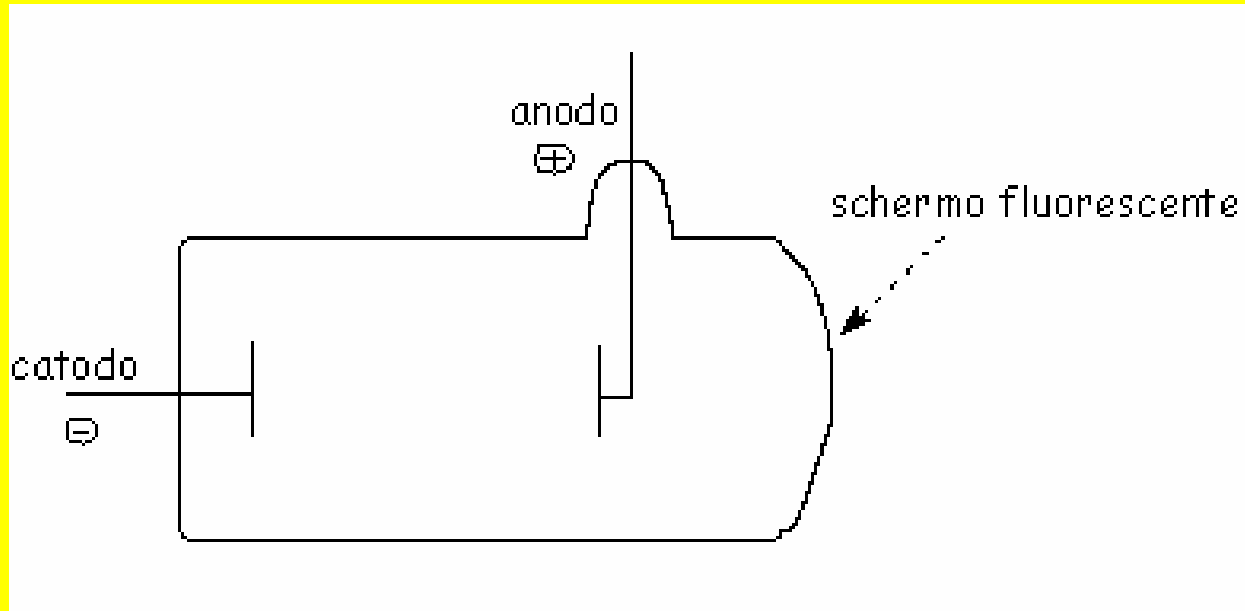
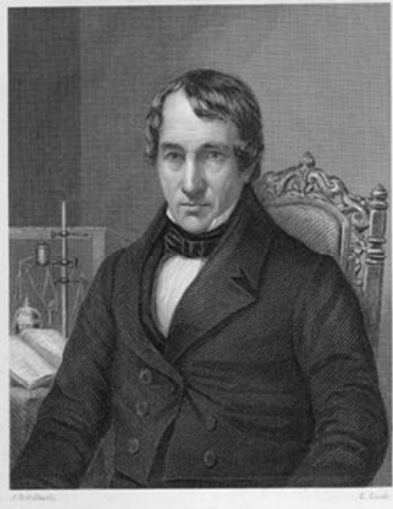


La struttura dell'atomo

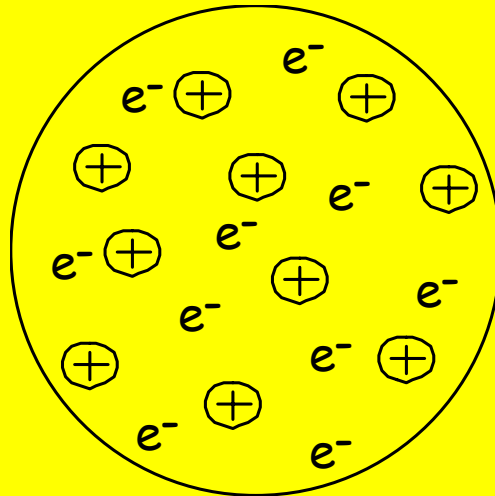


- raggi catodici (elettroni)
- raggi canale (ioni positivi)

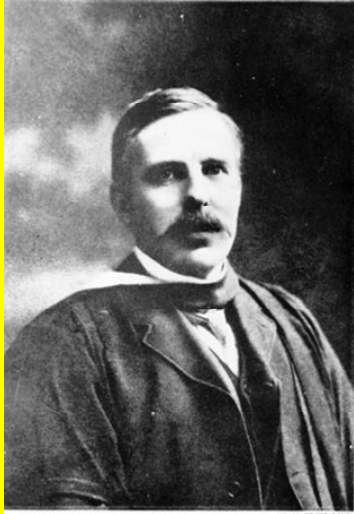
Modello di Thomson



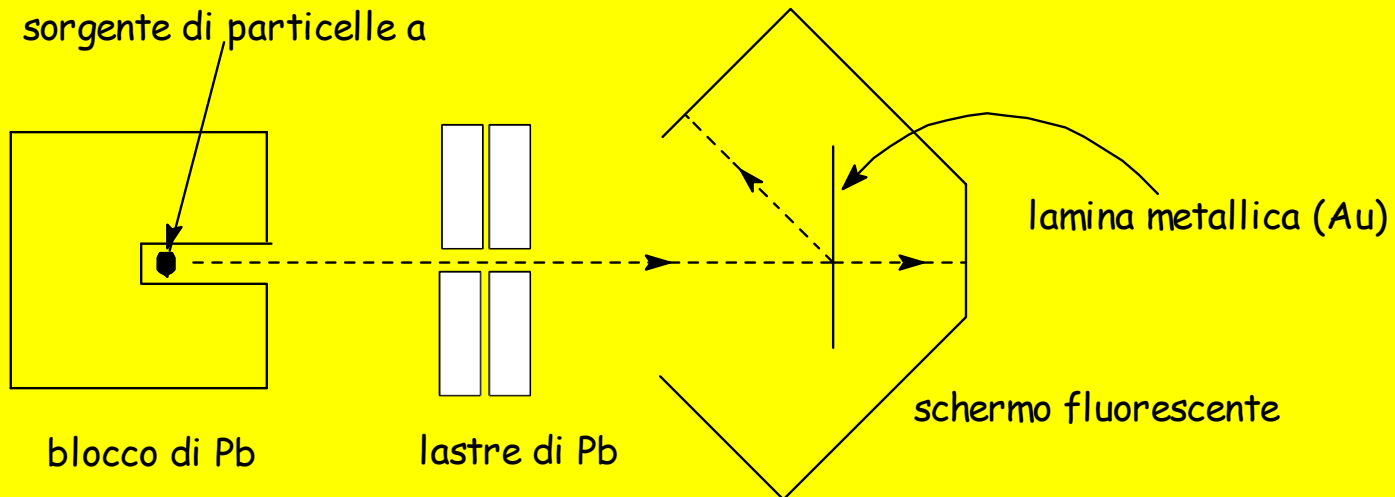
Atomo come una piccola sfera omogenea carica di elettricità positiva, nella quale sono dispersi gli elettroni, in numero tale da rendere l'insieme elettricamente neutro

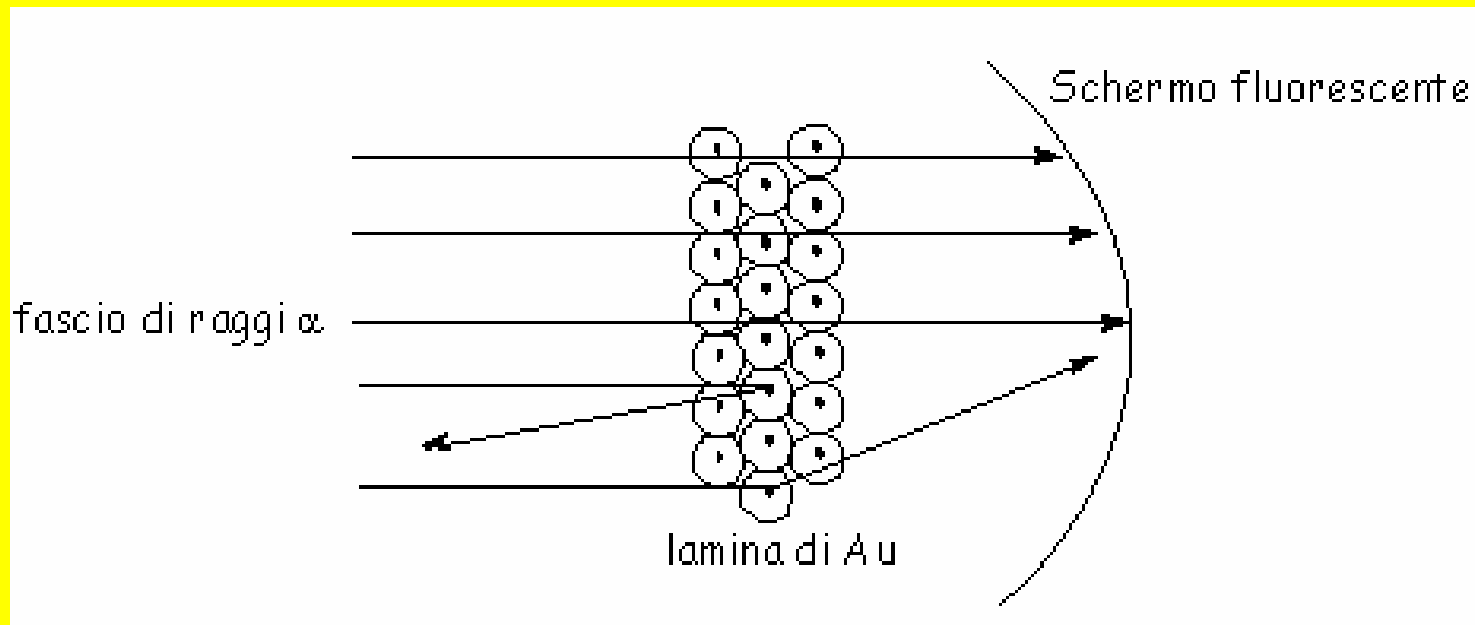


Modello di Rutherford



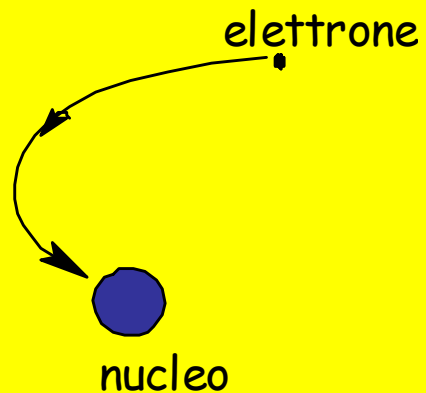
La materia nell'interno dell'atomo non è distribuita in modo uniforme, ma è localizzata nella quasi totalità in una piccola zona chiamata *nucleo*





Nucleo centrale (*nucleo atomico*)
Elettroni (su orbite ellittiche)

Difetto:



Modello di Bohr (teoria quantistica)



L'energia assunta dagli elettroni nel loro moto intorno al nucleo e dunque la distanza degli elettroni dal nucleo stesso non possono assumere valori qualsiasi, ma solamente valori ben definiti; in particolari condizioni l'elettrone può ruotare intorno al nucleo senza emettere energia

Postulati:

- In un atomo gli elettroni esistono solo in stati di energia costante, detti *stati stazionari*.
- Gli elettroni possono variare la loro energia solo in seguito ad una transizione da uno stato stazionario ad un altro.
- In ognuno degli stati stazionari l'elettrone si muove in orbite circolari intorno al nucleo.
- All'elettrone sono permessi solo quegli stati di moto (\Rightarrow energie) tali per cui il valore del momento angolare della quantità di moto, $m \cdot v \cdot r$, sia multiplo intero di $h/2\pi$.

$$\boxed{m \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi}} \quad (\text{condizione di } \textit{quantizzazione di Bohr})$$

$n = \textit{numero quantico principale}$

Modello di Sommerfeld

- Gli elettroni possono muoversi anche su orbite ellittiche.

Vengono introdotti:

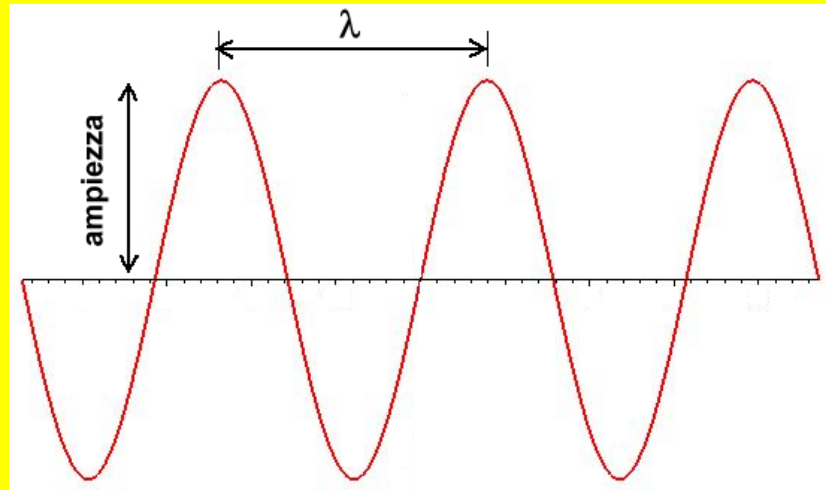
- un numero quantico secondario (energia dei livelli)
- un numero quantico magnetico (orientazione delle orbite nello spazio)
- un numero quantico di spin (rotazione dell'elettrone intorno al proprio asse)

Il principio di indeterminazione di Heisenberg

La precisione con cui possono essere determinate la posizione e la quantità di moto di una particella sono legate dalla relazione

$$\Delta x \cdot \Delta mv \geq \frac{h}{4\pi}$$

La teoria ondulatoria (De Broglie)



Ad ogni elettrone è associata una radiazione la cui lunghezza d'onda dipende dalla velocità dell'elettrone stesso. Questa onda può essere considerata come una specie di "onda guida" per l'elettrone.

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

Caratteristiche:

- L'onda associata ad un elettrone può essere considerata come *onda di probabilità*, tale cioè che *il quadrato dell'ampiezza dell'onda in ogni suo punto è proporzionale al valore della probabilità di trovare in quel punto l'elettrone*.

- L'elettrone, entità ben definita nella teoria quantistica, perde la sua individualità nella teoria ondulatoria, nella quale risulta *delocalizzato* in un'onda di probabilità, cioè in una nube di carica elettrica negativa.

L'onda guida associata all'elettrone è rappresentata dall'equazione di **Schrödinger** che mette in relazione le caratteristiche dell'onda guida con l'energia della particella:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \cdot \psi = 0$$

ψ = funzione d'onda

- deve essere a un solo valore, continua e finita in ogni punto dello spazio
- deve tendere a zero all'infinito
- $\int_V \psi^2 dV = 1$: infatti $\psi^2 dV$ rappresenta la probabilità di trovare l'elettrone nel volume infinitesimo dV ; il fatto che l'integrale esteso a tutto lo spazio sia uguale a 1, significa che in questo è certamente presente l'elettrone.

Le funzioni d'onda che sono soluzioni fisicamente accettabili dell'equazione di Schrödinger vengono definite *autofunzioni* dell'equazione stessa; consentono di rappresentare la distribuzione spaziale della carica elettrica dovuta a ciascun elettrone di un atomo.

3 coefficienti nell'espressione matematica delle autofunzioni:

- numero quantico principale (n): può assumere tutti i valori interi ≥ 1 ;
- numero quantico secondario o azimutale (l): per un determinato valore di n può assumere tutti i valori interi compresi tra 0 e $n - 1$;
- numero quantico magnetico (m): per un determinato valore di l può assumere tutti i valori interi compresi tra $-l$ e $+l$, incluso il valore 0 .

Orbitale: l'autofunzione associata ad una particolare terna di numeri quantici n , l e m

- numero quantico di spin ($m_s = +\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$)

Atomo di Bohr-Sommerfeld:

ciascun elettrone ruota attorno al nucleo su un'orbita ben definita e possiede un determinato valore di energia

Teoria ondulatoria:

ciascun elettrone si trova delocalizzato attorno al nucleo in una definita onda stazionaria ψ cui corrisponde ugualmente un determinato valore di energia, chiamato *orbitale*

Il generico orbitale ψ definito dai numeri quantici di valore n , l , m si scrive indicando tali valori come indici, nell'ordine n , l e m :

$$\psi_{nlm}$$

- orbitali con $l=0$ \Rightarrow *orbitali s*
- orbitali con $l=1$ \Rightarrow *orbitali p*
- orbitali con $l=2$ \Rightarrow *orbitali d*
- orbitali con $l=3$ \Rightarrow *orbitali f*

Significato dei numeri quantici:

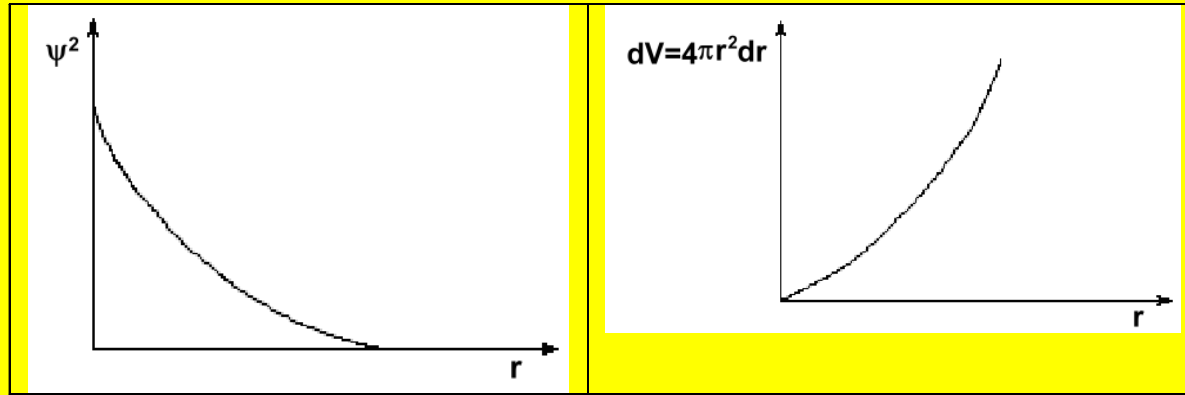
- n definisce l'energia dell'orbitale
- l completa l'indicazione dell'energia dell'orbitale e definisce generalmente la forma dell'orbitale stesso
- m precisa l'orientazione dell'orbitale nello spazio
- m_s indica il senso di rotazione dell'elettrone attorno al proprio asse

Numeri quantici			Orbitali possibili		
n	l	m			
1	0	0	1 orbitale	1s	ψ_{100}
2	0	0	1 orbitale	2s	ψ_{200}
	1	-1,0,1	3 orbitali	2p	$\psi_{21-1}, \psi_{210}, \psi_{211}$
3	0	0	1 orbitale	3s	ψ_{300}
	1	-1,0,1	3 orbitali	3p	$\psi_{31-1}, \psi_{310}, \psi_{311}$
	2	-2,-1,0,1,2	5 orbitali	3d	$\psi_{32-2}, \psi_{32-1}, \psi_{320}, \psi_{321}, \psi_{322}$
4	0	0	1 orbitale	4s	ψ_{400}
	1	-1,0,1	3 orbitali	4p	$\psi_{41-1}, \psi_{410}, \psi_{411}$
	2	-2,-1,0,1,2	5 orbitali	4d	$\psi_{42-2}, \psi_{42-1}, \psi_{420}, \psi_{421}, \psi_{422}$
	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	7 orbitali	4f	$\psi_{43-3}, \psi_{43-2}, \psi_{43-1}, \psi_{430}, \psi_{431}, \psi_{432}, \psi_{433}$

$|\psi|^2$: misura la probabilità di trovare l'elettrone nella zona posta intorno al nucleo (*densità di probabilità*)

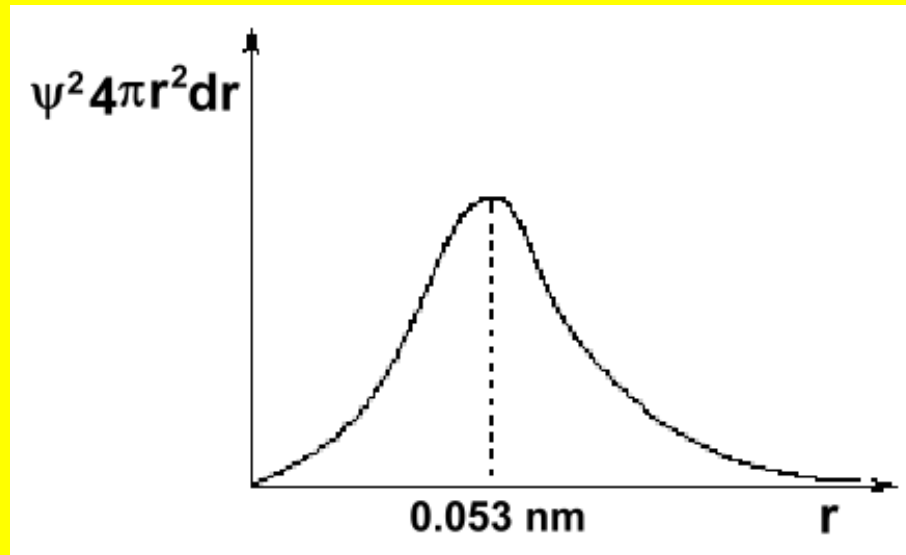
$|\psi|^2 dV$: misura la probabilità che l'elettrone si trovi nel volume infinitesimo dV

orbitale 1s (*simmetria sferica*)

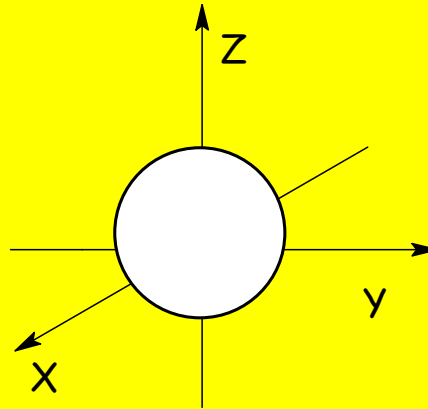
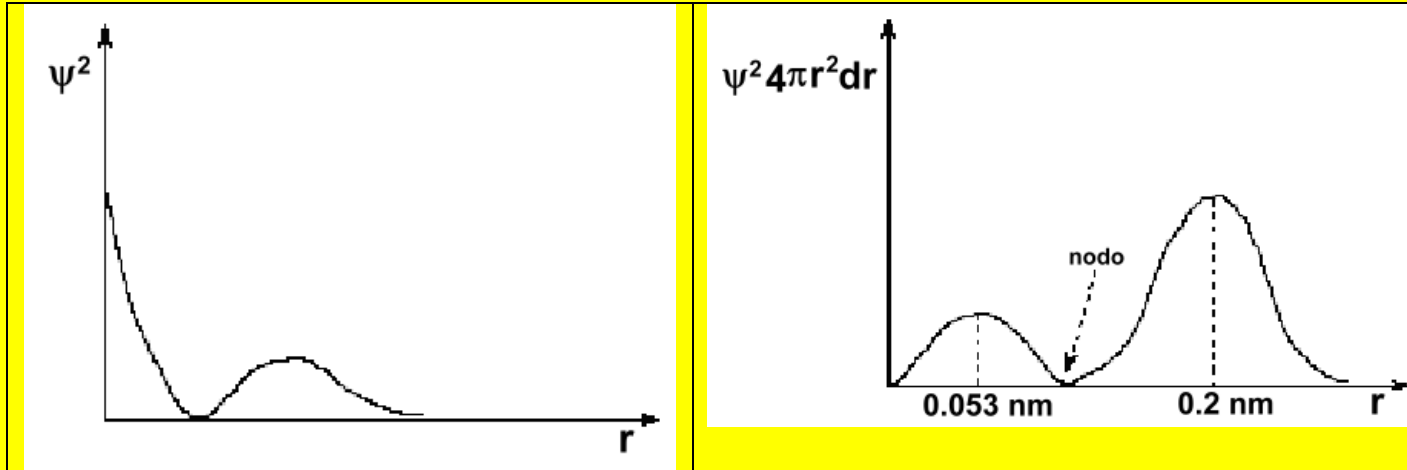


funzione di distribuzione della probabilità radiale

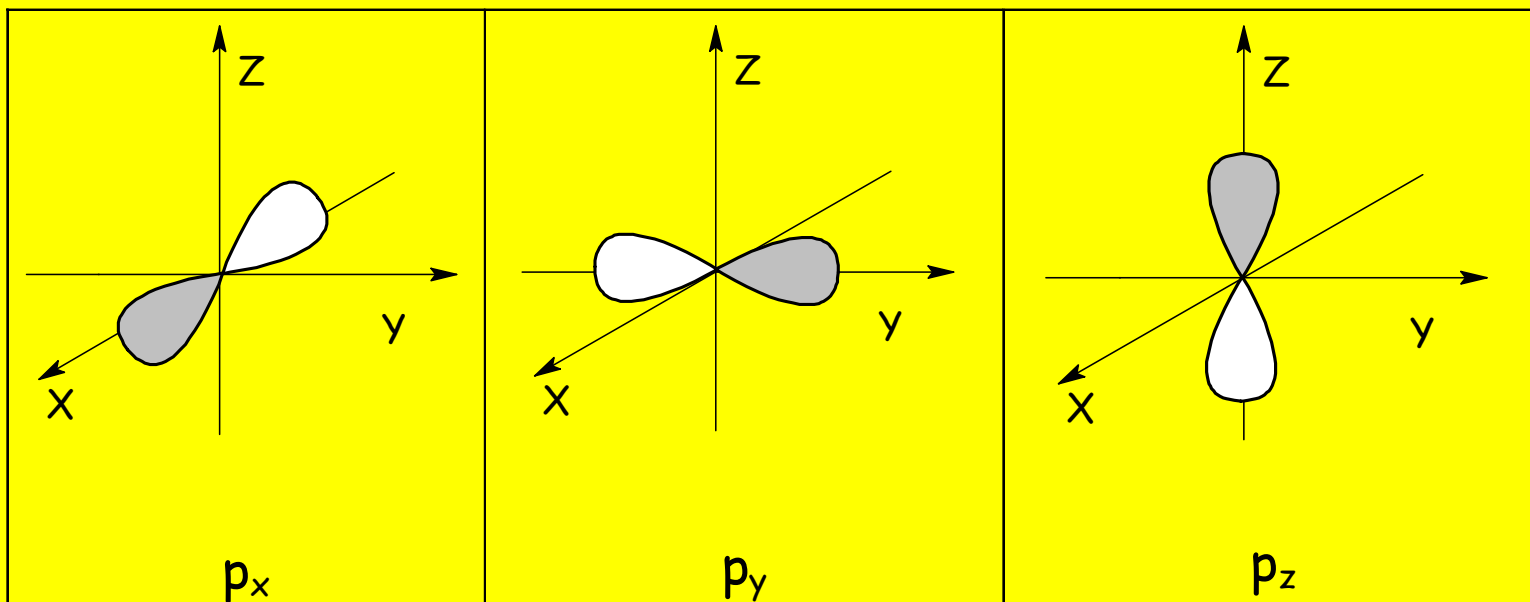
$$\psi^2 dV = \psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr$$



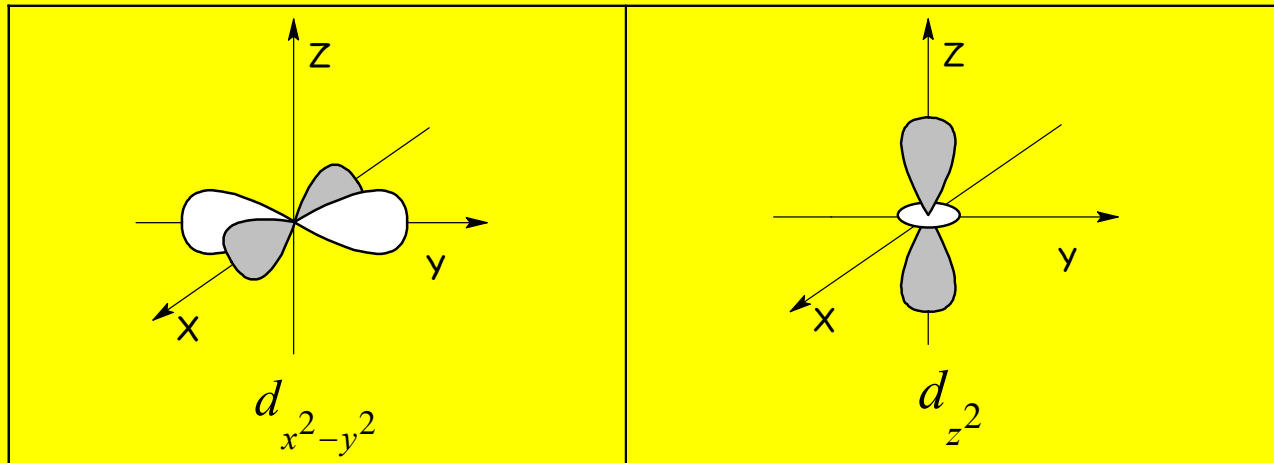
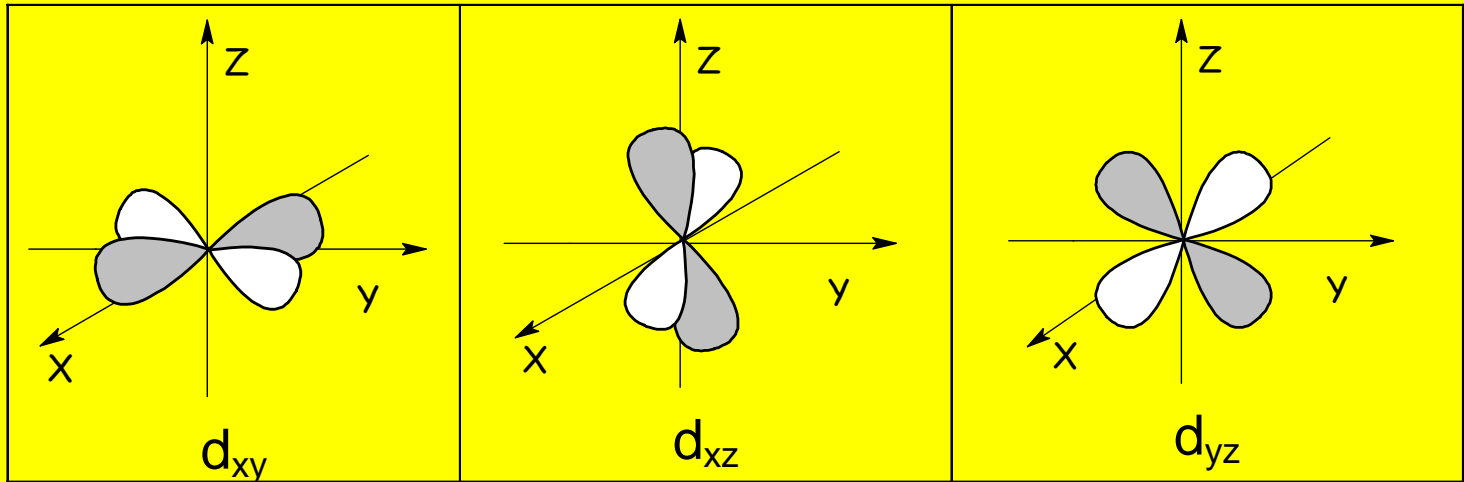
orbitale 2s



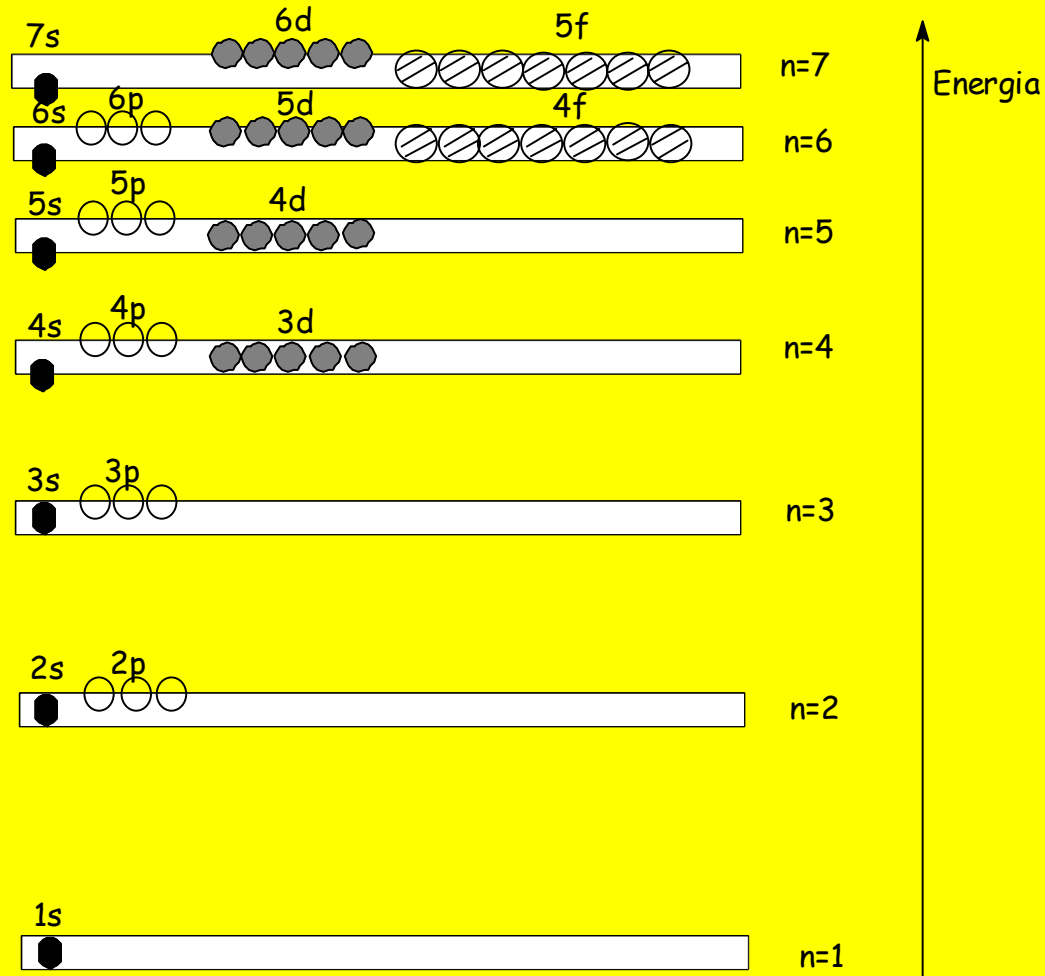
orbitali p (*simmetria assiale*)



orbitali d



L'energia degli orbitali



$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < \dots$

Regola “n + l”

I livelli più stabili in un atomo allo stato fondamentale (atomo isolato con contenuto di energia minimo, a temperatura e pressione ambiente e in assenza di campi elettrici o magnetici imposti) sono quelli per i quali la somma dei numeri quantici $n+l$ è minore. Quando più livelli hanno lo stesso valore di $n+l$, risultano più stabili quelli con il valore di n minore.

Esempio

Ordinare secondo l'energia crescente gli orbitali 3p, 3d e 4s.

Applicando la regola $n+l$:

$$3p: n+l=3+1=4$$

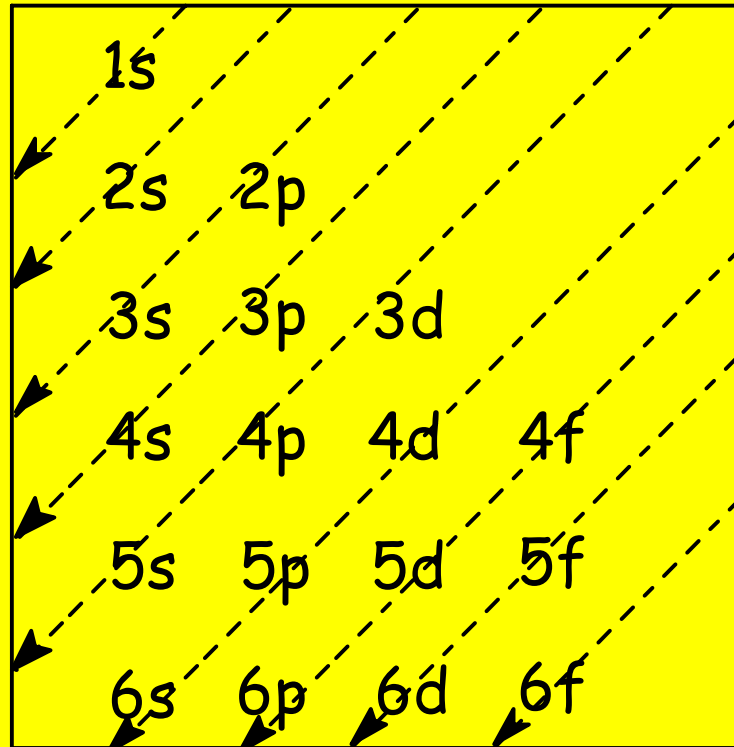
$$3d: n+l=3+2=5$$

$$4s: n+l=4+0=4$$

Tra 3p e 4s l'energia più bassa spetta ai 3p, in quanto questi ultimi hanno n minore. Pertanto:

$$3p < 4s < 3d$$

Tavola mnemonica



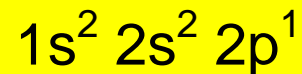
La distribuzione degli elettroni negli atomi

- regola di Pauli (*principio di esclusione*)
- regola di Hund (*principio della massima molteplicità*)

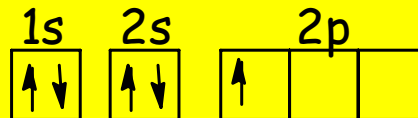
 ***Configurazione elettronica degli atomi***

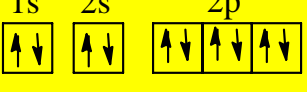
Metodi di rappresentazione della configurazione elettronica:

- mediante una *sigla*, costituita da due numeri e una lettera, dove il primo numero indica il numero quantico principale, la lettera il numero quantico secondario e il numero ad apice della lettera il numero di elettroni complessivamente presenti nell'orbitale o nel gruppo di orbitali identificati dal numero e dalla lettera:



- rappresentando ogni orbitale con una *casella* (detta *casella quantica*) dentro la quale gli elettroni presenti sono indicati mediante frecce rivolte verso l'alto o verso il basso a seconda del differente spin:



Elemento	Z	Configurazione elettronica
Idrogeno	1	$1s^1$ 
Elio	2	$1s^2$ 
Litio	3	$1s^2 2s^1$ 
Berillio	4	$1s^2 2s^2$ 
Boro	5	$1s^2 2s^2 2p^1$ 
Carbonio	6	$1s^2 2s^2 2p^2$ 
Azoto	7	$1s^2 2s^2 2p^3$ 
Ossigeno	8	$1s^2 2s^2 2p^4$ 
Fluoro	9	$1s^2 2s^2 2p^5$ 
Neon	10	$1s^2 2s^2 2p^6$ 
Sodio	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 

Scrittura più concisa:



