

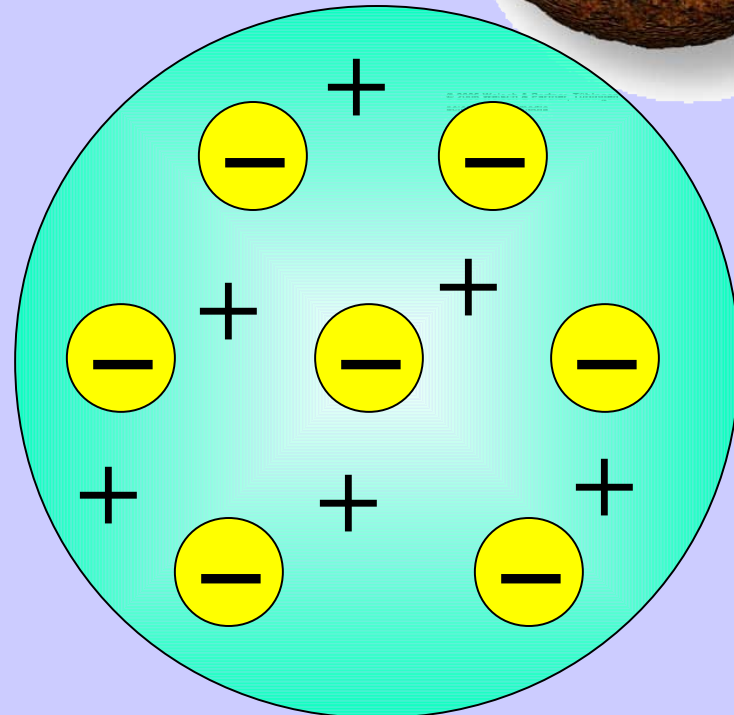
*Corso di CHIMICA*

*LEZIONE 2*

# MODELLO ATOMICO DI THOMSON 1904

Modello a 'panettone'

L'atomo è formato da una sfera carica positivamente in cui gli elettroni con carica negativa, distribuiti uniformemente all'interno, neutralizzano le cariche positive.

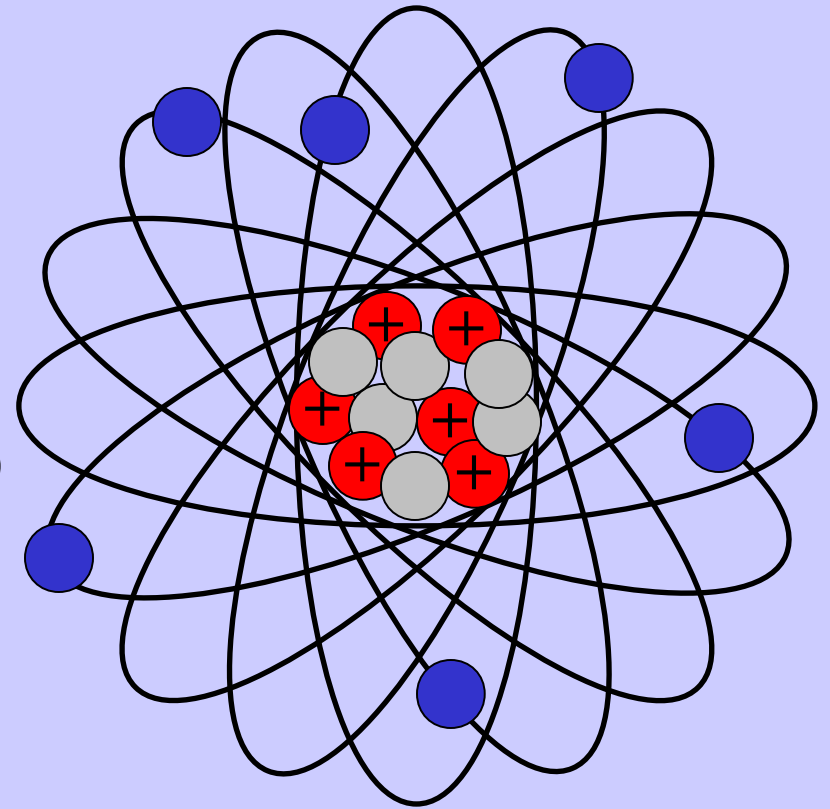


# MODELLO ATOMICO DI RUTHERFORD 1911

## Modello planetario

L'atomo, come il Sistema Solare, è costituito da un nucleo piccolissimo attorno a cui gli elettroni si muovono come i pianeti intorno al Sole.

Ogni elettrone è attratto dal nucleo da una forza elettrostatica. Questa forza è uguale e contraria alla forza centrifuga che agisce sull'elettrone in conseguenza del suo moto circolare.

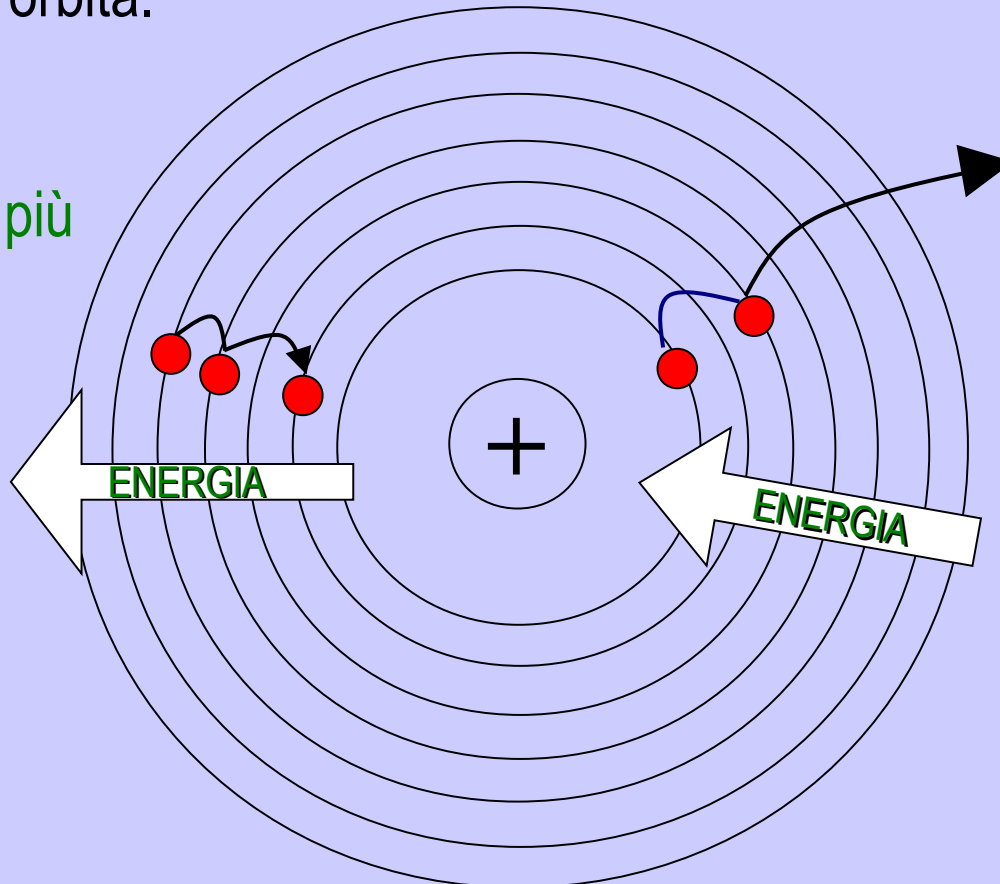


# MODELLO ATOMICO DI BOHR 1913

Un elettrone può muoversi intorno al nucleo solo su particolari orbite circolari poste a distanze definite dal nucleo.

Ogni elettrone è dotato di una energia che aumenta all'aumentare del raggio dell'orbita.

Quando un  $e^-$  cade su orbite più piccole libera energia.



Per portare un  $e^-$  da un'orbita più piccola ad una più grande, bisogna fornirgli energia.

# MODELLO ATOMICO DEGLI ORBITALI

Un elettrone in movimento ha una doppia natura: è una particella atomica dotata di una massa, ma si comporta anche come un'onda di energia (**IPOTESI DI DE BROGLIE 1924**).

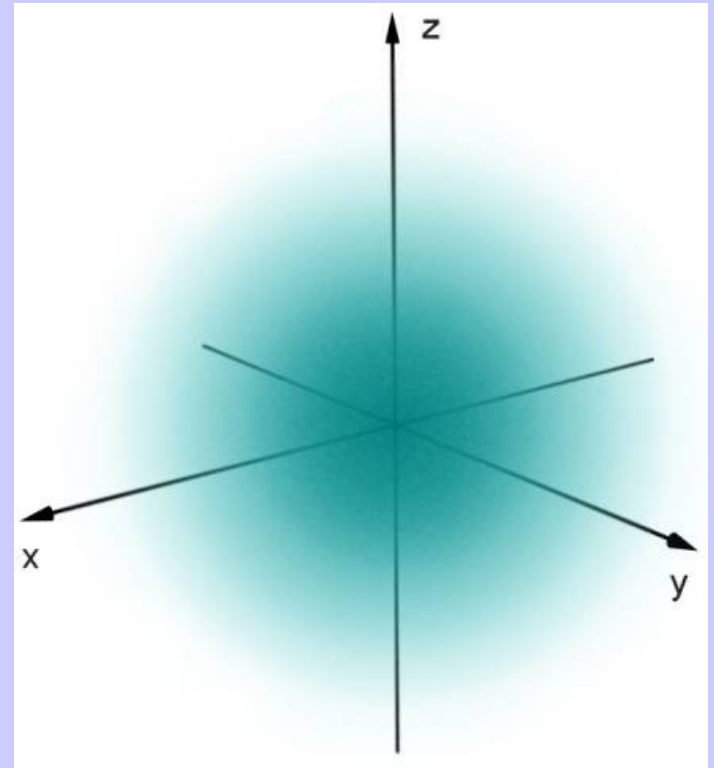
Non è possibile conoscere nel medesimo istante con la massima precisione sia la posizione che la velocità di un elettrone (**PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE DI HEISENBERG 1927**).

Si possono fare valutazioni probabilistiche, cioè calcolare la probabilità di trovare l'elettrone entro una determinata distanza dal nucleo in una certa zona dello spazio.

# L'ORBITALE

Il modello atomico attuale supera definitivamente il modello atomico di Bohr basato su orbite circolari e introduce invece il concetto di orbitale:

*L'orbitale è quella zona intorno al nucleo dove c'è il 90% di probabilità di trovare l'elettrone*



# I NUMERI QUANTICI

Definiscono le dimensioni, la forma e l'orientazione nello spazio di ogni orbitale oltre che il verso di rotazione degli elettroni.

$n$

$l$

$m$

$m_s$

principale

secondario

magnetico

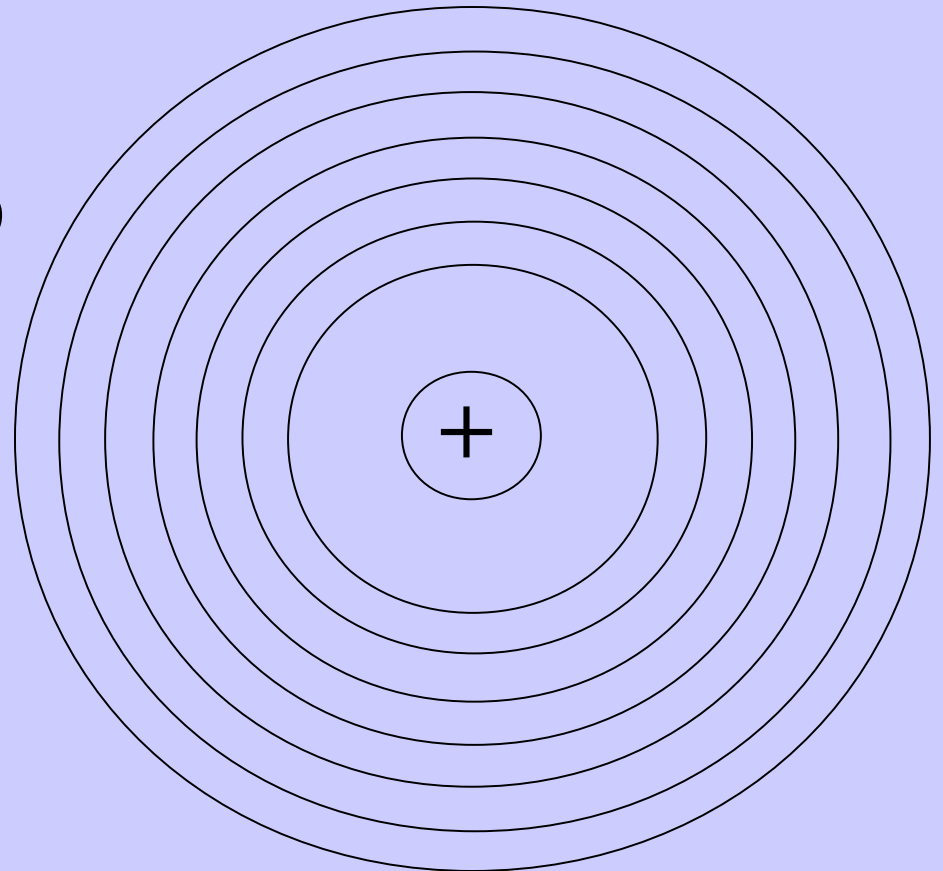
di spin

# Numero quantico principale $n$

→ è un indice delle dimensioni e dell'energia dell'orbitale

→ corrisponde al livello energetico che un elettrone può occupare

→  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$

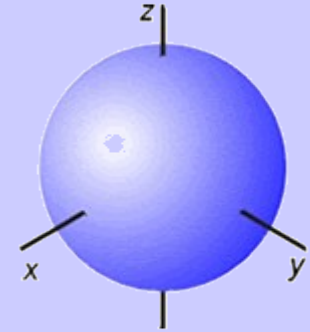




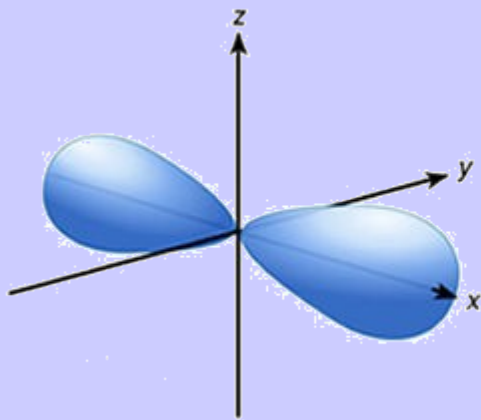
# Numero quantico secondario $l$ $0 \leq l \leq n - 1$

→ indica la FORMA dell'orbitale

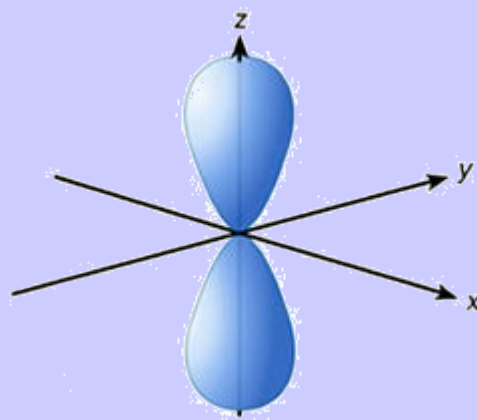
$l = 0$  → orbitale s (sferico)



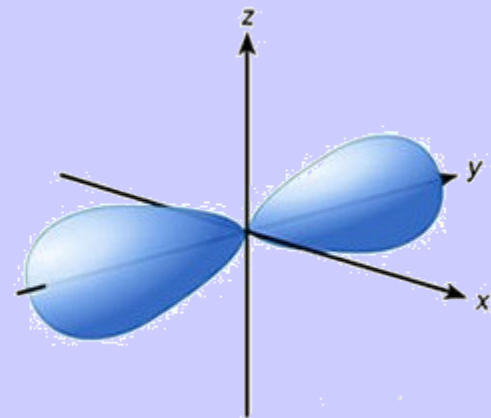
$l = 1$  → orbitale p (formato da 2 lobi)



$p_x$

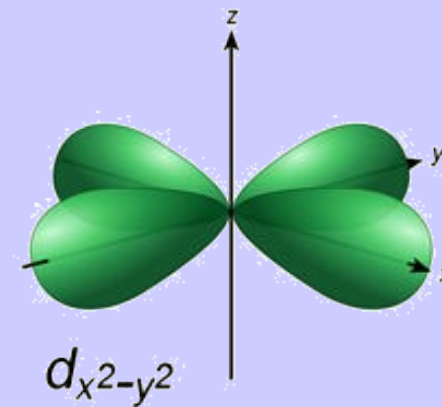
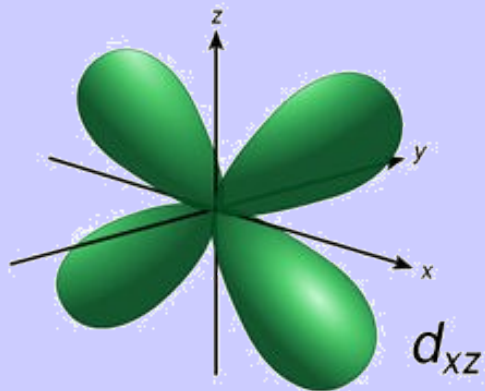
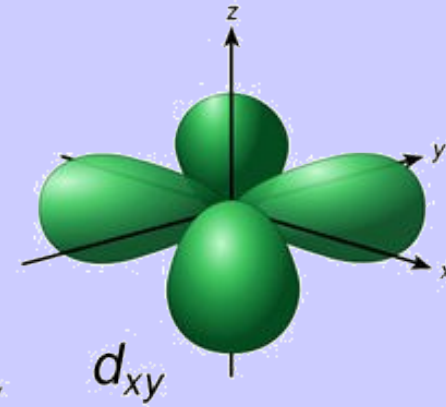
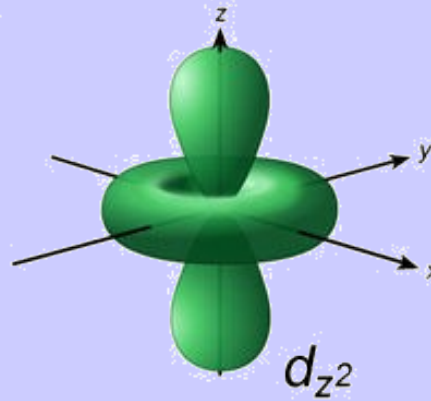
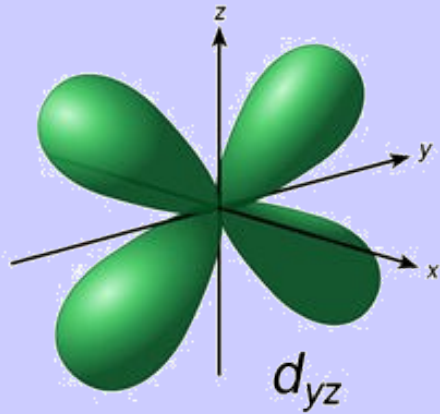


$p_y$

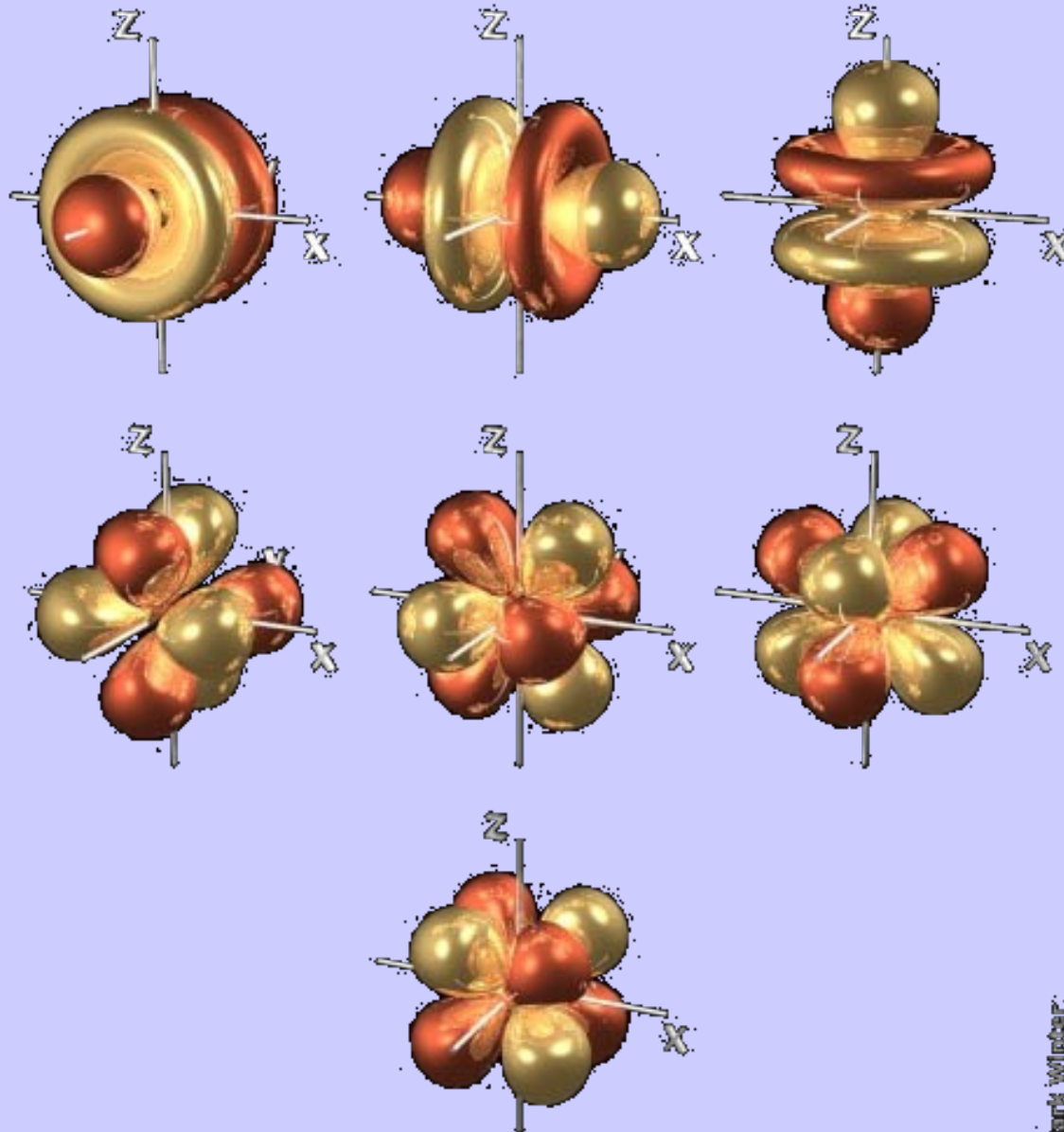


$p_z$

$l = 2 \rightarrow$  orbitale d (formato da 4 lobi)



$l = 3 \rightarrow$  orbitale f (forme complexe)



# Numero quantico magnetico $m$ $-l \leq m \leq +l$

→ indica il numero di orientamenti di un orbitale nello spazio

se  $l = 0 \rightarrow m = 0$   
l'orbitale **s** è unico

se  $l = 1 \rightarrow m = -1, 0, +1$   
gli orbitali **p** sono 3:  
 $p_x, p_y, p_z$

se  $l = 2 \rightarrow m = -2, -1, 0, +1, +2$   
gli orbitali **d** sono 5

se  $l = 3 \rightarrow m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$   
gli orbitali **f** sono 7

## ... RIASSUMENDO

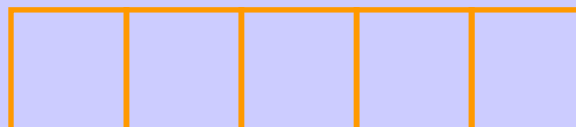
1 orbitale s



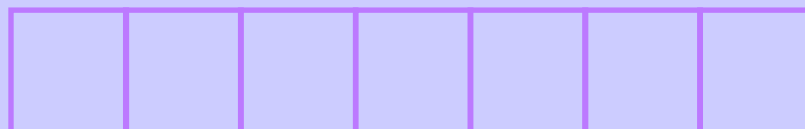
3 orbitali p



5 orbitali d



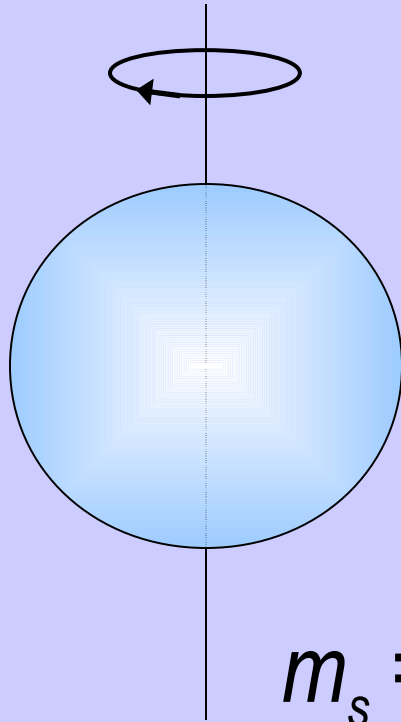
7 orbitali f



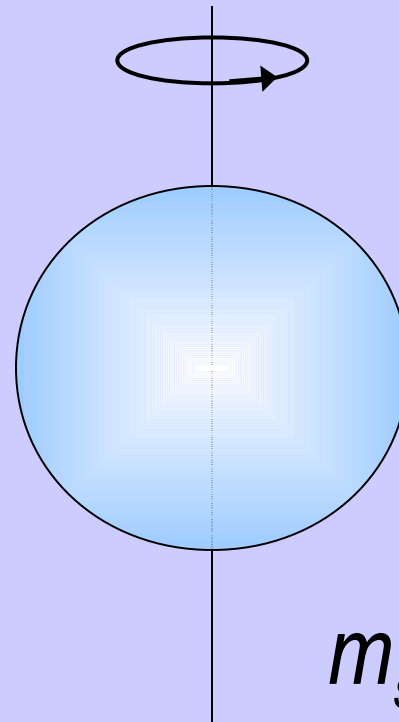
L'insieme degli orbitali dello stesso tipo, ma con orientamento diverso forma una famiglia di **orbitali ISOENERGETICI**.

# Numero quantico di spin $m_s$

indica il verso del moto rotatorio dell'elettrone intorno al proprio asse



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



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

# PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI

Su qualsiasi orbitale ci possono stare al massimo 2 elettroni con spin antiparallelo (cioè opposto), che vengono indicati con due freccette di verso opposto:  $\uparrow\downarrow$ .

1 orbitale s  $\rightarrow$  occupato al max da  $2e^-$

3 orbitali p  $\rightarrow$  occupati al max da  $6e^-$

5 orbitali d  $\rightarrow$  occupati al max da  $10e^-$

7 orbitali f  $\rightarrow$  occupati al max da  $14e^-$

# L'ENERGIA DEGLI ORBITALI

In realtà non in tutti i 7 livelli energetici possiamo trovare tutti gli orbitali (s, p, d, f) previsti in teoria. Gli orbitali effettivi per livello energetico sono i seguenti →



<b>n = 7</b>	7s			
<b>n = 6</b>	6s	6p	6d	
<b>n = 5</b>	5s	5p	5d	5f
<b>n = 4</b>	4s	4p	4d	4f
<b>n = 3</b>	3s	3p	3d	
<b>n = 2</b>	2s	2p		
<b>n = 1</b>	1s			



# ANOMALIE ENERGETICHE

- L'energia degli orbitali aumenta con l'aumentare di  $n$
- Con l'aumentare di  $n$  diminuiscono le differenze energetiche tra gli orbitali
- Ciò produce a volte delle sovrapposizioni energetiche con conseguenti anomalie nell'ordine di riempimento degli orbitali.
- L'ordine effettivo di energia degli orbitali è dato dalla regola della diagonale:

# ORDINE EFFETTIVO DI RIEMPIMENTO DEGLI ORBITALI

7s			
6s	6p	6d	
5s	5p	5d	5f
4s	4p	4d	4f
3s	3p	3d	
2s	2p		
1s			

1s   2s 2p   3s 3p   4s 3d 4p   5s 4d 5p

6s 4f 5d 6p   7s 5f 6d

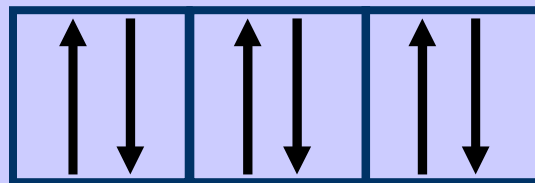
# CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DEGLI ELEMENTI

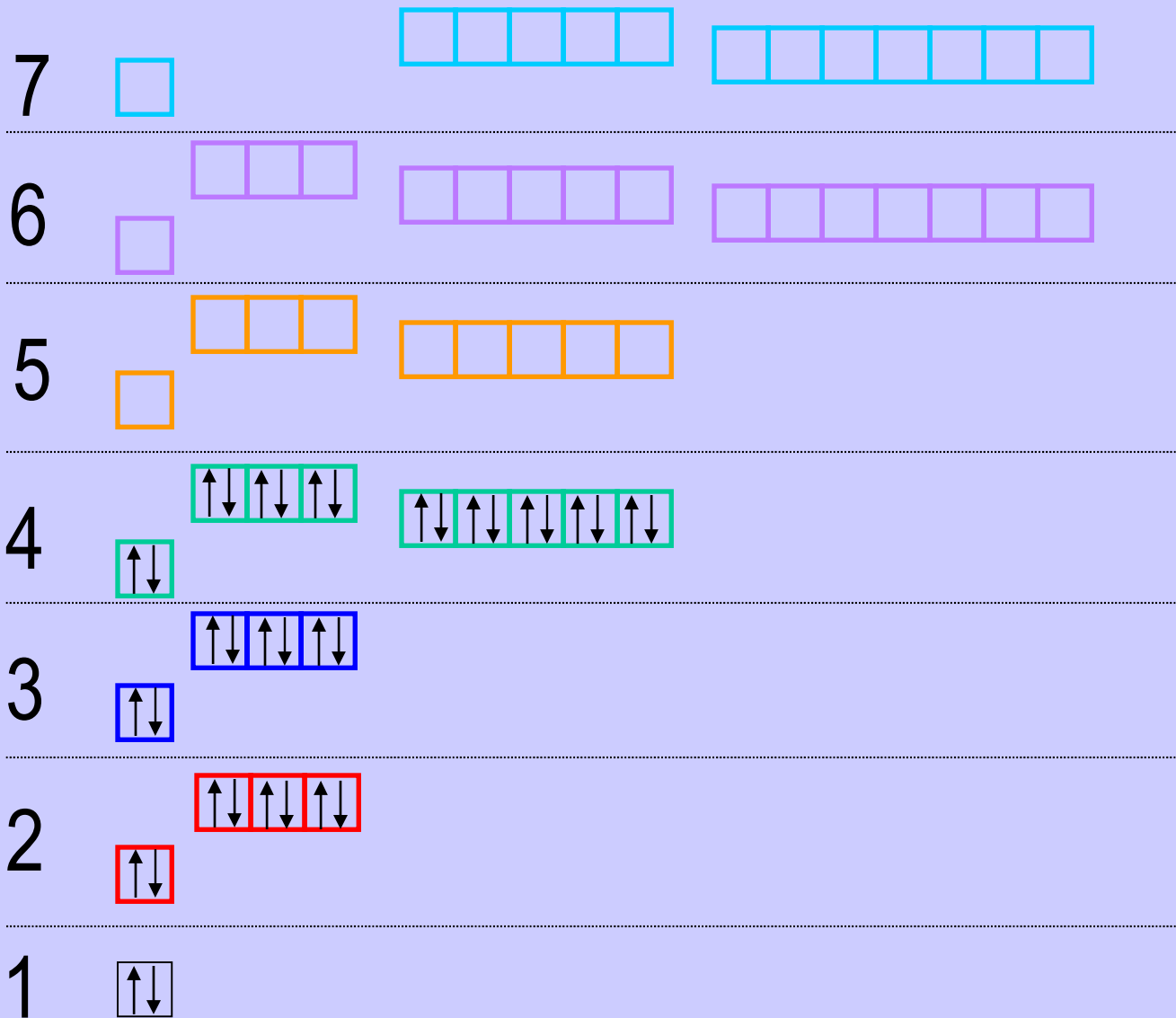
È sufficiente introdurre uno per volta gli elettroni tenendo conto delle seguenti regole fondamentali:

1. Gli elettroni occupano spontaneamente gli orbitali liberi a minor energia (più vicini al nucleo)
2. Ogni orbitale può ospitare al massimo 2 elettroni con spin antiparallelo ( $\uparrow\downarrow$ ) (**principio di esclusione di Pauli**)

3. Nel completamento di orbitali isoenergetici, gli elettroni si dispongono occupando, con spin paralleli tra loro, prima gli orbitali vuoti ed esauriti questi ultimi, quelli semipieni (**regola di Hund**):

**3 orbitali p (sono fra loro isoenergetici)**





1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d

