

ZANICHELLI

Giuseppe Valitutti

Marco Falasca

Patrizia Amadio

Lineamenti di chimica

ZANICHELLI

Capitolo 7

La struttura dell'atomo

ZANICHELLI

Sommario

1. La doppia natura della luce
2. La «luce» degli atomi
3. L'atomo di idrogeno secondo Bohr
4. L'energia di ionizzazione
5. Livelli e sottolivelli di energia in un atomo
6. La configurazione elettronica degli elementi
7. L'elettrone: particella o onda?
8. L'equazione d'onda e l'orbitale

La doppia natura della luce

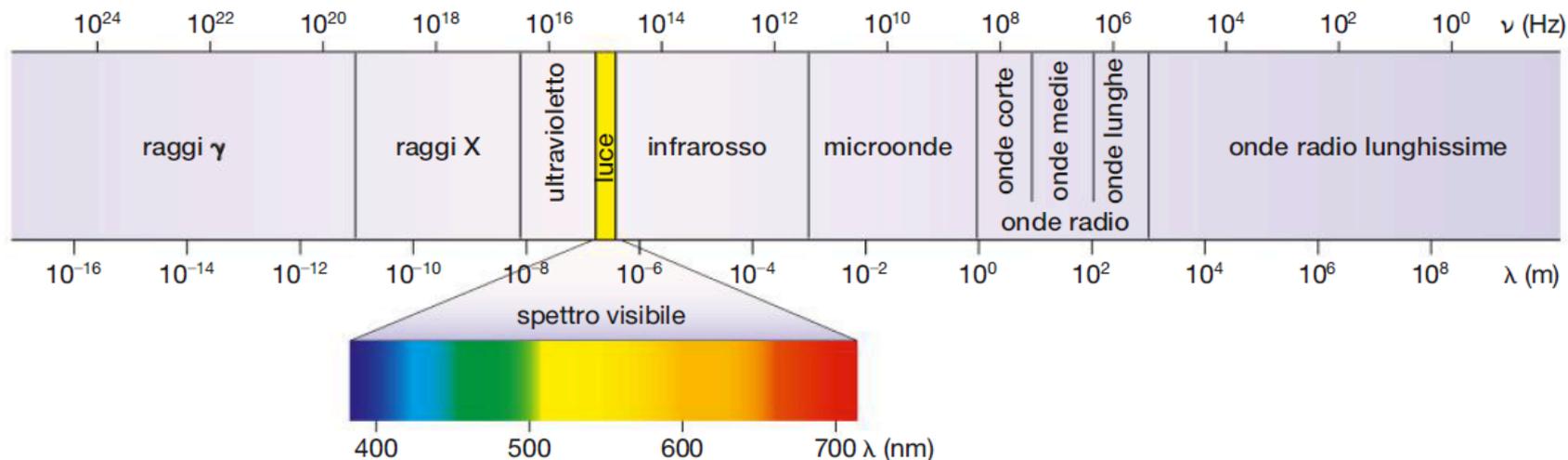
Quasi tutto quello che sappiamo sulla *struttura elettronica degli atomi* è stato scoperto attraverso l'analisi della **luce** emessa o assorbita dalle sostanze.

All'inizio del Novecento il lavoro di Max Planck e Albert Einstein ha confermato per la luce una doppia natura, **ondulatoria e corpuscolare**.

La doppia natura della luce

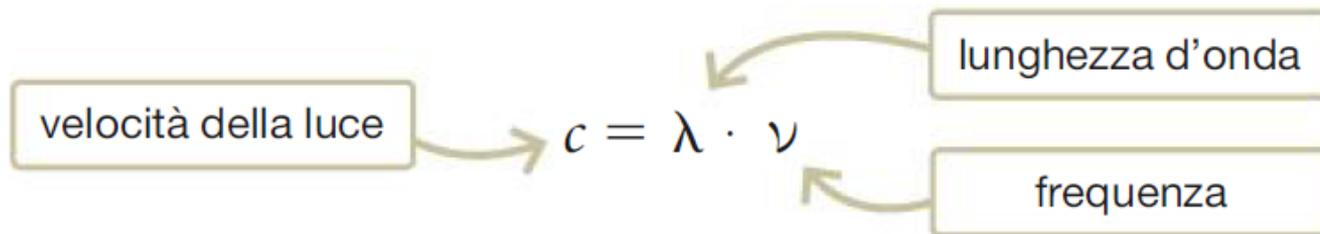
La luce ha natura **ondulatoria**.

Appartiene alla famiglia delle onde elettromagnetiche, il cui insieme costituisce lo **spettro elettromagnetico**.

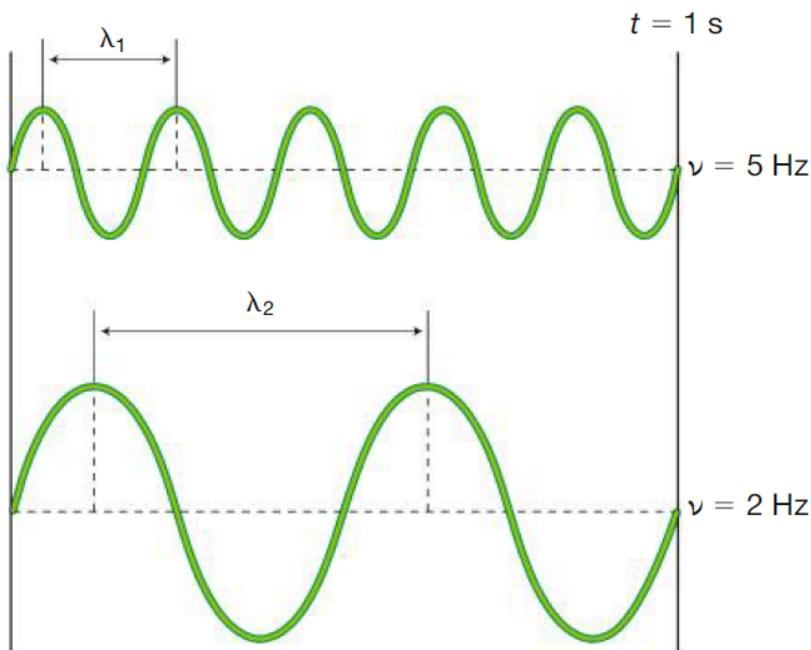


La doppia natura della luce

- **frequenza** (ν) \rightarrow numero di oscillazioni di un'onda in un secondo, si misura in *hertz*
- **lunghezza d'onda** (λ) \rightarrow distanza dopo la quale un'onda si riproduce uguale, si misura in *metri*
- **velocità di propagazione** (v) \rightarrow nel vuoto pari alla velocità della luce c , ovvero $3,00 \cdot 10^8$ m / s



La doppia natura della luce

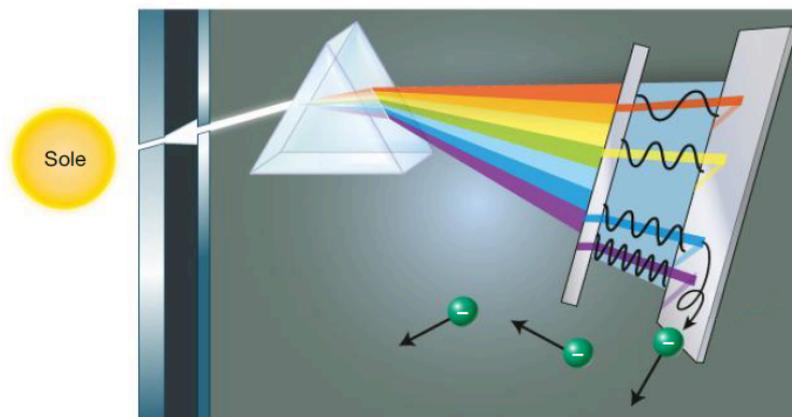


Al diminuire della lunghezza d'onda, aumenta la frequenza: le due grandezze sono *inversamente proporzionali*.

La doppia natura della luce

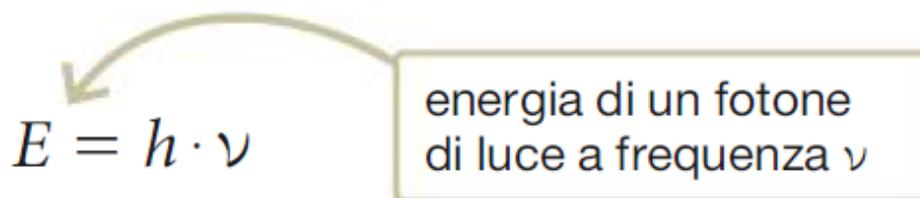
La luce ha natura **corpuscolare**.

Un fascio di luce ultravioletta proiettato su una lastrina di zinco provoca l'espulsione di elettroni dalla superficie del metallo (**effetto fotoelettrico**), ma solo se la frequenza della luce è superiore a un certo valore (**energia di soglia**).



La doppia natura della luce

Le onde elettromagnetiche sono composte da un insieme di «pacchetti di energia» detti **fotoni**, capaci di cedere energia (E) alla materia.



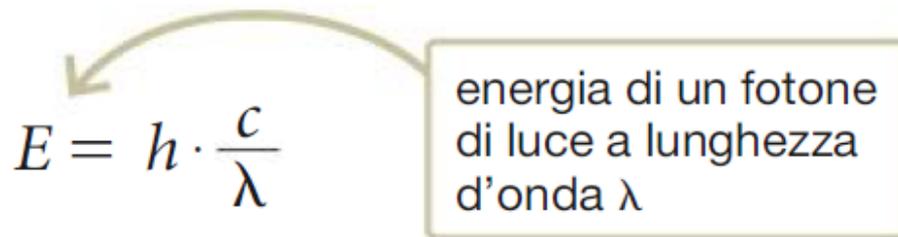
$E = h \cdot \nu$

energia di un fotone
di luce a frequenza ν

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

La doppia natura della luce

E poiché $\nu = c / \lambda$

$$E = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$


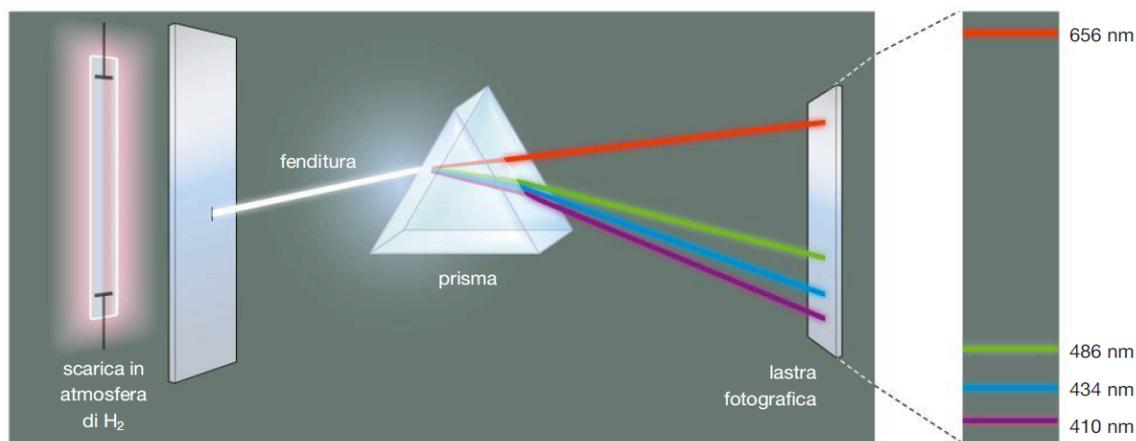
energia di un fotone
di luce a lunghezza
d'onda λ

Nella relazione sono riuniti i due aspetti della natura della luce.

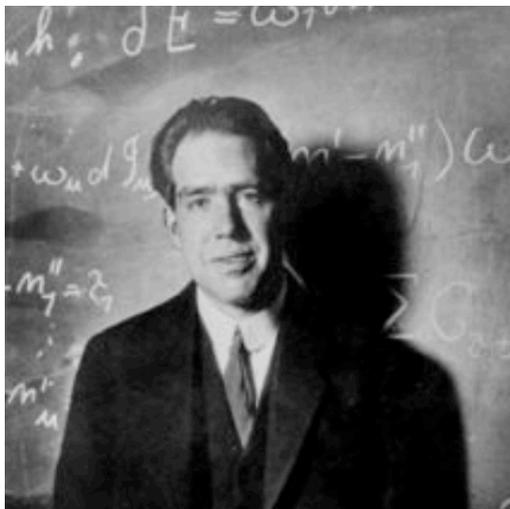
La «luce» degli atomi

I solidi e i liquidi, se portati all'incandescenza, emettono una luce a **spettro continuo**, cioè costituita da radiazioni di tutte le frequenze.

I gas, invece, emettono una serie di righe colorate distinte (**spettro a righe**), caratteristiche per ogni elemento.



L'atomo di idrogeno secondo Bohr



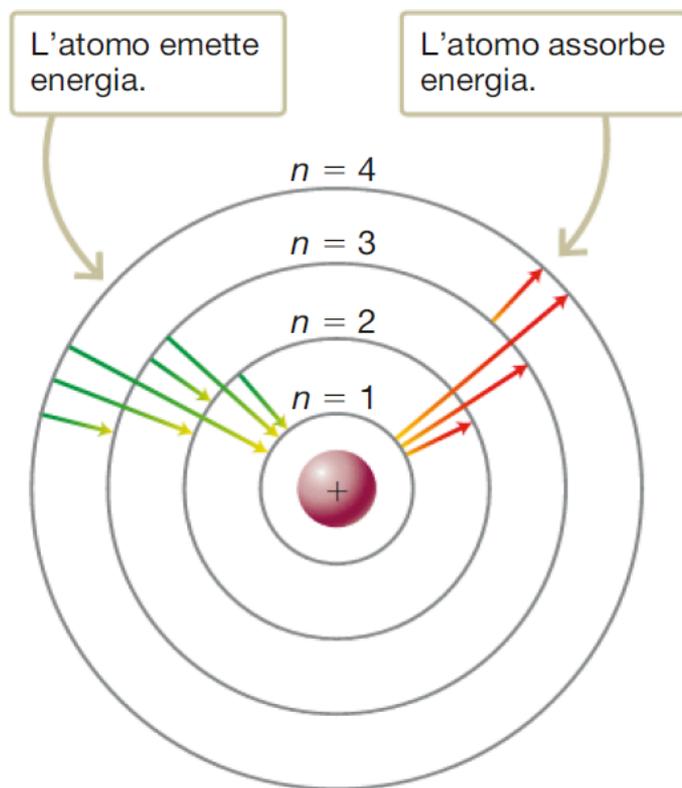
Nel 1913 Niels Bohr comprese che l'emissione di luce da parte degli atomi deve avere a che fare con gli elettroni e che l'energia viene emessa o assorbita per piccole quantità definite.

Elaborò così un nuovo modello atomico per l'atomo di idrogeno.

L'atomo di idrogeno secondo Bohr

1. l'elettrone percorre soltanto determinate *orbite stazionarie*
2. a ogni orbita corrisponde un determinato valore di energia
3. per passare da un'orbita a un'altra di livello energetico più elevato, l'elettrone assorbe un fotone
4. quando un elettrone «cade» su un livello di energia inferiore emette un fotone
5. l'energia del fotone emesso o assorbito corrisponde alla differenza di energia tra le due orbite

L'atomo di idrogeno secondo Bohr



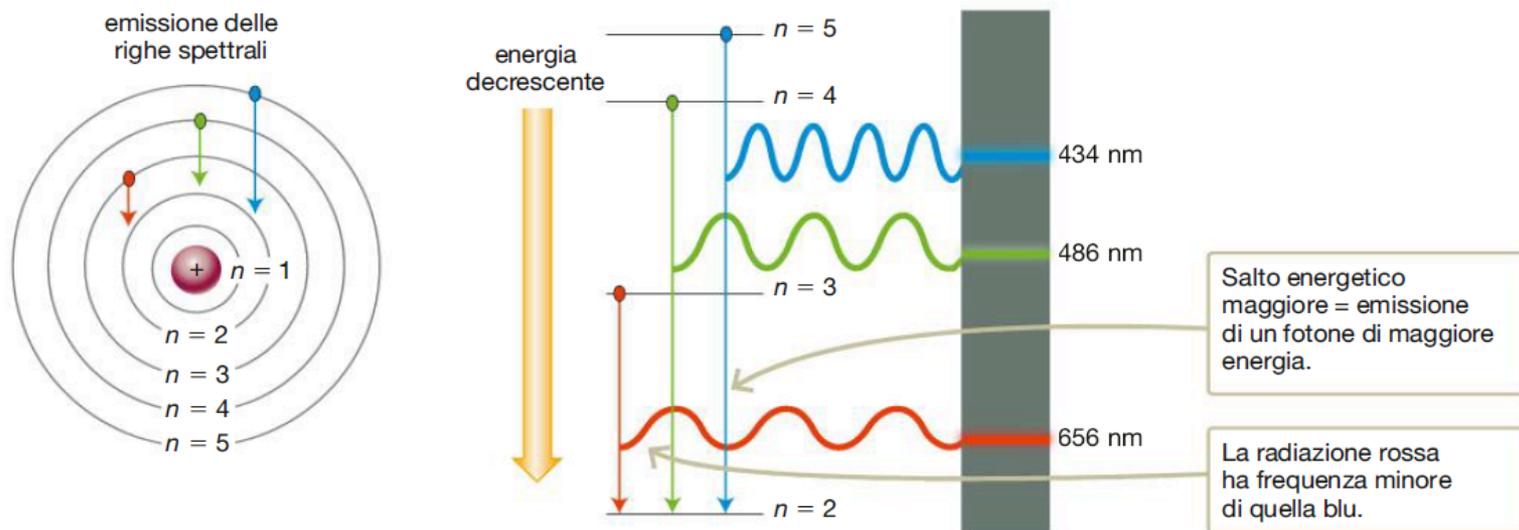
I livelli di energia delle orbite che l'elettrone dell'idrogeno può raggiungere dipendono dal **numero quantico principale, n** .

Il livello di energia più basso è chiamato **stato fondamentale** e ha un'energia uguale a E_1 .

I livelli di energia superiore sono chiamati **stati eccitati**.

L'atomo di idrogeno secondo Bohr

Gli elettroni degli atomi eccitati, attratti dal nucleo, ritornano nello stato fondamentale direttamente o scendendo un gradino alla volta, cioè passando per i livelli inferiori di energia, con l'emissione di un fotone.



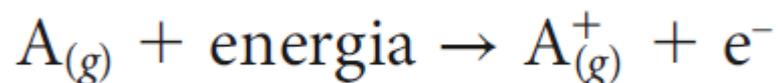
L'atomo di idrogeno secondo Bohr

Il modello di Bohr spiega le radiazioni emesse dall'atomo di idrogeno, che possiede un solo elettrone, ma non riesce a giustificare lo spettro a righe degli altri elementi.

Il modello atomico a strati prevede che ogni livello energetico (strato) sia suddiviso in sottolivelli (sottostrati).

L'energia di ionizzazione

Ionizzazione: fornendo energia a un atomo, i suoi elettroni possono compiere salti quantici verso i livelli più esterni, fino ad essere definitivamente allontanati dall'atomo, che si trasforma così in ione positivo.

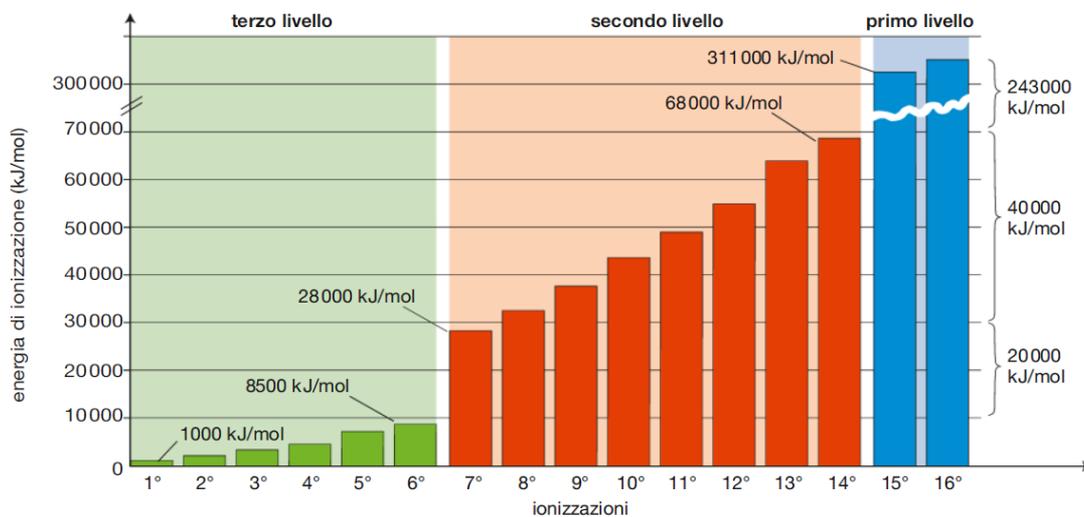


Energia di prima ionizzazione (E_i): energia necessaria per rimuovere un elettrone dall'atomo stesso quando è isolato e allo stato gassoso.

L'energia di ionizzazione

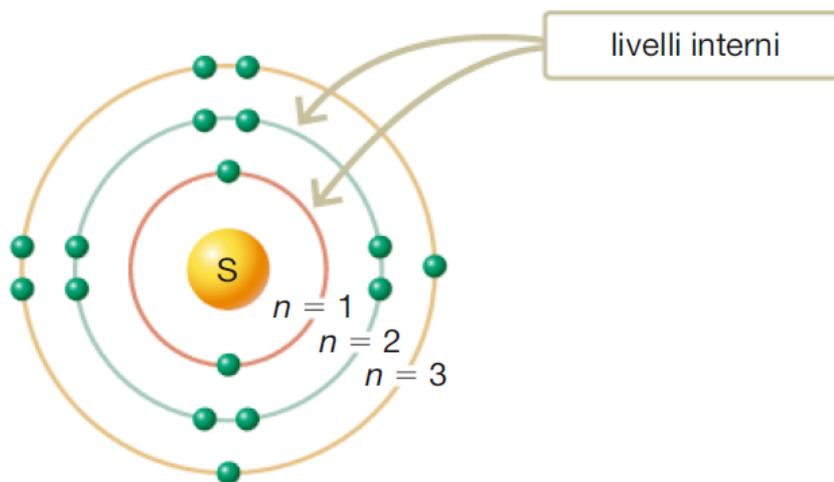
Fornendo quantità crescenti di energia, si possono allontanare anche un secondo, un terzo, un quarto elettrone (**energia di II, III, IV ionizzazione**) e così via.

Energie di ionizzazione dei 16 elettroni dell'atomo di zolfo:



L'energia di ionizzazione

Osservando l'istogramma, si nota che i valori delle energie di ionizzazione non crescono in modo regolare: vi è un forte aumento in corrispondenza dell'energia di VII e di XV ionizzazione. Questi due salti energetici sono una prova che gli elettroni dello zolfo sono sistemati su **tre diversi livelli energetici**.



Livelli e sottolivelli di energia in un atomo

I livelli di energia indicati con n (numero quantico principale) sono **sette**.

Il numero massimo di elettroni in ogni livello è $2n^2$.

A ogni valore di n corrisponde un numero uguale di **sottolivelli**, denominati:

- s (massimo 2 e^-)
- p (massimo 6 e^-)
- d (massimo 10 e^-)
- f (massimo 14 e^-).

Livello	Sottolivelli	Numero massimo di elettroni del sottolivello	Numero massimo di elettroni del livello
1	1s	2	2
2	2s 2p	2 6	8
3	3s 3p 3d	2 6 10	18
4	4s 4p 4d 4f	2 6 10 14	32
5	5s 5p 5d 5f	2 6 10 14	32

La configurazione elettronica degli elementi

La rappresentazione dei sottolivelli occupati da tutti gli elettroni, in un atomo oppure in uno ione, è chiamata **configurazione elettronica**.

Gli elettroni non iniziano a occupare un dato sottolivello se prima non sono stati riempiti i sottolivelli a più bassa energia.

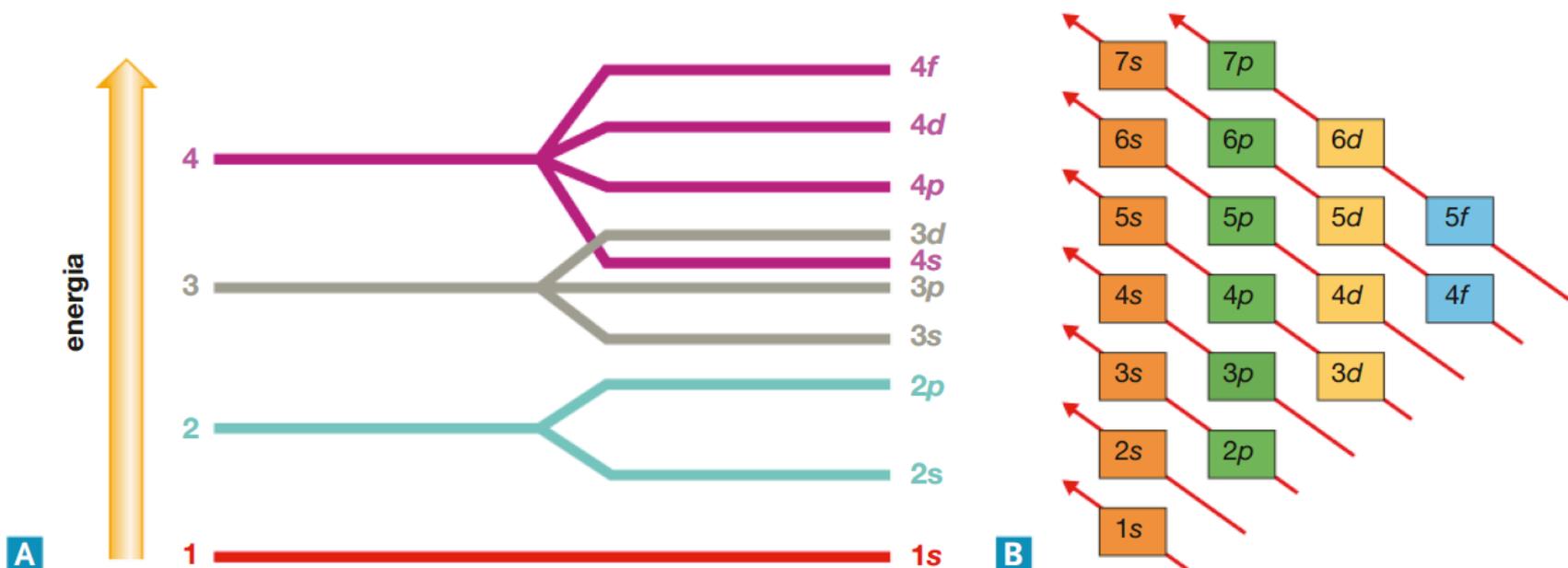
La configurazione elettronica degli elementi

La configurazione elettronica degli atomi neutri dei primi 18 elementi.

Atomo	Z	Configurazione elettronica dello stato fondamentale						
H	1	1s ¹						1° livello
He	2	1s ²						
Li	3	1s ²	2s ¹					2° livello
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			3° livello
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 elettronica degli elementi

Negli atomi con più di 18 elettroni l'aumento del numero dei sottolivelli porta alla sovrapposizione dei livelli che possiedono valori di n diversi.



L'elettrone: particella o onda?

Anche l'elettrone ha una doppia natura.

Nel 1924, Louis-Victor de Broglie associa all'elettrone, e a ciascun corpo in movimento, una lunghezza d'onda chiamata **onda di materia**.

lunghezza d'onda (proprietà tipica di un'onda)

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

costante di Planck: $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

$m \cdot v$ è la quantità di moto (proprietà tipica delle particelle):
 m è la massa e v la velocità

L'elettrone: particella o onda?

Principio di indeterminazione di Heisenberg (1927): è impossibile conoscere, nel medesimo istante e con la massima precisione, *dove* si trovi un elettrone e *con che velocità* si stia muovendo.

Quindi è impossibile assegnare all'elettrone un'orbita definita come quella prevista da Bohr.

L'equazione d'onda e l'orbitale

Equazione d'onda (Ψ) di Schrödinger: definisce la probabilità con cui un elettrone è presente nei diversi punti dello spazio attorno al nucleo.

Tale probabilità non corrisponde a un'orbita definita come nel modello di Bohr, ma a un *orbitale*.

L'equazione d'onda e l'orbitale

L'**orbitale** non è un luogo fisico preciso, ma è uno strumento matematico per calcolare la probabilità di presenza di un elettrone.

Ogni orbitale è descritto da tre **numeri quantici**, che ne caratterizzano energia, forma, dimensione e orientazione.

Un quarto numero quantico si riferisce al singolo elettrone.

L'equazione d'onda e l'orbitale

Il **numero quantico principale**, n , definisce il contenuto energetico dell'elettrone, dunque il livello energetico dell'orbitale, e va da 1 a 7.

Per il principio di indeterminazione, a ciascun livello non può essere assegnata una distanza fissa dal nucleo, ma ogni livello possiede un'energia ben determinata.

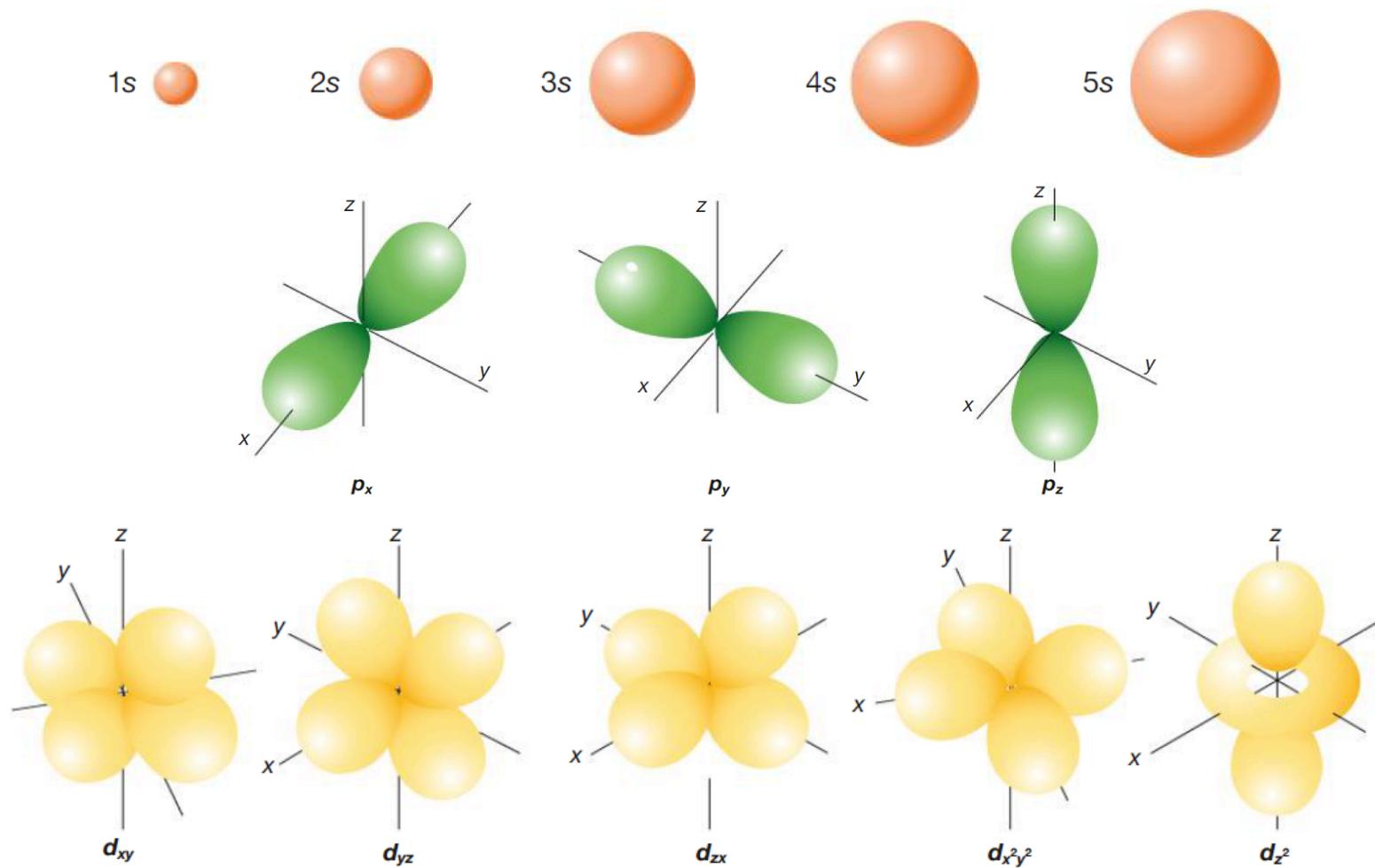
Il **numero massimo di elettroni** in ogni livello è $2n^2$.

L'equazione d'onda e l'orbitale

Il **numero quantico secondario**, l , definisce la forma dell'orbitale, dunque il sottolivello energetico, e per ogni n va da 0 a $(n - 1)$.

per $l =$	0	1	2	3
tipo di sottolivello:	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
numero di orbitali:	1	3	5	7

L'equazione d'onda e l'orbitale



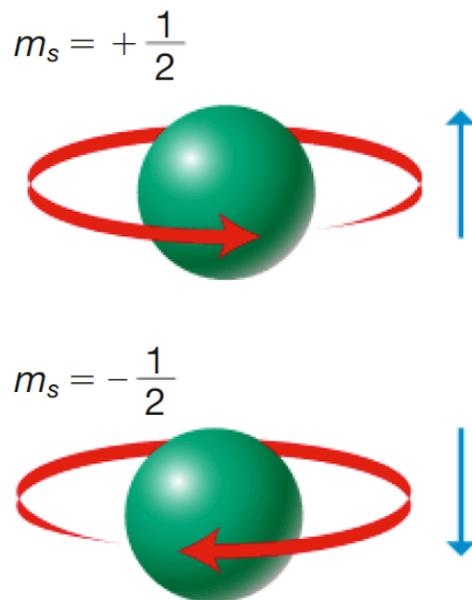
L'equazione d'onda e l'orbitale

Il **numero quantico magnetico**, m , definisce l'orientazione dell'orbitale e, per ogni valore di l , va da $-l$ a $+l$.

n	Numeri quantici		Orbitali	Numero massimo di elettroni
	l da 0 a $(n-1)$	m da $-l$ a $+l$ ($-l, 0, +l$)		
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

L'equazione d'onda e l'orbitale

Il **numero quantico magnetico di spin**, m_s , definisce il senso di rotazione del singolo elettrone e possiede soltanto due valori $+1/2$ (senso antiorario) e $-1/2$ (senso orario).



L'equazione d'onda e l'orbitale

Principio di esclusione di Pauli (1925): in un orbitale non possono essere presenti elettroni con gli stessi numeri quantici. Se due elettroni occupano lo stesso orbitale, hanno **spin opposti**.

Ogni orbitale, dunque, può contenere al massimo due elettroni.

L'equazione d'onda e l'orbitale

Per descrivere la configurazione elettronica degli elementi, rappresentiamo ciascun orbitale con un quadratino:

- se l'orbitale è vuoto e si rappresenta con un quadratino vuoto
- se l'orbitale è semipieno e si disegna nel quadratino una freccia \uparrow
- se l'orbitale è pieno e si disegnano nel quadratino due frecce, orientate in modo opposto $\uparrow\downarrow$.

L'equazione d'onda e l'orbitale

Nel disporre gli elettroni nei quadratini, vanno tenute presenti tre regole:

1. ogni orbitale può contenere al massimo due elettroni, con spin opposti (*principio di esclusione di Pauli*)
2. si occupano prima gli orbitali a più bassa energia (*principio della costruzione progressiva o di Aufbau*)
3. se ci sono più orbitali della stessa energia, prima si colloca un elettrone su ciascun orbitale vuoto e poi si completano gli orbitali semipieni (*regola di Hund o della massima molteplicità*)

L'equazione d'onda e l'orbitale

Configurazioni di ossigeno ($Z = 8$), fluoro ($Z = 9$)
e neon ($Z = 10$).

