

# Mezzi Didattici

- [https://www.amazon.it/Chimica-2019-colori-Archimede-Rotondo/dp/1695152840/ref=sr\\_1\\_1?\\_\\_mk\\_it\\_IT=ÅMÅŽÕÑ&keywords=chimica+di+archimede+rotondo&qid=1569841592&s=books&sr=1-1](https://www.amazon.it/Chimica-2019-colori-Archimede-Rotondo/dp/1695152840/ref=sr_1_1?__mk_it_IT=ÅMÅŽÕÑ&keywords=chimica+di+archimede+rotondo&qid=1569841592&s=books&sr=1-1) - Chimica: Ed. 2019 a colori (Archimede e Enrico Rotondo)»
  - <http://archi745.wixsite.com/chimicadiarchi> - sito docente
  - <https://moodle2.unime.it/enrol/index.php?id=46830> –
- PIATTAFORMA UNIVERSITARIA MOODLE**
- **PIATTAFORMA ESSE3 (Programmi, esami, prove parziali .....)**
  - **FACEBOOK «Corsi di chimica generale BIOMORF»**

# Definizioni

- **La chimica** è lo studio della materia e di come essa si trasforma
- **La materia** è tutto ciò che occupa il nostro spazio nei tre stati di aggregazione
- **Le sostanze** sono materia della stessa tipologia (sostanze semplici e sostanze complesse)
- Più sostanze costituiscono miscugli che possono essere sistemi omogenei o eterogenei
- **Le proprietà della materia** possono essere **fisiche** (senza rottura o trasformazioni delle sostanze) o **chimiche** (evidenti solo dopo rotture e arrangiamenti provocati da altre sostanze)

# Inizio della CHIMICA MODERNA

- Legge della composizione costante (Prust)
- Legge delle proporzioni multiple, Teoria atomica Dalton (1806)
- Conservazione della massa (Lavoisier 1789)

# Le Leggi

**Conservazione della massa:** se delle sostanze reagiscono danno luogo a prodotti il cui peso è identico a quello della materia reagente

**Composizione costante:** sostanza  $H_2O$ , viene da ossigeno ed idrogeno sempre nel rapporto ponderale di 16 a 2, cioè 89% di O e 11% di H

**Proporzioni multiple:** la combinazione di idrogeno e ossigeno può portare a  $H_2O$  e a  $H_2O_2$  con proporzioni ponderali H:O di 2:16 e di 2:32 cioè tra loro multiple

# Atomi (*'indivisibili'*)

## *Ipotesi atomica di Dalton (1804)*

1. Tutta la materia è composta da **atomi**: particelle piccole ed indivisibili.
2. Gli atomi di un certo **elemento** sono uguali, mentre atomi di elementi diversi si distinguono per la loro massa.
3. Un **composto** è una combinazione di atomi di uno o più elementi che avviene per numeri interi.
4. In una **reazione chimica** gli atomi non vengono né creati né distrutti, bensì **cambiano la disposizione** relativa formando nuove sostanze.

E' come giocare con i lego

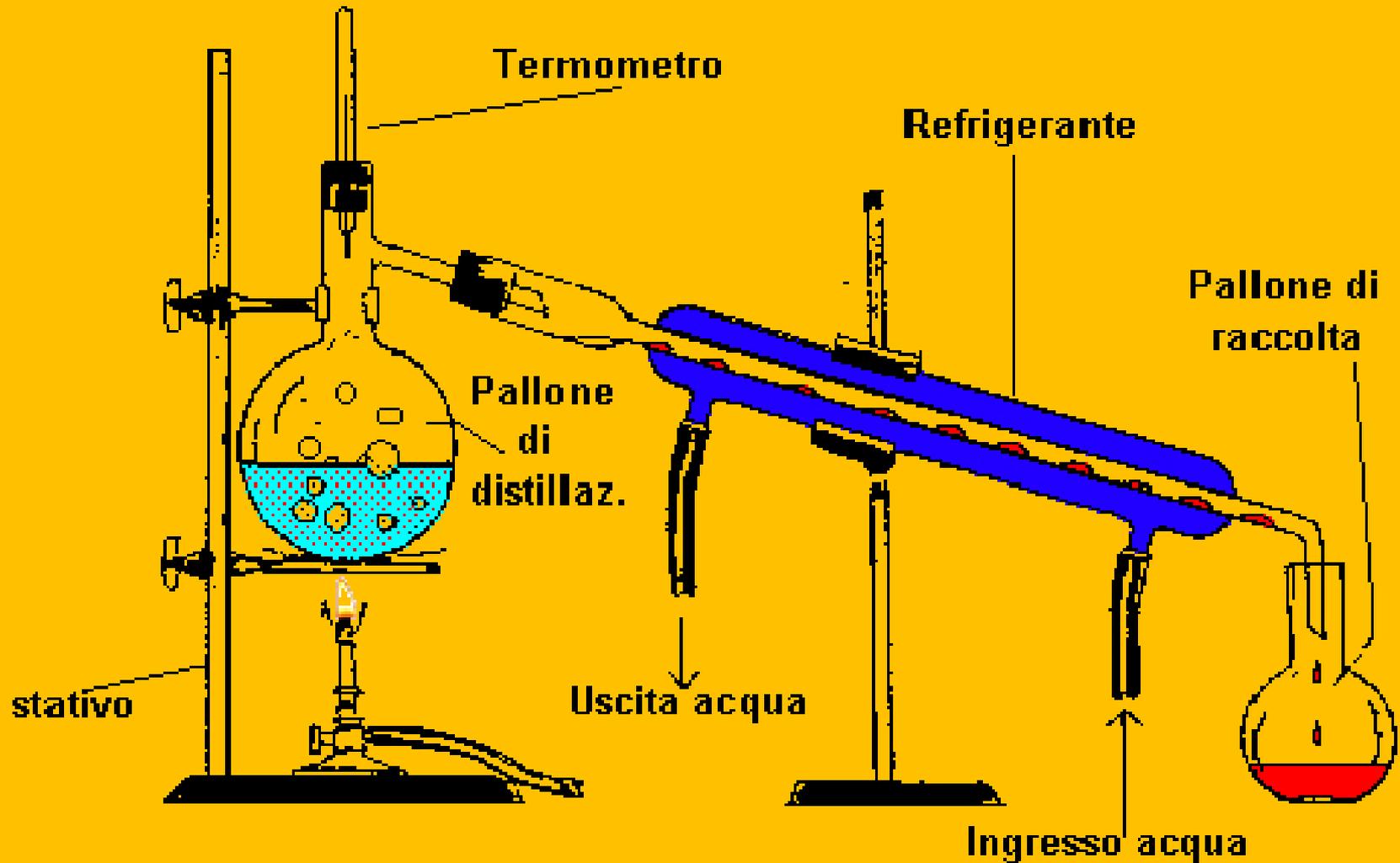


# Analisi Chimica

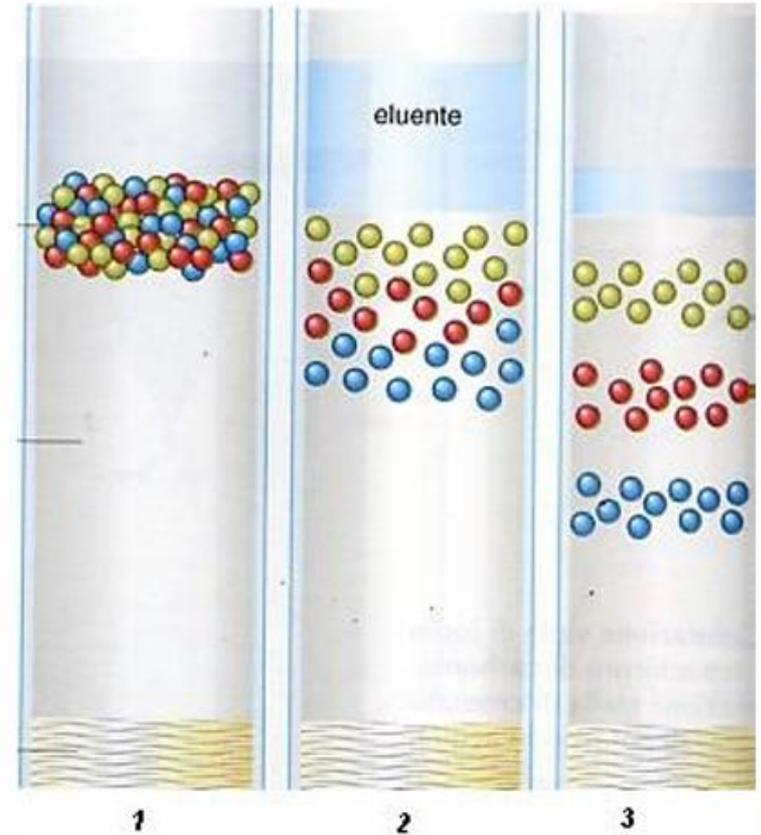
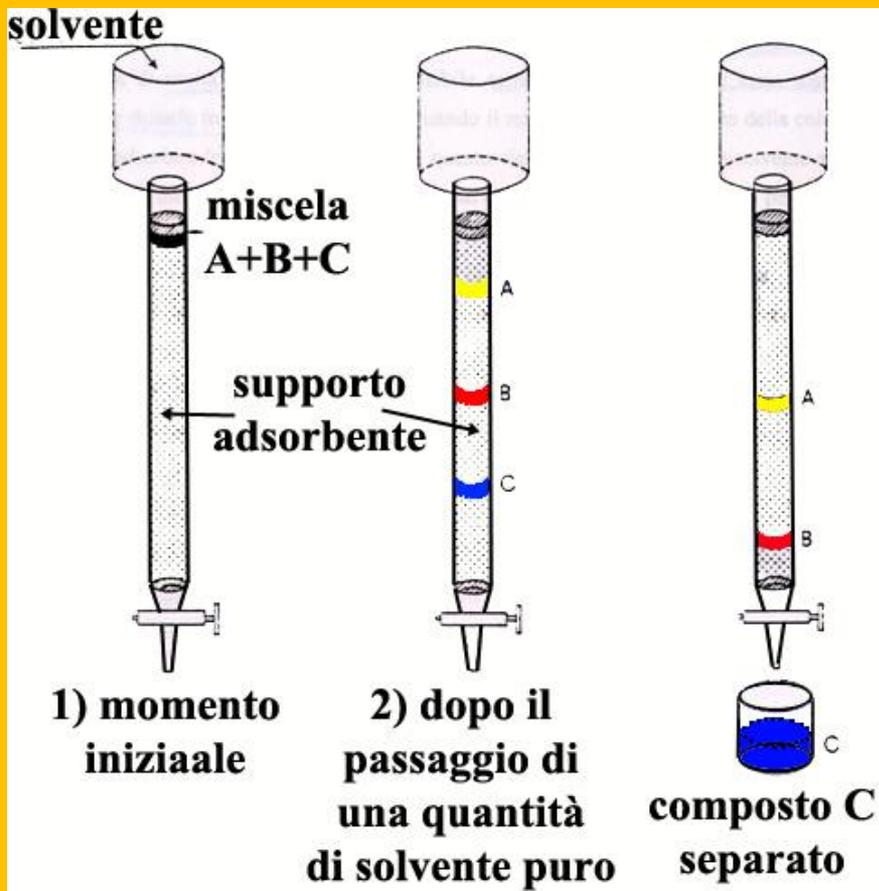
- Un campione è una porzione rappresentativa di materia
- I miscugli possono essere omogenei o eterogenei se sono o meno distinguibili porzioni di spazio con caratteristiche differenti (fisiche, chimiche, sino a che punto?)
- Vi sono metodi di separazione delle fasi e delle sostanze, usati per l'analisi e dosaggio delle differenti sostanze.

# Distillazione

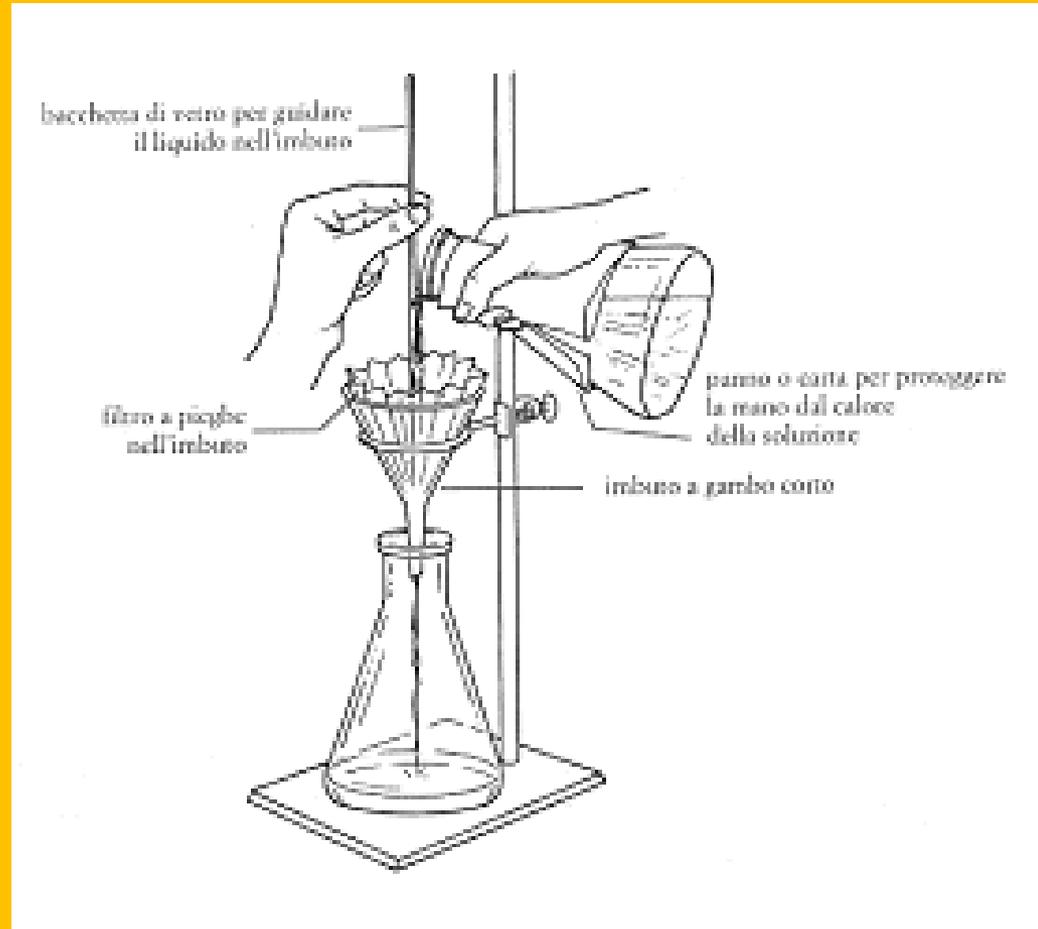
*Schema di distillazione*



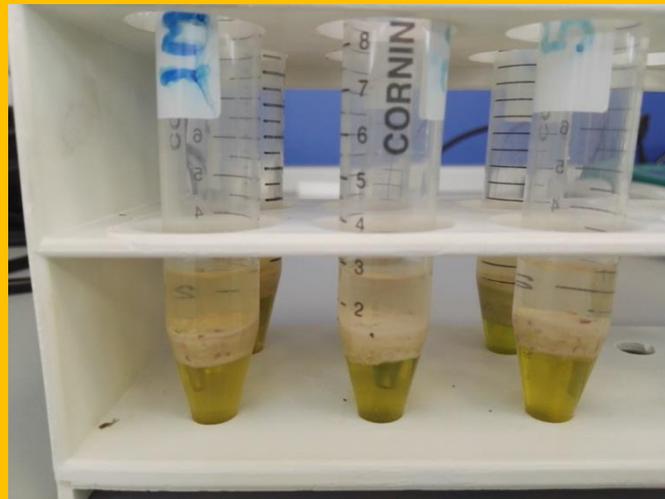
# Cromatografia



# Filtrazione



# Sample Treatment



# MISURE E GRANDEZZE FONDAMENTALI

Quantità	Unità (SI)	Simbolo
Massa	Chilogrammi	Kg
Lunghezza	Metri	m
Tempo	Secondi	s
Temperatura	Gradi Kelvin	K
Numero di particelle	Mole	mol
Intensità di corrente	Ampere	A
Intensità di illuminazione	Candela	cd

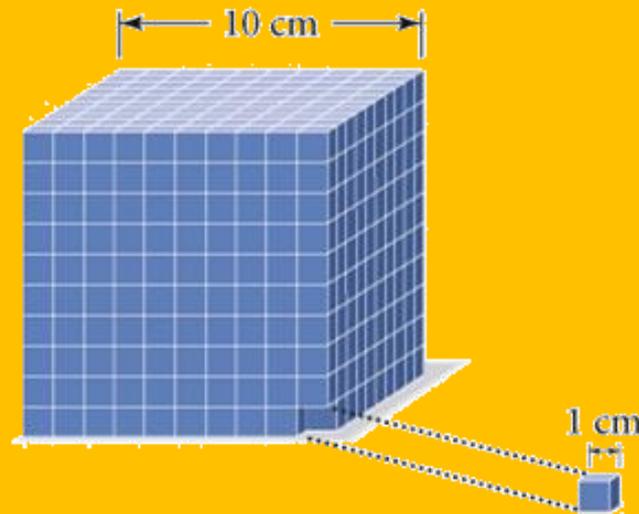
# Riepilogo (definizioni)

- La **chimica** studia la materia e come si trasforma
- La **materia** è tutto ciò che occupa uno spazio e si trova in uno dei tre stati di aggregazione, gode di proprietà **fisiche** (senza rottura di legami) e **chimiche** (con rotture di legami che trasformano la materia stessa). Solitamente la materia è costituita da più sostanze in miscela che può essere **omogenea** o **eterogenea** a seconda se si distinguono diverse fasi o meno
- Una **sostanza** (pura) è materia tutta dello stesso tipo dunque contiene lo stesso tipo di **molecole** che sono la più piccola parte della materia che conserva le stesse proprietà chimiche.
- Dalla teoria atomica si deduce che le sostanze possono essere costituite da un solo tipo di atomo e sono dette **sostanze elementari o elementi** ( $O_2$ ,  $N_2$ ,  $S_8$ ,  $Cl_2$ ,  $Cu$ ,  $Fe$ ,  $Zn$ ,  $Ti$ ,  $C$ ,  $Si$ ), oppure da diversi tipi di atomi e si **chiameranno sostanze composte o composti** ( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $C_2H_6O$ ,  $CH_4$ ,  $NH_3$ )

# Grandezze derivate

$$v = l/t \text{ (m}\cdot\text{sec}^{-1}\text{)}; a = l/t^2 \text{ (m}\cdot\text{sec}^{-2}\text{)}; E = m\cdot a\cdot l$$
$$\text{(kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{sec}^{-2}\text{)}$$

$V = l^3(\text{m}^3)$  poco pratico SI ma attenzione alla conversione  $1 \text{ m}^3 = 1000 \text{ dm}^3$



Un cubo di 10 cm contiene  
1000 cubi da 1 cm

# Moltiplicatori delle unità di misura

Prefisso	Simbolo	Moltiplicatore	
exa	E	1 000 000 000 000 000 000	$(10^{18})$
peta	P	1 000 000 000 000 000	$(10^{15})$
tera	T	1 000 000 000 000	$(10^{12})$
giga	G	1 000 000 000	$(10^9)$
mega	M	1 000 000	$(10^6)$
kilo	k	1000	$(10^3)$
deci	d	0.1	$(10^{-1})$
centi	c	0.01	$(10^{-2})$
milli	m	0.001	$(10^{-3})$
micro	$\mu$	0.000001	$(10^{-6})$
nano	n	0.000000001	$(10^{-9})$
pico	p	0.0000000000001	$(10^{-12})$
femto	f	0.0000000000000001	$(10^{-15})$
atto	a	0.0000000000000000001	$(10^{-18})$

# Proprietà della materia

- **Fisiche (misurabili reversibilmente)**
- **Chimiche (osservabili solo dopo una trasformazione)**
- **Estensive (dipendono dalla quantità di materia e seguono la additività: V, m, E)**
- **Intensive (intrinseche di un campione: T, dens.)**

**Blocco s** (alcalini e alcalini terrosi) **Blocco p**

**Blocco d** (metalli di transizione) **Blocco f** (Lantanidi - Attinidi)

**gruppi o colonne di elementi**

gas nobili  
18  
VIIIA  
He 2

1  
IA  
H 1

2  
IIA  
Li 3 Be 4

3  
III B IV B V B VI B VII B VIII IB IIB  
Na 11 Mg 12

4  
K 19 Ca 20 Sc 21 Ti 22 V 23 Cr 24 Mn 25 Fe 26 Co 27 Ni 28 Cu 29 Zn 30 Ga 31 Ge 32 As 33 Se 34 Br 35 Kr 36

5  
Rb 37 Sr 38 Y 39 Zr 40 Nb 41 Mo 42 Tc 43 Ru 44 Rh 45 Pd 46 Ag 47 Cd 48 In 49 Sn 50 Sb 51 Te 52 I 53 Xe 54

6  
Cs 55 Ba 56 La 57 Hf 72 Ta 73 W 74 Re 75 Os 76 Ir 77 Pt 78 Au 79 Hg 80 Tl 81 Pb 82 Bi 83 Po 84 At 85 Rn 86

7  
Fr 87 Ra 88 Ac 89 Rf 104 Db 105 Sg 106 Bh 107 Hs 108 Mt 109 Ds 110 Rg 111 Cn 112 Uut 113 Uuq 114 Uup 115 Uuh 116 Uus 117 Uuo 118

simbolo  
numero atomico (§2.1)  
numero di massa (§2.1)  
numeri di ossidazione (§ 10.15)  
elettronegatività (§5.7)  
nome

1.00794  
2.20  
-1  
Idrogeno

1.00794  
2.20  
-1  
Idrogeno

13 IIIA B 5  
14 IVA C 6  
15 VA N 7  
16 VIA O 8  
17 VIIA F 9

18  
He 2  
4.002602  
- 0  
Elio

10.811 12.0107 14.0067 15.9994 18.998403  
2.04 3 2.55 4 3.04 5.3 3.44 -2 3.98 -1  
Boro Carbono Azoto Ossigeno Fluoro

26.981539 28.0855 30.973762 32.065 35.453  
1.61 3 1.90 4 2.19 5.3 2.58 6.4.2 3.16 7.5.3.1  
Alluminio Silicio Fosforo Zolfo Cloro

69.723 72.64 74.92160 78.96 79.904 83.798  
1.81 3 2.01 4.2 2.18 5.3 2.55 6.4.2 2.96 5.3.1 3.00 0.2  
Galio Germanio Arsenico Selenio Bromo Krypton

114.818 118.710 121.760 127.60 126.90447 131.293  
1.78 3 1.96 4.2 2.05 5.3 2.1 6.4.2 2.66 7.5.3.1 2.60 0.6 4.2  
Indio Stagno Antimonio Tellurio Iodio Xenon

204.3833 207.2 208.98040 208.9824 209.9871 222.0176  
1.62 3.1 2.33 4.2 2.02 3 2.0 4.2 2.2 -1 2.2 0  
Thallio Bismuto Polonio Astatio Radon

284 289 288 292 293 294  
- - - - -  
Ununtrio Ununquadio Ununpentio Ununhexio Ununseptio Ununoctio

140.116 140.90765 144.242 144.9127 150.36 151.964 157.25 158.92535 162.500 164.93032 167.259 168.93421 173.054 174.9668  
1.12 4.3 1.13 3 1.14 3 1.13 3 1.17 3 1.2 3+ 1.2 3.2 1.1 3 1.22 3 1.23 3 1.24 3 1.25 3 1.1 3 1.27 3  
Cerio Praseodimio Neodimio Prometio Samario Europio Gadolinio Terbio Disprobio Holmio Erbio Tulio Itterbio Lutecio Lufzio

232.03806 231.03588 238.02891 237.0482 244.0642 243.0614 247 247.0703 251.0796 252.03 257.0951 258.01 259.1009 260.1053  
1.3 4 1.5 5 1.38 6 1.36 5 1.28 4 1.13 3 1.28 3 1.3 3 1.3 3 1.3 3 1.3 3 1.3 3 1.3 3 1.3 3  
Torio Protattinio Uranio Nettunio Plutonio Americio Curio Berkelio Californio Einstenio Fermio Mendelevio Nobelio Lawrencio

numeri che indicano il periodo o la riga

Lantanidi

Attinidi

L'unità di massa atomica (uma) vale 1/12 della massa dell'isotopo 12 del carbonio (IUPAC - 2007).

# La mole

- Non è possibile pesare una particella, o un atomo; bisogna dunque mettere in relazione oggetti in scala molecolare con il mondo macroscopico. Il fattore di conversione è  $N$ .

## La mole è

- **Numero** di particelle pari a  $N = 6,022 \cdot 10^{23}$
- **Quantità** in grammi pari al numero di massa o peso molecolare di un atomo molecola o particella.....

# Struttura della materia e atomi

## Le principali scoperte

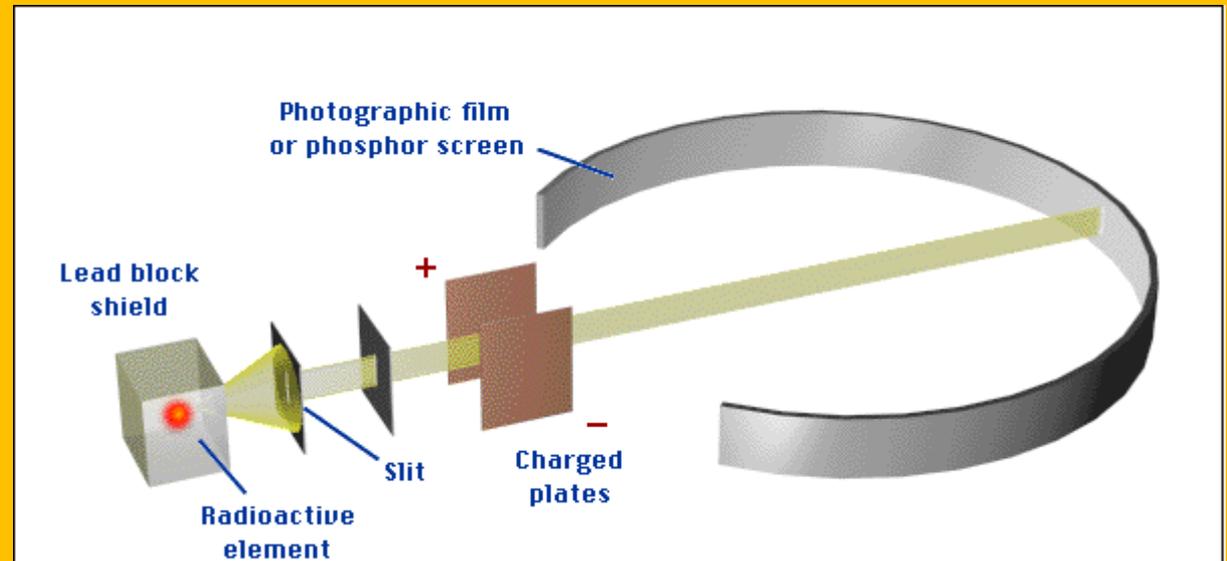
	Formation of a useful atomic theory		Discovery of the electron		Discovery of the atomic nucleus		Proton discovered	
<b>1630</b>	<b>1804</b>	<b>1896</b>	<b>1897</b>	<b>1898</b>	<b>1909</b>	<b>1913</b>	<b>1914</b>	<b>1932</b>
Discovery that electrically charged objects repel and attract each other		Radioactivity observed		Radioactivity defined		Mass of the electron determined		Neutron discovered

# Struttura Atomica

- Come è fatto un atomo
- Come si dispongono gli elettroni
- Modelli atomici
  - Rutherford
  - Bohr (meccanica quantistica)
  - Schrodinger (De Broglie, Eisenberg)  
(meccanica ondulatoria)
- Orbitali atomici

# Particelle subatomiche

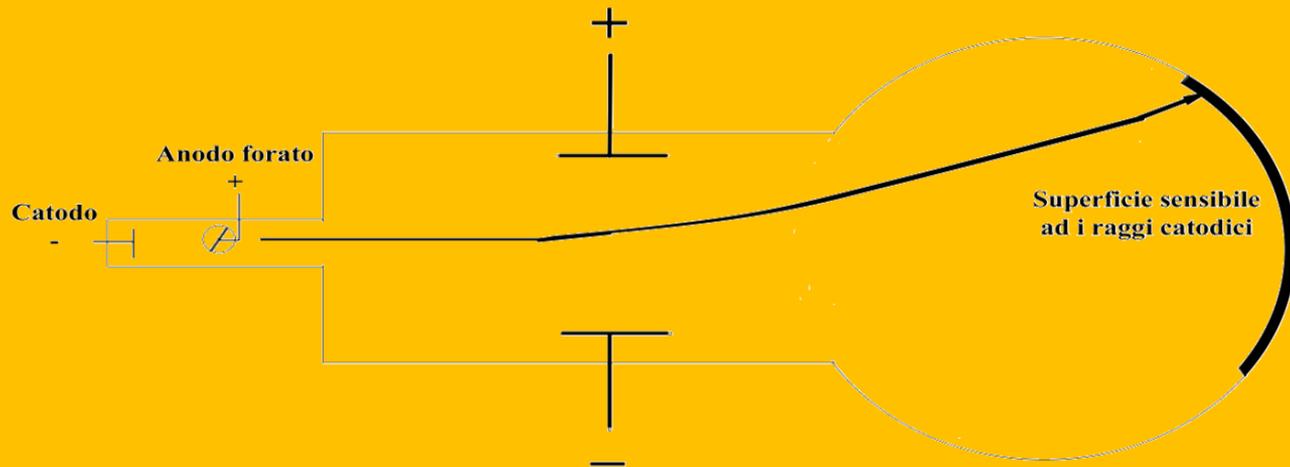
Gli studi sulla radioattività di Bequerel e M. Curie (1896) hanno mostrato l'esistenza di tre tipi di radiazione:



- **Alfa**: carichi positivamente
- **Beta**: carichi negativamente
- **Gamma**: senza carica.

(Alfa e beta sono frazioni di atomi)

# Raggi catodici (elettrone)

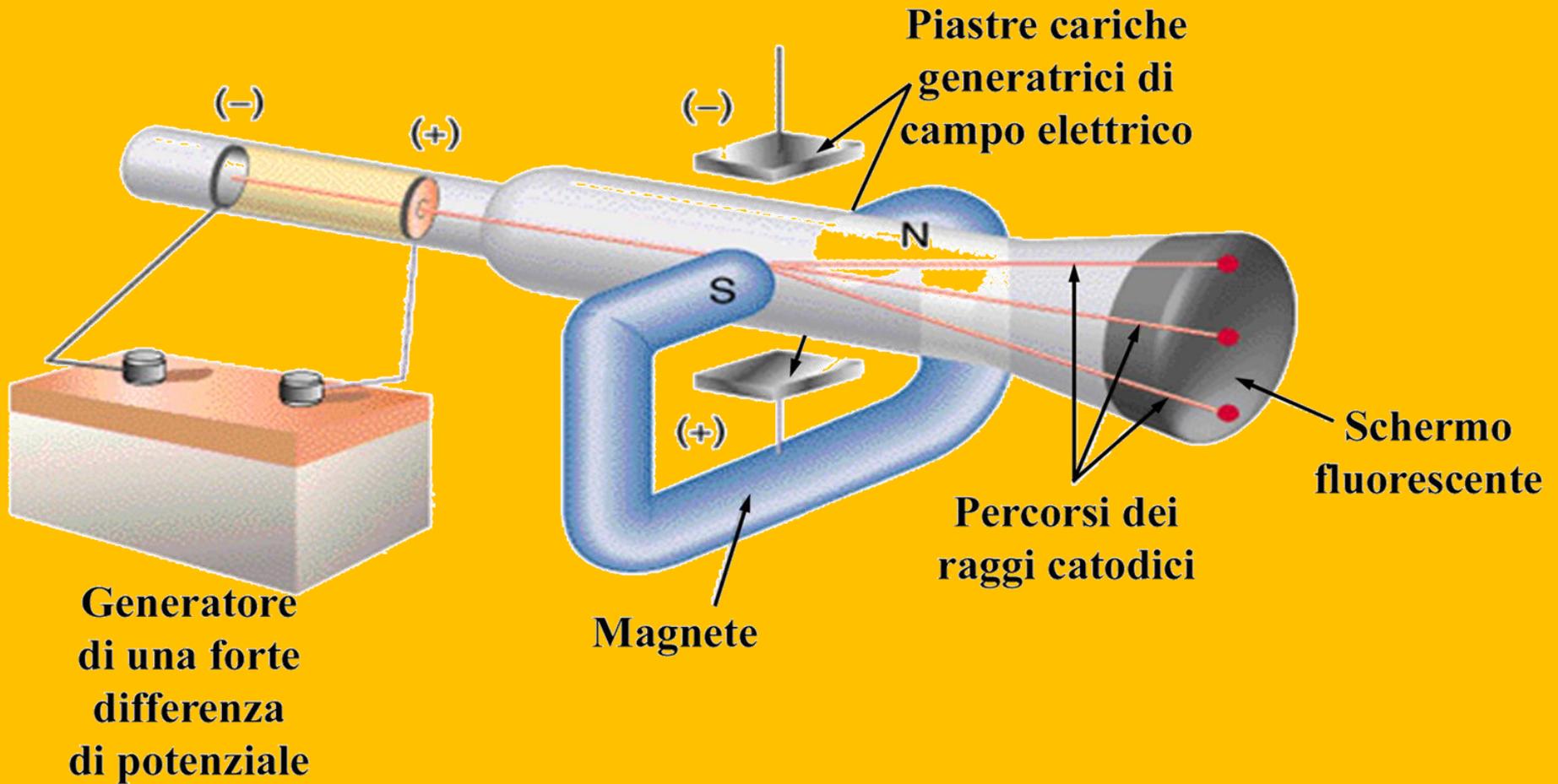


**L'elettrone.** Thompson nel 1897, studiando i raggi catodici con carica negativa è riuscito a misurare il rapporto carica/massa delle particelle chiamate elettroni. Millikan, studiando goccioline di olio ha misurato la carica dell'elettrone.

La sua massa è di  $9.109389 \cdot 10^{-28}$  grammi

La sua carica è di  $1.60217733 \cdot 10^{-19}$  Coulomb

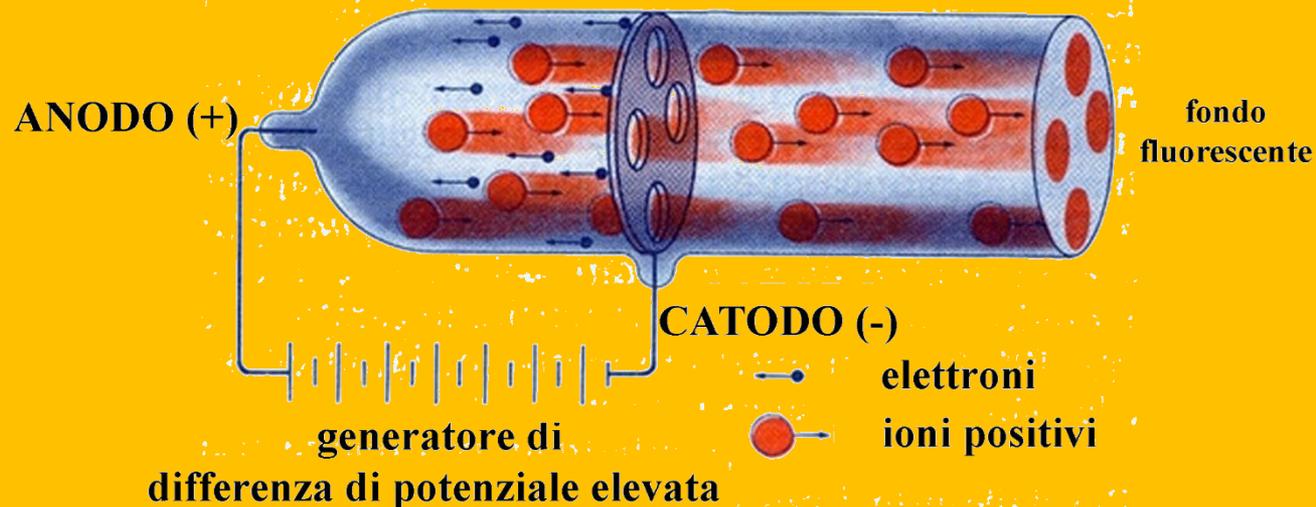
# Thomson modificato



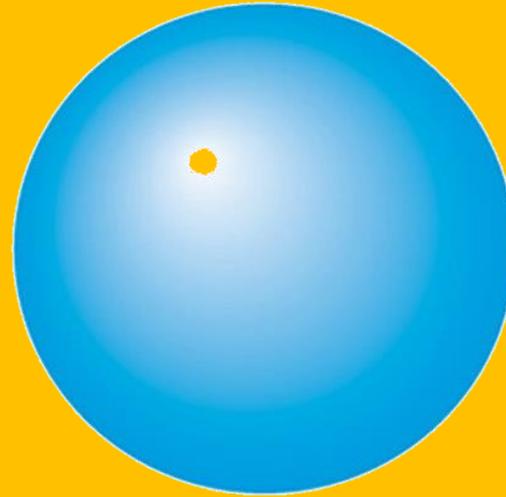
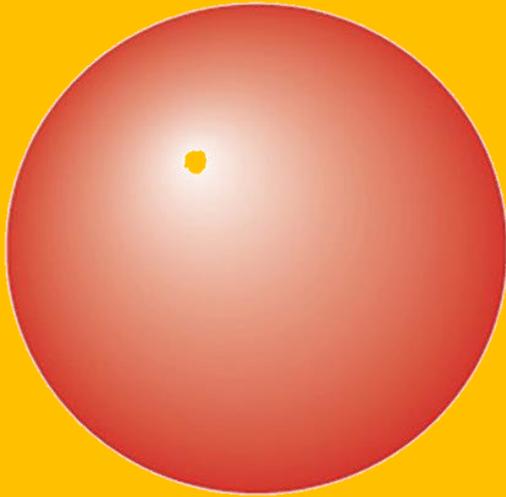
# Il protone

- Rutherford, analizzando i raggi canale (positivi), ha mostrato che il rapporto massa/carica differiva col tipo di gas usato (al contrario dei costanti raggi catodici). Il rapporto più alto (massa minore) era ottenuto con l'idrogeno. La particella, chiamata protone ha carica uguale, ma opposta, a quella dell'elettrone e massa di:

$$1,672623 \times 10^{-24} \text{ g}$$



# Particelle Atomiche



particella

protone

neutrone

elettrone

massa (kg)

$$1,673 \cdot 10^{-27}$$

$$1,675 \cdot 10^{-27}$$

$$9,1094 \cdot 10^{-31}$$

carica (C)

$$1,6022 \cdot 10^{-19}$$

0

$$-1,6022 \cdot 10^{-19}$$

# Particelle subatomiche e genesi dell'universo

**QUARK**

up <b>u</b>	charm <b>c</b>	top <b>t</b>
down <b>d</b>	strange <b>s</b>	beauty <b>b</b>

carica elettrica  $2/3$

carica elettrica  $-1/3$

**LEPTONI**

$\nu_e$	$\nu_\mu$	$\nu_\tau$
<b>e</b>	<b><math>\mu</math></b>	<b><math>\tau</math></b>

carica elettrica  $0$

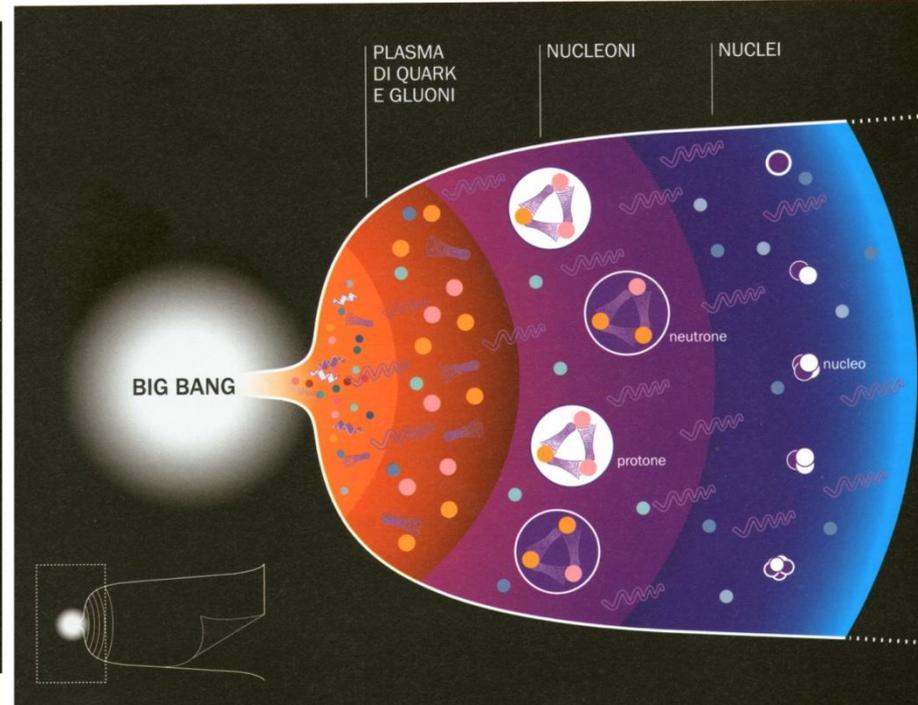
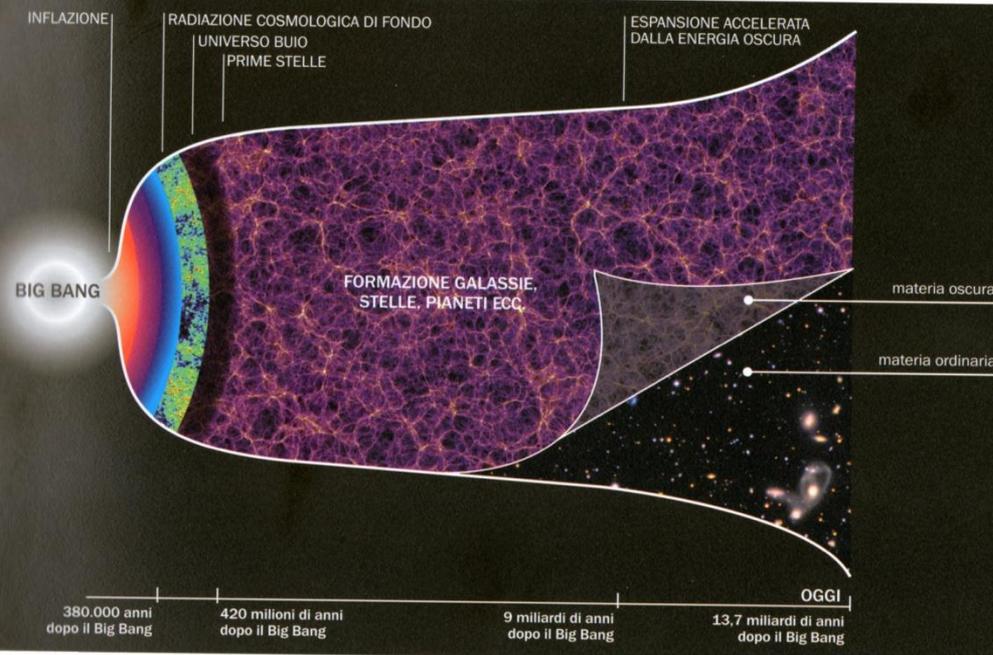
carica elettrica  $-1$

**MEDIATORI**

gluone <b><math>g</math></b>
fotone <b><math>\gamma</math></b>
bosone W <b><math>W^\pm</math></b>
bosone Z <b><math>Z</math></b>

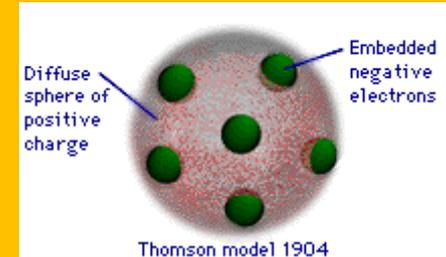


# Evoluzione Universo



# I nuclei.

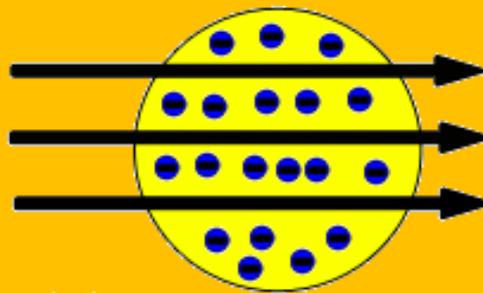
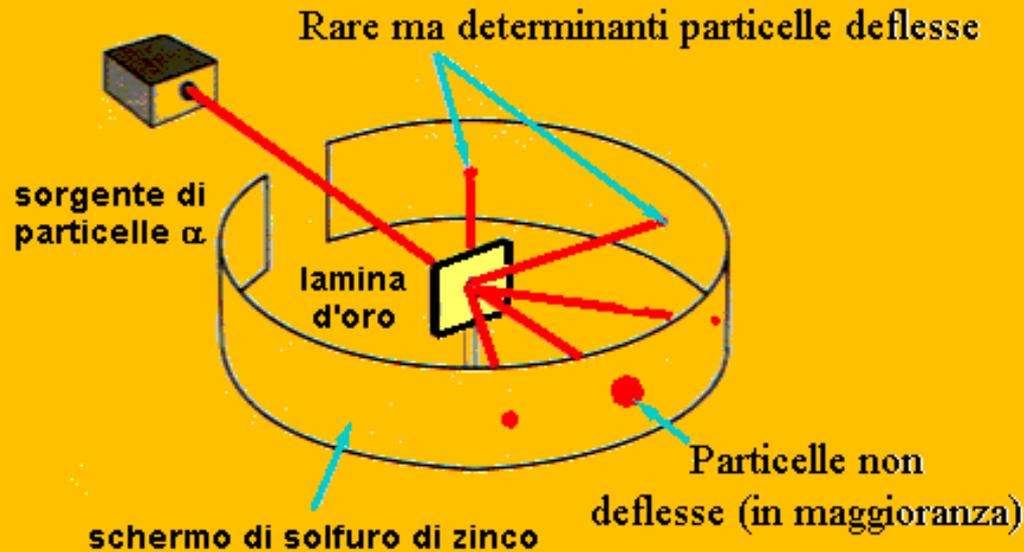
- **Thompson** propose gli elettroni fossero diffusi in una sostanza gelatinosa con carica positiva. (figura)
- **Rutherford** bombardò con particelle alfa (atomi di elio senza elettroni) una sottile lamina di oro ed osservò che una piccola frazione di era deflessa di più di  $90^\circ$ . Esse colpivano qualcosa di molto piccolo e duro: il nucleo. (video)
- Propose il modello di **atomo nucleare** in cui tutta la carica positiva e la massa di un atomo sono concentrate nel nucleo atomico, e gli elettroni gli ruotano attorno.
- Il nucleo è grande circa  $1/10\ 000$  del diametro dell'atomo stesso.



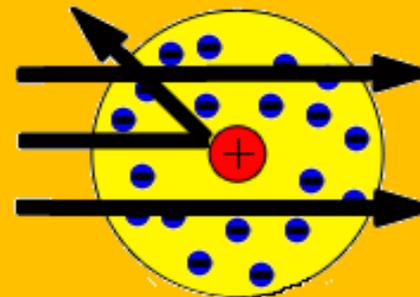
Modello di  
Thompson



# Rutherford immagine



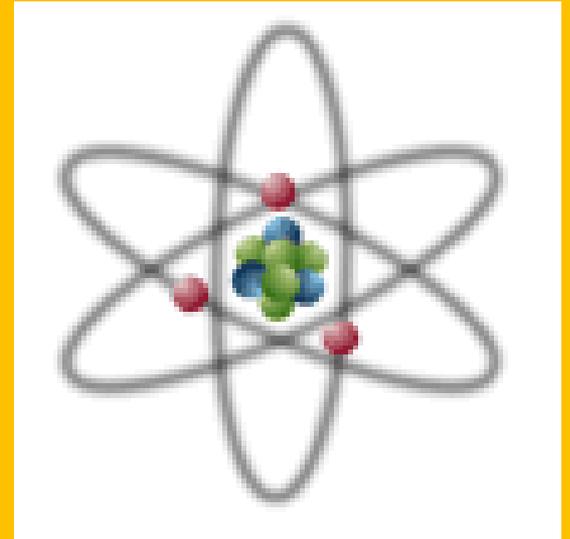
Modello  
non più accettabile



Modello  
proposto

# Struttura dell'atomo

- Gli atomi sono costituiti da un nucleo positivo e da elettroni negativi.
- Il nucleo ha un raggio di circa  $10^{-5}$  Å.
- Il raggio di un atomo è di circa 1 Å  
( $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ )



Proporzione: 100 m vs 1 mm

# Analogia dimensioni nucleo-mantello



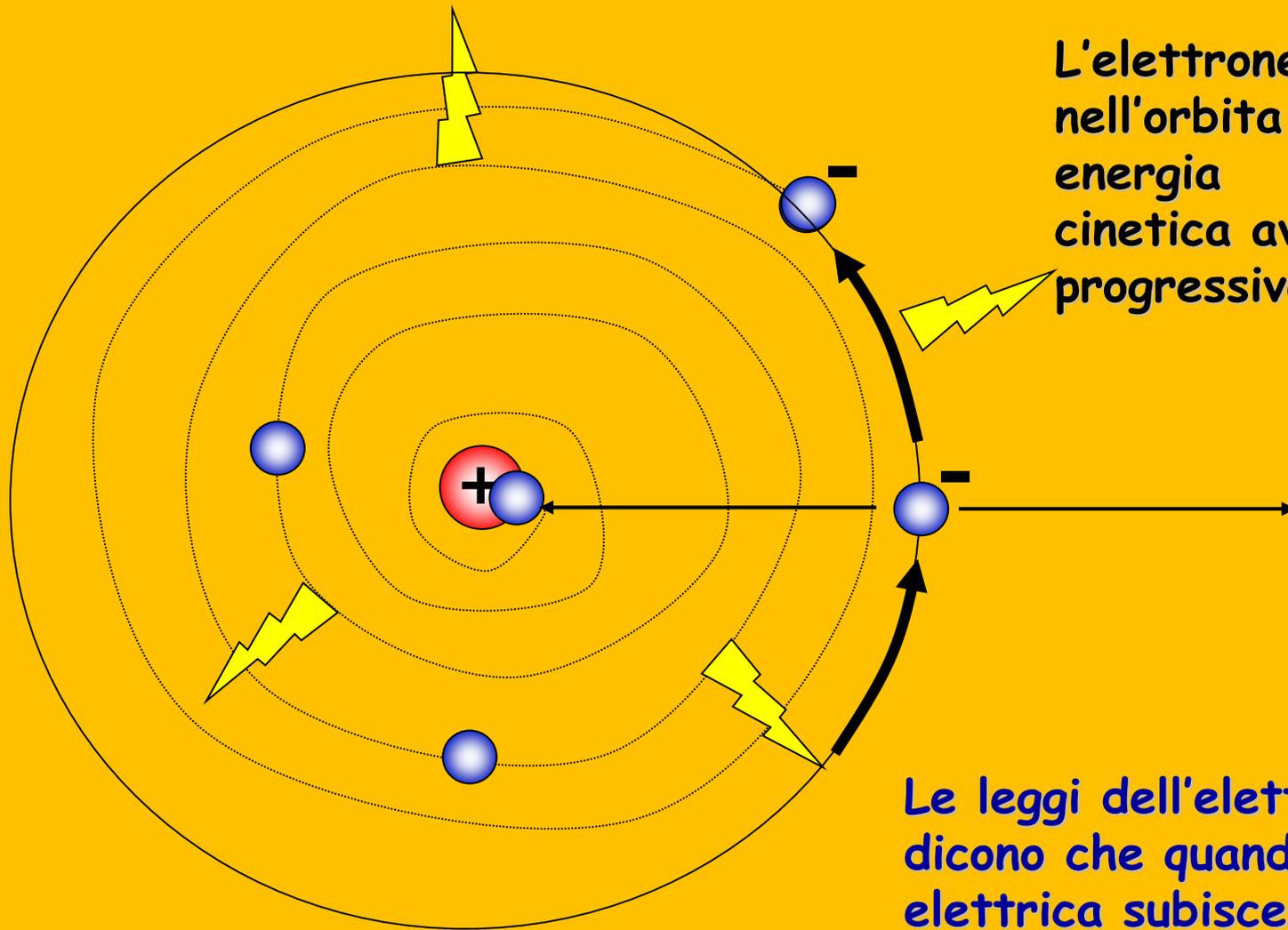
# L'atomo

- Il nucleo è fatto da **Protoni e Neutroni** (Nucleoni)
- Gli **Elettroni** orbitano intorno al nucleo
- In un atomo elettricamente neutro il numero di protoni deve essere uguale a quello degli elettroni.
- Tutti gli atomi di un elemento hanno lo stesso numero di protoni: **numero atomico, Z**.
- La massa di un atomo è misurata in Atomic Mass Unit (amu o uma). Il  $^{12}\text{C}$  ha massa di 12 uma
- **Il numero di massa (A)** è il numero di **nucleoni** (Protoni + Neutroni). Dà una stima abbastanza precisa della massa in uma.
- Ogni elemento ha un nome e un simbolo (Es. Sodio = Na, Z=11, A=23 per l'isotopo più comune).

# Le masse degli atomi

- Le masse degli atomi ( $A$ ) o molecole ( $PM$ ) vengono misurate con lo *spettrometro di massa*. Atomi o molecole vengono iniettati nella camera di ionizzazione dove vengono poi esposti ad un fascio di elettroni ad alta velocità. Questi estraggono elettroni dagli atomi formando così "ioni" positivi.
- Gli ioni vengono accelerati da un potenziale elettrostatico elevato: gli ioni più leggeri raggiungono velocità più elevate di quelli più pesanti, e la loro massa è calcolata dalla velocità raggiunta.
- Un **isotopo** viene indicato: neon-20, neon-21 e neon-22:  $^{20}\text{Ne}$ ,  $^{21}\text{Ne}$  e  $^{22}\text{Ne}$ .
- Le masse atomiche sono tutte molto piccole, tra  $10^{-24}$  e  $10^{-22}$  g. Vengono espresse in "unità di massa atomica" ( $uma = 6 \times 10^{-23}$  g). (Dalton)
- Una  $uma$  è la  $1/12$  parte della massa dell'atomo di  $^{12}\text{C}$
- Uno **ione** è un atomo o gruppo di atomi con *carica elettrica*.

# Modello planetario di Rutherford E il problema di Bohr



L'elettrone movendosi  
nell'orbita perderebbe  
energia  
cinetica avvicinandosi  
progressivamente al nucleo

Le leggi dell'elettromagnetismo  
dicono che quando una carica  
elettrica subisce una  
accelerazione perde energia

# L'equazione di Plank.

- Gli oggetti riscaldati emettono luce (radiazioni) la cui lunghezza d'onda dipende dalla temperatura
- Plank (1900): l'energia esiste in piccoli pacchetti (**quanti**).
- L'energia della radiazione e' collegata alla frequenza

$$E = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda$$

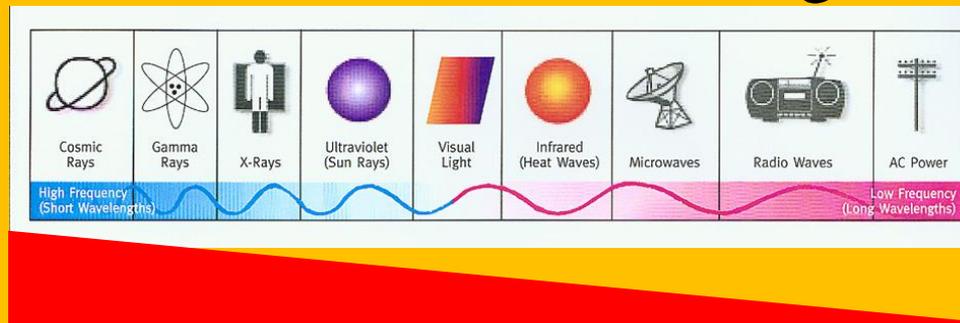
Costante di Plank  
 $6.6 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

frequenza

Velocità della luce nel vuoto =  $3 \times 10^8 \text{ m/s}$

Lunghezza d'onda

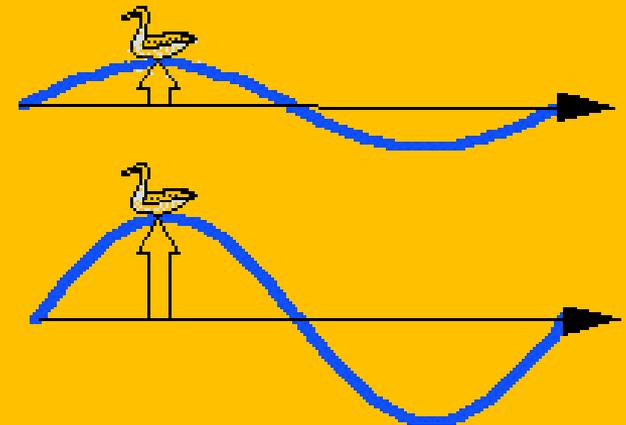
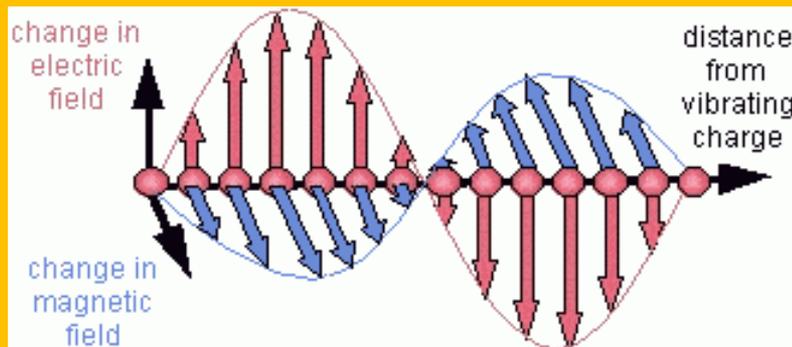
- L'energia della radiazione aumenta con la frequenza ma diminuisce con la lunghezza d'onda

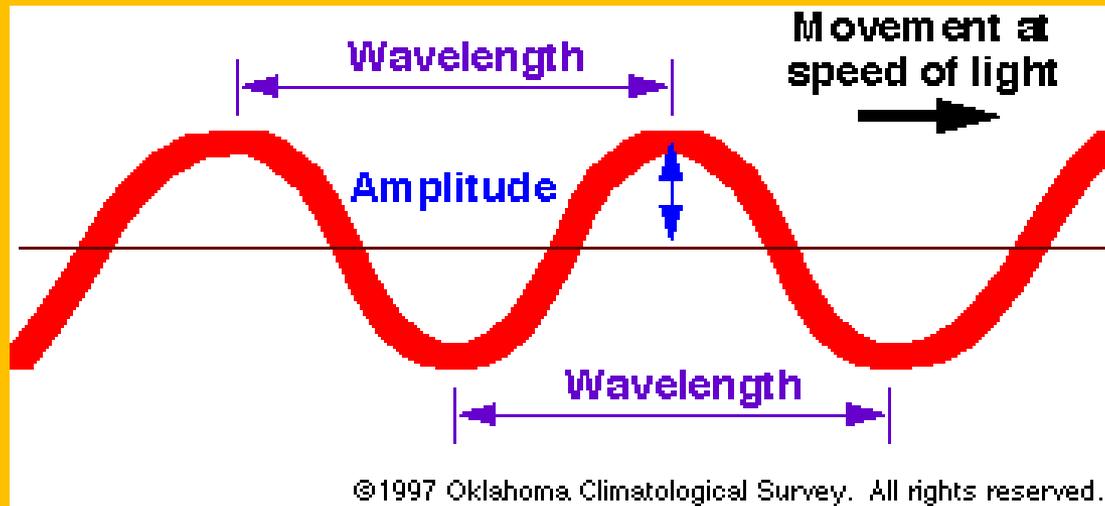


# Le radiazioni elettromagnetiche

- Nel 1864 James Maxwell ha sviluppato una teoria per descrivere le radiazioni: onde oscillanti del **campo elettrico e magnetico**, perpendicolari tra di loro.
  - Lunghezza d'onda  $\lambda$  (la lettera greca lambda)
  - Ampiezza
  - Velocità della luce  $c$  ( $3 \cdot 10^8$  m/s)
  - Frequenza  $\nu$  (nu, misurata in Hz = cicli/Sec)

$$\lambda \cdot \nu = c$$



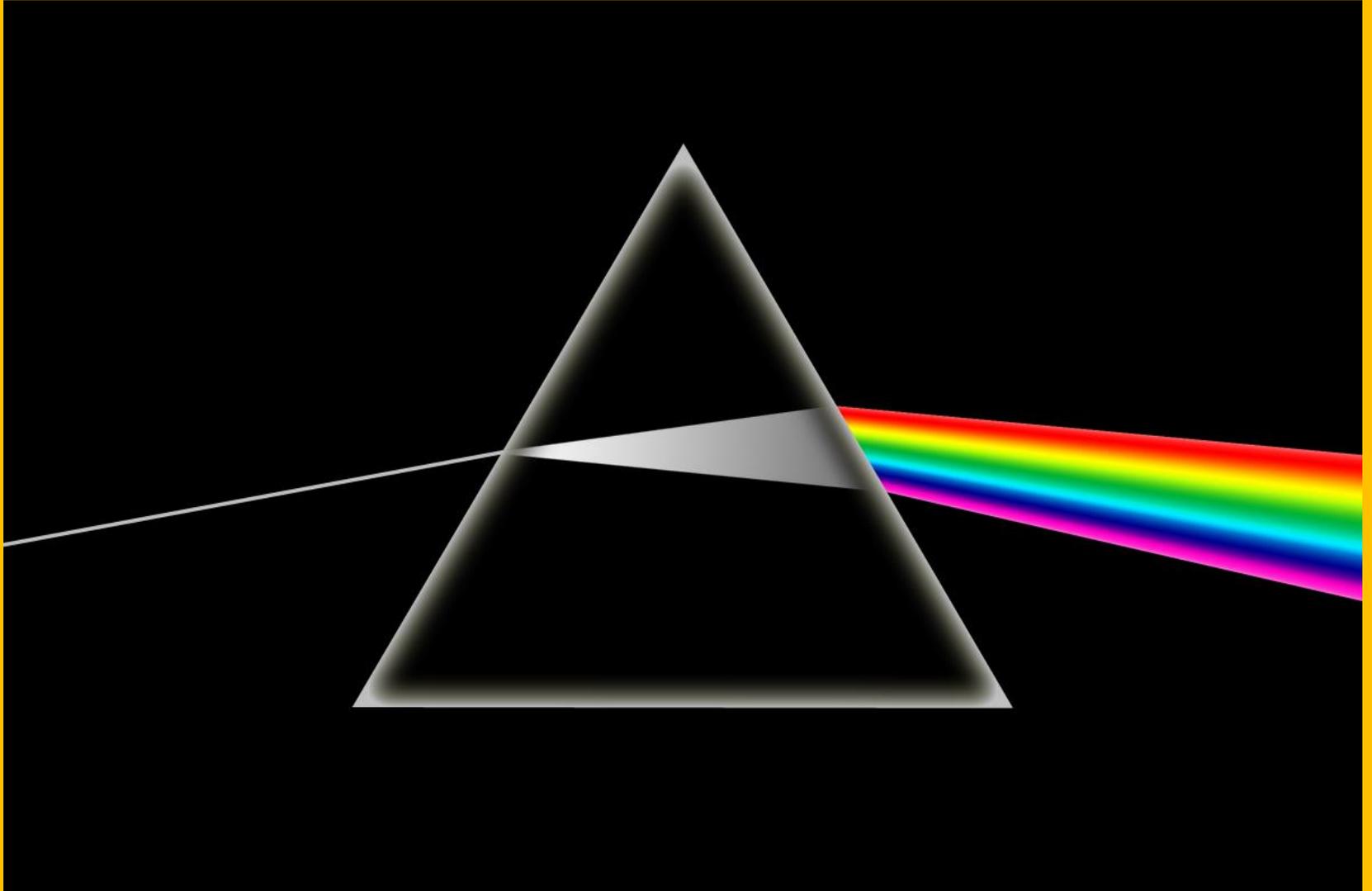


Lunghezza d'onda  $\lambda$  = tratto corrispondente all'intero ciclo di valori

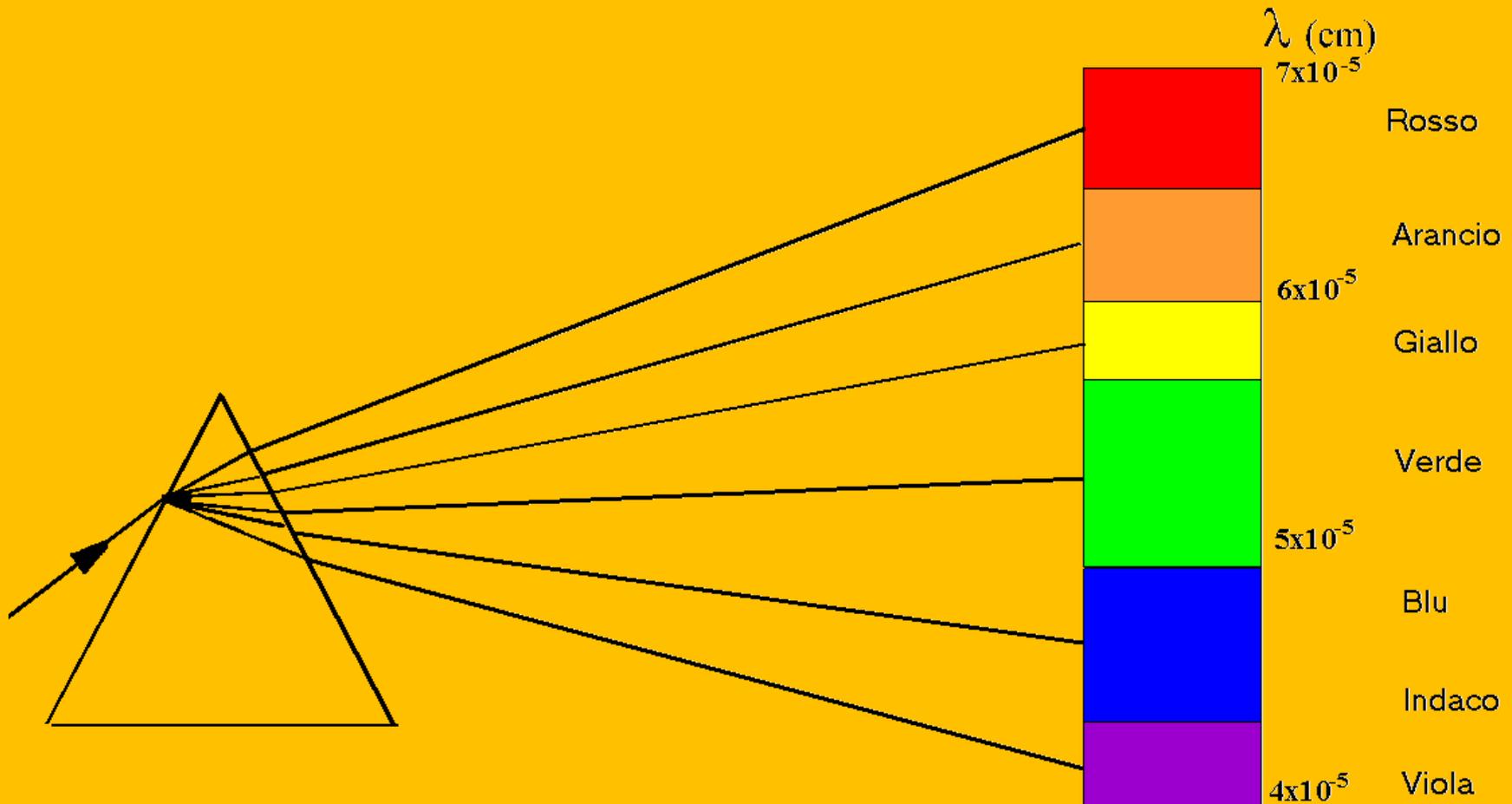
Frequenza  $\nu$  = numero di volte per secondo in cui il vettore assume l'intero ciclo di valori

$$\nu \text{ (Hz)} = c(\text{m s}^{-1}) / \lambda(\text{m})$$

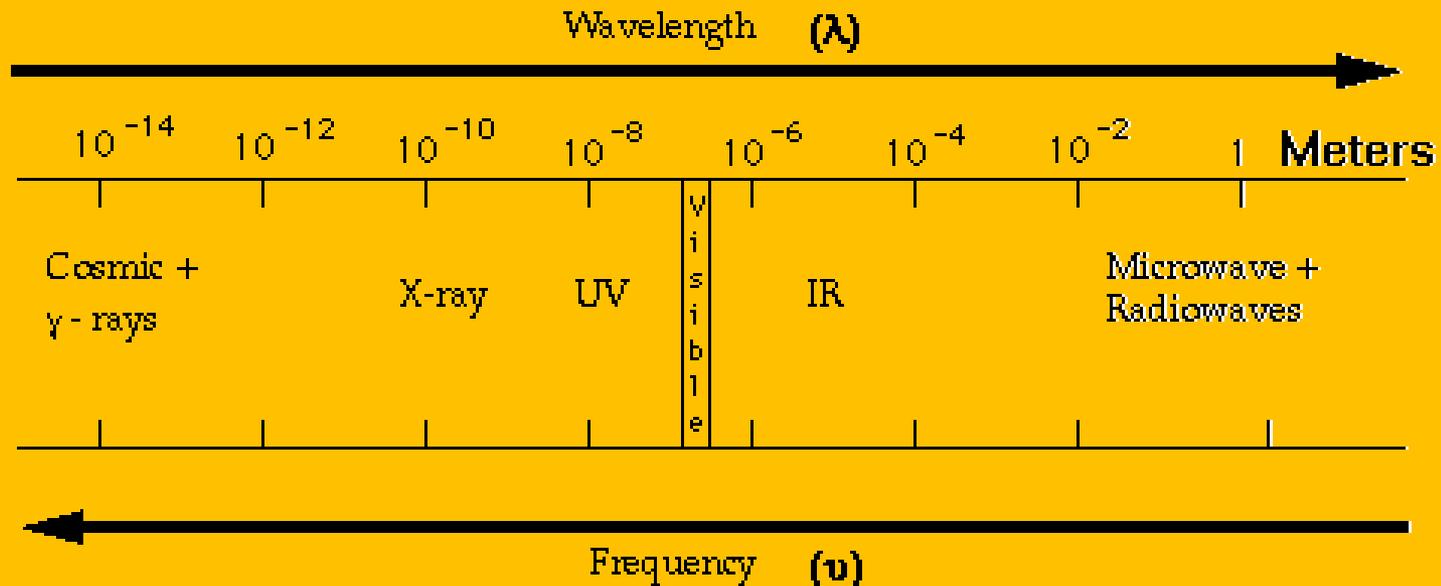
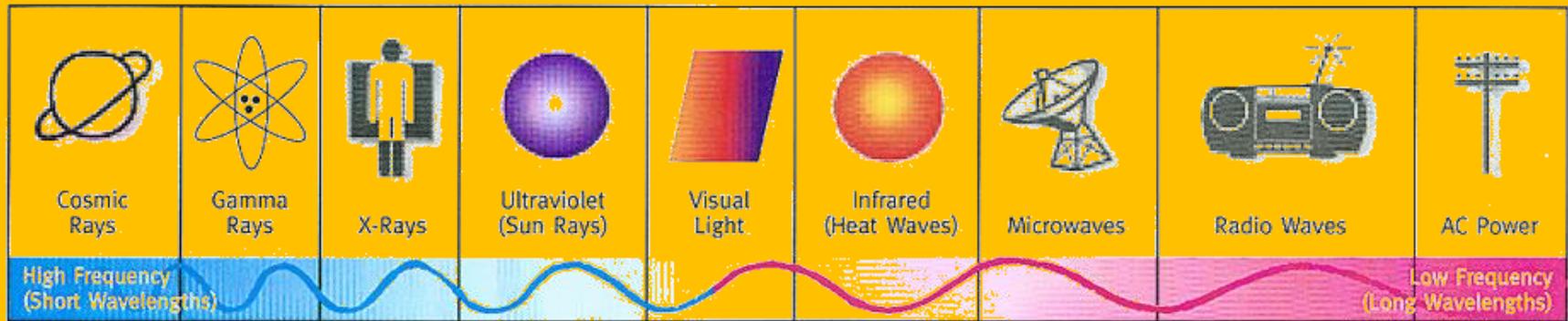
# The Dark Side of the Moon



# Diffrazione della luce visibile da parte di un prisma e spettro della luce.



# Spettro delle radiazioni elettromagnetiche



# Postulati del modello atomico di Bohr

-Esistono delle **orbite stazionare** che consentono all'elettrone di girare attorno al nucleo senza emettere energia

-Il **momento angolare** degli elettroni orbitanti ( $mvr$ ) è **quantizzato**

$$mvr = n \cdot (h/2\pi)$$

Ma la quantizzazione del momento angolare quantizza anche il raggio

$$R = n^2 \cdot 53\text{pm}$$

$$E = 2.18 \cdot 10^{-18} \cdot 1/n^2 \text{ J}$$

# Energia e raggio delle prime orbite stazionarie ipotizzate da Bohr

N° quantico(n) Livello	Raggio (pm)	Energia totale (J)
1	53	$E_1 = -R_H / 1 = -2.18 \cdot 10^{-18}$
2	212	$E_2 = -R_H / 4 = -0.545 \cdot 10^{-18}$
3	477	$E_3 = -R_H / 9 = -0.24 \cdot 10^{-18}$
4	848	$E_4 = -R_H / 16 = -0.14 \cdot 10^{-18}$

$$\text{Forza centripeta} = \frac{ke^2}{r^2}$$

$$\text{forza centrifuga} = \frac{mv^2}{r}$$

In condizioni di equilibrio la forza centripeta è uguale alla centrifuga :

$$\frac{ke^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

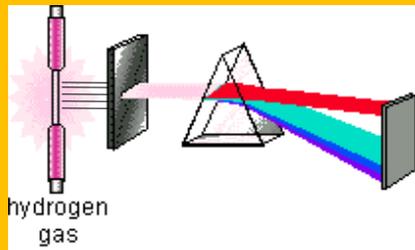
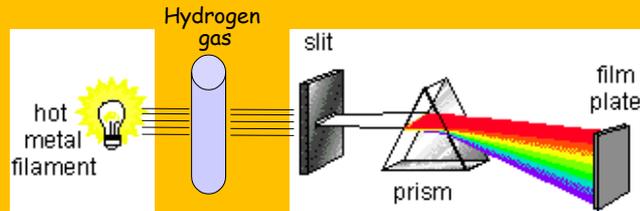
$$\text{da cui : } r = \frac{ke^2}{mv^2}$$

continuo alla lavagna.....

# LIMITAZIONI

- non è "ortodosso"; si parte dalla meccanica tradizionale (Newtoniana) e si arriva ad un modello fisico discontinuo introducendo assunzioni non dimostrate.
- il modello fornisce una spiegazione delle proprietà spettroscopiche dell'atomo di idrogeno ma non è sufficientemente "robusto" per interpretare gli spettri energetici degli altri elementi polielettronici.

# Linee spettrali atomiche



La luce emanata da una sostanza può essere analizzata (**spettro** di emissione)

Ogni elemento (sostanza) produce **linee** di diversa lunghezza d'onda

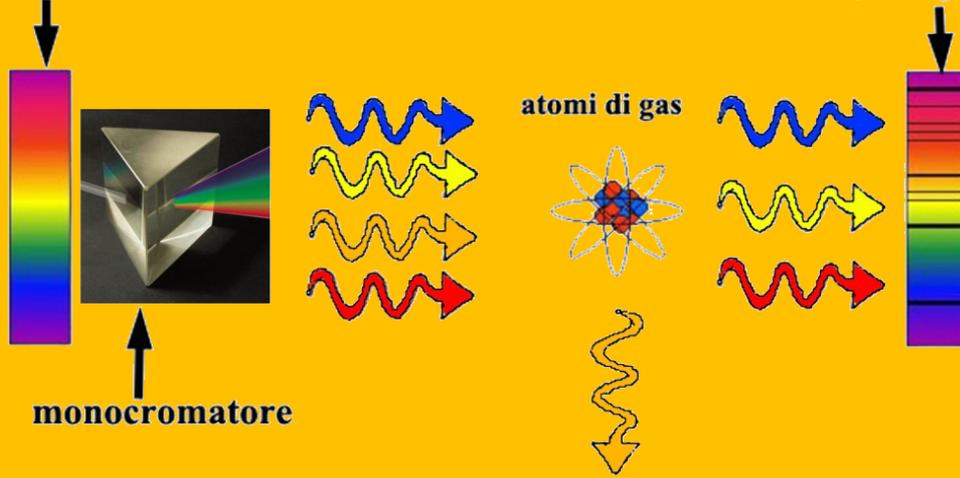
**Balmer** (1885) e Rydberg hanno trovato equazioni che descrivono le lunghezze d'onda emesse dall'idrogeno

$$\nu = R \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$(n_f = (1), 2, 3, 4 \dots \quad n_i = n_f + 1, n_f + 2 \dots)$

spettro della radiazione emessa da una sorgente

spettro di assorbimento atomico (con righe mancanti)



# Emissione ed Assorbimento

spettro di emissione a righe  
(complementari allo spettro di assorbimento)

$\lambda/\text{nm}$

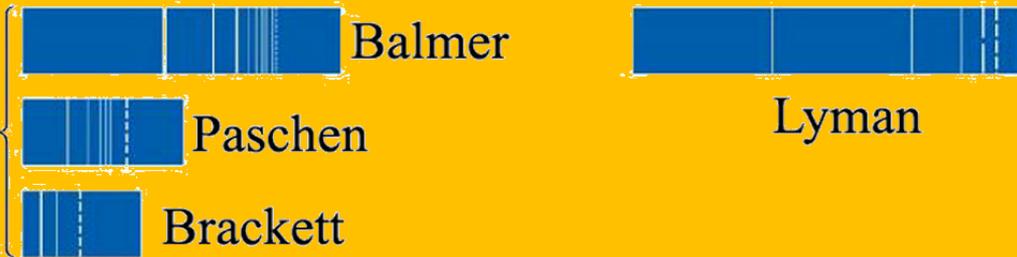
2000 1000 800 600 500 400 300 200 150 120 100

visibile

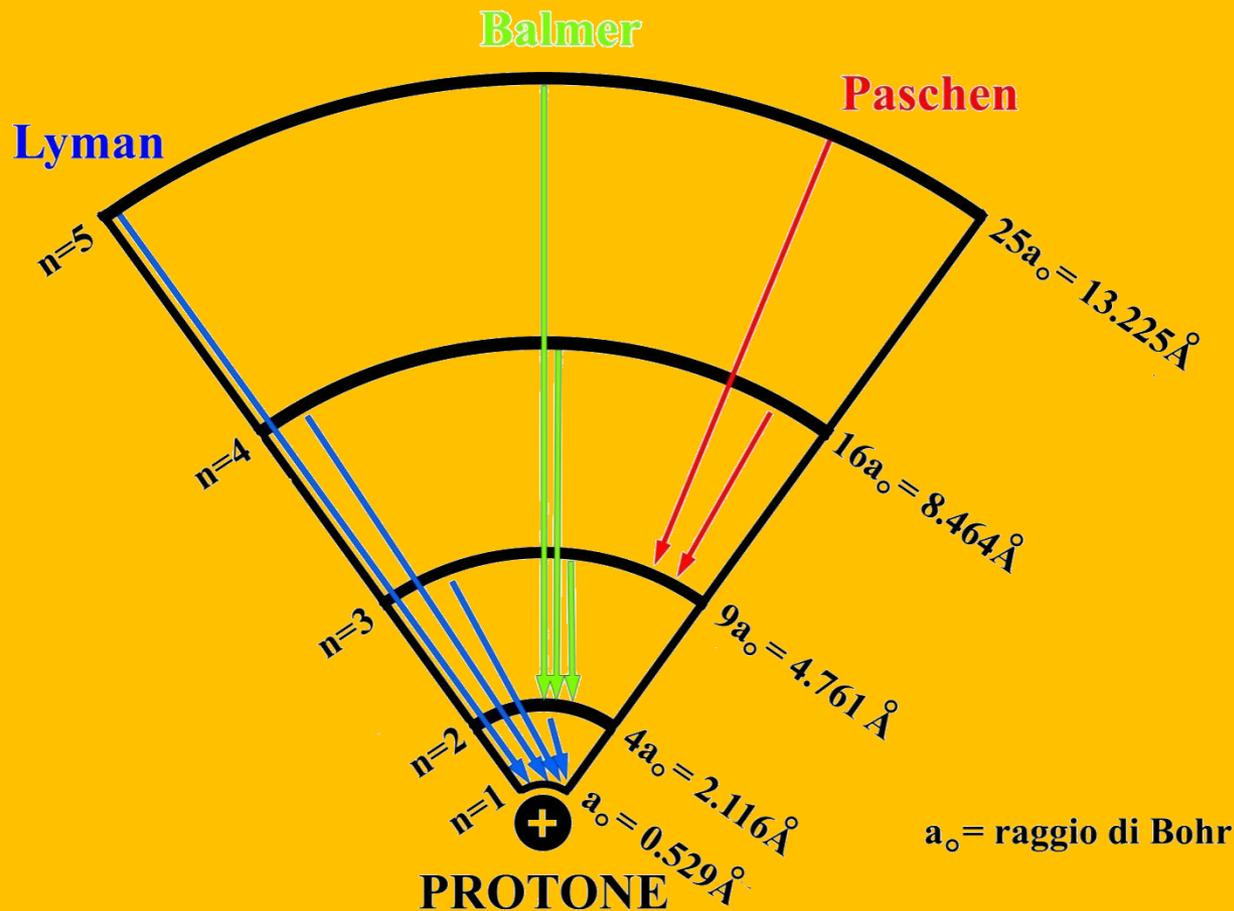
spettro totale



analisi delle singole porzioni



# Emissione

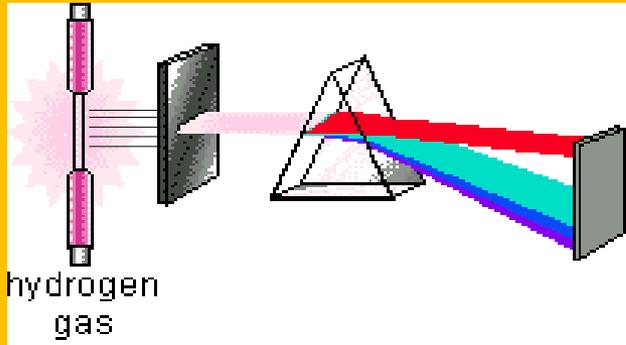


$$\nu = R \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

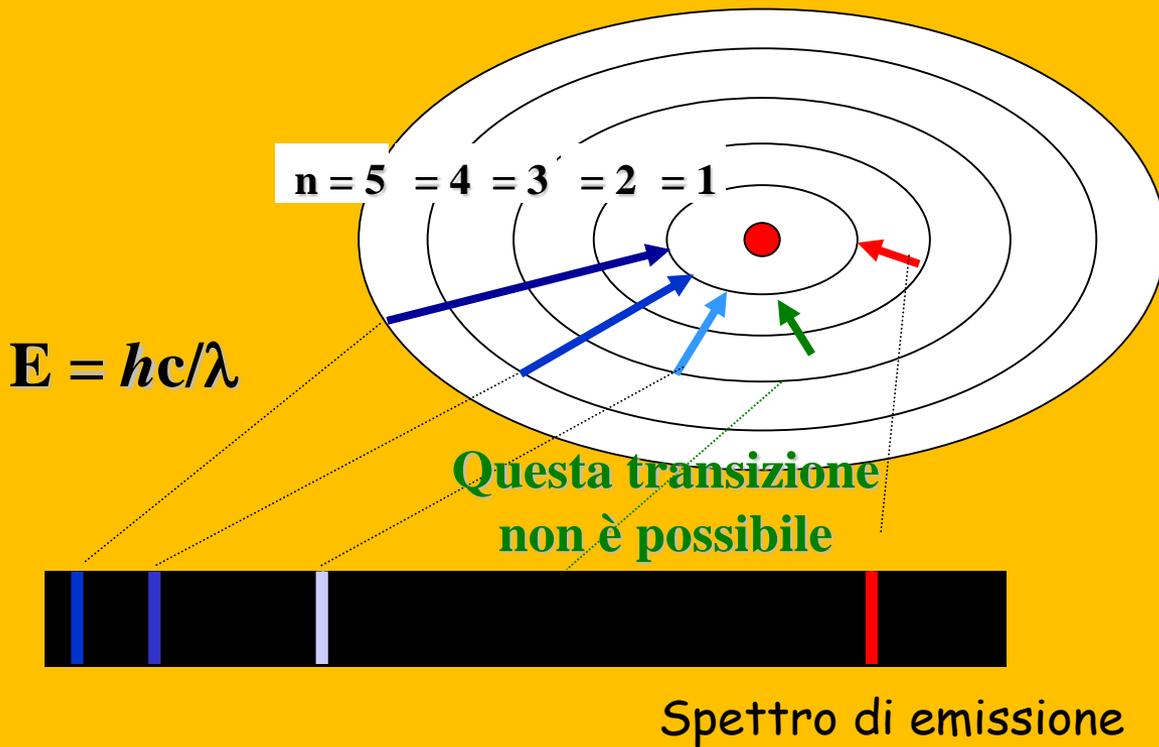
(L,  $n_f = 1$ ; B,  $n_f = 2$ ; P,  $n_f = 3$ )

$R_H = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ ; valore sperimentale coincidente con i calcoli di Bohr

# Modello atomico di Bohr



- Gli elementi eccitati emettono pacchetti specifici di energia (luce) quindi gli elettroni possono occupare solo orbite specifiche intorno al nucleo, ed ogni orbita ha energia quantizzata.



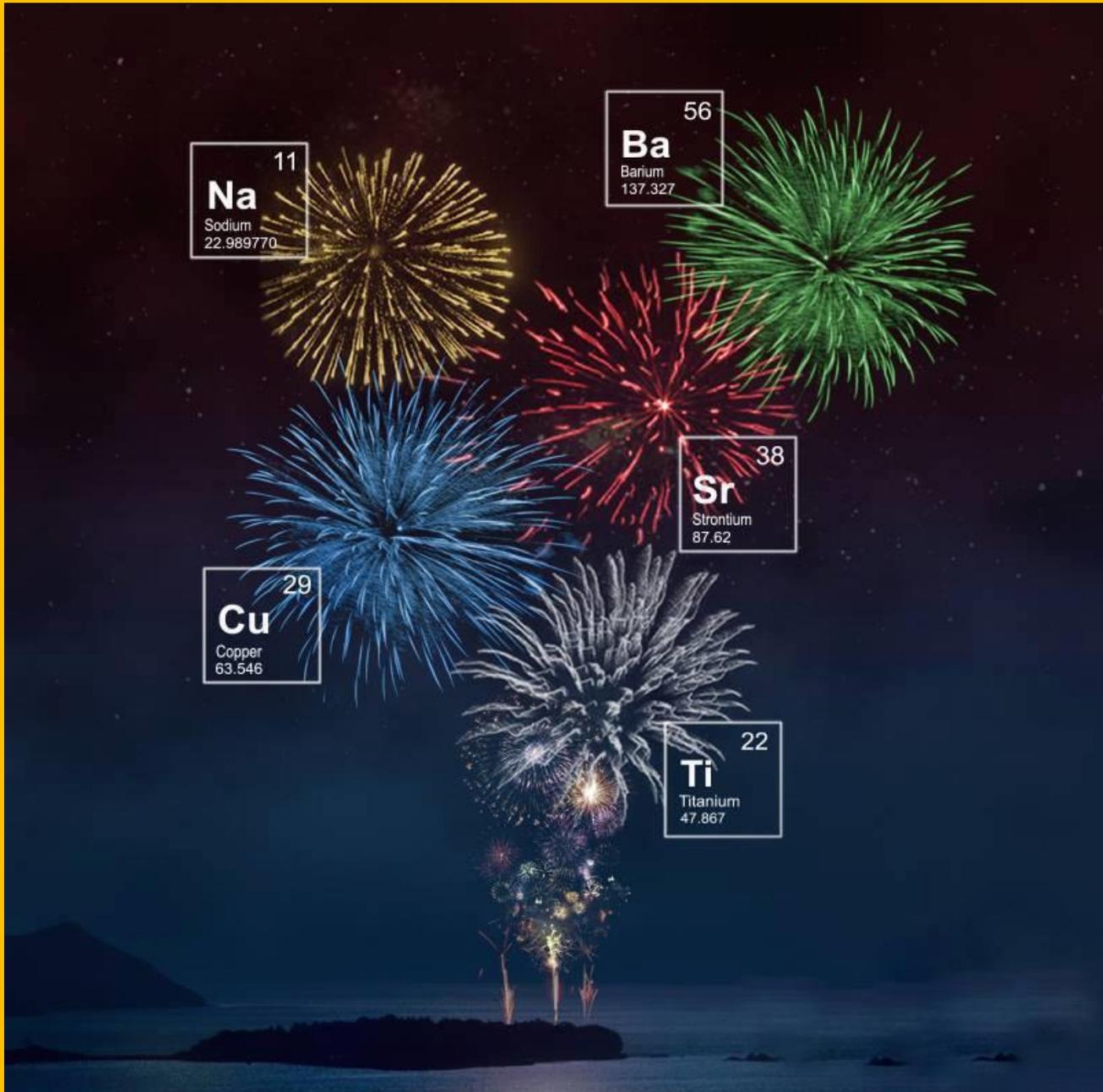
11  
**Na**  
Sodium  
22.989770

56  
**Ba**  
Barium  
137.327

29  
**Cu**  
Copper  
63.546

38  
**Sr**  
Strontium  
87.62

22  
**Ti**  
Titanium  
47.867





RbCl

CsCl



CaCl<sub>2</sub>

SrCl<sub>2</sub>

BaCl<sub>2</sub>

CuCl<sub>2</sub>

TiCl

# Perché l'atomo non collassa?

- *Gli elettroni nell'atomo devono muoversi*

Il nucleo li attrae, ed essi dovrebbero accelerare verso di esso

- *Se gli elettroni si muovono*

Il movimento emette radiazioni elettromagnetiche  
Questa causa perdita di energia, l'atomo collassa.

- *Perché non collassa?*

La fisica classica non lo spiega

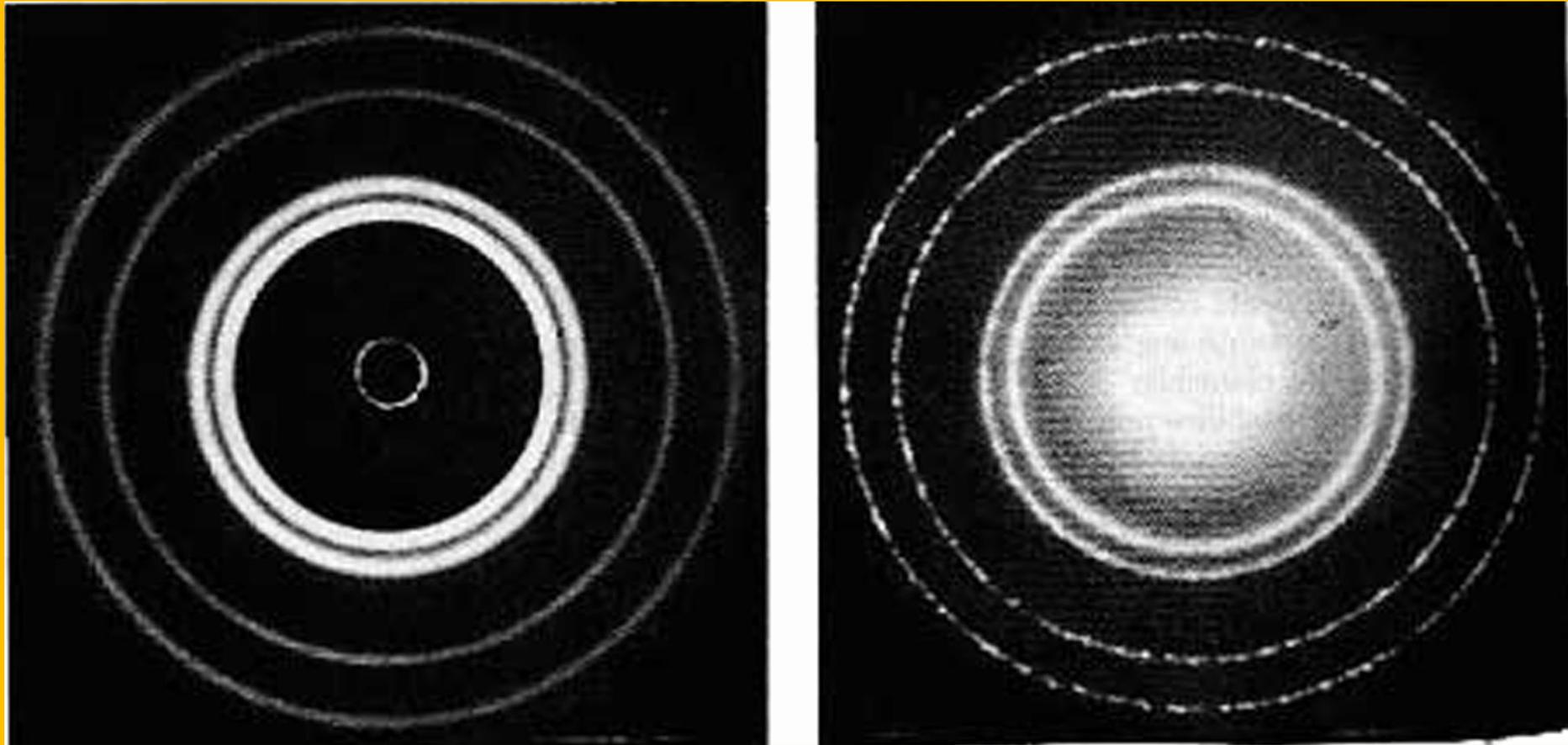
**Gli elettroni si comportano da onda/particella**

# Ipotesi della dualità onda-corpusco- lo di de Broglie (1924)

- a tutti gli oggetti in movimento è possibile associare una lunghezza d'onda
- quanto più piccolo è l'oggetto tanto maggiore è la lunghezza d'onda associata (e quindi il suo comportamento ondulatorio sarà più evidente)

$$\lambda = \frac{h}{m v}$$

# Diffrazione di Devisson e Germer



# Principio di indeterminazione di Heisenberg

Per  $\Delta$  si intende la  
variazione di errore  
nella determinazine

$$\Delta x \Delta p > \frac{h}{4\pi}$$
$$\Delta t \Delta E > \frac{h}{4\pi}$$

$$p = mv$$

Proprietà accoppiate di un elettrone come posizione e momento, o energia e tempo di permanenza in un dato volume **non possono essere determinate simultaneamente** con precisione infinita.

Limite invalicabile alla conoscenza contemporanea della quantità di moto e della posizione di un oggetto

Heisenberg e

Operatori che NON commutano

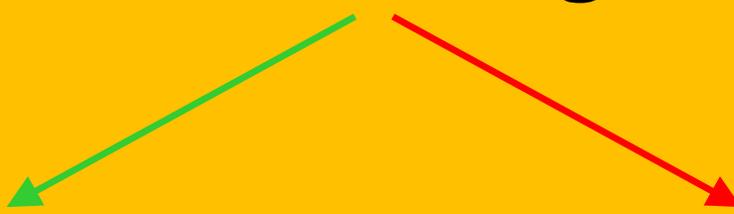
Operatori che commutano

$$[\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \equiv 0$$

Operatori che non commutano

$$[\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$$

# Principio di indeterminazione di Heisenberg

A diagram with two arrows originating from the bottom of the title. A green arrow points down and to the left towards the text 'Fenomeni macroscopici:'. A red arrow points down and to the right towards the text 'Dimensioni atomiche:'.

Fenomeni macroscopici:

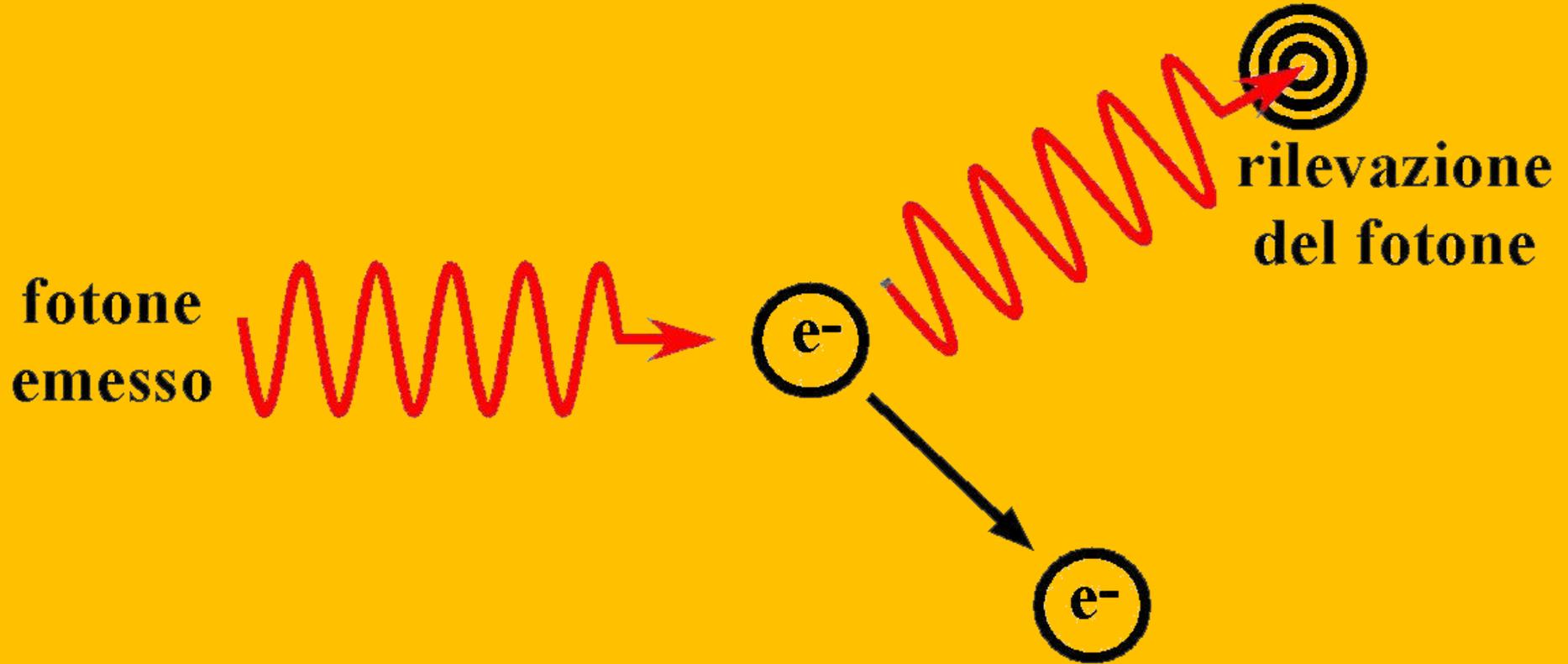
Nessuna conseguenza  
pratica

Dimensioni atomiche:

- Non è possibile definire la traiettoria di un elettrone intorno al nucleo

- Si può parlare della posizione dell'elettrone solo in termini probabilistici: si troverà in una regione dello spazio con una certa probabilità.

# Effetto Compton

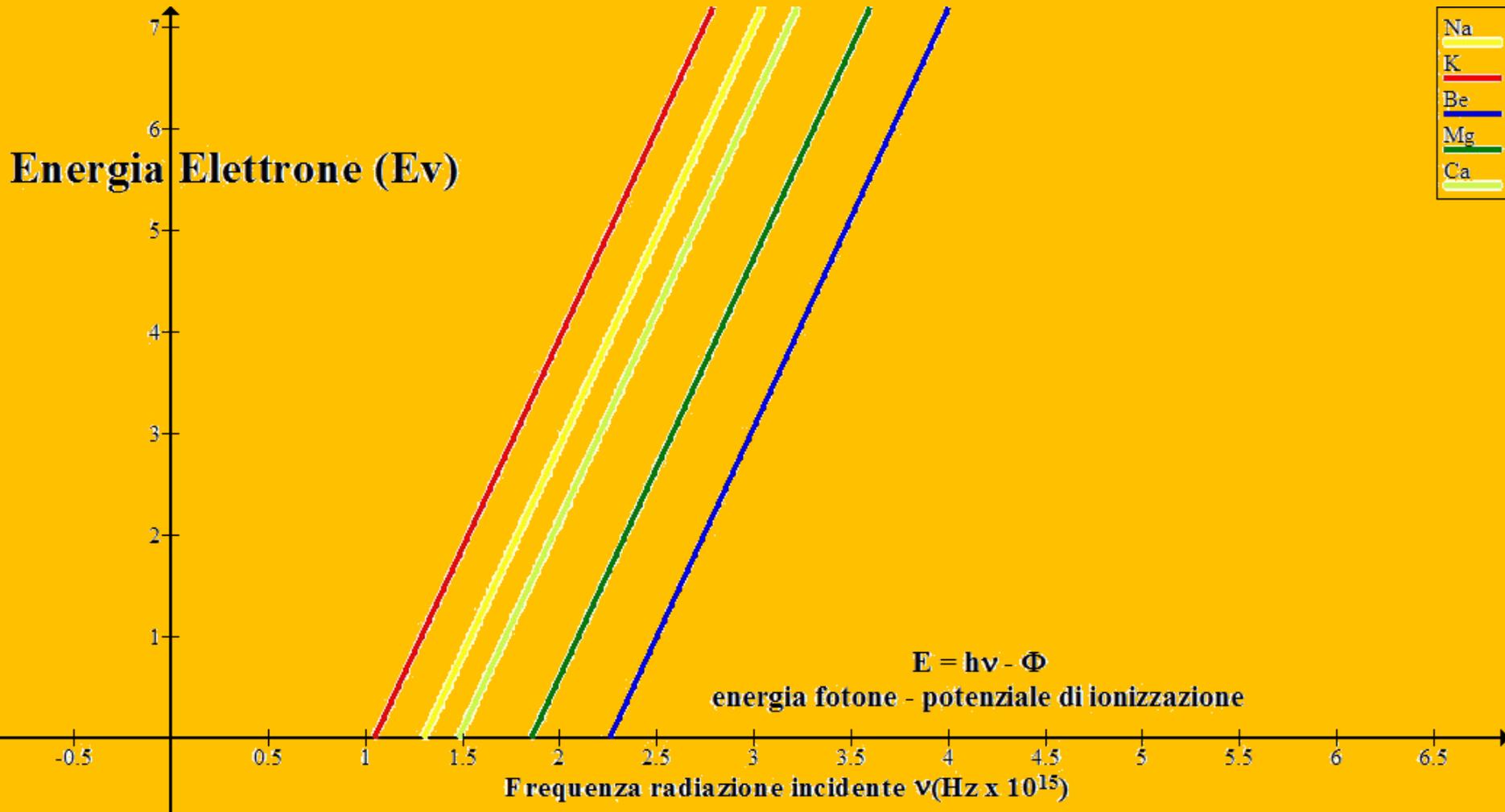


# Energia delle radiazioni elettromagnetiche

- Le radiazioni trasportano energia nello spazio
  - Lavoro per cambiare il campo elettromagnetico
  - Il trasmettente perde energia, il ricevente la guadagna
- Nelle onde classiche
  - L'energia è collegata all'ampiezza dell'onda
  - La luce più intensa dovrebbe portare più energia...
- Effetto fotoelettrico:
  - l'intensità non ha effetto sull'energia cinetica dell'elettrone emesso (più luce più elettroni)
  - La luce rossa non emette elettroni, quella blu sì
- Quindi: luce è fatta da fotoni, più luce = più fotoni.
- $E = h \cdot \nu$

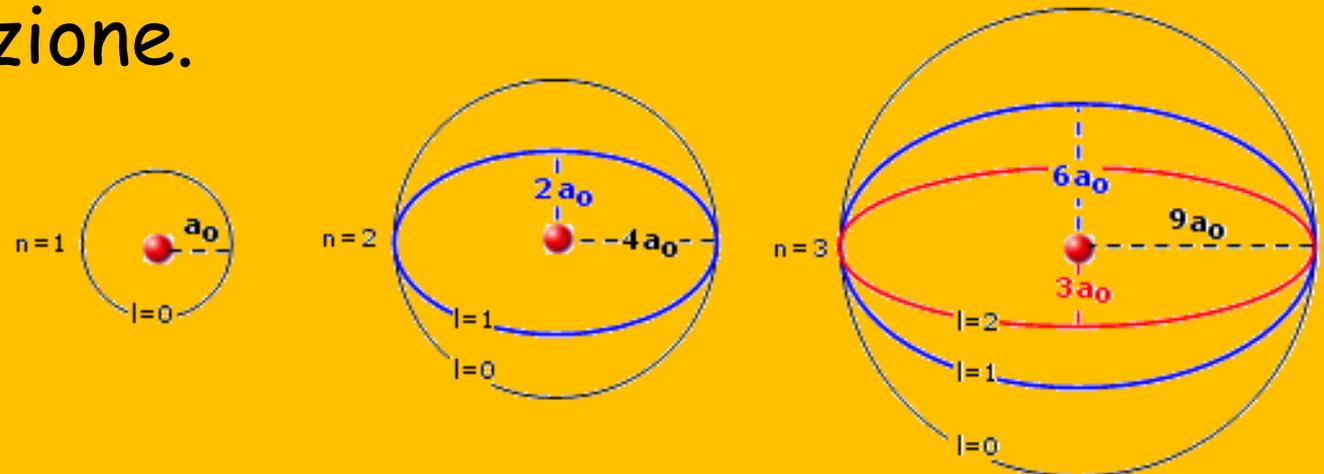
# Effetto fotoelettrico

A. Einstein, 1905 (Nobel 1921)

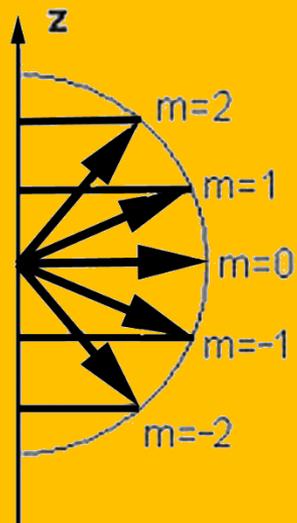
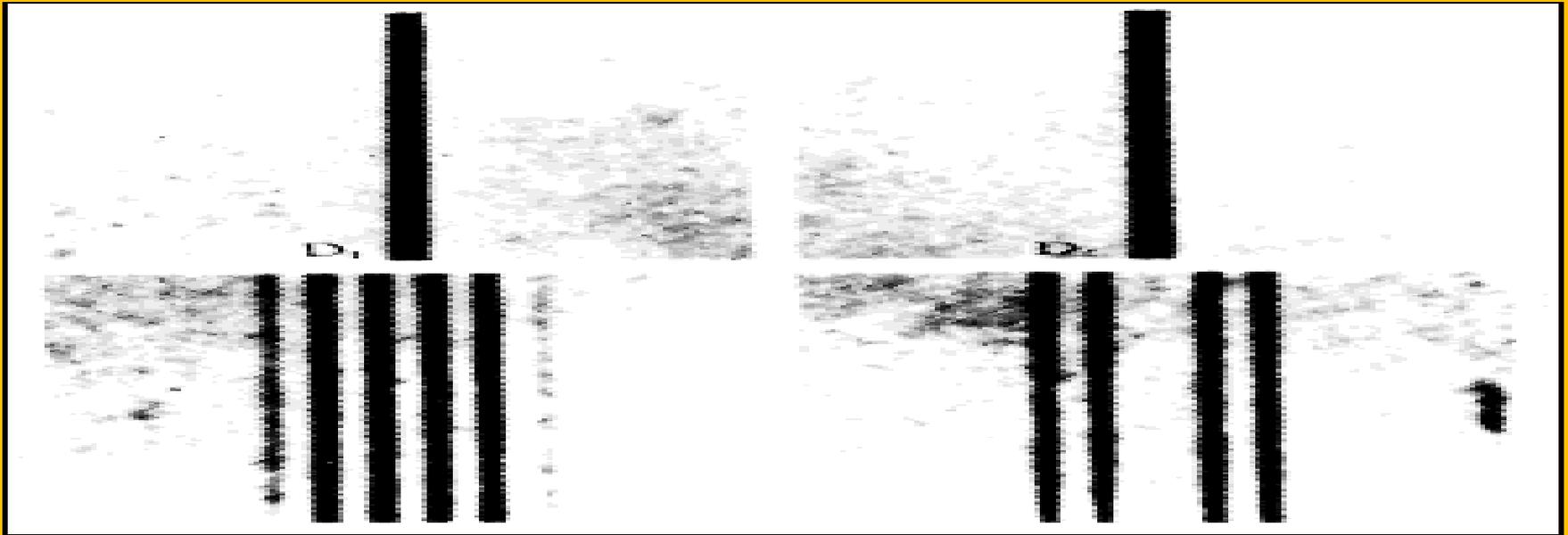


# Sommerfeld

L'avvento di spettrometri più precisi mise in evidenza i limiti della teoria di Bohr. Il fisico tedesco propose orbite ellittiche, dunque schiacciamento delle orbite non sempre circolari e questo aumentava la quantità di ipotetiche orbite e di salti elettronici, mantenendo il concetto della quantizzazione.



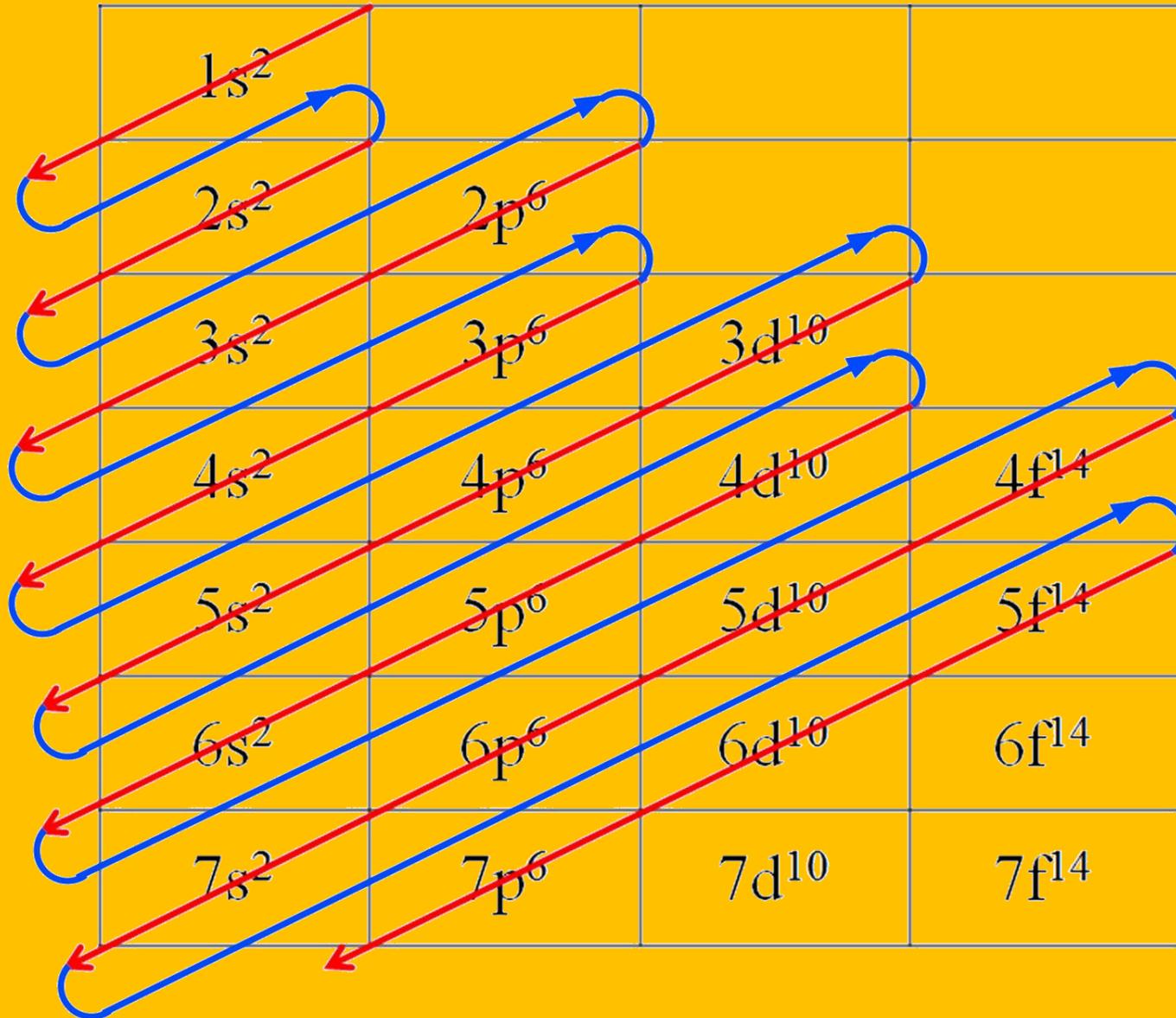
# Zeeman



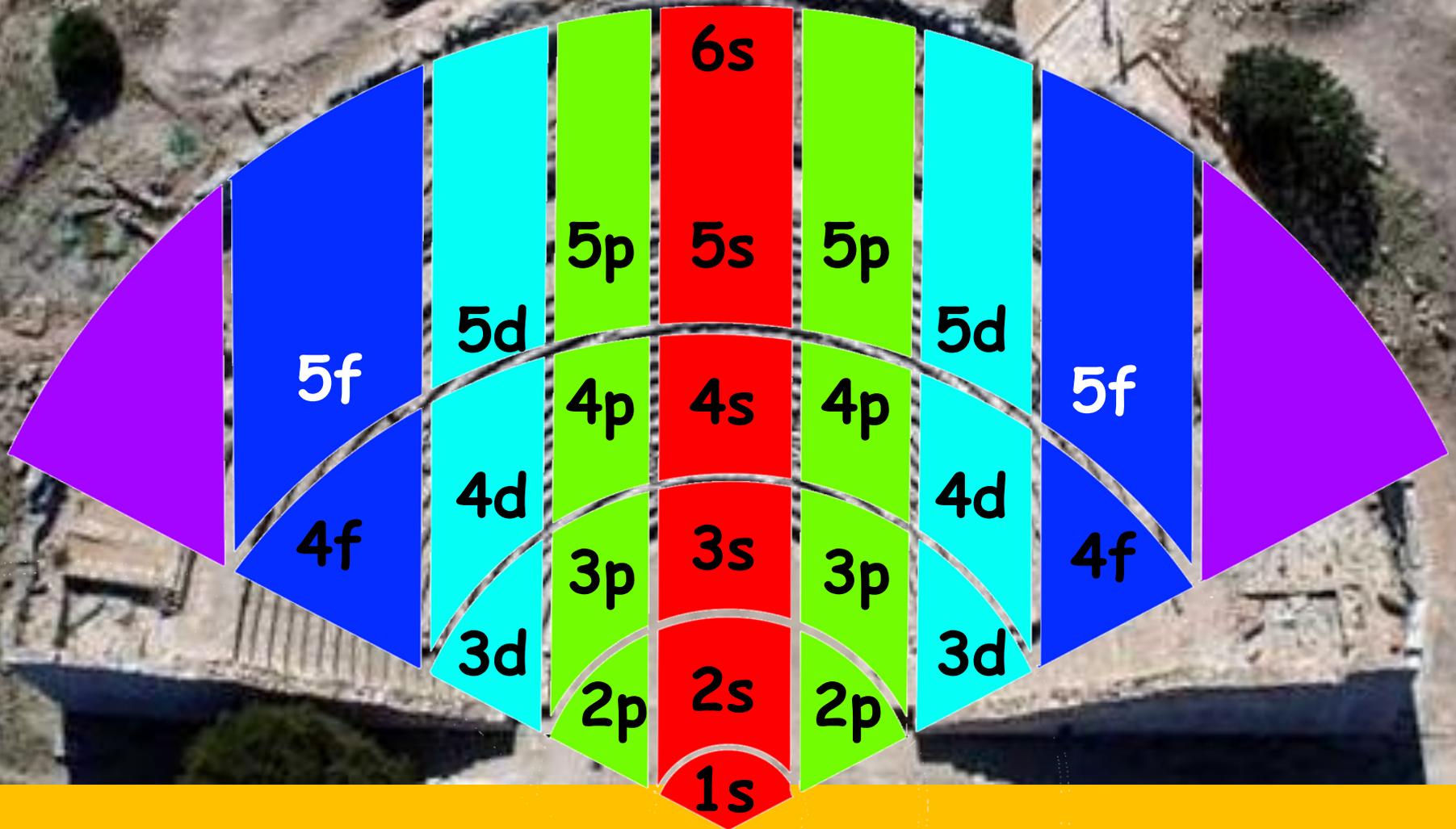
# Numeri quantici

- Numero quantico principale  $n$  (1, 2, 3, 4, ...)
- Numero quantico secondario o azimutale ( $l = 0, \dots, n-1$ )
- Numero quantico magnetico ( $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$ )
- Numero quantico di spin ( $m_s = \pm 1/2$ )

# Aufbau



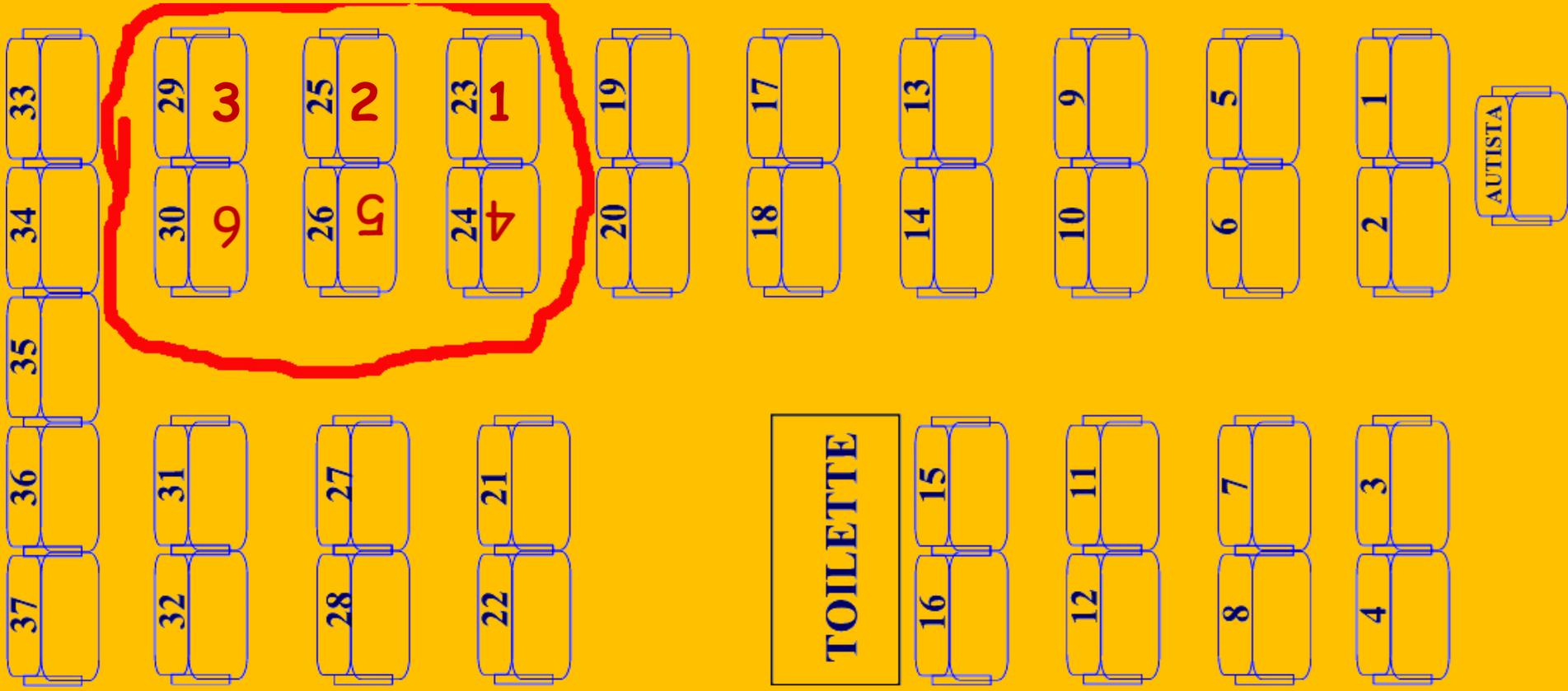
# Aufbau e il teatro di Segesta



# Regole di riempimento

- si riempie prima il livello con  $n$  più basso;
- all'interno del medesimo livello si riempie prima il sottolivello definito dal numero quantico azimutale  $l$  più basso (I regola di Hund);
- gli orbitali degeneri (con la stessa energia) si riempiono seguendo il principio della massima molteplicità (II regola di Hund);
- il riempimento avviene in ottemperanza al principio di esclusione di Pauli.

# Regole della Natura...



# L'atomo “quanto-meccanico”

- Gli elettroni nell'atomo hanno energie quantizzate
- Le funzioni d'onda dell'elettrone sono tridimensionali, quindi definite da tre coordinate spaziali
- La funzione d'onda che descrive un elettrone in un atomo è l'orbitale atomico
- Le energie e le forme matematiche degli orbitali sono calcolati con l'equazione di Shrodinger
- Ogni elettrone aggiunge 3 variabili ( $x$ ,  $y$  e  $z$ ) all'equazione.
- Le differenze di livello energetico calcolate con l'equazione sono in accordo con quelle calcolate dagli spettri atomici
- Ogni orbitale è definito da tre numeri quantici, più un quarto che lo differenzia dall'altra particella con la quale condivide l'orbitale

# Orbitale

- Una funzione d'onda autofunzione dell'equazione di Schrö dipendente da tre numeri quantici ed associata a specifica energia, orientazione e distanza media
- Porzione di spazio entro la quale si ha una probabilità del 90% di trovare l'elettrone o la particella cui è associato lo stesso

# Livelli, sottolivelli e orbitali

Gli orbitali sono classificati anche:

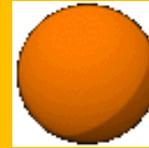
- **Livello ( $n$ ):** Da 1 a 7. Maggiore è il numero maggiore la distanza dal nucleo
- **Sottolivello ( $l$ ):** gruppo di orbitali all'interno di un livello. Identificati dalle lettere **s, p, d, f**. Il numero di sottolivelli è uguale a  $n$  (numero quantico principale)
- **Orbitali singoli:** sono identificati dalla loro direzione spaziale usando le coordinate cartesiane ( $m$ ). Il numero di orbitali dipende dal sottolivello, è **dispari**: 1 in s, 3 in p, 5 in d, 7 in f.

n	l	$m_l$	orbitale	Numero Orbitali
1	0	0	1s	1
2	0	0	2s	1
2	1	-1, 0, 1	2p	3
3	0	0	3s	1
3	1	-1, 0, 1	3p	3
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	5
4	0	0	4s	1
4	1	-1, 0, 1	4p	3
4	2	-2, -1, 0, 1, 2	4d	5
4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f	7

$$n = x, \quad l = 0 \dots (x-1), \quad m = -l \dots +l$$

$$n = 1$$

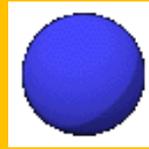
$$l = 0, \quad m = 0$$



1s

$$n = 2$$

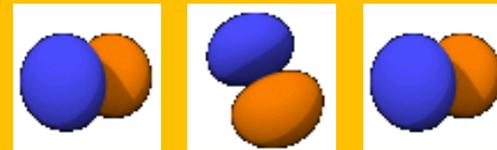
$$l = 0, \quad m = 0$$



2s

$$n = 2$$

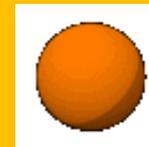
$$l = 1, \quad m = +1, 0, -1$$



2p

$$n = 3$$

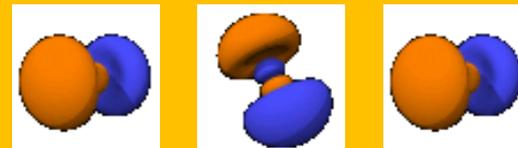
$$l = 0, \quad m = 0$$



3s

$$n = 3$$

$$l = 1, \quad m = +1, 0, -1$$



3p

$$n = 3$$

$$l = 2, \quad m = +2, +1, 0, -1, -2$$



3d

$n = 4$   
 $l = 0, m = 0$



4s

$n = 4$   
 $l = 1, m = +1, 0, -1$



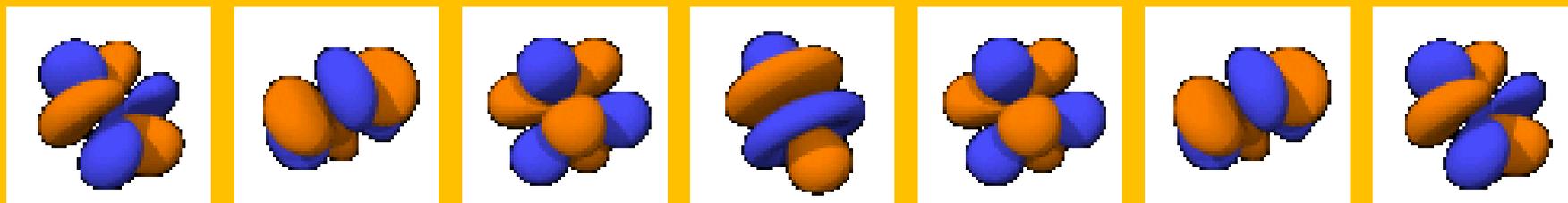
4p

$n = 4$   
 $l = 2, m = +2, +1, 0, -1, -2$



4d

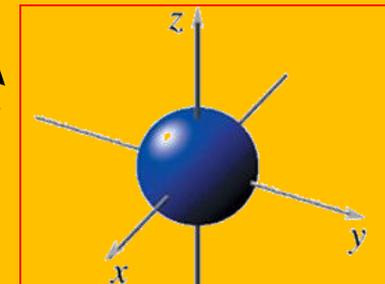
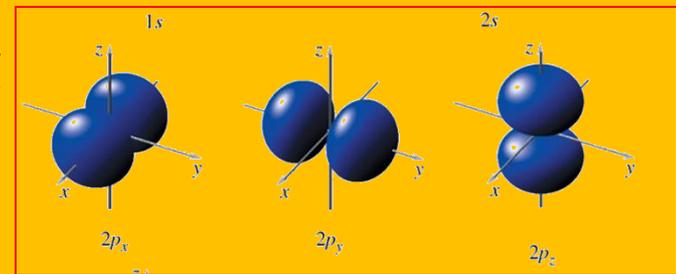
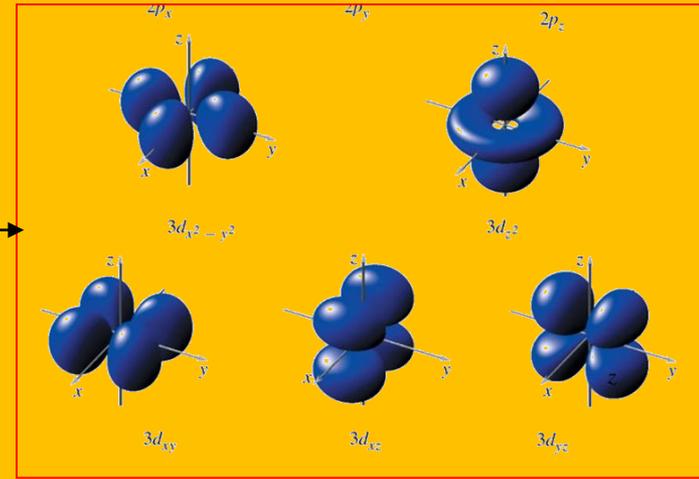
$n = 4$   
 $l = 3, m = +3, +2, +1, 0, -1, -2, -3$



4f

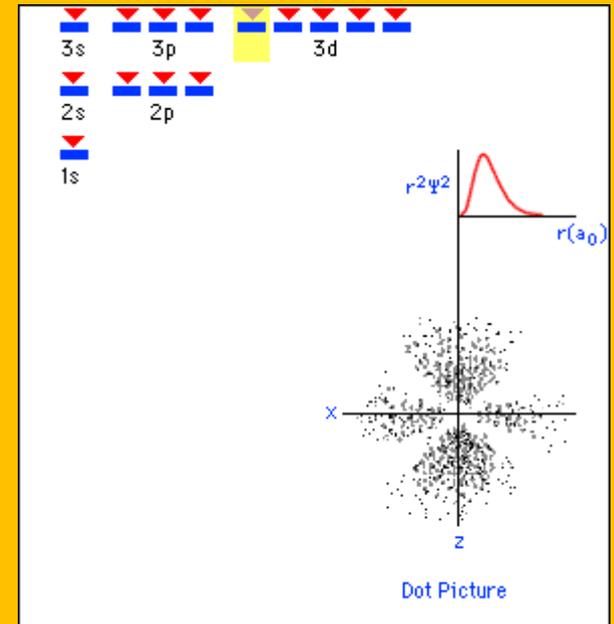
# Orbitali nei primi tre livelli

Shell	Subshell	Orbital
$n = 3$	$l = 2$ $d$	+2   +1   0   -1   -2 $3d$
	$l = 1$ $p$	+1   0   -1 $3p$
	$l = 0$ $s$	0 $3s$
$n = 2$	$l = 1$ $p$	+1   0   -1 $2p$
	$l = 0$ $s$	0 $2s$
$n = 1$	$l = 0$ $s$	0 $1s$
$n$	$l$	$m_l$



# Riepilogo

- Il nucleo conferisce la massa dell'atomo
- gli elettroni definiscono la dimensione
- Gli elettroni occupano zone intorno al nucleo, chiamate orbitali
- Questi hanno forme ed energie definite
- Atomi diversi hanno diversa carica nucleare e quindi numero di elettroni



## Wave Equation

- A differential equation describing the motion of an electron in a region of space surrounding an atomic nucleus
- The solution to a wave equation is called a **Wavefunction**,  $\Psi$
- The probability of finding an electron in a given region of space is found to be proportional to  $\Psi^2$

## The Schrödinger Equation

$$\nabla^2 \Psi(x, y, z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \{E - U(x, y, z)\} \Psi(x, y, z) = 0$$

Where:  $\nabla$ , is a triple derivative in x, y, and z;  $\Psi$ , is the wave equation; h is Planck's constant; E is the energy of the system and U is the potential energy (often the Coulombic field of the nucleus).

# Equazione di Schrödinger

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \text{Equazione di stato}$$

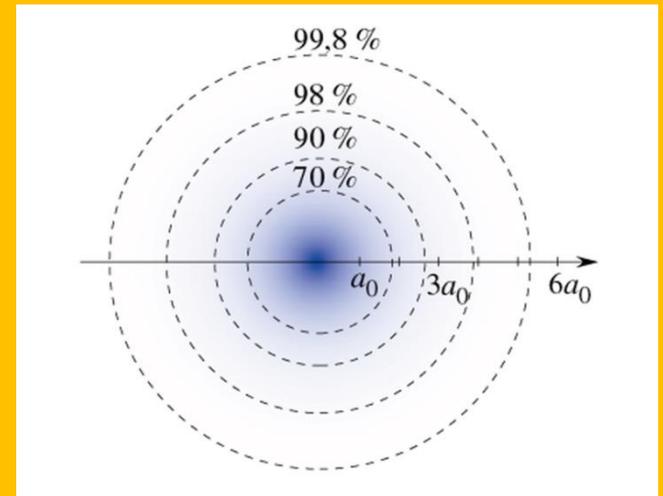
- Incognite sono sia  $E$  che  $\psi$  (funzione d'onda).
- Il risultato sono infinite  $\psi$  a ciascuna delle quali è associato un valore di energia  $E$ .
- Può essere risolta esattamente per l'atomo di idrogeno e in modo approssimato per gli atomi polielettronici.

$\Psi^2 \Delta V$ : esprime la probabilità che una particella descritta dalla funzione si trovi nel volume infinitesimo  $DV$  intorno ad un punto di coordinate  $x, y, z$ .

# Orbitale atomico

- **Regione dello spazio** intorno al nucleo delimitata da una superficie all'interno della quale c'è il 99% di probabilità di trovare l'elettrone (superficie limite).
- **Le funzioni d'onda**  $\Psi$  ottenute dalla risoluzione della equazione di Schroedinger

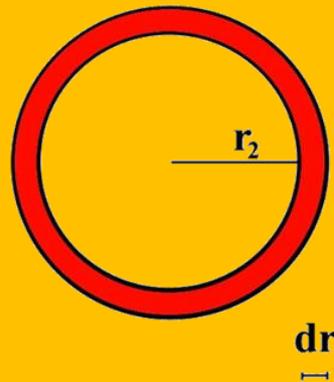
la probabilità di trovare un elettrone entro una certa area,  $d\tau$ , è data dal valore di  $\Psi^2 d\tau$ .



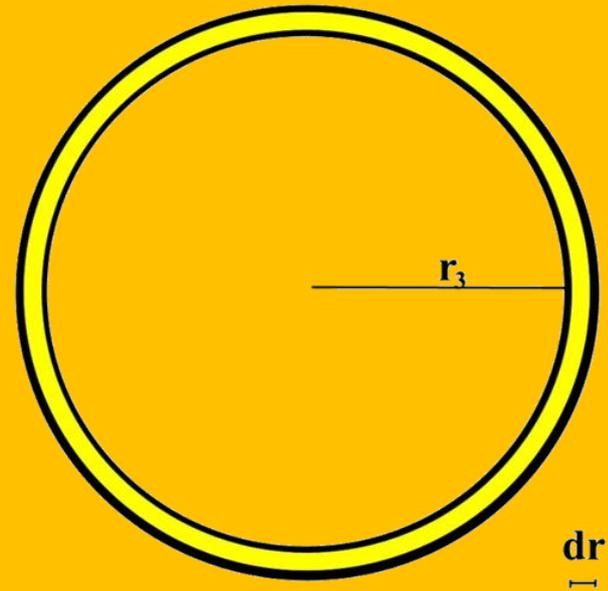
# Funzione elementi di volume sferici



$$V_1 = 4 \pi r_1^2 dr$$

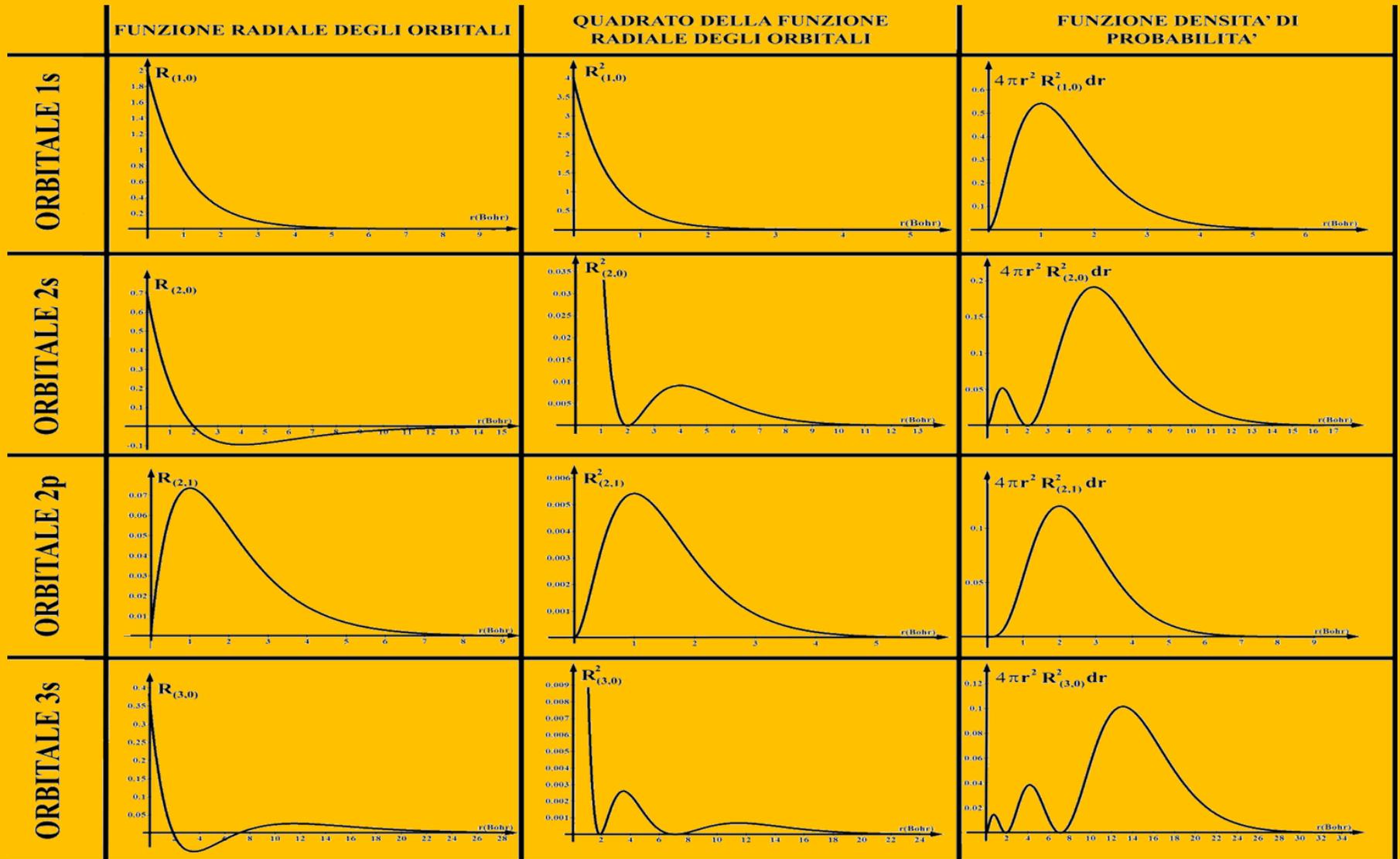


$$V_2 = 4 \pi r_2^2 dr$$



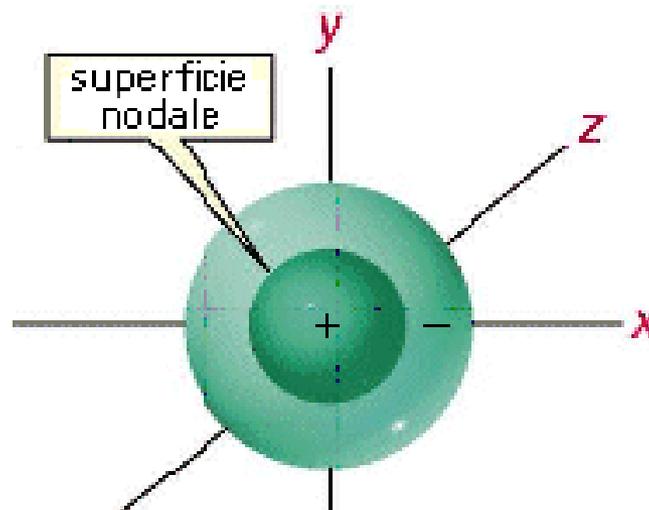
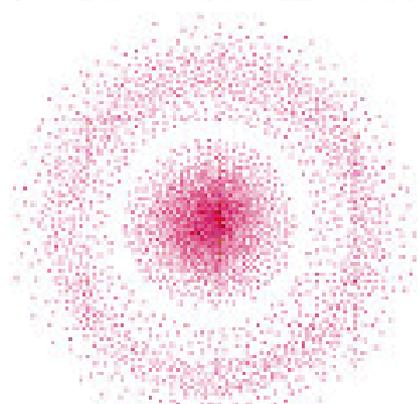
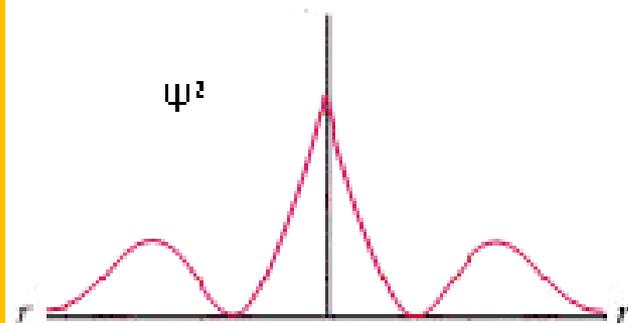
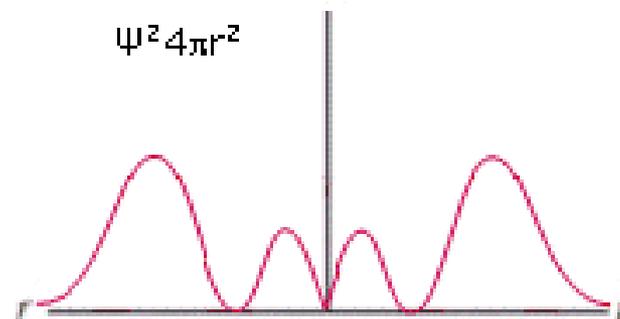
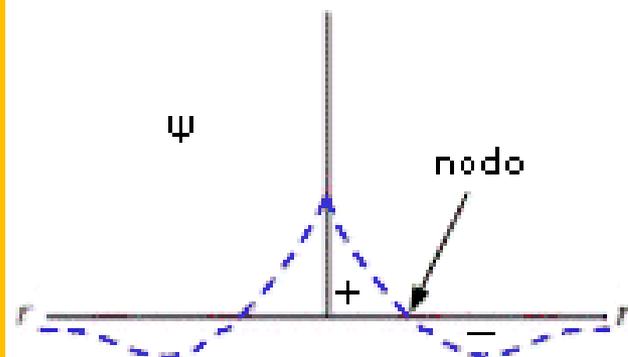
$$V_3 = 4 \pi r_3^2 dr$$

# Funzioni d'onda $\Psi$ e derivate



# Densità di probabilità

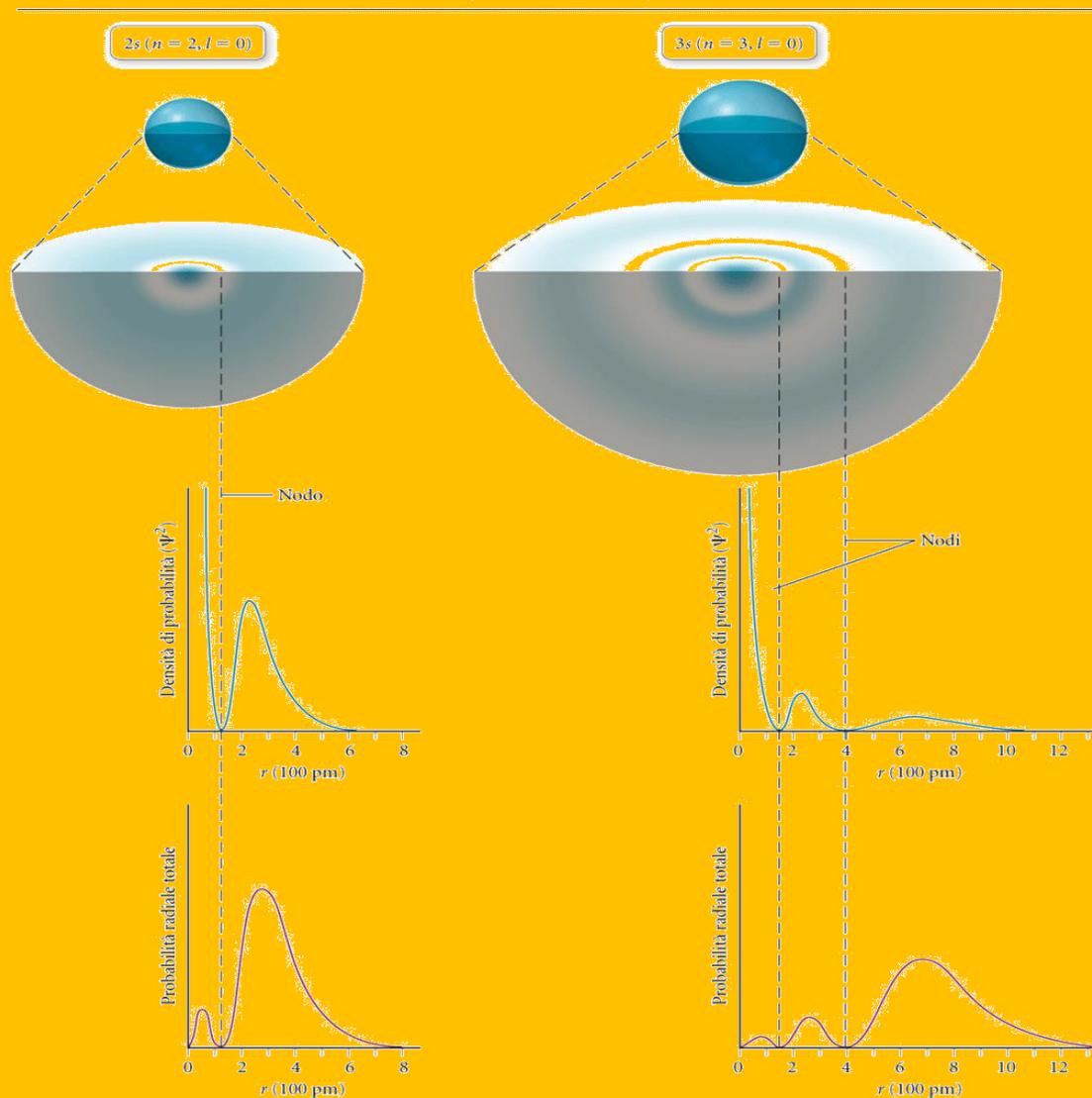
orbitale 2s



5s-2D



# Orbitali 2s 3s

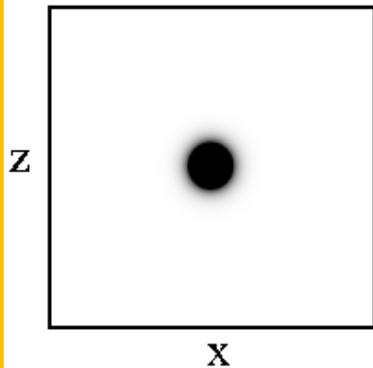


▲ FIGURA 7.25 Densità di probabilità e funzioni di distribuzione radiale per gli orbitali 2s e 3s

# Densità di probabilità

Strato K

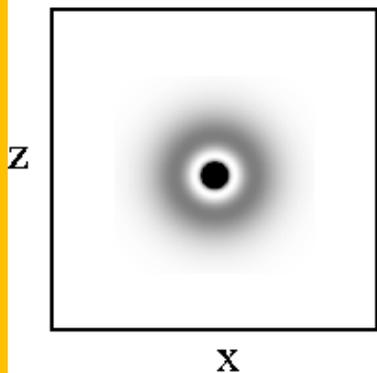
1s



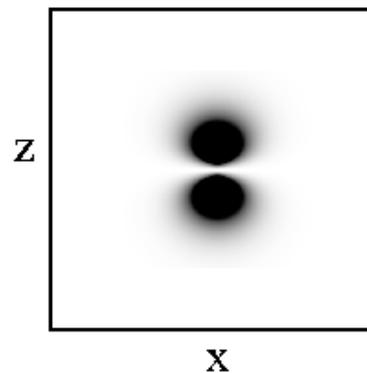
Densità di probabilità elettronica  
per gli orbitali dei primi tre strati K, L ed M  
dell'atomo di idrogeno  
sui piani indicati dalle coordinate x, y, z .

Strato L

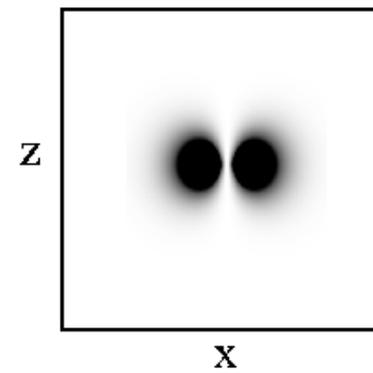
2s



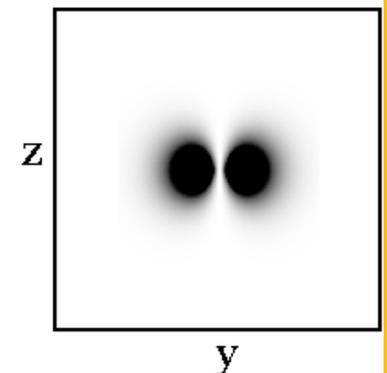
2p<sub>z</sub>



2p<sub>x</sub>

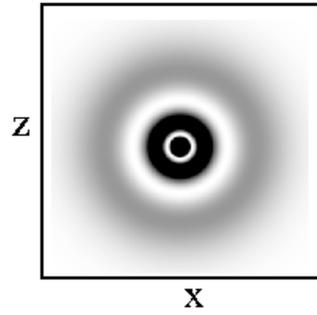


2p<sub>y</sub>

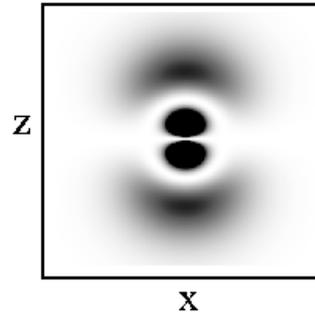


Strato M

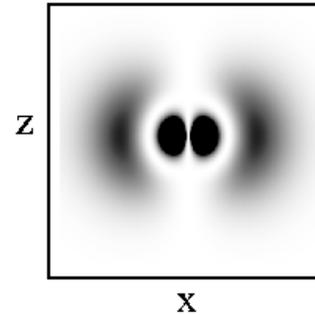
3s



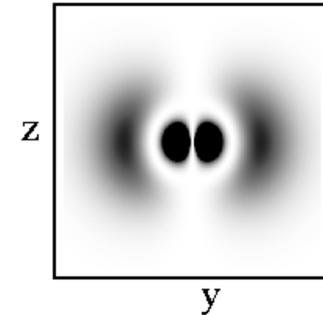
3p<sub>z</sub>



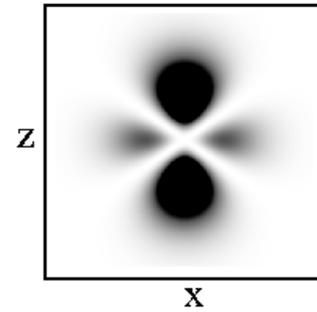
3p<sub>x</sub>



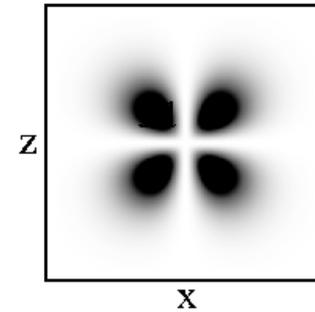
3p<sub>y</sub>



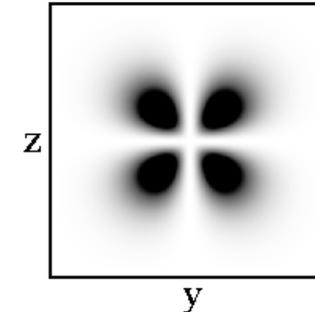
3d<sub>z<sup>2</sup></sub>



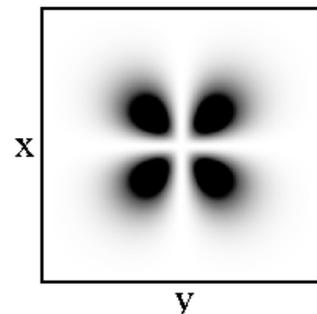
3d<sub>xz</sub>



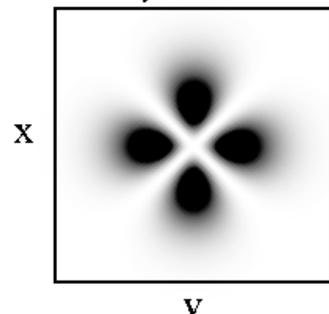
3d<sub>yz</sub>



3d<sub>xy</sub>



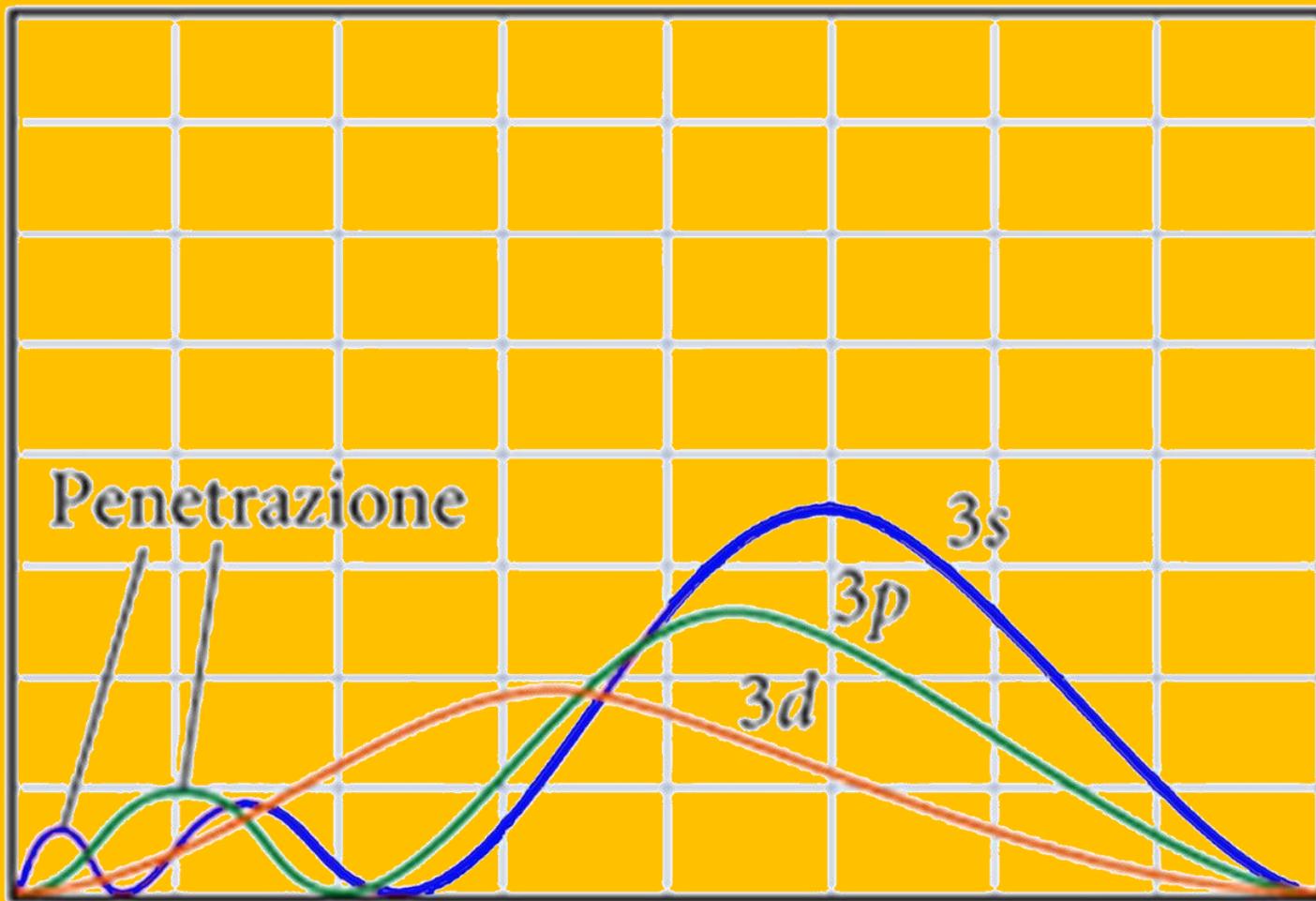
3d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>



# I nodi

- Nei punti in cui  $\Psi = 0$ , anche la  $\Psi^2 = 0$  e la  $DPR = 0$ ; questi punti sono nodi.
- I nodi radiali ( $R = 0$ ) sono sempre pari a  $n-l-1$
- Tutti gli orbitali hanno un nodo centrale
- Gli orbitali possono avere superfici nodali o nodi angolari

Densità di probabilità radiale



Distanza dal nucleo

# $Z^*$ e $Z$

La carica nucleare  $Z$  non è la carica nucleare effettiva  $Z^*$  che è realmente percepita dall'elettrone nell'ultimo strato.

Gli elettroni interni schermano infatti la carica risentita da quest'ultimo

Slater impostò una parametrizzazione empirica della schermatura degli elettroni dei livelli inferiori e dello stesso livello occupato dall'elettrone più esterno

# Calcoli.... Per i primi atomi

$$\text{Be} : Z^* = 4 - (2 \times 0,85) - (1 \times 0,35) = +1,95;$$

$$\text{B} : Z^* = 5 - (2 \times 0,85) - (2 \times 0,35) = +2,60;$$

$$\text{C} : Z^* = 6 - (2 \times 0,85) - (3 \times 0,35) = +3,25;$$

$$\text{N} : Z^* = 7 - (2 \times 0,85) - (4 \times 0,35) = +3,90;$$

$$\text{O} : Z^* = 8 - (2 \times 0,85) - (5 \times 0,35) = +4,55;$$

$$\text{F} : Z^* = 9 - (2 \times 0,85) - (6 \times 0,35) = +5,20;$$

# Proprietà atomiche

- Dipendono principalmente dalla carica nucleare efficace  $Z^*$
- Raggio atomico (di van der Waals)
- Potenziale di ionizzazione
- Affinità Elettronica
- Elettronegatività

# MISURA DEI PRINCIPALI RAGGI ATOMICI IN pm

<b>Li</b> 257	<b>Be</b> 112	<b>B</b> 88	<b>C</b> 77	<b>N</b> 74	<b>O</b> 66	<b>F</b> 64	Ne
<b>Na</b> 191	<b>Mg</b> 160	<b>Al</b> 143	<b>Si</b> 118	<b>P</b> 110	<b>S</b> 104	<b>Cl</b> 99	Ar
<b>K</b> 235	<b>Ca</b> 197	<b>Ga</b> 153	<b>Ge</b> 122	<b>As</b> 121	<b>Se</b> 117	<b>Br</b> 114	Kr
<b>Rb</b> 250	<b>Sr</b> 215	<b>In</b> 167	<b>Sn</b> 158	<b>Sb</b> 141	<b>Te</b> 137	<b>I</b> 133	Xe
<b>Cs</b> 272	<b>Ba</b> 224	<b>Tl</b> 171	<b>Pb</b> 175	<b>Bi</b> 182	<b>Po</b> 167	At	Rn

# Tendenze

Figura 8.21

Tendenze in tre proprietà atomiche

