

## • Capitolo 3 •

### I MODELLI ATOMICI



#### FOCUS

1. Scopriremo i modelli atomici e gli esperimenti che hanno portato alla loro scoperta.
2. Impareremo a capire il passaggio dai modelli atomici classici a quelli quantomeccanici
3. Impareremo a capire la differenza tra le teorie deterministiche e quelle probabilistiche.

#### 3.1 QUALI SONO I MODELLI ATOMICI?

I modelli atomici che si sono susseguiti cronologicamente possono essere raggruppati in:

- Modelli atomici classici
- Modelli atomici quantistici semiclassici
- Modelli atomici quanto-meccanici

##### 3.1.1 Modelli atomici classici

Al fine di descrivere in modo adeguato le nuove caratteristiche che si evidenziavano a livello subatomico (scoperta di particelle cariche come gli elettroni e parti del nucleo caricato positivamente) vennero proposti nei primi anni del '900, diversi modelli atomici.

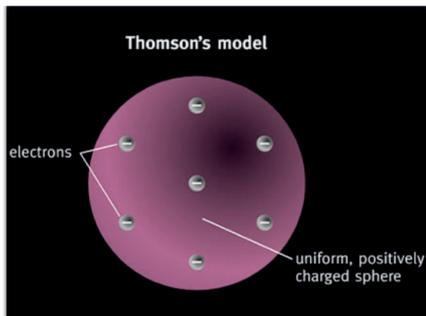
##### 3.1.1.1 Modello di Thomson

Nel 1904 **J.J. Thomson** ipotizzò che gli atomi fossero costituiti da una massa carica positivamente, uniformemente distribuita, all'interno della quale erano presenti gli elettroni, carichi negativamente, in numero tale da determinare l'equilibrio delle cariche e quindi la neutralità. In base a quanto fino ad allora scoperto, Thomson propose un nuovo modello della struttura atomica superando quella di Dalton ed affermando:

L'atomo è come una sfera omogenea carica di elettricità positiva nel cui interno sono immersi gli elettroni (Una sorta di panettone nel quale erano casualmente disposte delle uvette - gli elettroni -)

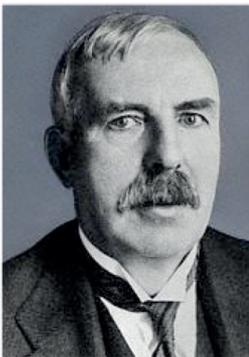


Questo modello molto semplice e razionale doveva essere confermato da dati sperimentali. Tra le varie tecniche usate, quella che maggiormente dava risultati in linea con le considerazioni teoriche era lo **scattering**, ancora oggi utilizzata per sondare la struttura della materia. Con questa tecnica si studiano gli effetti di *deflessione* (deviazione) che le cariche positive dell'atomo, producono su particelle dotate della stessa carica positiva quando queste vengono "sparate" contro l'atomo stesso.



Rappresentazione del modello atomico "a panettone" di J.J. Thomson (1904)

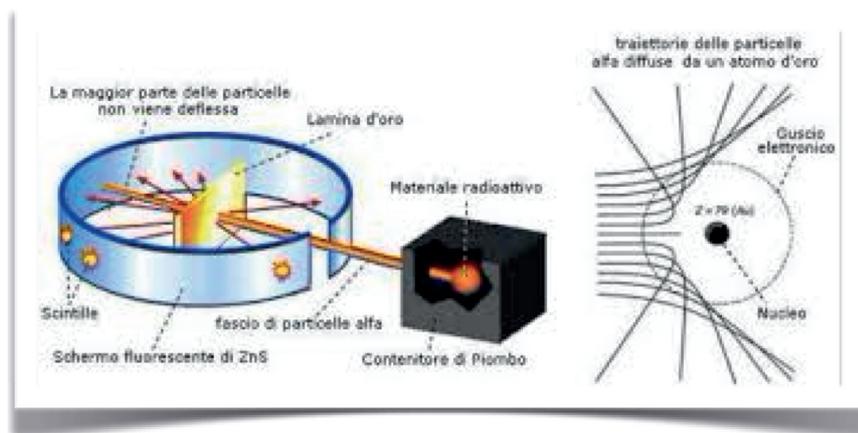
### 3.1.1.2 Modello di Rutherford



Nel 1911 Rutherford e i suoi studenti, a conclusione di una serie di esperimenti di scattering condotti su alcuni atomi, misero a punto un esperimento che portò alla costruzione del modello nucleare

L' esperimento di Rutherford consisteva nel far collidere particelle  $\alpha$  positive sprigionate da polonio radioattivo contro sottilissimi fogli metallici di oro. Il comportamento delle particelle  $\alpha$  veniva rilevato da uno schermo fluorescente posto intorno alla lamina d'oro; egli osservò che:

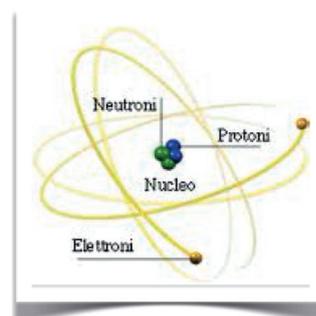
- la maggior parte delle particelle attraversava indisturbata la lamina d'oro
- alcune particelle subivano significative deflessioni
- alcune particelle, anche se poche, rimbalzavano indietro
- il numero delle particelle deviate risultava correlato alla massa dell'atomo bombardato.



Dai risultati di questo esperimento, Rutherford mise in evidenza i limiti del modello di Thomson che si rivelò sbagliato in quanto, se la carica positiva fosse stata diffusa cioè distribuita uniformemente su tutto il volume atomico, le particelle  $\alpha$  sarebbero dovute rimbalzare in numero molto maggiore. Rutherford, meravigliato dai risultati del suo esperimento ebbe a dire: *“è come se, bombardando con palle di cannone un foglio di carta, un certo numero di esse, anche se molto esiguo, possano tornare indietro”*.

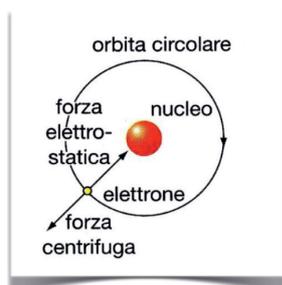
Al fine di spiegare i risultati ottenuti dalla sua esperienza Rutherford ipotizzò che:

- visto l'alto numero di particelle in grado di attraversare la lamina senza subire deflessione, la struttura atomica fosse estremamente rarefatta, cioè l'atomo fosse costituito essenzialmente da spazio vuoto.
- La deflessione e le poche particelle che tornavano indietro era provocata dalla repulsione o dalla vicinanza tra particelle alfa incidenti ed una carica positiva estremamente concentrata, il cui valore cresceva al crescere della massa dell'atomo.



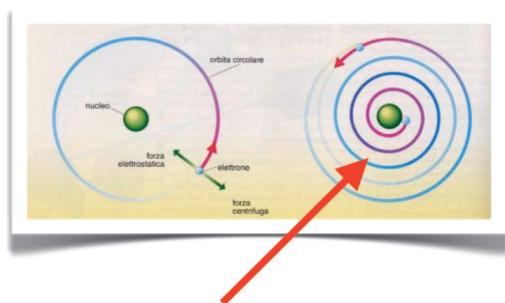
Rutherford, che era partito per giustificare il modello atomico di Thomson, propose, alla luce delle ultime due considerazioni sopra esposte, un nuovo modello atomico, detto **modello planetario** (in analogia con il sistema planetario) con gli elettroni che ruotavano su un'orbita circolare a distanza elevata dalla zona centrale dell'atomo costituita dal nucleo. Per non cadere nel nucleo, attirati dalla carica positiva in esso presente, gli elettroni negativi dovevano possedere un'energia cinetica e quindi una forza che agiva in senso opposto a quella attrattiva.

Da calcoli effettuati sugli angoli di deviazione, Rutherford giunse a calcolare che, mentre l'atomo doveva possedere un diametro dell'ordine di  $10^{-8}$  cm, il nucleo avrebbe dovuto presentare un diametro dell'ordine di  $10^{-12}$  cm, cioè il nucleo era circa 10000 volte più piccolo dell'intero atomo (se ipotizziamo le dimensioni del nucleo pari a quelle della terra, l'elettrone più vicino dovrebbe stazionare su una orbita geo-stazionaria di un satellite per telecomunicazioni cioè a circa 35.700km di altezza).



Il modello di Rutherford presentava tuttavia gravi limitazioni:

- come previsto dalle leggi della fisica classica, gli elettroni che ruotano intorno al nucleo dovrebbero perdere velocità e quindi energia cinetica sotto forma di emissione di radiazione elettromagnetica, finendo per cadere sul nucleo (annichilimento)
- gli atomi, in opportune condizioni, sono, invece, in grado di emettere e assorbire radiazioni elettromagnetiche secondo modalità che il modello planetario di Rutherford non era in grado di giustificare.

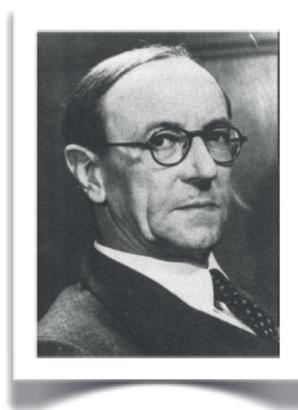


**Annichilimento**

Fu pertanto necessario introdurre un nuovo modello atomico. Ma prima di parlarne è necessario affrontare il problema della natura della radiazione elettromagnetica e dei fenomeni di interazione che essa manifesta con la materia e di cui tratteremo nel par. 3.6.

**3.2 COME SONO STATI SCOPERTI IL PROTONE ED IL NEUTRONE?**

Rutherford propose di chiamare protone il nucleo dell'elemento più leggero, l'idrogeno e l'esistenza dei protoni venne confermata nel 1925 da Blackett. **J. Chadwick** nel 1932, scoprì una nuova particella: *il neutrone*. Bombardando il Berillio con particelle  $\alpha$  scoprì che nei nuclei sono presenti anche particelle neutre, aventi una massa dello stesso ordine di grandezza del protone, anche se leggermente superiore, che vennero chiamati neutroni.



Protone e neutrone hanno massa rispettivamente  $1,673 \cdot 10^{-24}$  g e  $1,675 \cdot 10^{-24}$  g, ma mentre il primo presenta la più piccola carica elettrica positiva esistente ( $+1,602 \cdot 10^{-19}$  Coulomb) indicata con +1, il secondo non presenta carica. La massa dell'elettrone vale  $9,11 \cdot 10^{-28}$  g e la sua carica ( $-1,602 \cdot 10^{-19}$  Coulomb) è la più piccola carica elettrica negativa esistente, indicata con -1. La seguente tabella riassume le principali caratteristiche delle particelle sub-atomiche.

NOME	SIMBOLO	MASSA ASSOLUTA	MASSA RELATIVA	CARICA ASSOLUTA	CARICA RELATIVA
Elettrone	$e^-$	$9,11 \cdot 10^{-28}$ g	1/1836	$-1,602 \cdot 10^{-19}$	-1
Protone	p	$1,673 \cdot 10^{-24}$ g	1	$+1,602 \cdot 10^{-19}$	+1
Neutrone	n	$1,675 \cdot 10^{-24}$ g	1	nulla	nulla

Come si può vedere la massa di un atomo viene determinata esclusivamente da neutroni e protoni poiché il contributo degli elettroni è assolutamente trascurabile.

**PER SAPERNE DI PIU'**

Studi più recenti hanno dimostrato che solo l'elettrone è una particella fondamentale, mentre protone e neutrone sono costituiti da particelle più piccole: i **quark** che a loro volta sono tenuti insieme dai **gluoni**. I quark si suddividono in *up-quark*, aventi carica positiva e valore pari a 2/3 di quella dell'elettrone, e *down-quark* aventi carica negativa e valore pari a 1/3 di quella dell'elettrone.

- **Esercizio:** Se il protone ha carica convenzionale +1 mentre il neutrone 0, quanti up-quark e downquark sono presenti nel protone e nel neutrone?

### 3.3 NUMERO ATOMICO, NUMERO DI MASSA.

Ogni elemento (atomo) è contraddistinto da un *numero atomico*, indicato con la lettera Z che corrisponde esattamente al numero di protoni presenti nell'atomo neutro. Essendo l'atomo neutro (stesso numero di cariche positive e negative), il numero degli elettroni è uguale al numero dei protoni. Ad esempio il carbonio (C) per il quale Z vale 6 ha 6 protoni e 6 elettroni. I neutroni sono invece in numero variabile.

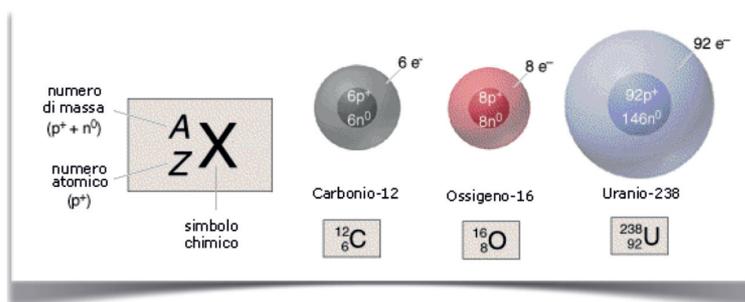


**NUMERO ATOMICO:**  
 è il numero di protoni presenti nel nucleo di un atomo e si indica con la lettera Z

- La massa del protone viene posta, convenzionalmente, uguale a 1 e così pure quella del neutrone. La massa dell'elettrone è invece trascurabile, visto che è 1836 volte più piccola di quella del protone.
- La massa dell'atomo sarà quindi concentrata nel nucleo. La somma dei protoni e dei neutroni è detta *numero di massa* e viene contraddistinta dalla lettera A.

**NUMERO DI MASSA:**  
 è la somma dei protoni e dei neutroni e si indica con la lettera A

Nell'esempio che segue, il carbonio-12 ( $^{12}\text{C}$ ) ha nel nucleo 6 protoni e 6 neutroni, quindi ha massa atomica A uguale a 12 (6 + 6), l'ossigeno-16 ( $^{16}\text{O}$ ) ha nel nucleo 8 protoni e 8 neutroni, quindi ha massa atomica 16 e l'Uranio-238 ( $^{238}\text{U}$ ) ha nel nucleo 92 protoni e 146 neutroni, quindi massa atomica 238.



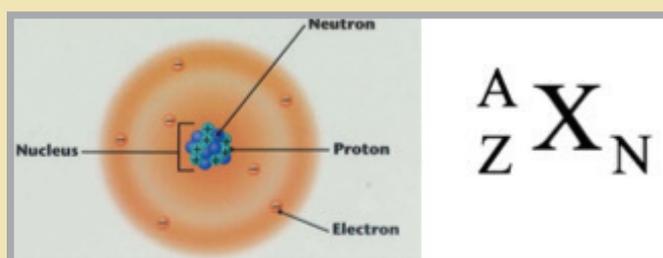
Ogni singola specie nucleare individuata da un numero atomico e da un numero di massa è detto **nuclide**: il numero atomico Z viene scritto in basso a sinistra del simbolo dell'elemento il numero di massa A viene scritto invece in alto a sinistra.

### Ricapitolando:

Il nucleo atomico è caratterizzato da:

- numero atomico (Z) che indica il numero di protoni
- numero di massa (A) che indica la somma dei protoni e neutroni (nucleoni)

Se indichiamo con N il numero di neutroni possiamo scrivere  $A = N + Z$



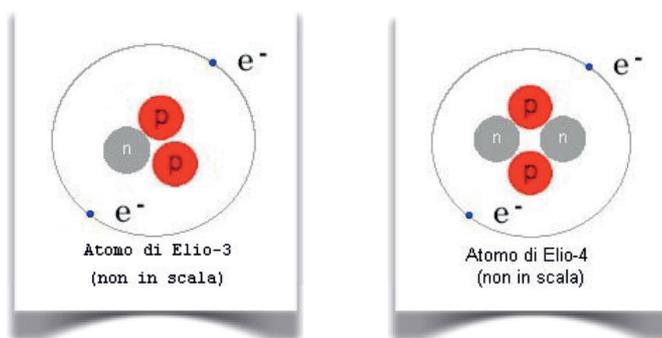
### 3.4 GLI ISOTOPI

Possono esistere forme diverse dello stesso elemento con uguale numero atomico ma differente numero di massa. Tali forme sono dette *isotopi* e possiedono identiche proprietà chimiche (la parola isotopo deriva da un termine greco che significa "stesso posto" ad indicare che gli isotopi avendo lo stesso Z occupano lo stesso posto nella tavola periodica).

Per restare all'esempio del carbonio esistono, in natura, 3 isotopi e precisamente:  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{C}$

- Il carbonio 12 con 6 protoni e 6 elettroni + 6 neutroni;
- Il carbonio 13 con 6 protoni e 6 elettroni + 7 neutroni;
- Il carbonio 14 con 6 protoni e 6 elettroni + 8 neutroni.

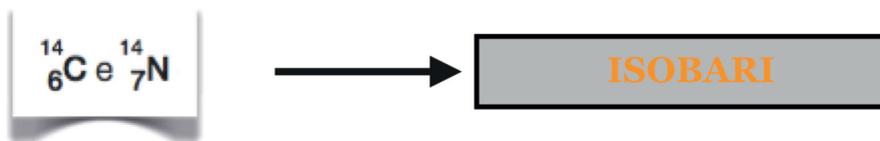
Altri esempi:  $^3\text{He}$  e  $^4\text{He}$



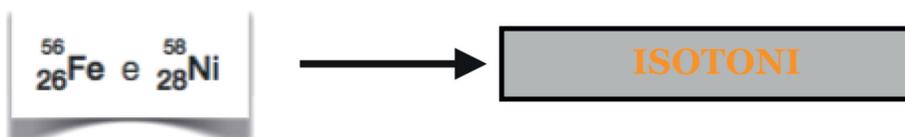
A titolo di ulteriore esempio vengono riportati in tabella i tre isotopi esistenti dell'idrogeno:

SIMBOLO	$^1\text{H}$	$^2\text{H}$	$^3\text{H}$
Nome	Prozio	Deuterio	Trizio
Z	1	1	1
A	1	2	3
N	0	1	2

Esistono nuclidi con lo stesso numero di massa e diverso numero atomico che vengono definiti **isobari**:



e nuclidi con uguale numero di neutroni definiti isotoni



### 3.5 MASSA ATOMICA E MOLECOLARE

Nella prima metà dell'Ottocento, soprattutto ad opera di **Berzelius** (1779-1849), si conoscevano una cinquantina di elementi chimici e qualche migliaio di sostanze ricavate dalla combinazione degli elementi stessi. Per gli studi quantitativi era necessario conoscere le loro masse atomiche e quindi le masse delle sostanze. Ricordiamo che l'atomo è composto da elettroni, protoni e neutroni che hanno masse molto piccole:

$$\begin{aligned} \text{massa elettrone} &= 9.1 \times 10^{-28} \text{ g} \\ \text{massa protone} &= 1.67 \times 10^{-24} \text{ g} \\ \text{massa neutrone} &= 1.67 \times 10^{-24} \text{ g} \end{aligned}$$

Pertanto il valore assoluto della massa dell'atomo come somma dei valori assoluti delle masse dei suoi componenti non risulta comodo, in quanto molto piccolo per essere utilizzato nei comuni calcoli, per cui è sorta l'esigenza di definire un'unità di misura più comoda per esprimere la massa degli atomi e delle molecole.

Si ritenne quindi di confrontare la massa di un atomo con un altro preso come riferimento. Inizialmente venne scelto l'idrogeno (l'elemento conosciuto avente massa minore) e successivamente fu ipotizzato il calcolo delle masse atomiche relative all'Ossigeno (in quanto elemento necessario alla vita) ed in particolare alla sedicesima parte dell'isotopo dell'ossigeno presente in maggiore quantità e cioè  ${}^{16}\text{O}$ . Oggi non si usa più né l'idrogeno e né l'Ossigeno come unità di misura, ma la dodicesima parte (1/12) della massa dell'isotopo del Carbonio 12 ( ${}^{12}\text{C}$ ).

Tale quantità è oggi nota come unità di massa atomica (u.m.a. o u o Dalton).

**Unità di massa atomica (u.m.a.)  
è la dodicesima parte della massa  
dell'atomo di carbonio 12 ( ${}^{12}\text{C}$ )**

E' possibile ricavare il valore in grammi (massa assoluta) dell'u.m.a.:

$$u_{ma} = \frac{\text{massa}^{12}\text{C}}{12} = \frac{2,0088 \times 10^{-23} \text{ g}}{12} = 1,67 \times 10^{-24} \text{ g}$$

Utilizzando dunque come fattore di conversione (approssimato)  $1,67 \cdot 10^{-24}$  g/u.m.a. è possibile trasformare le masse relative (esprese in u.m.a.) in masse assolute (espressi in g).

$$M_{(ass)} (g) = M_{(rel)} (u.m.a.) \times 1,67 \cdot 10^{-24} (g/uma)$$

Ad esempio la massa atomica assoluta del Carbonio 12 è  
 Ma C =  $12 (u.m.a.) \times 1,67 \cdot 10^{-24} (g/u.m.a.) = 2,0088 \cdot 10^{-23} (g)$

La maggior parte degli elementi presenta degli isotopi; per calcolarne **la massa atomica relativa** bisogna quindi usare la media ponderata (pesata) tra i diversi isotopi in riferimento alla loro distribuzione percentuale.

**La massa atomica relativa è la media ponderata di tutti gli isotopi dell'elemento in relazione alla loro distribuzione percentuale espressa in u.m.a.**

**ESEMPIO**

Il Magnesio ha i seguenti isotopi con relative percentuali  
 Mg-24 (78,70%) ; Mg-25 (10,13%) ; Mg-26 (11,17%)

Quindi la massa atomica relativa del Magnesio sarà:

$$MA(Mg) = \frac{(24 \times 78,70) + (25 \times 10,13) + (26 \times 11,17)}{100} = \frac{1888,8 + 253,25 + 290,42}{100} = 24,32 \text{ uma}$$

**La massa delle molecole** (massa molecolare MM) è la somma delle masse dei singoli atomi che la compongono. Si esprime anch'essa in uma essendo una massa relativa. Si può comunque determinare la massa assoluta delle molecole moltiplicando la massa in u.m.a. per  $1,67 \times 10^{-24}$  g (massa in grammi dell'u.m.a.)

**ESEMPIO**

La massa molecolare dell'acqua, H<sub>2</sub>O, si ottiene sommando la massa atomica dell'ossigeno a quella dell'idrogeno moltiplicando quest'ultima per due:

$$MM (H_2O) = 15,9994 \text{ uma} + 2 \times 1,0079 \text{ uma} = 18,0152 \text{ uma}$$

**RICORDA**

**Le masse atomiche espresse in u.m.a. sono MASSE ATOMICHE RELATIVE così come la MASSA MOLECOLARE (somma delle masse atomiche relative degli atomi componenti la molecola) anche essa espressa in u.m.a. o u.m.m. (unità di massa molecolare) .**

## PER SAPERNE DI PIU'

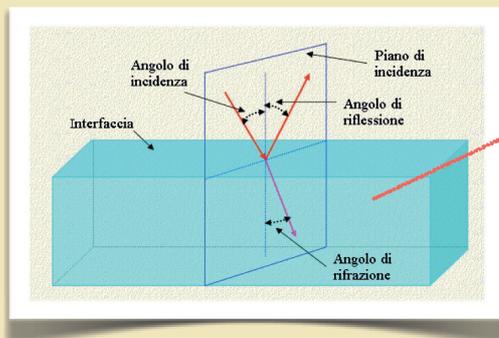
### Modello ondulatorio e corpuscolare a confronto

La disputa intorno alla natura della luce nacque nel '600 ; tra i protagonisti sono da annoverare Isaac **Newton (1642-1727)** ed il fisico olandese **C. Huygens (1629-1695)**. Newton, sostenitore della teoria atomica corpuscolare, riteneva che la luce fosse formata da particelle che:

- si propagavano in tutte le direzioni in linea retta
- erano soggette alle leggi della meccanica che, come egli stesso aveva scoperto, governavano tutti i corpi.

Huygens riteneva invece che la luce fosse un fenomeno ondulatorio, simile "alle onde sonore che fanno vibrare l'aria o alle onde di energia meccanica che increspano la superficie dell'acqua".

Entrambi i modelli erano in grado di giustificare, in prima approssimazione, il comportamento dei raggi luminosi, ma non l'effetto fotoelettrico).

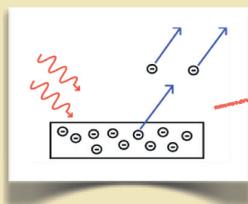


### Fenomeni di riflessione e rifrazione

Newton contestava ad Huygens il fatto che, se la luce fosse stata un fenomeno ondulatorio, avrebbe dovuto aggirare gli ostacoli, come faceva il suono.

Attraverso il suo modello ondulatorio Huygens riuscì a spiegare i fenomeni di riflessione e quelli di rifrazione ma L'avvento della meccanica quantistica agli inizi del XX secolo ha permesso di capire che la luce possiede anche proprietà tipiche delle particelle e di spiegare fenomeni come l'effetto fotoelettrico.

Nella fisica moderna la luce (e tutta la radiazione elettromagnetica) viene composta da unità fondamentali, o quanti chiamati **fotoni**.



### Effetto fotoelettrico

La svolta si ebbe nel 1900, quando **Max Planck** ebbe un'intuizione che, come spesso accade nell'attività scientifica fu casuale. Planck, con i suoi studi, propose che le onde elettromagnetiche non potessero essere emesse da una sorgente raggianti in modo continuo, ma solo sotto forma di pacchetti d'onda che chiamò quanti.

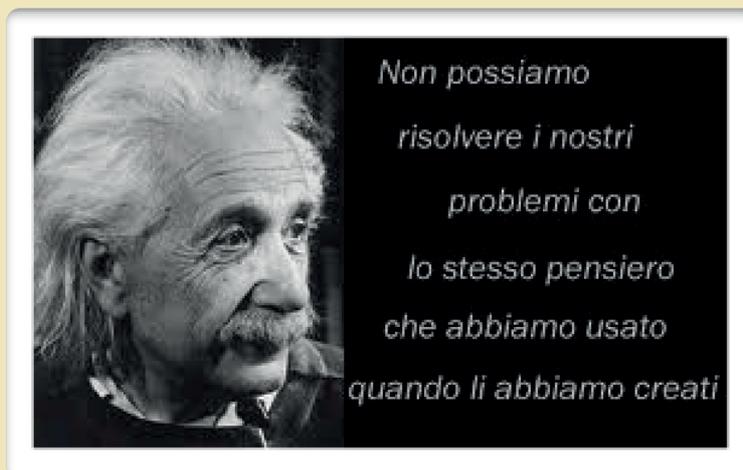
Ogni quanto possedeva una certa quantità di energia che dipendeva dalla lunghezza d'onda della luce, secondo la relazione:  $E = h\nu$

dove  $\nu$  è la frequenza della radiazione e  $h$  è una costante, detta costante di Planck che vale  $6,62559 \cdot 10^{-34} J \cdot s$ .

La luce non poteva dunque più essere considerata solo un fenomeno ondulatorio, visto che in alcuni casi aveva un comportamento corpuscolare. Nacque quindi l'idea di un comportamento duale della luce:

- si utilizza il modello ondulatorio per descrivere i fenomeni di propagazione della radiazione elettromagnetica
- si utilizza il modello corpuscolare per descrivere i fenomeni di interazione con la materia (emissione ed assorbimento)

Pochi anni più tardi, nel 1905 **Albert Einstein** confermò la descrizione quantistica della radiazione, utilizzando l'ipotesi di Planck per spiegare l'effetto fotoelettrico e suggerì di trattare le radiazioni come particelle dotate di energia  $E = h\nu$ , che chiamò fotoni.



## ESERCIZI DA SVOLGERE



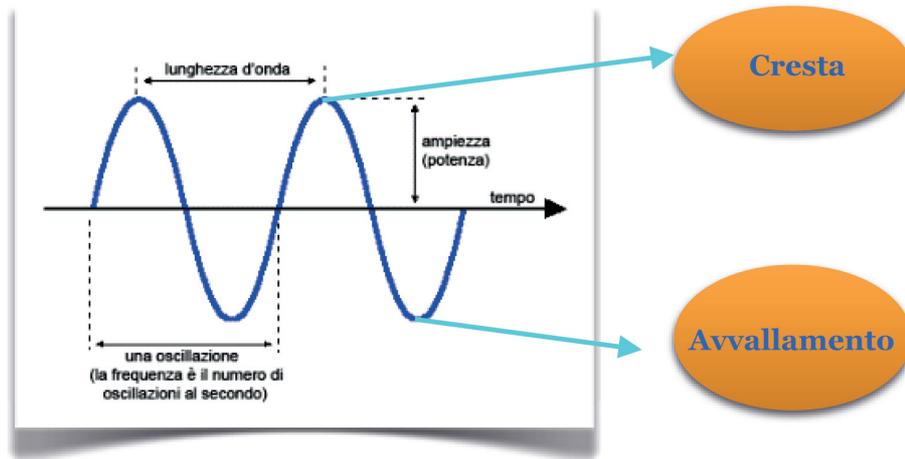
- Quanti neutroni sono presenti in  ${}^{70}_{32}\text{Ge}$
- Scrivi, nella forma  ${}^A_Z X$  l'isotopo del Rame che presenta nel suo nucleo 36 neutroni
- Quanti elettroni presenta il catione  $\text{Al}^{3+}$  se l'atomo di Alluminio ha numero atomico 13?
- ${}^{65}_{29}\text{Cu}$   ${}^{66}_{30}\text{Zn}$  hanno lo stesso numero di neutroni (isotoni) ?
- Il Calcio-40 ed il Calcio-45 hanno lo stesso numero di massa A (isobari)?
- Quanti elettroni presenta l'anione  $\text{S}^{-2}$  se lo zolfo ha numero atomico 16?
- Quanti elettroni presenta complessivamente l'anione  $\text{CO}_3^{2-}$  se il Carbonio ha numero atomico 6 e l'Ossigeno 8 ?
- Quanti protoni presenta il catione  $\text{Cu}^{2+}$  se il rame ha numero atomico 29?

**Determinare la massa atomica relativa (approssimato alla 1ª cifra decimale) dei seguenti elementi di cui sono fornite, tra parentesi, le abbondanze isotopiche percentuali:**

- K-39 (93,10%) K-41 (6,9%)
- B-10 (19,78%) B-11 (80,22%)
- Ti-46 (7,93%); Ti-47 (7,28%); Ti-48 (73,94%); Ti-49 (5,51%); Ti-50 (5,34%)

### 3.6 LA RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA

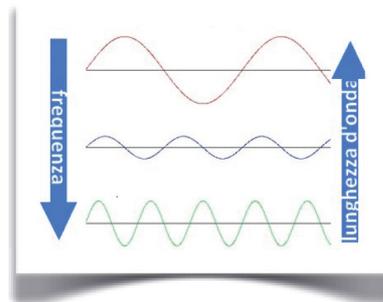
La luce (dal latino *lux*) si definisce come un tipo particolare di radiazione elettromagnetica visibile dall'occhio umano. Le onde elettromagnetiche sono classificate in base alla lunghezza d'onda  $\lambda$  (lambda) che è la distanza tra due creste consecutive di un'onda e si misura in metri o in base alla frequenza  $\nu$  che è il numero di onde complete in 1 sec e si misura in Hz (herz o 1/s).



E' intuitivo quindi che la lunghezza d'onda sia inversamente proporzionale alla frequenza (onde con maggiore frequenza infatti hanno le creste più vicine).

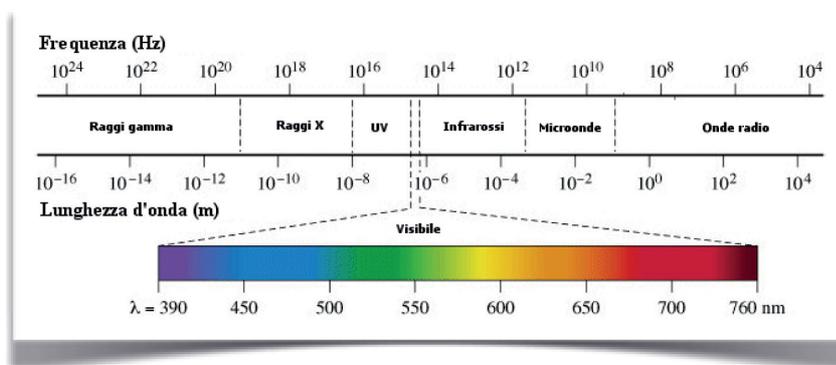
La relazione che unisce le grandezze è:

$$\lambda = c / \nu$$



con  $c$  = velocità della luce ( $\sim 3 \times 10^8$  m/s o 300.000 Km/s).

La classificazione di tutte le onde elettromagnetiche in funzione della lunghezza d'onda espressa in cm (ma sono frequenti come unità di misura anche il metro, l'Ångström e il micron) è detta **spettro elettromagnetico**.



Come evidenziato in figura le onde elettromagnetiche che il nostro occhio riesce a vedere rappresentano solo una piccola porzione dell'intero spettro, compresa tra  $\lambda = 390$  nm (nanometri) che è la lunghezza d'onda del violetto e  $\lambda = 760$  nm che è la lunghezza d'onda del rosso.

L'essere umano riesce a percepire ciascuna lunghezza d'onda all'interno di tale intervallo, detto **spettro visibile**, come un colore diverso: il rosso, poi arancione, giallo, verde, blu, violetto. Le onde elettromagnetiche aventi lunghezza maggiore di 760nm sono classificate come *infrarosso, microonde, onde radar e onde radio*. *Le onde con lunghezza inferiori a 390nm sono classificate come ultravioletto, raggi X, raggi gamma.*

Le onde elettromagnetiche trasportano energia e l'energia trasportata da ciascuna radiazione è inversamente proporzionale alla sua lunghezza d'onda (direttamente proporzionale alla frequenza)

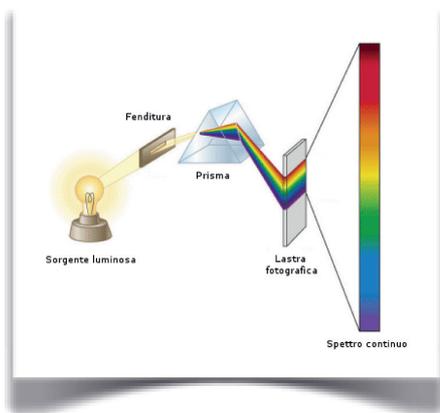
$$E = h \times \nu \text{ oppure } E = h \times c / \lambda$$

dove: E è l'energia espressa in Joule  
h è la costante di Planck e vale  $6,62559 \times 10^{-34}$  J·s  
ν è la frequenza espressa in Hz (1/s)

Ciò significa che la luce rossa è ad esempio meno energetica di quella blu in quanto ha una lunghezza d'onda maggiore e naturalmente una frequenza minore.

### 3.6.1 Cosa è uno spettro?

Quando un raggio di luce bianca colpisce obliquamente un prisma di vetro trasparente viene scomposto in tanti raggi di luce di diversi colori. La *luce bianca* è una mescolanza di lunghezze d'onda di tutti i colori. Il prisma di vetro non crea la luce di diversi colori, ma semplicemente separa i colori già contenuti nella luce bianca.



*Nell'arcobaleno i colori che si formano sono dovuti alla luce che attraversa le goccioline di umidità sospese nell'aria che funzionano da prisma.*

La separazione dei colori è dovuta al fatto che la deviazione dipende dalla lunghezza d'onda del raggio incidente, quindi essendoci nella luce bianca radiazioni di varia lunghezza d'onda, ciascuna radiazione sarà deviata in modo diverso. L'immagine che si può raccogliere su uno schermo, su una pellicola fotografica o come accade con l'arcobaleno avendo come sfondo il cielo, è detta spettro e mostra una serie di colori sfumati dal rosso al violetto.

Si distinguono due tipi di spettri:

- spettri di emissione spettri di assorbimento
- di assorbimento

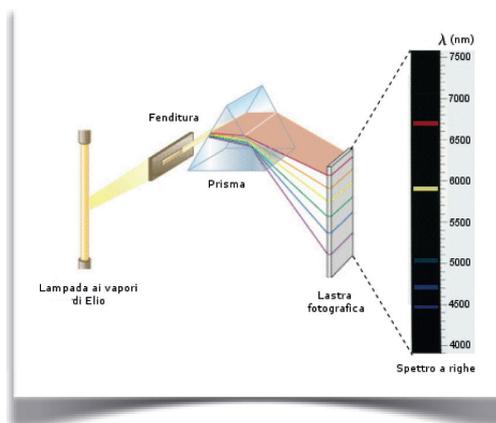
### 3.6.1.1 Spettri di emissione

Si formano ogni qualvolta la materia emette radiazione elettromagnetica. Si distinguono in spettri di emissione continui e spettri di emissione a righe.

#### Spettri di emissione continui:

- 1) sono emessi da una sorgente luminosa;
- 2) presentano tutti i colori dal rosso al violetto sfumati l'uno nell'altro;
- 3) sono emessi da corpi incandescenti, solidi, liquidi o gassosi

Sono esempi lo spettro solare e quello emesso da una lampada ad incandescenza.



#### Spettri di emissione a righe:

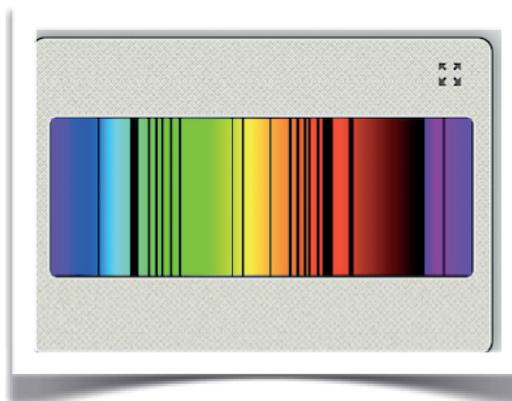
Si ottengono facendo passare attraverso un prisma la luce emessa da una sostanza gassosa riscaldata opportunamente attraverso una scarica elettrica o mediante una fiamma; lo spettro che si ottiene non è continuo ma è formato da una serie di righe di colore diverso ognuna delle quali corrisponde ad una determinata lunghezza d'onda, cioè a una determinata energia.



Spettro di emissione a righe dell'atomo di idrogeno

### 3.6.1.2 Spettri di assorbimento

Si ottengono quando la radiazione continua proveniente da una sorgente passa attraverso un gas od un vapore, e ciò che si constata è che, allo spettro continuo mancano certe radiazioni che, sono state assorbite dal gas interposto. In pratica si riscontra che i gas ed i vapori assorbono le stesse radiazioni che emettono (**legge di Kirchhoff 1859**), per cui lo spettro di assorbimento risulta l'esatto negativo dello spettro di emissione a righe.



### 3.7 MODELLI ATOMICI QUANTISTICI SEMICLASSICI

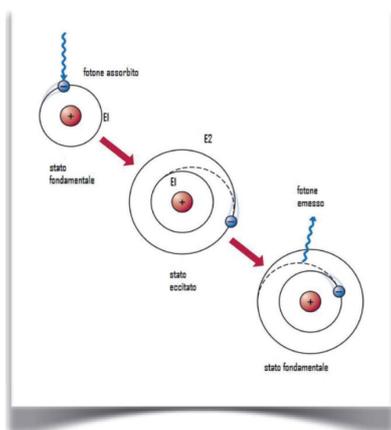
Il modello planetario di Rutherford risultava in contraddizione con i principi dell'elettrodinamica classica e doveva pertanto essere corretto.

N.Bohr decise di tentare la stessa strada di Planck per risolvere il problema degli spettri a righe in quanto non era in grado di spiegare il perché si producessero le righe spettrali che , con molta probabilità erano legate proprio alla struttura atomica

#### 3.7.1 Modello planetario di Bohr

Nuove evidenze sperimentali si fecero strada nei primi del novecento e portarono gli scienziati a non ritenere più valido il modello atomico di Rutherford che come è stato detto, presentava delle incongruenze.

Nel 1913 **Niels Bohr** elaborò un nuovo modello atomico tenendo conto del fenomeno di emissione ed assorbimento delle radiazioni da parte dei corpi.



Atomo colpito da un fotone di luce

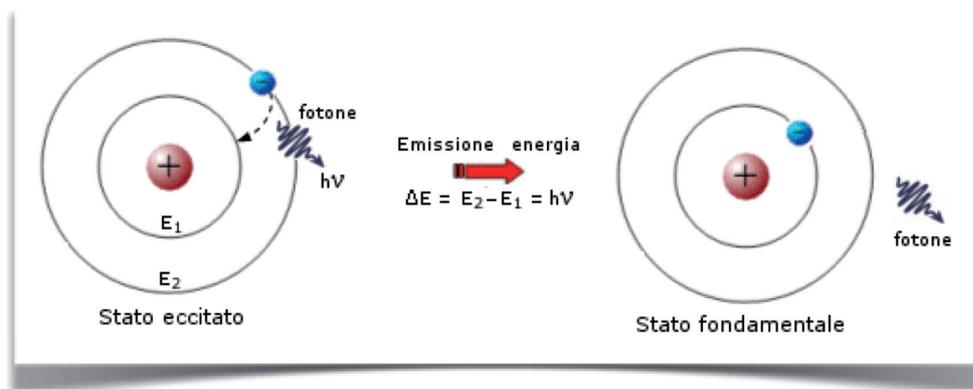
Bohr in modo geniale e spregiudicato, partendo da alcune ipotesi che erano in contrasto con le leggi della fisica, propose un nuovo modello atomico basato sul concetto di **quantizzazione** dell'energia. Secondo la teoria di Bohr, nel passare da un'orbita all'altra, l'elettrone emetteva una determinata quantità di energia o fotone di luce pari alla differenza di energia fra le orbite tra le quali avviene il salto elettronico.

Quando l'elettrone si trova in un'orbita superiore a quella in cui si trova normalmente, l'atomo possiede un eccesso di energia che lo rende instabile (eccitato). L'elettrone è quindi destinato a tornare nell'orbita di partenza riemettendo l'energia precedentemente assorbita tramite un fotone la cui energia è appunto pari a:



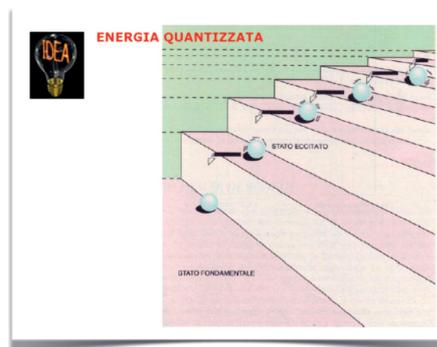
$$E_2 - E_1 = \Delta E = h\nu$$

L'energia quantizzata era determinata da un fattore o un numero che Bohr indicò col **numero quantico n** (detto principale) che, poteva assumere solo valori interi: 1,2,3, ecc.



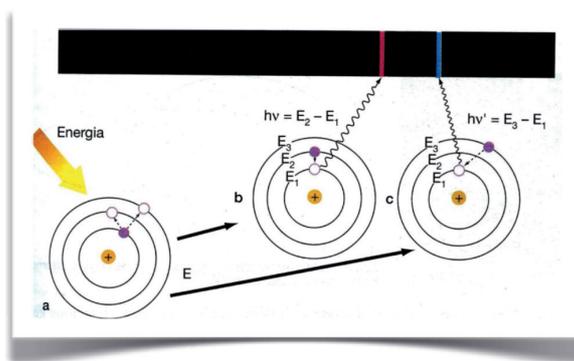
Nel modello di Bohr l'elettrone si comporta come una pallina che staziona su un gradino e può salire a un livello superiore, se acquista energia, o scendere a uno inferiore se la perde, ma lo fa sempre "saltando uno o più gradini" "L'energia che bisogna spendere per salire un gradino di una scala non è generica ma una quantità ben definita, che dipende dall'altezza dello scalino; se spendessi una energia per salire mezzo scalino non riuscirei a compiere la salita e se spendessi una energia

superiore a quella necessaria potrei salire un maggior numero di scalini, ma l'energia che dovrei spendere dovrà essere sempre un multiplo intero di quella da spendere per salire un gradino”.



Grande risonanza riscontrò nel mondo scientifico il modello di Bohr che contribuì alla comprensione degli spettri atomici sia di emissione che di assorbimento in quanto, fu dimostrato che la formazione delle righe sono dovute ai salti elettronici.

Dalla figura si osserva che quando ad un atomo si somministra energia, l'elettrone salta da un'orbita o livello energetico inferiore ad uno superiore e successivamente ritorna nello stato fondamentale emettendo energia pari al salto di orbita o di livello energetico effettuato. Ad ogni salto corrisponde una sola riga nello spettro.



### Modello atomico di Bohr

- La massa dell'atomo (protoni e neutroni) è localizzata nel nucleo, in accordo con Rutherford.
- Gli elettroni ruotano intorno al nucleo descrivendo orbite circolari di raggio crescente
- Gli elettroni non possono orbitare in posizioni casuali intorno al nucleo ma devono occupare certe orbite chiamate stazionarie o quantizzate ed a ciascuna delle quali è associata un ben preciso livello di energia.
- Un elettrone che si trova su una di queste orbite non emette onde elettromagnetiche e quindi non perde energia

Qualche esempio di manifestazioni visibili della teoria atomica dell'atomo di Bohr:

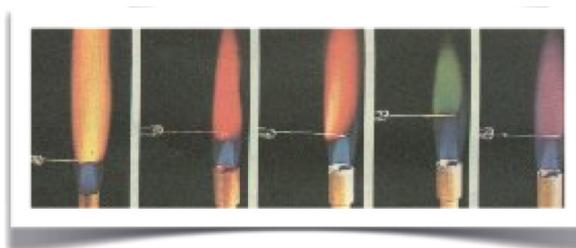
#### Fuochi pirotecnici

L'energia conseguente all'esplosione durante i fuochi d'artificio eccita gli atomi dei sali contenuti nella polvere pirica i quali atomi nel tornare nello stato fondamentale emettono radiazioni luminose di colore giallo se c'è del sodio, rosso se c'è litio, verde se c'è rame, violetto se c'è potassio e così via.



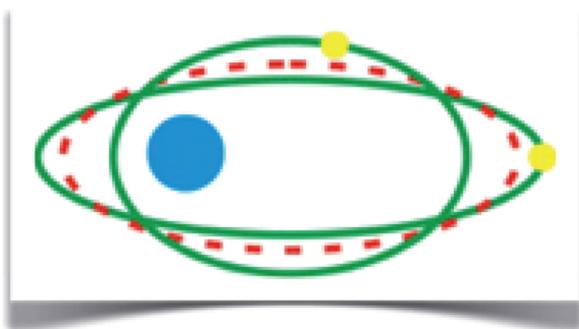
### Saggi alla fiamma

In chimica il saggio alla fiamma è una semplice tecnica di analisi qualitativa per verificare la presenza di ioni di metalli: metalli alcalini, alcalino-terrosi e alcuni metalli di transizione. Si basa sull'emissione di luce di determinate frequenze da parte degli atomi di un campione, eccitati per via termica.



### 3.7.2 Modello atomico di Bohr-Sommerfeld

Il modello planetario di Bohr aveva dei limiti e fra essi quello più evidente riguardava l'ipotesi che le orbite degli elettroni fossero circolari. Nel 1915 A. Sommerfeld portò alcune modifiche al modello di Bohr, introducendo anche le orbite ellittiche in cui il nucleo occupava uno dei due fuochi, in modo del tutto analogo a quanto accade per le orbite planetarie. Atomo di Sommerfeld (1915):



## PER SAPERNE DI PIU'

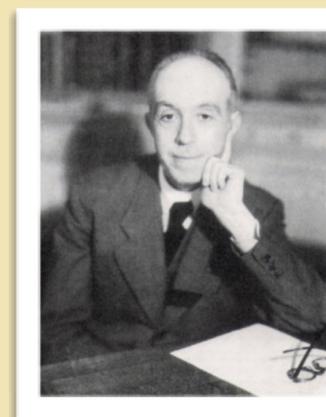
### Modelli atomici quanto-meccanici

Il modello di Bohr-Sommerfeld spiega con successo lo spettro a righe dell'idrogeno, ma i suoi limiti sono evidenti per questi motivi:

- a) i riferimenti alle leggi della fisica classica ed alla elettrodinamica erano ricorrenti ma dovevano porsi delle eccezioni non completamente spiegabili quali quella che, l'elettrone che ruota intorno al nucleo in orbite stazionarie non irraggiava radiazioni
- a) la condizione di quantizzazione era stata introdotta in modo del tutto arbitrario
- b) il modello otteneva risultati in linea con i dati sperimentali solo per lo spettro dell'idrogeno, mentre non era soddisfacente per gli atomi che avevano un numero di elettroni superiore ad 1

Il modello di Bohr-Sommerfeld fu rivisto con la nascita di una nuova meccanica, la **meccanica quantistica** e la conseguente introduzione di modelli atomici quantomeccanici.

La data di nascita della meccanica quantistica si può fissare al 1900 con la scoperta da parte di **Planck** del quanto di energia radiante. Ma il padre della meccanica quantistica è oggi considerato **Louis De Broglie**. Nel 1924 ipotizzò che al pari di delle radiazioni elettromagnetiche che avevano una **natura duale** (onda o particella) anche la materia poteva essere considerata e trattata con la teoria corpuscolare e con quella ondulatoria.



Secondo tale ipotesi ad ogni corpo è possibile associare un'onda, che De Broglie chiamava 'onda di materia'. Tale ipotesi doveva necessariamente essere dimostrata sperimentalmente, e tra il 1925 e il 1930 gli studi di diffrazione su reticoli di vari cristalli svolti da C.J. Davisson e L.H. Germer in U.S.A., da Otto Stern e G. Thomson (figlio di J.J. Thomson, curiosamente G. Thomson ricevette il premio Nobel per aver verificato la natura ondulatoria dell'elettrone, mentre in precedenza suo padre era stato insignito della stessa onorificenza per aver dimostrato la natura corpuscolare dell'elettrone) in Europa ne dimostrarono ampiamente la sua validità. In definitiva una cosa era il mondo macroscopico in cui la materia era definita e compatta da sembrare immutabile, altra cosa è quello microscopico, in cui tutto è in movimento. Un corpo in movimento poteva essere rappresentato da una quantità di moto  $p = h/\lambda$  oppure attraverso la lunghezza d'onda  $\lambda = h/p$

#### DIMOSTRAZIONE

$$E = h \nu \text{ (Planck)} \quad E = m c^2 \text{ (Einstein)}$$

$$\nu = \text{frequenza} \quad c = \text{velocità della luce}$$

quindi

$$E = h \nu = m c^2 \quad \text{quindi} \quad h \nu = m c \lambda$$

da cui

$$m c \lambda = \frac{h \nu}{c} \quad \text{poiché} \quad \lambda = \frac{c}{\nu}$$

$$m c \lambda = \frac{h}{\lambda} \quad \text{poiché} \quad m c \lambda = p \text{ (quantità di moto)} \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

#### Il principio di indeterminazione di Heisenberg

Heisenberg dimostrò che non è possibile misurare simultaneamente con una grande precisione due variabili coniugate.

Se consideriamo ad esempio le due variabili coniugate:

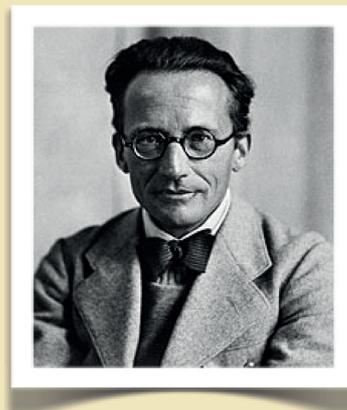
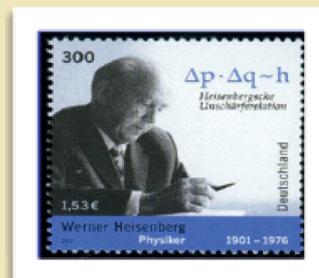
- posizione  $s$  di una particella rispetto all'origine di un sistema di riferimento nella direzione  $s$
- quantità di moto  $p = mv$  della medesima particella con  $m$  = massa della particella e  $v$  = velocità della particella

Heisenberg affermava il suo principio secondo il quale "È impossibile determinare sperimentalmente con precisione, contemporaneamente la posizione e la velocità di una particella di massa molto piccola". Nel mondo macroscopico, possiamo interagire senza limitazioni con gli oggetti della nostra conoscenza, misurarli ed ottenere informazioni da essi senza modificarli in modo sostanziale. Nel mondo subatomico non è per principio possibile trascurare le perturbazioni che le nostre misure arrecano alle stesse grandezze che misuriamo.

Per poter misurare la posizione di un elettrone noi dobbiamo interagire con esso inviandogli almeno un fotone (un quanto di energia), ma questa interazione altera in modo imprevedibile lo stato di moto dell'elettrone. Nel campo delle particelle atomiche e subatomiche è dunque necessario rinunciare alla pretesa di determinare in modo esatto tutte le variabili del moto. Alla classica visione deterministica del mondo è quindi necessario sostituire una *visione probabilistica*.

Quindi noi non possiamo prevedere i movimenti delle singole particelle perché siamo nell'impossibilità teorica, e non solo pratica, di conoscere con esattezza le condizioni iniziali.

Una sintesi dei risultati proposti dagli scienziati sopra citati, confermata dalla interpretazione probabilistica sulla materia elaborata da **Max Born** secondo cui l'onda associata ad una particella materiale deve essere interpretata in termini di probabilità di trovare la particella in un certo volume di spazio, può essere così riassunta: "la stabilità della materia era solo un'illusione del mondo macroscopico, a livello microscopico era necessario immaginare elettroni, protoni e atomi come delle nuvolette di materia pulsante senza contorni ben definiti"

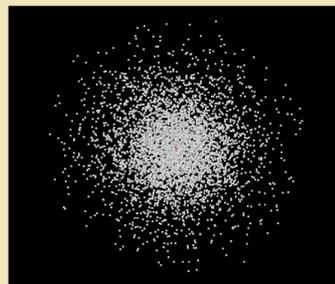


### Modello quantomeccanico dell'atomo di Schrödinger

Alla luce del principio di indeterminazione venne introdotto il **concetto di orbitale atomico** che va a sostituire quello di orbita. Gli orbitali atomici non sono altro che delle espressioni matematiche dette funzioni d'onda ( $\Psi$ ) e rappresentano, di fatto, l'elettrone all'interno dell'atomo.

Queste funzioni d'onda furono utilizzate dal fisico austriaco E. Schrödinger, il quale propose un'equazione (equazione di Schrödinger) che forniva come soluzioni le funzioni d'onda stesse e l'energia ad esse associata.

Importante è il significato che assume il quadrato della funzione d'onda ( $\Psi^2$ ) che in pratica rappresenta la probabilità di trovare l'elettrone in una certa regione dello spazio e si viene dunque a perdere l'informazione assoluta circa la posizione e la velocità dell'elettrone.

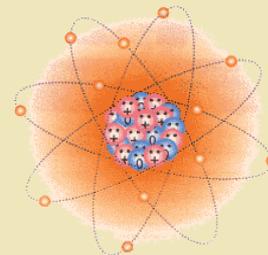


“Dati certi valori ai numeri quantici  $n$ ,  $l$  e  $m$  (*vedi prossima unità*), le soluzioni dell'equazione di Schrödinger non forniscono le coordinate del punto  $P$  in cui si dovrebbe trovare l'elettrone rispetto al nucleo, posto idealmente all'origine degli assi di un sistema di riferimento, ma una funzione d'onda  $\Psi$ , che descrive l'elettrone intorno al nucleo e l'energia associata alla stessa”. Ciò costrinse ad abbandonare il concetto di traiettoria definita e quindi di orbita, per introdurre quello di **orbitale**, inteso come:

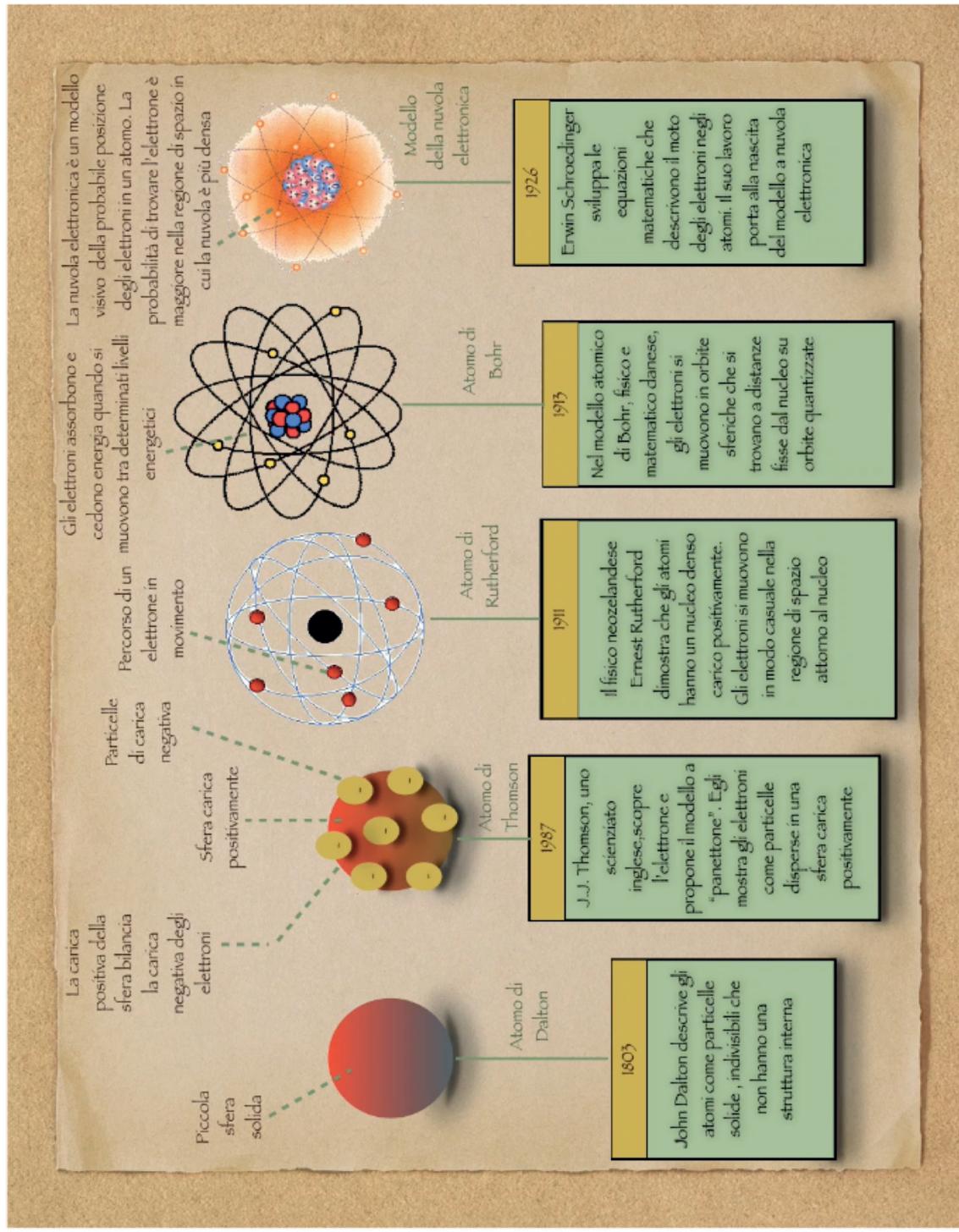
**“regione di spazio intorno al nucleo alla quale associare una certa probabilità di trovarvi l'elettrone”.**

Si può dunque descrivere il comportamento di un elettrone attorno ad un nucleo mediante la risoluzione dell'equazione di Schrödinger.

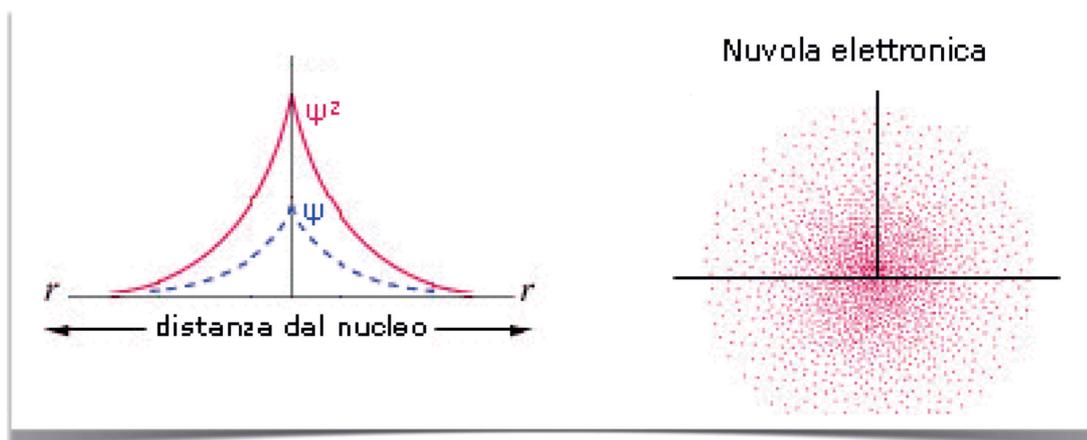
Un buon modo per rappresentare un orbitale è immaginare di fotografare molte volte l'elettrone attorno al nucleo, utilizzando sempre la stessa pellicola: otterremmo un risultato rappresentabile come in figura con tanti puntini, uno per ogni istantanea dell'elettrone. La “nuvola” elettronica che viene così a formarsi rappresenta la distribuzione della probabilità di trovare l'elettrone. L'insieme delle zone dove i punti sono più fitti è l'orbitale.



Ricapitolando...



# NUMERI QUANTICI E CONFIGURAZIONI



## FOCUS

1. Impareremo cosa sono i numeri quantici e a cosa servono.
2. Scopriremo con quali regole si riempiono gli orbitali
3. Impareremo a determinare la configurazione elettronica degli elementi.

## 3.8 I NUMERI QUANTICI

Dal lavoro di Schrödinger si sviluppò la teoria secondo la quale è possibile individuare le regioni dello spazio in cui la probabilità di trovare gli elettroni è massima: tali regioni sono chiamate *orbitali*.

Ogni orbitale possiede una determinata quantità di energia, una forma caratteristica e un orientamento nello spazio; tutte queste caratteristiche sono descritte dai *numeri quantici* che sono quattro, i primi tre associati all'orbitale e il quarto associato all'elettrone.

### 3.8.1 Numero quantico principale

Si indica con  $n$  e indica il *livello energetico e le dimensioni degli orbitali*. Può assumere tutti i valori interi compresi tra 1 e 7.

All'aumentare del valore di  $n$  aumenta l'energia dell'orbitale.

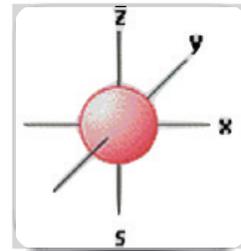
**$n =$  tutti i valori interi da 1 a 7**

### 3.8.2 Numero quantico secondario o angolare

Si indica con  $l$  e rappresenta il *sottolivello energetico e la forma degli orbitali*. Dipende dal valore di  $n$  in quanto può assumere tutti i valori compresi tra 0 e  $n-1$ .

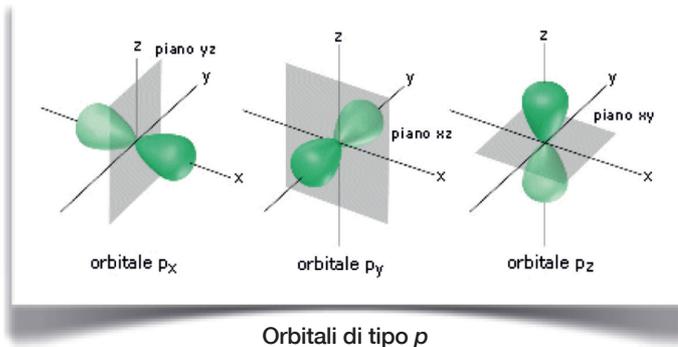
**$l =$  tutti i valori interi da 0 a  $n-1$**

A ogni valore di  $l$  corrisponde una particolare forma degli orbitali. Per  $l=0$  l'orbitale è di tipo  $s$  ed è rappresentato da una nube di forma sferica



Orbitale di tipo  $s$

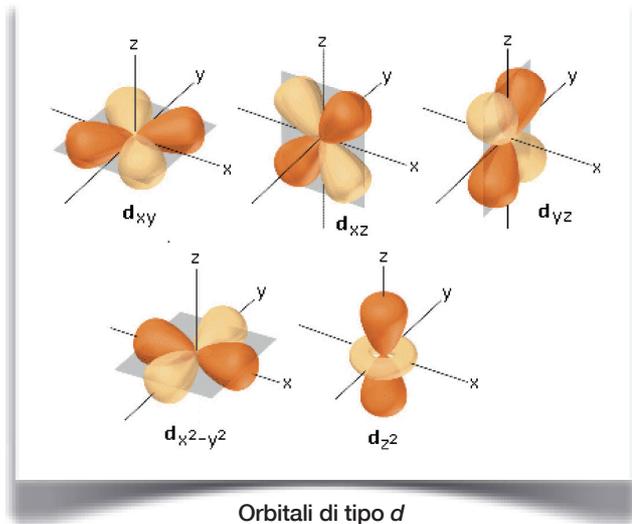
Per  $l=1$  l'orbitale è di tipo  $p$  ed è rappresentato da una nube costituita da due lobi ad elevata densità (forma di infinito).



Orbitali di tipo  $p$

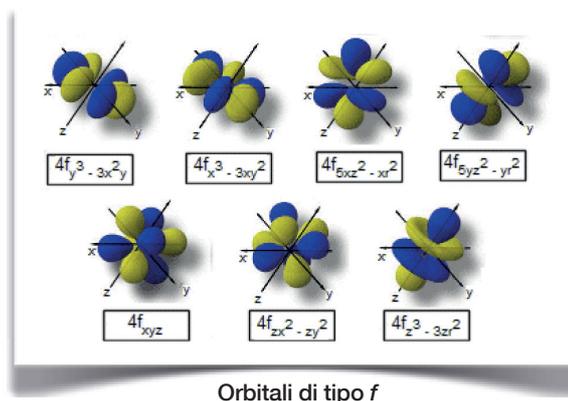
Gli orbitali  $p$  sono tre per livello energetico (tranne il primo livello energetico) ed essendo orientati uno perpendicolarmente all'altro nella direzione dei tre assi cartesiani, vengono indicati con la notazione:  $p_x, p_y, p_z$ .

Per  $l=2$  l'orbitale è di tipo  $d$ ; sono 5 per livello energetico (tranne i primi due livelli energetici). Quattro di essi sono tetralobati (4 lobi). Il quinto orbitale  $d$  è bilobato con una regione anulare.



Orbitali di tipo  $d$

Per  $l=3$  gli orbitali sono di tipo  $f$ ; sono 7 per livello energetico (tranne i primi tre livelli energetici).



Orbitali di tipo  $f$

### 3.8.3 Numero quantico magnetico

Il numero quantico magnetico si indica con  $m$  e rappresenta l'orientamento nello spazio della nuvola elettronica dell'orbitale. Dipende dal valore di  $l$  e infatti può assumere tutti i valori compresi tra  $-l$  e  $+l$ .

**$m =$  tutti i valori interi da  $-l$  a  $+l$**

A ogni valore di  $l$  corrisponde un orientamento e quindi un orbitale; ad esempio per  $l=1$   $m= -1,0,+1$  (tre valori e dunque tre orbitali). Vediamo ora come, al variare dei numeri quantici, si ottengono gli orbitali. Partiamo dal caso per il quale  $n$  (**numero quantico principale**) è uguale a 1

**Se  $n = 1$  l'unico valore che può assumere  $l$  (tutti i valori da 0 a  $n-1$ ) è  $l = 0$**

Per  $l = 0$  abbiamo sempre orbitali di tipo  $s$ . Questi orbitali, come abbiamo visto, sono a simmetria sferica vanno cioè immaginati come delle superfici sferiche sulle quali è elevata la probabilità di trovare addensamenti di carica negativa e cioè gli elettroni.

L'unico valore che può assumere  $m$  (tutti i valori da  $-l$  a  $+l$ ) per  $l = 0$  sarà  $m = 0$ . A un solo valore corrisponde un solo orbitale, precisamente l'orbitale  $1s$  (1 indica il numero quantico principale e  $s$  la forma dell'orbitale).

Vediamo adesso gli orbitali che appartengono al secondo livello energetico e cioè quello per il quale  $n$  (**numero quantico principale**) è 2. I possibili valori che possono assumere i numeri quantici  $l$  ed  $m$  sono:

**Se  $n = 2$**

$l = 0$   $m = 0$                       **1 orbitale (2s)**

$l = 1$   $m = -1, 0, +1$               **3 orbitali (2p<sub>x</sub> 2p<sub>y</sub> 2p<sub>z</sub>)**

Per  $l = 1$  abbiamo gli orbitali  $p$  che sono tre e poiché  $m$  rappresenta di fatto i possibili orientamenti nello spazio degli orbitali si deduce che 3 sono gli orbitali di tipo  $p$  che distinguiamo in  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  (diretti lungo le direzioni dei tre assi cartesiani).

Nel terzo livello energetico e quindi quando  $n = 3$  i possibili valori che possono assumere i numeri quantici  $l$  ed  $m$  sono:

$l = 0$   $m = 0$                       **1 orbitale (3s)**

$l = 1$   $m = -1, 0, +1$               **3 orbitali (3p<sub>x</sub> 3p<sub>y</sub> 3p<sub>z</sub>)**

$l = 2$   $m = -2, -1, 0, +1, +2$       **5 orbitali (3d<sub>xy</sub> 3d<sub>xz</sub> 3d<sub>yz</sub> 3d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 3d<sub>z<sup>2</sup></sub>)**

Quando  $l = 2$  abbiamo gli orbitali  $d$ . Anche qui c'è da notare che i possibili valori di  $m$  per  $l = 2$  (orbitali  $d$ ) sono cinque e 5 saranno i possibili orientamenti nello spazio degli orbitali di tipo  $d$ .

Per  $n = 4$  i possibili valori che possono assumere i numeri quantici  $l$  ed  $m$  sono:

$l = 0$   $m = 0$                       **1 orbitale (4s)**

$l = 1$   $m = -1, 0, +1$               **3 orbitali 4p<sub>x</sub> 4p<sub>y</sub> 4p<sub>z</sub>**

$l = 2$   $m = -2, -1, 0, +1, +2$       **5 orbitali (4d<sub>xy</sub> 4d<sub>xz</sub> 4d<sub>yz</sub> 4d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 4d<sub>z<sup>2</sup></sub>)**

$l = 3$   $m = -3,-2,-1,0,+1,+2,+3$     **7 orbitali 4f**

Quando  $l = 3$  abbiamo gli orbitali  $f$ .

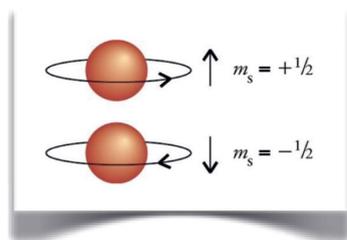
Da notare, in questo caso, che i possibili valori di  $m$  per  $l = 3$  sono sette e poiché  $m$  rappresenta sempre i possibili orientamenti nello spazio degli orbitali possiamo concludere che 7 sono gli orbitali di **tipo f**.

Il seguente schema riassume quanto detto:

$n$	$l$	$m$	$n^\circ$ di orbitali	$n^\circ$ di elettroni
1	0	0	1	2
2	0,1	0 -1,0,+1	4	8
3	0,1,2	0 -1,0,+1 -2,-1,0,+1,+2	9	18
4	0,1,2,3	0 -1,0,+1 -2,-1,0,+1,+2 -3,-2,-1,0,+1,+2,+3	16	32

### 3.8.4 Numero quantico magnetico

Il numero quantico magnetico di spin si indica con  $m_s$  e rappresenta il verso di rotazione dell'elettrone intorno al proprio asse (*spin*) che può essere orario o antiorario, assumendo rispettivamente i valori  $-\frac{1}{2}$  e  $+\frac{1}{2}$



## 3.9 CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DEGLI ELEMENTI: AUF-BAU

La configurazione elettronica degli elementi è una rappresentazione che ci consente di comprendere come gli elettroni occupano gli orbitali. Le motivazioni che ci spingono a capire la distribuzione degli elettroni intorno al nucleo è che essa ci consentirà di capire le caratteristiche chimiche degli elementi (atomi) e come essi si combinano tra di loro per dare origine alle delle sostanze. Ci sono delle regole da rispettare nella costruzione della configurazione elettronica di ciascun elemento. Intanto gli elettroni, (che indicheremo con delle frecce in alto o in basso a distinguere lo spin), vanno a riempire gli orbitali atomici (che indicheremo con dei quadratini) cominciando dall'orbitale ad energia più bassa.

Partiamo dalla configurazione elettronica dell'elemento a più basso numero atomico: l'**idrogeno Z=1** (cioè 1 elettrone)  ${}_1H$

L'unico elettrone dell'idrogeno va collocato nell'orbitale ad energia più bassa: l'orbitale 1s.



Il secondo elemento della tabella periodica è l'**Elio Z=2** (cioè 2)  ${}_2He$ .

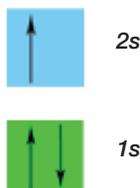
La configurazione elettronica dell'elio è la seguente:



L'atomo di elio ha quindi due elettroni. Entrambi gli elettroni si collocano nello stesso orbitale ma come si vede il verso delle due frecce che rappresentano gli elettroni è opposto. Cosa rappresenta il verso opposto delle frecce? Rappresenta il numero quantico magnetico di spin. Un elettrone avrà spin  $+1/2$  e l'altro spin  $-1/2$ .

Il terzo elemento della tabella periodica è il **Litio  $Z=3$**  (cioè 3 elettroni)  ${}_3\text{Li}$

La configurazione elettronica del Litio è la seguente:

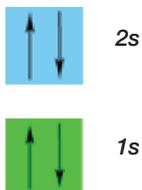


Due elettroni si collocano quindi nell'orbitale 1s, il terzo elettrone nell'orbitale 2s che appartiene al secondo livello di energia.

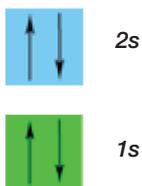
### 3.9.1 Mettiamo un po' di ordine e diamo delle regole

- **Principio di minima energia:** *nella costruzione della configurazione elettronica, detta anche auf-bau (costruzione in tedesco), degli elementi, gli elettroni vanno ad occupare prima gli orbitali ad energia più bassa e poi gli altri ad energia sempre più alta.*
- *Un orbitale atomico può ospitare al massimo due elettroni con spin opposto (spin antiparallelo) e questo per soddisfare il **Principio di esclusione di Pauli** il quale afferma che all'interno di un atomo non possiamo avere due elettroni con tutti e quattro i numeri quantici uguali.*

Il quarto elemento della tabella periodica è il **Berillio  $Z=4$**  (cioè 4 elettroni)  ${}_4\text{Be}$  La configurazione elettronica del Berillio è la seguente:

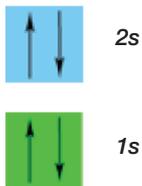


Configurazione elettronica del boro  **$Z=5$**  (cioè 5 elettroni)  ${}_5\text{B}$ :



Il quinto elettrone del boro va in un orbitale 2p.

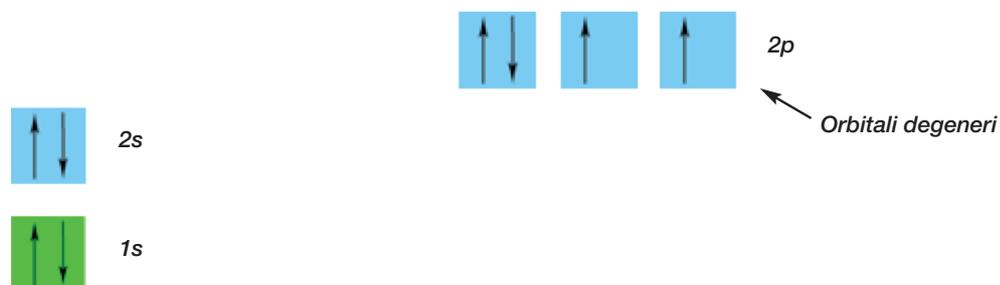
Configurazioni elettronica del **carbonio  $Z=6$**  (cioè 6 elettroni)  ${}_6\text{C}$ :



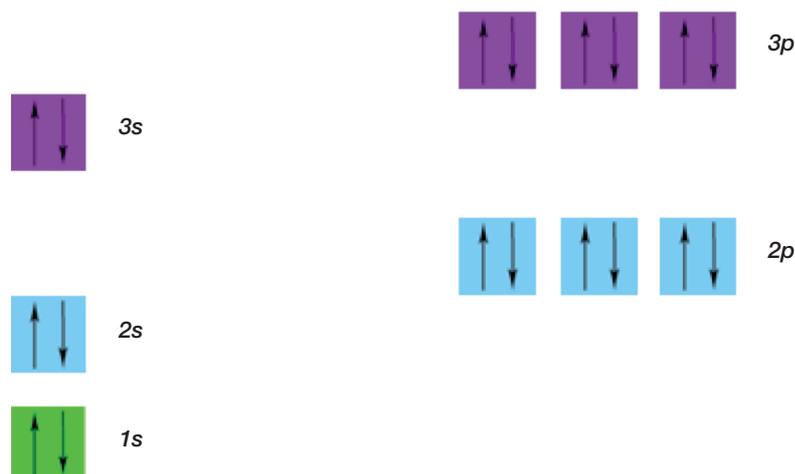
Perché il sesto elettrone del carbonio va a finire nell'orbitale  $2p_y$  piuttosto che nell'orbitale  $2p_x$  con spin antiparallelo ?

- **Principio di massima molteplicità di spin o regola di Hund:** quando più elettroni devono occupare orbitali alla stessa energia (orbitali degeneri) si distribuiscono prima occupando tutti gli orbitali con lo stesso spin e poi completando gli orbitali stessi.

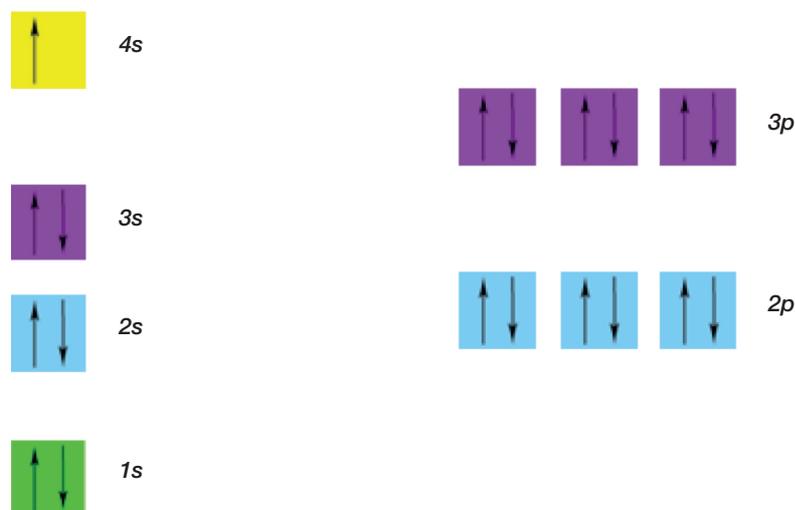
Vediamo la configurazione elettronica dell'ossigeno  $Z=8$  (cioè 8 elettroni)  ${}_8O$



Configurazione elettronica dell'Argon  $Z=18$  (cioè 18 elettroni)  ${}_{18}Ar$



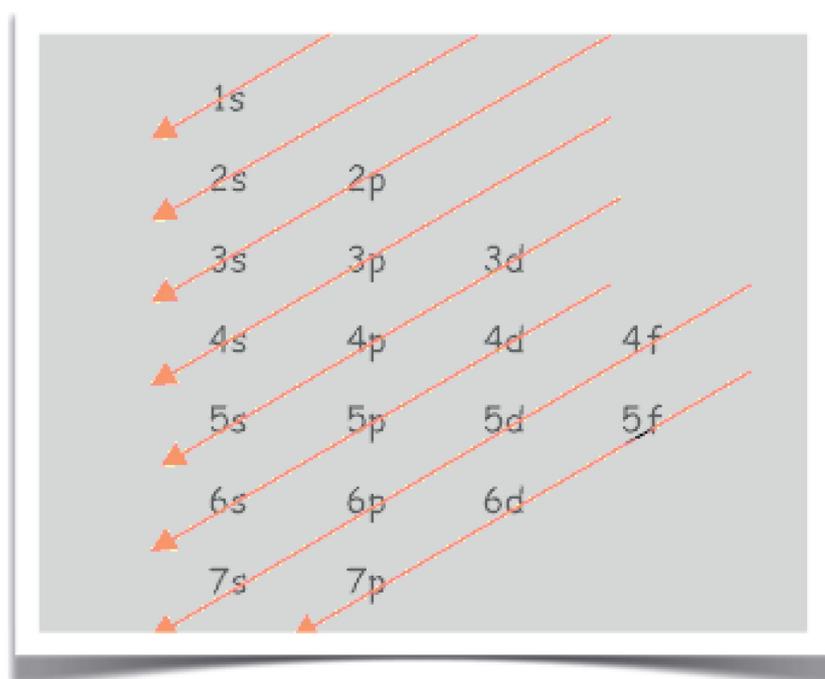
Configurazione elettronica del potassio  $Z=19$  (19 elettroni)  ${}_{19}K$



Perché il 19° elettrone del potassio va a collocarsi nell'orbitale 4s? Il motivo per il quale l'ultimo elettrone del Potassio va ad occupare l'orbitale 4s e non l'orbitale 3d sta nel principio di minima energia e allora, evidentemente, l'energia dell'orbitale 4s è inferiore a quella dell'orbitale 3d.

Vediamo quindi come ricavare l'ordine di riempimento degli orbitali atomici. A causa delle interazioni elettroniche i valori delle energie degli orbitali variano in modo alquanto complicato all'aumentare del numero totale di elettroni presenti. E' possibile, tuttavia, ricavare l'ordine relativo dei livelli energetici degli orbitali mediante una regola chiamata "Regola della diagonale" abbastanza semplice e generalmente valida, salvo eccezioni come per esempio l'oro (Au), il rame (Cu), l'argento (Ag).

### REGOLA DELLA DIAGONALE



Si legge dall'alto verso il basso e da sinistra verso destra così come sono state tracciate le diagonali. L'ordine risultante è: **1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p.**

In questo modo si ricava l'ordine di riempimento degli orbitali atomici dello stato fondamentale. Nella trattazione per rappresentare gli orbitali sono stati usati dei quadratini e per rappresentare gli elettroni delle frecce. Tra le altre esiste una rappresentazione nella quale scompaiono i quadratini ma viene scritto il numero di elettroni contenuti negli orbitali come apice degli stessi. Es.:



*diventa*  $2s^2$



*diventa*  $2p^4$

H ( numero atomico 1) =  $1s^1$

He (numero atomico 2) =  $1s^2$

Li ( numero atomico 3) =  $1s^2, 2s^1$

Be ( numero atomico 4) =  $1s^2, 2s^2$

B ( numero atomico 5) =  $1s^2, 2s^2, 2p^1$

C ( numero atomico 6) =  $1s^2, 2s^2, 2p^2$

O ( numero atomico 8) =  $1s^2, 2s^2, 2p^4$

Ne (numero atomico 18) =  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$

Ca (numero atomico 20) =  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2$

Cu ( numero atomico 29) =  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^9, 4s^2$  e non come ci si aspetterebbe utilizzando la regola prima illustrata che avrebbe portato a scrivere  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^1$

Au ( numero atomico 79) =  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5s^2, 5p^6, 5d^9, 6s^2$  e non  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5s^2, 5p^6, 5d^{10}, 6s^1$

Le ultime due configurazioni elettroniche illustrate come anche altre, presenti soprattutto tra i metalli di transizione e dei transuranici, dipendono da particolari situazioni energetiche che in questa sede non approfondiamo e che potrai osservare nello studio dell'unità riguardante la tabella periodica.

### 3.9.2 Configurazione elettronica esterna

L'identità chimica degli elementi dipende da come gli atomi interagiscono tra di loro, e quindi da come si comportano gli elettroni "più esterni" che sono quelli che possono essere scambiati, condivisi, strappati come vedremo quando affronteremo i legami chimici. Gli elettroni esterni sono quelli presenti al livello energetico più alto e che si trovano di norma su orbitali di tipo s e p. Per stabilire la configurazione elettronica esterna (**c.e.e.**) è necessario individuare il livello energetico (n° quantico principale) più alto e quindi contare gli elettroni presenti sugli orbitali **s** o **s** e **p** di questo livello. Gli elettroni esterni sono chiamati anche **elettroni di valenza**. I seguenti esempi chiariranno meglio questo concetto:

