

ZANICHELLI

Valitutti, Falasca, Tifi, Gentile

Chimica

concetti e modelli.blu

ZANICHELLI

Capitolo 11

La struttura dell'atomo

Sommario (I)

1. La doppia natura della luce
2. La «luce» degli atomi
3. L'atomo di Bohr
4. La doppia natura dell'elettrone
5. L'elettrone e la meccanica quantistica

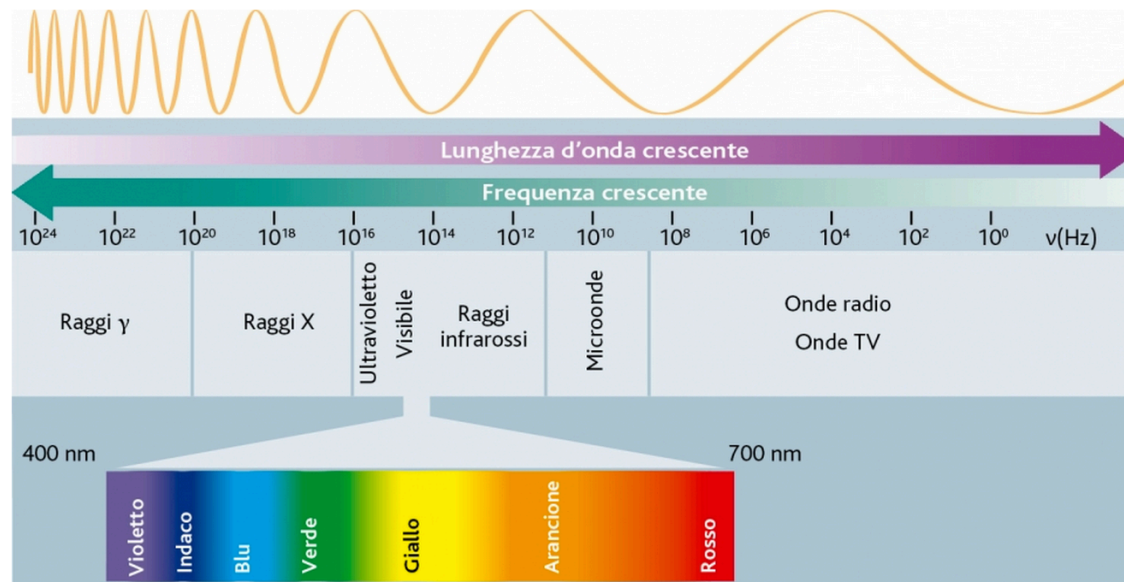
Sommario (II)

6. L'equazione d'onda
7. Numeri quantici e orbitali
8. Dall'orbitale alla forma dell'atomo
9. L'atomo di idrogeno secondo la meccanica quantistica
10. La configurazione degli atomi polielettronici

La doppia natura della luce (I)

La luce è un particolare tipo di **onda elettromagnetica** che si crea per rapidissima oscillazione di cariche elettriche.

L'insieme delle onde elettromagnetiche costituisce lo **spettro elettromagnetico**.

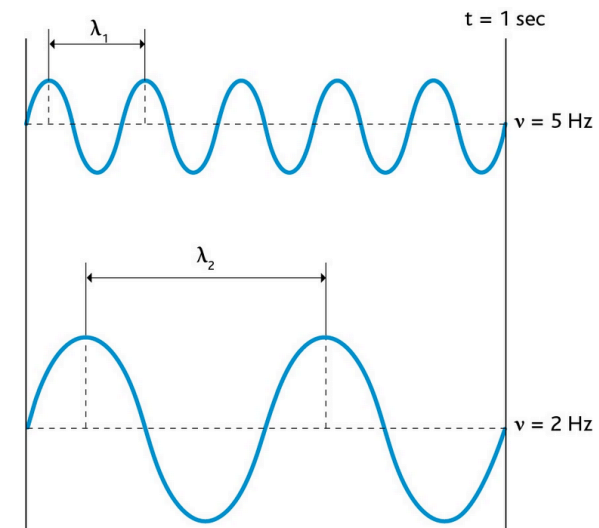


ZANICHELLI

La doppia natura della luce (II)

I parametri che caratterizzano le onde elettromagnetiche sono:

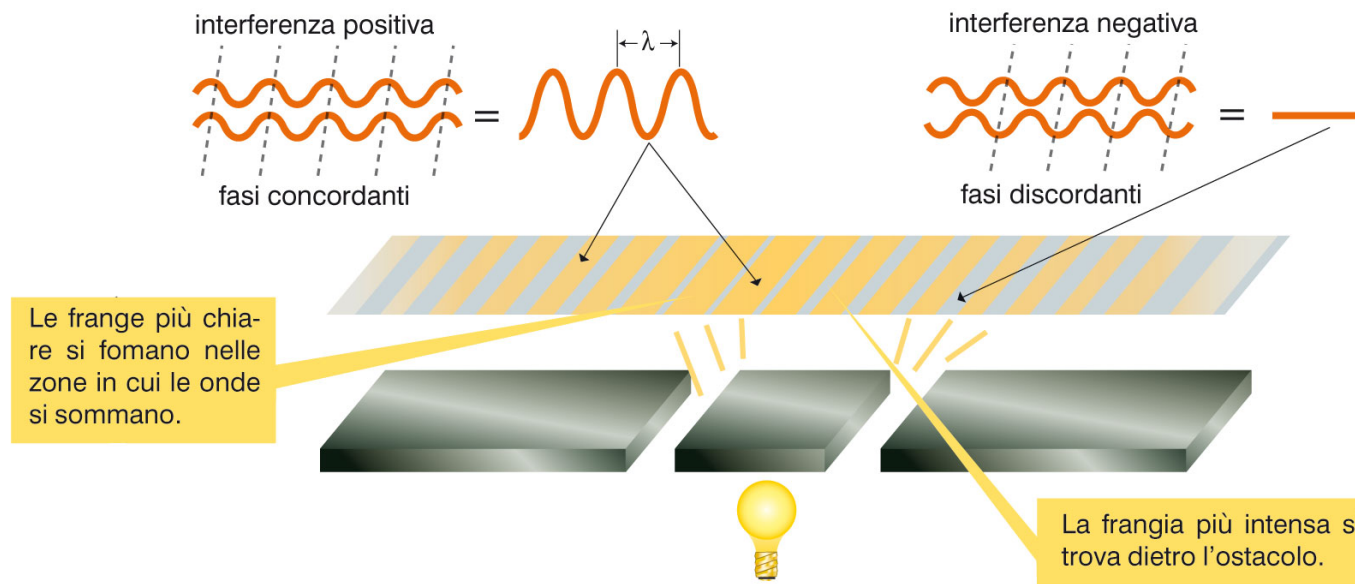
- La **lunghezza d'onda** (λ) si esprime in nanometri (nm) o in ångstrom (Å).
- La **frequenza** (ν) si misura in Hertz (Hz).
- La **velocità** (c), espressa da
$$c = \lambda \cdot \nu$$



ZANICHELLI

La doppia natura della luce (III)

La **diffrazione** della luce è la caratteristica principale della sua **natura ondulatoria**.



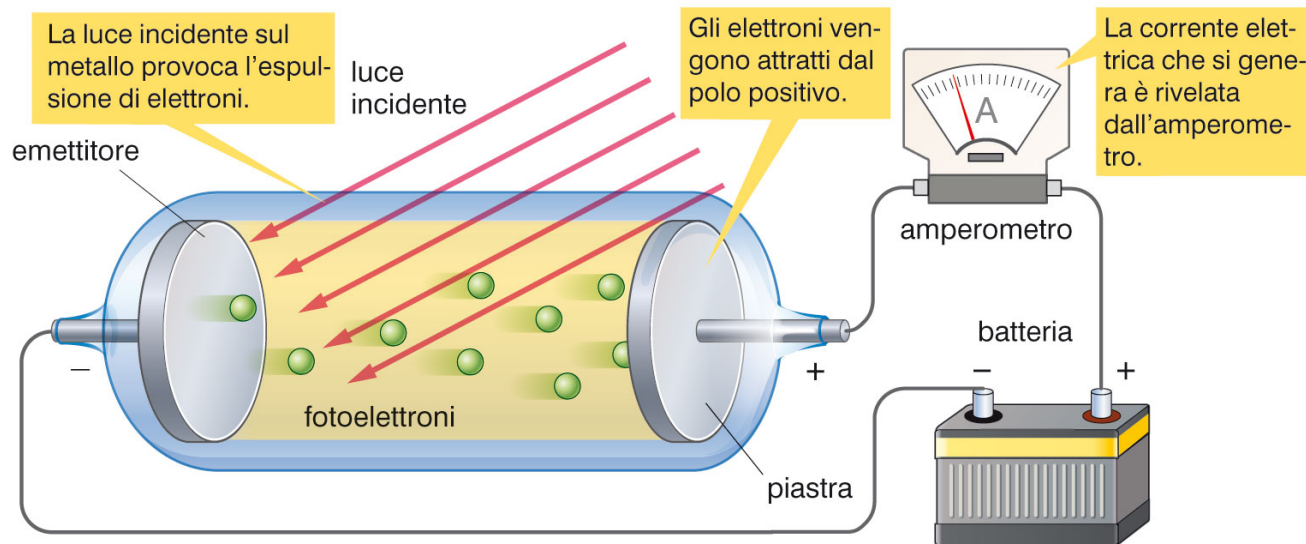
La doppia natura della luce (IV)

L'interazione della luce con la materia è la prova che la luce ha anche **natura corpuscolare**.

La propagazione del fascio luminoso è dovuto allo spostamento di un gruppo di pacchetti di energia, detti *quanti di energia* o **fotoni**.

La doppia natura della luce (V)

Secondo la teoria corpuscolare i **fotoni** possono provocare l'espulsione degli elettroni atomici oppure possono venire assorbiti cedendo l'energia che trasportano.



La doppia natura della luce (VI)

La **relazione di Planck-Einstein** riassume questo comportamento:

$$E = h \cdot \nu$$

dove

E = energia di un fotone di luce

$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ (*costante di Planck*)

ν = frequenza della radiazione elettromagnetica

Poiché h è costante, E e ν sono grandezze costanti

La doppia natura della luce (VII)

Ricordando che $v = c / \lambda$, la stessa relazione si può scrivere anche:

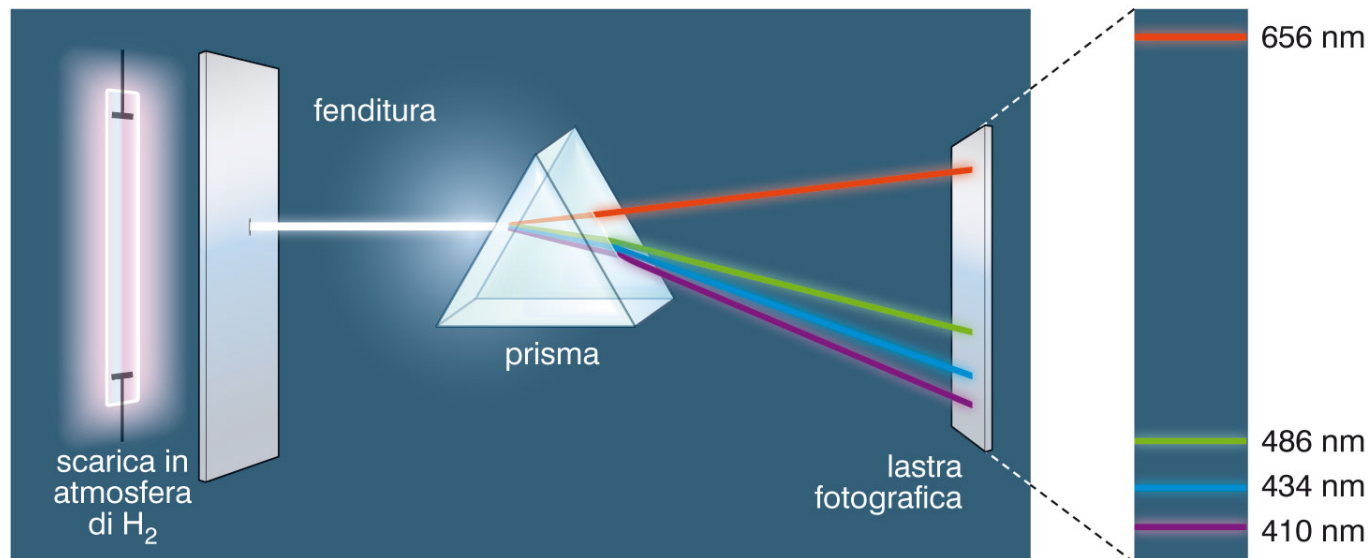
$$E = h \cdot c / \lambda$$

E e λ sono grandezze inversamente proporzionali.

Le due formule evidenziano i due aspetti della natura della luce, ondulatoria e corpuscolare.

La «luce» degli atomi (I)

La luce emessa dagli atomi non è continua e presenta soltanto alcune frequenze, caratteristiche per ciascun tipo di atomo.



La «luce» degli atomi (II)

L'emissione di luce dei gas rarefatti si ha in seguito al trasferimento di energia dalla scarica elettrica agli atomi che costituiscono il gas.

Se si fa passare luce bianca attraverso un'ampolla riempita di gas, nello spettro si identificano righe meno brillanti: sono le **righe di assorbimento**.

Le radiazioni elettromagnetiche assorbite da ciascun tipo di atomo hanno la stessa frequenza di quelle emesse dall'atomo eccitato.

L'atomo di Bohr (I)

Attraverso i suoi studi **Bohr** spiegò perché soltanto certe radiazioni possono interagire con gli atomi e quale relazione intercorre tra radiazione luminosa e struttura atomica.

Bohr perfezionò il modello di Rutherford e riuscì a spiegare la stabilità degli atomi e l'emissione degli spettri a righe.

L'atomo di Bohr (II)

Bohr articolò la sua teoria a partire da un punto fondamentale:

un fotone che viene assorbito da un atomo, cede tutta la sua energia a uno dei suoi elettroni, che passa così a uno stato energetico più elevato.

L'atomo di Bohr (III)

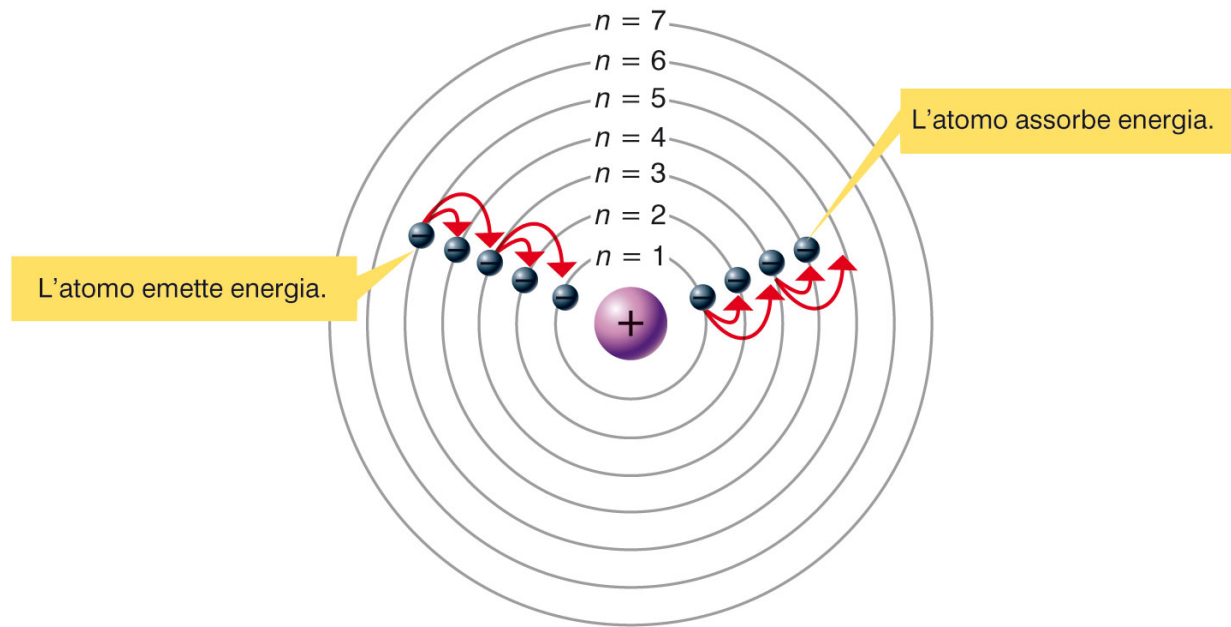
I punti salienti del modello atomico di Bohr sono:

1. L'elettrone percorre solo determinate orbite circolari (**orbite stazionarie**), senza emettere e cedere energia e quindi senza cadere nel nucleo.
2. All'elettrone sono permesse solo certe orbite a cui corrispondono determinati valori di energia (**quantizzata**).

L'atomo di Bohr (IV)

3. Per passare da un'orbita a un'altra a livello energetico superiore, l'elettrone assorbe energia.
4. Per passare da un'orbita a un'altra a contenuto energetico minore, l'elettrone emette un fotone di appropriata frequenza (se appartiene al visibile dello spettro elettromagnetico, appare come riga colorata).
5. L'energia del fotone emesso o assorbito corrisponde alla differenza di energia delle due orbite.

L'atomo di Bohr (V)



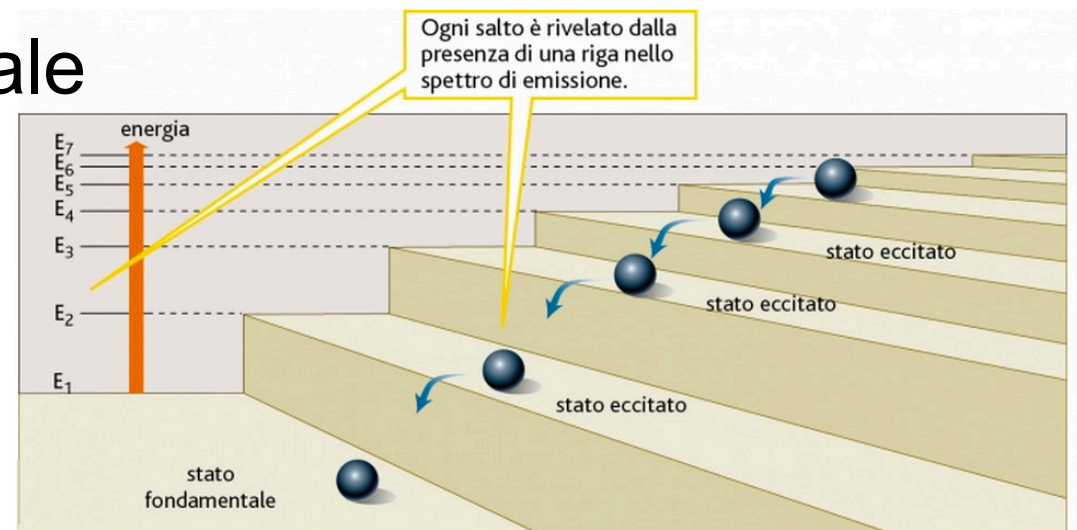
Le orbite degli elettroni in un atomo sono **quantizzate.**

L'atomo di Bohr (VI)

Il numero quantico principale n indica il livello energetico associato a ogni orbita.

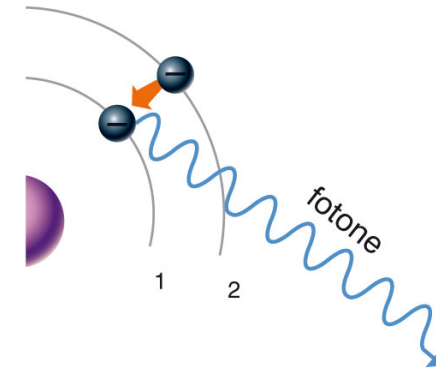
Il livello più basso di energia è detto **stato fondamentale**.

I livelli a energia superiore dello stato fondamentale si chiamano **stati eccitati**.

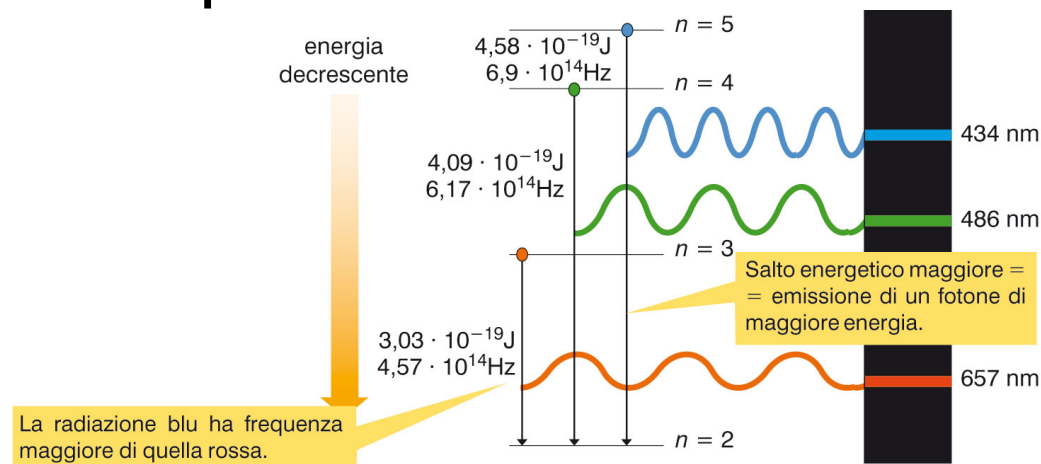


L'atomo di Bohr (VII)

A ogni salto di orbita si ha una **transizione energetica**, ovvero emissione di energia sotto forma di fotone.



Ogni transizione dell'elettrone da uno stato eccitato a un livello energetico inferiore è caratterizzata da una riga nello spettro di emissione.



L'atomo di Bohr (VIII)

Il modello atomico di Bohr presentò presto tutti i suoi limiti: non era applicabile ad atomi con molti elettroni e non spiegava gli spettri atomici in presenza di un campo magnetico.

Le contraddizioni emerse in questo modello erano dovute all'inadeguatezza delle leggi della meccanica classica.

La doppia natura dell'elettrone (I)

De Broglie ipotizzò che la doppia natura ondulatoria e corpuscolare fosse una proprietà universale della materia.

Associò a ogni particella in movimento un'onda.



Il legame tra caratteristiche corpuscolari e ondulatorie si manifesta nella relazione:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E} = \frac{h \cdot c}{m \cdot c^2} = \frac{h}{m \cdot c}$$

quantità di moto del fotone

La doppia natura dell'elettrone (II)

Le onde associate con l'elettrone, e con qualsiasi corpo in movimento, si chiamano **onde di de Broglie**.

A ogni corpo in movimento è associata quindi una lunghezza d'onda:

$$\lambda = h / (m \cdot v)$$

dove $(m \cdot v)$ rappresenta la quantità di moto dell'elettrone, m la sua massa e v la sua velocità.

L'elettrone e la meccanica quantistica (I)

La **meccanica quantistica** è la parte della chimica-fisica che descrive il comportamento di elettroni, fotoni e altre particelle microscopiche, basandosi su leggi statistiche.

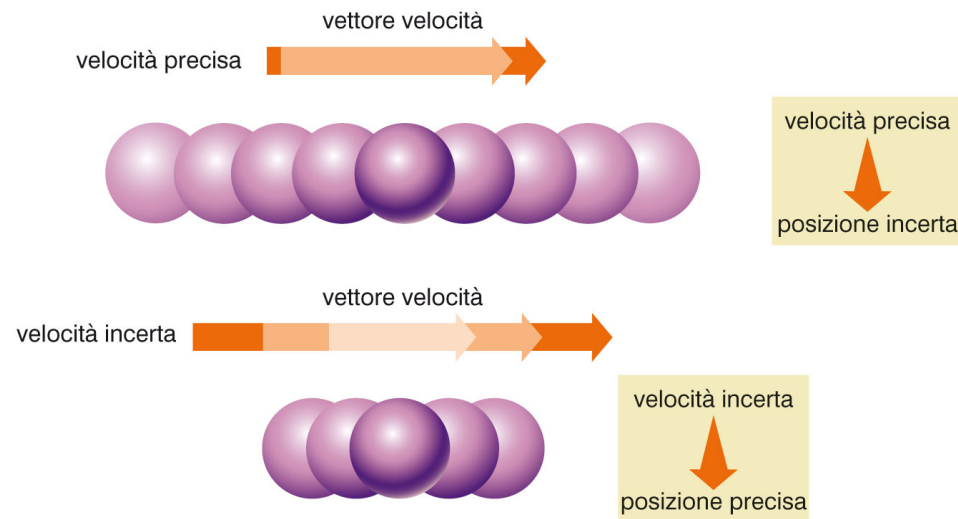
Le leggi della meccanica quantistica determinano la **probabilità** con cui può verificarsi un evento che coinvolge particelle microscopiche: possono per esempio fornire indicazioni statistiche sulla posizione o la velocità delle particelle.

L'elettrone e la meccanica quantistica (II)

Il principio di indeterminazione di Heisenberg afferma che non è possibile conoscere a ogni istante, contemporaneamente, la posizione e la velocità di un elettrone.



L'elettrone e la meccanica quantistica (III)



Poiché le informazioni sul moto dell'elettrone possono essere solo di tipo probabilistico, con la meccanica quantistica il concetto di orbita di un elettrone è superato e inadeguato.

L'equazione d'onda

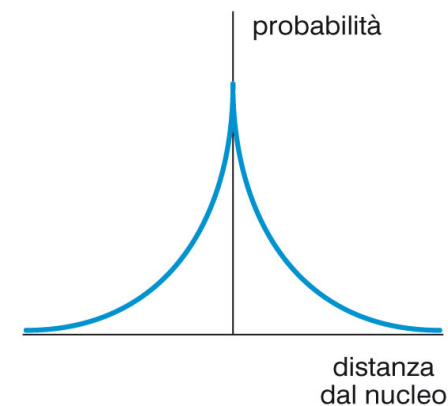
Le onde che si propagano con l'elettrone in moto nell'atomo possono essere descritte da una funzione matematica proposta da Schrödinger nel 1926: è l'**equazione d'onda di Schrödinger**.

Tale funzione fornisce informazioni sulla probabilità di trovare l'elettrone in un punto particolare dello spazio intorno al nucleo.



Ricorda

ψ^2 grande = alta probabilità di trovare l'elettrone;
 ψ^2 piccolo = bassa probabilità di trovare l'elettrone.



Numeri quantici e orbitali (I)

La funzione d'onda contiene tre numeri interi, detti **numeri quantici** (n , l e m) che definiscono lo stato quantico dell'elettrone e ne specificano il valore di una proprietà.

L'**orbitale** è una funzione d'onda elettronica caratterizzata da una particolare terna di valori di n , l e m .

Numeri quantici e orbitali (II)

- **Numero quantico principale n**
($n = 1, 2, 3, \dots, 7$): definisce il livello energetico dell'elettrone che è proporzionale alla distanza dal nucleo.
- **Numero quantico secondario l**
($l = 0, 1, \dots, n-1$): determina le caratteristiche geometriche dell'orbitale (sottolivello energetico).

valori di l 0 1 2 3

lettera s p d f

Numeri quantici e orbitali (III)

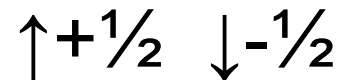
- **Numero quantico magnetico m**
($m = -l, 0, +l$): definisce quanti orbitali della stessa forma, ma con orientazione diversa, possono coesistere in un sottolivello.
- **Numero quantico di spin m_s**
($m_s = \pm 1/2$): indica il valore di *spin* che può essere assunto dall'elettrone.

Numeri quantici e orbitali (IV)

n	Numeri quantici		Tipo di orbitali	Numero massimo di elettroni per tipo di orbitale
	l da 0 a $(n-1)$	m $(-l, 0, +l)$		
4	3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	4f	14
	2	-2 -1 0 +1 +2	4d	10
	1	-1 0 +1	4p	6
	0	0	4s	2
3	2	-2 -1 0 +1 +2	3d	10
	1	-1 0 +1	3p	6
	0	0	3s	2
2	1	-1 0 +1	2p	6
	0	0	2s	2
1	0	0	1s	2

Numeri quantici e orbitali (V)

La scoperta del quarto numero quantico, portò Pauli a enunciare il **principio di esclusione**, secondo il quale in un orbitale possono essere presenti al massimo due elettroni con spin opposto, cioè antiparallelo.



Lo *spin* è una proprietà intrinseca dell'elettrone che si manifesta quando l'elettrone, sottoposto all'azione di un campo magnetico disomogeneo, assume due diversi stati energetici.

Dall'orbitale alla forma dell'atomo (I)

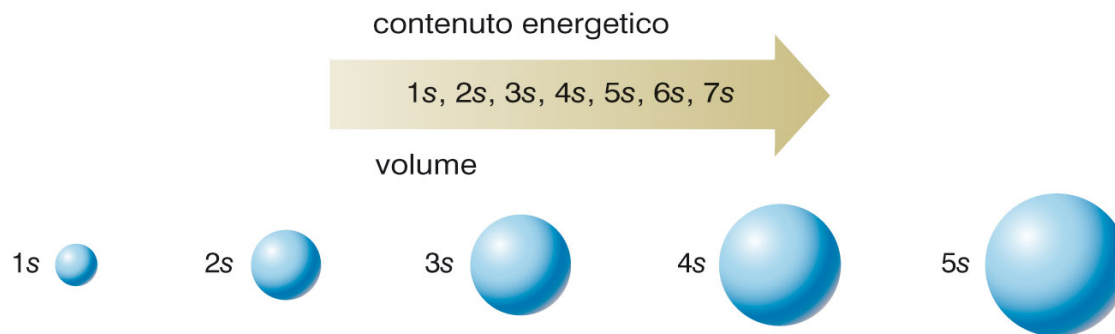
Lo spazio intorno al nucleo entro il quale si ha una certa probabilità di trovare l'elettrone, si chiama **superficie di contorno**.

La forma delle superfici di contorno e i volumi da esse racchiusi variano da un orbitale all'altro:

- la forma è determinata dal numero quantico secondario l ;
- il volume dipende dal numero quantico principale n .

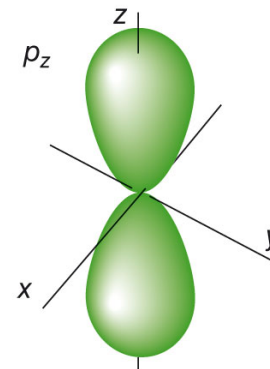
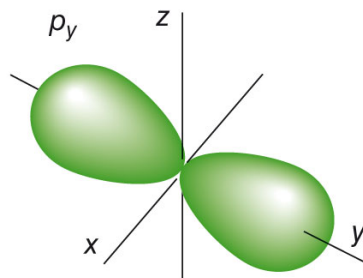
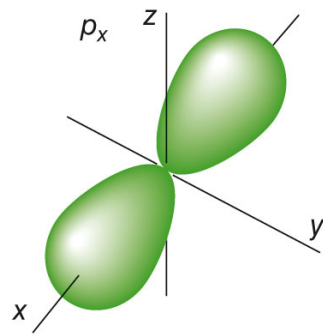
Dall'orbitale alla forma dell'atomo (II)

La superficie di contorno degli **orbitali s** è una sfera il cui volume aumenta all'aumentare del numero quantico principale n .



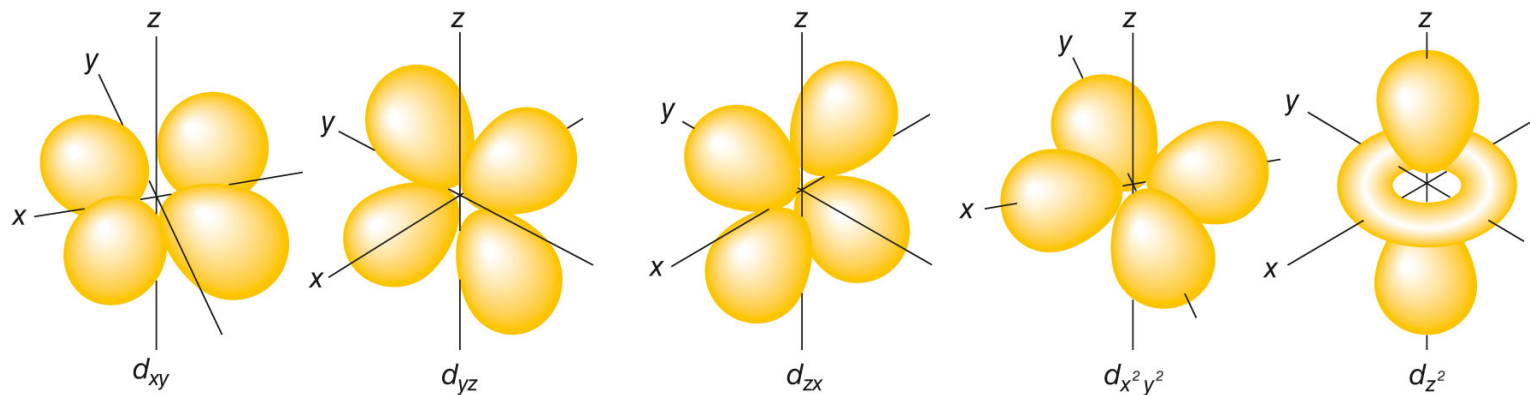
Dall'orbitale alla forma dell'atomo (III)

La superficie di contorno degli **orbitali p** è un doppio lobo che si espande lungo gli assi x , y e z

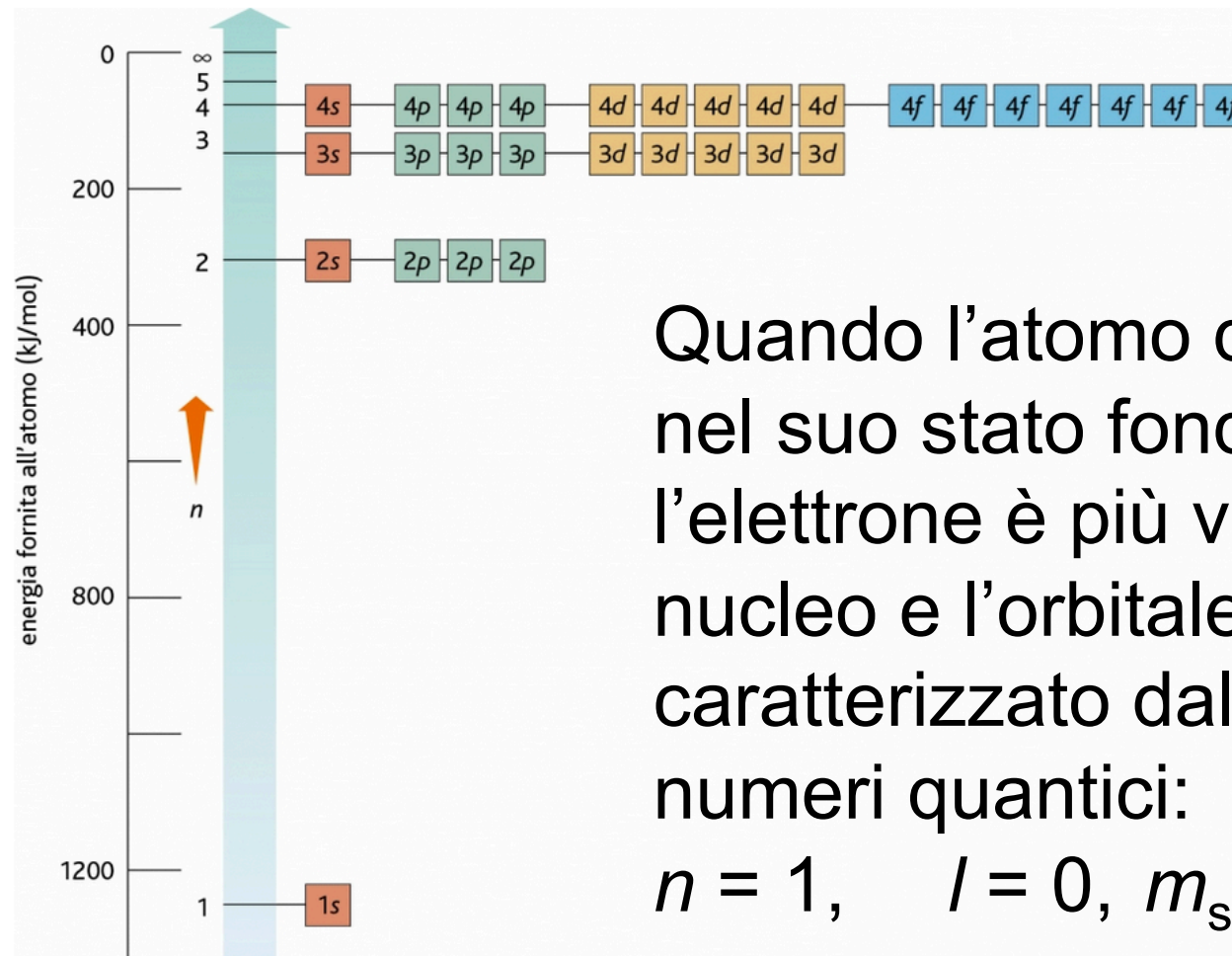


Dall'orbitale alla forma dell'atomo (IV)

La superficie di contorno degli **orbitali d** è a quattro lobi.

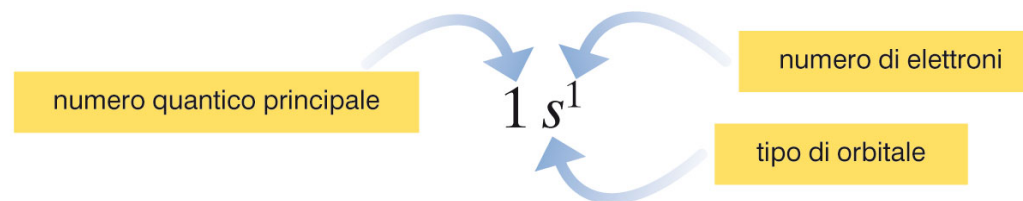


L'atomo di idrogeno secondo la meccanica quantistica



La configurazione degli atomi polielettronici (I)

La rappresentazione completa degli orbitali occupati da tutti gli elettroni in un atomo o in uno ione in ordine crescente di energia si chiama **configurazione elettronica**.



Per scrivere la configurazione elettronica di un atomo si applica il **principio di Aufbau**.

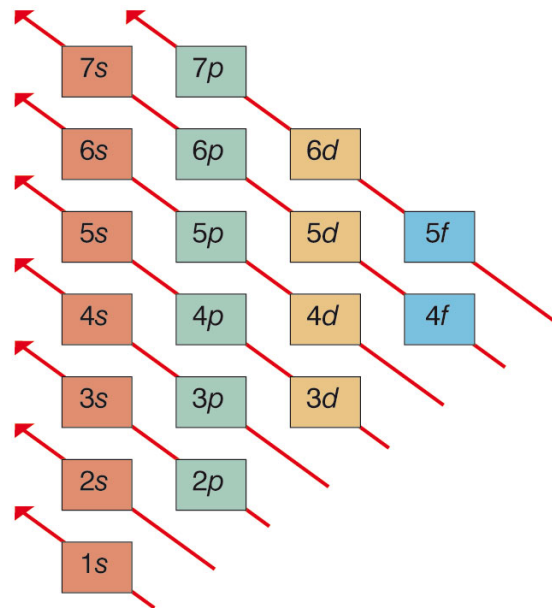
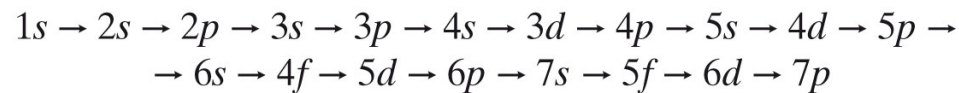
La configurazione degli atomi polielettronici (II)

Il numero atomico Z dell'elemento indica il numero di elettroni da sistemare.

Atomo	Z	Configurazione elettronica dello stato fondamentale		
H	1	$1s^1$] livello 1	
He	2	$1s^2$		
Li	3	$1s^2 2s^1$] livello 2	
Be	4	$1s^2 2s^2$		
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$		
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$		
N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$		
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$		
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$		
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$		
Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$] livello 3
Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$		
Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$		
Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$		
P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$		
S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$		
Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$		
Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$		

La configurazione degli atomi polielettronici (III)

La successione degli orbitali in cui sistemare gli elettroni in ordine di energia crescente è:



La configurazione degli atomi polielettronici (IV)

La somma degli esponenti che compaiono nella configurazione elettronica deve corrispondere al numero Z .

Gli elettroni occupano prima gli orbitali a energia più bassa, poi quelli a energia più elevata.

Secondo la **regola di Hund**, se ci sono orbitali allo stesso livello energetico, prima si colloca un elettrone su ciascun orbitale vuoto, poi si completano gli orbitali semipieni.

La configurazione degli atomi polielettronici (V)

Nella configurazione elettronica più stabile di un atomo, gli elettroni appartenenti a un medesimo sottolivello tendono ad assumere lo stesso *spin*.

