

STRUTTURA ATOMICA E CONFIGURAZIONE ELETTRONICA

Per capire il comportamento degli atomi dobbiamo studiare il comportamento dei suoi elettroni

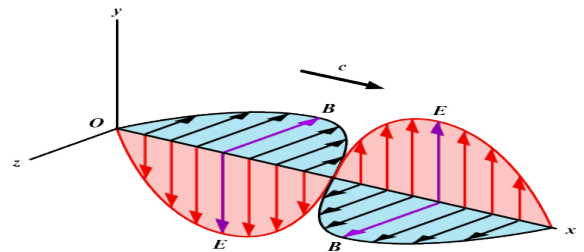
L'atomo e le sue particelle NON sono direttamente visibili...

...per avere informazioni sull'atomo possiamo però misurare:

- l'energia di ionizzazione (cioè l'energia necessaria ad allontanare un elettrone dall'atomo)
- le radiazioni emesse o assorbite dagli atomi

Per questo è importante sapere cosa sono le radiazioni elettro-magnetiche (tra le quali c'è la luce visibile) e come interagiscono con la materia.

Le radiazioni (o onde) elettromagnetiche consistono in una forma di energia che si propaga, anche nel vuoto: sono la simultanea propagazione nello spazio delle oscillazioni di un campo elettrico(E) e di un campo magnetico(B).



Una radiazione elettromagnetica consiste in 'pacchetti discreti' di energia, chiamati FOTONI, la cui energia dipende dalla frequenza dell'onda:

ENERGIA(E) e FREQUENZA(ν) sono DIRETTAMENTE PROPORZIONALI: $E = h \nu$

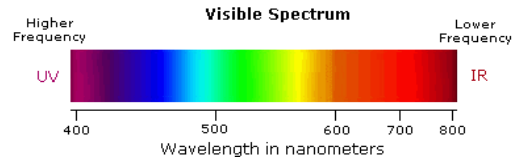
$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad (\text{costante di Planck})$$

lo spettro delle onde elettromagnetiche

Tipi di radiazione						
onde radio	micro-onde	raggi IR	luce visibile	raggi UV	raggi X	raggi gamma
10^7	10^{10}	10^{12}	10^{14}	10^{15}	10^{17}	10^{20}
ordini di grandezza (in Hz) delle FREQUENZE						
bassa ν bassa E alta λ					alta ν alta E bassa λ	
ordini di grandezza (in cm) delle LUNGHEZZE D'ONDA						
10^3	1	10^{-3}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-8}	10^{-11}

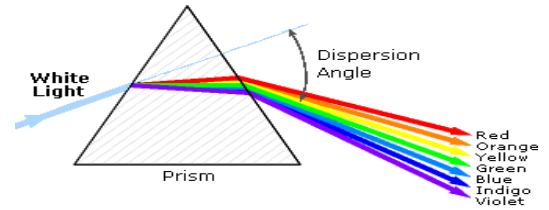
LA LUCE VISIBILE è solo una piccola parte dello spettro elettromagnetico

Alle diverse radiazioni visibili, che differiscono per la loro lunghezza d'onda (e di conseguenza per la loro frequenza ed energia) corrispondono i diversi colori.



DISPERSIONE DELLA LUCE:

La luce "bianca" è in realtà un miscuglio di tutti i colori



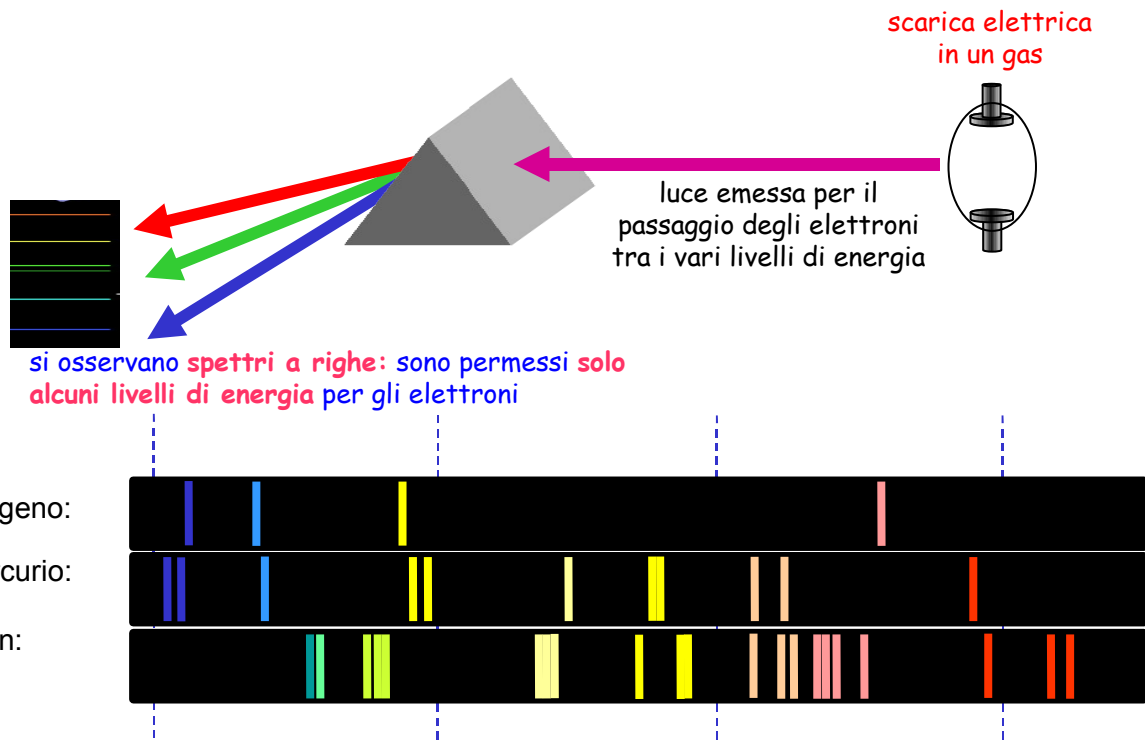
LA SPETTROSCOPIA studia le radiazioni emesse o assorbite dai materiali

Atomi o molecole, trovandosi in campi energetici (calorifici, elettrici, elettromagnetici,...) possono assorbire quantità definite e caratteristiche di energia e passare a stati energetici maggiori.

Dagli stati eccitati, ritornando allo stato fondamentale, atomi e molecole emettono energia sotto forma di radiazioni elettromagnetiche: è il fenomeno di **EMISSIONE**

Spettro atomico

(lo "spettro" è l'insieme delle radiazioni emesse dagli atomi)



Riassumendo:

Gli atomi emettono solo **ben precisi tipi di radiazioni** (aventi ben definiti valori di energia)...

QUINDI

nell'atomo gli elettroni possono assumere solo **ben precisi livelli di energia** !

IL PROBLEMA DELL'ATOMO...

Alla fine del 1800, l'idea che la materia fosse costituita da atomi era diffusa e applicata in fisica e chimica, ma non era ancora universalmente accettata...

... la conferma definitiva arriva con la spiegazione di Einstein (1905) del moto browniano (moto erratico e casuale di particelle di polline in sospensione in un liquido), causato dai continui urti della particella con gli atomi del liquido in agitazione termica. Le osservazioni suggerivano **atomi con un raggio dell'ordine di 10^{-10} m.**

Esperienza di Rutherford (1911) (...particelle α emesse ad alta energia verso una lamina d'oro...)

La presenza di particelle deviate a grandi angoli suggerisce che la carica positiva e gran parte della massa sia concentrata in una **regione molto piccola (10^{-15} m) dell'atomo, il nucleo.**

Modello planetario dell'atomo di Rutherford: "gli elettroni ruotano attorno al nucleo". Presenta due problemi:

- 1) non è stabile, perché gli elettroni ruotando, emetterebbero radiazione elettromagnetica, perdendo energia e cadendo sul nucleo.
- 2) Lo spettro della radiazione emessa dovrebbe essere continuo. Invece, atomi di un gas eccitato da scariche elettriche emettono un insieme di righe spettrali.

Un altro modello: il modello atomico di Bohr

Per ovviare ai problemi del modello planetario di Rutherford, Bohr propone un "Modello planetario quantizzato".

Secondo tale modello sono permesse (senza spiegare bene perché) solo le orbite in cui il momento angolare dell'elettrone ($= m \times v \times r$) è un multiplo intero di $h/2\pi$.

Questo modello spiegava perfettamente lo spettro dell'atomo d'idrogeno... ma poco altro.

La concezione attuale: l'atomo secondo la MECCANICA QUANTISTICA

La svolta decisiva viene dalla **meccanica quantistica** che ha rivoluzionato la descrizione dell'universo. Negli anni 1920-1930 nasce la 'meccanica quantistica' stimolata da una serie di esperimenti inspiegabili dal punto di vista classico (irraggiamento del corpo nero, righe spettrali atomiche, effetto fotoelettrico,...) : si comprende che **il mondo microscopico (atomi, molecole, particelle) si comporta in modo** molto diverso da come si comportano gli oggetti macroscopici della nostra esperienza quotidiana.

Ecco alcune idee chiave della meccanica quantistica...

QUANTIZZAZIONE DELL'ENERGIA: l'energia di una particella può assumere solo valori discreti (=ben precisi, cioè non può variare con continuità).

DUALISMO ONDA-CORPUSCOLO: la materia e la radiazione presentano comportamenti spiegabili talvolta in termini di onde e talvolta in termini di particelle (la distinzione onde-particelle non ha senso).

PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE DI HEISENBERG: non si può misurare nello stesso momento con arbitraria precisione la posizione e la velocità di una particella. (definizione poco

rigorosa e non quantitativa)

...quindi, **NON** ha senso parlare di **ORBITA** degli elettroni

La trattazione fisica è molto complessa e si esprime in termini di “funzioni d'onda”...

... che permettono poi di calcolare la **PROBABILITA'** di trovare l'elettrone nei vari punti intorno al nucleo e con ben precise energie...

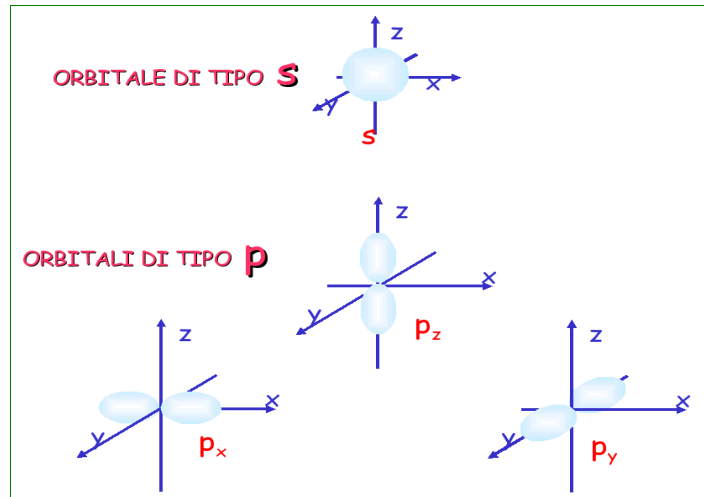
*Ci occuperemo solo dei **RISULTATI** di tali calcoli (che hanno avuto comunque notevoli conferme sperimentali) ... usando spiegazioni un po' “approssimative” !*

Ogni elettrone, in un atomo, può trovarsi solo in ben definite “situazioni” * chiamate

ORBITALI

Ad ogni **ORBITALE** corrisponde:

- una ben precisa **energia**
- una particolare **distribuzione nello spazio** intorno al nucleo delle zone in cui è più probabile trovare l'elettrone



* a rigore, con il termine “orbitale” si intende una “funzione d'onda” che esprime “ampiezze d'onda” che non hanno un significato fisico diretto; è il quadrato del modulo dell'ampiezza che ha invece significato: è proporzionale alla **PROBABILITA'** di trovare l'elettrone nella posizione considerata.

In ogni atomo si hanno quindi dei ben definiti **LIVELLI ENERGETICI** ...

...e ad ogni livello energetico possono esistere solo ben definiti tipi di orbitale (in un numero ben preciso) ...

Al 1° livello:	1 orbitale di tipo s	1s: <input type="checkbox"/>
Al 2° livello:	1 orbitale di tipo s	2s: <input type="checkbox"/>
	3 orbitali di tipo p	2p: <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
Al 3° livello:	1 orbitale di tipo s	3s: <input type="checkbox"/>
	3 orbitali di tipo p	3p: <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
	5 orbitali di tipo d	3d: <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>

....e così via....

I diversi tipi di orbitale (s, p, d, f) differiscono per la forma delle zone di massima probabilità di localizzare l'elettrone.

Vedremo di seguito uno schema più completo con i diversi orbitali ai diversi livelli energetici: gli elettroni andranno ad occupare tali orbitali seguendo alcune regole...

RIEMPIMENTO DEGLI ORBITALI E CONFIGURAZIONE ELETTRONICA

RIEMPIMENTO DEGLI ORBITALI

- 1 - Si "riempiono" prima gli orbitali a più bassa energia.
- 2 - In ogni orbitale possono trovarsi al massimo 2 elettroni, (con 'spin' opposto: $\uparrow\downarrow$).
- 3 - A parità di energia, gli elettroni si disporranno, se c'è posto, non accoppiati.

L'elenco degli orbitali in cui si trovano gli elettroni, con il numero di elettroni presenti, costituisce la "configurazione elettronica dell'atomo".

<p style="text-align: center;">Ossigeno, ha 8 elettroni.</p> <p style="text-align: center;">Configurazione elettronica:</p> <p style="text-align: center;">$1s^2 2s^2 2p^4$</p>	<p style="text-align: center;">Sodio, ha 11 elettroni.</p> <p style="text-align: center;">Configurazione elettronica:</p> <p style="text-align: center;">$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$</p>
--	---

configurazione elettronica degli elementi

- H $1s^1$
- He $1s^2$
- Li $1s^2 2s^1$
- Be $1s^2 2s^2$
- B $1s^2 2s^2 2p^1$

..... e così via

configurazione elettronica ESTERNA e COMPORTAMENTO CHIMICO

L'identità chimica degli elementi dipende da come gli atomi interagiscono tra di loro...

... e quindi da come si comportano gli elettroni "più esterni"

(cioè gli elettroni al livello energetico più alto)

ci interessa quindi la configurazione elettronica ESTERNA degli elementi

(cioè considerando solo gli elettroni al livello energetico più alto, quindi più 'esterni')

H	s^1	Na	s^1
He	s^2	Mg	s^2
Li	s^1	Al	$s^2 p^1$
Be	s^2	Si	$s^2 p^2$
B	$s^2 p^1$	P	$s^2 p^3$
C	$s^2 p^2$	S	$s^2 p^4$
N	$s^2 p^3$	Cl	$s^2 p^5$
O	$s^2 p^4$	Ar	$s^2 p^6$
F	$s^2 p^5$	K	s^1
Ne	$s^2 p^6$	Ca	s^2
		

... e si osserva che si ripete "periodicamente" !

(ad es. Be, Mg, Ca,... hanno la stessa configurazione elettronica esterna)

mettendo in colonna gli atomi con la stessa configurazione elettronica esterna salta fuori proprio la tavola periodica degli elementi ...

orbitali s												orbitali p											
H													B	C	N	O	F	Ne					
Li	Be												Al	Si	P	S	Cl	Ar					
Na	Mg												Ga	Ge	As	Se	Br	Kr					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn		In	Sn	Sb	Te	I	Xe					
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd		Tl	Pb	Bi	Po	At	Ra					
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg												
Fr	Ra	Ac																					
										orbitali f													
										Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
										Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

... che Mendeleev aveva costruito, il secolo precedente, basandosi SUL COMPORTAMENTO CHIMICO !

RAPPRESENTAZIONE DI LEWIS DELLA CONFIGURAZIONE ELETTRONICA ESTERNA

(per gli **ELEMENTI TIPICI**, mentre per metalli di transizione e terre rare il problema si complica...)

Elementi dello **STESSO GRUPPO** hanno la **STESSA CONFIGURAZIONE ELETTRONICA ESTERNA**

(per cui ci basta conoscere la configurazione di un elemento di ogni gruppo: per gli altri sarà la stessa!!)

Consideriamo gli "elementi tipici" (cioè quelli dei gruppi in cui sono in riempimento gli orbitali s e p):
e indichiamo gli elettroni non accoppiati in un orbitale con • e quelli accoppiati con ••.

Al 1° livello c'è solo un orbitale s □ (max 2 elettroni) quindi elementi H e He:

elem.	n° atomico = n° e ⁻ tot.	n° e ⁻ esterni	configurazione elettronica esterna	rappresent. di Lewis:
H	1	1	↑	•H
He	2	2	↑↓	:He

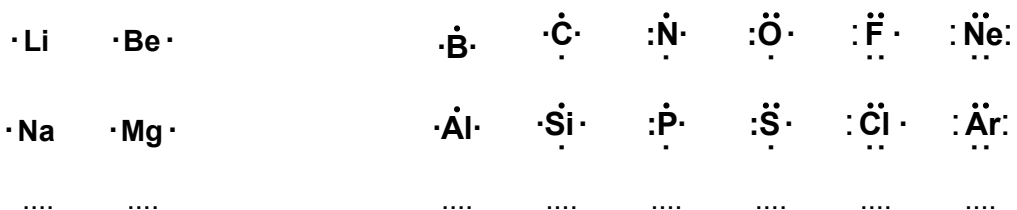
Dal 2° livello hanno a disposizione (al livello più esterno) **1 orbitale s** e **3 orbitali p**:

s □ p □□□ (cioè 4 orbitali in cui possono stare **al max 8 elettroni**)

elem.	n° atomico = n° e ⁻ tot.	n° e ⁻ esterni	gruppo n°	configurazione elettronica esterna*	rappresent. di Lewis:
Li	3	1	1	↑ □ □ □	•Li
Be	4	2	2	↑ ↑ □ □	•Be•
B	5	3	3	↑ ↑ ↑ □	•B•
C	6	4	4	↑ ↑ ↑ ↑	•C•
N	7	5	5	↑↓ ↑ ↑ ↑	:N•
O	8	6	6	↑↓ ↑↓ ↑ ↑	:O•
F	9	7	7	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑	:F•
Ne	10	8	8	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	:Ne:

* in realtà gli orbitali p hanno energia leggermente superiore agli s, ma la differenza non è così grande da sfavorire le configurazioni con gli elettroni "non accoppiati" riportata per Be, B e C.

La stessa configurazione si ripete per gli altri elementi del gruppo!



Esempio: Bromo ⇒ 7° gruppo ⇒ 7 e⁻ esterni ⇒ •Br•

LA CONFIGURAZIONE DI LEWIS CI SERVIRÀ A SPIEGARE E PREVEDERE I LEGAMI CHIMICI

orbitali e livelli energetici negli atomi

(schema generale approssimativo)

