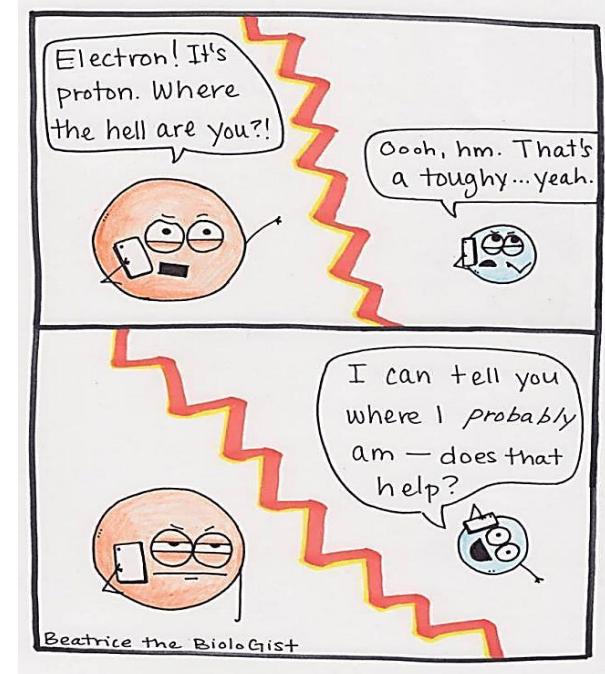


# Corso di CHIMICA

## Lezione 5

### La struttura dell'atomo: l'atomo quantistico e la sua struttura elettronica

info: [claudio.gerbaldi@polito.it](mailto:claudio.gerbaldi@polito.it)





# Sommario della lezione

Questa lezione è finalizzata a descrivere il modello moderno degli atomi ad oggi conosciuti che descriva in maniera opportuna come gli elettroni sono “disposti” intorno al proprio nucleo. Verranno illustrati in precedenza in modo succinto i fondamenti della **meccanica quantistica**, di estrema importanza in quanto permette di addivenire alle configurazioni elettroniche e di spiegare a fondo la natura dei legami chimici nelle molecole.

1. Modello atomico di Bohr. Il numero quantico principale
2. Ipotesi di De Broglie
3. Principio di indeterminazione di Heisenberg
4. L'equazione d'onda di Schrodinger
5. Orbitali atomici e loro rappresentazione
6. Struttura elettronica degli atomi





# Ricapitolando...

Dunque, l'esistenza degli spettri atomici a righe e molte altre proprietà dell'atomo non erano spiegabili tramite i modelli atomici di Thomson e/o Rutherford.

Nel 1913 Niels Bohr (e poi Sommerfeld), adattando il concetto della quantizzazione dell'energia al modello classico di Rutherford, propose un nuovo modello atomico che permise di ricavare esattamente i dati spettrali dell'atomo di idrogeno.

Gli esperimenti di spettroscopia atomica a l'interpretazione di Bohr dell'atomo di H ci hanno rivelato un **atomo** in cui l'**energia** degli **elettroni**, la loro **velocità** e la loro **distanza dal nucleo** non hanno valori qualsiasi, ma **valori speciali ben definiti**.

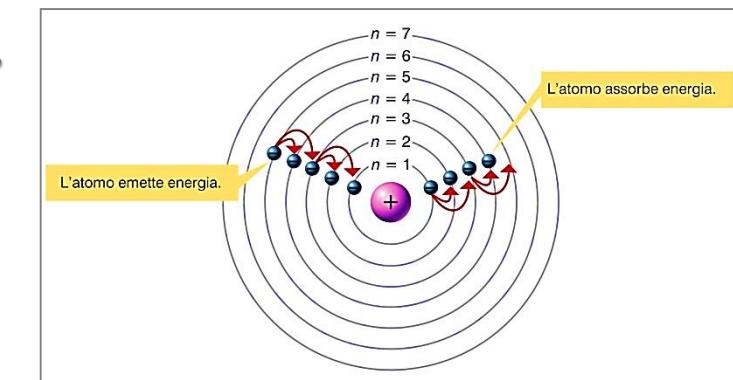
*Si genera una riga spettrale quando viene emesso un fotone dall'  $e^-$  che passa da uno stato ad energia maggiore ad uno ad energia minore.*

*$n=1,2,3\dots$  è associato al raggio dell'orbita dell' $e^-$  e quindi alla sua energia; più piccolo è  **$n$  (num. quantico principale)**, più piccolo è il raggio, minore è l'energia dell'orbita.*

*Bohr calcolò tutti i raggi e le energie delle orbite permesse.*

*Se  $e^-$  si trova in un orbita superiore alla prima è in uno **stato eccitato**.*

L'orbita ad energia più bassa è LO STATO FONDAMENTALE ( $r_{BOHR} = 53 \text{ pm} = 53 \times 10^{-12} \text{ m} = 0.53 \text{ \AA}$ )



# Limiti del modello di Bohr-Sommerfeld

Tutto a questo punto pareva risolto e controllato sperimentalmente.

Ma, nonostante i continui adattamenti (numeri quantici), **il modello di Bohr-Sommerfeld presentava problemi sia dal punto sperimentale sia da quello teorico**.

La teoria di Sommerfeld (applicazione delle teorie relativistiche all'atomo di Bohr) non teneva conto di alcuni fatti: **non spiegava quantitativamente la complessità degli spettri**, che si rivelavano ad esami più attenti ancor più complicati e **non rendeva ragione di alcune anomalie magnetiche dell'atomo**.

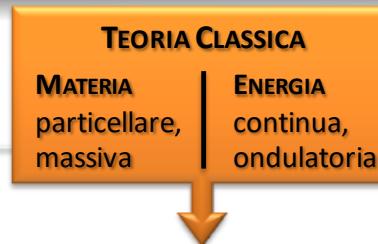
In breve, il modello di Bohr-Sommerfeld non spiegava sufficientemente i processi che avvengono all'interno dell'atomo: **quando un elettrone salta da un'orbita all'altra? Per quanto tempo un elettrone persiste in un'orbita?**

*Bohr stesso scrisse: bisognava rinunciare a descrivere il comportamento individuale degli atomi nello spazio e nel tempo, conformemente al principio di causalità, e immaginare che la natura può fare, tra diverse possibilità, una libera scelta che non è sottoposta che a considerazioni di probabilità.*

Dunque, alcuni fenomeni continuavano a non essere completamente interpretati da questo modello ed inoltre esso aveva una **debolezza strutturale, dovuta al mescolamento tra fisica classica e fisica quantistica**.

Come vedremo, esso **sarà poi sostituito da un modello puramente quantistico**.





Dato che la **materia** è discontinua e particellare, forse è discontinua e particellare anche l'**energia**

**Osservazione**

- Radiazione del corpo nero
- Effetto fotoelettrico
- Spettri a righe atomici

**Teoria**

- Planck: l'energia è quantizzata, sono permessi soltanto certi valori
- Einstein: la luce ha un comportamento particellare (fotoni)
- Bohr: l'energia degli atomi è quantizzata, l'elettrone emette un fotone quando cambia orbita

Poiché l'energia è di natura ondulatoria, forse è di natura ondulatoria anche la **materia**

**Osservazione**

- Davisson/Germer:  
diffrazione degli elettroni  
per opera di cristalli metallici

**Teoria**

- De Broglie: tutta la materia si muove di moto ondulatorio, ovvero  
l'energia degli atomi è quantizzata a causa  
del moto ondulatorio degli elettroni



# Ipotesi di De Broglie

Dunque, abbiamo appurato che la **luce** presenta un **duplice comportamento**: può essere considerata sia come un'**onda elettromagnetica** che come un **fascio di fotoni**.

Nel 1924, il fisico francese **Louis De Broglie** ipotizzò che anche le **particelle materiali** potessero avere un **comportamento dualistico**, cioè potevano comportarsi come corpuscoli o come onde a seconda delle condizioni sperimentali.

**De Broglie**, confrontando la relazione di Planck tra energia e frequenza di una radiazione ( $E = h\nu$ ) e la relazione proposta da Einstein sulla base dell'interpretazione dell'effetto photoelettrico (quantità di moto di un fotone di lunghezza d'onda  $\lambda$  come  $m \cdot v_{\text{fotone}} = h / \lambda$ ), **propose di utilizzare per le particelle materiali la seguente relazione (relazione di De Broglie)**:

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

$$\text{Eq. Plank } E = h\nu$$

$$\text{Eq. Einstein } E = mc^2$$

$$\text{Poiché } \nu = c/\lambda$$

$$\text{Allora: } mc^2 = hc/\lambda$$

$$\lambda = h/mc$$



Louis de Broglie (1892–1987)  
matematico e fisico francese

Ad una particella di massa  $m$  che viaggi alla velocità  $v$  (quantità di moto  $mv$ ), può essere associata una lunghezza d'onda (di de Broglie)  $\lambda = h/mv$ .

# Ipotesi di De Broglie

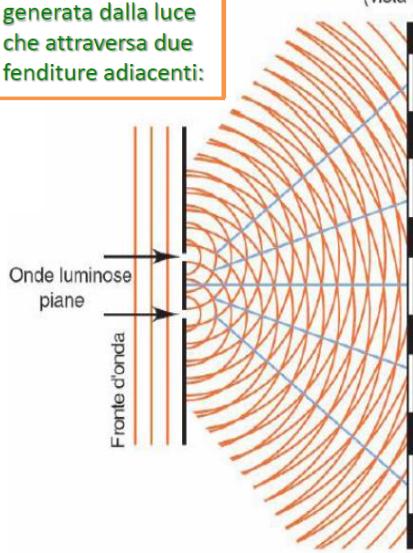
Questa ipotesi rivoluzionaria, e perciò ritenuta da molti follia, divenne realtà nel 1927 quando poté essere provata sperimentalmente.



I fisici statunitensi **Clinton Davisson e Lester H. Germer** misero in evidenza un fenomeno in cui le particelle si comportano come onde: un fascio di  $e^-$  fatti incidere su un sottile foglio di Al davano luogo ad una figura di diffrazione su uno speciale schermo rivelatore.

Se l'elettrone si comporta come un'onda deve dare DIFFRAZIONE se la distanza tra le fenditure del reticolo è dell'ordine della sua  $\lambda$  (ex. Cristalli metallici).  
Infatti, è così:  
**L'ELETTRONE SI COMPORTA COME UN'ONDA!**

Figura di diffrazione generata dalla luce che attraversa due fenditure adiacenti:



Pellicola fotografica (vista di taglio)

Pellicola fotografica (vista frontale)

Onde in accordo di fase

Onde in opposizione di fase

Regione chiara (luminosa)  
Regione oscura (buia)

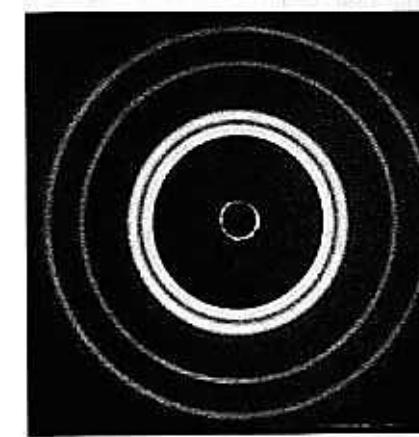


Figura di diffrazione dei raggi X generata da un foglio di alluminio

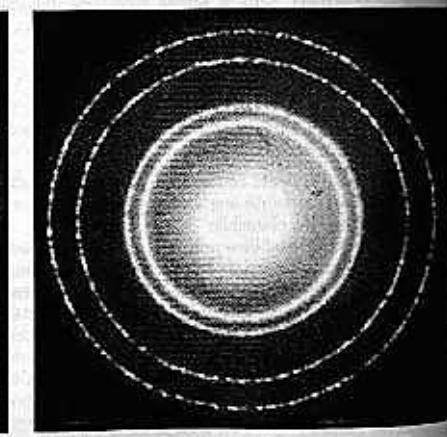


Figura di diffrazione degli elettroni generata da un foglio di alluminio

*La somiglianza tra questi 2 spettri evidenzia fortemente le proprietà ondulatorie delle particelle.*

# Ipotesi di De Broglie

Si osserva che la quantità di moto dipende dalla lunghezza dell'onda elettromagnetica con cui si propaga. **La natura ondulatoria della materia si può evidenziare solo se si studiano particelle di massa molto piccola (tipo  $e^-$  e  $p^+$ ).**

Lunghezze d'onda di De Broglie di alcuni corpi

Corpo	Massa (g)	Velocità (m/s)	$\lambda$ (m)
elettrone lento	$9 \times 10^{-28}$	1,0	$7 \times 10^{-4}$
elettrone veloce	$9 \times 10^{-28}$	$5,9 \times 10^6$	$1 \times 10^{-10}$
particella a massa di 1 g	$6,6 \times 10^{-24}$	$1,5 \times 10^7$	$7 \times 10^{-15}$
palla da baseball	1,0	0,01	$7 \times 10^{-29}$
Terra	142	25,0	$2 \times 10^{-34}$
	$6,0 \times 10^{27}$	$3,0 \times 10^4$	$4 \times 10^{-63}$



La  $\lambda$  associata ad un  $e^-$  veloce è simile a quella della radiazione elettromagnetica nel campo dei raggi X. Quella associata ad un pallone scagliato a 100 km/h è così bassa da non essere osservabile né (se confrontata con la precedente) rappresentabile.

Queste nuove idee influenzarono grandemente l'elaborazione del **nuovo modello atomico "ondulatorio"**. Si possono schematizzare come segue:

La **materia** è discontinua, cioè corpuscolare



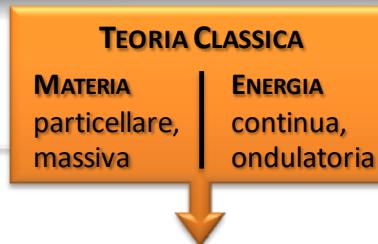
La **luce** ha comportamento corpuscolare



La **luce** ha una natura ondulatoria



La **materia** ha caratteristiche ondulatorie. Le particelle materiali hanno una lunghezza d'onda associata:  $\lambda = h / m \cdot v$



Dato che la **materia** è discontinua e particellare, forse è discontinua e particellare anche l'**energia**

**Osservazione**

Radiazione del corpo nero

**Teoria**Planck: l'energia è quantizzata, sono permessi soltanto certi valori

Effetto fotoelettrico

Einstein: la luce ha un comportamento particellare (fotoni)

Spettri a righe atomici

Bohr: l'energia degli atomi è quantizzata, l'elettrone emette un fotone quando cambia orbita

Poiché l'energia è di natura ondulatoria, forse è di natura ondulatoria anche la **materia**

**Osservazione**Davisson/Germer:  
diffrazione degli elettroni  
per opera di cristalli metallici**Teoria**De Broglie: tutta la materia si muove di moto ondulatorio, ovvero  
l'energia degli atomi è quantizzata a causa  
del moto ondulatorio degli elettroni

Poiché la materia è dotata di massa, forse è dotata di massa anche l'energia

**Osservazione**Compton:  
la lunghezza d'onda di un fotone  
aumenta (la quantità di moto diminuisce)  
dopo l'urto con un elettrone**Teoria**Einstein/De Broglie: la massa è l'energia sono equivalenti,  
le particelle hanno una lunghezza d'onda e i  
fotoni hanno una quantità di moto**TEORIA QUANTISTICA**

**l'energia e la materia**  
sono particellari,  
massive e ondulatorie

# Principio di indeterminazione

Se pensiamo all' $e^-$  come ad una particella che si muove in un'orbita, è naturale che per descriverlo si debbano conoscere la sua posizione e velocità in un certo istante per prevedere come esso seguirà a muoversi. Ma, **se pensiamo all' $e^-$  come ad un'onda, il concetto di posizione perde di significato poichè un'onda si propaga nello spazio e non occupa un punto preciso.**

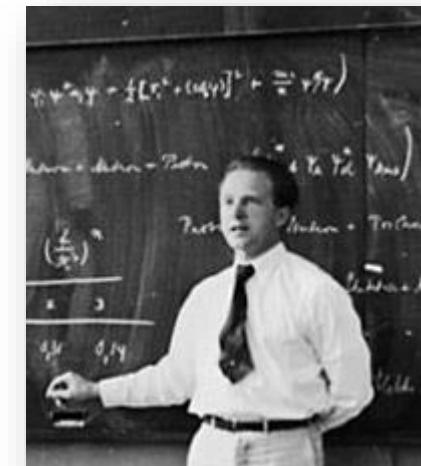
Considerazioni simili portarono, nel 1927, **W. Heisenberg** a dimostrare un principio fisico di enorme importanza, il **principio di indeterminazione**:

**E' impossibile conoscere simultaneamente la posizione esatta e l'esatta quantità di moto di una particella subatomica.**

**Tanto maggiore sarà la precisione con la quale determiniamo la posizione dell' $e^-$ , tanto minore sarà la precisione con la quale possiamo conoscere la sua velocità, e viceversa.**

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

dove  $\Delta x$  e  $\Delta u$  rappresentano gli errori commessi nella determinazione della posizione e della velocità, e  $h$  è la costante di Planck.



Werner Karl Heisenberg  
(1901–1976) fisico tedesco

# Principio di indeterminazione

Esempio: ricordando che il raggio di Bohr per l'atomo di idrogeno è 52,9 pm (o 0,529 Å). Assumendo che si conosca la posizione di un elettrone nella sua orbita con un'accuratezza dell'1% del raggio, calcolare l'incertezza sulla velocità dell'elettrone.

**Soluzione** L'incertezza sulla posizione dell'elettrone,  $\Delta x$ , è

$$\Delta x = \frac{1\%}{100\%} \times 52,9 \text{ pm} \times \frac{1 \times 10^{-12} \text{ m}}{1 \text{ pm}} = 5,29 \times 10^{-13} \text{ m}$$

Dal principio di indeterminazione di Heisenberg (Equazione 1.22), si ha

$$\begin{aligned}\Delta p &\geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{1,054 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2(5,29 \times 10^{-13} \text{ m})} \\ &\geq 9,96 \times 10^{-23} \text{ kg m s}^{-1}\end{aligned}$$

Siccome  $\Delta p = m \Delta u$ , l'incertezza sulla velocità è data da

$$\begin{aligned}\Delta u &= \frac{\Delta p}{m} \geq \frac{9,96 \times 10^{-23} \text{ kg m s}^{-1}}{9,1095 \times 10^{-31} \text{ kg}} \\ &\geq 1,1 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}\end{aligned}$$

L'incertezza sulla velocità dell'elettrone è dello stesso ordine di grandezza della velocità della luce ( $3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ ). A questo livello di incertezza, non si può avere idea di quale sia la velocità dell'elettrone.

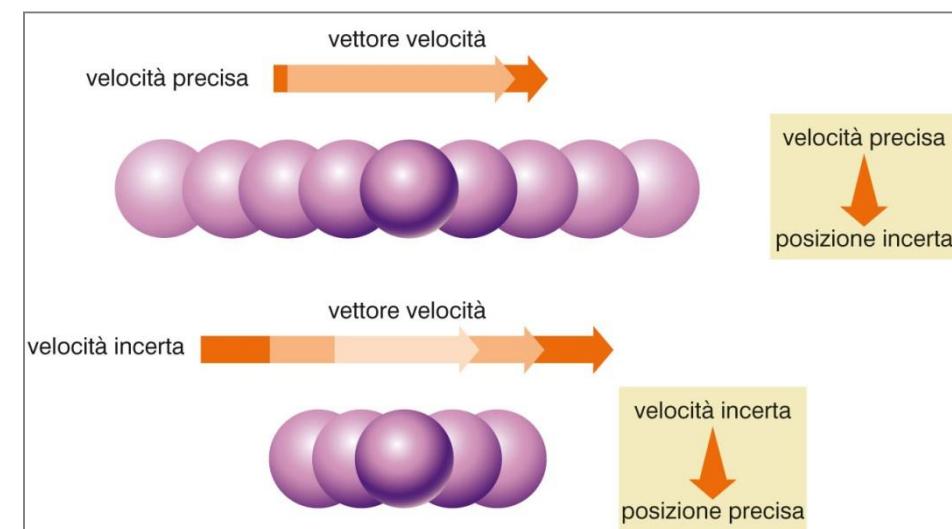
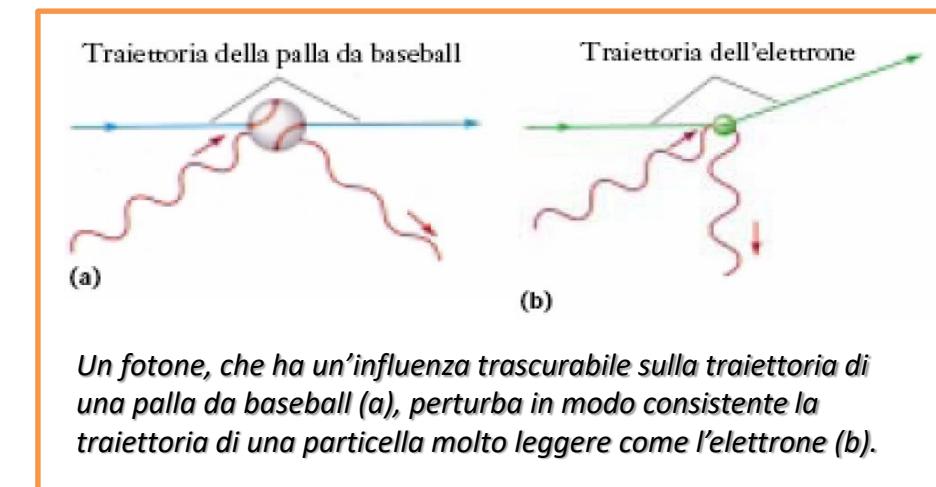


# ...riepilogando

La fisica classica permette la misura contemporanea della velocità e della posizione di un qualunque corpo in movimento nel **mondo macroscopico**, per corpi di grande massa **non si applica il principio di indeterminazione**.

Nel **mondo atomico**: il principio di indeterminazione implica "**non posso sapere dove è l'elettrone, se voglio conoscere contemporaneamente la sua velocità**".

**Non possiamo determinare** l'esatta posizione dell'elettrone, **possiamo però calcolarne l'energia, o meglio, la probabilità che l'elettrone si trovi in un certo spazio in corrispondenza di un determinato valore di energia.**



# L'atomo ondulatorio

A questo punto, la **teoria di Bohr**, che **localizza l'elettrone in orbite ben precise dove ripassa ad ogni giro per gli stessi punti**, **non può essere corretta in quanto non obbedisce al principio di indeterminazione**, che è un principio di valore universale.

La visione tipica della **meccanica classica viene sostituita dalla meccanica quantistica**, adatta a descrivere particelle microscopiche in moto a velocità prossime a quella della luce.

**Si ipotizzò che lo stesso comportamento dualistico del fotone** (che è un'onda e quindi una radiazione o una particella) **potesse valere anche per l'elettrone (modello dell'atomo ondulatorio)**.

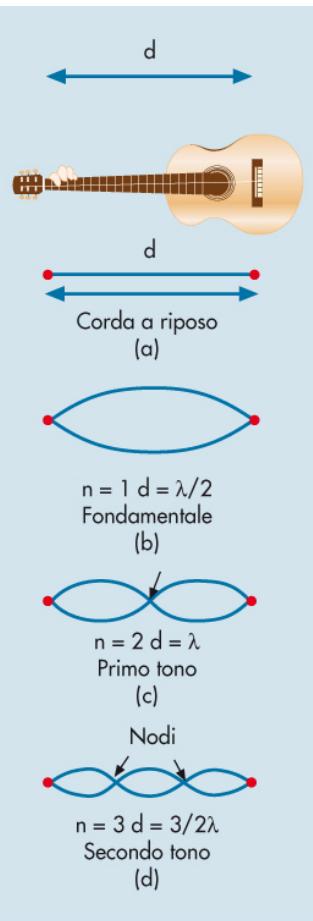
Un elettrone in un atomo non può assumere qualsiasi valore di energia, ma solo certi valori che sono permessi. **Anche all'elettrone in movimento posso associare un'onda**, per cui vale la relazione:

$$\lambda = h / (mv)$$

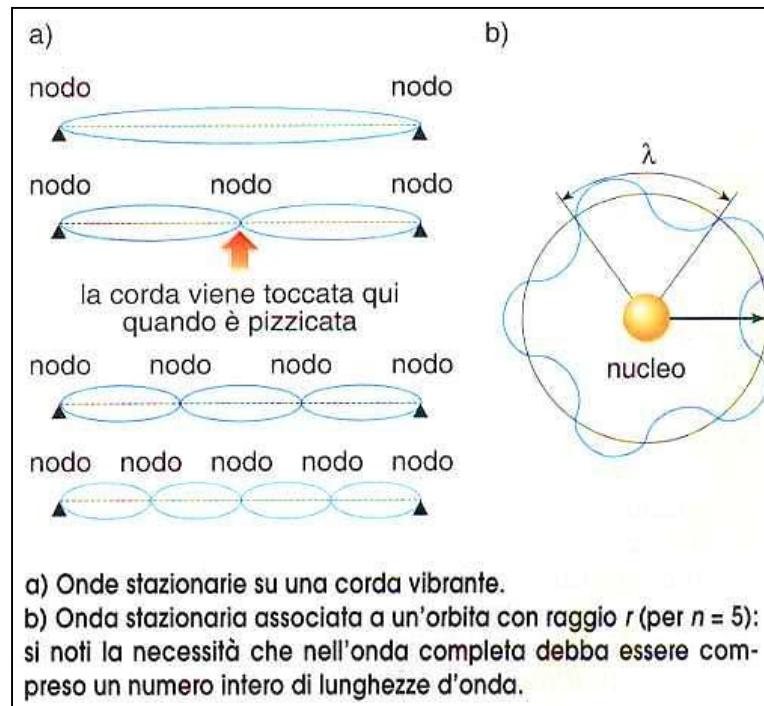
Tale onda viene detta **ONDA di FASE** = variazione periodica della densità di probabilità di trovare l'elettrone in un certo punto dello spazio.



# Le onde stazionarie



Le **onde** si dividono in **progressive** (sasso in acqua) e **stazionarie** (corda chitarra). Il moto di un'onda è descrivibile matematicamente tramite un'**equazione differenziale** (**equazione d'onda**). La sua risoluzione permette di ricavare l'ampiezza dell'onda sia in funzione delle coordinate spaziali che del tempo.



Corda chitarra: i punti si muoveranno dal basso verso l'alto ad eccezione degli estremi vincolati. Se  $\lambda = 2d$ , max spostamento si ha al centro della corda (**modo fondamentale**).

I punti dove l'ampiezza è 0 si chiamano **nodi** e il loro numero è  **$n+1$** . I vari modi di vibrazione (**armoniche superiori**) si ottengono attribuendo valori interi diversi ad  $n$ .

Figura 2.22

Vibrazioni di una corda di chitarra fissa alle due estremità: a) corda di lunghezza  $d$  a riposo, b)  $n = 1$ : vibrazione fondamentale, c)  $n = 2$ : prima armonica, d)  $n = 3$ : seconda armonica

# L'equazione d'onda di Schrödinger

Schrödinger descrisse il **comportamento dell'elettrone orbitante attorno al nucleo come quello di un'onda stazionaria**, per cui:

Nel 1926 Schrödinger scrisse un'**equazione che descrive l' $e^-$  considerato come un'onda**

La Funzione d'onda ( $\Psi$ ) descrive:

1. l'**energia dell' $e^-$  con una data  $\Psi$**
2. la **probabilità di trovare l' $e^-$  in un determinato volume di spazio**

L'equazione di Schrödinger può essere risolta esattamente solo per l'atomo di idrogeno. Per i sistemi multi elettronici si hanno solo soluzioni approssimate.



Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887–1961) fisico e matematico austriaco

# L'equazione d'onda di Schrödinger

Le onde stazionarie sono rappresentate da equazioni differenziali nelle quali non figura la variabile tempo.

## Il modello quanto-meccanico dell'atomo

### L'equazione di Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{d^2\Psi}{dz^2} + \frac{8\pi^2m_\Theta}{h^2}(E - V(x,y,z))\Psi(x,y,z) = 0$$

funzione d'onda

massa dell'elettrone

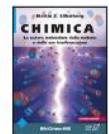
energia potenziale nel punto x,y,z

come  $\psi$  varia nello spazio

Energia quantizzata totale del sistema atomico



Copyright © 2008 – The McGraw-Hill Companies srl



# L'equazione d'onda di Schrödinger

Risolvendo l'equazione di Schrödinger si ottengono delle funzioni d'onda  $\Psi$  caratterizzate da un preciso valore di energia.

Esistono infinite funzioni d'onda  $\Psi$ , possibili soluzioni dell'equazione di Schrödinger, ma tra di esse sono accettabili solo quelle che soddisfano determinate condizioni: le autofunzioni (devono soddisfare la condizione di normalizzazione = probabilità di trovare l' $e^-$  in tutto lo spazio intorno al nucleo dev'essere unitaria). Inoltre,  $\Psi$  dev'essere continua e finita, avere un solo valore in ogni punto nello spazio, all'infinito deve tendere a 0.

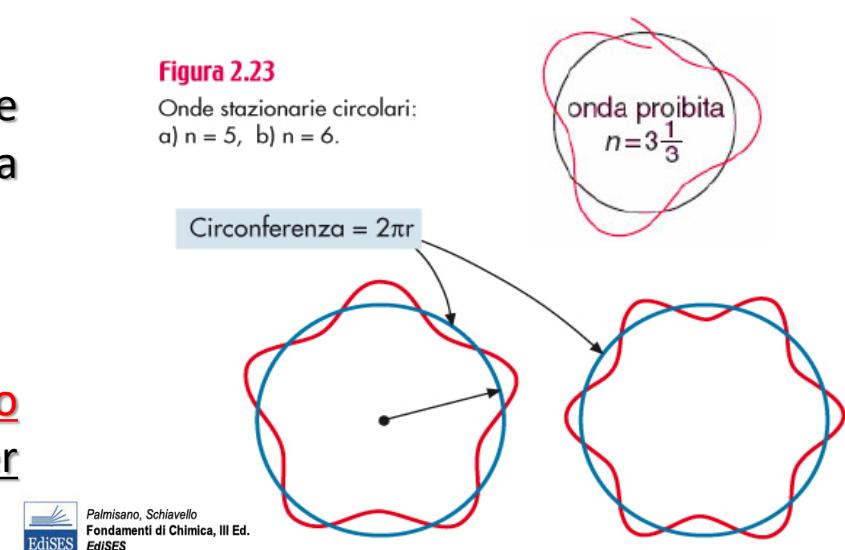
Se immaginiamo l'onda associata all'elettrone come la propagazione di una vibrazione in una corda chiusa su se stessa, si deve avere:

$$2\pi r = n\lambda, \text{ dove } n \text{ è un num. intero}$$

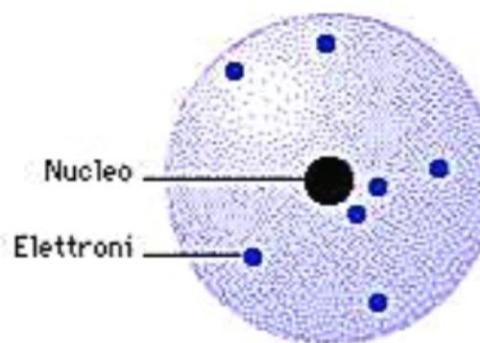
Se la lunghezza d'onda non fosse un sottomultiplo della circonferenza, l'onda si annullerebbe per interferenza.

Figura 2.23

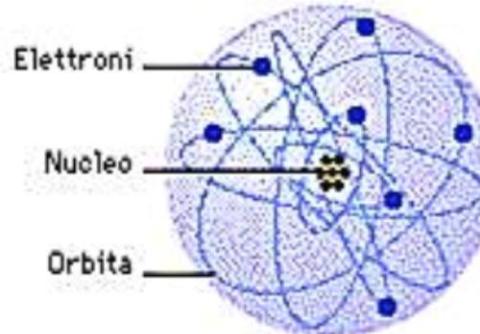
Onde stazionarie circolari:  
a)  $n = 5$ , b)  $n = 6$ .



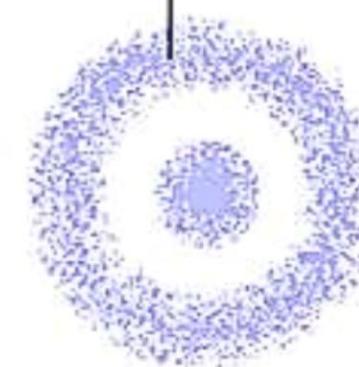
# Confronto tra i vari modelli atomici



**Il modello di Rutherford**  
descrive l'atomo come un sistema solare in miniatura in cui gli elettroni ruotano come pianeti attorno al nucleo.



**Il modello di Bohr**  
"quantizza" le orbite per dare una spiegazione della stabilità dell'atomo.



**Il modello di Schrödinger**  
abbandona l'idea di orbite precise e introduce una descrizione delle regioni dello spazio (orbitali) basata sulla probabilità di trovare gli elettroni.

# I protagonisti della rivoluzione scientifica



Photographie Benjamin Couprie

*V Congresso di Solvay su «Elettroni e Fotoní»  
Bruxelles - ottobre 1927*

28, Avenue Louise, Bruxelles

A. PICCARD	E. HENRIOT	ED. HERZEN	TH. DE DONDER	E. SCHROEDINGER	W. PAULI	W. HEISENBERG	L. BRILLOUIN	
P. EHRENFEST				E. VERSCHAFFELT				
P. DEBYE	M. KNUDSEN	W. L. BRAGG	H. A. KRAMERS	P. A. M. DIRAC	A. H. COMPTON	L. V. DE BROGLIE	M. BORN	N. BOHR
I. LANGMEIR	M. PLANCK	MADAME CURIE	H. A. LORENTZ	A. EINSTEIN	P. LANGEVIN	CH. E. GUYE	C. T. R. WILSON	O. W. RICHARDSON

# e quindi? ...perché l'elettrone non cade sul nucleo?

Perché sta su un'orbita che ha energia fissa (quantizzata), percorrendola non perde la sua energia intrinseca e quindi non collassa. Orbita: stato stazionario = energia fissa.

L'elettrone perde e/o acquista energia emettendo e/o assorbendo un quanto di energia (fotone), il risultato è il passaggio da un'orbita all'altra.

Il dualismo onda-particella implica che l'elettrone non può essere descritto come una particella orbitante attorno ad un nucleo secondo una traiettoria definita.

L'immagine di un elettrone che descrive orbite regolari è spazzata via, se non c'è momento lineare non c'è traiettoria. Nella visione quantistica lo studio della dinamica del corpo va fatta in termini probabilistici e ondulatori.

Inoltre in un atomo, lo stato fondamentale per gli elettroni deve corrispondere ad uno stato a distanza finita dal nucleo. Non essendoci stati a energia inferiore, l'elettrone non può cadere nel nucleo.



# Dualismo onda-particella: il moto degli elettroni

*cosa vuol dire che gli elettroni si comportano sia come particelle sia come onde?*

In meccanica quantistica, **l'elettrone può essere trattato sia come onda che come particella**, in accordo col dualismo onda-particella.

L'elettrone è descritto matematicamente da una funzione di variabile complessa, la **funzione d'onda**. Il **quadrato del valore assoluto della funzione d'onda** rappresenta una **densità di probabilità**, cioè la probabilità **che l'elettrone sia osservato nell'intorno di una determinata posizione**. Da tale distribuzione si può calcolare l'incertezza della posizione dell'elettrone. Un calcolo analogo si può fare sulla quantità di moto dell'elettrone (principio di indeterminazione di Heisenberg).

**Negli atomi gli elettroni non posseggono contemporaneamente una posizione e una velocità definite, se si conosce una non si conosce l'altra.** Ne consegue una **conoscenza probabilistica del loro moto che non occupa un'orbita ma un'orbitale che è una regione di spazio più probabilmente occupata dall'elettrone**.

Secondo il moderno modello a orbitali, gli **elettroni si muovono**, ma **non su un'orbita** come se fossero puntiformi con una traiettoria, bensì **in modo casuale all'interno di uno spazio definito orbitale** (ogni orbitale ha diversa energia e in base all'energia posseduta, l'elettrone si posiziona in orbitali diversi): la differenza è che **possiamo conoscere solo la distribuzione di probabilità di trovarlo in un punto piuttosto che un altro e senza averne mai la certezza**.

L'elettrone non è solo un puntino di **materia** ma anche un'**onda** e quando "gira" **attorno al nucleo si comporta come una onda stazionaria confinata nel suo orbitale**.

L'**orbitale** è la **soluzione dell'equazione di Schrödinger** ed è **caratterizzato dai numeri quantici**.

Attraverso i **numeri quantici** puoi conoscere:

- ENERGIA DELL'ORBITALE, FORMA DELL'ORBITALE, NUMERO DI ORBITALI E ORIENTAZIONE SPAZIALE, DIREZIONE DI ROTAZIONE DELL'ELETTRONE



# Cronistoria della Teoria Atomica

**1869 C.E.** - Mendeleev made the first periodic table of elements. He organized the already known elements by their properties and how many electrons were on their outer shell. He couldn't find a textbook so he created his own.

**1897 C.E.** - J.J. Thomson discovered electrons. He took Crooks' tube and moved the path of the electrons using the positive side of a magnet. He figured that if the electrons moved towards the positive side of the magnet then that means that atoms must have a negative charge. He called his model of an atom the 'Plum Pudding Model.' He proposed that there were negative and positively charged charges mixed together.

**1900 C.E.** - Max Planck proposed that energy was released in discrete packets called quanta.

**1911 C.E.** - Rutherford did an experiment containing a piece of gold foil and a particle emitter. He thought that the particle would go through the foil with little or no deflection. What actually happened was most of the particles went through with little or no deflection, except for a few that had major deflection. Some even bounced back.

**1913 C.E.** - Niels Bohr the planetary model of looking at atoms. We still use this today even though we don't think this is the most accurate model. He came up with the idea that there are certain paths that electrons travel around the outside on. electrons can jump from level to level.

**1926 C.E.** - Erwin Schrodinger contributed the cloud model. He found the area where you will most likely find the electrons.

**1932 C.E.** - Chadwick discovered the neutron. He found that there was a particle in an atom that has no charge. he redesigned Bohr's model to incorporate this.

**1935 C.E.** - Wolfgang Pauli proposed the exclusion principle. This states that no two electrons in an atom can have the same set of quantum numbers.

**1947 C.E.** - Maria Goeppert Mayer and J. Hans D. Jensen proposed the nuclear model of the atom. They believed that the atom contained a dense, positive nucleus surrounded by negative electrons.

**1953 C.E.** - James Watson and Francis Crick proposed the double helix model of DNA.

**1964 C.E.** - Arno Penzias and Robert Wilson discovered the background radiation of the universe.

**1968 C.E.** - Carl Sagan proposed the theory of panspermia.

**1972 C.E.** - The Apollo 17 astronauts brought back the first samples of the moon.

**1973 C.E.** - The first test-tube baby was born.

**1974 C.E.** - The first AIDS cases were reported.

**1976 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**1981 C.E.** - The first AIDS cases were reported.

**1984 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**1990 C.E.** - The Hubble Space Telescope was launched.

**1996 C.E.** - The first cloned animal, Dolly the sheep, was born.

**1997 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**1999 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2001 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2003 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2005 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2007 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2009 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2011 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2013 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2015 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2017 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2019 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2021 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2023 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2025 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2027 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2029 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2031 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2033 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2035 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2037 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2039 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2041 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2043 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2045 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2047 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2049 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2051 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2053 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2055 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2057 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2059 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2061 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2063 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2065 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2067 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2069 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2071 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2073 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2075 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2077 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2079 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2081 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2083 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2085 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2087 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2089 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2091 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2093 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2095 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2097 C.E.** - The first mobile phone call was made.

**2099 C.E.** - The first mobile phone call was made.

# I numeri quantici

In realtà, **il moto dell'elettrone avviene in tre dimensioni**, per cui **le soluzioni accettabili dell'equazione d'onda derivano dalla combinazione di tre costanti**, dette **numeri quantici** e indicate con le lettere **n, l, m** che devono essere **legate tra loro da relazioni ben definite**.

**n numero quantico principale**

*può assumere tutti i valori interi da 0 a  $\infty$*

**l numero quantico secondario (o azimutale)**

*dipende da n, può assumere tutti i valori interi tra  $0 < l < n-1$*

**$m_l$  numero quantico magnetico**

*dipende da l, può assumere tutti i valori interi tra  $-l$  e  $+l$*



# Significato fisico dei numeri quantici: gli orbitali

Ogni funzione d'onda elettronica caratterizzata da una particolare terna di valori di  $\Psi_{nlm}$  viene chiamata **ORBITALE** e corrisponde ad un determinato stato stazionario possibile per l'elettrone.

$\Psi_{(x,y,z)}$  funzione d'onda  $\leftrightarrow$  ORBITALE

$\Psi^2$  rappresenta la probabilità di trovare l' $e^-$  in una determinata posizione intorno al nucleo.

Un **orbitale atomico** è una funzione d'onda  $\psi$  che descrive il comportamento di un elettrone in un atomo.

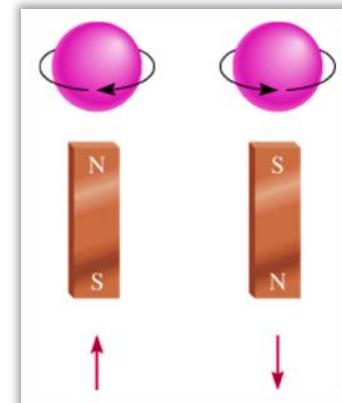
Una regione di spazio attorno ad un nucleo atomico in cui la probabilità di trovarvi un elettrone è massima (di solito superiore al 90%) è usata per rappresentare graficamente un **orbitale atomico** di quell'elettrone.

La funzione  $\Psi_{100}$  rappresenta l'orbitale con  $n=1$ ,  $l=0$ ,  $m=0$  ed è la soluzione dell'equazione d'onda corrispondente allo stato energetico più basso possibile, cioè allo stato fondamentale dell' $e^-$  nell'atomo di H.

Ogni orbitale può descrivere il comportamento di due elettroni che non possono avere tutti e 4 i numeri quantici uguali (**principio di esclusione di Pauli**)  $\rightarrow$  quarto numero quantico:

$m_s$  numero quantico di spin

associato alla componente z dello spin dell' $e^-$ , vale  $+1/2$  o  $-1/2$





# Significato fisico dei numeri quantici: gli orbitali

I diversi orbitali sono indicati per convenzione con le lettere

**s ( $l=0$ ), p ( $l=1$ ), d ( $l=2$ ), f ( $l=3$ ).**

*s (sharp), p (principal), d (diffuse), f (fundamental)*

Terne possibili dei numeri quantici  $n, l, m_l$  e corrispondenti espressioni dell'energia ( $a_0 = 53$  pm) per l'atomo di idrogeno;  $k$  è una costante che dipende dal sistema di unità

Numeri quantici $n$	$l$	$m_l$	Simbolo generale	Simbolo esplicito	Energia
1	0	0	$s$	$1s$	$-\frac{ke^2}{2a_0}$
2	0	0	$s$	$2s$	$-\frac{1}{4} \frac{ke^2}{2a_0}$
2	1	0	$p$	$2p_z$	"
2	1	1		$2p_x$	"
2	1	-1		$2p_y$	"
3	0	0	$s$	$3s$	$-\frac{1}{9} \frac{ke^2}{2a_0}$
3	1	0	$p$	$3p_z$	"
3	1	1		$3p_x$	"
3	1	-1		$3p_y$	"
3	2	0	$d$	$3d_z^2$	"
3	2	1		$3d_{xz}$	"
3	2	-1		$3d_{yz}$	"
3	2	2		$3d_{xy}$	"
3	2	-2		$3d_{x^2-y^2}$	"

**n (1,2,3,...,7)** definisce il livello energetico dell' $e^-$ , che è proporzionale alla distanza dal nucleo.

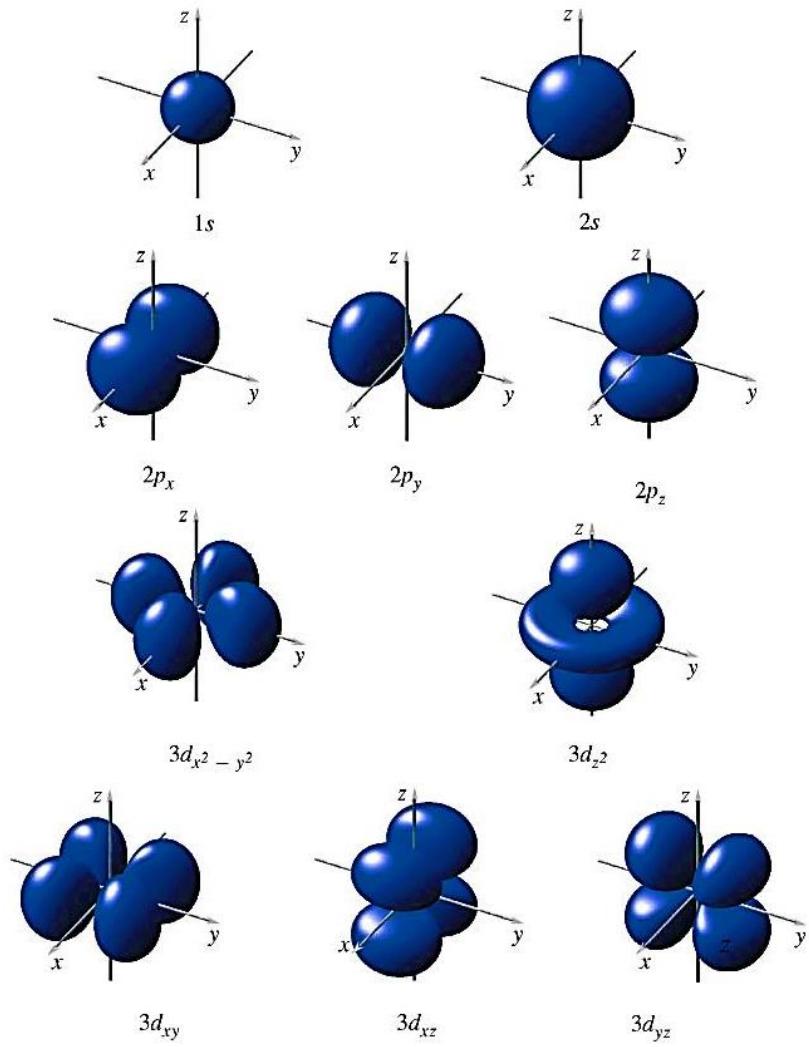
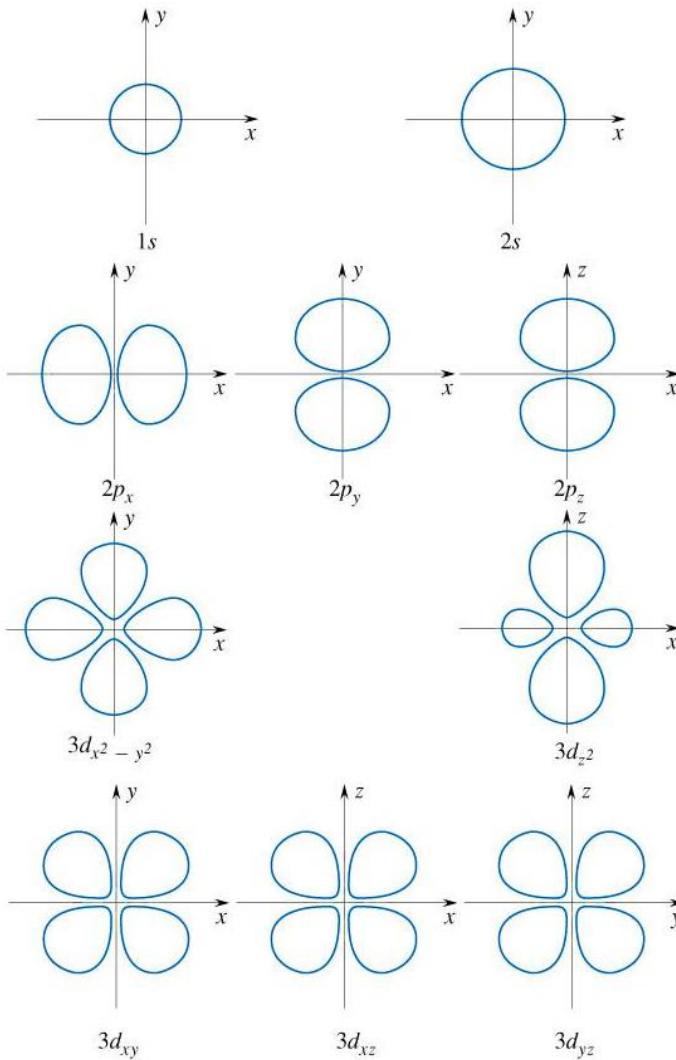
**l (0,1,...,n-1)** individua i sottolivelli energetici e determina le caratteristiche geometriche dell'orbitale (forma).

**Valori di l: 0    1    2    3**  
**Orbitale: s    p    d    f**

**$m (-l / +l)$**  indica l'orientazione degli orbitali nello spazio.



# Orbitali atomici e loro rappresentazione



# Orbitali di tipo "s"

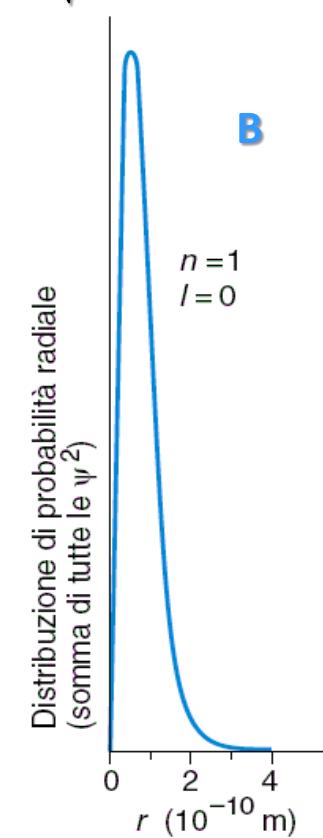
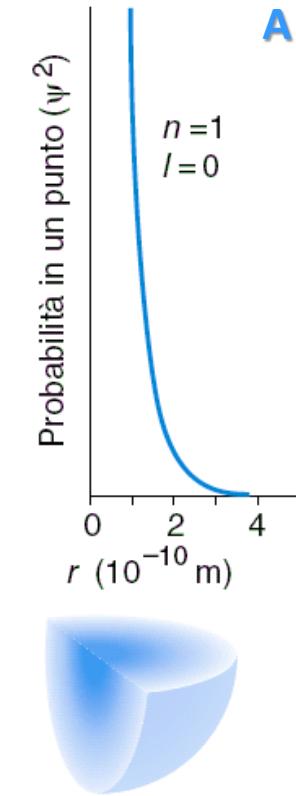
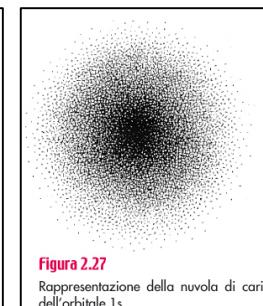
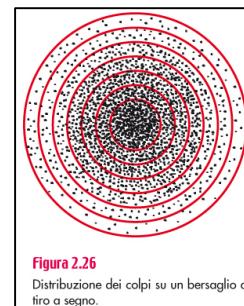
La **soluzione dell'equazione di Schrödinger** per l'**orbitale 1s** dell'atomo di H è una **funzione** i cui valori dipendono solamente dalla distanza  $r$  dell' $e^-$  attorno al nucleo:  $\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-r/a_0}$

Valore di  $a_0 \equiv$  raggio prima orbita di Bohr, correlato alla costante di Planck, alla carica dell' $e^-$  e alle masse di  $e^-$  e nucleo.

Riportando la  $\Psi^2$  in funzione di  $r$ , si ottiene la curva riportata in **Fig. A** che rappresenta la **distribuzione di probabilità** per l'orbitale 1s.

La **Fig. B** mostra come la **funzione  $4\pi r^2 \Psi^2$  (funzione di distribuzione radiale)** dipenda dalla distanza dal nucleo. La probabilità di trovare l' $e^-$  molto vicino al nucleo è bassa, poi aumenta (massimo) e poi decresce asintoticamente.

*Andamento simile alla distribuzione delle tracce dei colpi su un bersaglio da tiro a segno.*



L'orbitale 1s

# Orbitali di tipo "s"

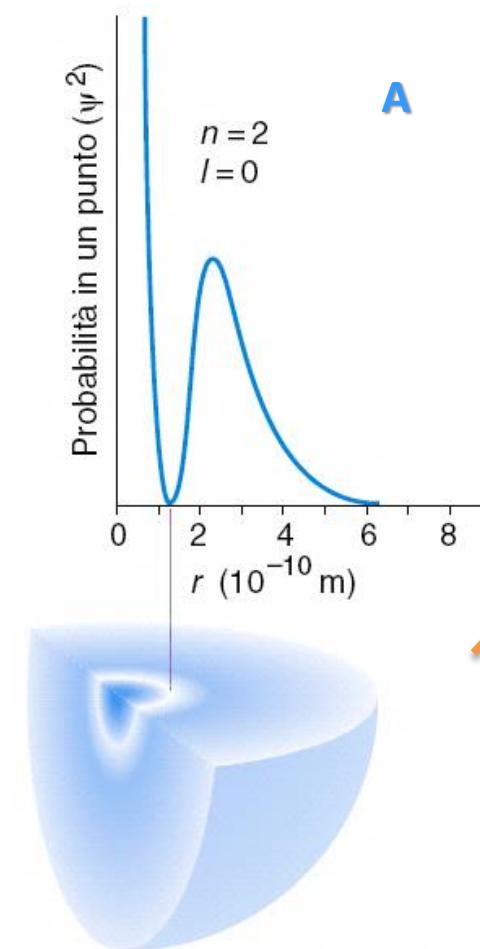
Dunque, per  **$l = 0$** , si ottengono **orbitali di tipo s** per i quali la probabilità di trovare l' $e^-$  attorno al nucleo dipende solo dal raggio.

Questi orbitali hanno simmetria sferica e ad un aumento del numero quantico  $n$  corrisponde un aumento dello spazio a disposizione dell' $e^-$  (aumento diametro sfera).

La probabilità di trovare l' $e^-$  è massima per un valore di raggio superiore ad  $r_0$  e si annulla per una distanza  $r_1$  dal nucleo.

Le superfici sferiche dove la probabilità è zero si chiamano **superfici nodali**.

Quando  $n = 3$ , 2 superfici nodali e così via...



A

L'orbitale  $2s$  ha una superficie nodale sferica

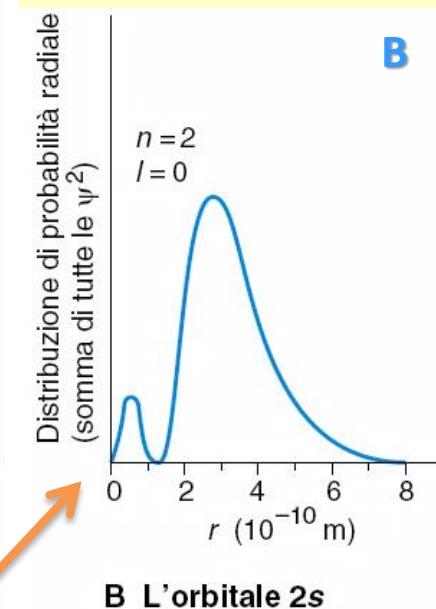
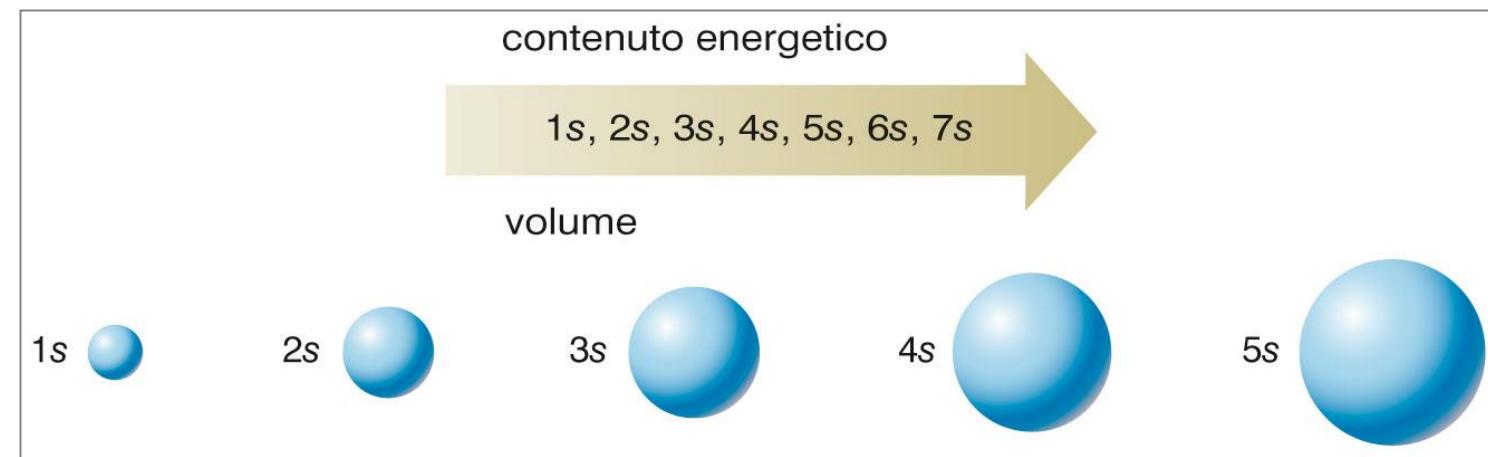
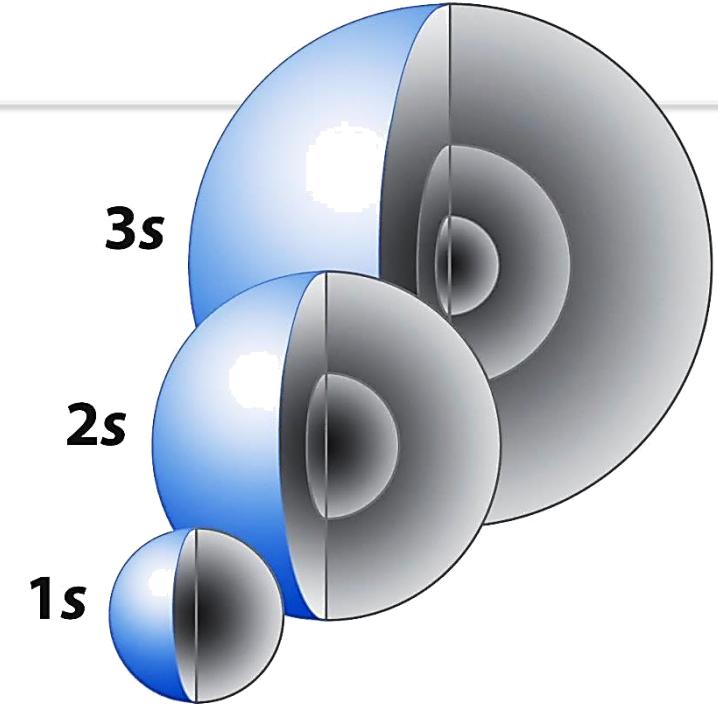
B L'orbitale  $2s$ 

Figura 2.29  
Rappresentazione della nuvola di carica dell'orbitale  $2s$ .



## Orbitali di tipo "s"

La superficie di contorno degli orbitali s è una **sfera** (che racchiude il > 90 % di probabilità di trovare l'elettrone) il cui volume aumenta all'aumentare del numero quantico principale  $n$ .



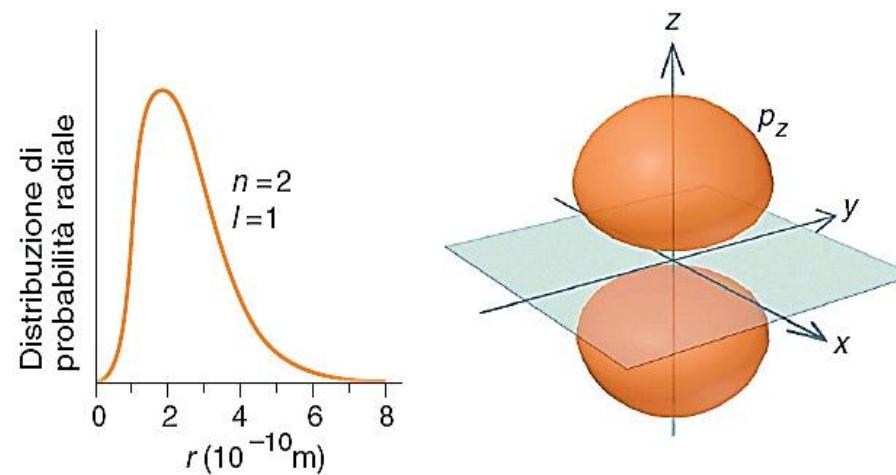
# Orbitali di tipo "p"

Per  $l = 1$ , si ottengono **tre orbitali lobati di tipo p**, corrispondenti a valori di **m** pari a **-1, 0 e +1**, per i quali **la distribuzione di probabilità dipende dalla direzione**.

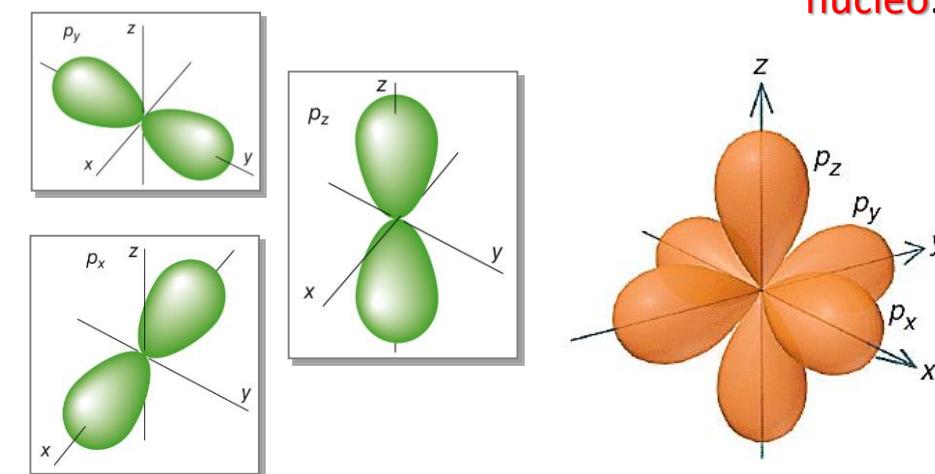
Ciascuno di essi risulta **simmetrico** rispetto ad uno dei tre **assi**  $\rightarrow p_x, p_y, p_z$ .

**I tre orbitali di tipo p sono perfettamente equivalenti tra loro e isoenergetici (DEGENERI).**

Gli orbitali  $2p$  hanno **piani nodali** che separano i due lobi e sono **perpendicolari agli assi**

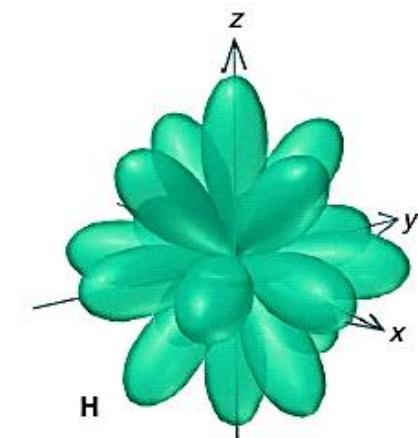
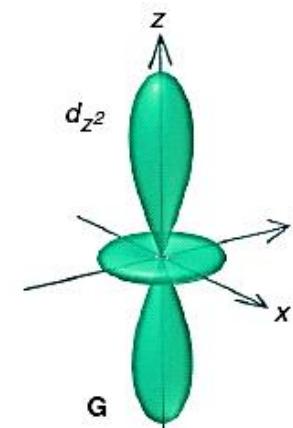
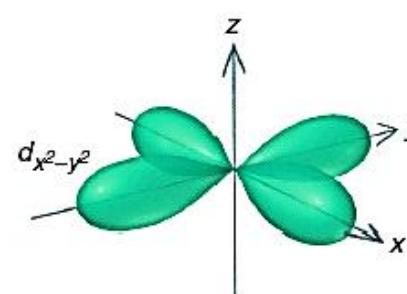
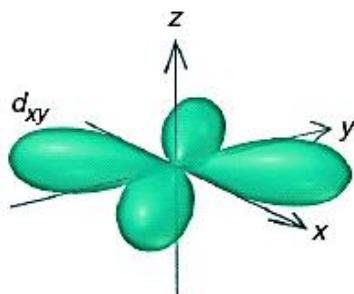
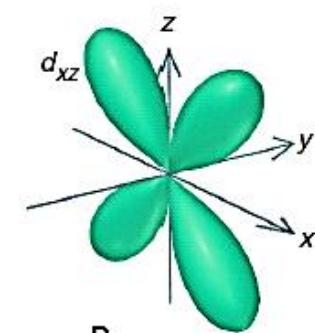
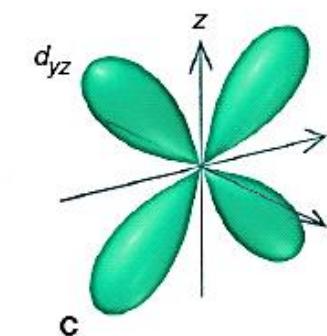
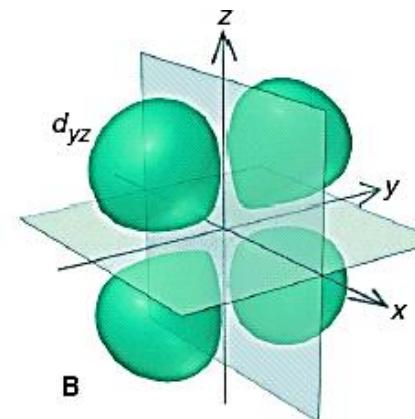
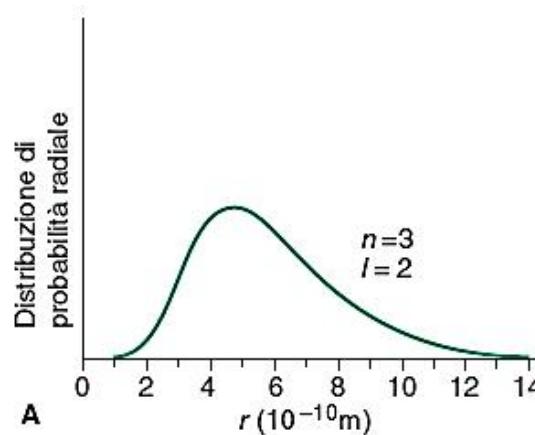


A differenza degli orbitali di tipo s, la **probabilità di trovare l' $e^-$  attorno al nucleo è zero**. Al crescere di **n**, la forma rimane la stessa, mentre la **regione di massima densità si sposta sempre più lontano dal nucleo**.



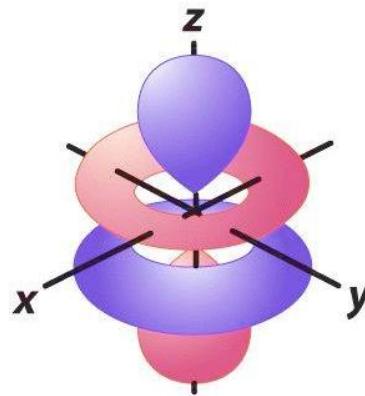
# Orbitali di tipo "d"

Per  $l = 2$ , si ottengono **5 orbitali di tipo d (degeneri)**, con  $m = -2, -1, 0, +1, +2$ , per i quali la densità elettronica dipende sia dalla distanza dal nucleo che dall'orientazione nello spazio.

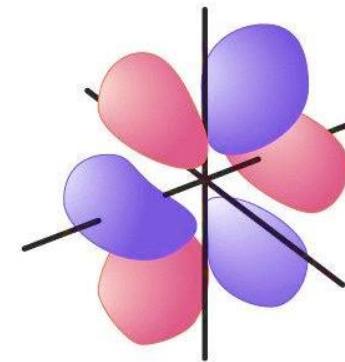


# Orbitali di tipo "f"

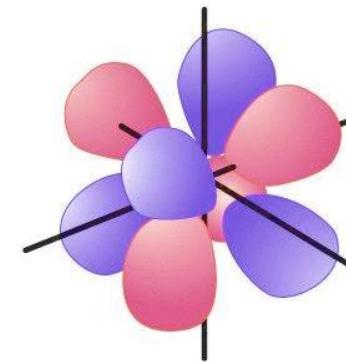
Per  $l = 3$ , si ottengono **7 orbitali di tipo f (degeneri)**, con  $m_l = -3 \leftrightarrow +3$ .



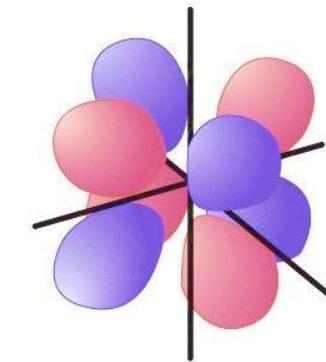
$$5z^3 - 3zr^2$$



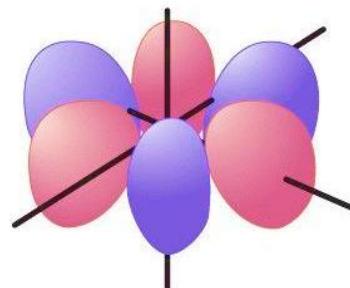
$$5xz^2 - xr^2$$



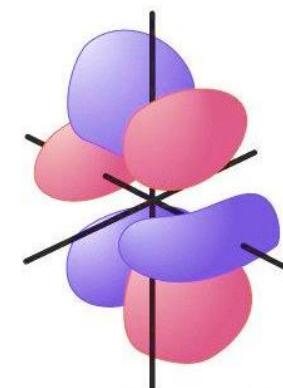
$$zx^2 - zy^2$$



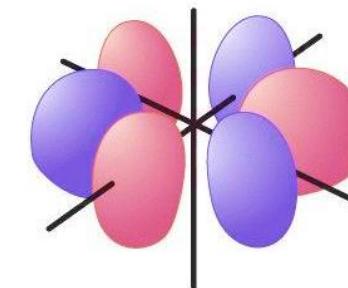
$$xyz$$



$$y^3 - 3yx^2$$



$$5yz^2 - yr^2$$



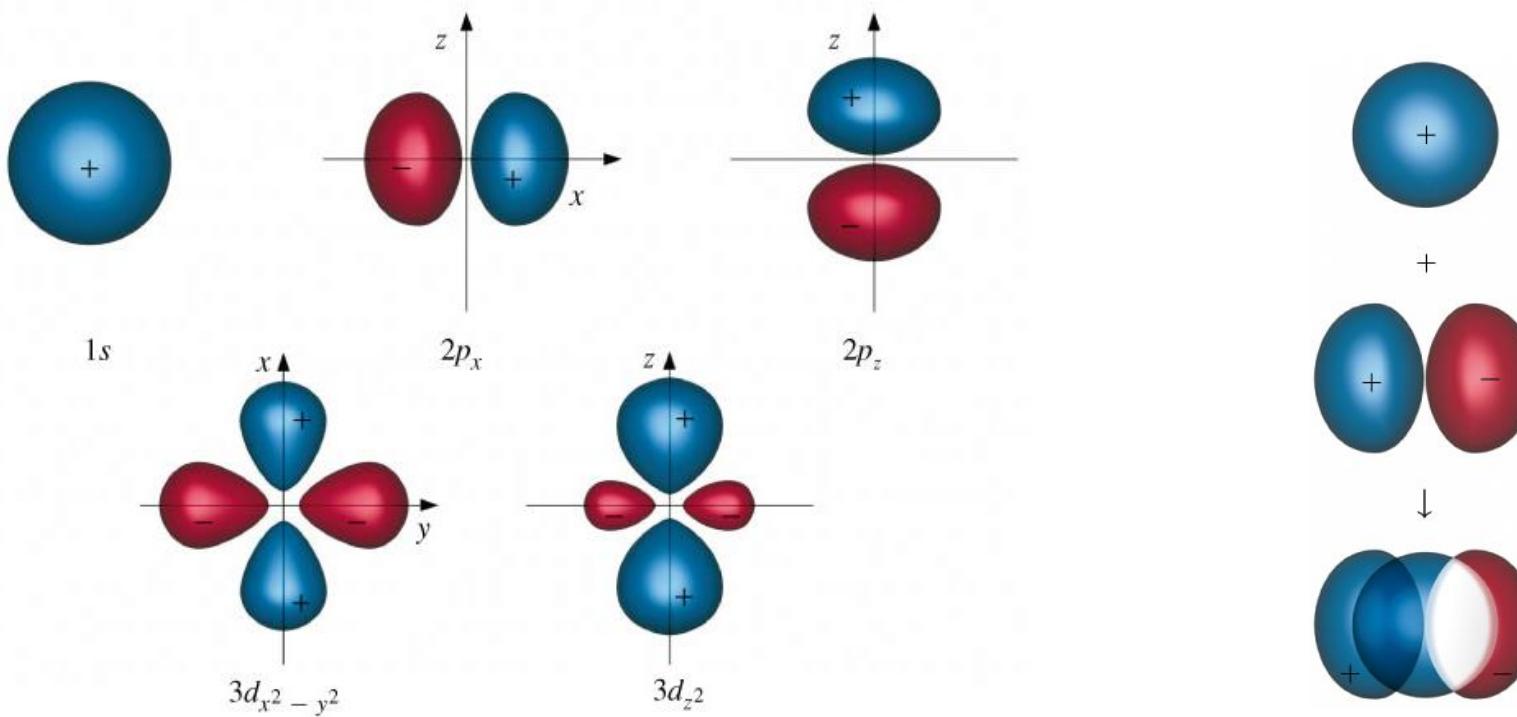
$$x^3 - 3xy^2$$



# Orbitali atomici e loro rappresentazione

L'**orbitale** è una **funzione matematica** e quindi assumerà un certo valore per ogni terna di valori  $x, y, z$ .

Per l'**orbitale 1s** i **valori della funzione sono sempre positivi**, per gli **altri orbitali i valori** assunti dalle funzioni possono essere **sia positivi che negativi**.



# Ricapitolando: caratteristiche orbitali atomici

L'orbitale  $2s$  ha una superficie nodale sferica

Per  $l = 0$ , si ottengono **orbitali di tipo s** per i quali **la probabilità di trovare l' $e^-$  attorno al nucleo dipende solo dal raggio**. Questi orbitali hanno **simmetria sferica** e ad un aumento del numero quantico  $n$  corrisponde un aumento dello spazio a disposizione dell' $e^-$  (aumento diametro sfera).

Gli orbitali  $2p$  hanno piani nodali che separano i due lobi e sono perpendicolari agli assi

Per  $l = 1$ , si ottengono **tre orbitali lobati di tipo p**, corrispondenti a valori di  $m$  pari a **-1, 0 e +1**, per i quali **la distribuzione di probabilità dipende dalla direzione**. Ciascuno di essi risulta **simmetrico** rispetto ad uno dei tre assi  $\rightarrow p_x, p_y, p_z$ .

I tre orbitali di tipo p sono perfettamente equivalenti tra loro e isoenergetici (**degeneri**).

Per  $l = 2$ , si ottengono **5 orbitali di tipo d (degeneri)**, con  $m = -2, -1, 0, +1, +2$ , per i quali **la densità elettronica dipende sia dalla distanza dal nucleo che dall'orientazione nello spazio**.

Per  $l = 3$ , si ottengono **7 orbitali di tipo f (degeneri)**, con  $m = -3 \leftrightarrow +3$ .

