

ZANICHELLI

Vito Posca, Tiziana Fiorani

Chimica più .verde

ZANICHELLI

Capitolo 9

La struttura atomica

ZANICHELLI

Sommario

1. I limiti del modello planetario di Rutherford
2. Il modello atomico di Bohr applicato all'atomo di idrogeno
3. Il principio di indeterminazione non permette di definire l'orbita dell'elettrone
4. Il modello quanto-meccanico definisce l'orbitale atomico
5. I numeri quantici
6. La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Sommario

7. Il numero quantico di spin definisce il moto di rotazione dell'elettrone
8. Il principio di esclusione di Pauli definisce il numero di elettroni di un orbitale
9. L'energia degli orbitali aumenta con i valori di n e di l
10. L'ordine di riempimento degli orbitali è definito da tre principi
11. La configurazione elettronica

I limiti del modello planetario di Rutherford

Il modello planetario di Rutherford era in contraddizione con le leggi della **fisica classica**.

Un elettrone, ruotando attorno al nucleo, dovrebbe compiere orbite a spirale fino a cadere sul nucleo.



Inoltre, dovrebbe emettere radiazioni elettromagnetiche di *tutte* le lunghezze d'onda, dunque uno *spettro continuo*. Invece, ogni atomo emette radiazioni di lunghezza d'onda *definite*, registrabili in uno *spettro discontinuo*.

I limiti del modello planetario di Rutherford

Nel 1913 **Niels Bohr** applicò al modello planetario, precisamente all'atomo di idrogeno, la **teoria quantistica** formulata nel 1900 da Max Planck.



L'energia di una radiazione elettromagnetica è emessa (o assorbita) da un oggetto non in modo continuo, secondo quantità variabili, ma in modo discontinuo, secondo quantità ben definite, dette **quanti**.

In base alla teoria quantistica l'energia è **quantizzata**.

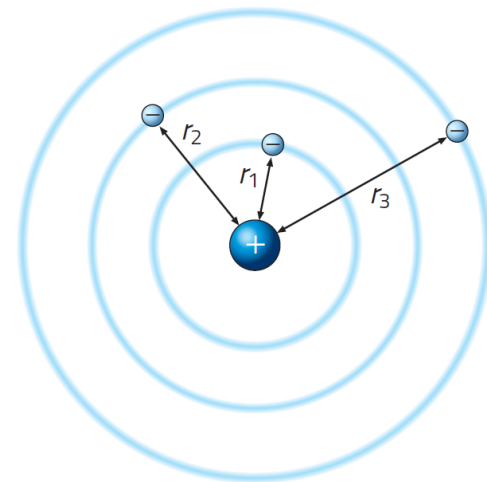
Il modello atomico di Bohr applicato all'atomo di idrogeno

Nello **stato fondamentale**, in cui l'elettrone possiede il minor contenuto energetico, il moto dell'elettrone è possibile solo su determinate orbite circolari (*orbite stazionarie*).

1. L'elettrone si muove su *orbite diverse* ma di **raggio** ben definito, con *determinati valori* e mai valori intermedi.

1. Le orbite hanno un'**energia quantizzata**, che assume solo determinati valori.

Se l'elettrone si muove in una delle orbite, *non si ha emissione di energia* e non cade sul nucleo.



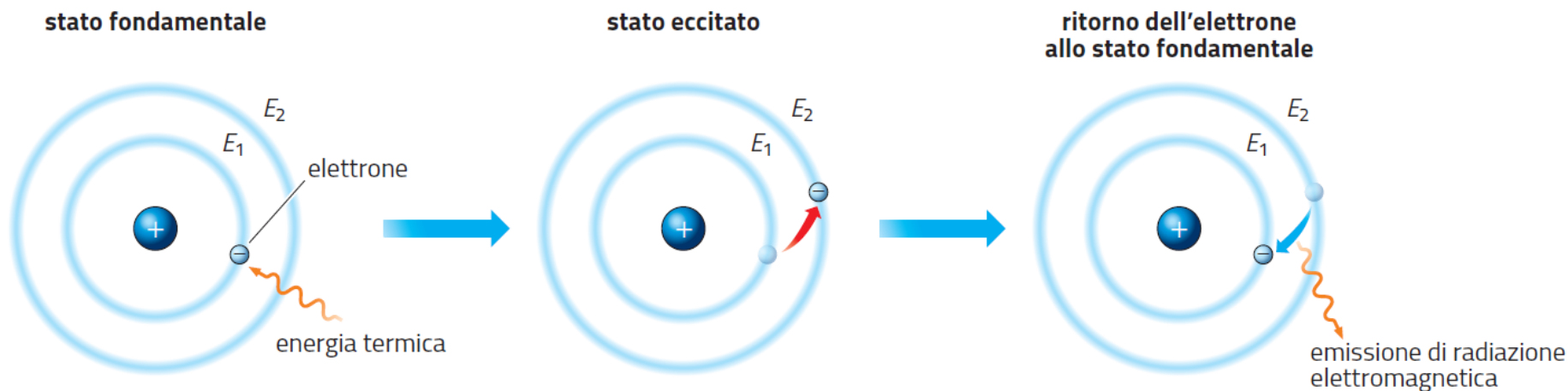
Il modello atomico di Bohr applicato all'atomo di idrogeno

Nello **stato eccitato**, ovvero lo stato in cui l'elettrone assorbe energia, l'elettrone passa da un livello energetico inferiore (*stato fondamentale*) a un livello energetico superiore (*stato eccitato*).

Quando all'atomo viene fornita energia, l'elettrone può passare dall'orbita E_1 con energia minore all'orbita E_2 con energia maggiore *assorbendo una quantità di energia* uguale alla differenza di energia (ΔE) tra le due orbite.

Il modello atomico di Bohr applicato all'atomo di idrogeno

Quando l'elettrone ritorna dallo stato eccitato allo stato fondamentale, *emette una quantità di energia* sotto forma di radiazione elettromagnetica con lunghezza d'onda definita.



Il principio di indeterminazione non permette di definire l'orbita dell'elettrone

Il modello di Bohr è in contraddizione con il **principio di indeterminazione** formulato pochi anni dopo da **Werner Heisenberg**:



è *impossibile* misurare con precisione e contemporaneamente una coppia di grandezze; anzi, la precisione di misura di una grandezza è inversamente proporzionale alla precisione di misura dell'altra.

Il principio di indeterminazione non permette di definire l'orbita dell'elettrone

Tale principio non permette di *definire esattamente le orbite* descritte dagli elettroni.

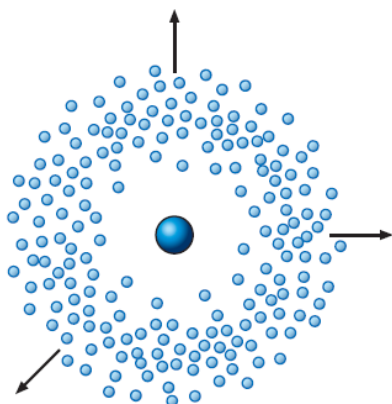
Le grandezze usate per determinare le orbite di un elettrone sono la *posizione* e la *velocità* dell'elettrone in ogni istante.

Secondo il principio di Heisenberg qualsiasi misura della posizione di un elettrone influisce sulla sua velocità ed è impossibile misurarle in uno stesso istante.

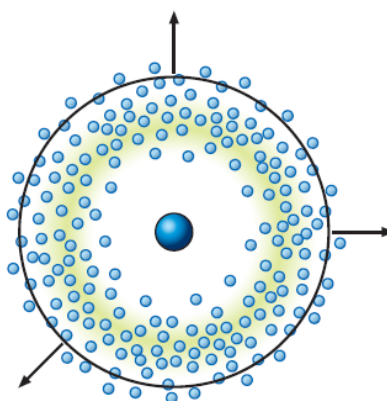
Il modello quanto-meccanico definisce l'orbitale atomico

È possibile stabilire solo la *probabilità* di trovare l'elettrone intorno al nucleo in una certa regione di spazio. La regione con contorno indefinito in cui è molto probabile che si trovi l'elettrone è chiamata *nube elettronica*.

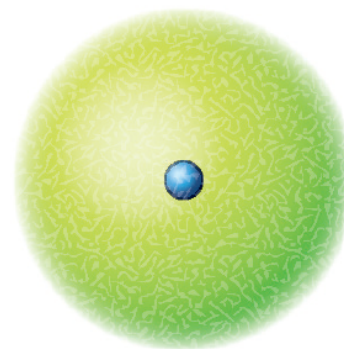
L'**orbitale** è la regione dello spazio intorno al nucleo in cui la probabilità di trovare l'elettrone è del 95%.



nube elettronica



orbitale



orbitale sferico

I numeri quantici

Dimensione ed energia, forma e orientazione degli orbitali sono specificati da *tre numeri interi* detti *quantici*.

Il numero quantico principale (n) definisce le *dimensioni* e l'*energia* dell'orbitale.

Assume valori interi positivi tra 1 e 7: $n = 1, 2, \dots, 7$

All'aumentare del valore di n aumenta la distanza dal nucleo e, quindi, le dimensioni e l'energia dell'orbitale.

Tutti gli orbitali con lo stesso valore di n costituiscono un *livello energetico*.

Il numero di orbitali per un dato valore di n è dato da n^2 .

I numeri quantici

Il **numero quantico secondario** o *azimutale* o *angolare* (l) indica la *forma* dell'orbitale.

Assume valori interi compresi tra 0 e $n - 1$:

$$l = 0, \dots, (n - 1)$$

Tutti gli orbitali con lo stesso valore di n , ma con diverso valore di l costituiscono un *sottolivello*.

Livello n	Sottolivello l
1	0
2	0, 1
3	0, 1, 2
4	0, 1, 2, 3

I numeri quantici

Il **numero quantico magnetico** (m) definisce l'*orientazione* dell'orbitale nello spazio rispetto ai tre assi ortogonali x , y , z .

Assume tutti i valori interi compresi tra $-l$ e $+l$:

$$m = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

Valori di ℓ	Valori di m
0	0
1	-1, 0, 1
2	-2, -1, 0, 1, 2
3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3

I numeri quantici

Gli orbitali che hanno lo stesso valore del numero quantico principale (n) e del numero quantico secondario (l), ma possiedono una diversa orientazione (diverso m), si chiamano **orbitali degeneri**.

Ad esempio, gli orbitali degeneri per $n = 2$ e $l = 1$ sono specificati dai numeri quantici:

$$n = 2 \quad l = 1 \quad m = -1;$$

$$n = 2 \quad l = 1 \quad m = 0;$$

$$n = 2 \quad l = 1 \quad m = 1$$

✓ Mettiamoci alla prova

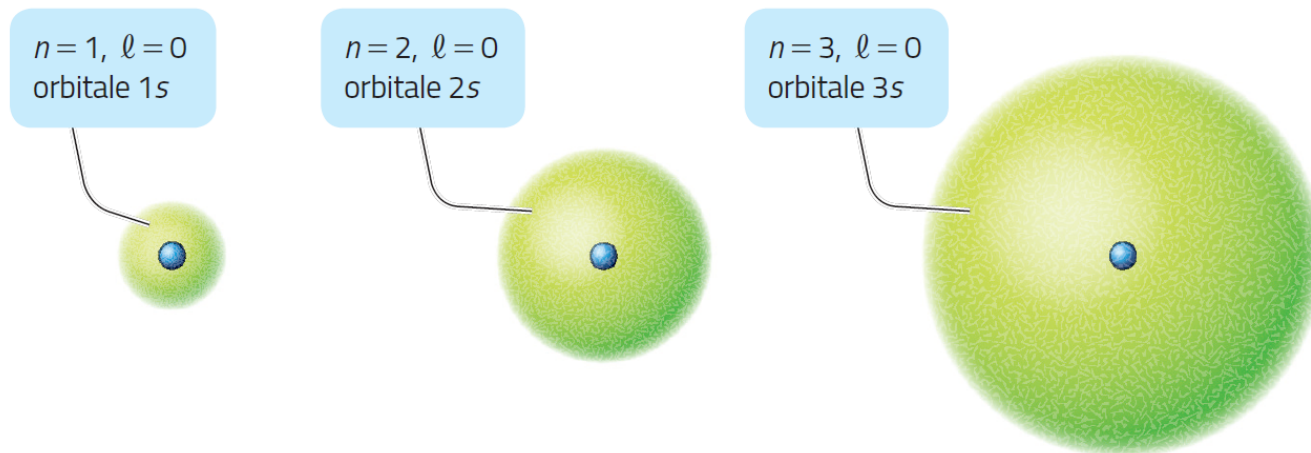
- Che cos'è l'orbitale? Qual è la differenza tra orbitale e orbita?
- Determina tutti i valori che possono assumere i numeri quantici l e m per $n = 4$.

La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Gli orbitali con $l = 0$ sono di tipo **s**.

Tutti gli orbitali s hanno forma *sferica*; all'aumentare di n aumentano dimensioni ed energia dell'orbitale.

Per distinguerli si premette a s il valore di n : 1s, 2s, 3s.



Si rappresentano graficamente con un quadratino:

La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Gli orbitali con $l = 1$ sono di tipo p .

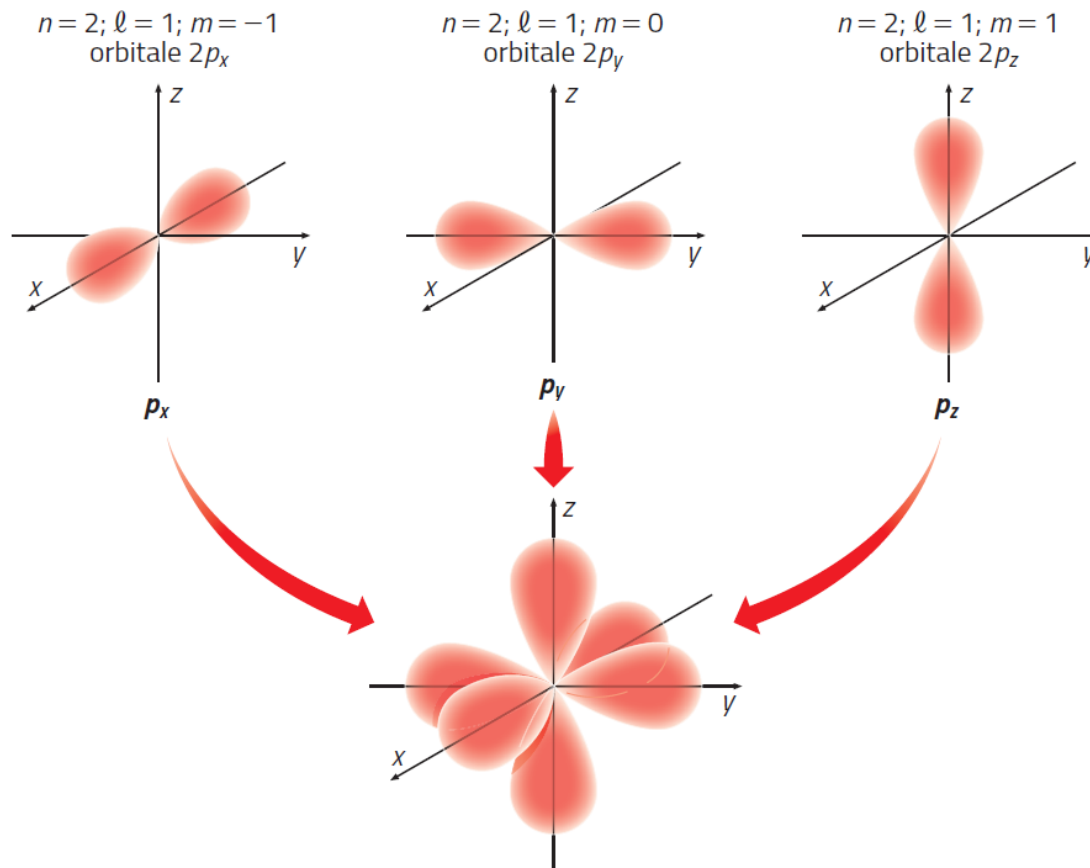
Per $l = 1$ esistono tre valori di m (-1, 0, +1), quindi 3 orbitali p con forma a due lobi e diversa orientazione.

Orbitali p con stesso valore di n , quindi stesse dimensioni ed energia, sono orbitali *degeneri*.

I tre orbitali p si rappresentano graficamente con tre quadratini: 

La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Rappresentazione dei tre orbitali p :




La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Gli orbitali con $l = 2$ sono di tipo d .

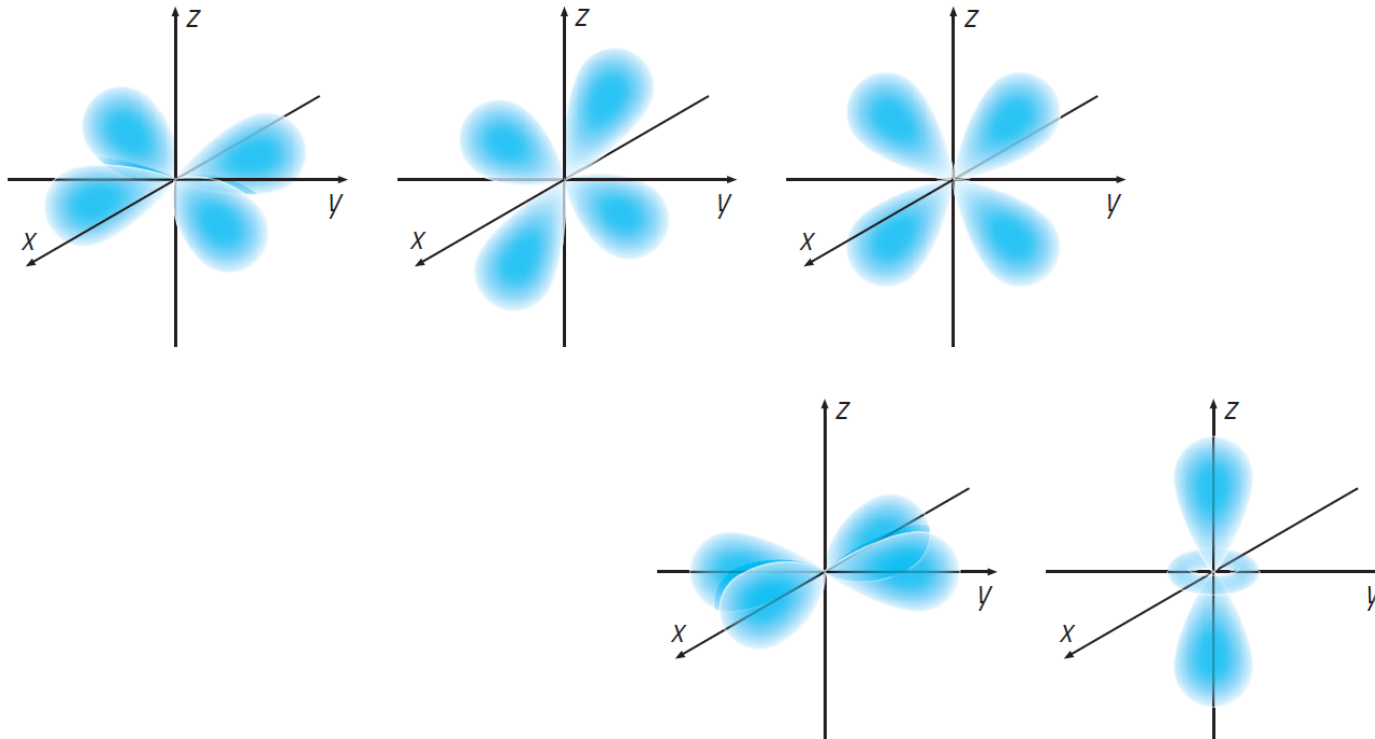
Per $l = 2$ esistono cinque valori di m (-2, -1, 0, 1, 2), quindi 5 orbitali d con diversa orientazione.

Orbitali d con stesso valore di n , quindi stesse dimensioni ed energia, lo stesso valore di l , quindi stessa forma, ma con diversa orientazione nello spazio sono *degeneri*.

I cinque orbitali d si rappresentano graficamente con cinque quadratini: 

La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Rappresentazione dei cinque orbitali d :



La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Gli orbitali con $l = 3$ sono di tipo f .

Per $l = 3$ esistono sette valori di m (-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3), quindi 7 orbitali f con diversa orientazione.

Orbitali f con stesso valore di n , quindi stesse dimensioni ed energia, con la stessa forma, ma con diversa orientazione nello spazio sono *degeneri*.

I sette orbitali f si rappresentano graficamente con sette quadratini: 

La forma degli orbitali atomici è definita dal numero quantico secondario

Valori dei numeri quantici n , l , m e degli orbitali dei primi tre livelli energetici:

Numeri quantici			Orbitali			
n	l	m	tipo	nome	numero per sottolivello	numero per livello (n^2)
1	0	0	<i>s</i>	1s	1	1
2	0	0	<i>s</i>	2s	1	4
	1	-1, 0, +1	<i>p</i>	2p	3	
3	0	0	<i>s</i>	3s	1	9
	1	-1, 0, +1	<i>p</i>	3p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	<i>d</i>	3d	5	

Il numero quantico di spin definisce il moto di rotazione dell'elettrone

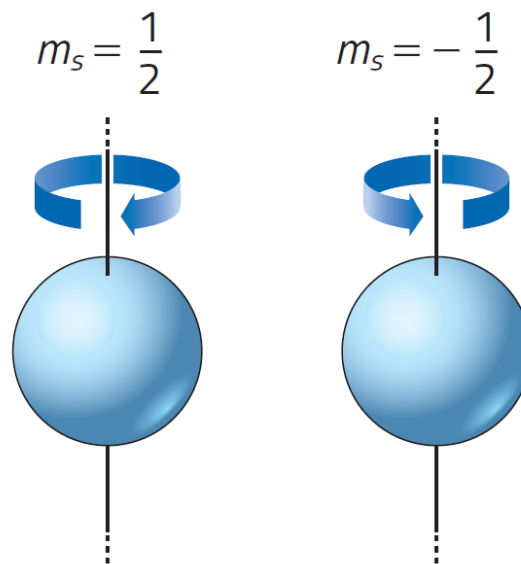
L'elettrone si comporta come fosse una piccola sfera che ruota anche intorno al proprio asse.

Il moto di rotazione dell'elettrone intorno al proprio asse è descritto dal **numero quantico di spin** (m_s).

Il numero quantico di spin può assumere solo due valori a seconda che la rotazione avvenga in senso orario o antiorario:

$$m_s = \frac{1}{2}$$

$$m_s = -\frac{1}{2}$$

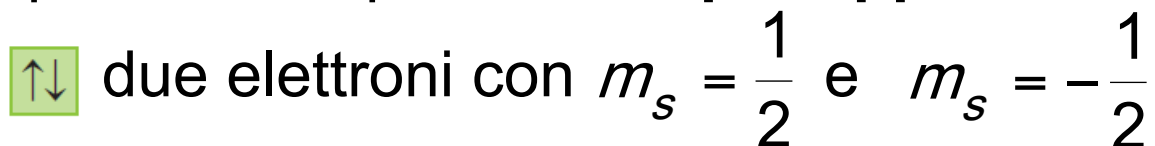


Il numero quantico di spin definisce il moto di rotazione dell'elettrone

Un orbitale con un elettrone si rappresenta con un quadratino contenente una freccia:



Due elettroni nello stesso orbitale con *diverso* numero quantico di spin hanno **spin opposto**:



Due o più elettroni in due o più orbitali con lo *stesso* numero quantico di spin hanno **spin parallelo**:



Il principio di esclusione di Pauli definisce il numero di elettroni in un orbitale

Il numero di elettroni che possono coesistere in un orbitale è definito dal **principio di esclusione di Pauli**.

Un orbitale non può essere occupato da più di due elettroni e quando due elettroni occupano lo stesso orbitale devono avere spin opposto.

Quindi, in un atomo non possono coesistere due o più elettroni con tutti e quattro i numeri quantici uguali.

In base al principio di Pauli possiamo stabilire il numero *massimo* di elettroni per **sottolivello** e per **livello**.

Il principio di esclusione di Pauli definisce il numero di elettroni in un orbitale

Sottolivello (ℓ)	Orbitali		Numero massimo di elettroni per sottolivello
	tipo	numero	
0	<i>s</i>	1	2
1	<i>p</i>	3	6
2	<i>d</i>	5	10
3	<i>f</i>	7	14

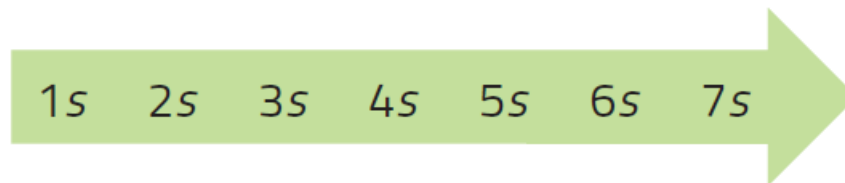
Livello (n)	Orbitali		Numero massimo di elettroni per livello ($2n^2$)
	tipo	numero (n^2)	
1	<i>s</i>	1	2
2	<i>s, p</i>	4 (1+3)	8 (2+6)
3	<i>s, p, d</i>	9 (1+3+5)	18 (2+6+10)
4	<i>s, p, d, f</i>	16 (1+3+5+7)	32 (2+6+10+14)

L'energia degli orbitali aumenta con i valori di n e di l

L'energia degli orbitali dipende dal *numero quantico principale* (n) e dal *numero quantico secondario* (l) e aumenta al crescere dei valori di n e di l .

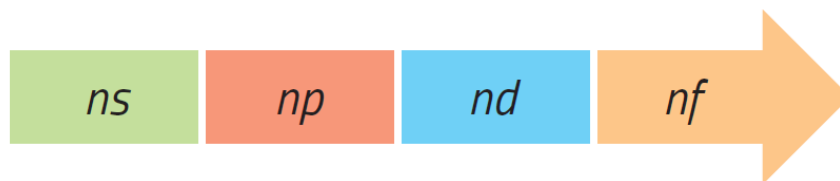
- Per orbitali con *diverso* livello energetico (n) ma con la *stessa* forma (l), l'energia degli orbitali aumenta con il valore di n .

Per gli orbitali s si ha:



L'energia degli orbitali aumenta con i valori di n e di l

- Per orbitali con lo stesso livello energetico (n) ma con diversa forma (l), l'energia degli orbitali aumenta con il valore di l :



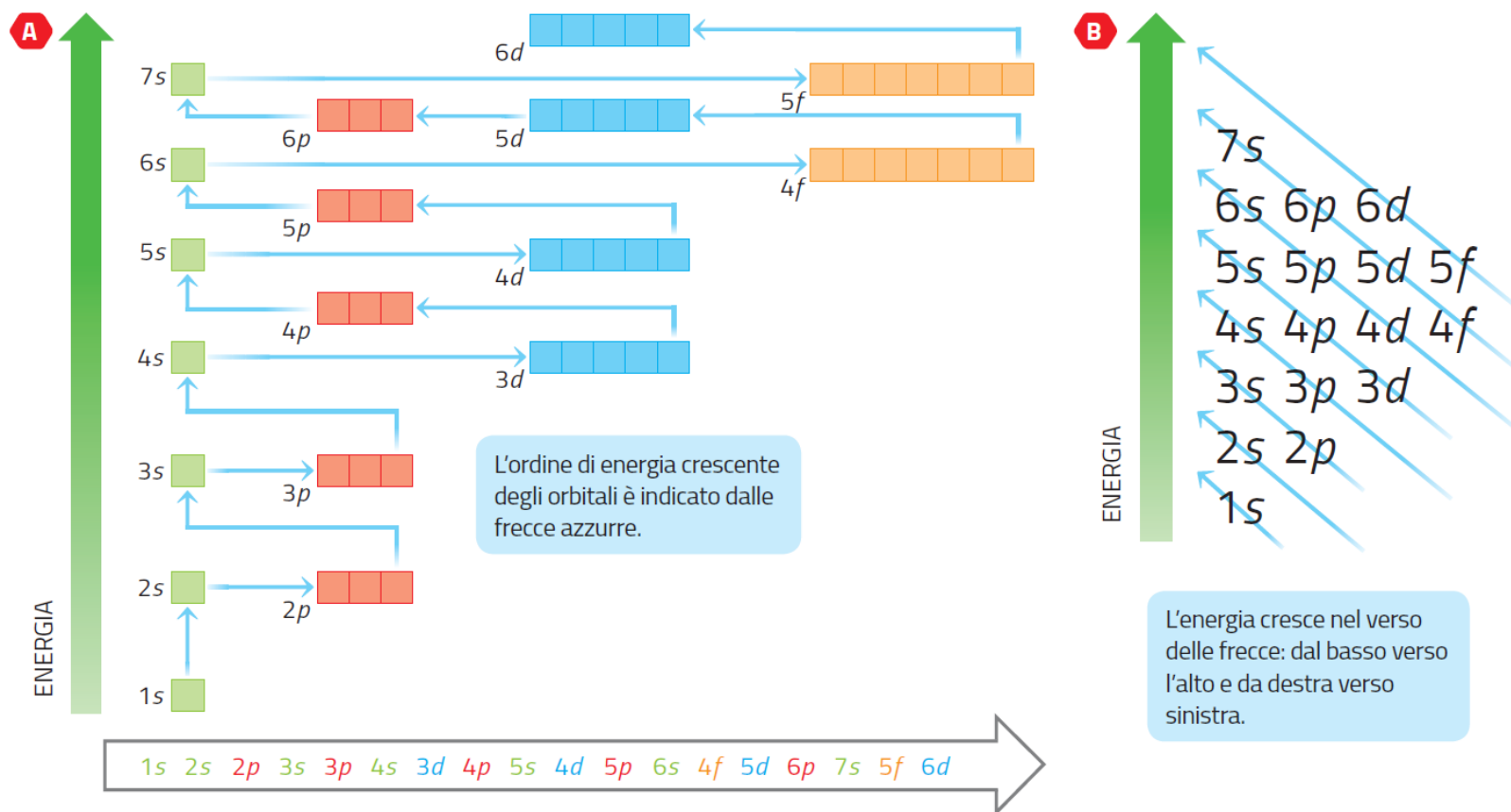
Per orbitali con $n = 4$ e $l = 0, 1, 2, 3$ si ha quindi:



- Orbitali con lo stesso livello energetico (n) e con la stessa forma (l) hanno la stessa energia e sono detti **isoenergetici**.

L'energia degli orbitali aumenta con i valori di n e di l

In base a questi criteri e alle inversioni di energia tra $s-d$ e $s-f$ di vicini livelli energetici, costruiamo l'ordine di energia crescente degli orbitali (A) e il diagramma delle diagonali (B).



L'ordine di riempimento degli orbitali è definito da tre principi

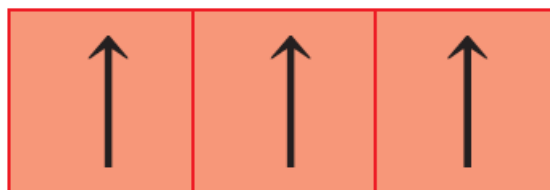
Gli elettroni degli atomi nello stato fondamentale (o di minima energia) riempiono gli orbitali a disposizione secondo un ordine che deve tenere conto delle seguenti regole:

- 1. principio di minima energia:** gli elettroni tendono a occupare gli orbitali di minore energia;
- 2. principio di esclusione di Pauli:** due elettroni in un atomo non possono avere i quattro numeri quantici uguali;

L'ordine di riempimento degli orbitali è definito da tre principi

3. principio di Hund: gli elettroni di un atomo che hanno a disposizione orbitali degeneri (i tre orbitali p , i cinque orbitali d , i sette orbitali f) si dispongono con spin parallelo occupando tutti gli orbitali disponibili.

Per i tre orbitali degeneri p :



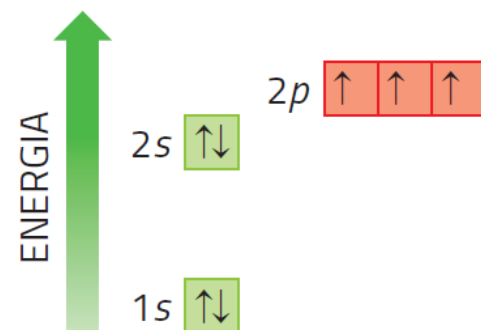
La configurazione elettronica

La **configurazione elettronica** di un atomo nello stato fondamentale è la disposizione degli elettroni nei vari orbitali.

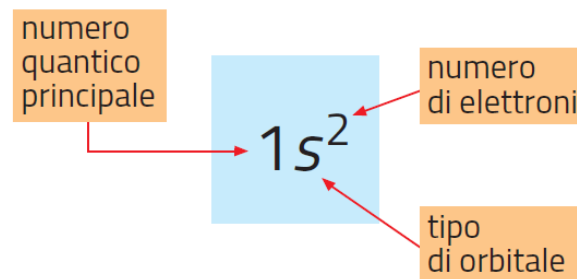
Si può rappresentare in due modi.

1. Il diagramma energia-orbitale

rappresenta gli orbitali con dei quadratini e gli elettroni con delle frecce verticali, secondo la loro energia crescente.

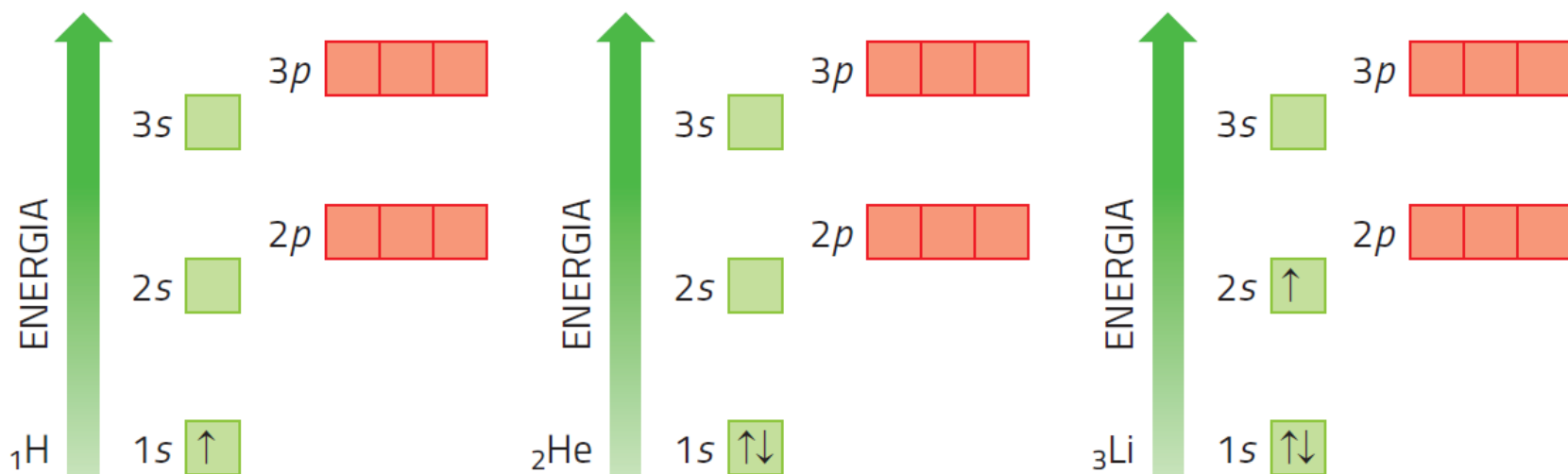


1. La **notazione *s p d f*** denomina i vari orbitali con i simboli *s*, *p*, *d*, *f*, e specifica con un esponente il numero di elettroni contenuti.



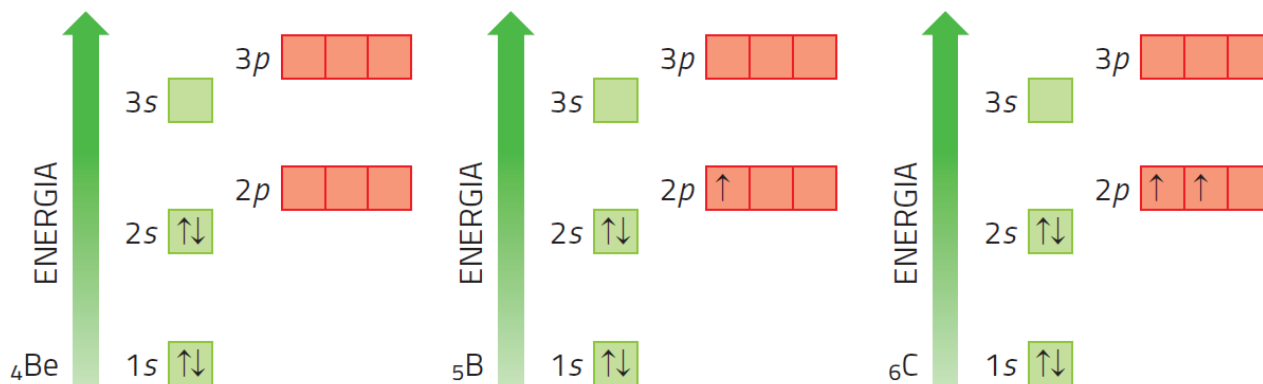
La configurazione elettronica

La rappresentazione con il diagramma energia-orbitale delle configurazioni elettroniche degli atomi di **idrogeno** (H), **elio** (He) e **litio** (Li) è:

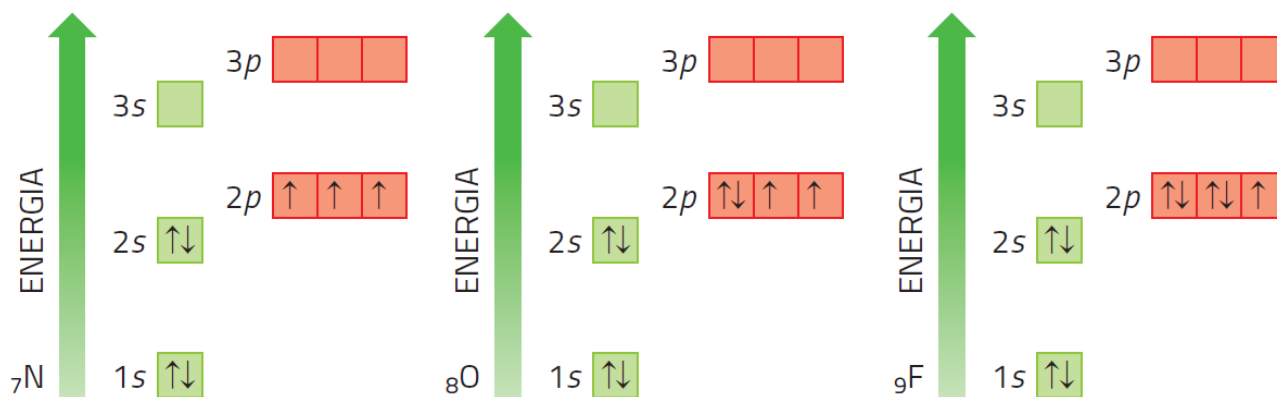


La configurazione elettronica

Berillio (Be), boro (B) e carbonio (C):

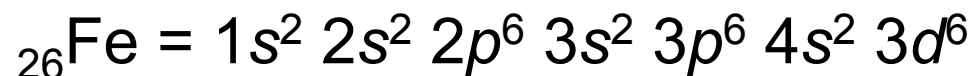
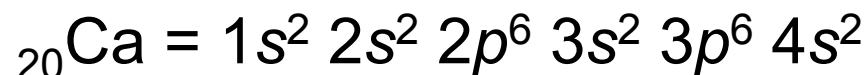


Azoto (N), ossigeno (O) e fluoro (F):



La configurazione elettronica

Le configurazioni elettroniche del **calcio** (Ca) e del **ferro** (Fe) con la notazione *s p d f* sono:



Dopo il riempimento degli orbitali *3p*, gli elettroni si dispongono nell'orbitale *4s* e successivamente nei *3d*.

✓ Mettiamoci alla prova

- Quanti elettroni al massimo possono essere presenti in un orbitale $3d$?
- Rappresenta la configurazione elettronica dello zolfo (S, $Z=16$) con la notazione $s p d f$.