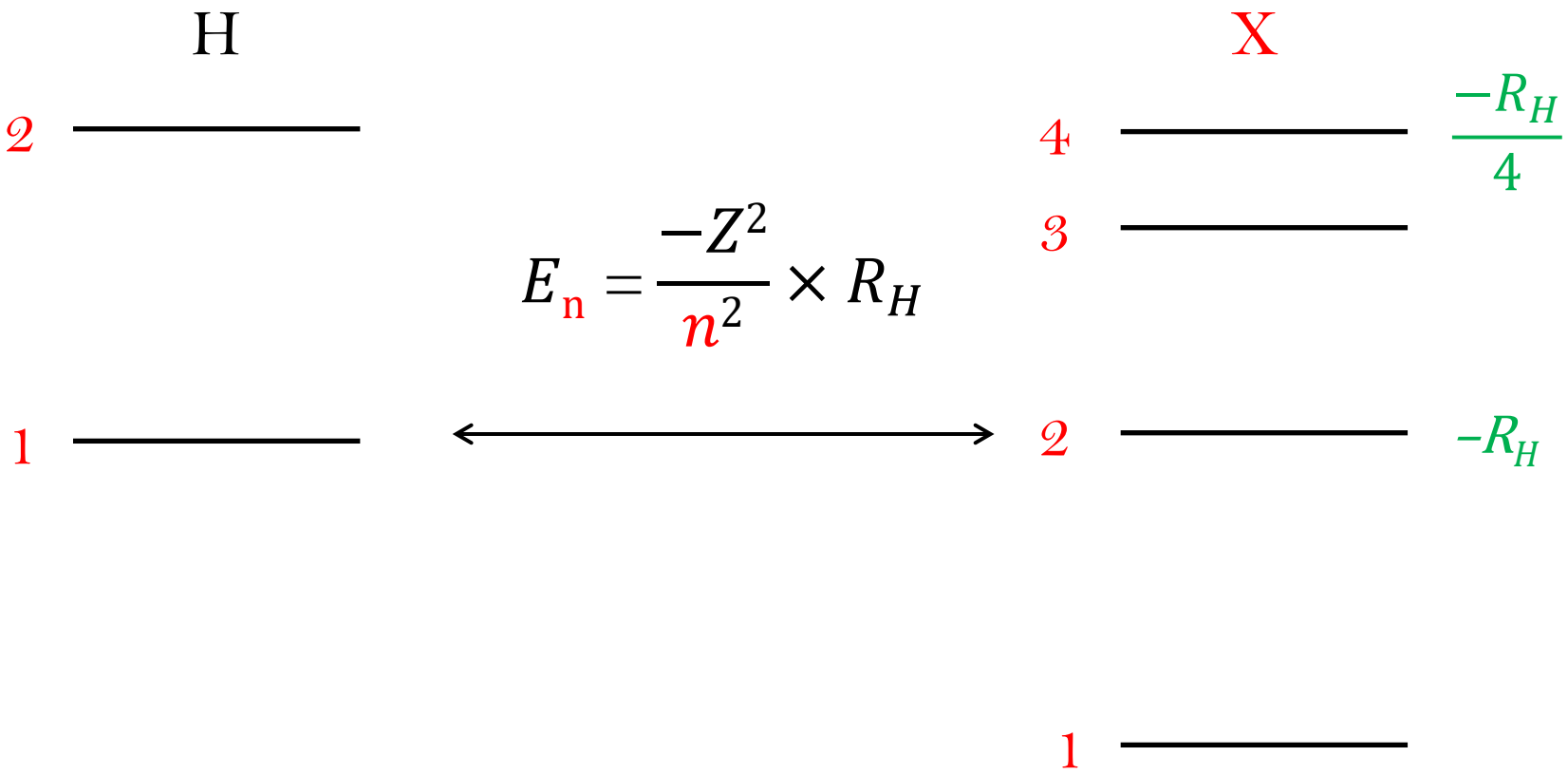
$$E_t = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}$$

n – *numero quantico principale*,
$n = 1, 2, 3, 4 \ldots.$
R_H – *costante di Riedberg*,
Z_{eff} – *carica effettiva*

$R_H = 2.18 \times 10^{-18}\ J = 3.29 \times 10^{15}\ Hz$
$N_A \cdot R_H = 1312$ kJ/mol



A quale ione corrisponde il diagramma X?



$$E_n = \frac{-Z^2}{n^2} \times R_H$$

a) H^+

b) He^+

c) Li^{2+}

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

Equazione di *Schrödinger* per un'onda monodimensionale

$\psi(x)$ – onda monodimensionale

$$\underbrace{\frac{-h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}}_{\text{energia cinetica}} + \underbrace{V(x)\,\psi(x)}_{\text{energia potenziale}} = E_t\,\psi(x)$$

$$H\,\psi(x) = E_t\,\psi(x)$$

Solo alcune onde possono essere associate ad un elettrone in un atomo

Le soluzioni dell'equazione d'onda applicata all'elettrone (equazione di Schrödinger) sono dette "funzioni d'onda", "funzioni orbitali" o "orbitali" e indicate con la lettera ψ

Nel caso dell'elettrone occorrerà risolvere equazioni in cui la funzione d'onda è tridimensionale: $\psi(x,y,z)$

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria
Consideriamo inizialmente l'atomo di idrogeno

Solo determinate funzioni d'onda sono soluzioni dell'equazione di Schrödinger

A ciascuna di esse è associato un valore dell'energia

L'energia dell'elettrone nell'atomo è quantizzata

Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger per un elettrone nello spazio tridimensionale dipendono da parametri numerici:

$$\psi = \psi(n,\ \ell,\ m_\ell)$$

- Funzione d'onda
- Funzione orbitale
- Orbitale

$n,\ \ell,\ m_\ell$ = numeri quantici

I loro valori sono interdipendenti

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

Una funzione orbitale è definita univocamente da una terna di numeri quantici

$$\psi = \psi(n,\ \ell,\ m_\ell)$$

n ⇨ numero quantico principale

⇨ può assumere tutti i valori interi positivi

⇨ n **= 1,2,3,…**

ℓ ⇨ numero quantico del momento angolare

⇨ può assumere tutti i valori interi positivi da 0 a n-1

⇨ ℓ **= 0,1,2,3,…, n-1**

⇨ n valori possibili per ℓ

m_ℓ ⇨ numero quantico magnetico

⇨ può assumere tutti i valori interi positivi e negativi - ℓ a + ℓ

⇨ m_ℓ **= 0,±1, ±2, ±3, … , ±** ℓ

⇨ 2 ℓ + 1 valori possibili per m_ℓ

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

Esempi di funzioni orbitali con diversi valori dei numeri quantici

Numero quantico principale	Numero quantico del momento angolare	Numero quantico magnetico	Orbitale
$n = 1$	$\ell = 0$	$m_\ell = 0$	Ψ_{100}
$n = 2$	$\ell = 0$	$m_\ell = 0$	Ψ_{200}
$n = 2$	$\ell = 1$	$m_\ell = +1$	Ψ_{211}
$n = 2$	$\ell = 1$	$m_\ell = 0$	Ψ_{210}
$n = 2$	$\ell = 1$	$m_\ell = -1$	Ψ_{21-1}

A ciascun orbitale corrisponde un valore ben definito di energia (E)

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

Modo più diffuso di indicare gli orbitali:

1) Si indicano solo i primi due numeri quantici (dai quali dipende l'energia in assenza di campo magnetico)

2) Il numero quantico ℓ è indicato con una lettera secondo lo schema seguente

Valore di ℓ	0	1	2	3
	↓	↓	↓	↓
Simbolo usato	**s**	**p**	**d**	**f**

3) Si sottintende il simbolo ψ

Esempio: $\psi_{200} \rightarrow \psi_{20} \rightarrow \psi_{2s} \rightarrow 2s$

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

$n = 1$	$\ell = 0$	$m_\ell = 0$	ψ_{100}	$\rightarrow \psi_{10} \rightarrow$ 1s
$n = 2$	$\ell = 0$	$m_\ell = 0$	ψ_{200}	$\rightarrow \psi_{20} \rightarrow$ 2s
	$\ell = 1$	$m_\ell = +1$	ψ_{211}	$\rightarrow \psi_{21} \rightarrow$ 2p
		$m_\ell = 0$	ψ_{210}	
		$m_\ell = -1$	ψ_{21-1}	3 orbitali degeneri
$n = 3$	$\ell = 0$	$m_\ell = 0$	ψ_{300}	$\rightarrow \psi_{30} \rightarrow$ 3s
	$\ell = 1$	$m_\ell = +1$	ψ_{311}	$\rightarrow \psi_{31} \rightarrow$ 3p
		$m_\ell = 0$	ψ_{310}	
		$m_\ell = -1$	ψ_{31-1}	3 orbitali degeneri
	$\ell = 2$	$m_\ell = +2$	ψ_{322}	$\rightarrow \psi_{32} \rightarrow$ 3d
		$m_\ell = +1$	ψ_{321}	
		$m_\ell = 0$	ψ_{320}	5 orbitali degeneri
		$m_\ell = -1$	ψ_{32-1}	
		$m_\ell = -2$	ψ_{32-2}	

Orbitali degeneri = orbitali a cui è associata la stessa energia

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

Significato fisico delle funzioni d'onda

Il valore della funzione d'onda in un punto dello spazio, $\psi(x,y,z)$, corrisponde all'ampiezza dell'onda associata all'elettrone in quel punto
(può essere positiva o negativa)

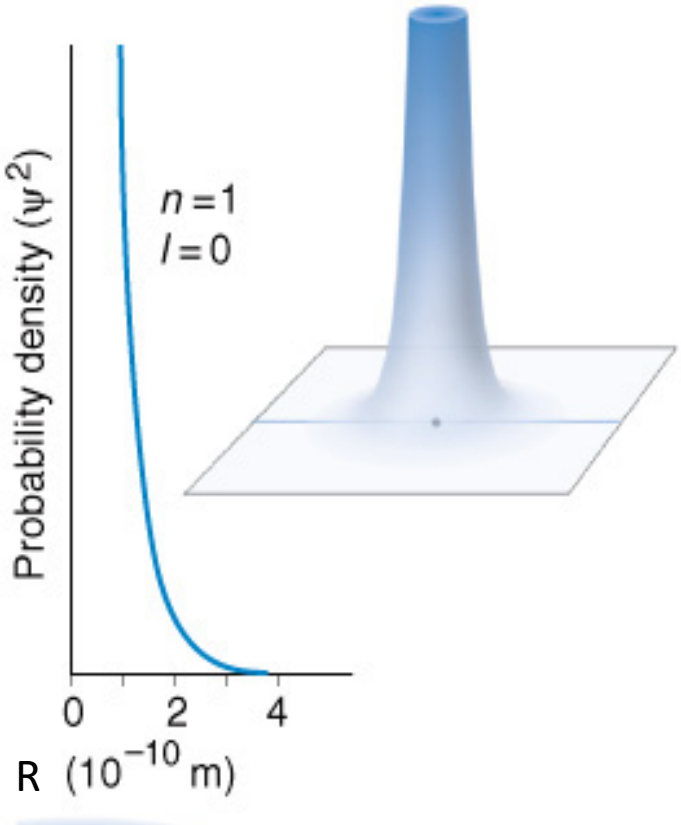
Il quadrato del valore della funzione d'onda in punto dello spazio, $|\psi|^2$, è direttamente proporzionale alla probabilità di trovare l'elettrone in una piccola regione dello spazio attorno a quel punto (indica cioè una densità di probabilità).

$|\psi|^2$ in funzione di x,y,z ⇨ distribuzione dell'elettrone intorno al nucleo in termini di probabilità.

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

Metodi convenzionali di rappresentazione di un orbitale

1. $|\psi|^2$ in funzione di R (R = distanza dal nucleo)

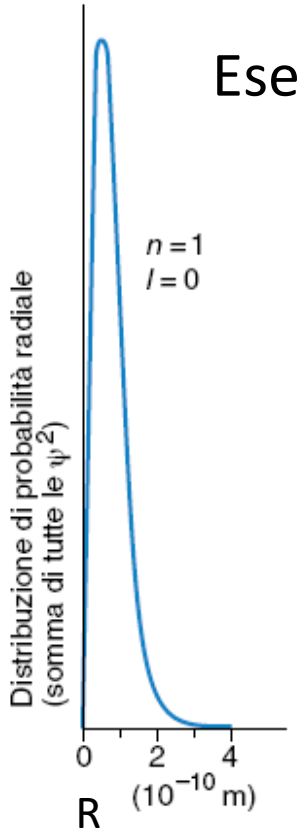


Esempio: orbitale 1s

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

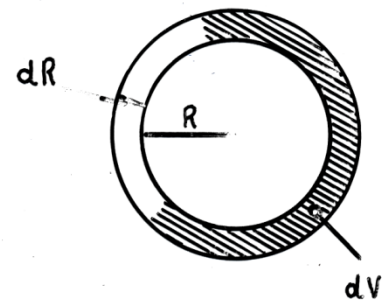
Metodi convenzionali di rappresentazione di un orbitale

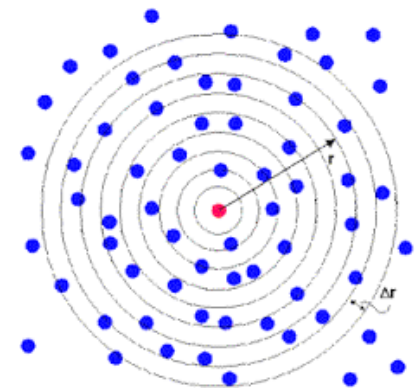
2. Probabilità radiale π in funzione di R (R = distanza dal nucleo)



Esempio: orbitale 1s

$dV = 4\pi R^2 dR$





Massimo della curva → 0.53 Å
Corrisponde al raggio della prima orbita di Bohr per l'atomo di idrogeno

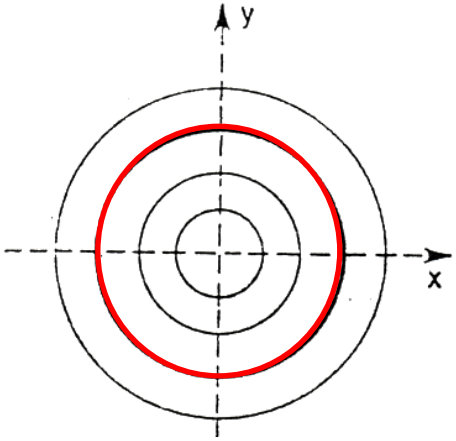
Rappresenta la probabilità di trovare l'elettrone nel volume (dV) compreso tra due sfere concentriche (centrate sul nucleo) di raggio R e R+dR

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

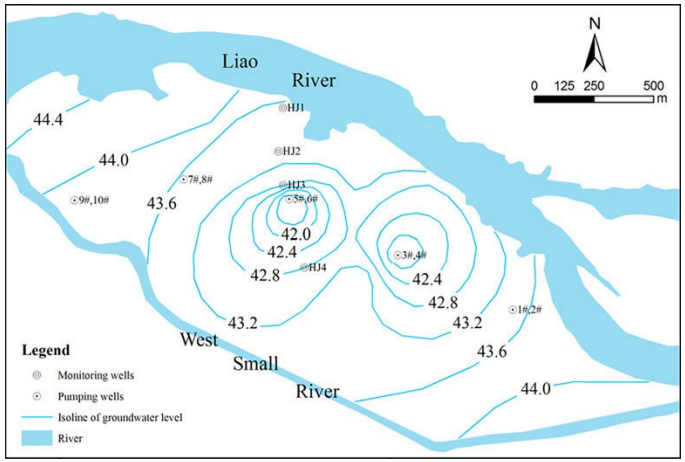
Metodi convenzionali di rappresentazione di un orbitale

3. Superfici/curve a $|\psi|^2$ = costante (superfici/curve di equiprobabilità)

In base ai valori di ψ si tracciano le superfici di uguale probabilità: se possono rappresentare sezioni su specifici piani



Sezioni delle superfici di equiprobabilità sul piano xy per l'orbitale 1s

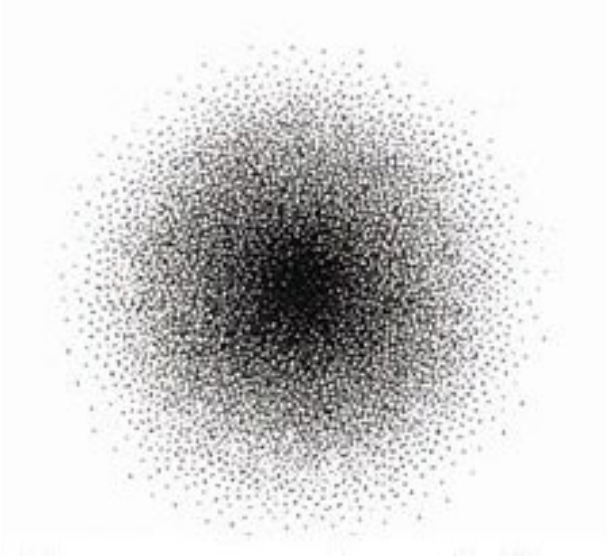


Contorno rosso: superficie che delimita la regione all'interno della quale si ha il 95% di probabilità di trovare l'elettrone.

La struttura dell'atomo secondo la meccanica ondulatoria

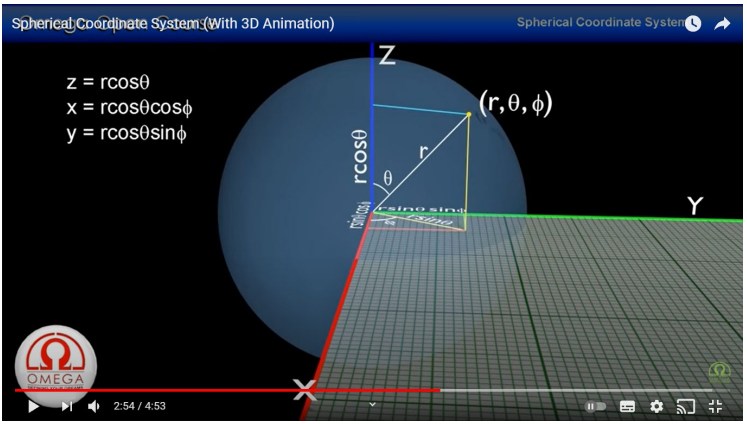
Metodi convenzionali di rappresentazione di un orbitale

4. Distribuzione della nuvola elettronica



Lo spazio intorno al nucleo viene punteggiato in modo che la densità dei punti sia proporzionale alla probabilità $|\psi|^2$

Rappresentazione dell'orbitale 1s come nuvola elettronica attorno al nucleo



$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y(\theta,\phi)$$

Funzione d`onda

Parte radiale

Parte angolare

$$\psi(n,l,m_l)=R(n,l)Y(l,m_l)$$

$$\psi^2(n,l,m_l)=R^2(n,l)Y^2(l,m_l)$$

Distribuzione di probabilità

https://www.youtube.com/watch?v=FDyenWWlPdU&t=1s

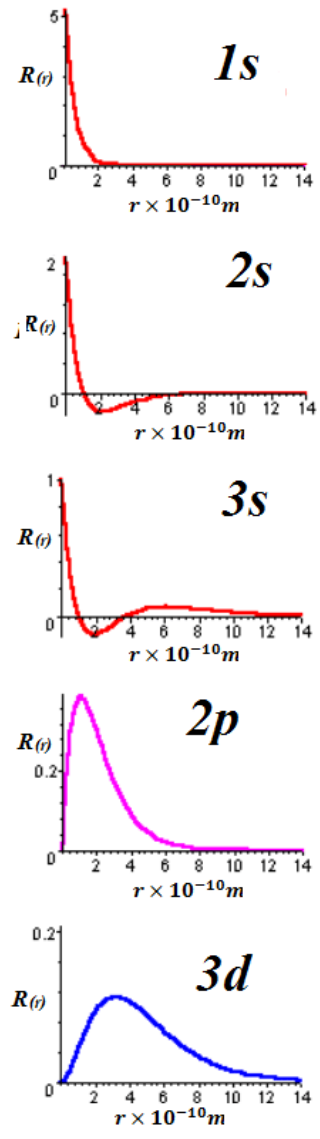
TABLE 5.2

Angular and Radial Parts of Wave Functions for One-Electron Atoms

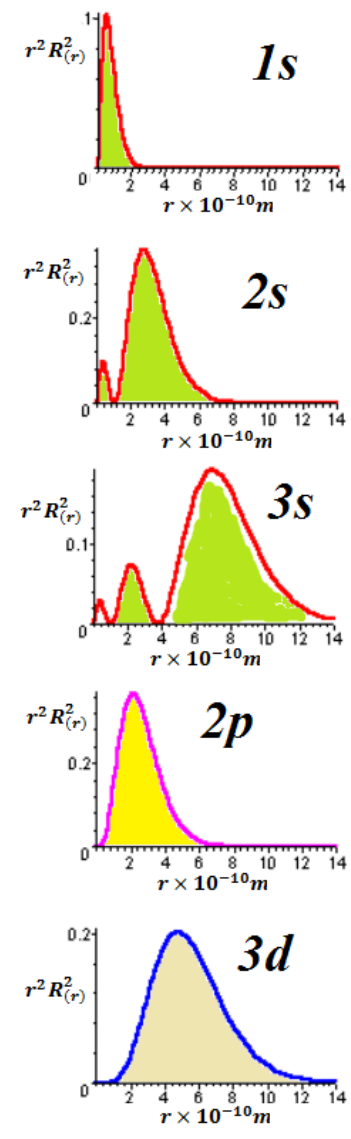
Angular Part $Y(\theta, \phi)$	Radial Part $R_{n\ell}(r)$
$\ell = 0 \quad Y_s = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$R_{1s} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-\sigma)$ $R_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2-\sigma)\exp(-\sigma/2)$ $R_{3s} = \frac{2}{81\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (27 - 18\sigma + 2\sigma^2)\exp(-\sigma/3)$
$\ell = 1 \quad Y_{p_x} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\cos\phi$ $Y_{p_y} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\sin\phi$ $Y_{p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$	$R_{2p} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma\exp(-\sigma/2)$ $R_{3p} = \frac{4}{81\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6\sigma - \sigma^2)\exp(-\sigma/3)$
$\ell = 2 \quad Y_{d_{z^2}} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$ $Y_{d_{xz}} = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\cos\theta\cos\phi$ $Y_{d_{yz}} = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\cos\theta\sin\phi$ $Y_{d_{xy}} = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta\sin 2\phi$ $Y_{d_{x^2-y^2}} = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta\cos 2\phi$	$R_{3d} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2\exp(-\sigma/3)$

$$\sigma = \frac{Zr}{a_0} \qquad a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi e^2 m_e} = 0.529 \times 10^{-10}\ \text{m}$$

Funzione d'onda radiale

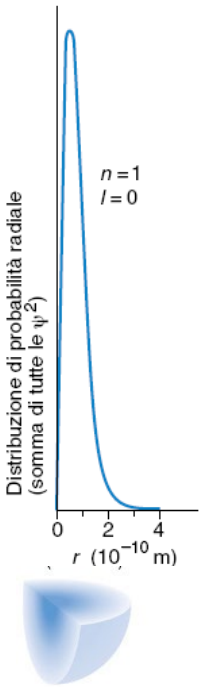


Funzione di distribuzione radiale

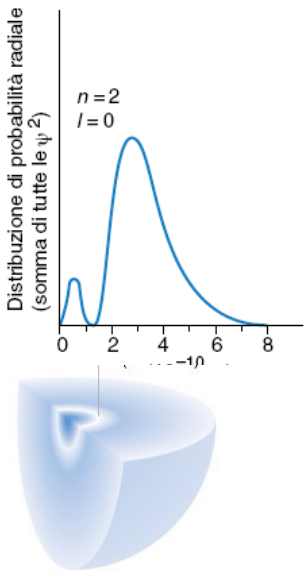


Rappresentazione delle funzioni orbitali

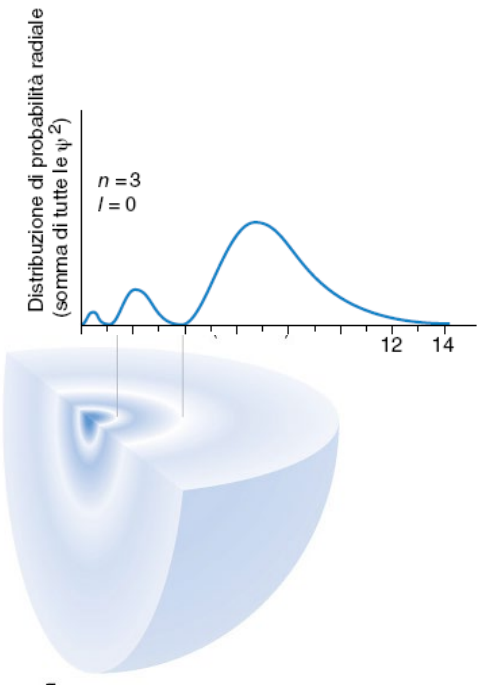
Orbitale 1s (ψ_{100})



Orbitale 2s (ψ_{200})



Orbitale 3s (ψ_{300})



Orbitale ns (ψ_{n00})

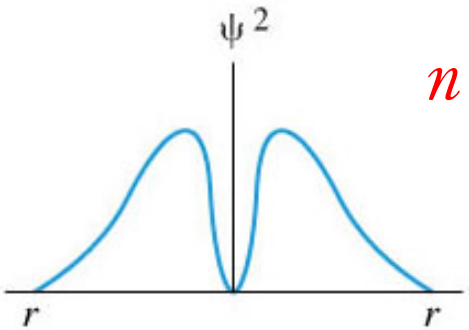
n : 1
l : 0 (s)
m_l : 0

n : 2
l : 0 (s)
m_l : 0

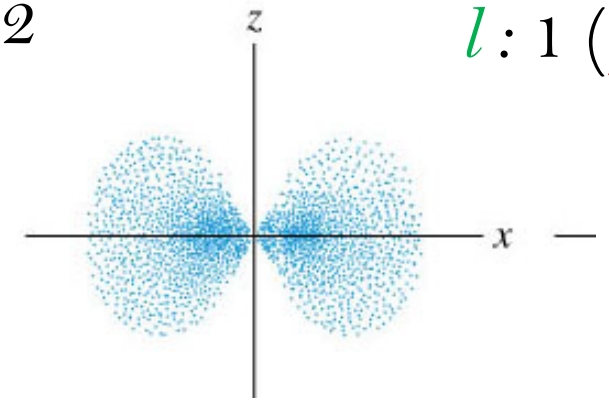
n : 3
l : 0 (s)
m_l : 0

Orbitali 2p (ψ_{21})

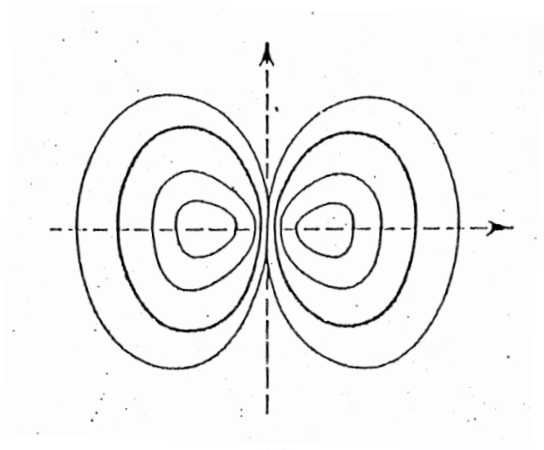
Rappresentazione delle funzioni orbitali



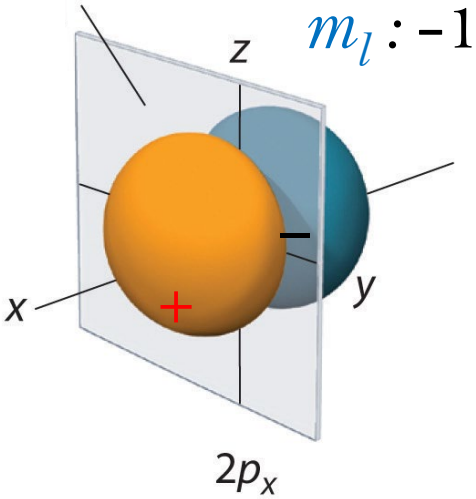
$n : 2$



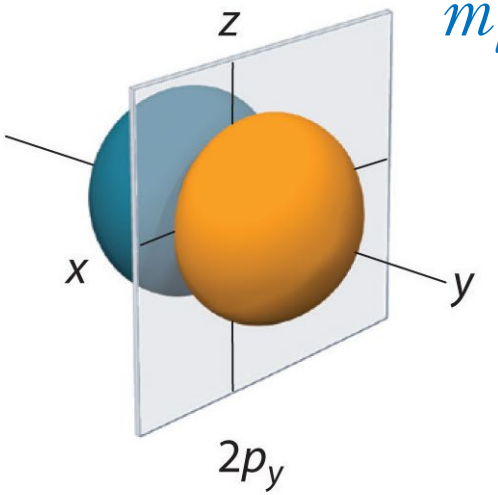
$l : 1$ (p)



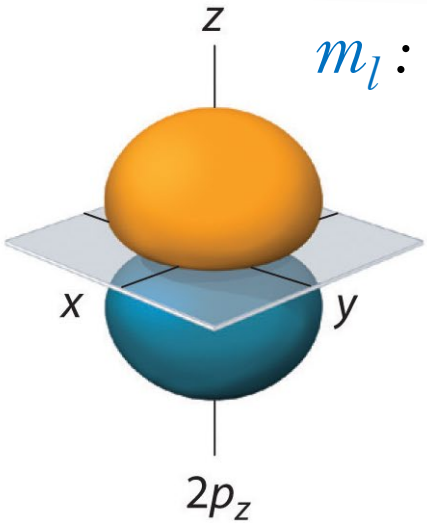
Piano nodale



$m_l : -1$

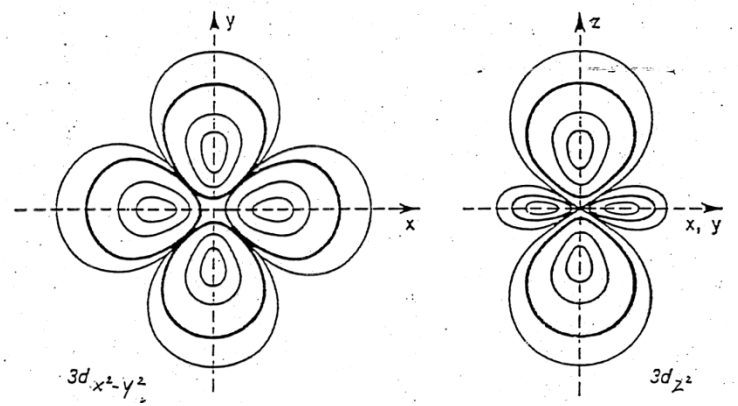


$m_l : 0$



$m_l : 1$

3 orbitali 2p (ψ_{211}, ψ_{210}, ψ_{21-1}) equivalenti (stessa superficie di contorno, stessa distribuzione di probabilità) ma diversamente orientati nello spazio (solitamente indicati con p_x, p_y, p_z)

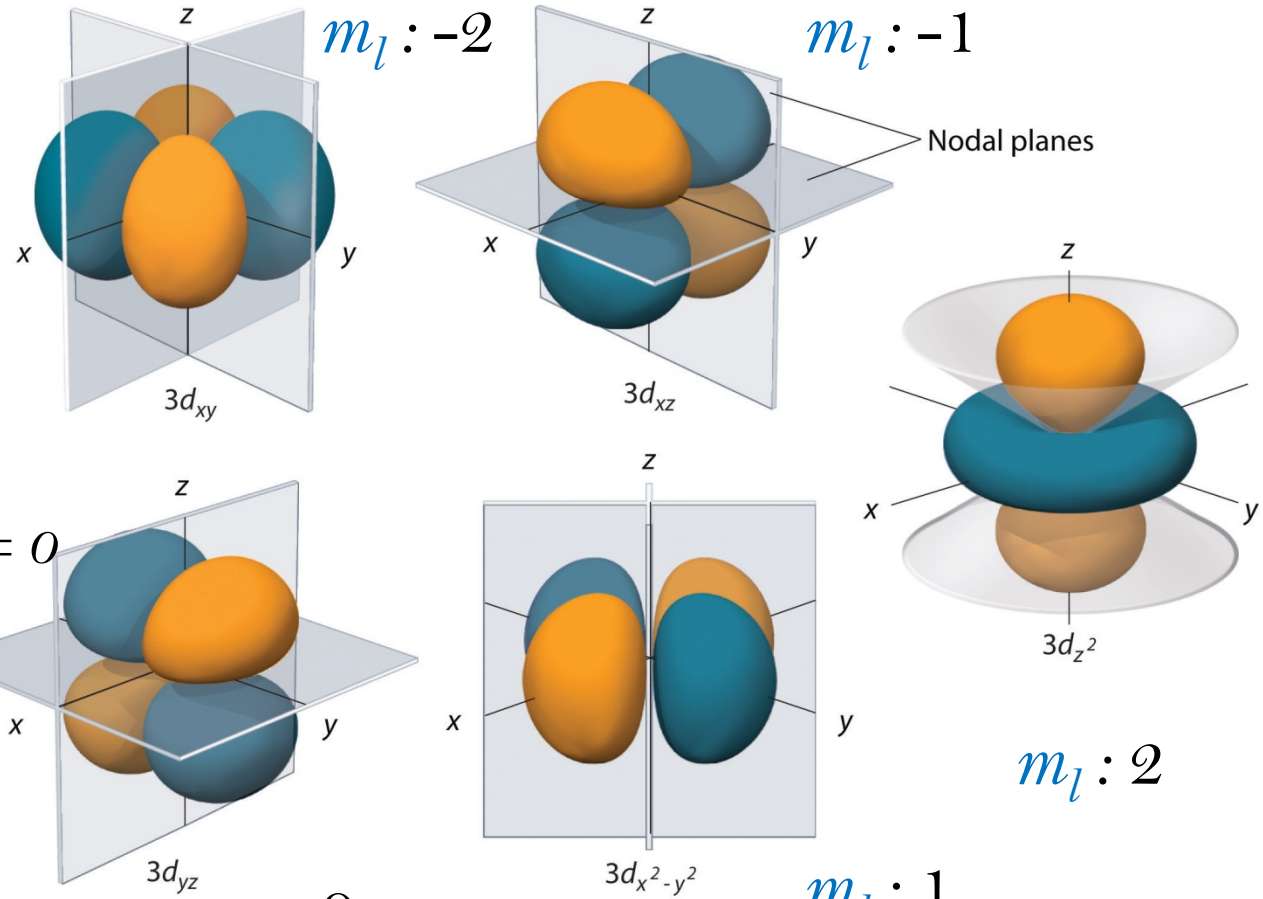


Rappresentazione delle funzioni orbitali

$n : 3$ $\quad$ $l : 2\ (\mathrm{d})$

Orbitali 3d (ψ_{32})

$m_l : -2$ $\quad$ $m_l : -1$



$m_l : 2$

$m_l : 0$ $\quad$ $m_l : 1$

$$Nodi\ angolari = l = 2$$

$$Nodi\ radiali = n - 1 - l = 0$$

Numeri quantici

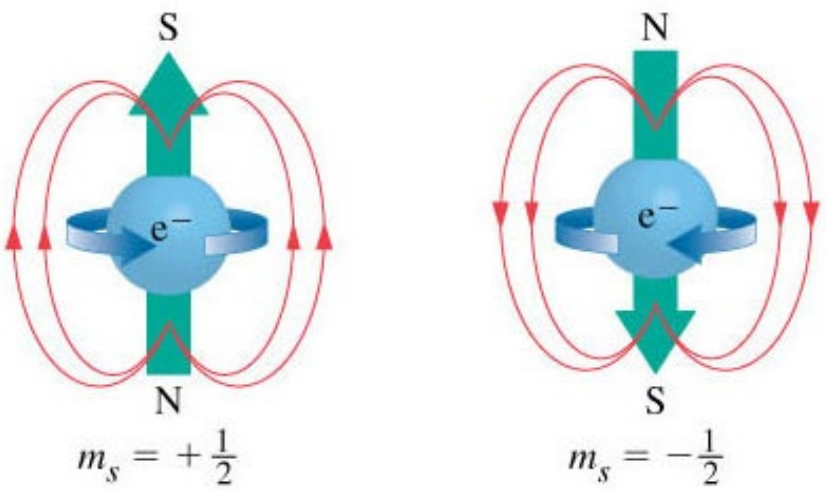
Valore del N.Q.	Proprietà dell`orbitale
n: *N.Q. principale* *n* = 1, 2, 3, 4….	✓ *Energia* ✓ *Numero dei nodi n-1*
l: *momento angolare* *l* : 0 (s), 1(p), 2 (d), 3(f),… *n-1*	✓ *Forma dell`orbitale* ✓ *Numero dei nodi angolari l*
m_l: *magnetico* m_l:: -*l*, -(*l*-1),…0, …, (*l*-1), *l*	✓ *Orientazione nello spazio*

Lo spin elettronico

Studi sul comportamento magnetico degli atomi hanno portato a definire il

numero quantico di spin m_s

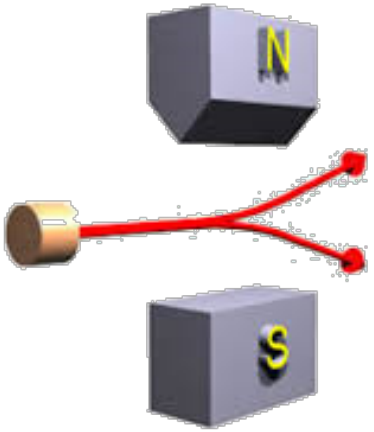
intrinsecamente quantistico



Lo spin elettronico è quantizzato, ed il valore di m_s può assumere solo due valori

$m_s = +½$ **o** $-½$

Per descrivere correttamente il comportamento (e quindi l'energia) di un elettrone in un atomo è necessario specificare 4 numeri quantici



$$\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$$

Quanti elettroni può ospitare un orbitale?

se n, l, e m_l sono fissati, allora m_s = ½ or - ½

$\Psi = (n, l, m_l, ½)$ **oppure** $\Psi = (n, l, m_l, -½)$

Un orbitale può ospitare 2 elettroni

L'esistenza (e l'energia) di **un** elettrone in un atomo è descritta da un **unico** valore della sua funzione d'onda Ψ, ovvero da quattro **diversi** numeri quantici. Poiché m_s assume solo due valori deriva:

Principio di esclusione di Pauli :

In un atomo non esistono due elettroni con gli stessi quattro numeri quantici.

Ogni posto è identificato univocamente (R12, S8)
Ogni posto può essere occupato da una sola persona alla volta.

Quanti orbitali 2p ci sono in un atomo?

n=2

↓

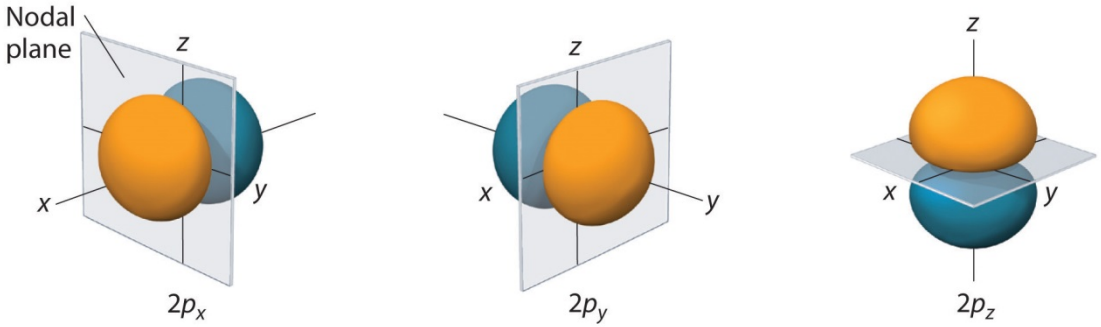
2p

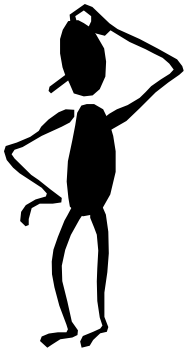
↑

l = 1

Se l = 1, allora m_l = -1, 0, or +1

3 orbitali





Quanti elettroni si possono disporre nel sottolivello 3d?

n=3

↓

3d

↑

l = 2

Se l = 2, allora m_l = -2, -1, 0, +1, or +2

5 orbitali che possono ospitare un totale di 10 e^-

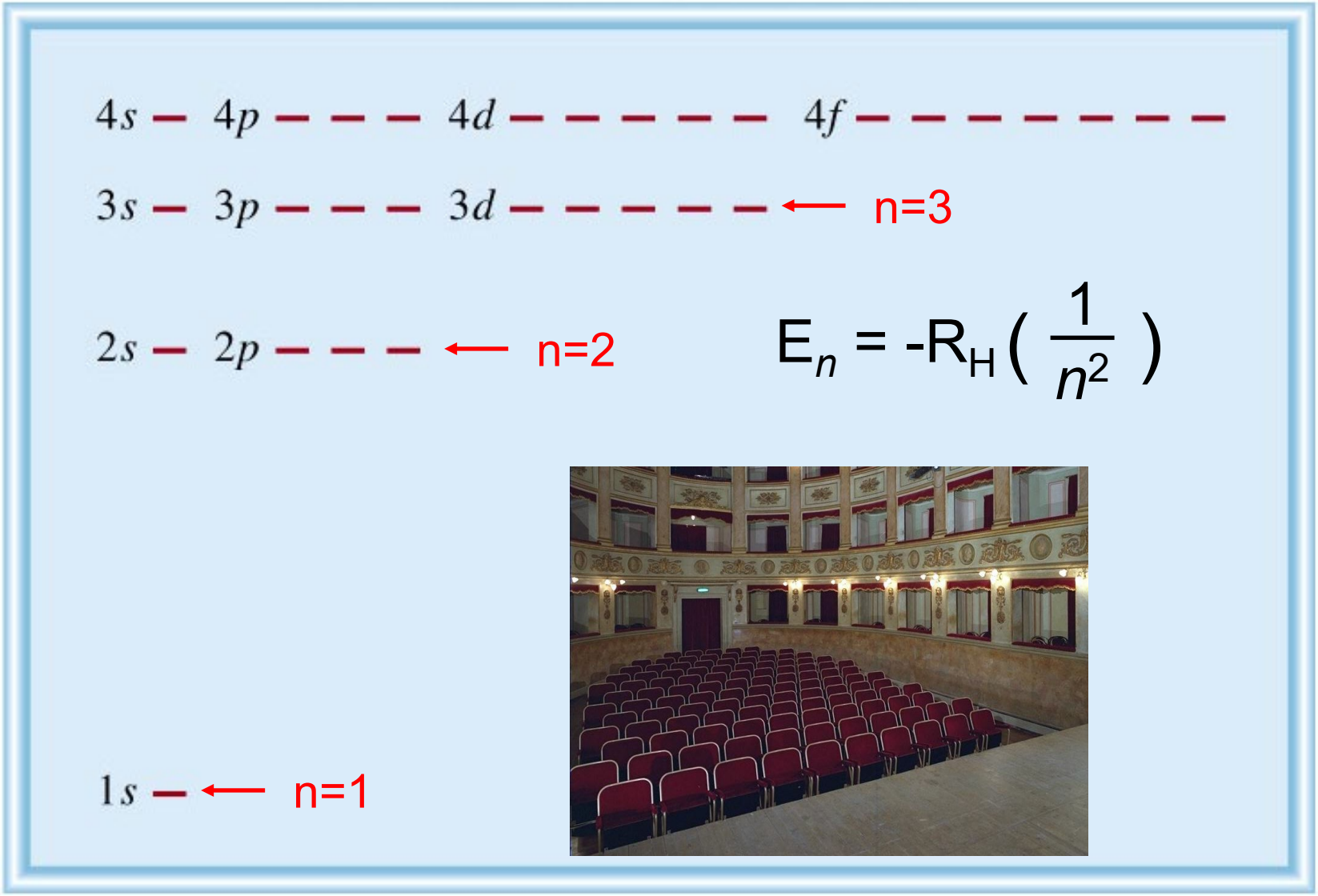
…riassumendo

1. Fissato uno stato elettronica, più è basso il valore di n, più stabile (cioè a energia più bassa) sarà l`orbitale
2. Ci sono n tipi di sottolivelli energetici nell`n^{esimo} livello di energia (es. il terzo livello ha orbitali s, p e d).
3. Ci sono $2l+1$ orbitali per tipo (cioè uno s, tre p, cinque d etc.). Questo è anche il numero di valori che può assumere m_l per un dato valore di l.
4. Ci sono n^2 orbitali totali per strato/livello

Energia degli orbitali in un sistema monoelettronico

L'energia dipende solo dal numero quantico principale ***n***

Energia



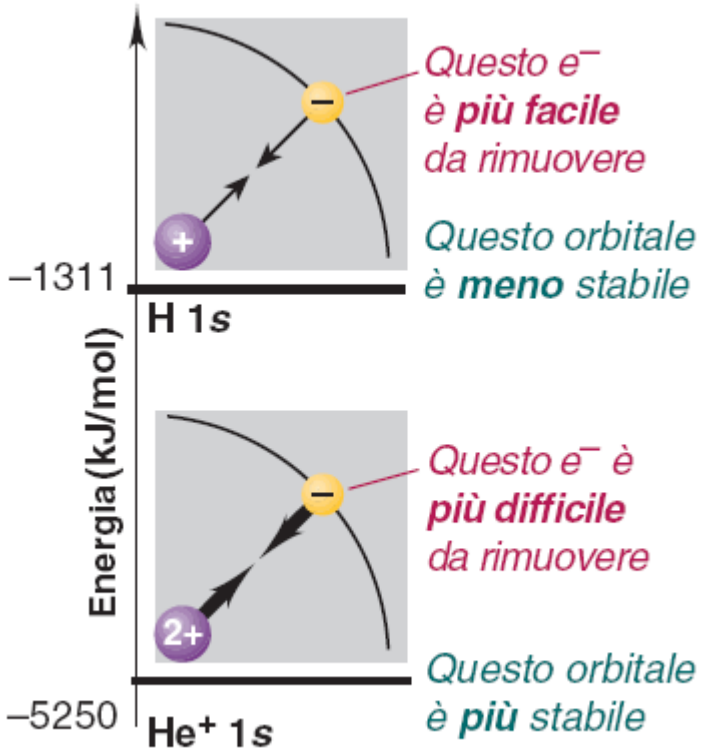
$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

Sistemi polielettronici

Occorre considerare i seguenti fattori:

1. Repulsione fra gli elettroni
2. Effetto di schermo degli elettroni più interni

Effetto della carica nucleare sull'energia dei sottolivelli



La carica nucleare **maggiore abbassa** l'energia dei sottolivelli.

E' necessaria ***più energia*** per rimuovere l'elettrone 1*s* da He^+ che da H.

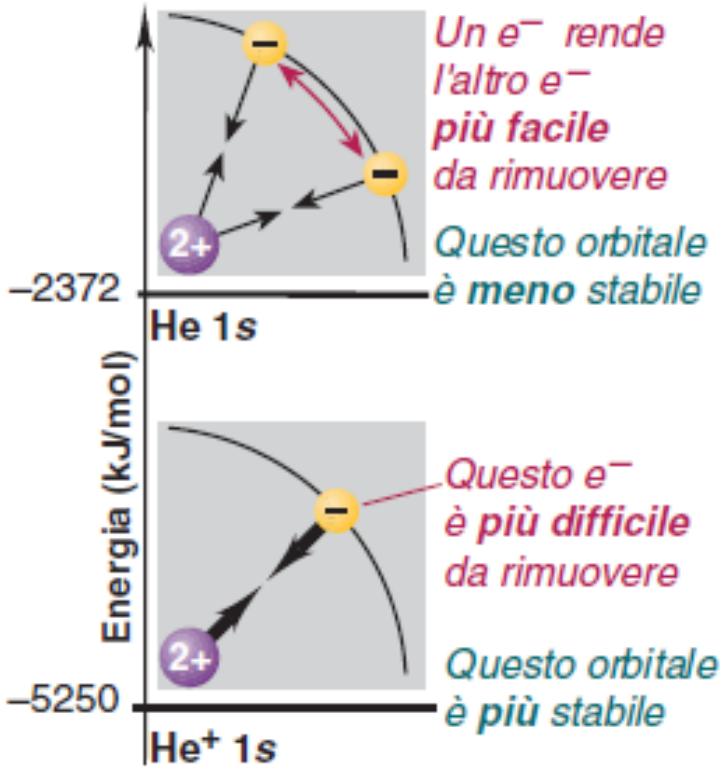
Schermatura ed energia degli orbitali

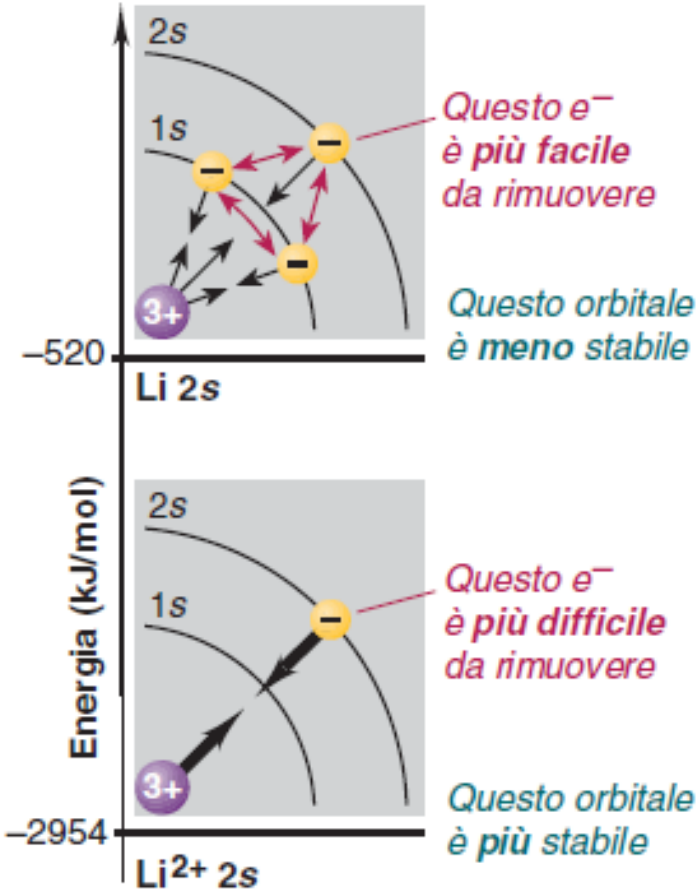
- Gli elettroni nello ***stesso*** livello energetico si schermano reciprocamente.

- Gli elettroni in orbitali ***interni*** schermano gli elettroni interni più efficacemente.
  - *Maggiore è la distanza dal nucleo di un elettrone, minore è Z_{eff} per quell'elettrone.*

Carica Nucleare Effettiva **(Z_{eff})** è la "carica positiva" effettivamente sentita da un elettrone esterno considerando la carica nucleare e l'effetto repulsivo degli altri elettroni.

Schermatura e livelli energetici



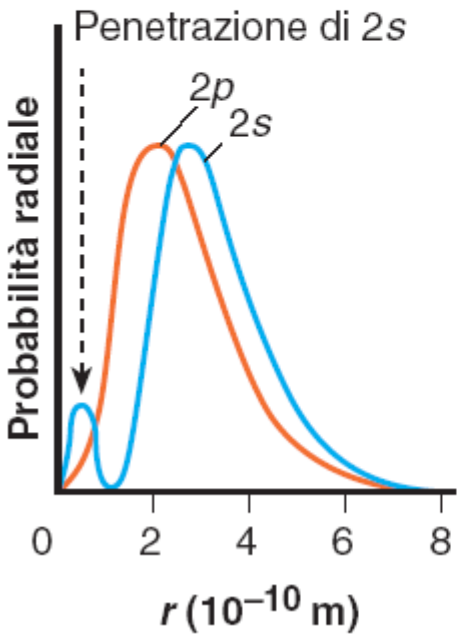


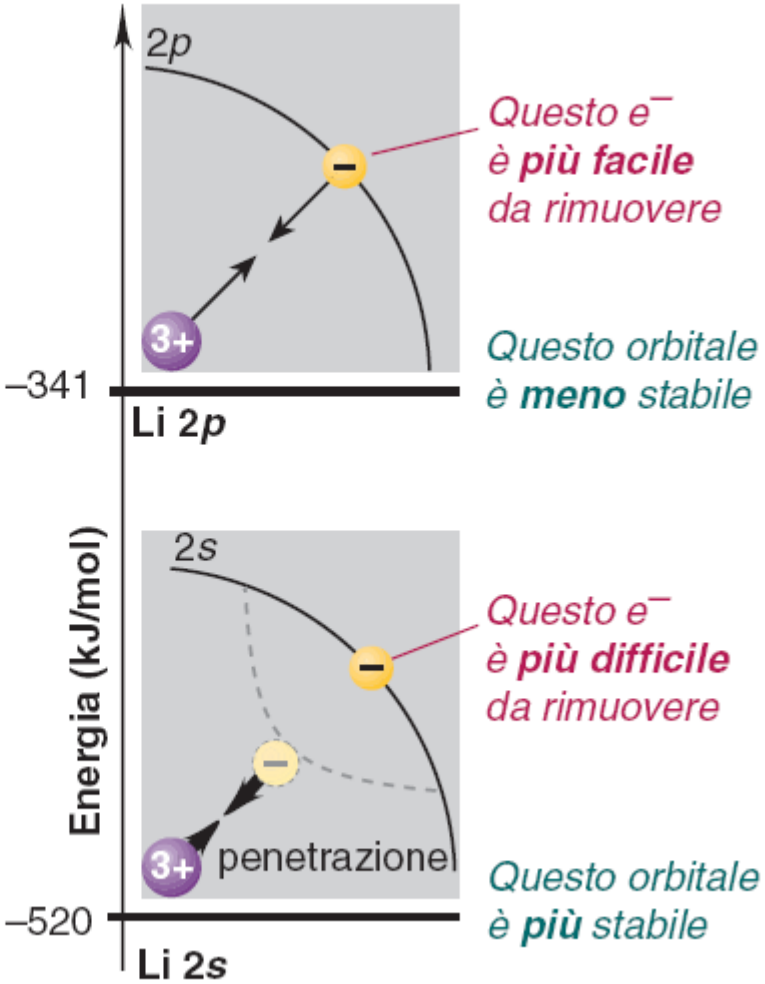
Penetrazione ed energia dei sottolivelli

La forma dell'orbitale fa sì che gli elettroni in alcuni orbitali "**penetrino**" più vicino al nucleo.

La penetrazione aumenta l'attrazione nucleare e diminuisce la schermatura

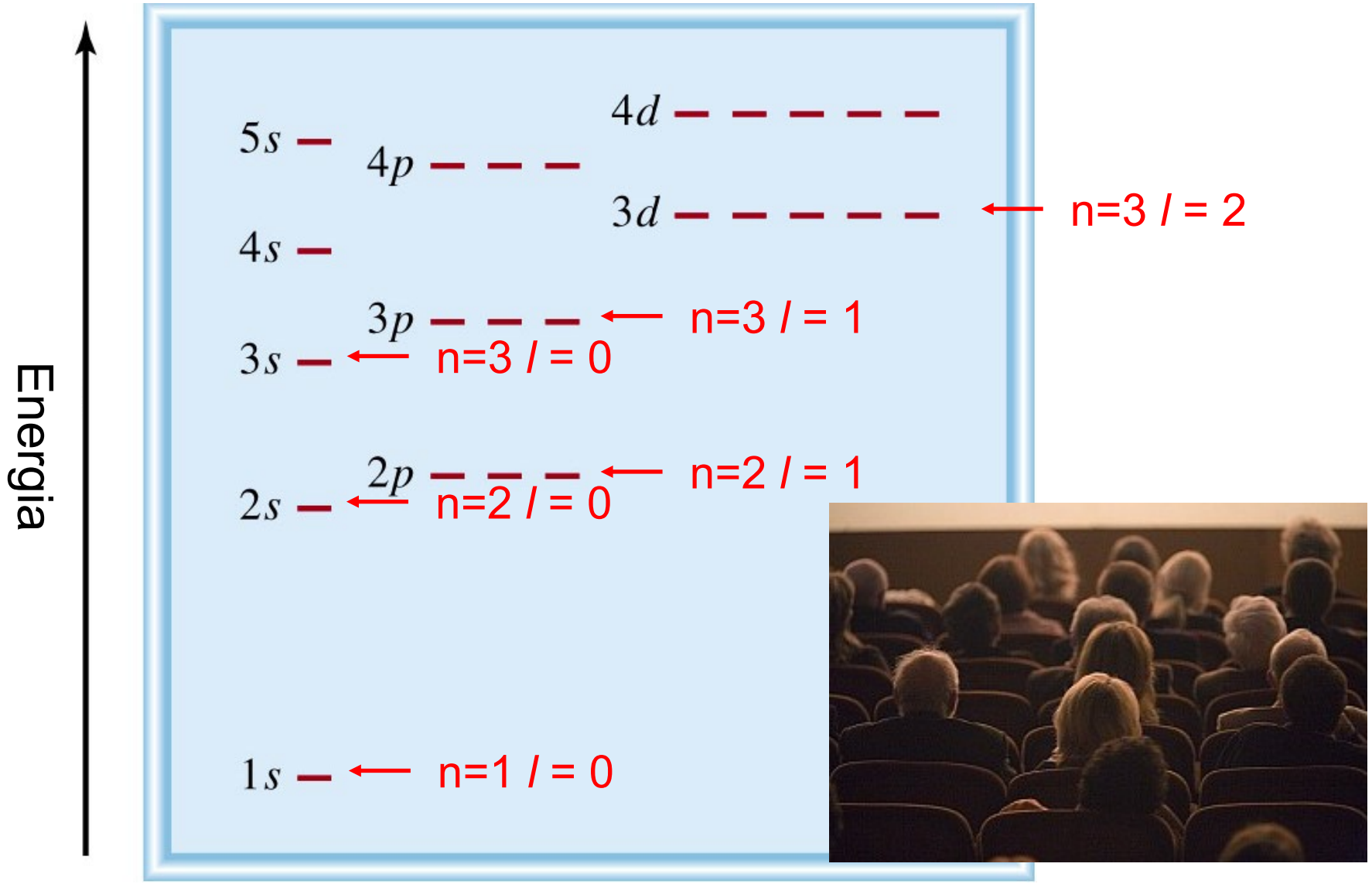
Il sottolivello *2s* è più stabile del *2p* perché penetra più vicino al nucleo.





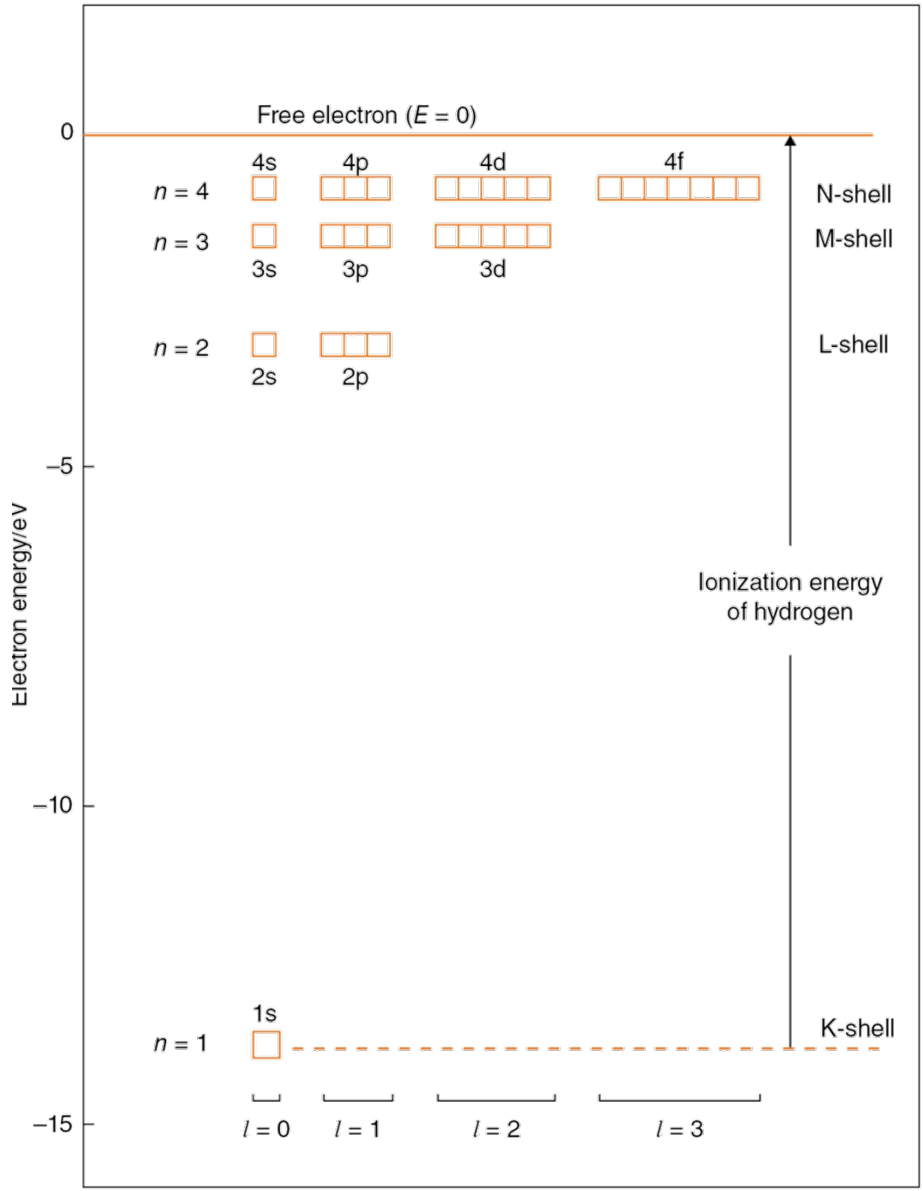
Energia degli orbitali in un sistema **multi**-elettronico

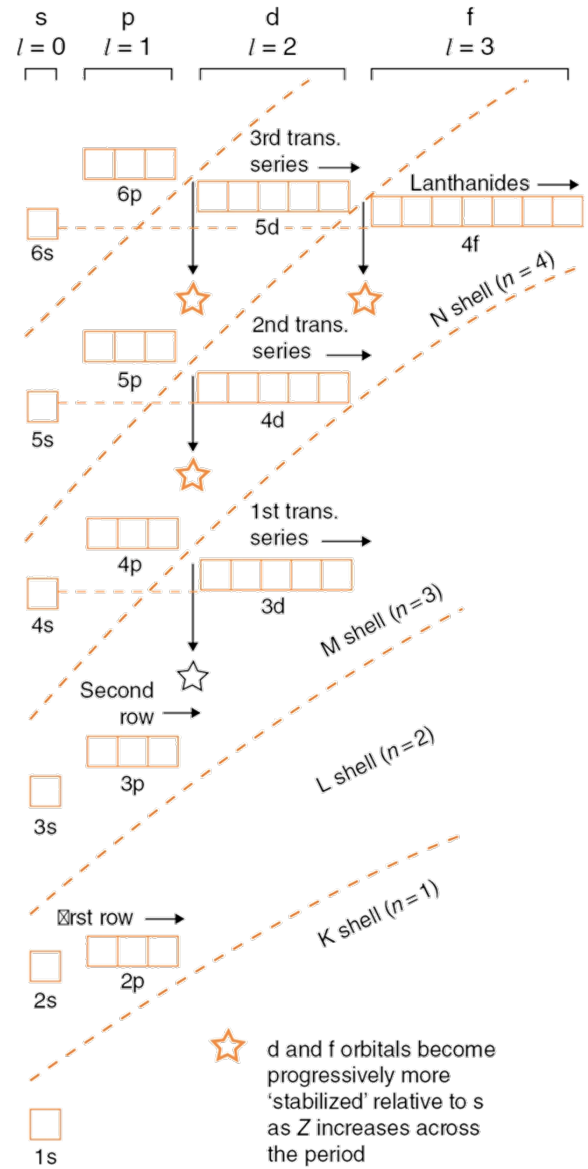
*L'energia dipende da **n** e **l***



sistema **mono-**elettronico

sistema **poli-**elettronico



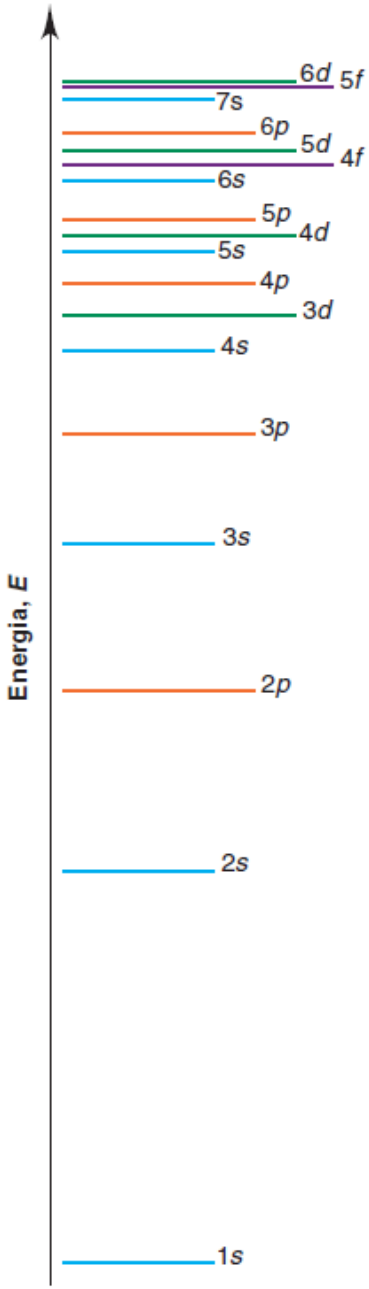


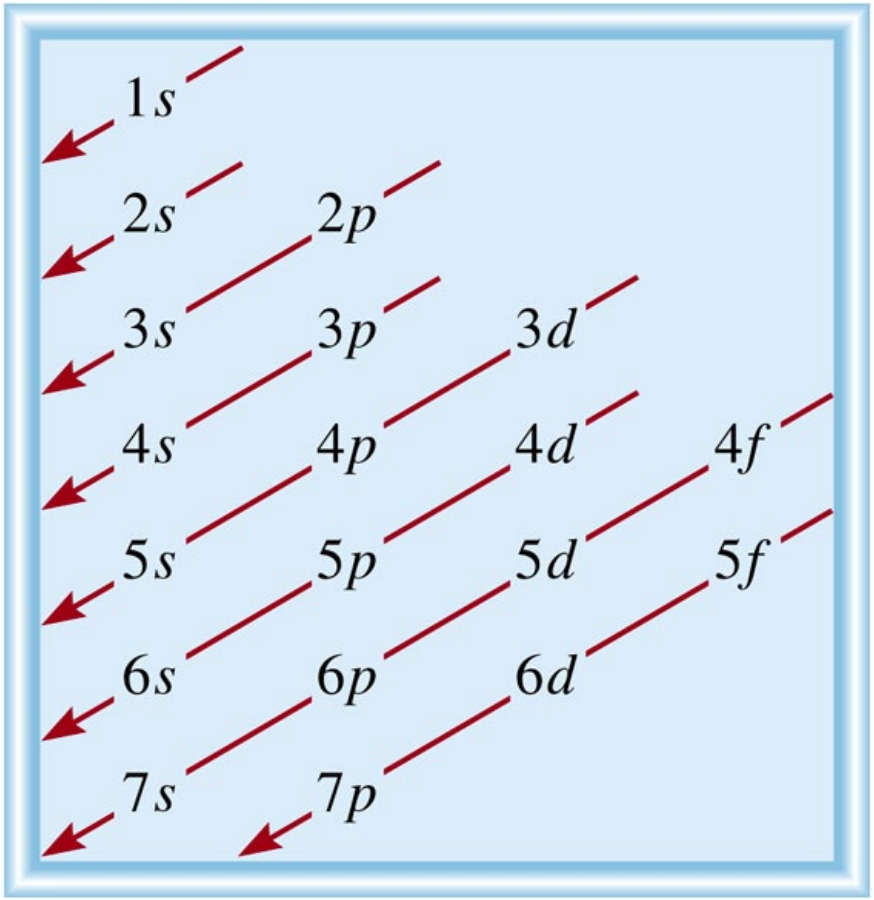
Ordine degli orbitali (riempimento) nei sistemi multi-elettronici

Le energie degli orbitali che vengono via via occupati dagli elettroni non dipendono dal solo numero quantico principale n, bensì crescono al crescere della somma n+l, e che per orbitali con uguale valore di n+l il più stabile è quello con il numero quantico principale n più basso

Orbitale	1*s*	2*s*	2*p*	3*s*	3*p*	3*d*	4*s*	4*p*	4*d*	4*f*	5*s*	5*p*	5*d*	…
l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	…
n+*l*	1	2	3	3	4	5	4	5	6	7	5	6	7	…

Ordine degli orbitali (riempimento) nei sistemi multi-elettronici (schema mnemonico)





1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s

La *configurazione elettronica* definisce come gli elettroni sono distribuiti tra i vari orbitali atomici di un atomo.

numero di elettroni nell'orbitale o sottolivello

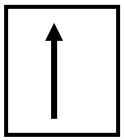
$1s^1$

numero quantico pricipale ***n***

numero quantico angolare ***l***

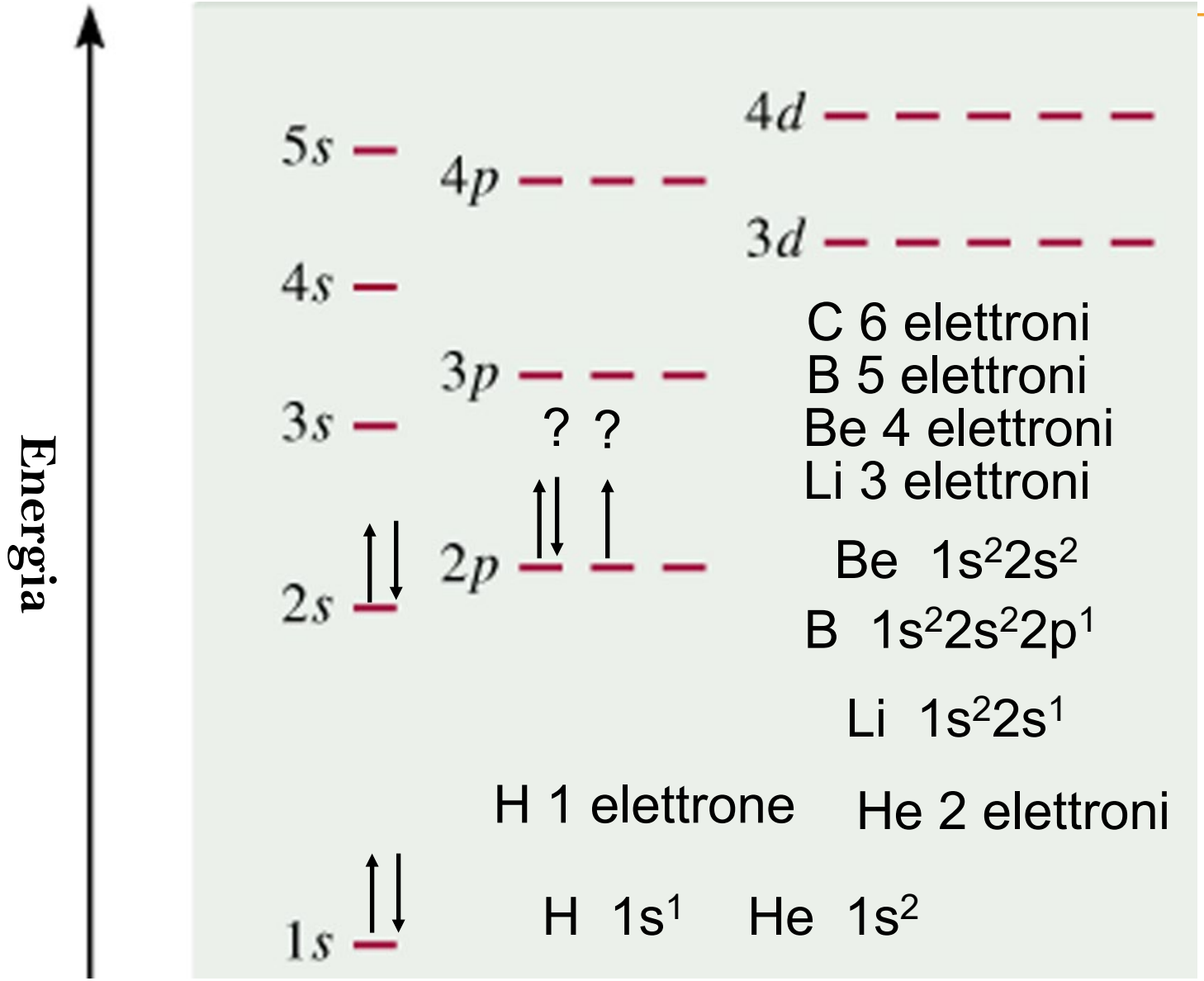
Diagramma ad orbitali

H

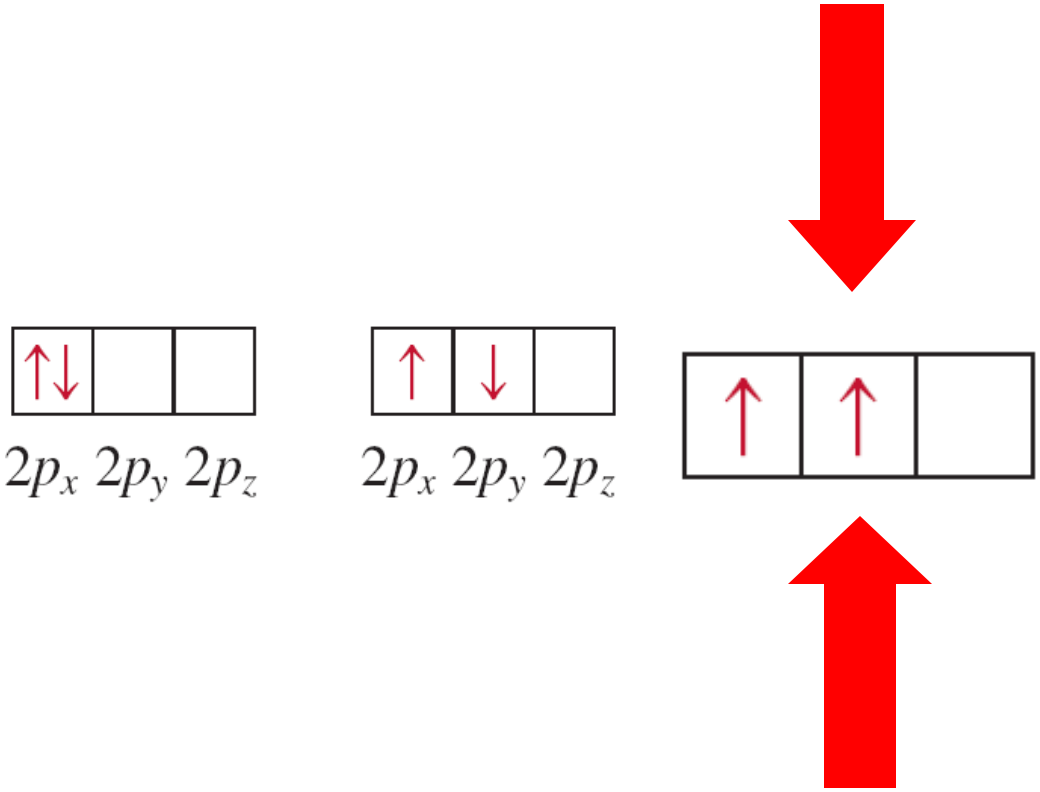


$1s^1$

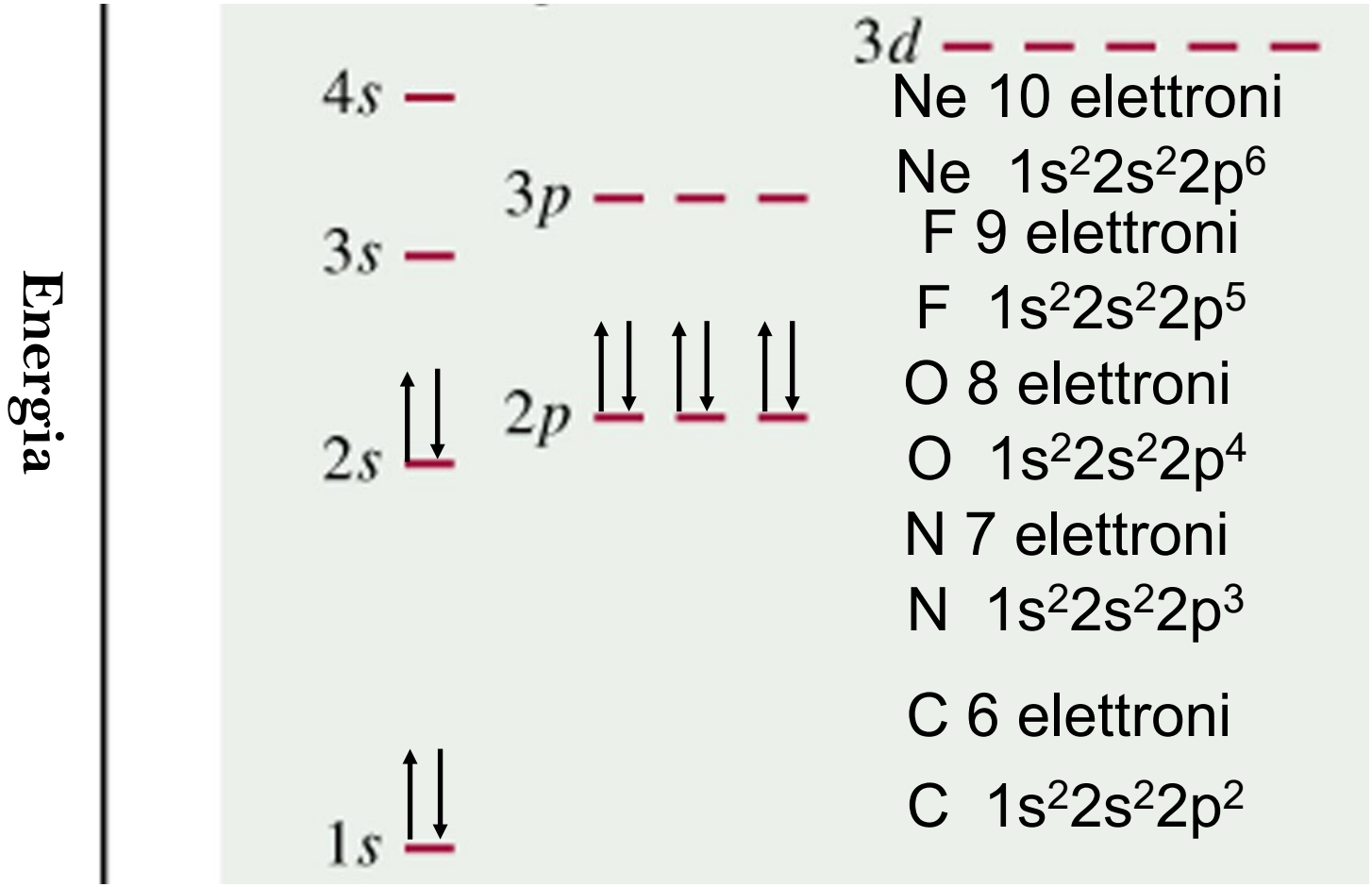
“Riempimento” degli elettroni negli orbitali a energia più bassa (*Principio di Aufbau*)



La disposizione più stabile degli elettroni in un sottolivello è quella con il maggior numero di spin paralleli (***regola di Hund***).



La disposizione più stabile degli elettroni in un sottolivello è quella con il maggior numero di spin paralleli (***regola di Hund***).



Ne 10 elettroni

Ne $1s^2 2s^2 2p^6$

F 9 elettroni

F $1s^2 2s^2 2p^5$

O 8 elettroni

O $1s^2 2s^2 2p^4$

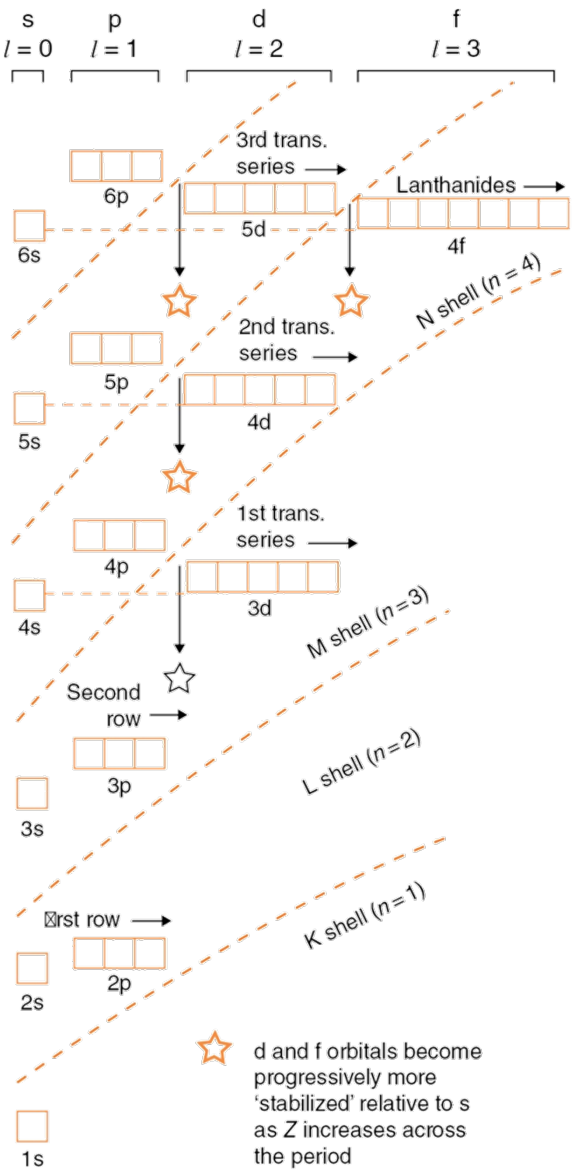
N 7 elettroni

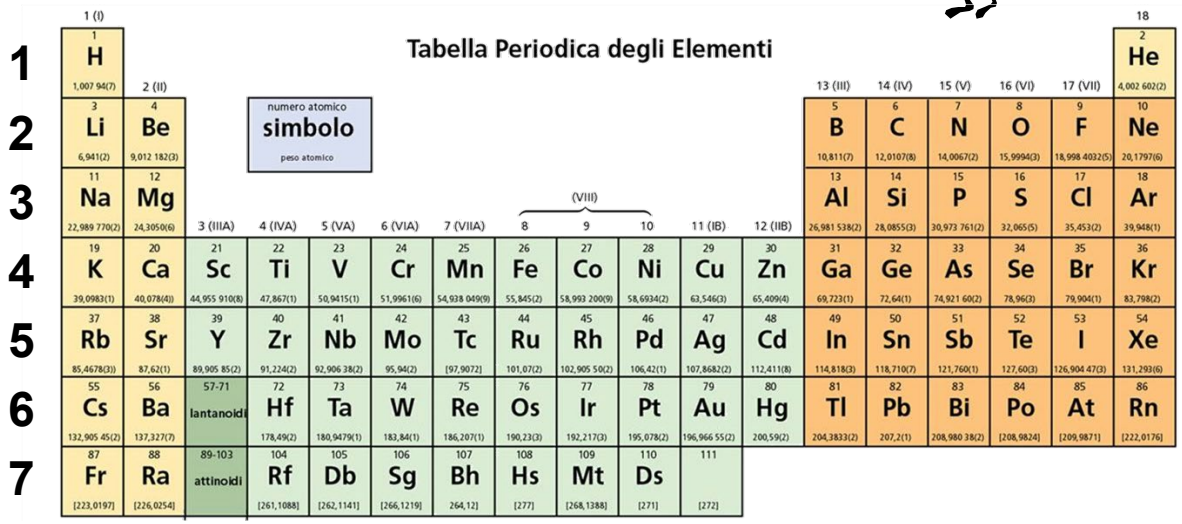
N $1s^2 2s^2 2p^3$

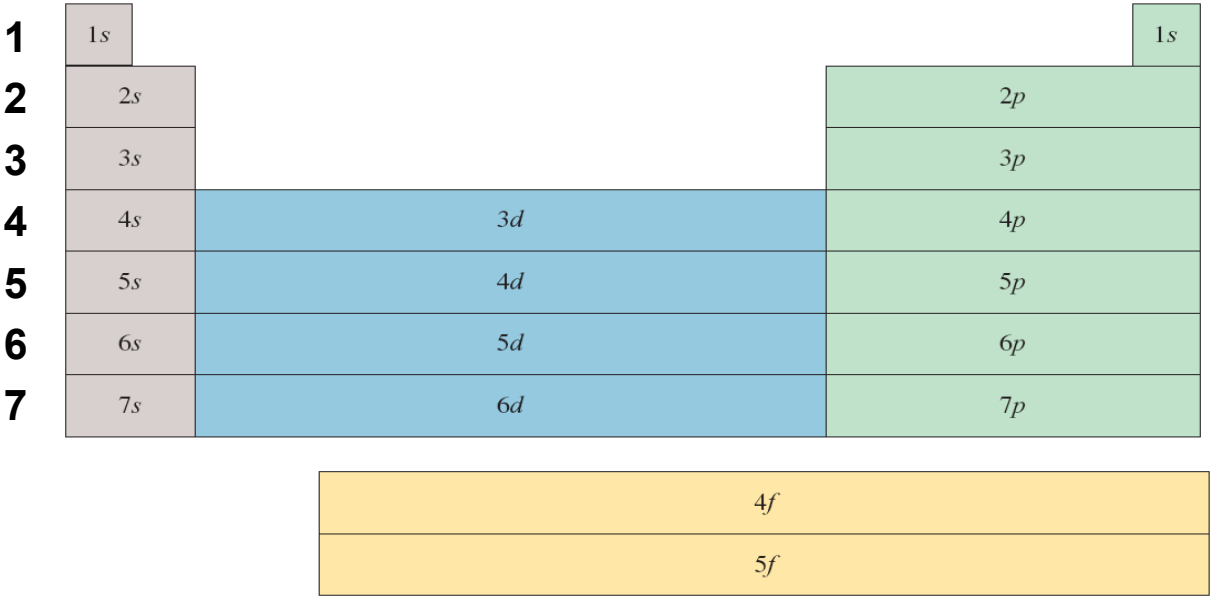
C 6 elettroni

C $1s^2 2s^2 2p^2$

Scrivere configurazione elettronica del atomo…





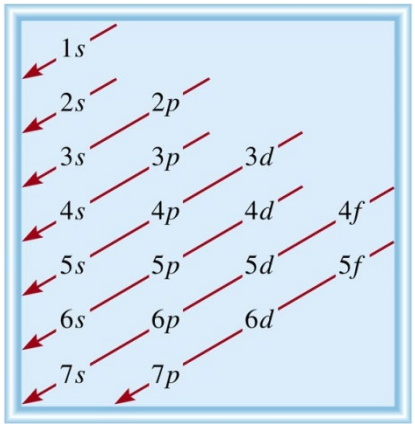


Scrivere configurazione elettronica del atomo…

Elementi dei gruppi principali

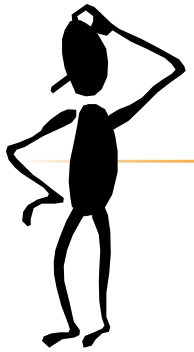
blocco *s* — blocco *p* — Elementi di transizione — blocco *d*

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 (1s) H																	2 (1s) He
2	3 (2s) Li	4 Be											5 B	6 C	7 (2p) N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 (3s) Na	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 (3p) P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 (4s) K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 (3d) Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 (4p) As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 (5s) Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 (4d) Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 (5p) Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 (6s) Cs	56 Ba	57 La*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 (5d) Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 (6p) Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 (7s) Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 (6d) Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112						



Elementi di transizione interni — blocco *f*

*	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 (4f) Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 (5f) Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



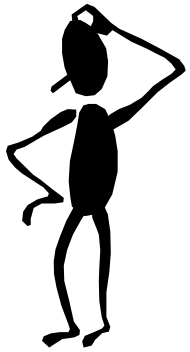
Qual è la configurazione elettronica di Mg?

Mg 12 elettroni

1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ 2 + 2 + 6 + 2 = 12 elettroni

Abbreviato come $[Ne]3s^2$ [Ne] $1s^2 2s^2 2p^6$



Quali sono i possibili numeri quantici per l'ultimo elettrone (il più esterno) di Cl?

Cl 17 elettroni 1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ 2 + 2 + 6 + 2 + 5 = 17 elettroni

L'ultimo elettroni è addizionato all'orbitale 3p

$n = 3$ $l = 1$ $m_l = -1, 0, \text{ or } +1$ $m_s = ½ \text{ or } -½$

Review of Concepts

Why is it not possible to have a $2d$ orbital but a $3d$ orbital is allowed?

Review of Concepts

Given the ground state electron configuration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$, which of the four quantum numbers would be the same for the three $3p$ electrons?

Configurazione elettronica di cationi ed anioni degli elementi rappresentativi

Na	$[Ne]3s^1$	Na^+	[Ne]
Ca	$[Ar]4s^2$	Ca^{2+}	[Ar]
Al	$[Ne]3s^23p^1$	Al^{3+}	[Ne]

Gli atomi perdono elettroni affinchè il catione abbia una configurazione elettronica esterna di gas nobile.

Gli atomi acquistano elettroni in modo che l'anione abbia una configurazione elettronica esterna di gas nobile.

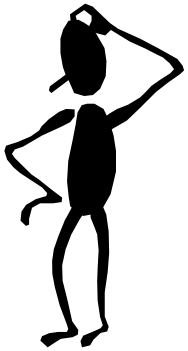
H	$1s^1$	H^-	$1s^2$ or [He]
F	$1s^22s^22p^5$	F^-	$1s^22s^22p^6$ = [Ne]
O	$1s^22s^22p^4$	O^{2-}	$1s^22s^22p^6$ = [Ne]
N	$1s^22s^22p^3$	N^{3-}	$1s^22s^22p^6$ = [Ne]

Specie isoelettroniche

Na^+: [Ne] Al^{3+}: [Ne] F^-: $1s^2 2s^2 2p^6$ = [Ne]

O^{2-}: $1s^2 2s^2 2p^6$ = [Ne] N^{3-}: $1s^2 2s^2 2p^6$ = [Ne]

Na^+, Al^{3+}, F^-, O^{2-}, e N^{3-} sono tutti ***isoelettronici*** con Ne



Quale atomo neutro è isoelettronico con H^- ?

H^-: $1s^2$ stessa configurazione elettronica di He

7.64 Indicare il numero totale di (a) elettroni *p* in N (Z = 7); (b) elettroni *s* in Si (Z = 14); e (c) elettroni 3*d* in S (Z = 16).

7.64 Le configurazioni elettroniche degli elettroni sono:

(a) N:

(b) Si:

(c) S:

7.82 Indicare il numero di elettroni spaiati presenti in ognuno dei seguenti atomi: B, Ne, P, Sc, Mn, Se, Kr, Fe, Cd, I, Pb.

7.85 La configurazione elettronica di un atomo neutro è $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$. Scrivere i numeri quantici corrispondenti a ciascun elettrone. Dare un nome all'elemento.

7.85 Ci sono un totale di 12 elettroni:

Orbital	n	l	m_l	m_s
$1s$	1	0	0	$+\frac{1}{2}$
$1s$	1	0	0	$-\frac{1}{2}$
$2s$	2	0	0	$+\frac{1}{2}$
$2s$	2	0	0	$-\frac{1}{2}$
$2p$	2	1	1	$+\frac{1}{2}$
$2p$	2	1	1	$-\frac{1}{2}$
$2p$	2	1	0	$+\frac{1}{2}$
$2p$	2	1	0	$-\frac{1}{2}$
$2p$	2	1	-1	$+\frac{1}{2}$
$2p$	2	1	-1	$-\frac{1}{2}$
$3s$	3	0	0	$+\frac{1}{2}$
$3s$	3	0	0	$-\frac{1}{2}$

l'elemento è il magnesio.

Categorie di elettroni

Elettroni interni (o *elettroni di core):* sono quelli nel gas nobile precedente e in ogni serie di transizione completata. Riempiono tutti i *livelli energetici inferiori di un atomo.*

Elettroni esterni sono quelli nel *livello energetico più alto*(valore di *n più alto). Trascorrono la maggior parte del loro tempo alla massima* distanza dal nucleo.

Gli elettroni di valenza sono quelli che intervengono nella formazione dei composti.

Negli **elementi dei gruppi principali**, gli elettroni di valenza sono gli elettroni esterni.

Negli **elementi di transizione**, nella formazione del legame intervengono spesso anche alcuni elettroni d interni, (n-1)d, che sono annoverati tra gli elettroni di valenza.