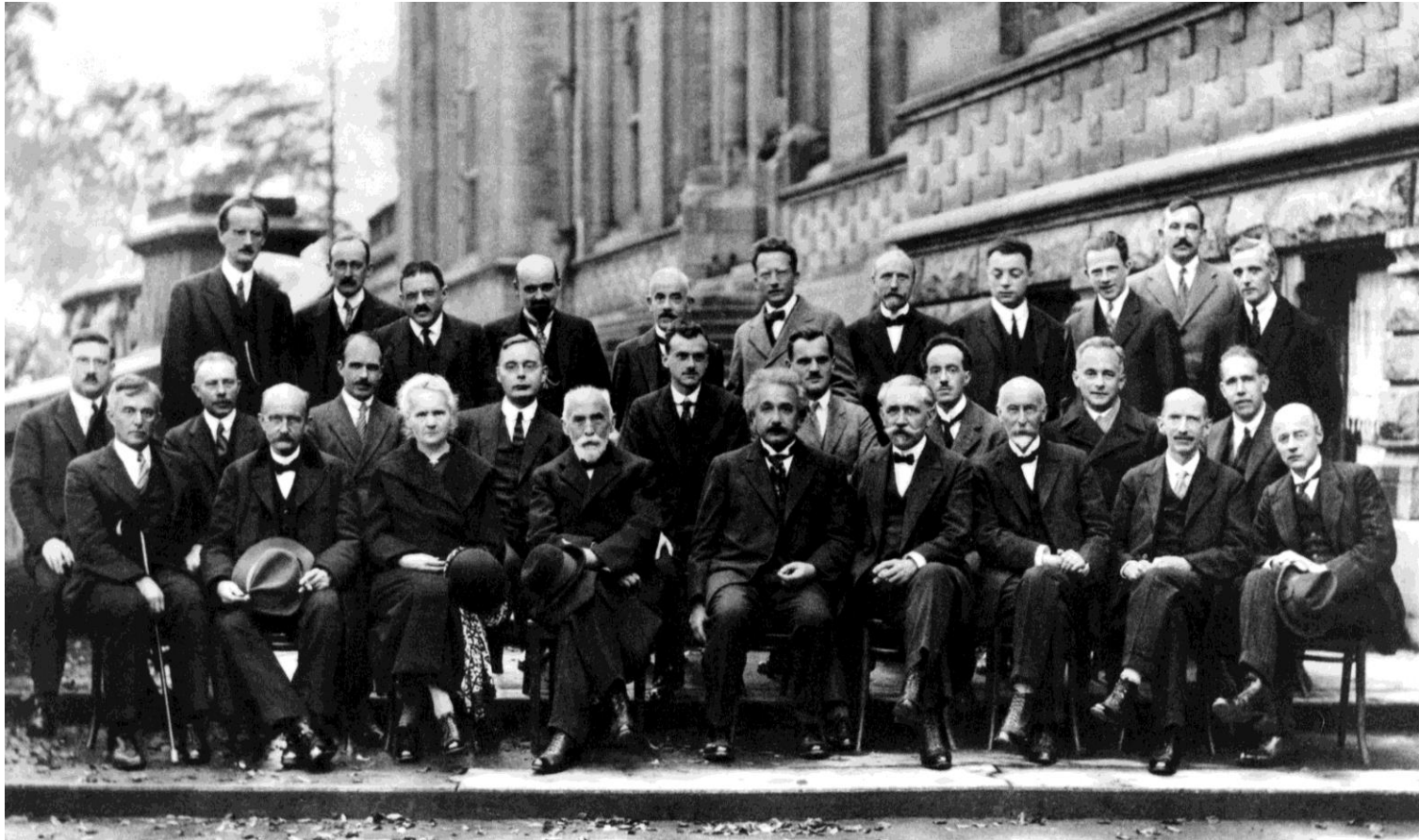


Lezione 18. Il Modello Atomico

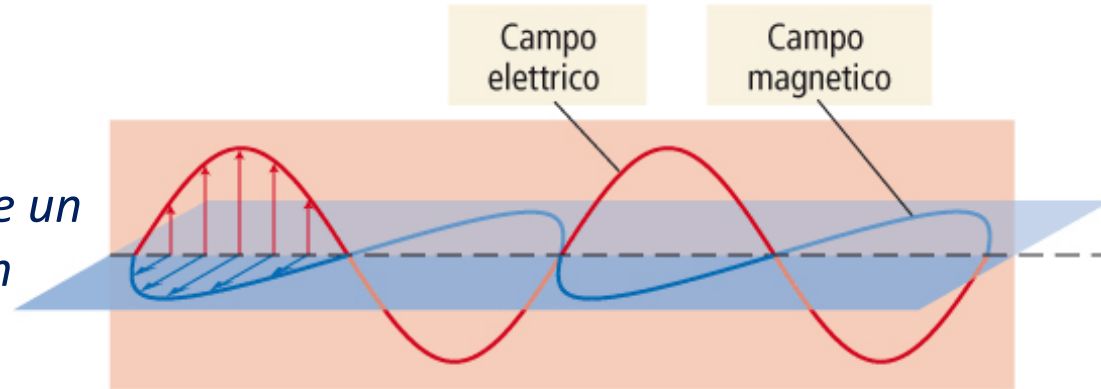


- *La radiazione elettromagnetica*
- *Modello atomici: da Rutherford a Bohr*
- *Dualismo onda-particella*
- *L'equazione di Schrödinger*
- *Forma degli Orbitali Atomici*

Natura Ondulatoria della Luce

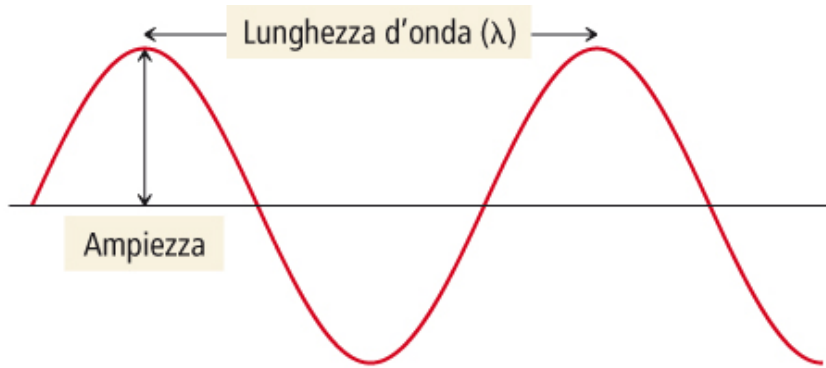
*La luce è una **radiazione elettromagnetica***

*Una radiazione elettromagnetica può essere descritta da un'onda composta da un **campo elettrico** e un **campo magnetico** che oscillano in piani **perpendicolari** tra loro*



Velocità della luce nel vuoto: $3.00 \cdot 10^8$ m/s
(10^6 volte più veloce della velocità del suono)

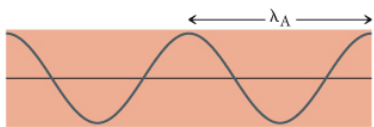
Natura Ondulatoria della Luce



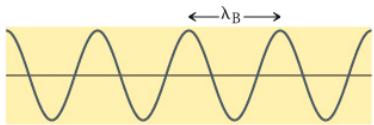
Un'onda è descritta dall'**ampiezza** (altezza verticale di una cresta), dalla **lunghezza d'onda** (λ , distanza tra due creste successive) e dalla **frequenza** (ν , numero di creste nell'unità di tempo)

Frequenza e lunghezza d'onda sono **inversamente proporzionali**:

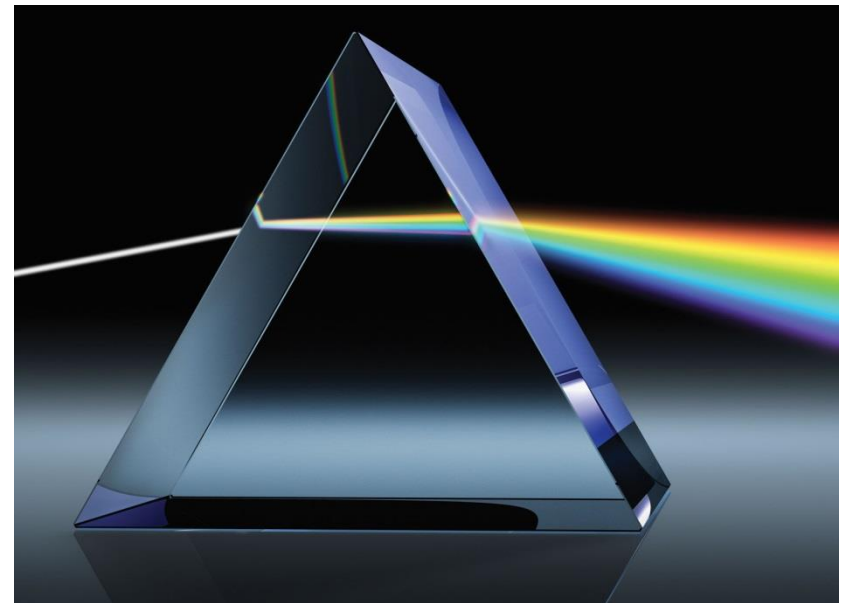
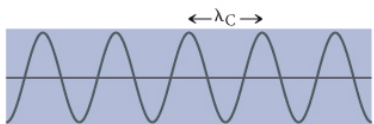
$$\nu = \frac{\lambda}{c}$$



A lunghezze d'onda diverse corrispondono **colori diversi**

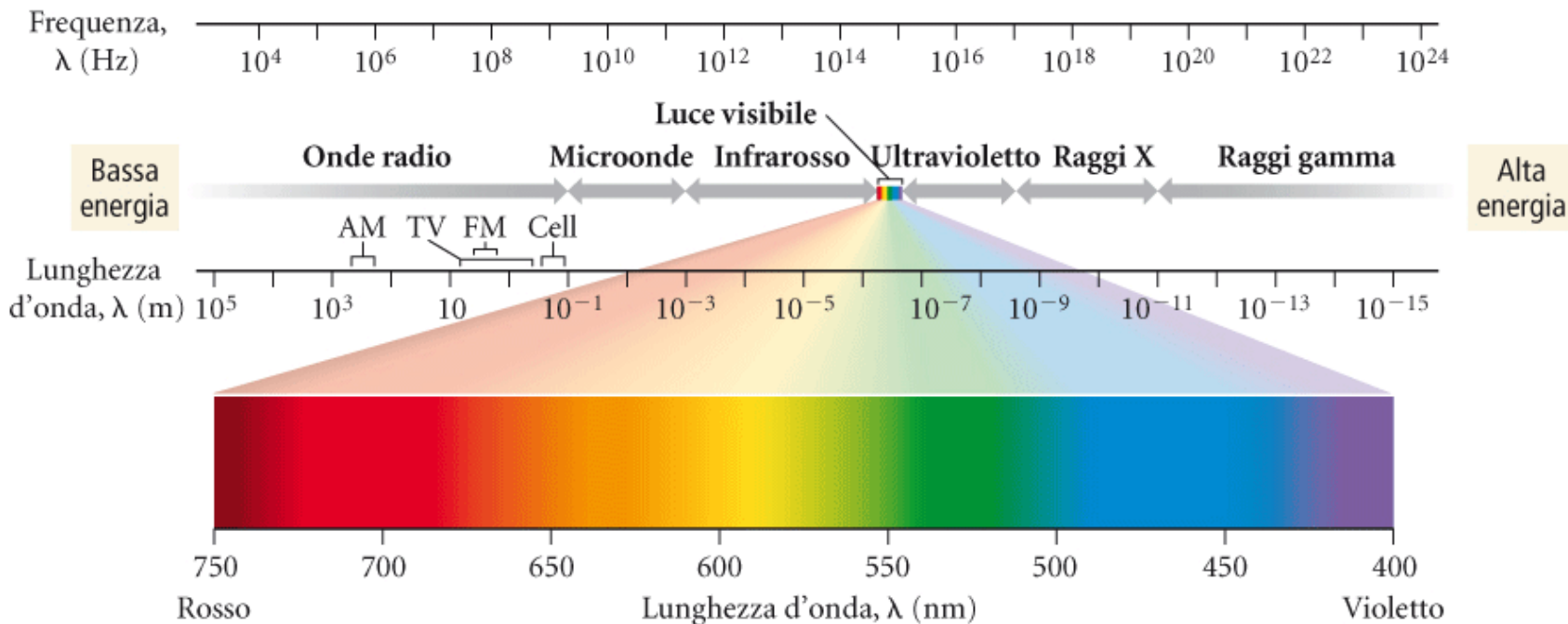


La luce visibile contiene **uno spettro di lunghezze d'onda, e quindi uno spettro di colori**



Lo Spettro Elettromagnetico

contiene tutte le lunghezze d'onda delle radiazioni elettromagnetiche



Raggi gamma: prodotti dal Sole e da nuclei instabili – possono danneggiare i tessuti

Raggi X: passano attraverso molte sostanze – pericolose per l'uomo

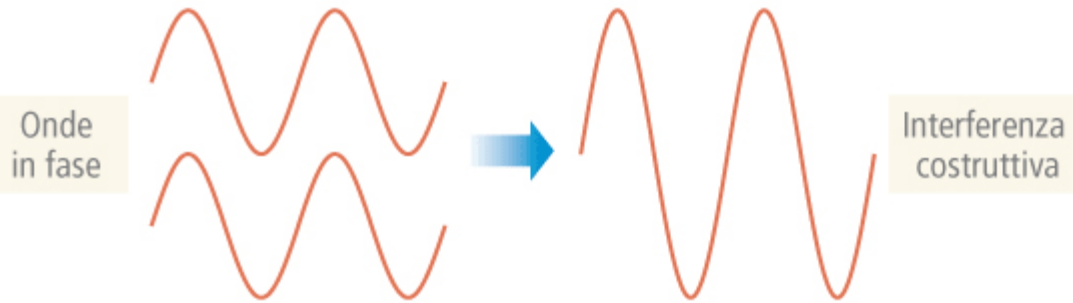
Radiazioni UV: sufficientemente energetiche da danneggiare la pelle

Radiazioni infrarosse: responsabili del calore di un corpo caldo

Microonde: sono assorbite dall'acqua, che scalda le sostanze con cui è in contatto

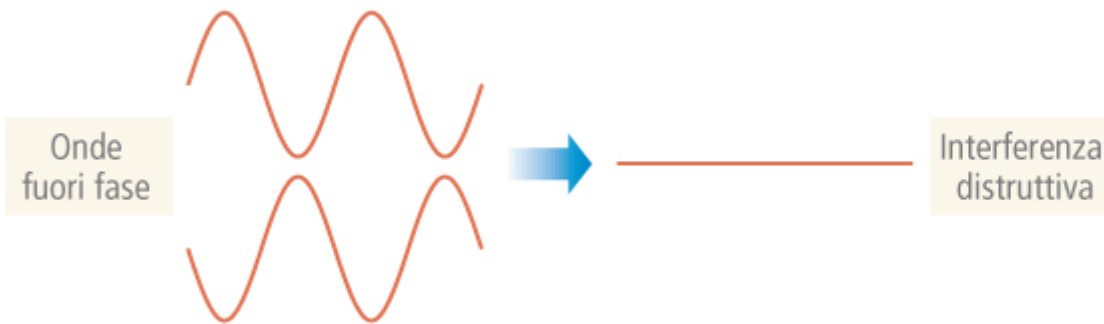
Onde radio: prodotte da radio, tv, cellulari

Interferenza e Diffrazione



*Le onde interagiscono per dare interferenza, che è **costruttiva** se le onde sono in fase (cioè se le creste si sovrappongono)*

*Se le onde sono in opposizione di fase (cioè se le creste di una si sovrappongono alle gole dell'altra) l'interferenza sarà **distruttiva***



Interferenza e Diffrazione

Diffrazione: quando un'onda incontra un ostacolo o una fessura di dimensioni comparabili alla λ dell'onda, il fronte d'onda *s'incurva* attorno ad essa

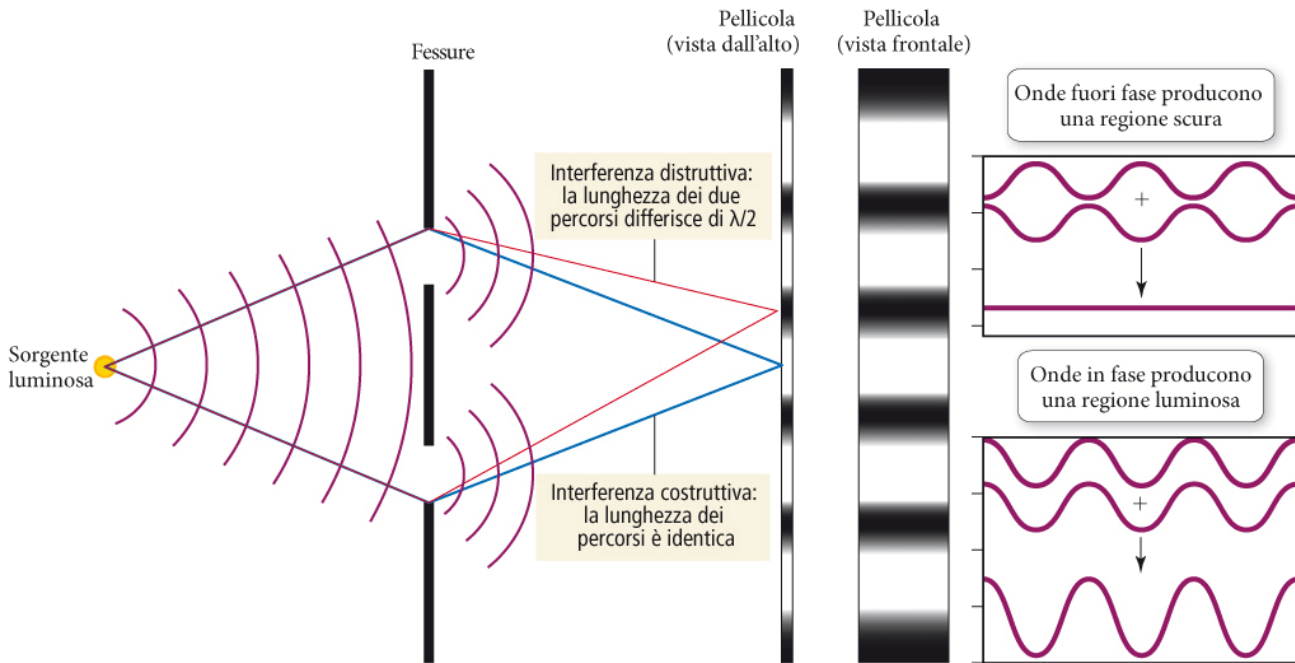
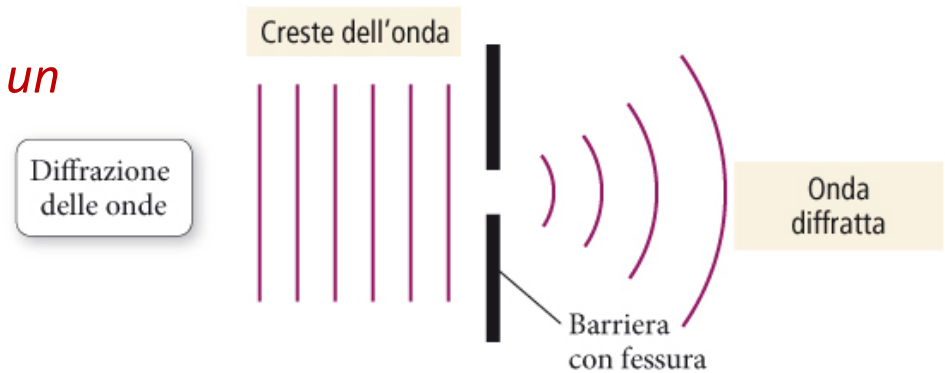
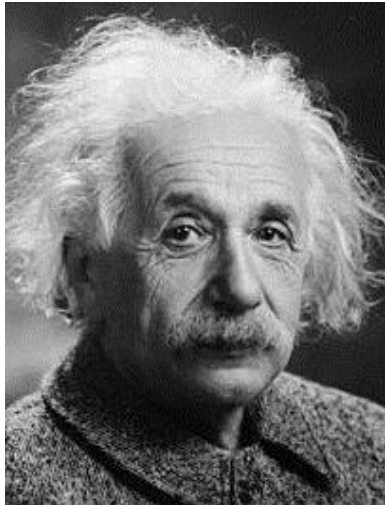


Figura di diffrazione

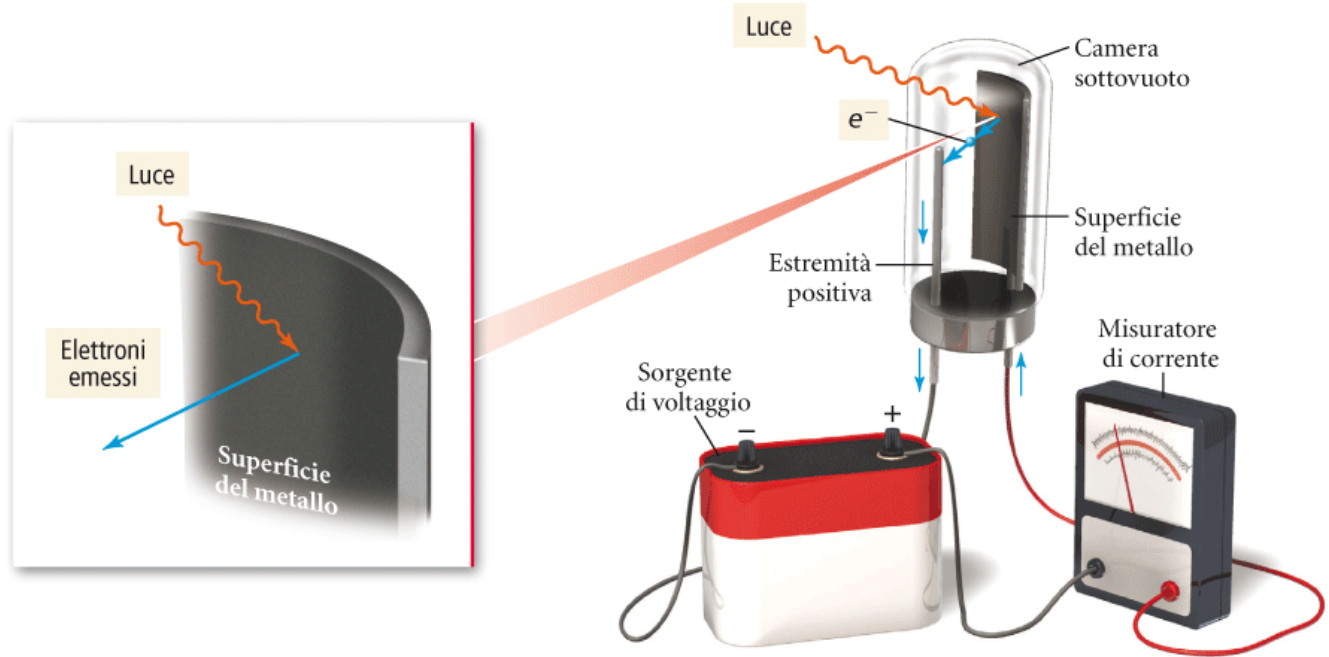
Profilo di Interferenza: quando un fascio di luce attraversa due fessure, le due onde risultanti interferiscono tra loro, dando interferenza costruttiva e distruttiva a seconda della distanza percorsa dalle due onde

Natura Particellare della Luce

*Fino all'inizio del ventunesimo secolo si pensava che la luce avesse una natura esclusivamente **ondulatoria***



A. Einstein
(1879-1955)



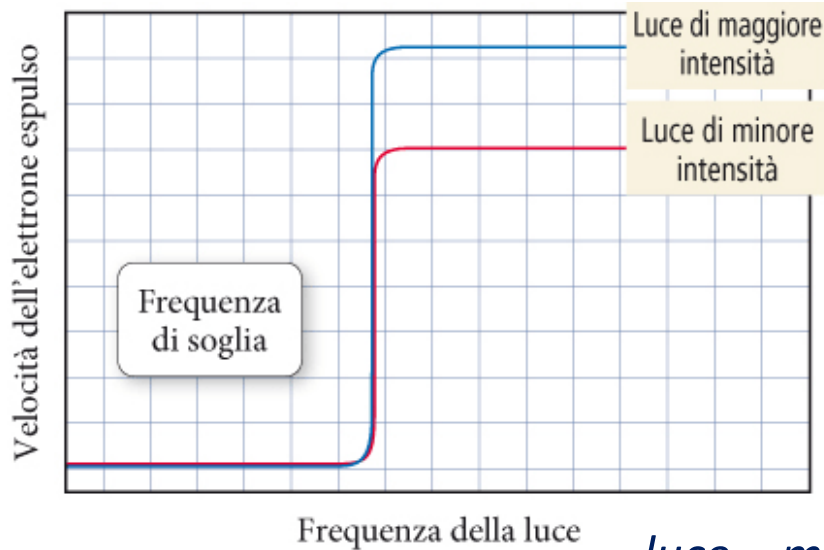
Effetto fotoelettrico: molti metalli emettono elettroni quando colpiti dalla luce

Trasferimento di energia dalla luce alla materia

In base alla natura ondulatoria della luce, la velocità degli elettroni in uscita dovrebbe aumentare all'aumentare dell'intensità della radiazione

Natura Particellare della Luce

Invece l'elettrone veniva emesso **solo al di sopra** di una certa frequenza (**frequenza di soglia**), indipendentemente dall'ampiezza della radiazione



M. Planck
(1858-1947)

Einstein ipotizzò che, nell'interazione luce – materia, il singolo elettrone potesse **assorbire l'energia di un solo fotone o quanto di luce**

La radiazione elettromagnetica si comporta, **almeno in alcune circostanze**, come se la sua energia fosse **concentrata in quantità finite e localizzate (fotoni)**, di energia

$$E = h\nu$$

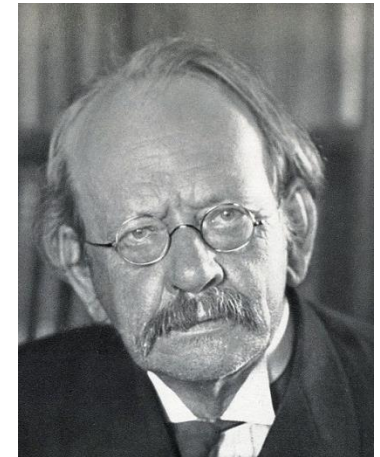
$$h = \text{costante di Planck} = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Modelli Atomici

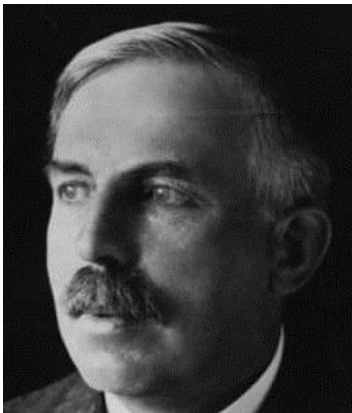


Modello di Thomson:
l'atomo come una sfera omogenea carica positivamente in cui gli elettroni erano distribuiti in maniera uniforme e senza una disposizione spaziale particolare

Modello «plum pudding»



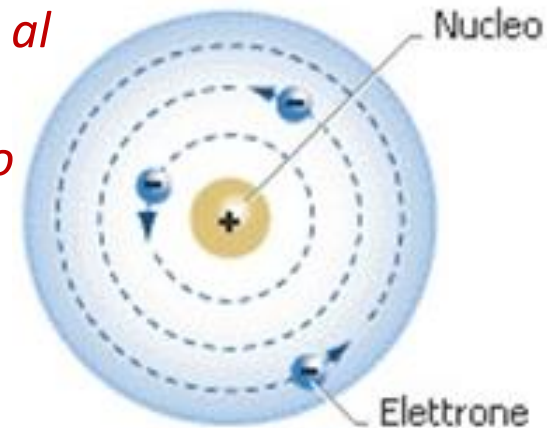
J. J. Thomson
(1856–1940)



E. Rutherford
(1871–1937)

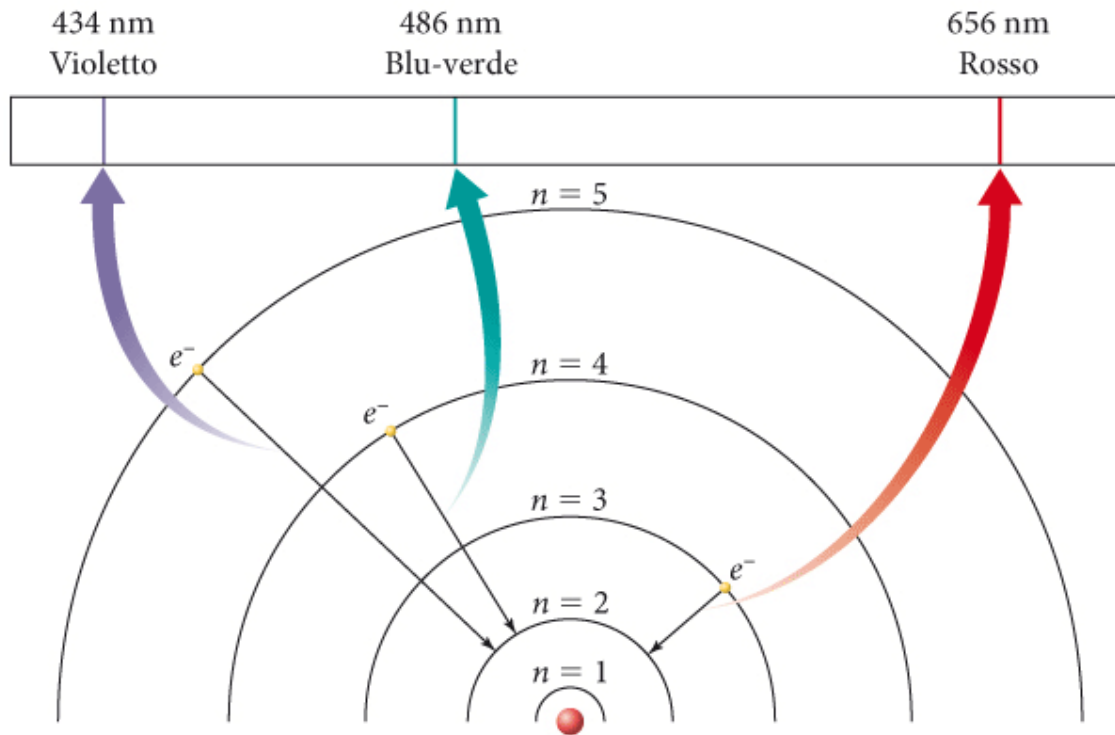
Modello di Rutherford:
come i pianeti del sistema solare attorno al sole, così fu ipotizzato che gli elettroni ruotassero attorno ad un piccolo nucleo atomico in cui era concentrata la maggioranza della materia

Modello atomico «planetario»



Modello Atomico di Bohr

*Gli elettroni si muovono attorno al nucleo seguendo **orbite circolari**. Diversamente dai pianeti, le orbite del modello di Bohr possono esistere solo a **ben determinate distanze** dal nucleo*



N. H. D. Bohr
(1885-1962)

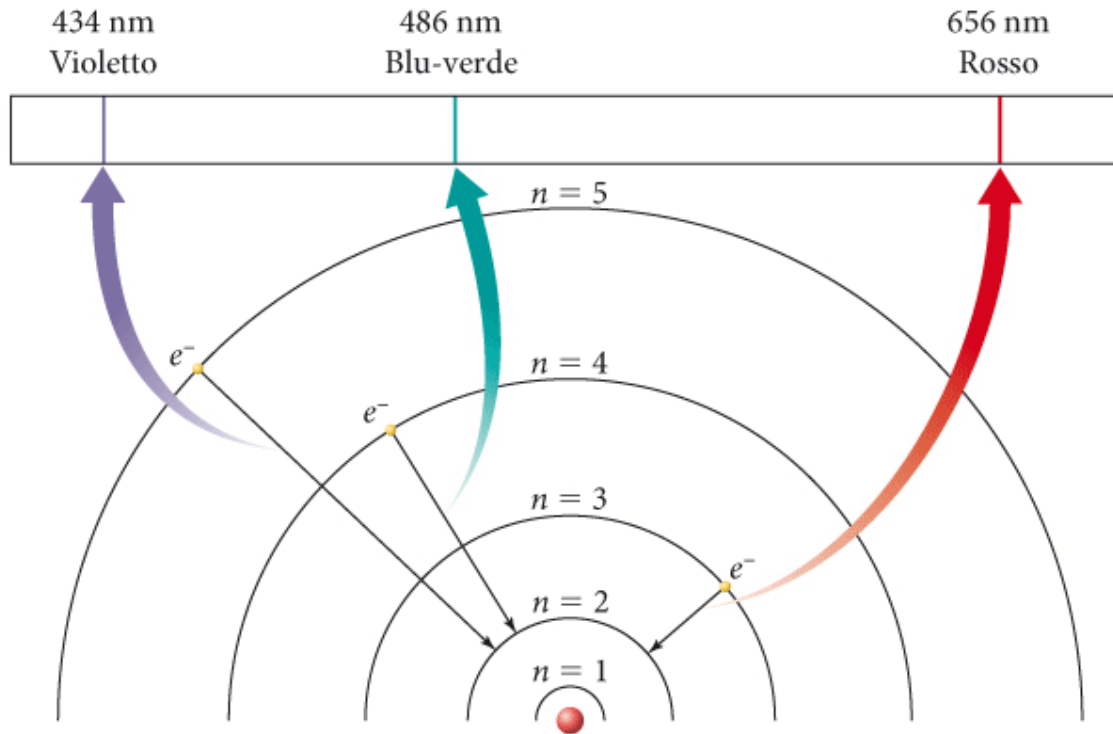
*L'energia di queste orbite è fissa, cioè **quantizzata***

Modello di Bohr e Spettri di Emissione

Quando un elettrone decade da un'orbita stabile, o stato stazionario, ad un'altra ad energia più bassa, emette una radiazione di una specifica lunghezza d'onda, a cui è associato uno specifico colore



Neon



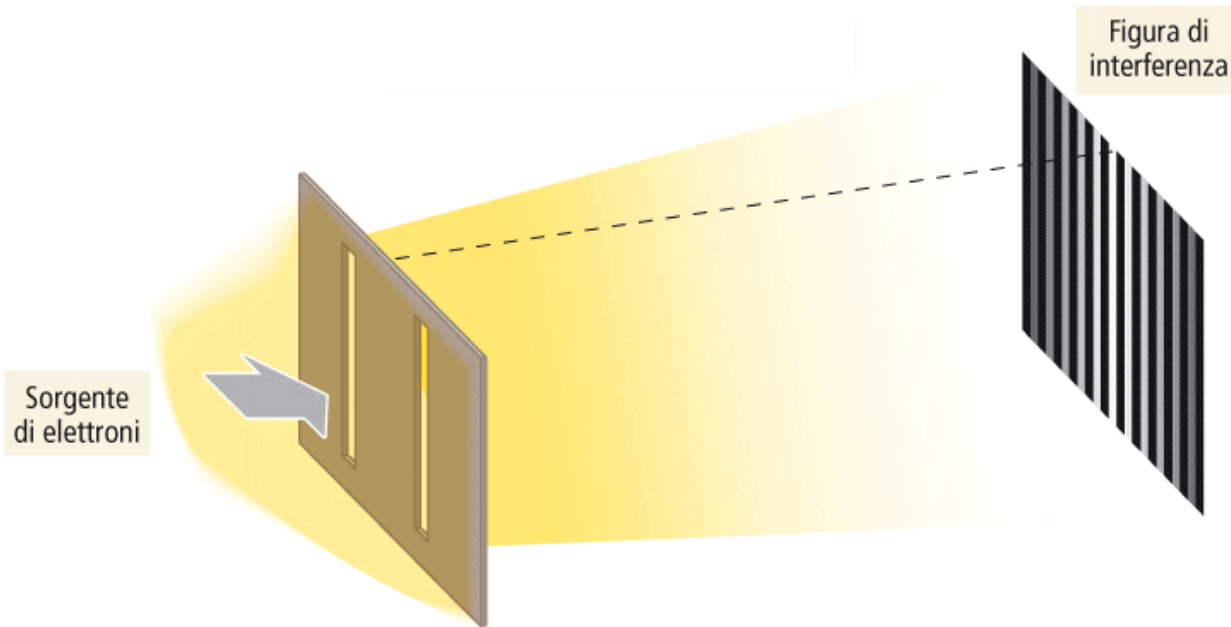
Sodio

Potassio

Litio

Natura Ondulatoria della Materia

Il cuore della teoria quantomeccanica è la dimostrazione della natura ondulatoria della materia



G. P. Thomson
(1892–1975)

Quando un singolo elettrone passa attraverso due fessure ravvicinate si genera una figura d'interferenza

Dualismo Onda-Particella

- *La luce ha proprietà di una onda e di una particella*
- *de Broglie propose che tutta la materia possiede proprietà ondulatorie*
- *Ad una particella di massa m che si muove ad una velocità v è associata una lunghezza d'onda:*

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Relazione di De Broglie

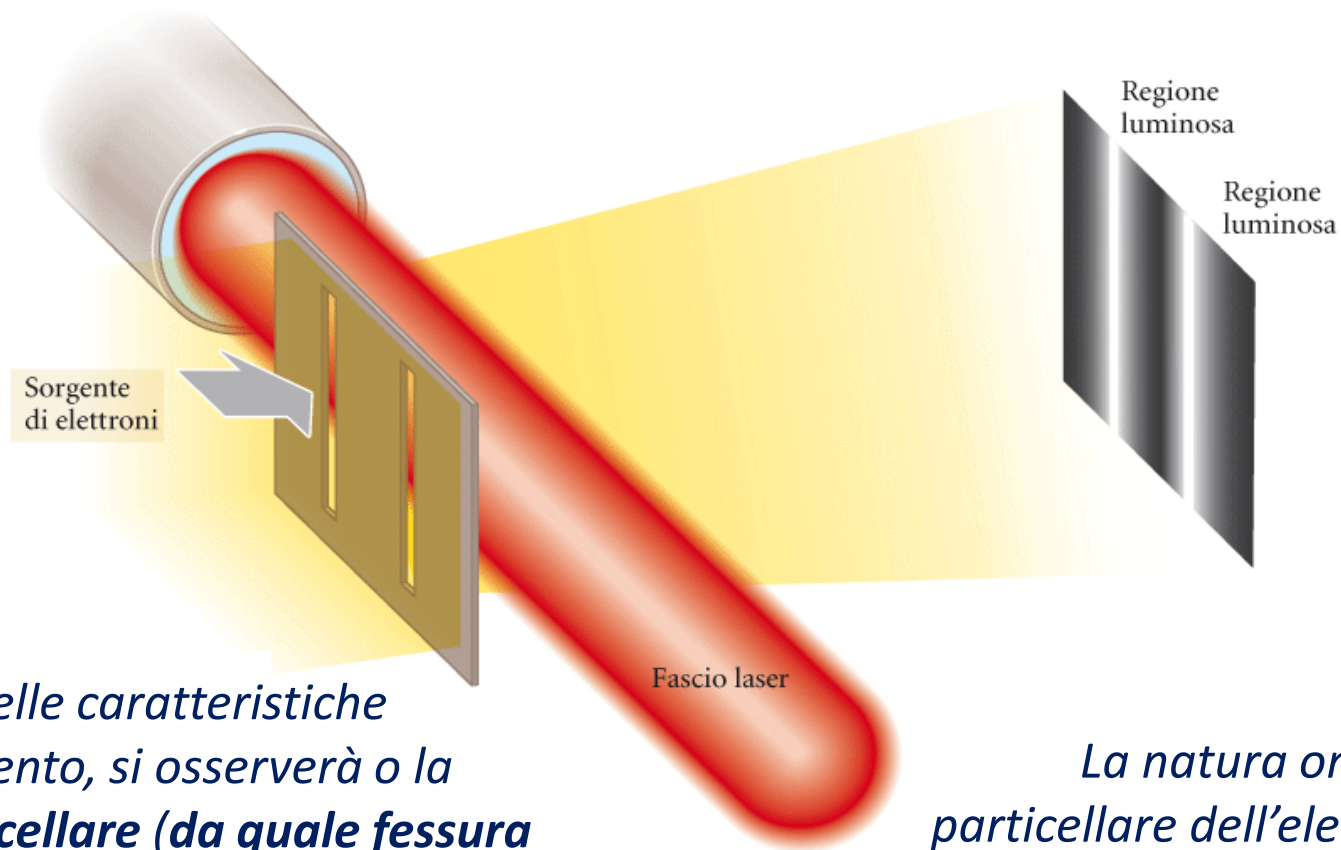
(ottenuta da $E = mc^2$ (Einstein), $E = hv$ (Planck) e $v = c/\lambda$)



*L.-V. P. R. de Broglie
(1892–1987)*

Il Principio di Indeterminazione

Non è possibile vedere il profilo d'interferenza e allo stesso tempo determinare da quale fessura passa l'elettrone



*A seconda delle caratteristiche dell'esperimento, si osserverà o la natura **particellare** (da quale fessura passa l'elettrone) o quella **ondulatoria** (si osserva il profilo d'interferenza)*

*La natura ondulatoria e particellare dell'elettrone sono **proprietà complementari***

Il Principio di Indeterminazione

*La **velocità** di un elettrone è correlata con la sua natura di **onda**,
mentre la **posizione** con la sua natura di **particella***

*L'incapacità di osservare un elettrone come particella e come
onda implica che **non è possibile misurare simultaneamente la
sua posizione e la sua velocità***

***Principio di Indeterminazione
di Heisenberg:***

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

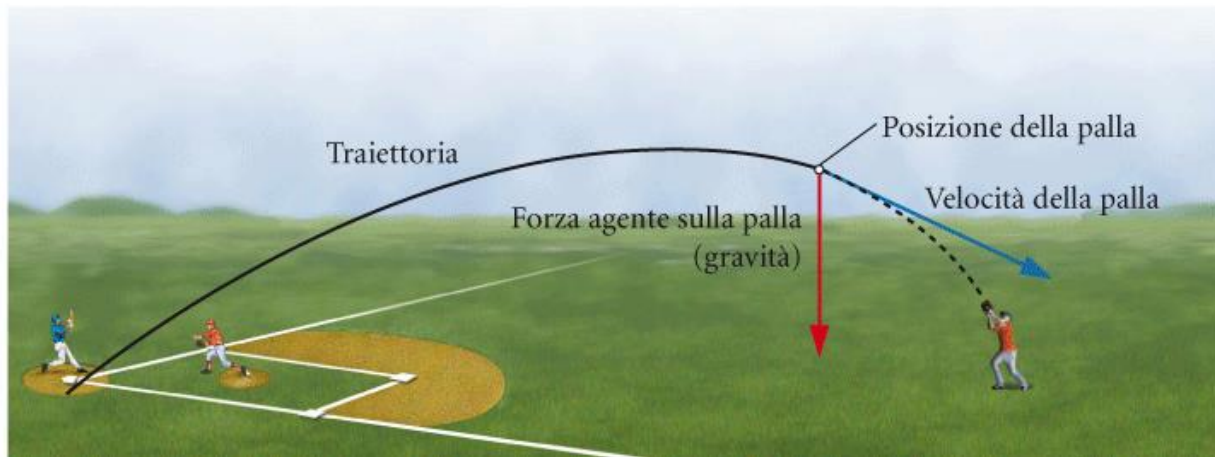
***Tanto più accuratamente si conosce la posizione di un
elettrone (Δx piccolo), tanto meno accuratamente si
conosce la sua velocità (Δv grande), e viceversa***



***W. K. Heisenberg**
(1901-1976)*

Mappe di Distribuzione della Probabilità

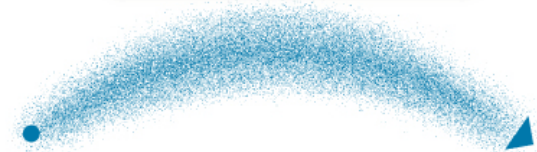
In contraddizione al **determinismo** Newtoniano (il presente **determina** il futuro), nella meccanica quantistica è necessario pensare in termini di **mappe di probabilità**, rappresentazioni statistiche che mostrano dove una particella microscopica (come un elettrone) ha **maggiore probabilità** di trovarsi



Diversamente dalla palla da baseball, il cui percorso futuro è **determinato** dalla sua posizione e velocità, la traiettoria dell'elettrone può essere descritta **solo in termini statistici**

Traiettoria classica

Mappa di distribuzione della probabilità in quantomeccanica



La Meccanica Quantistica e L'Atomo

*La **velocità** di una particella è associata alla sua **energia** (Es.: $E_c = \frac{1}{2} mv^2$)*

*Possiamo conoscere **l'energia** di uno stato elettronico, ma **non la posizione** associata all'elettrone in un determinato istante*

*La **posizione** dell'elettrone è descritta in termini di **orbitali**, mappe di distribuzione che indicano le **probabilità** di trovare un elettrone in una determinata regione dello spazio*

La Meccanica Quantistica e L'Atomo

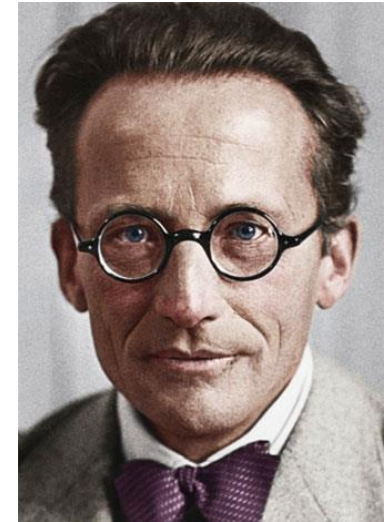
La derivazione matematica delle energie e degli orbitali per gli elettroni negli atomi si ottiene dalla risoluzione dell'equazione di Schrödinger

$$Hy = Ey$$

Equazione di Schrödinger

H **operatore hamiltoniano:** insieme di operazioni matematiche che rappresentano l'Energia cinetica e potenziale di un elettrone all'interno di un atomo

y **Funzione d'onda:** funzione matematica che descrive la natura ondulatoria dell'elettrone



E. Schrödinger
(1887-1961)

L'equazione tiene conto della natura corpuscolare e ondulatoria dell'elettrone

La Funzione d'Onda ψ

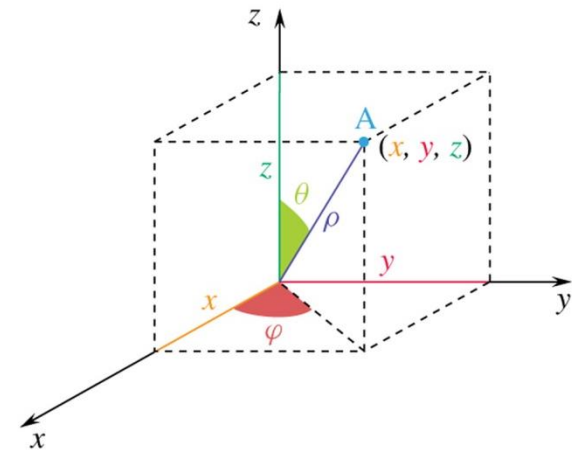
Schrodinger utilizzò il concetto di considerare un elettrone come un onda per risolvere il problema della distribuzione degli elettroni in un atomo

Ciascuna soluzione della equazione d'onda descrive uno stato energetico

$$\Psi_{n,l,m}(x, y, z)$$

*Ogni soluzione è definita da un insieme di **numeri quantici***

*ρ : descrive distanza di un punto dal nucleo
 θ e ϕ : come varia in funzione degli angoli che descrivono orientazione rispetto agli assi x, y, z*



$$\Psi_{n,l,m}(x, y, z) = \Psi_{n,l,m}(\rho, \theta, \phi) = \Psi_{n,l}(\rho)\Psi_{l,m}(\theta)\Psi_{l,m}(\phi)$$

Equazione di Schrödinger

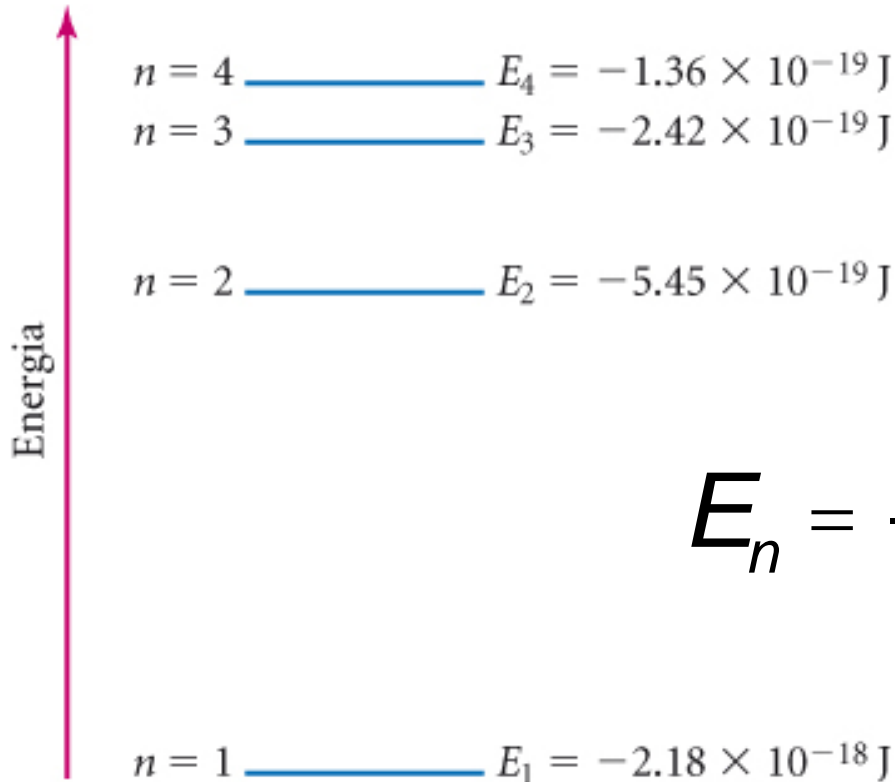
*Lo stato di un elettrone può essere descritto da soluzioni dell'equazione d'onda che derivano dalla combinazione di tre costanti dette **Numeri Quantici** indicati con le lettere n , l , m*

*Ogni funzione d'onda caratterizzata da tre numeri quantici viene chiamata **orbitale** e corrisponde ad uno stato stazionario possibile per l'elettrone*

Ciascuna specifica combinazione di numeri quantici individua un orbitale atomico

Numero Quantico Principale (n)

È un numero intero che determina la **dimensione** e l'**energia** complessiva di un orbitale



$$E_n = -2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

$$n = 1, 2, 3, 4 \dots$$

Numero Quantico del Momento Angolare (l)

*È un numero intero che determina la **forma** dell'orbitale*

Valore di l	Designazione in lettere
$l = 0$	s
$l = 1$	p
$l = 2$	d
$l = 3$	f

Può assumere valori interi che vanno da 0 a (n-1)

Numero Quantico Magnetico (m_l)

*È un numero intero che specifica l'**orientamento** dell'orbitale*

Può assumere valori interi che vanno da -l a +l

Numero Quantico di Spin (m_s)

*Specifica l'**orientazione della rotazione** dell'elettrone*

Il valore di m_s è quantizzato, può assumere solo valori +1/2 e -1/2

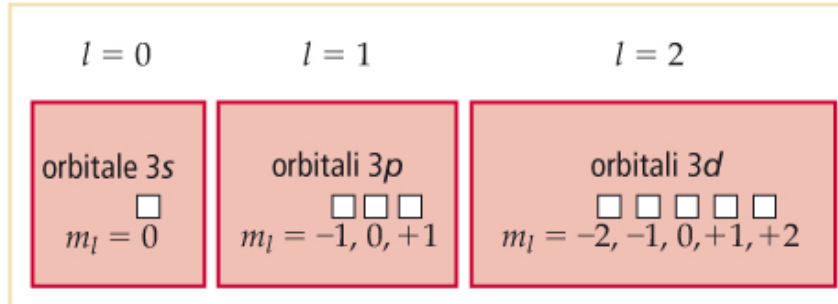
I Numeri Quantici Descrivono lo Stato di un e^-

Ciascuna combinazione dei primi tre numeri quantici individua un orbitale atomico

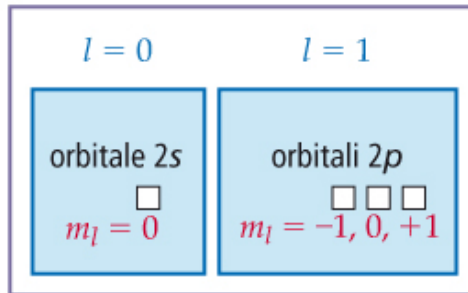
Livello principale
(specificato da n)

Sottolivello
(specificato da l)

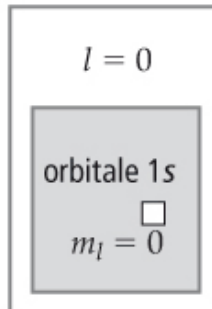
$n = 3$



$n = 2$



$n = 1$



*Orbitali con lo stesso valore di n appartengono allo stesso **livello principale***

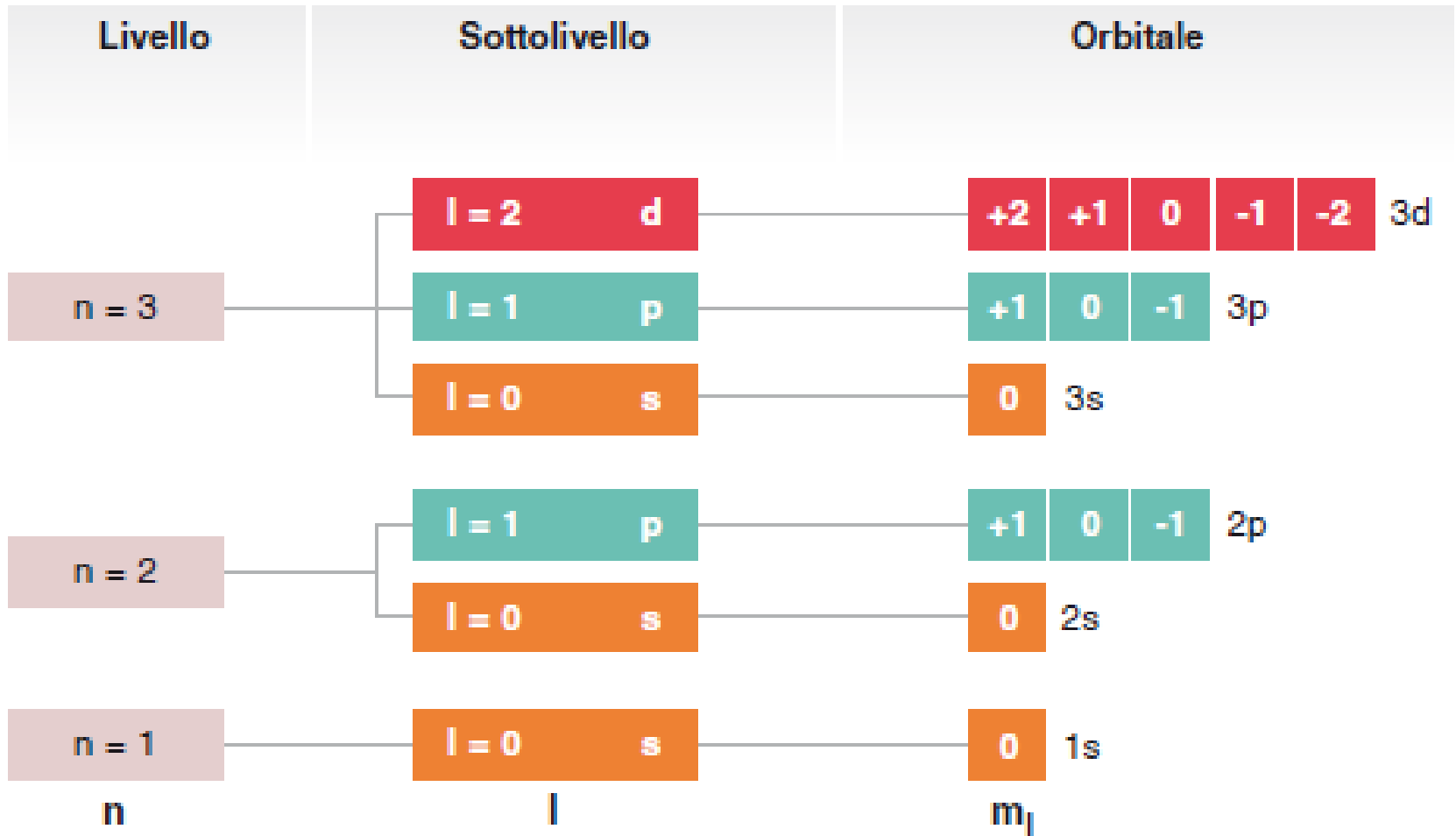
*Orbitali con lo stesso valore di n ed l appartengono allo stesso **sottolivello***

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$ n assume valori interi

$l = 0, \dots, n-1, \dots$ l assume valori da 0 a $n-1$

$m = -l, 0, +l, \dots$ m varia da $-l$ a $+l$, compreso 0

Corrispondenza tra Numeri Quantici e Orbitali



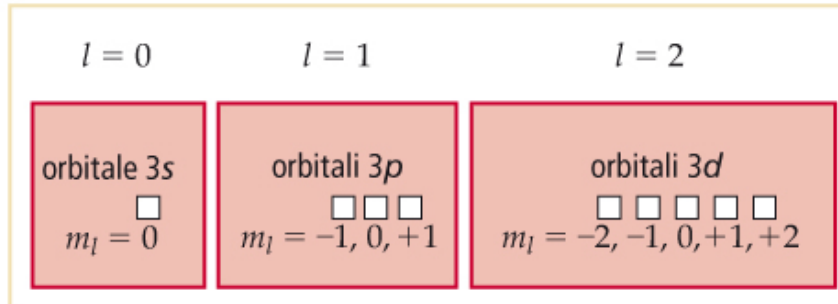
I Numeri Quantici Descrivono lo Stato di un e^-

Ciascuna combinazione dei primi tre numeri quantici individua un orbitale atomico

Livello principale
(specificato da n)

Sottolivello
(specificato da l)

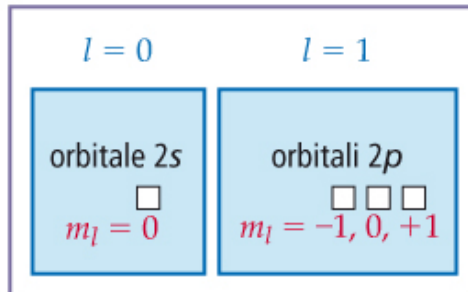
$n = 3$



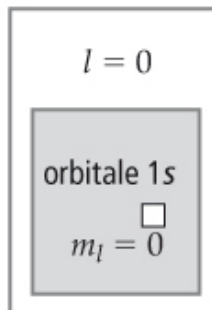
*Orbitali con lo stesso valore di n appartengono allo stesso **livello principale***

*Orbitali con lo stesso valore di n ed l appartengono allo stesso **sottolivello***

$n = 2$



$n = 1$

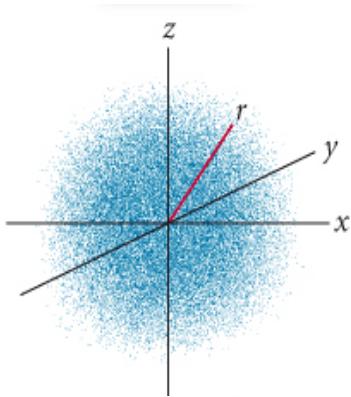


N° di sottolivelli = n
(es.: il livello $n = 1$ ha un sottolivello, il livello $n = 2$ ha due sottolivelli, ecc.)

N° di orbitali in ciascun sottolivello = $2l + 1$
(es.: il sottolivello s ha un orbitale ($l = 0$), il sottolivello p ha tre orbitali ($l = 1$), il sottolivello d ha 5 orbitali ($l = 2$))

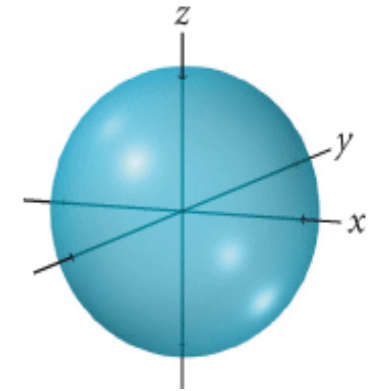
Orbitale s ($l = 0$)

Definizione di ψ^2 = densità di probabilità = probabilità/volume



Orbitale 1s

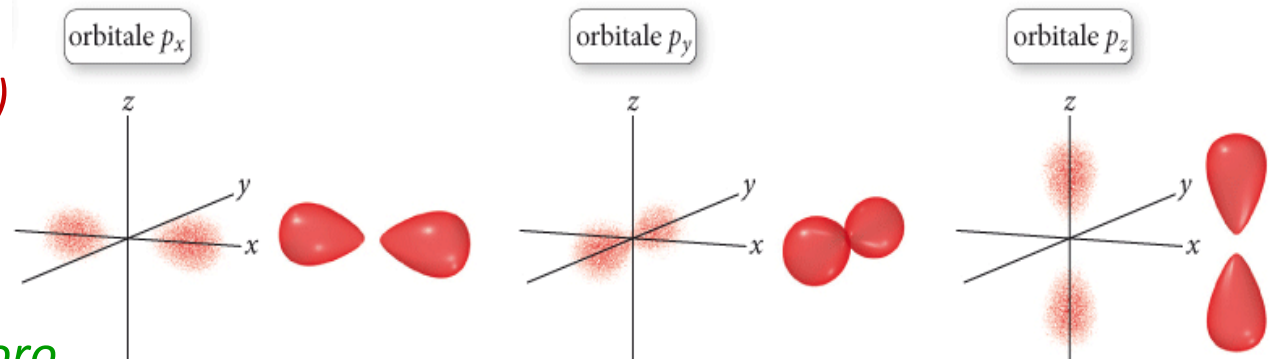
Funzione della distribuzione radiale:
probabilità di trovare di trovare
l'elettrone all'interno di un sottile
guscio sferico a distanza r dal nucleo



Superficie dell'orbitale 1s

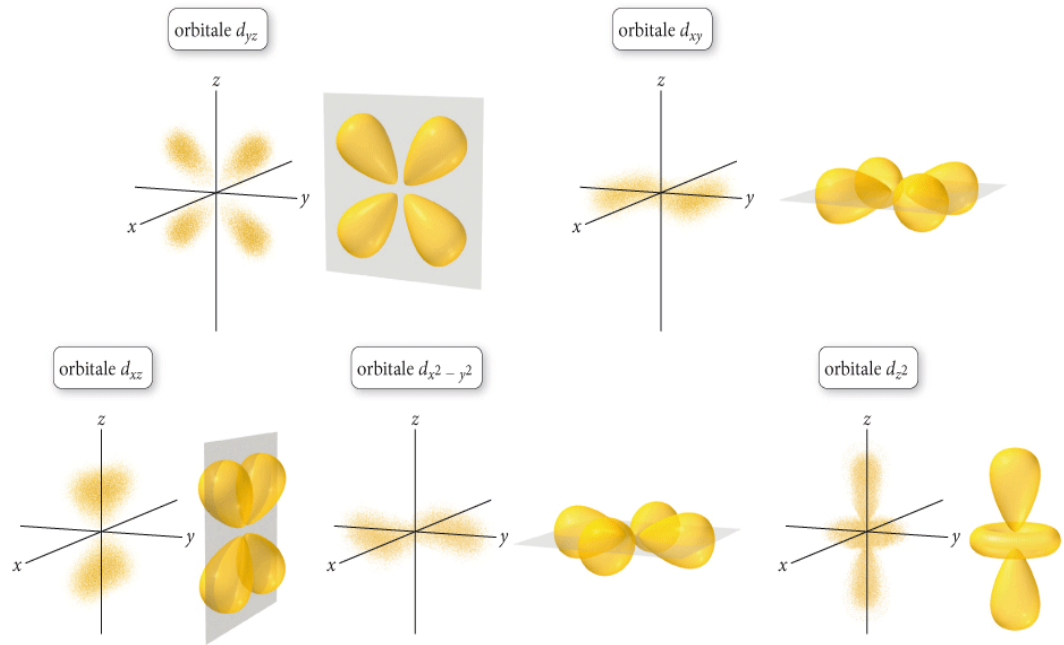
Orbitali p ($l = 1$)

- **Tre orbitali** ($m_l = -1, 0, +1$)
- Gli orbitali p non hanno simmetria sferica, ma sono **bilobati**
- Sono **perpendicolari** tra loro

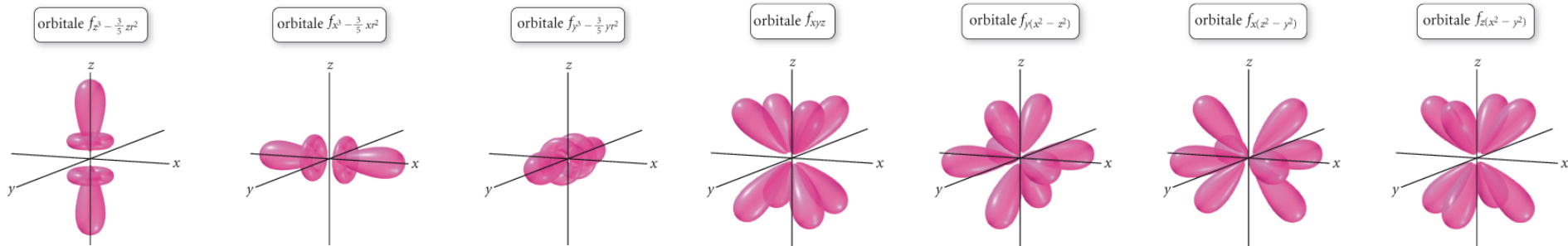


Orbitali d ($l = 2$)

- **Cinque orbitali**
($m_l = -2, -1, 0, +1, +2$)
- Gli orbitali d hanno forma di **quadrifoglio** eccetto il d_{z^2}



Orbitali f ($l = 3$)



La Forma degli Atomi

Se alcuni orbitali hanno forme a quadrifoglio o anche più complesse, perché spesso si rappresentano gli atomi come sfere?



La maggior parte di questi atomi contiene molti elettroni che occupano molti orbitali diversi. La forma di un atomo è ottenuta sovrapponendo tutti i suoi orbitali.

Dalla sovrapposizione degli orbitali s , p , d e f si ottiene una forma approssimabile ad una sfera