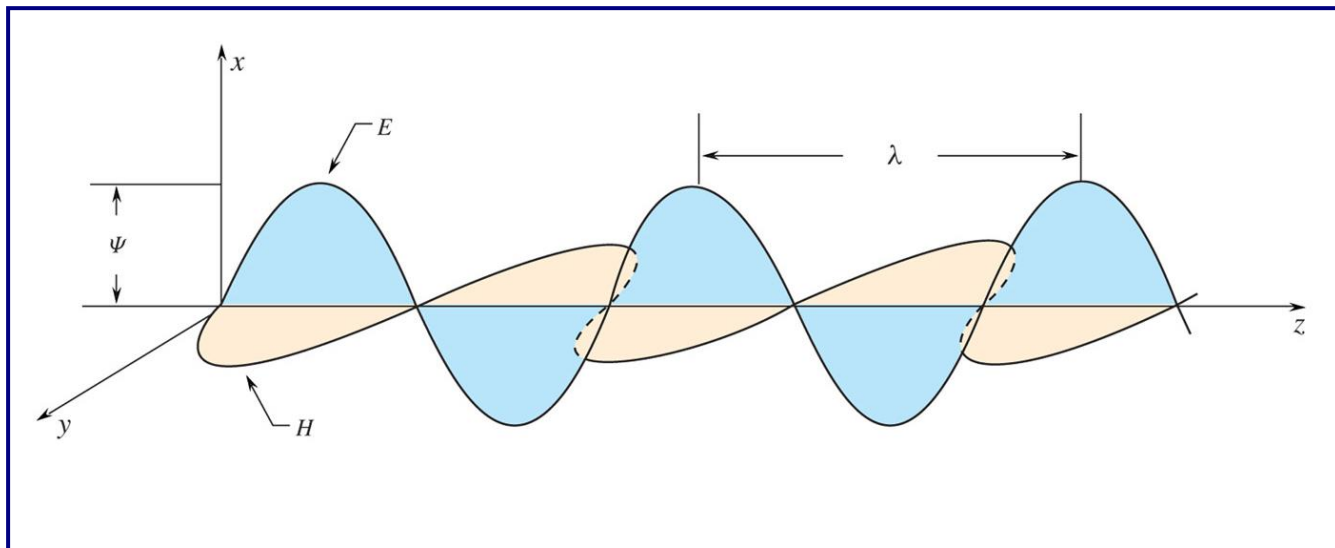


Lezione 9 - Struttura atomica

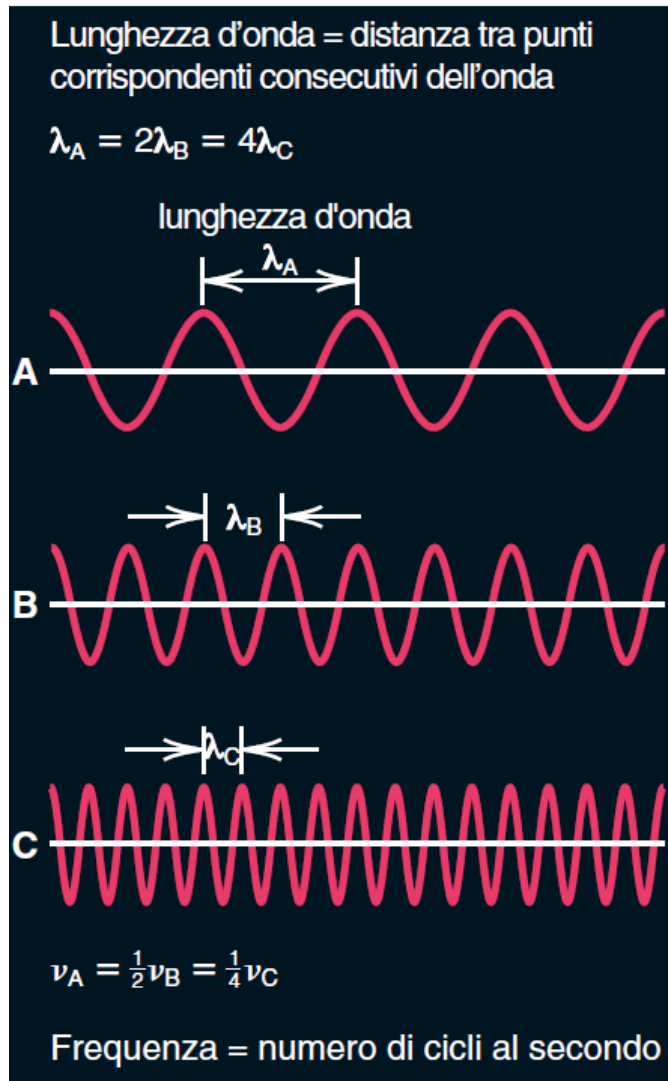
- Natura della luce
- Spettri atomici
- Il dualismo onda-particella di materia ed energia
- Il modello quanto-meccanico dell'atomo

Natura ondulatoria della luce – La radiazione elettromagnetica

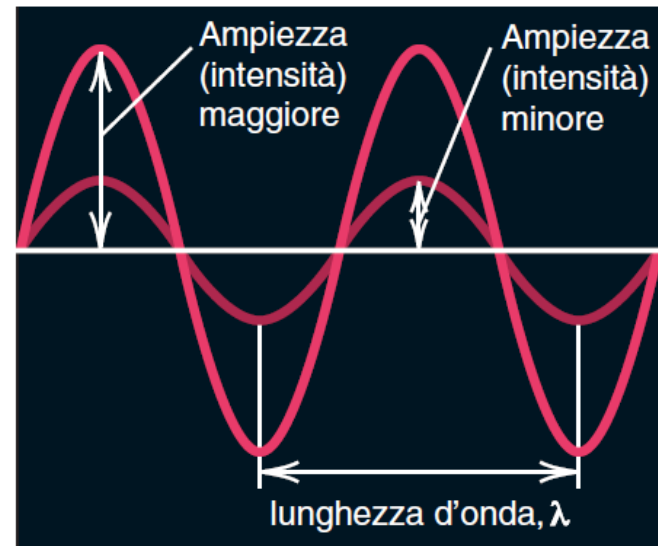
- Le radiazione elettromagnetica sono costituite da energia che si propaga attraverso lo spazio mediante campi elettrici e magnetici la cui intensità varia in modo ondulatorio
- La luce visibile è un tipo di **radiazione elettromagnetica**



Frequenza, lunghezza d'onda e ampiezza di un'onda



- Le proprietà ondulatorie delle radiazioni elettromagnetiche sono descritte da tre variabili:
 - **frequenza** (ν), cicli al secondo
 - **lunghezza d'onda** (λ), distanza percorsa dall'onda in un ciclo
 - **ampiezza**, l'altezza di un massimo o la profondità di un minimo



Velocità di propagazione di una radiazione elettromagnetica

- **frequenza (ν)**, cicli al secondo [sec⁻¹] \equiv Hertz
- **lunghezza d'onda (λ)**, distanza percorsa in un ciclo [m]
nm = 10⁻⁹ m
Å = 10⁻¹⁰ m
pm = 10⁻⁹ m

- Velocità di propagazione di un onda: $\nu \cdot \lambda$
[cicli·sec⁻¹] x [m·ciclo] = [m·sec⁻¹]

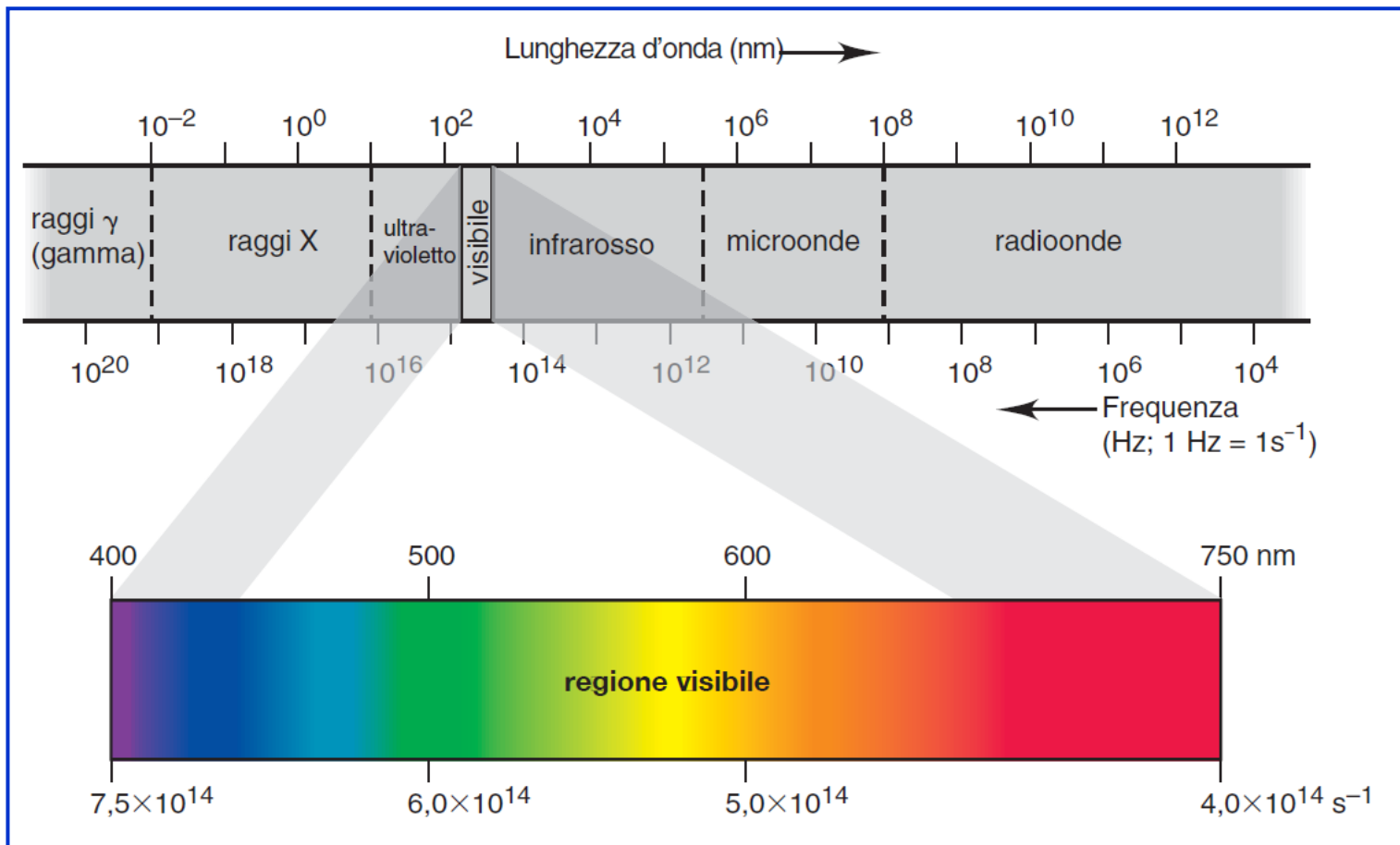
- Nel vuoto tutte le radiazioni elettromagnetiche si propagano alla stessa velocità
- La **velocità della luce** è una costante:

$$c = \nu \times \lambda = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$$

Una radiazione con ν alta ha λ piccola e viceversa

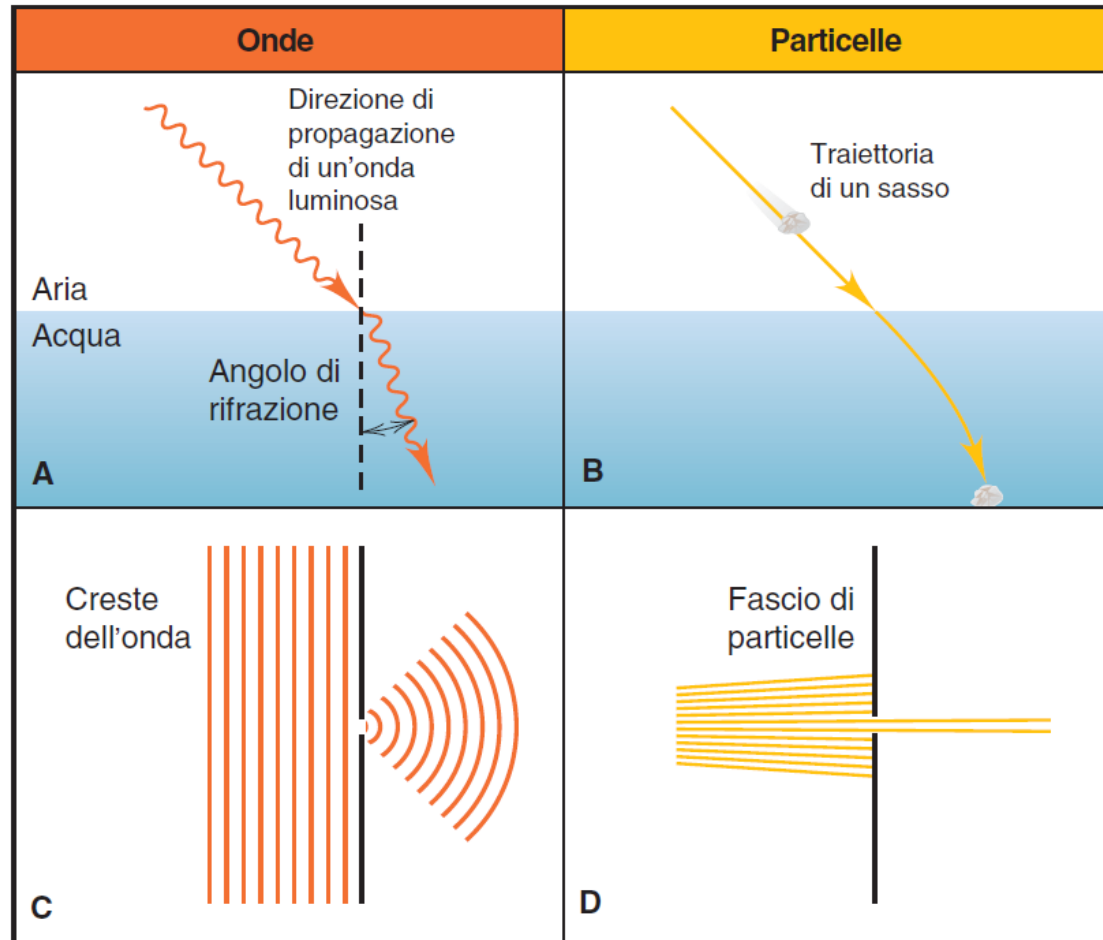
Regioni dello spettro elettromagnetico

- Le onde dello spettro elettromagnetico si propagano alla stessa velocità nel vuoto ma differiscono in ν (e quindi in λ)
- La luce visibile è una regione dello spettro elettromagnetico

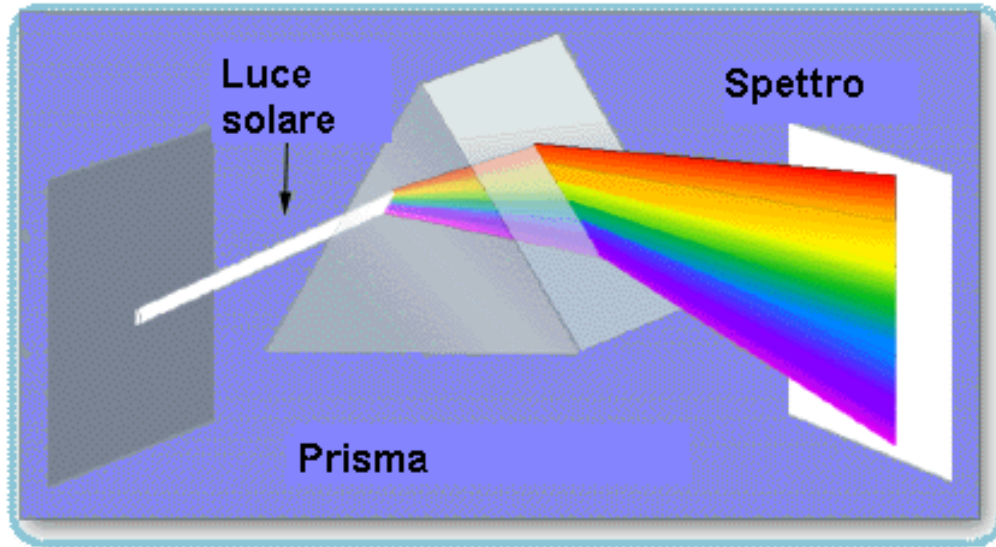


Differenti comportamenti di onde e particelle

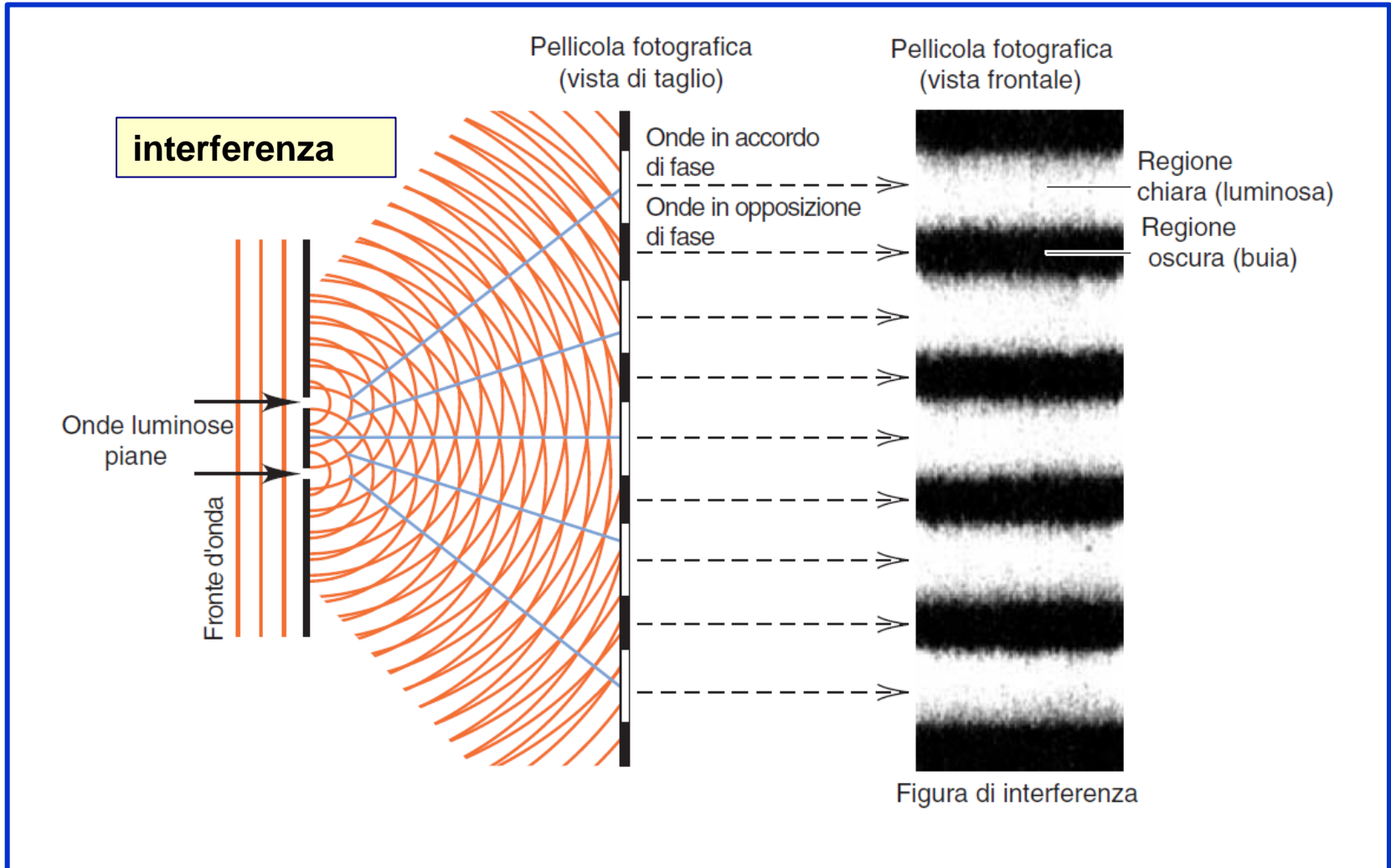
rifrazione



diffrazione



Formazione di una figura di diffrazione



Radiazione del corpo nero - Energia e frequenza

- Un corpo solido emette luce visibile quando viene riscaldato a temperature di circa 1000 K e superiori
- Questa emissione è chiamata **radiazione di corpo nero**

[Corpo nero: corpo ideale che assorbe completamente tutte le radiazioni incidenti (assorbitore perfetto)].

- Il colore e l'intensità della luce variano al variare della temperatura
- La teoria classica non spiega questa proprietà



Carbone
~ 1000 K



Piastra elettrica
~ 1500 K



Filamento di una lampadina
~ 2000 K

- Il calore è correlato alla **lunghezza d'onda** e alla **frequenza**,
la temperatura è correlata all'**energia**.



- **L'energia è correlata alla lunghezza d'onda e alla frequenza:**

$$E = nh\nu$$

E	energia
n	numero intero positivo
h	costante di Planck

$$E = h\nu = hc/\lambda$$

$h = 6.62607 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ **costante di Planck**

$c = 2.997925 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$

ν frequenza

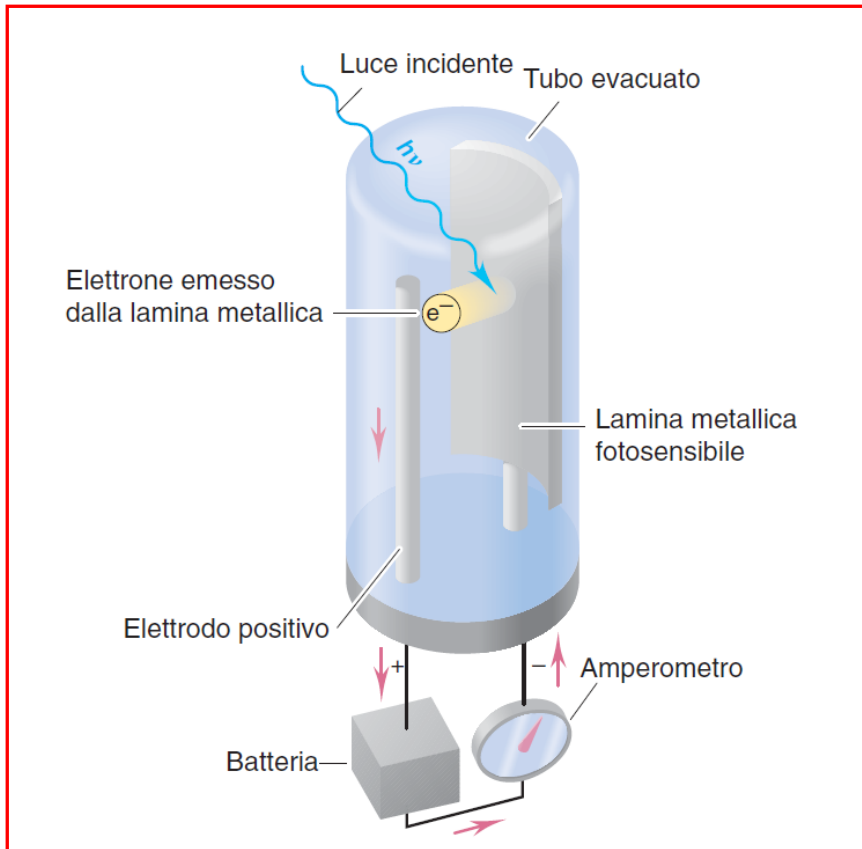
λ lunghezza d'onda

Quantizzazione dell'energia

- Ogni oggetto (inclusi gli atomi) può emettere o assorbire solo **determinate quantità** di energia.
- L'energia è **quantizzata**; esiste soltanto in quantità fisse invece di essere continua.
- Ogni quantità fissa di energia è detta **quanto**.
- Un atomo può cambiare il suo stato energetico solo mediante assorbimento o emissione di **quanti** di energia.

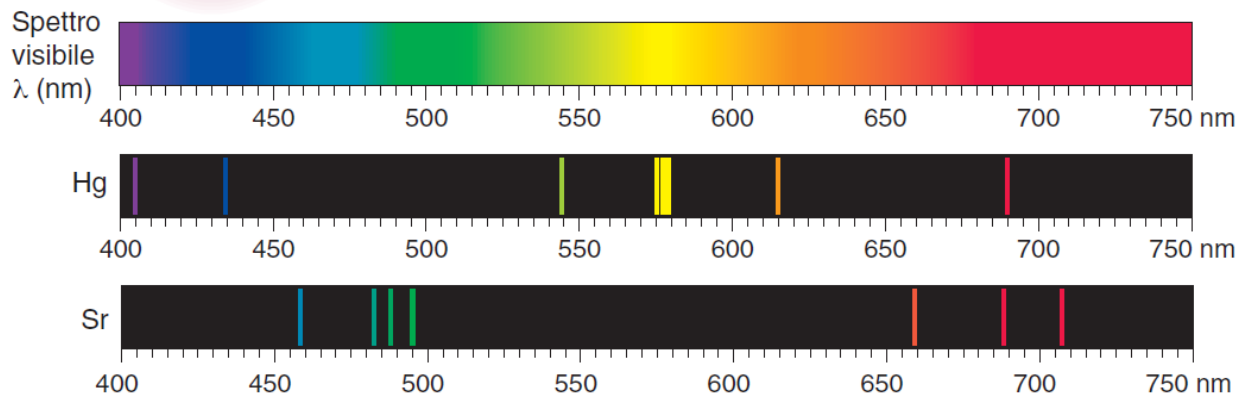
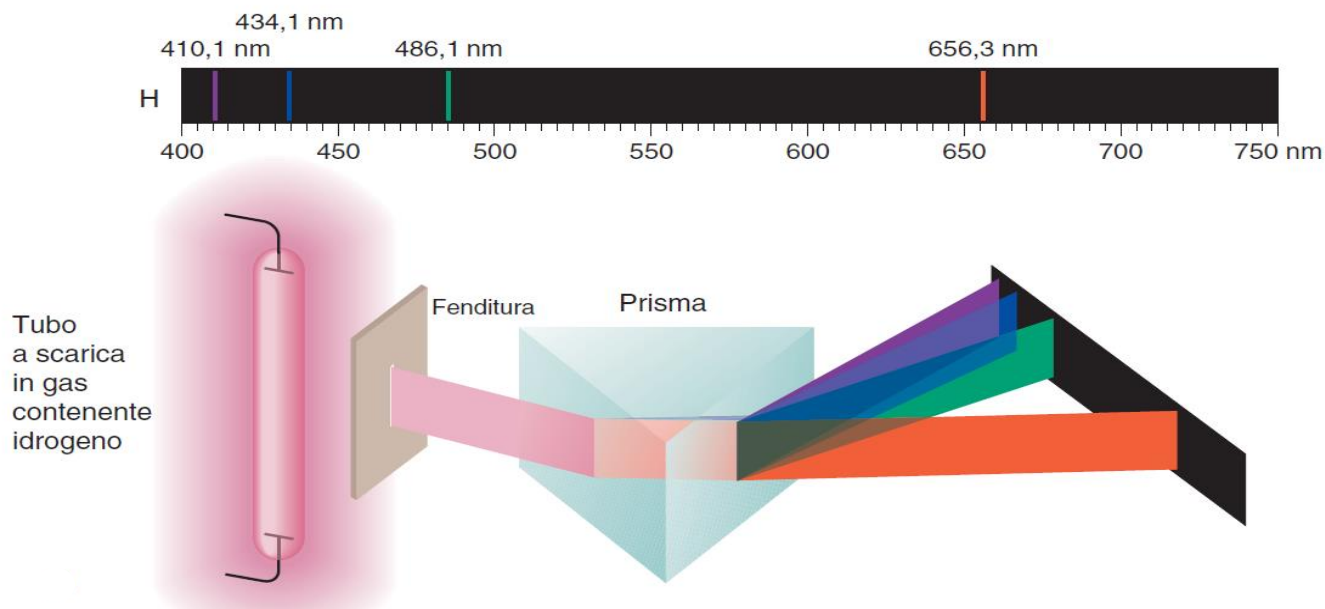
$$\Delta E = E_{\text{rad. emessa (o assorbita)}} = nh\nu$$

Effetto fotoelettrico

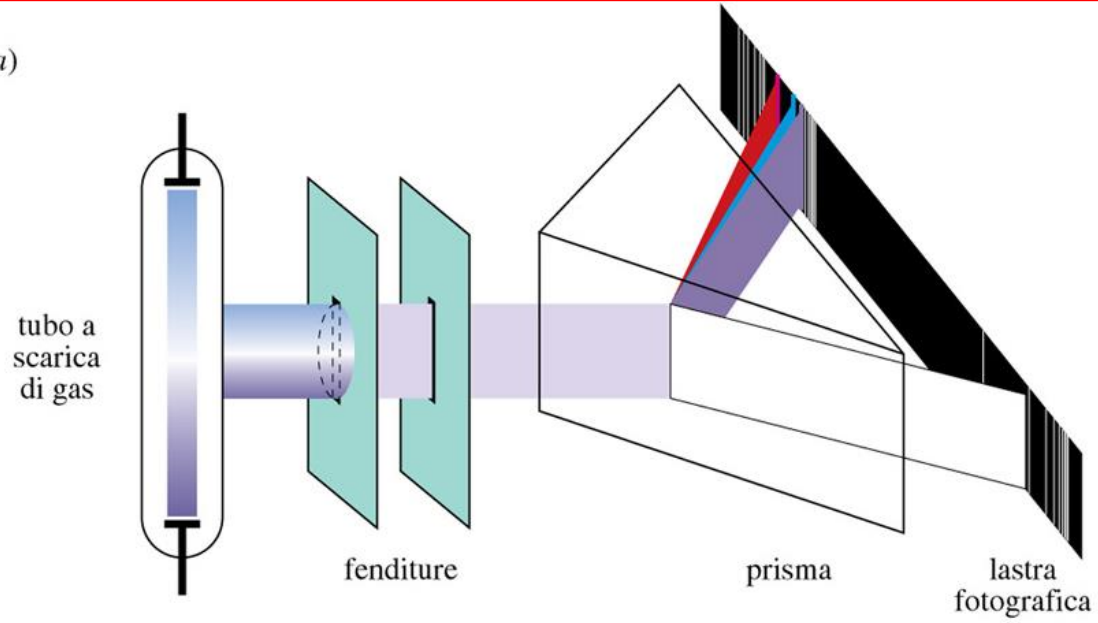


- Frequenza di soglia
- Assenza di ritardo temporale
- La luce ha natura particellare ossia esiste in quanti di energia elettromagnetica (**fotoni**)

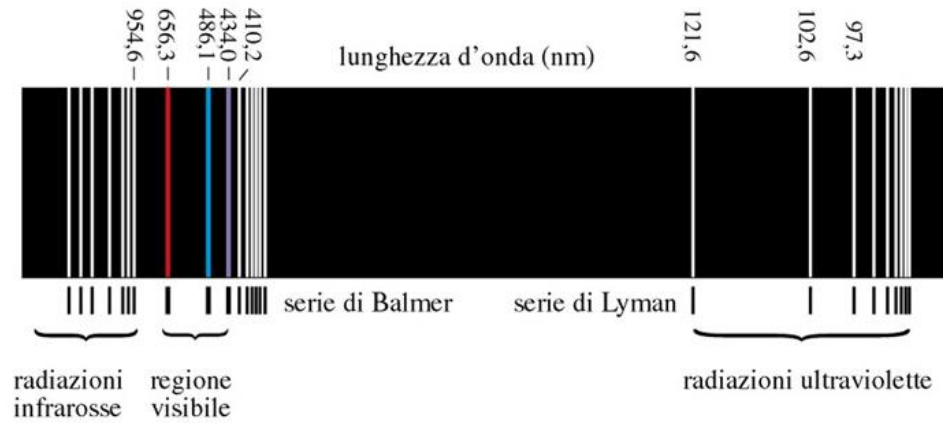
Lo spettro a righe dell'idrogeno



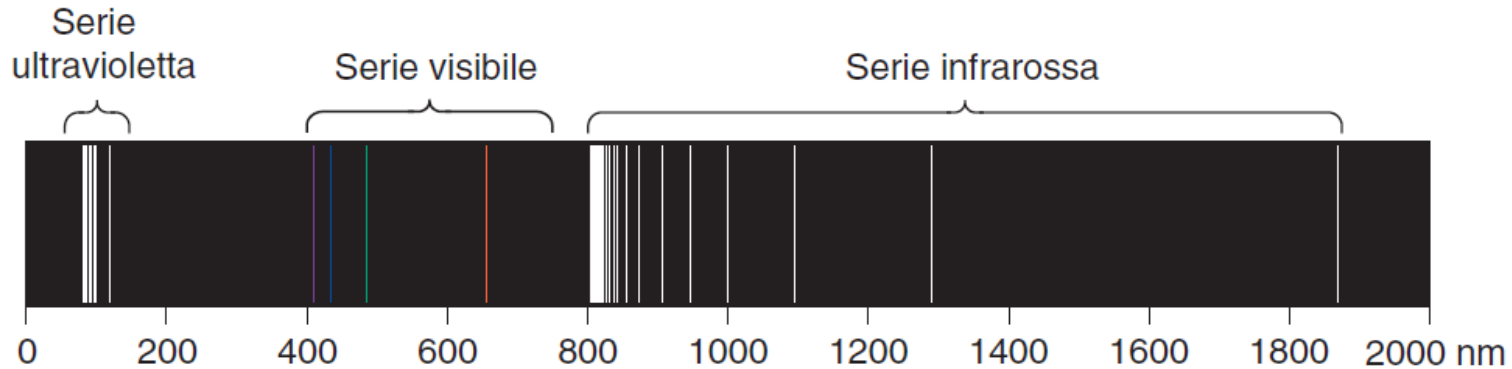
a)



b)



Tre serie di righe spettrali dell'idrogeno atomico



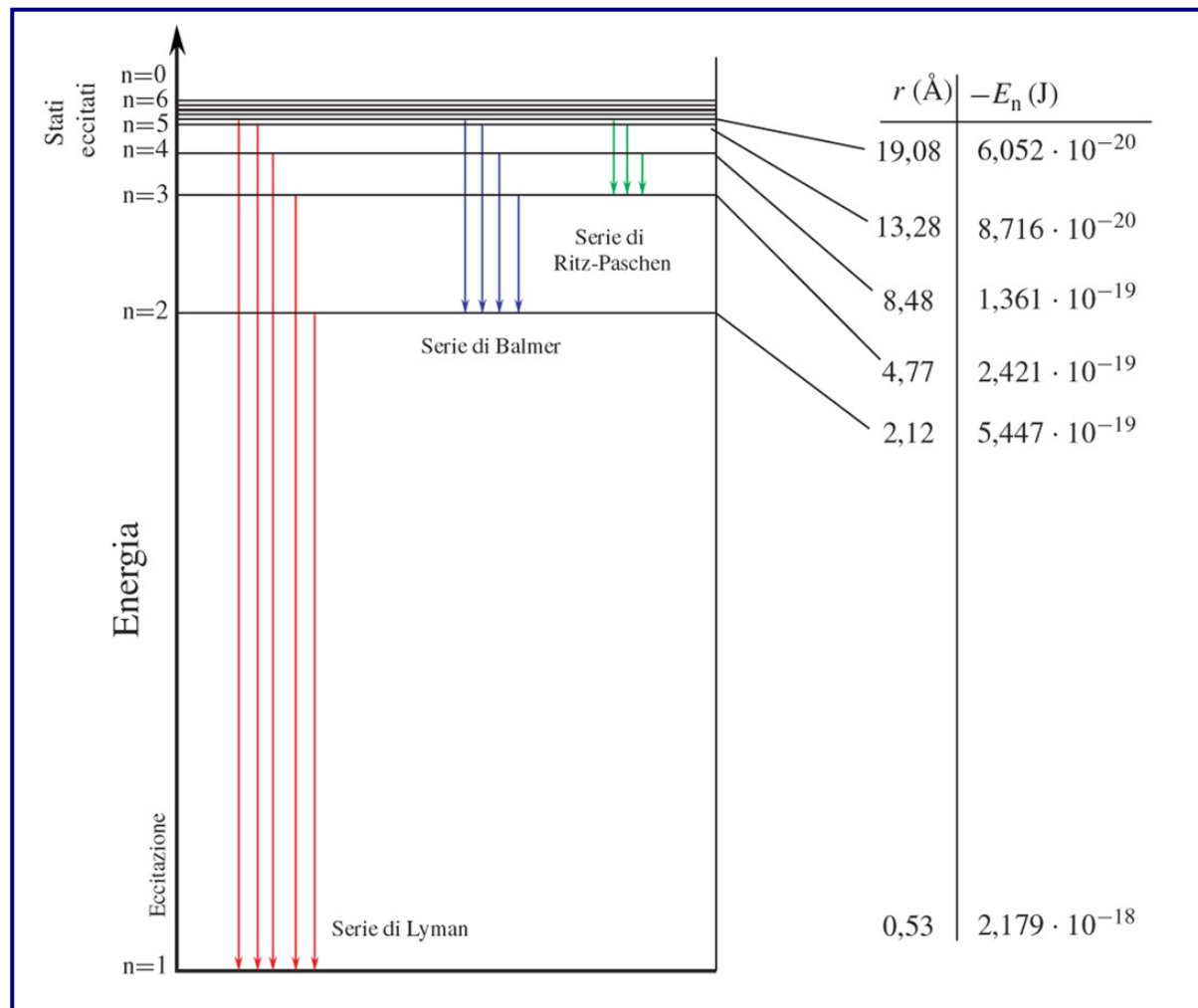
Equazione di Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

R è la costante di Rydberg = $1,096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

Per la serie visibile, $n_1 = 2$ e $n_2 = 3, 4, 5, \dots$

Righe dello spettro di emissione dell'atomo di idrogeno



Il modello di Bohr dell'atomo di idrogeno

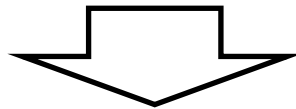
Tre postulati:

1. L'atomo ha soltanto certi livelli energetici permessi (**stati stazionari**) a ognuno dei quali è associata un'orbita circolare fissa dell'elettrone attorno al nucleo.

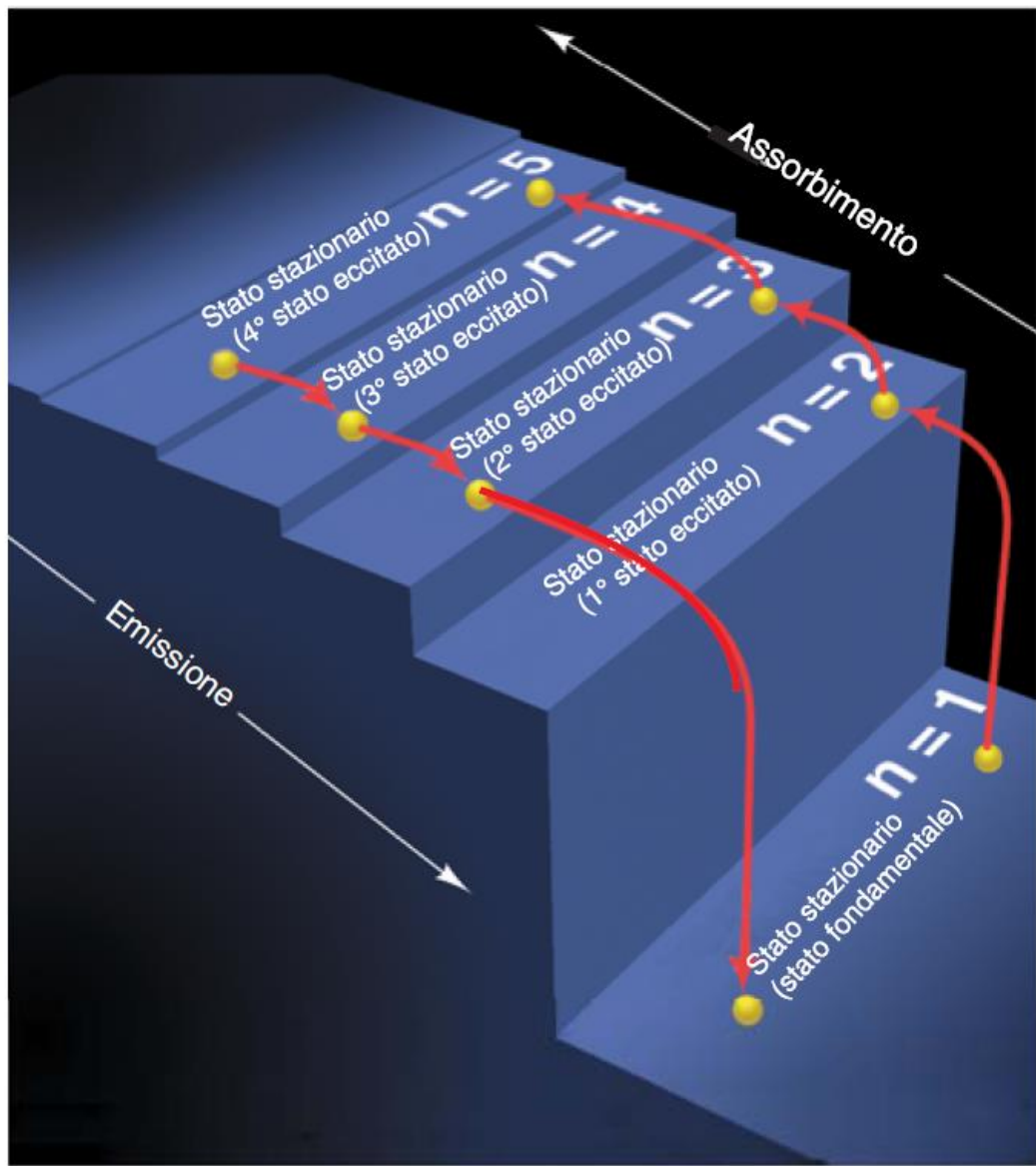
Maggiore è il livello energetico, maggiore è il raggio dell'orbita

2. L'atomo **non** irraggia energia mentre è in uno dei suoi stati stazionari

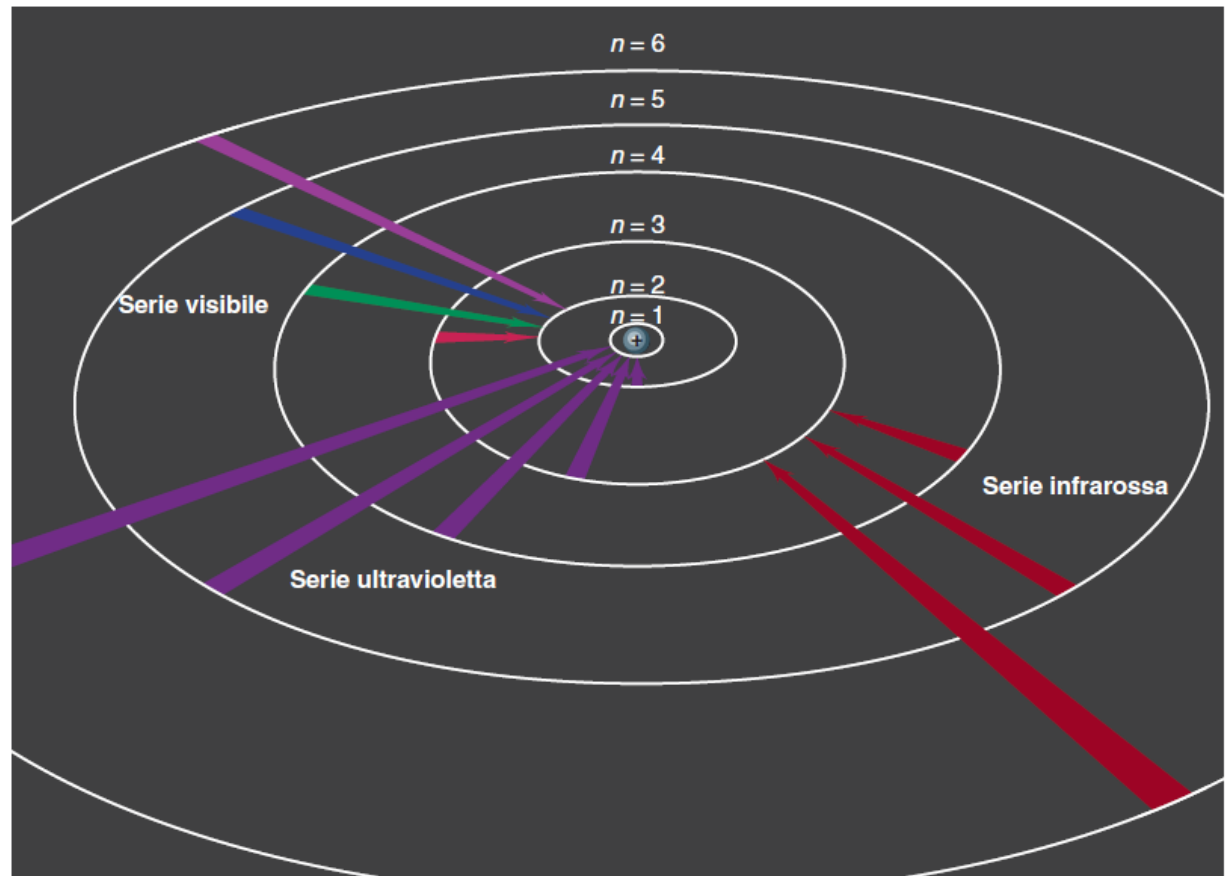
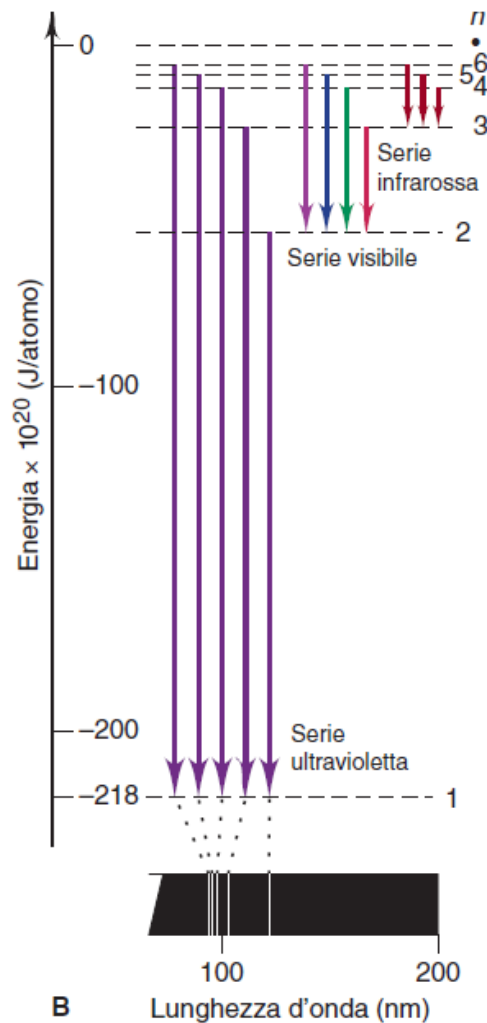
3. L'atomo compie una transizione da uno o stato stazionario ad un altro soltanto assorbendo o emettendo un fotone la cui energia è uguale alla differenza di energia tra i due stati $\Delta E = h\nu$.



- Un elettrone può passare solo da un'orbita permessa ad un'altra.
- Quando l'elettrone è nella prima orbita, l'atomo è nello **stato fondamentale**, il livello energetico più basso.
- Quando l'elettrone è in qualsiasi orbita con $n > 1$ l'atomo è in uno **stato eccitato**.



Il modello di Bohr e le righe spettrali dell'atomo di H



B



Stronzio $_{38}\text{Sr}$



Rame $_{29}\text{Cu}$

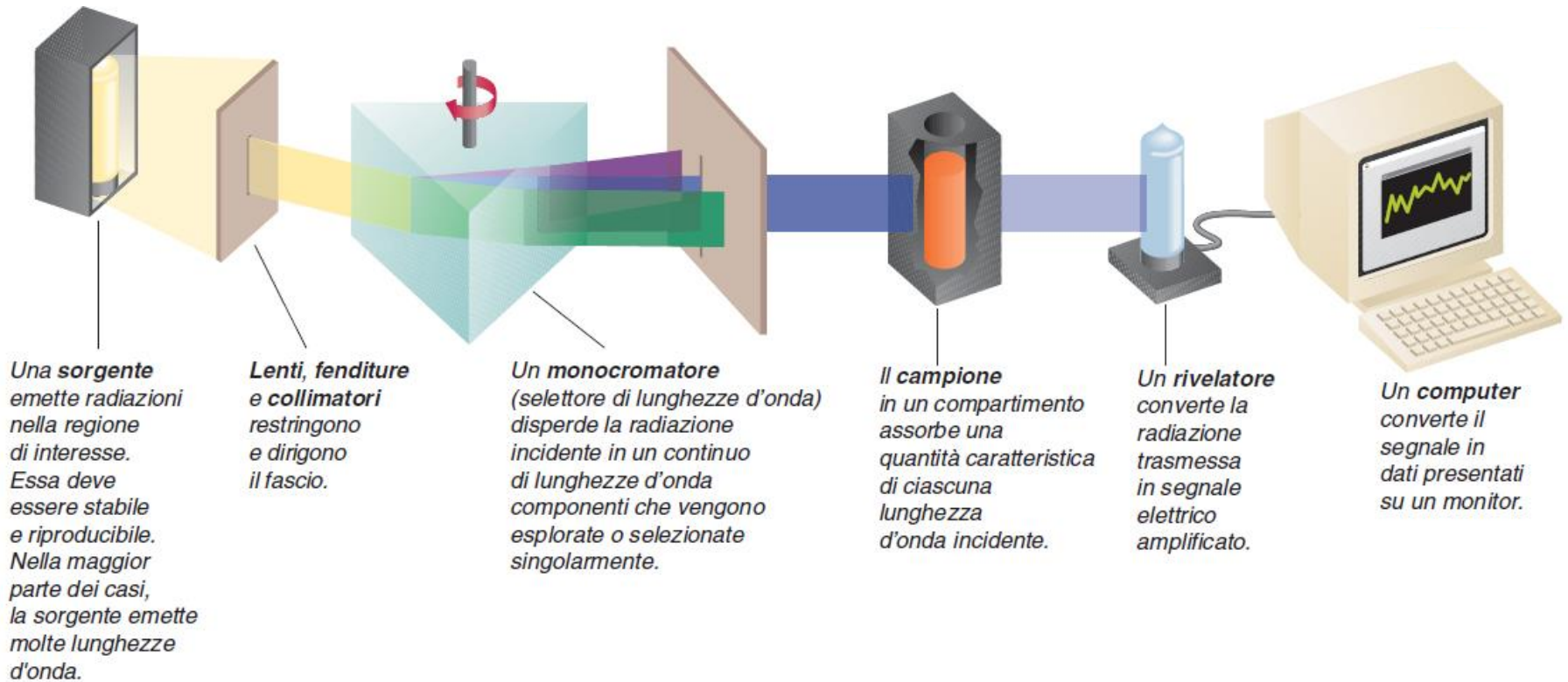


Il colore della fiamma è dovuto all'emissione di luce di una particolare lunghezza d'onda caratteristica di ogni elemento.

Spettri di emissione e di assorbimento degli atomi di sodio



Componenti di un tipico spettrometro



Il dualismo onda-particella di materia ed energia

- Materia ed energia sono forme alternative della stessa entità
- Relazione tra la quantità di energia e la quantità di massa ad essa equivalente.

$$E = mc^2$$

- **La materia** mostra proprietà **sia delle particelle che delle onde**.
La materia si comporta come se si muovesse di moto ondulatorio
- Considerando le due equazioni: $E = mc^2$ $E = h\nu = h \cdot c / \lambda$
si ricava la lunghezza d'onda di **de Broglie** per *qualsiasi particella*:

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

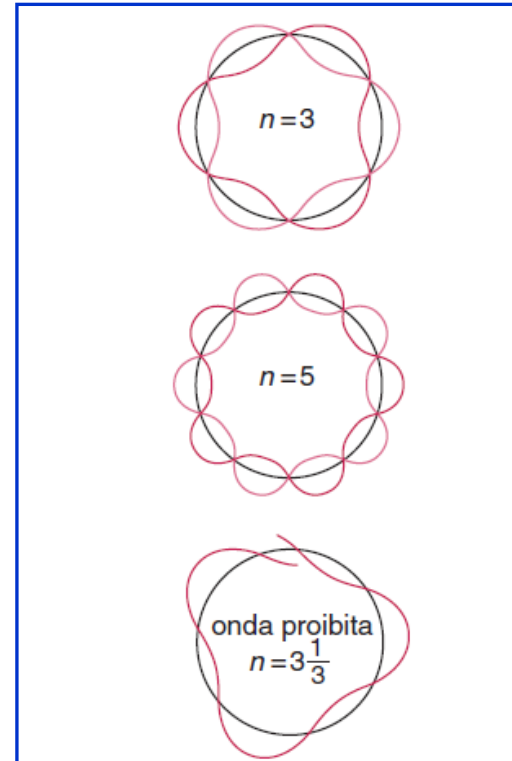
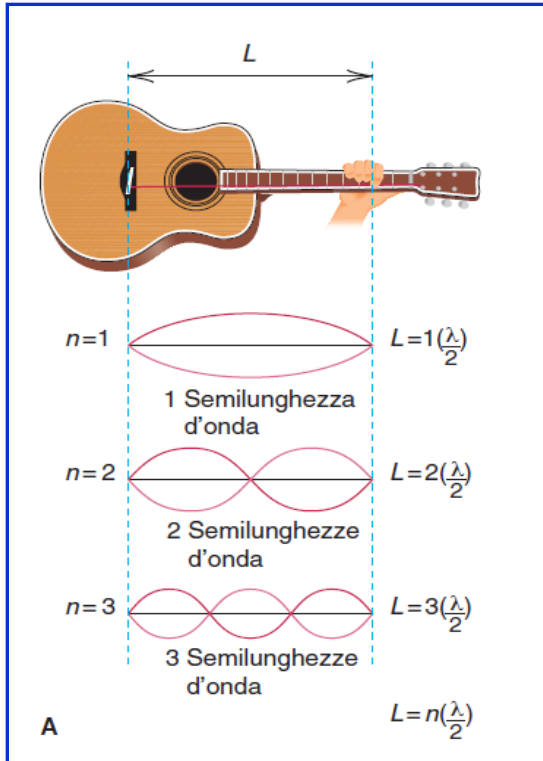
m = massa

u = velocità in m/s

- Gli elettroni si muovono di moto ondulatorio e possono avere soltanto certi valori permessi di frequenze ed energie.

Onde stazionarie - Moto ondulatorio limitato nello spazio

- Sistemi che presentano solo alcuni moti permessi



- Essendo fisse le estremità della corda sono possibili solo certe frequenze e lunghezze d'onda

- Se gli elettroni si muovessero di moto ondulatorio e su orbite circolari a raggi fissi, potrebbero avere solo certe frequenze (lunghezze d'onda) ed energie

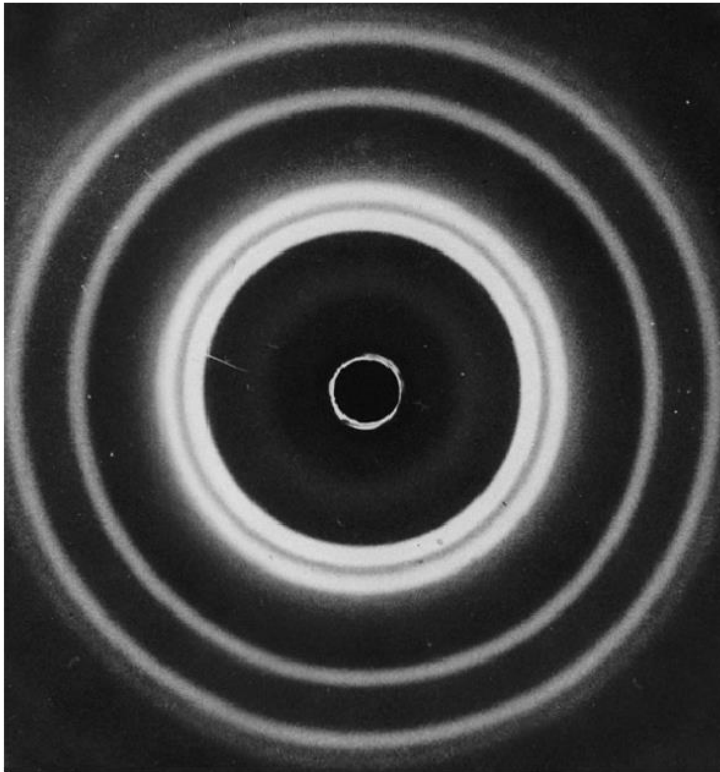
Lunghezze d'onda di de Broglie di alcuni corpi

Corpo	Massa (g)	Velocità (m/s)	λ (m)
elettrone lento	9×10^{-28}	1,0	7×10^{-4}
elettrone veloce	9×10^{-28}	$5,9 \times 10^6$	1×10^{-10}
particella α	6.6×10^{-24}	$1,5 \times 10^7$	7×10^{-15}
massa di 1 g	1.0	0,01	7×10^{-29}
palla da baseball	142	25,0	2×10^{-34}
Terra	$6,0 \times 10^{27}$	$3,0 \times 10^4$	4×10^{-63}

- I corpi di massa molto grande hanno lunghezze d'onda di ordini di grandezza più piccole del corpo stesso.

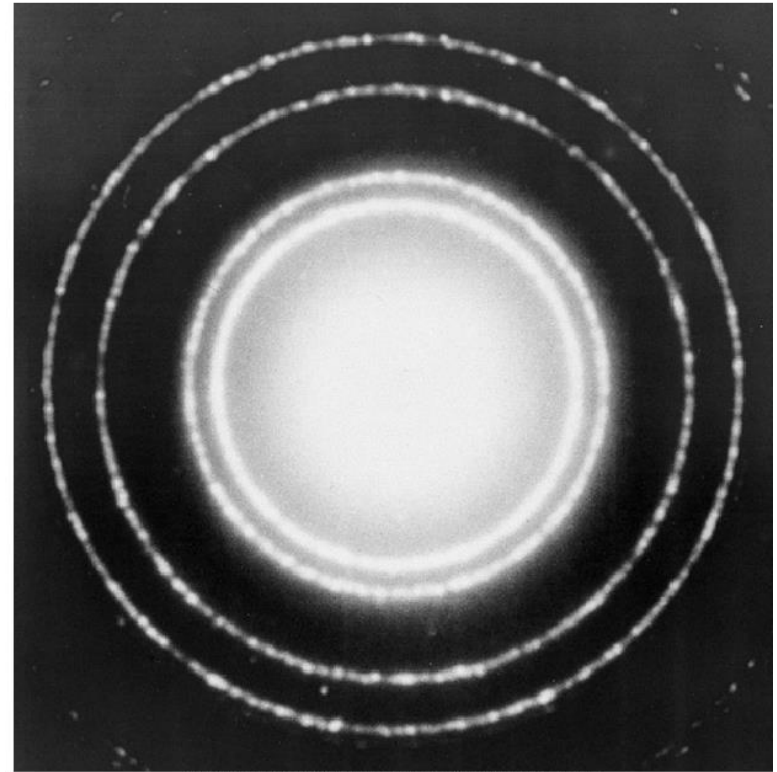
Figure di diffrazione dei raggi X e degli elettroni di una lamina di Al

- Le particelle si muovono di moto ondulatorio e quindi presentano diffrazione ed interferenza



PSSC Physics © 1965, Education Development Center, Inc

raggi X



D.C. Heath & Company/Education Development Center, Inc

elettroni

TEORIA CLASSICA

Materia
particellare,
massiva

Energia
continua,
ondulatoria



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

Osservazione

radiazione del
corpo nero
effetto fotoelettrico



Teoria

Planck: L'energia è quantizzata; sono permessi soltanto
certi valori



Einstein: La luce ha un comportamento particellare (fotoni) spettri a
righe atomici



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



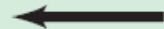
Teoria

De Broglie: Tutta la materia si muove di moto ondulatorio:
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 contro un elettrone

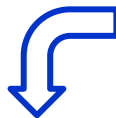


Teoria

Einstein/de Broglie: La massa e 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



Il principio di indeterminazione di Heisenberg

- Non è possibile conoscere simultaneamente posizione esatta e quantità di moto esatta di una particella.

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

x = posizione
 u = velocità

Il modello quantomeccanico dell'atomo

- La materia-onda associata all'elettrone si muove nello spazio attorno al nucleo da cui è continuamente influenzata.
- L'elettrone è descritto da una **funzione d'onda Ψ** .
- L'equazione d'onda di ***Schrödinger*** ci permette di calcolare i livelli di energia permessi per gli elettroni in un atomo .
- Il quadrato della funzione d'onda Ψ^2 dà la ***densità di probabilità***, una misura della ***probabilità*** di trovare un elettrone con una particolare energia in una particolare regione dell'atomo.

L' **equazione di Schrödinger** descrive le proprietà ondulatorie di un elettrone in un atomo associato ad un nucleo in termini di posizione, massa, energia totale e potenziale

$$\hat{H}\psi = E \psi$$

\hat{H} e' l' **operatore Hamiltoniano**

ψ e' la **funzione d'onda** (autofunzione dell'operatore) che descrive il moto dell'elettrone nello spazio (x, y, z) e nel tempo (t)

E e' l'**energia** dell'elettrone (autovalore dell'operatore - scalare)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \cdot \psi(x,y,z) = E \cdot \psi(x,y,z)$$

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \times$$

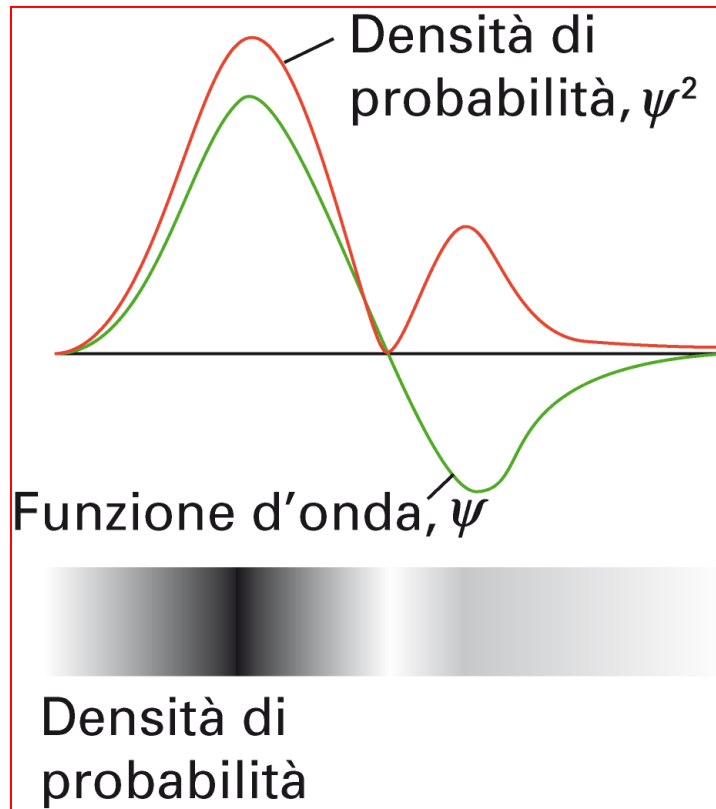
$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad \text{operatore che descrive l'energia cinetica dell'elettrone}$$

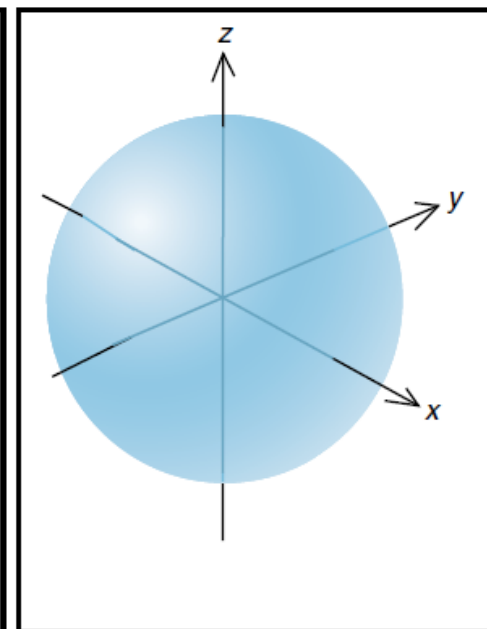
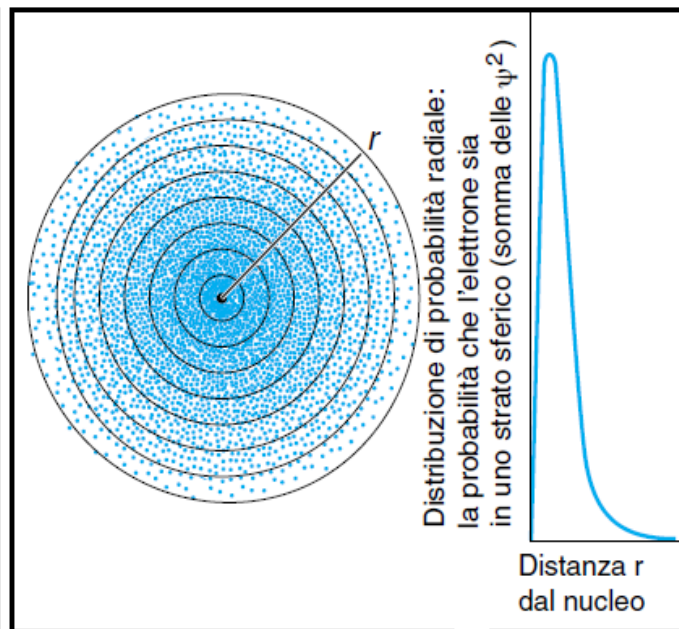
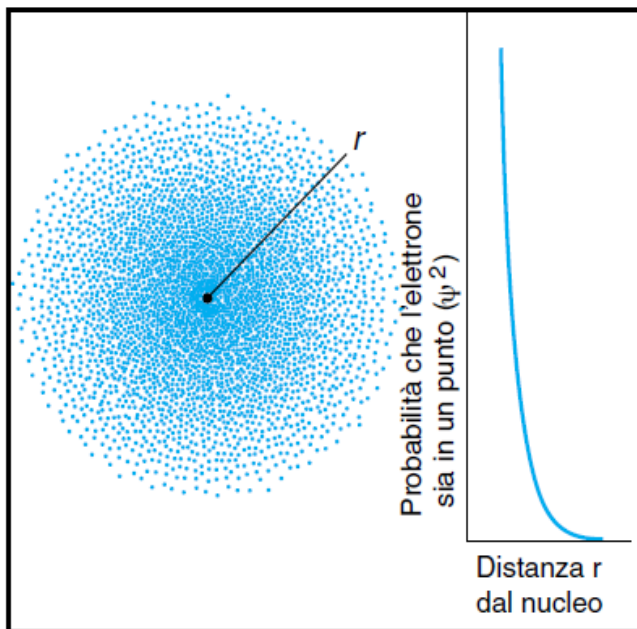
$$V(x,y,z) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{operatore che descrive l'energia potenziale dell'elettrone dovuta all'attrazione elettrostatica del nucleo}$$

Funzione d'onda e densità di probabilità

Il quadrato della funzione d'onda Ψ^2 dà la **densità di probabilità**, una misura della **probabilità** di trovare un elettrone con una particolare energia in una particolare regione dell'atomo.



Probabilità elettronica nell'atomo di H nello stato fondamentale



Numeri quantici e orbitali atomici

- Ogni soluzione della equazione di Schroedinger (orbitale atomico) è definita da 3 numeri quantici.
- Il numero quantico **principale** (n) è un intero positivo.
Il valore di n indica la **dimensione** relativa dell'orbitale e la sua **distanza** relativa dal nucleo.
- Il numero quantico del **momento angolare** (l) è un numero intero compreso tra 0 e $(n - 1)$.
Il valore di l indica la **forma** dell'orbitale.
- Il numero quantico **magnetico** (m_l) è un numero intero compreso tra $-l$ e $+l$
Il valore di m_l indica l'**orientazione** dell'orbitale.

I numeri quantici degli orbitali atomici

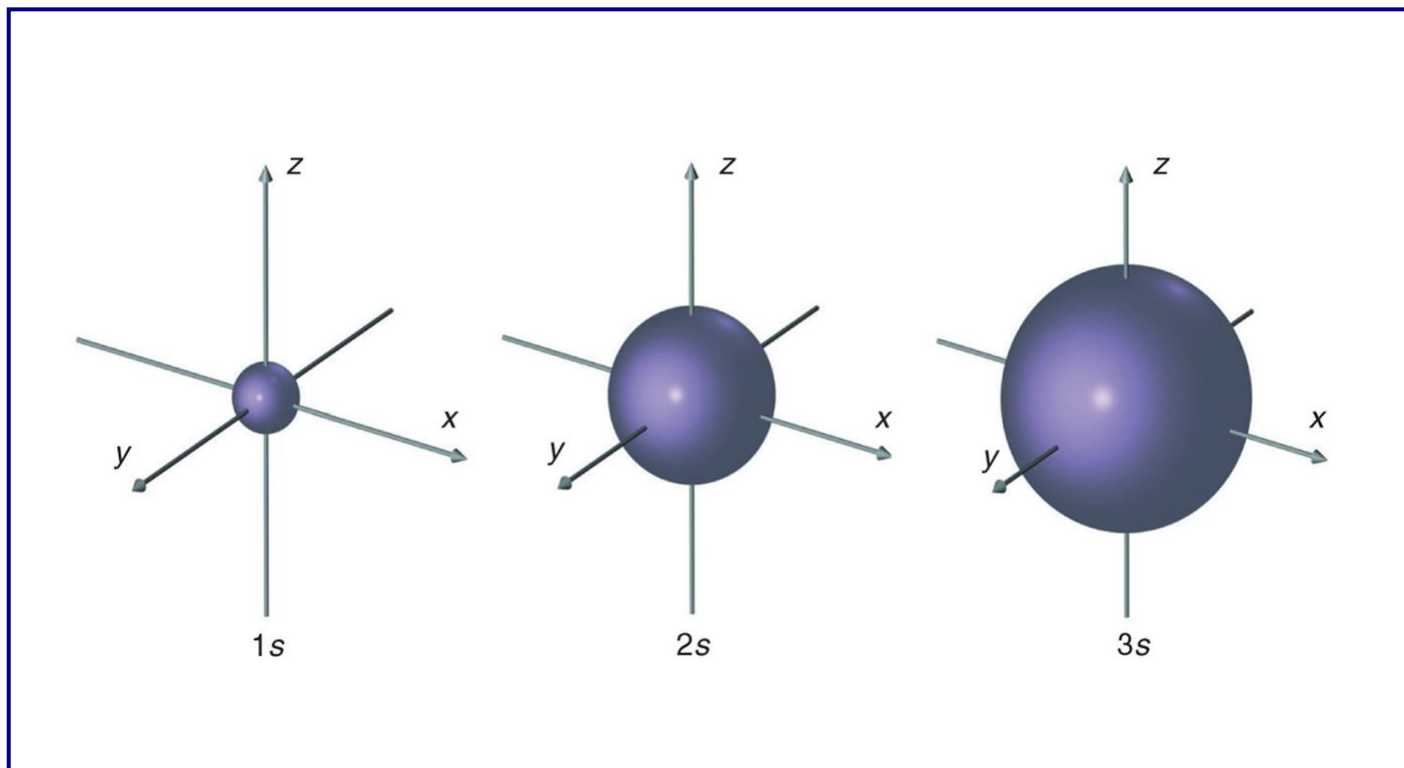
Nome, simbolo (proprietà)	Valori permessi	Numeri quantici												
Principale, n (dimensione, energia)	Intero positivo (1, 2, 3, ...)	1	2		3									
Momento angolare, l (forma)	0 a $n - 1$	0	0	1	0	1	2							
Magnetico, m_l (orientazione)	$-l, \dots, 0, \dots, +l$	0	0	-1	0	+1	-1	0	+1	-2	-1	0	+1	+2

Orbitali dell'atomo di idrogeno

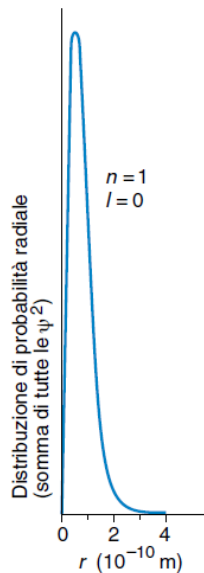
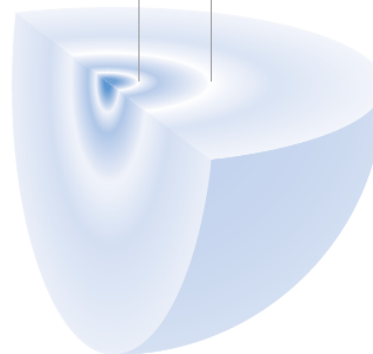
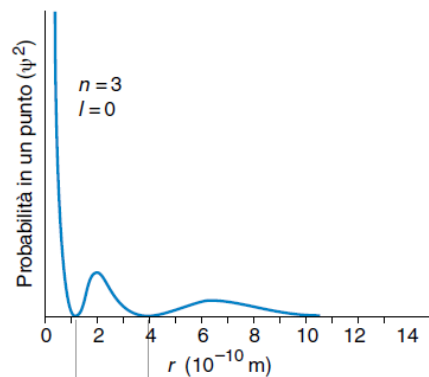
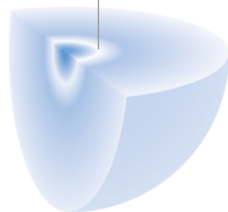
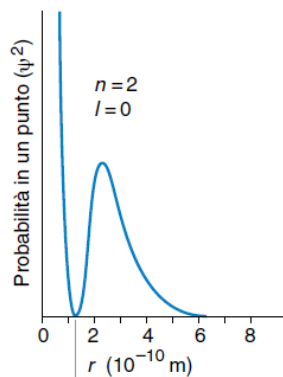
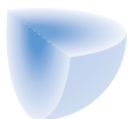
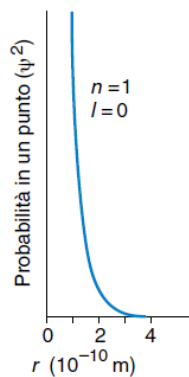
<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	orbitali	simbolo orbitali	n. totale orbitali
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	1s	1
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$	2s	4
	1	+1, 0, -1	$\Psi_{2,1,1}, \Psi_{2,1,0}, \Psi_{2,1,-1}$	2p	
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$	3s	9
	1	+1, 0, -1	$\Psi_{3,1,1}, \Psi_{3,1,0}, \Psi_{3,1,-1}$	3p	
	2	+2, +1, 0, -1, -2	$\Psi_{3,2,2}, \Psi_{3,2,1}, \Psi_{3,2,0}, \Psi_{3,2,-1}, \Psi_{3,2,-2}$	3d	
4	0	0	$\Psi_{4,0,0}$	4s	16
	1	+1, 0, -1	$\Psi_{4,1,1}, \Psi_{4,1,0}, \Psi_{4,1,-1}$	4p	
	2	+2, +1, 0, -1, -2	$\Psi_{4,2,2}, \Psi_{4,2,1}, \Psi_{4,2,0}, \Psi_{4,2,-1}, \Psi_{4,2,-2}$	4d	
	3	+3, +2, +1, 0, -1, -2, -3	$\Psi_{4,3,3}, \Psi_{4,3,2}, \Psi_{4,3,1}, \Psi_{4,3,0}, \Psi_{4,3,-1}, \Psi_{4,3,-2}, \Psi_{4,3,-3}$	4f	

Orbitali s

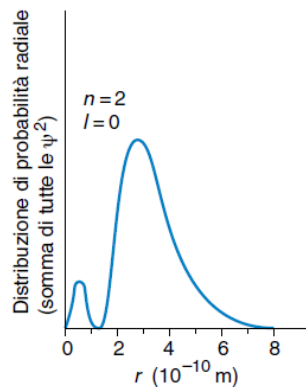
n	l	m	orbitali	simbolo orbitali
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	1s
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$	2s
3	0	0	$\Psi_{3,0,0}$	3s
4	0	0	$\Psi_{4,0,0}$	4s



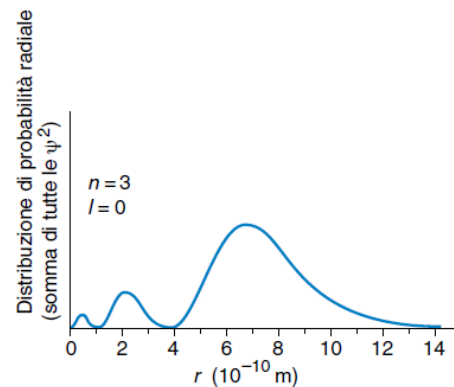
Gli orbitali 1s, 2s e 3s



A L'orbitale 1s

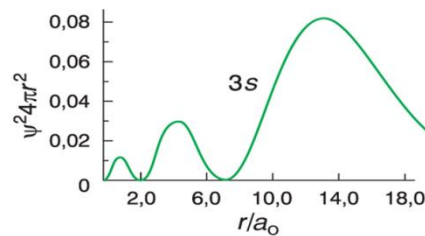
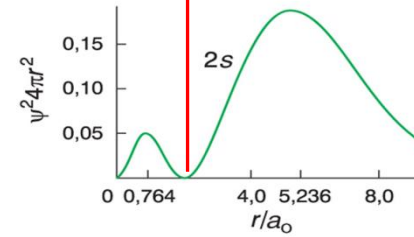
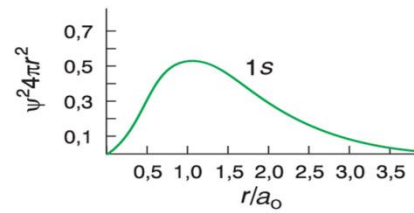
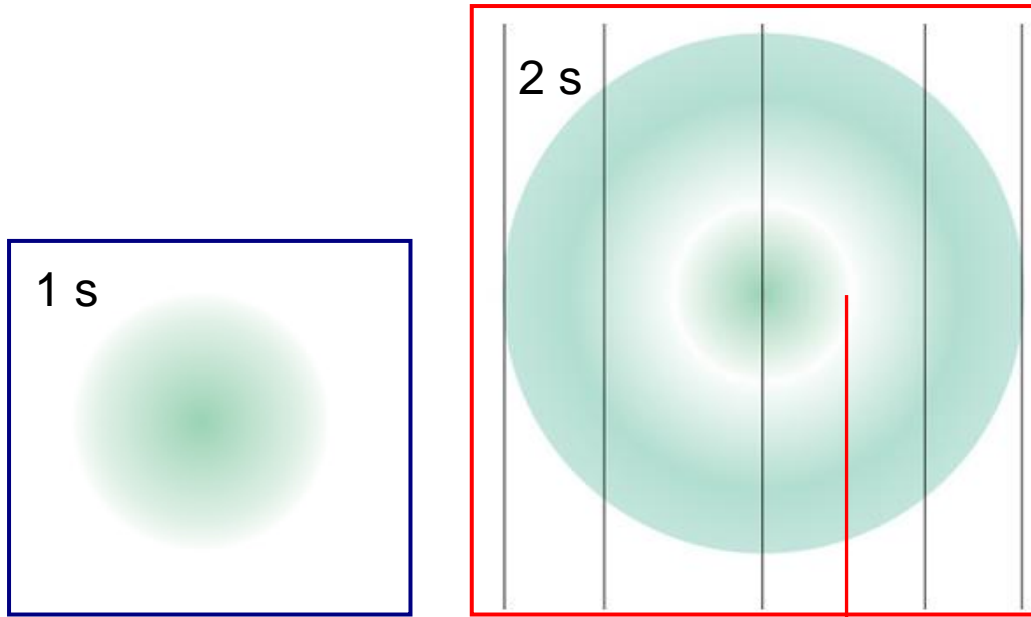


B L'orbitale 2s



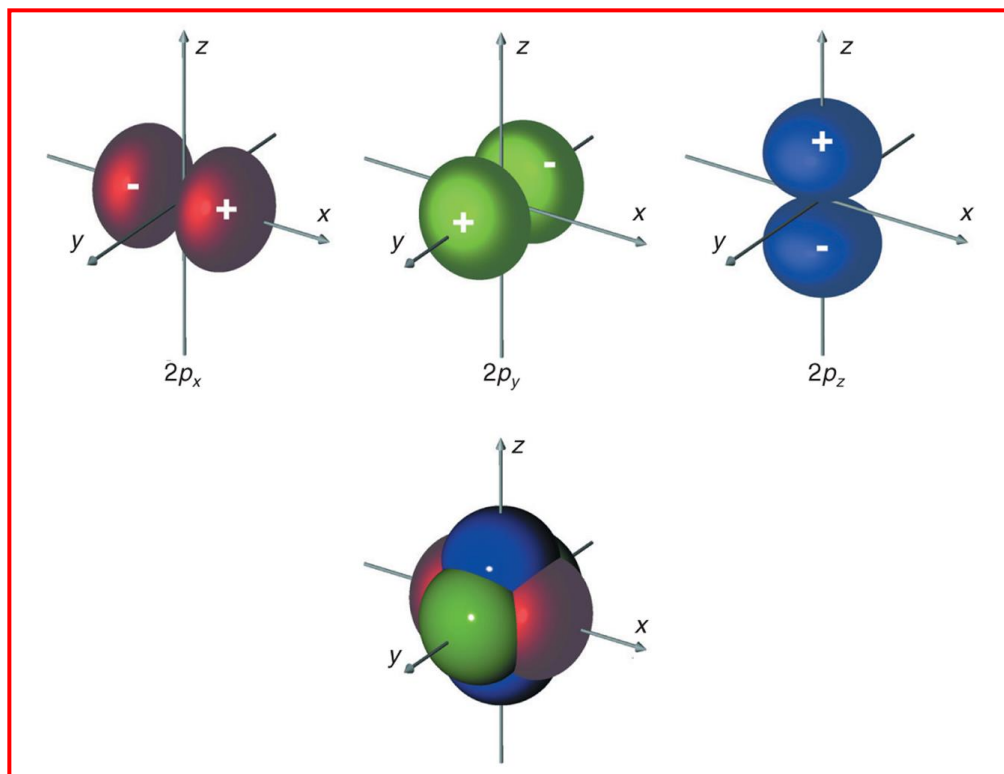
C L'orbitale 3s

Orbitali s - Funzione di probabilità - Nodi

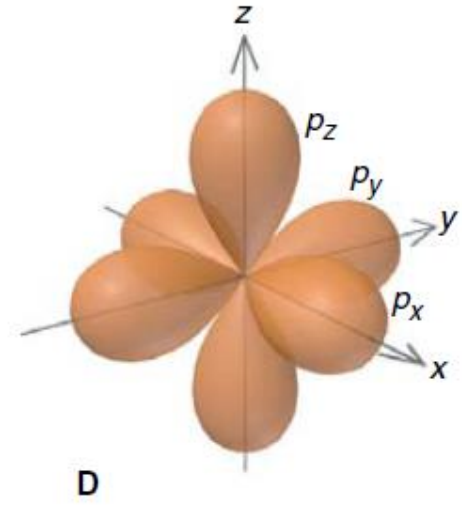
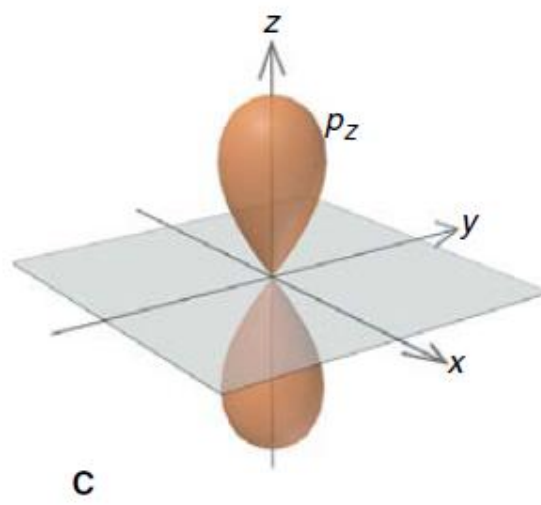
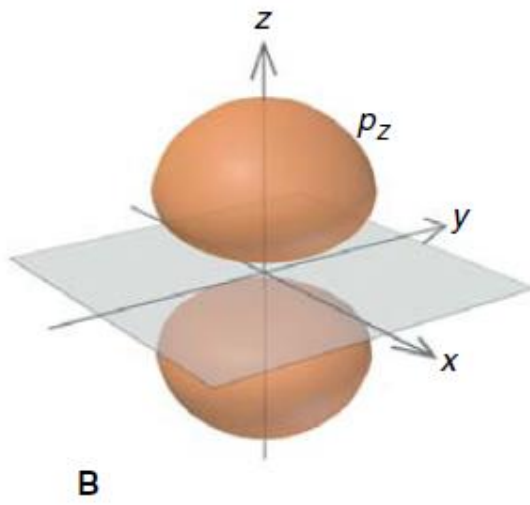
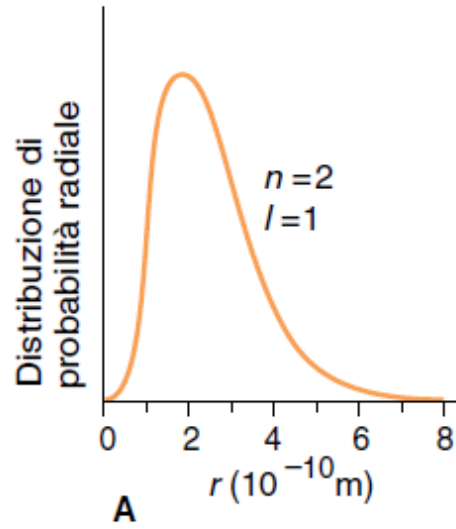


Orbitali p

n	l	m	orbitali	simbolo orbitali
2	1	+1, 0, -1	$\Psi_{2,1,1}$, $\Psi_{2,1,0}$, $\Psi_{2,1,-1}$	2p
3	1	+1, 0, -1	$\Psi_{3,1,1}$, $\Psi_{3,1,0}$, $\Psi_{3,1,-1}$	3p



Gli orbitali 2p



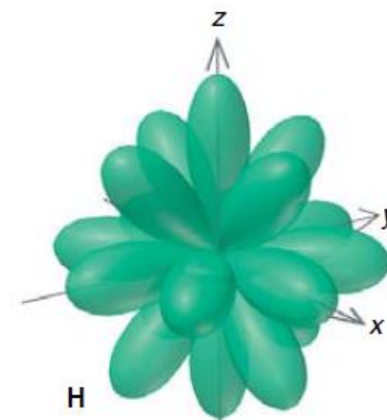
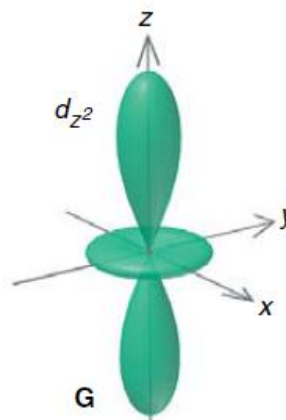
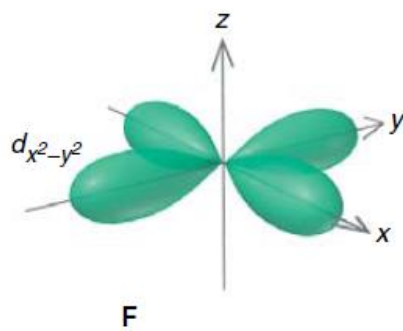
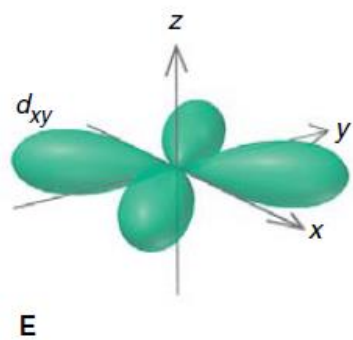
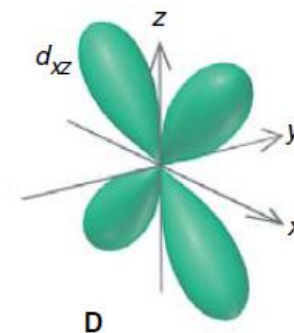
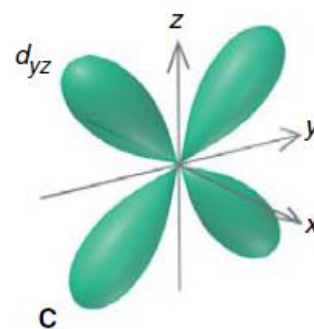
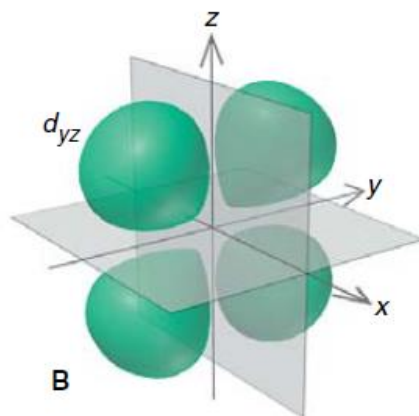
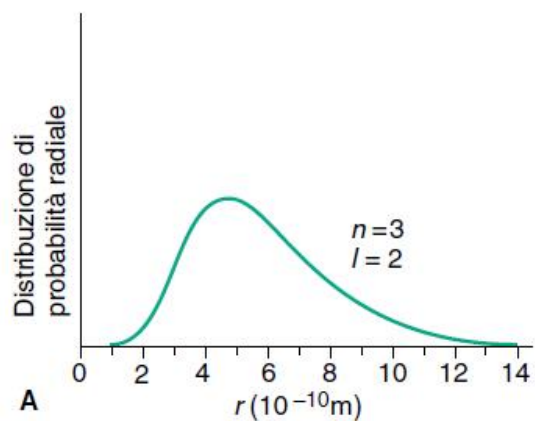
Gli orbitali 3d

2

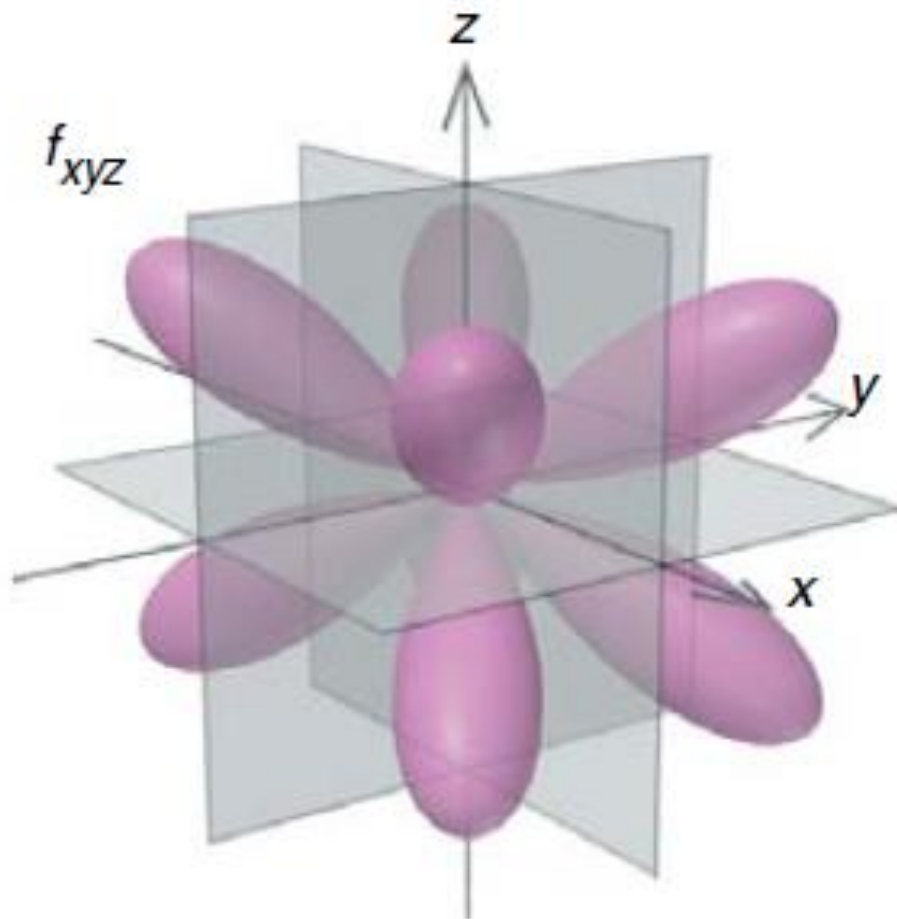
+2, +1, 0, -1, -2

$\Psi_{3,2,2}, \Psi_{3,2,1}, \Psi_{3,2,0}, \Psi_{3,2,-1}, \Psi_{3,2,-2}$

3d



L'orbitale $4f_{xyz}$, uno dei sette orbitali $4f$



Livelli energetici dell'atomo di H

