

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 - **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

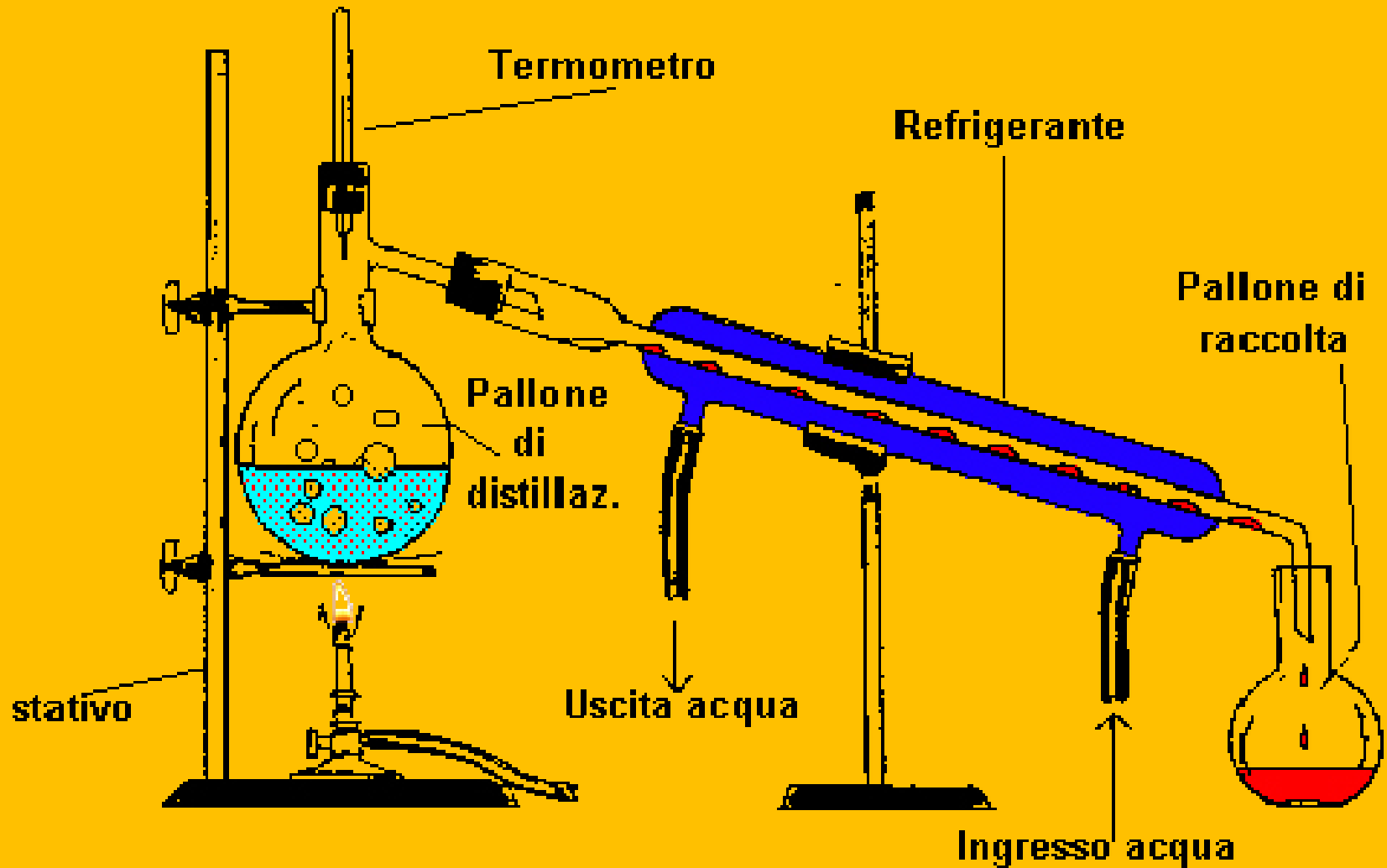


Analisi Chimica

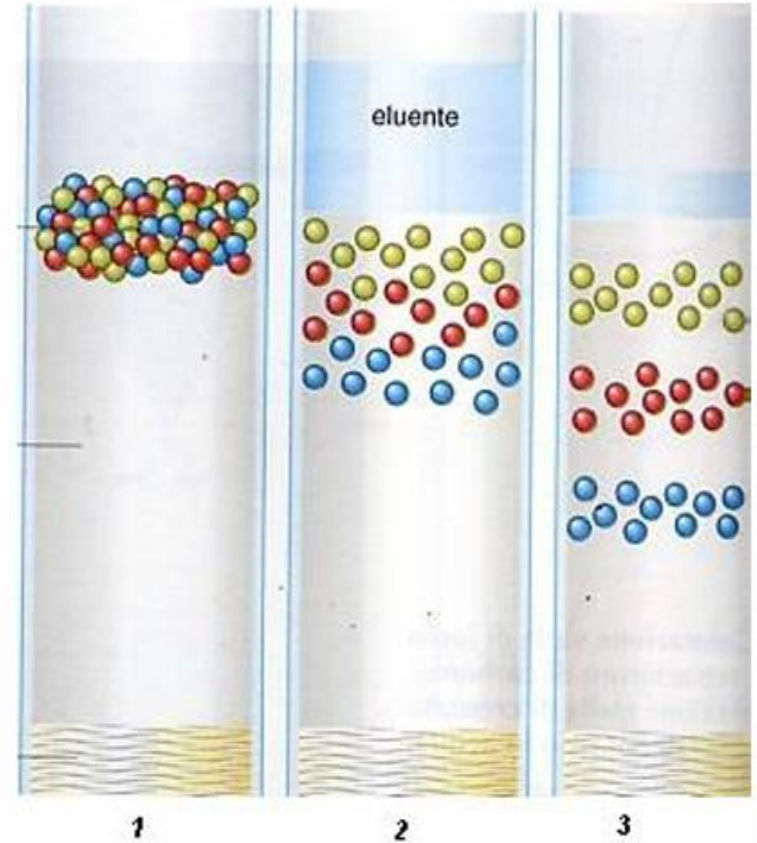
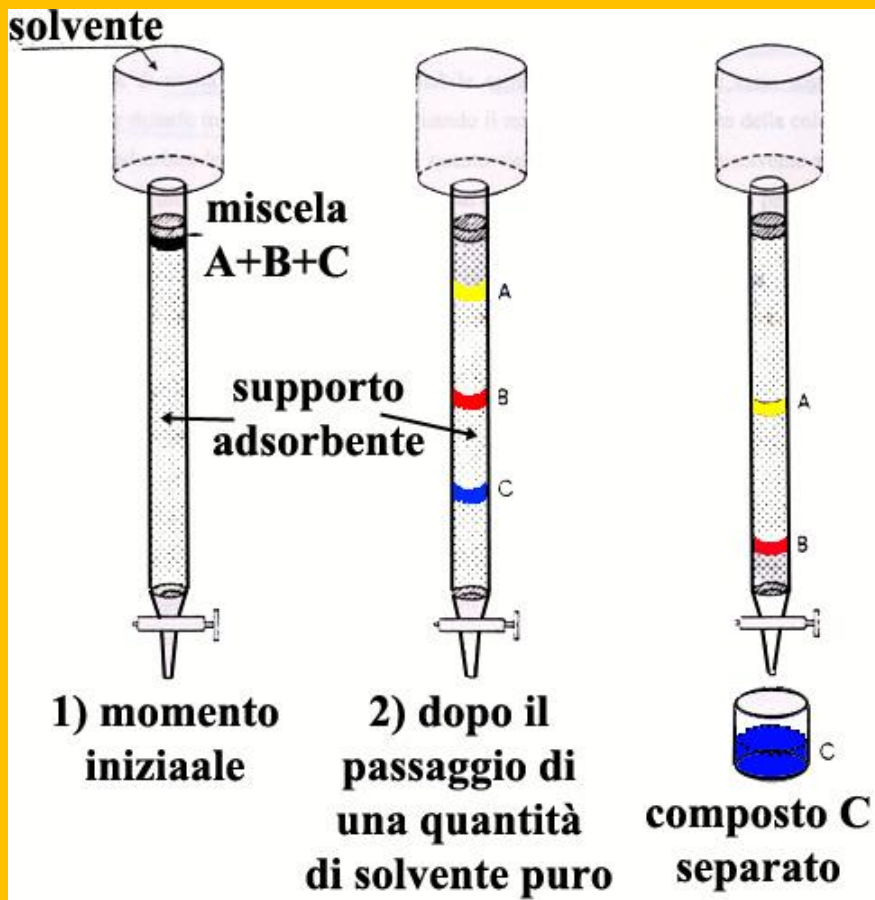
- Un campione è una porzione rappresentativa di materia
- I miscugli possono essere omogenei o eterogenei se sono o meno distinguibili porzioni di spazio con caratteristiche differenti (fisiche, chimiche, sino a che punto?)
- Vi sono metodi di separazione delle fasi e delle sostanze, usati per l'analisi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

Distillazione

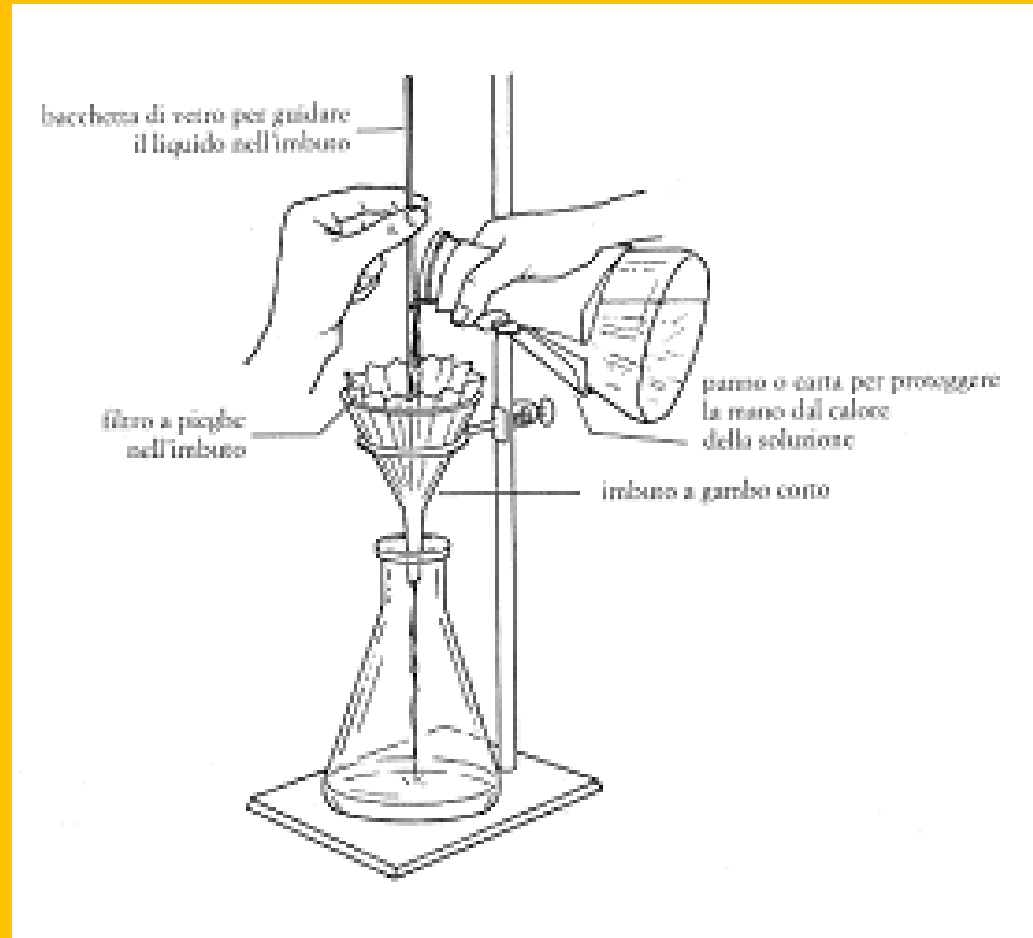
Schema di distillazione



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

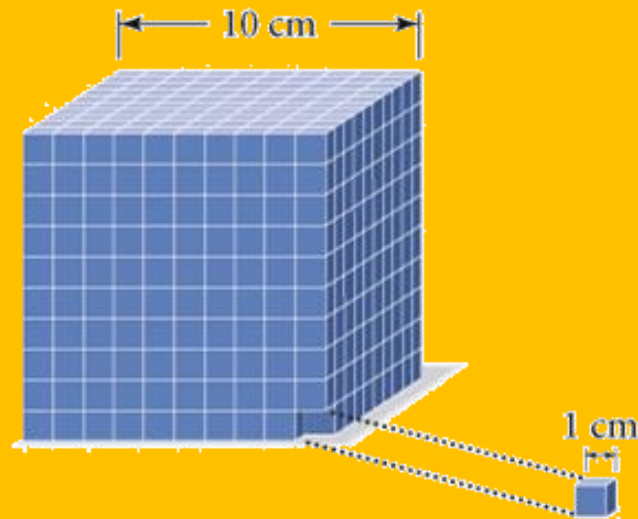
Riepilogo (definizioni)

- 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	μ	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.)

The periodic table is annotated with the following information:

- Blocks:**
 - Blocco s (alcalini e alcalini terrosi) - Cyan
 - Blocco p - Blue
 - Blocco d (metalli di transizione) - Red
 - Blocco f (Lantanidi - Attinidi) - Green
- Groups (colonne):** I to VIIIA (gas nobili), labeled at the top with arrows pointing to columns 13-18.
- Oxidation States:** Numbers (positive and negative) are placed below each element's symbol.
- Electronegativity:** A legend for electronegativity (§5.7) is shown next to the H1 cell.
- Other labels:** "simbolo", "numero atomico (§2.1)", "numero di massa (§2.1)", and "numeri di ossidazione (§ 10.15)" are linked to the H1 cell.

Blocco s (alcalini e alcalini terrosi)													Blocco p					gas nobili ↓ 18 VIIIA	
Blocco d (metalli di transizione)		Blocco f (Lantanidi - Attinidi)											grupp(i) o colonna(e) di elemento(i)						
1 IA	2 IIA												13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA	
1	H 1 1.00794 2.20 1 -1 Idrogeno												B 5 10.811 2.04 3 Boro	C 6 12.0107 2.55 4 Carbonio	N 7 14.0067 3.04 5,3 -3 Azoto	O 8 15.9994 3.44 -2 Ossigeno	F 9 18.998403 3.98 -1 Fluoro	Ne 10 20.1797 - 0 Neon	
2	Li 3 6.941 0.98 1 Lito	Be 4 9.012182 1.5 2 Berilio												Al 13 26.981539 1.61 3 Alluminio	Si 14 28.0855 1.90 4 Silicio	P 15 30.973762 2.19 5,3 -3 Fosforo	S 16 32.065 2.58 6,4,2 -2 Zolfo	Cl 17 35.453 3.16 7,5,3,1 -1 Cloro	Ar 18 39.948 - 0 Argon
3	Na 11 22.989769 0.93 1 Sodio	Mg 12 24.3050 1.31 2 Magnesio	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8-10 VIII		11 IB	12 IIB								
4	K 19 39.0983 0.82 1+ Potassio	Ca 20 40.078 1.00 2 Calcio	Sc 21 44.95592 1.36 3 Scandio	Ti 22 47.867 1.54 4 Titanio	V 23 50.9415 1.63 5 Vanadio	Cr 24 51.9961 1.66 6,3 Cromo	Mn 25 54.938045 1.55 7,4,2 Manganese	Fe 26 55.845 1.83 3,2 Ferro	Co 27 58.933195 1.88 3,2 Cobalto	Ni 28 58.6934 1.91 2 Nichel	Cu 29 63.546 1.88 2,1 Rame	Zn 30 65.38 1.65 2 Zinco	Ga 31 69.723 1.81 3 Galio	Ge 32 72.64 2.01 4,2 Germanio	As 33 74.92160 2.18 5,3 -3 Arsenico	Se 34 78.96 2.55 6,4,2 -2 Selenio	Br 35 79.904 2.96 5,3,1 -1 Bromo	Kr 36 83.798 3.00 0,2 Krypton	
5	Rb 37 85.4678 0.82 1+ Rubidio	Sr 38 87.62 0.95 2 Stronzio	Y 39 88.90585 1.22 3 Ittrio	Zr 40 91.224 1.33 4 Zirconio	Nb 41 92.90638 1.6 5 Niobio	Mo 42 95.96 2.16 6,4 Molibdeno	Tc 43 98.9062 1.9 7,4 Technezio	Ru 44 101.07 2.2 4,3 Rutenio	Rh 45 102.90550 2.28 3 Rodio	Pd 46 106.42 2.20 4,2 Palladio	Ag 47 107.8682 1.93 1 Argento	Cd 48 112.411 1.69 2 Cadmio	In 49 114.818 1.78 3 Indio	Sn 50 118.710 1.96 4,2 -4 Stagno	Sb 51 121.760 2.05 5,3 -3 Antimonio	Te 52 127.60 2.1 6,4,2 -2 Tellurio	I 53 126.90447 2.66 7,5,3,1 -1 Iodio	Xe 54 131.293 2.60 0,6 4,2 Xenon	
6	Cs 55 132.90545 0.79 1+ Cesio	Ba 56 137.327 0.89 2 Bario	La 57 138.90547 1.1 3 Lantanio	Hf 72 178.49 1.3 4 Hafnio	Ta 73 180.94788 1.5 5 Tantalio	W 74 183.84 2.36 6,4 Tungsteno	Re 75 186.207 1.9 4 Renio	Os 76 190.23 2.2 4 Osmio	Ir 77 192.217 2.20 4,3 Indio	Pt 78 195.084 2.28 4,2 Platino	Au 79 196.96657 2.54 3 Oro	Hg 80 200.59 2.00 2,1 Mercurio	Tl 81 204.3833 1.62 3,1 Tallio	Pb 82 207.2 2.02 3 Bismuto	Bi 83 208.98040 2.02 3 Bismuto	Po 84 208.9824 2.0 4,2 Polonio	At 85 209.9871 2.2 -1 Astatio	Rn 86 222.0176 2.2 0 Radon	
7	Fr 87 223.0197 0.7 1+ Francio	Ra 88 226.0254 0.9 2 Radio	Ac 89 227.0278 1.1 3 Attinio	Rf 104 261.11 - - Ruterfordio	Db 105 262.11 - - Dubnio	Sg 106 263.12 - - Seaborgio	Bh 107 262.12 - - Bohrio	Hs 108 264 - - Hassio	Mt 109 266.1378 - - Meitnerio	Ds 110 269 - - Darmstadtio	Rg 111 272 - - Roentgenio	Cn 112 277 - - Copernicium	Uut 113 284 - - Ununtrio	Uuq 114 289 - - Ununquadio	Uup 115 288 - - Ununpentio	Uuh 116 292 - - Ununhexio	Uus 117 293 - - Ununseptio	Uuo 118 294 - - Ununoctio	
numeri che indicano il periodo o la riga	Lantanidi → 6																		
	Actinidi → 7																		
	Ce 58 140.116 1.12 4,3 Cerio	Pr 59 140.90765 1.13 3 Praseodimio	Nd 60 144.242 1.14 3 Neodimio	Pm 61 144.9127 1.13 3 Prometio	Sm 62 150.36 1.17 3 Samario	Eu 63 151.964 1.2 3+ Europio	Gd 64 157.25 1.2 3,2 Gadolino	Tb 65 158.92535 1.1 3 Terbio	Dy 66 162.500 1.22 3 Disprobio	Ho 67 164.93032 1.23 3 Holmio	Er 68 167.259 1.24 3 Erbio	Tm 69 168.93421 1.25 3 Tulio	Yb 70 173.054 1.1 3 Itterbio	Lu 71 174.967 1.27 3 Lutetio					
	Th 90 232.03806 1.3 4 Torio	Pa 91 231.03588 1.5 5 Protattinio	U 92 238.02891 1.38 6 Uranio	Np 93 237.0482 1.36 5 Nettunio	Pu 94 244.0642 1.28 4 Plutonio	Am 95 243.0614 1.13 3 Americio	Cm 96 247 1.28 3 Curcio	Bk 97 247.0703 1.3 3 Berkelio	Cf 98 251.0796 1.3 3 Californio	Es 99 252.03 1.3 3 Einsteinio	Fm 100 257.0951 1.3 3 Fermio	Md 101 258.01 1.3 3 Mendelevio	No 102 259.1009 1.3 3 Nobelio	Lr 103 260.1053 1.3 3 Lawrencio					

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

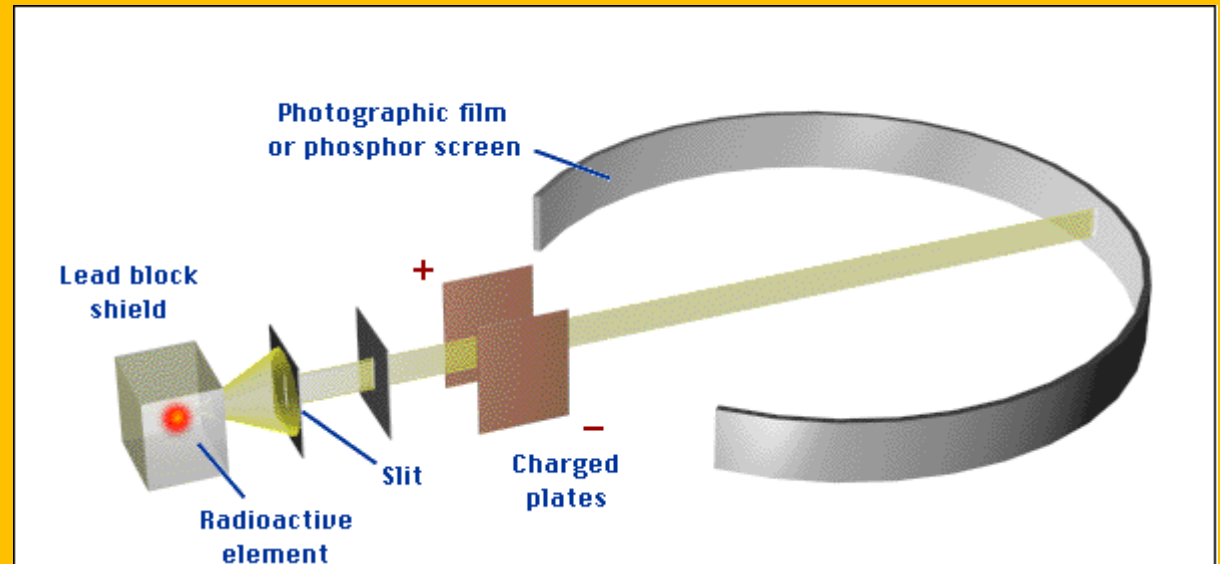
	Formation of a useful atomic theory		Discovery of the electron		Discovery of the atomic nucleus		Proton discovered	
1630	1804	1896	1897	1898	1909	1913	1914	1932
Discovery that electrically charged objects repel and attract each other		Radioactivity observed		Radioactivity defined		Mass of the electron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

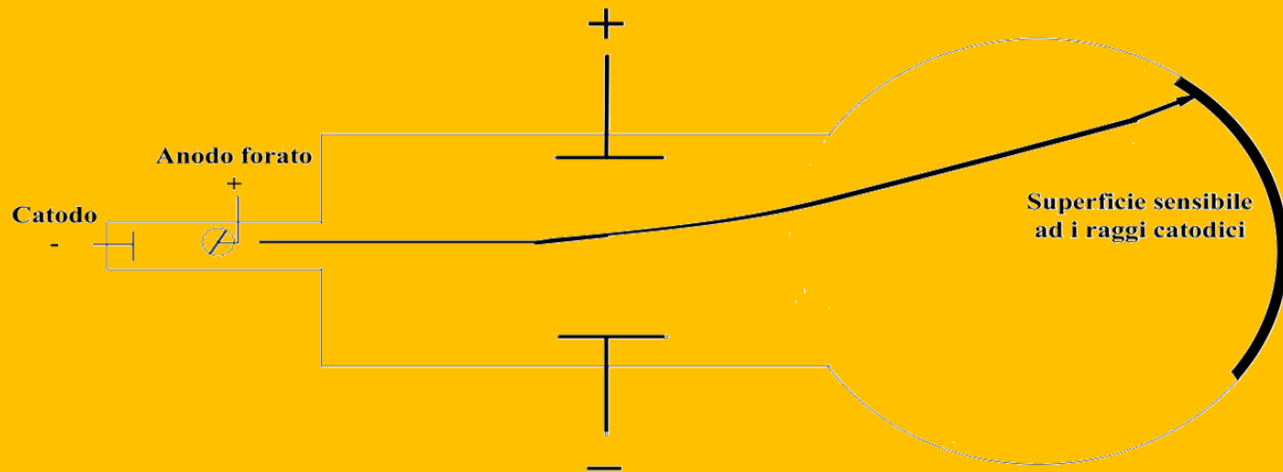
Gli studi sulla radioattività di Bequerel e M. Curie (1896) hanno mostrato l'esistenza di tre tipi di radiazione:



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

(Alfa e beta sono frazioni di atomi)

Raggi catodici (elettrone)

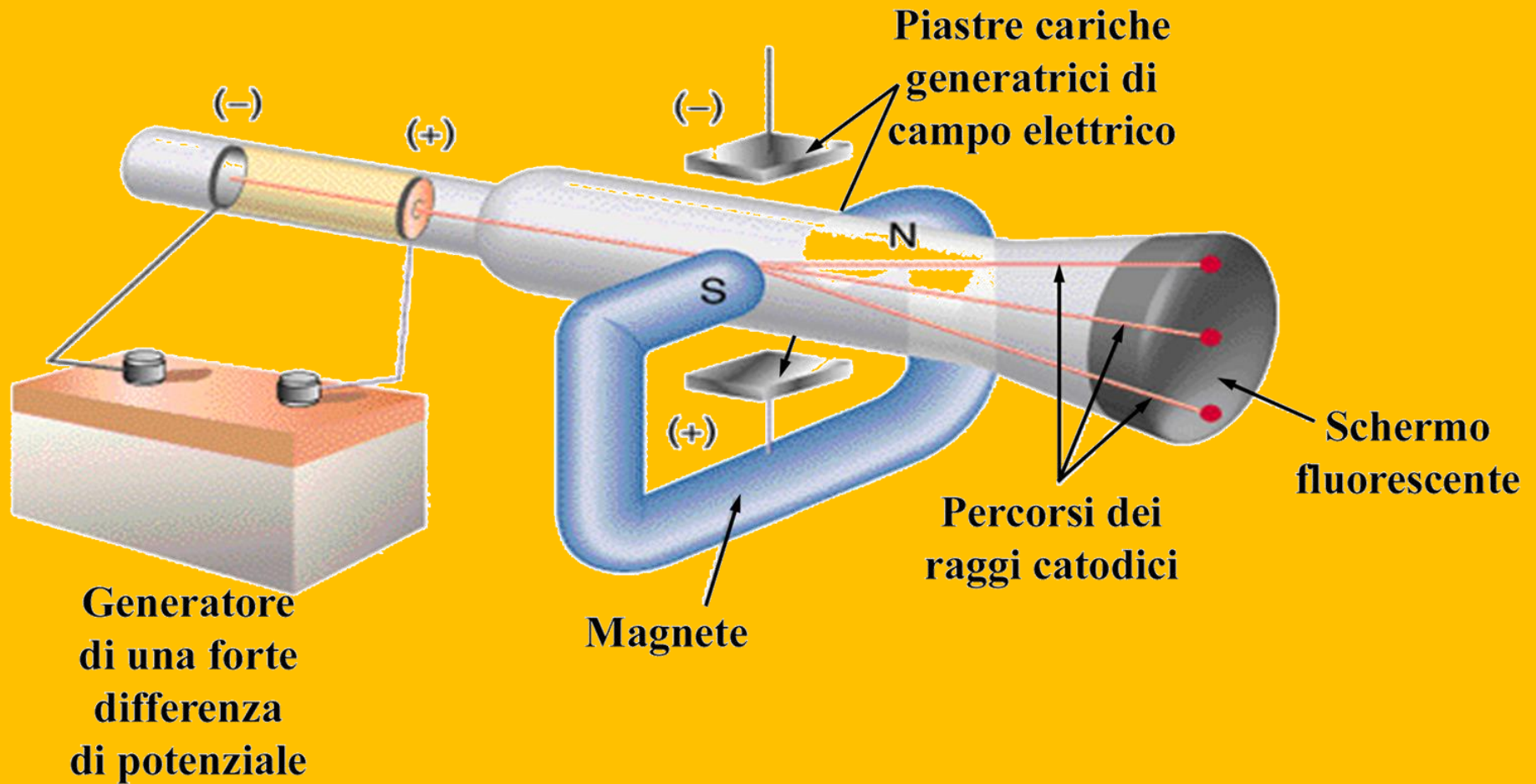


L'elettrone. Thompson nel 1897, studiando i raggi catodici con carica negativa è riuscito a misurare il rapporto carica/massa delle particelle chiamate elettroni. Millikan, studiando goccioline di olio ha misurato la carica dell'elettrone.

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

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

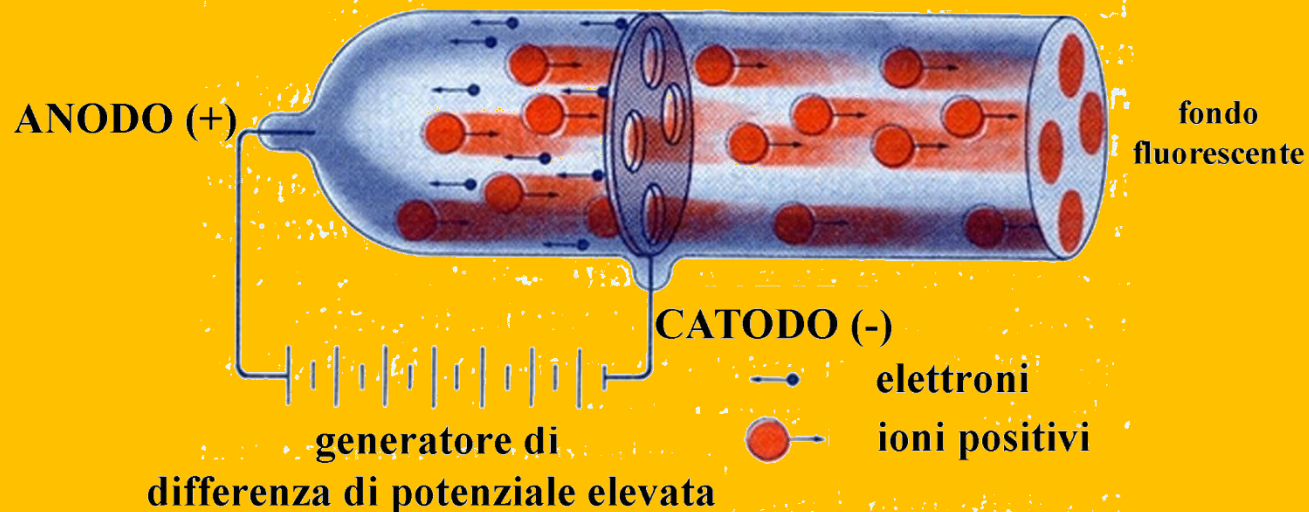
Thomson modificato



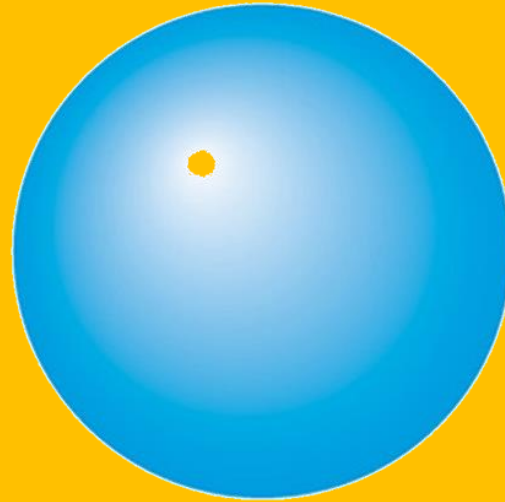
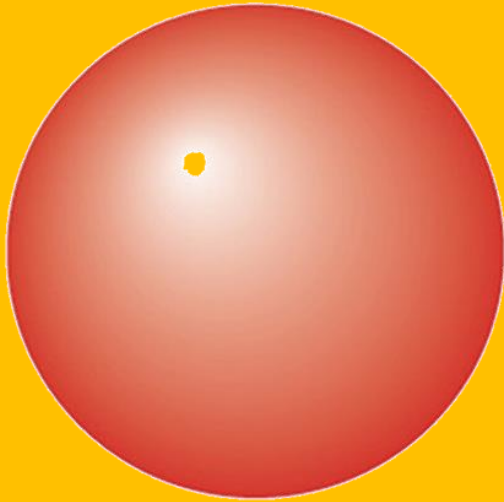
Il protone

- Rutheford, 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 u	charm c	top t
carica elettrica 2/3		
down d	strange s	beauty b
carica elettrica -1/3		

LEPTONI

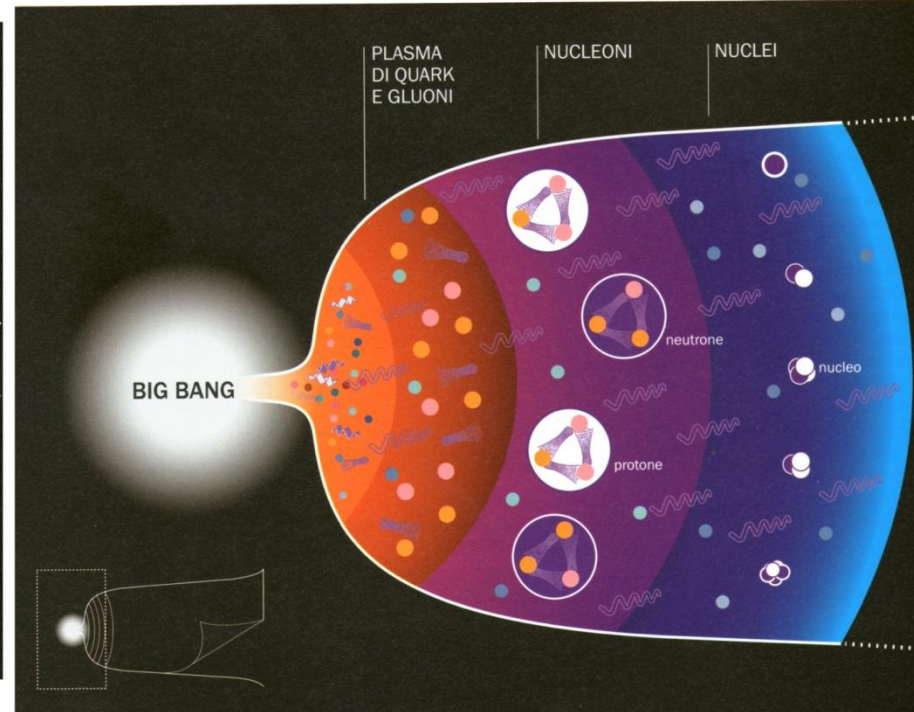
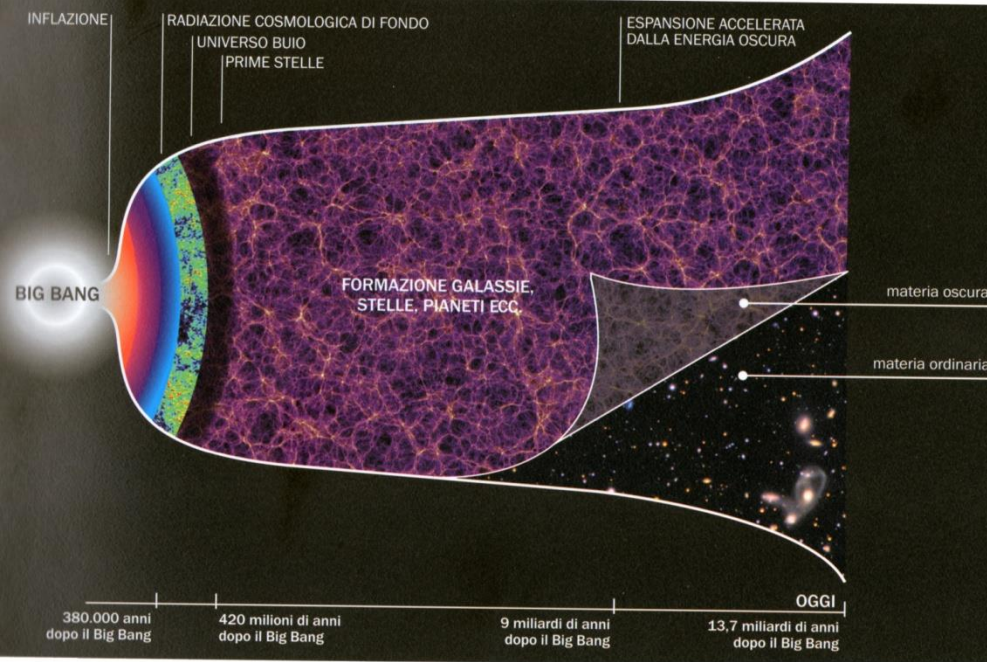
ν_e	ν_μ	ν_τ
carica elettrica 0		
e	μ	τ
carica elettrica -1		

MEDIATORI

gluone g
fotone γ
bosone W W^\pm
bosone Z Z

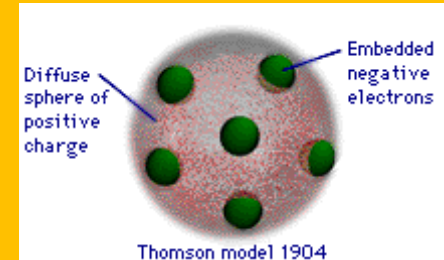


Evoluzione Universo



I nuclei.

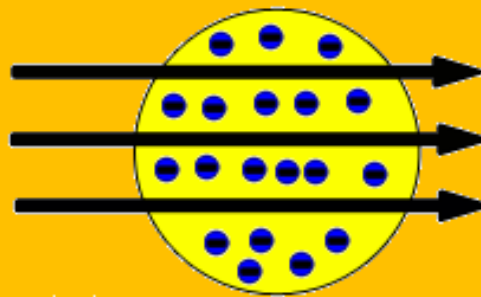
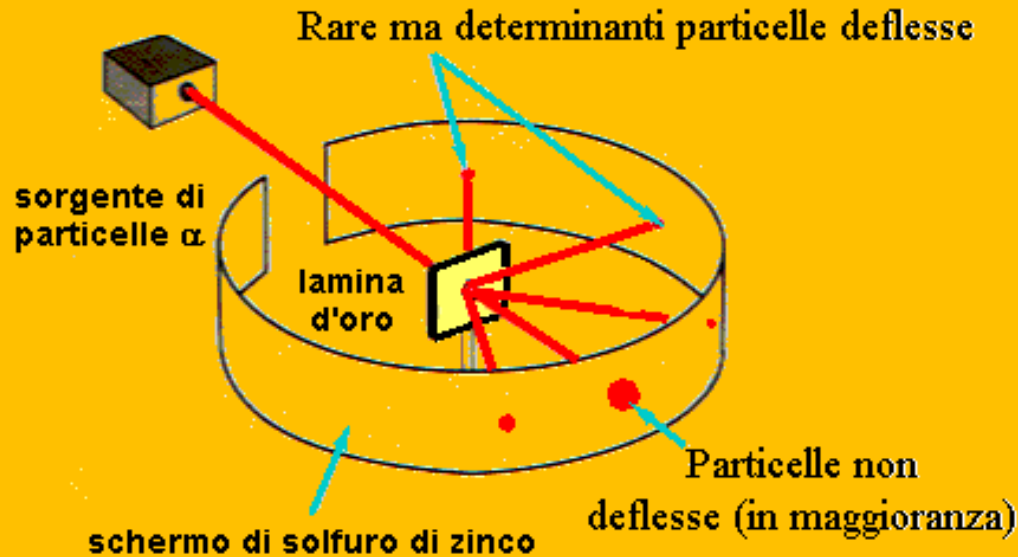
- **Thompson** propose gli elettroni fossero diffusi in una sostanza gelatinosa con carica positiva. (figura)
- **Rutherford** bombardò con particelle alfa (atomi di elio senza elettroni) una sottile lamina di oro ed osservò che una piccola frazione di era deflessa di più di 90° . Esse colpivano qualcosa 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.



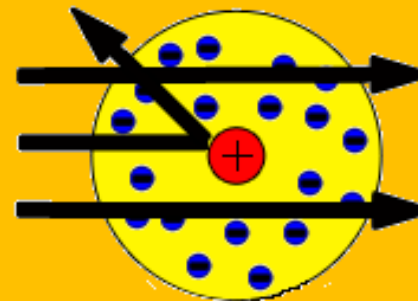
Modello di
Thompson



Rutherford immagine



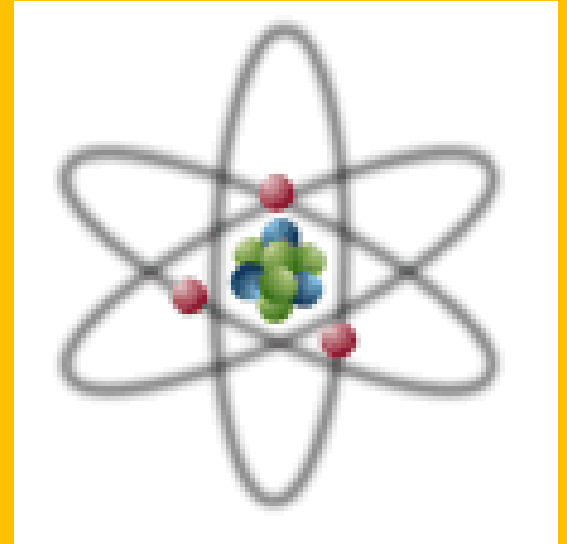
Modello
non più accettabile



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



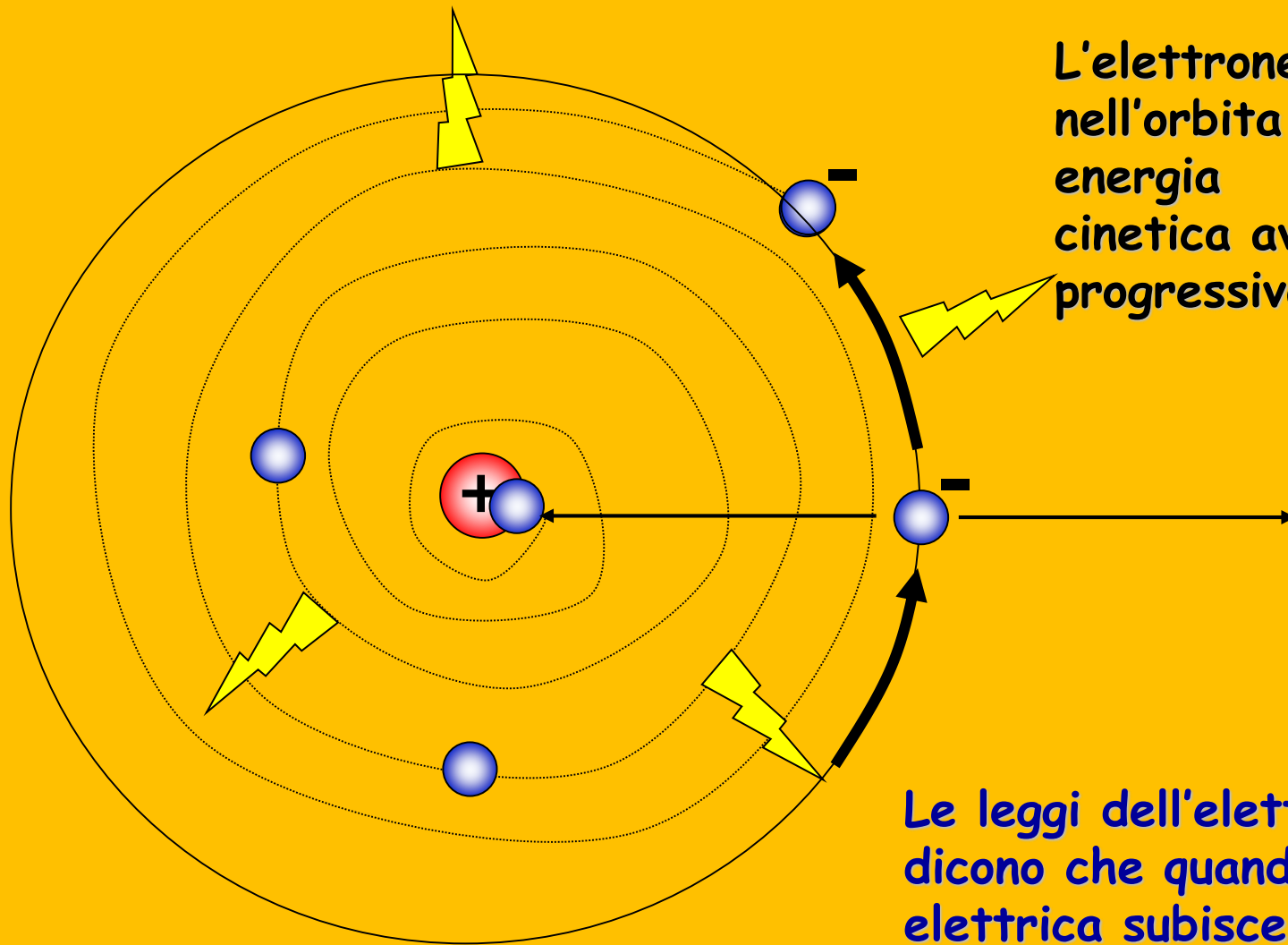
L'atomo

- 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}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}Ne , ^{21}Ne e ^{22}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}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

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

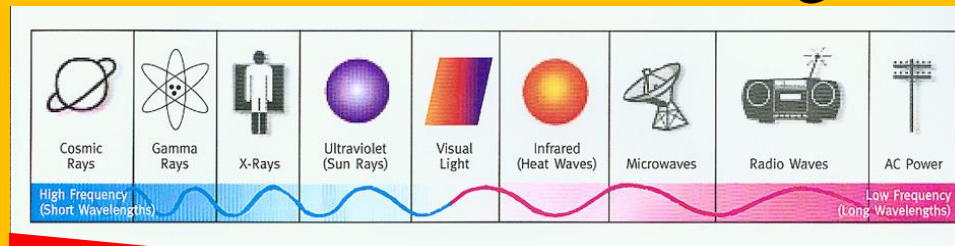
Costante di Plank
 $6.6 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

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

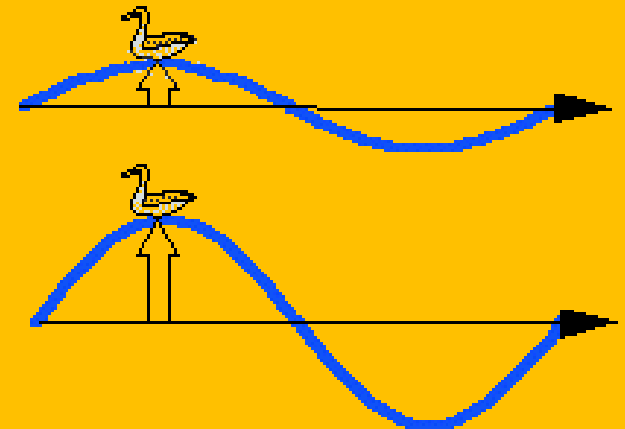
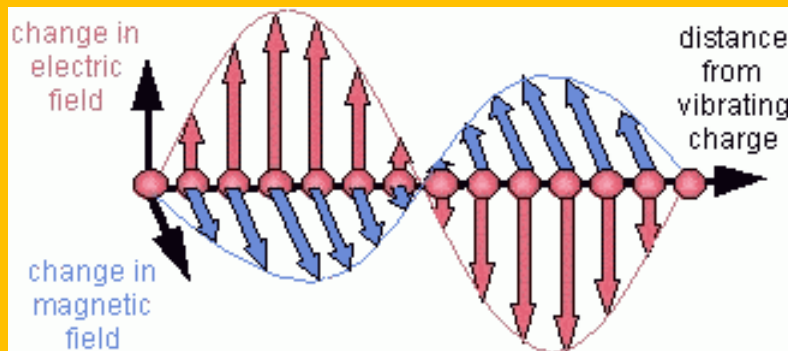


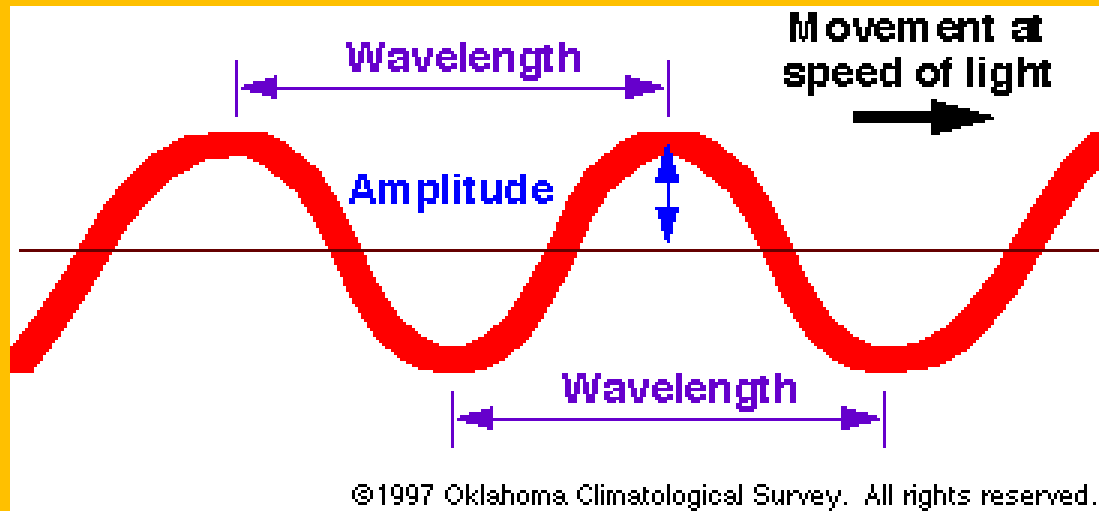
E

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 λ (la lettera greca lambda)
 - Ampiezza
 - Velocità della luce c ($3 \cdot 10^8$ m/s)
 - Frequenza ν (nu, misurata in Hz = cicli/Sec)

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



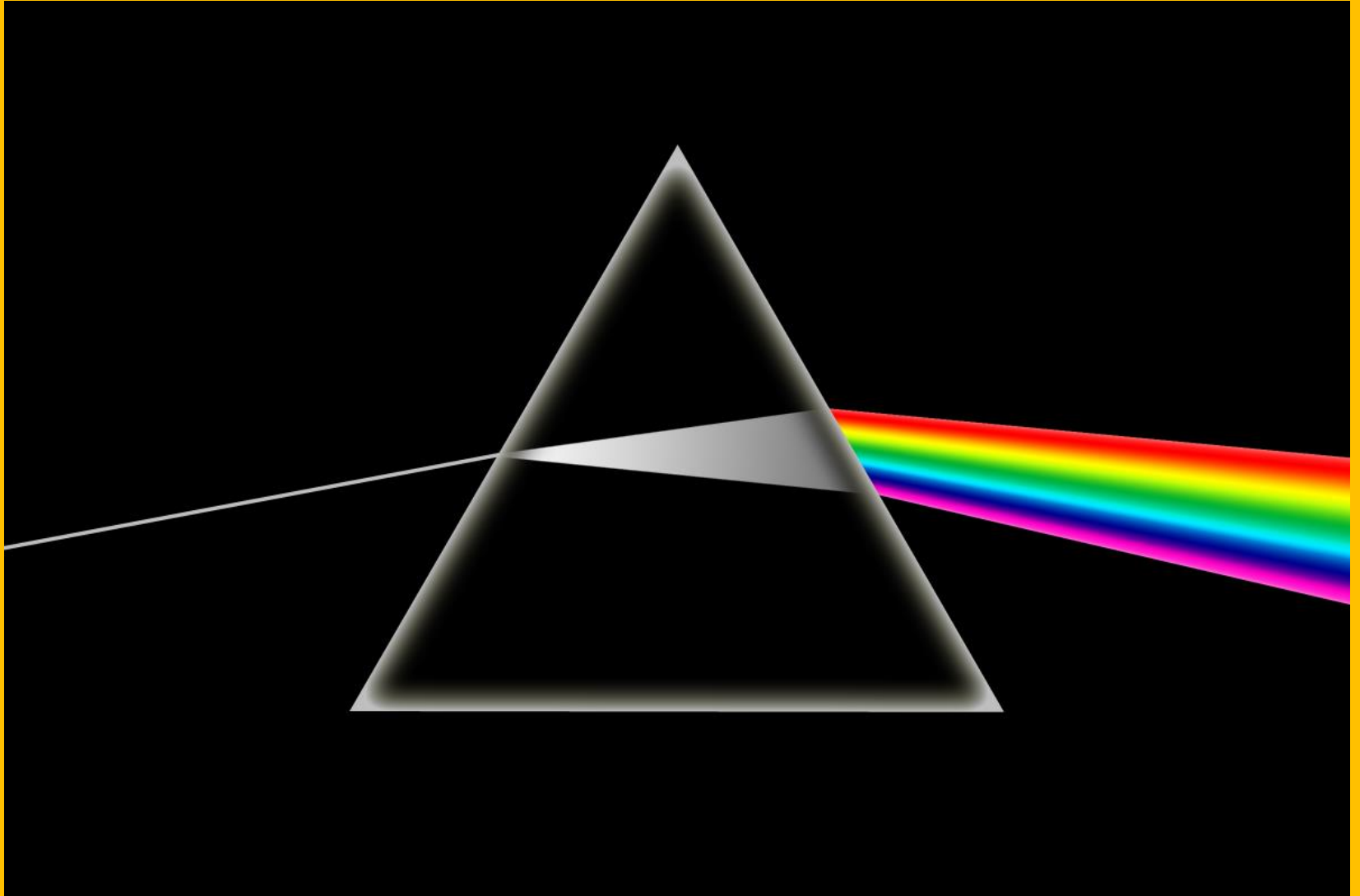


Lunghezza d'onda λ = tratto corrispondente all'intero ciclo di valori

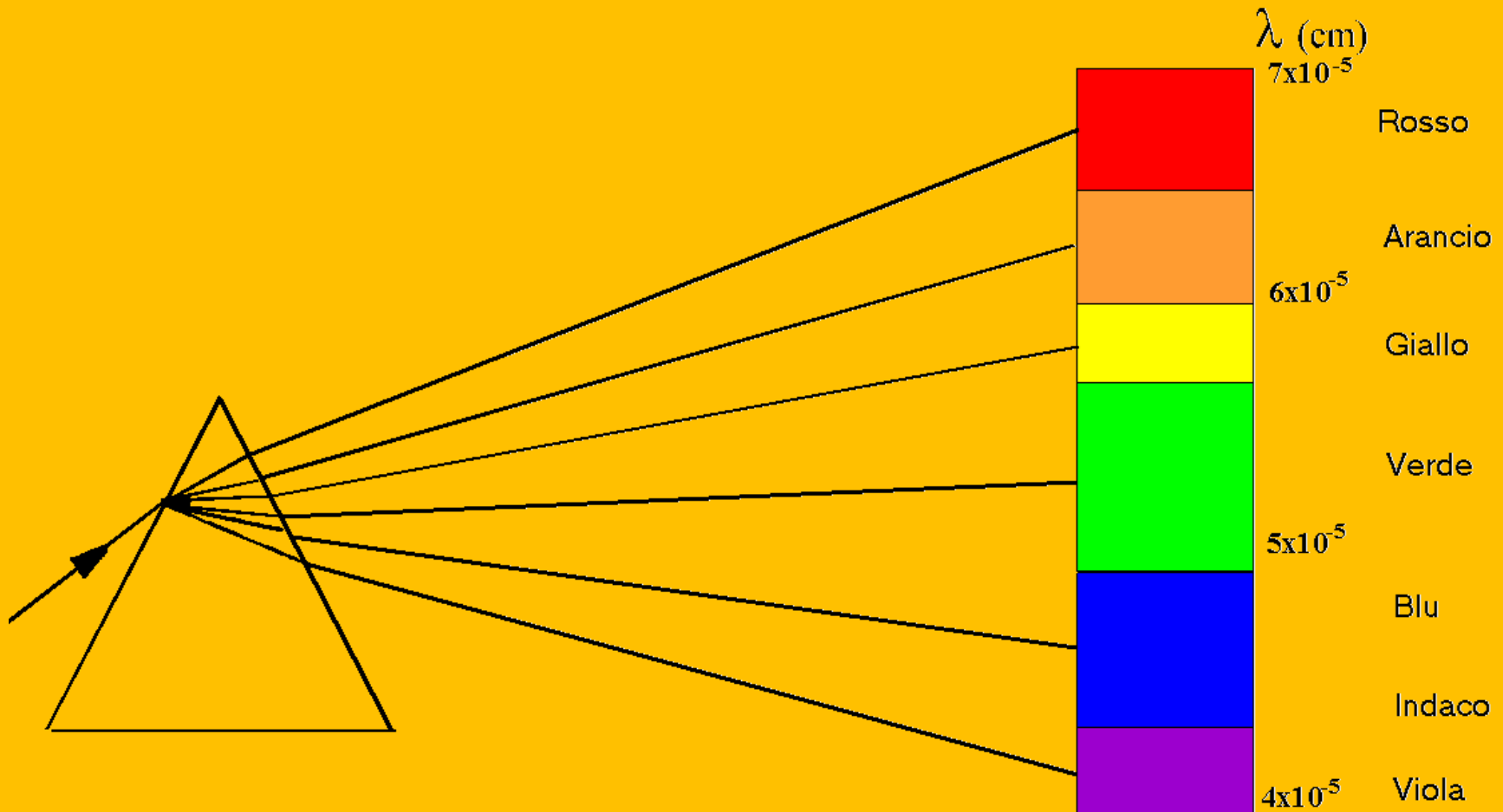
Frequenza ν = numero di volte per secondo in cui il vettore assume l'intero ciclo di valori

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

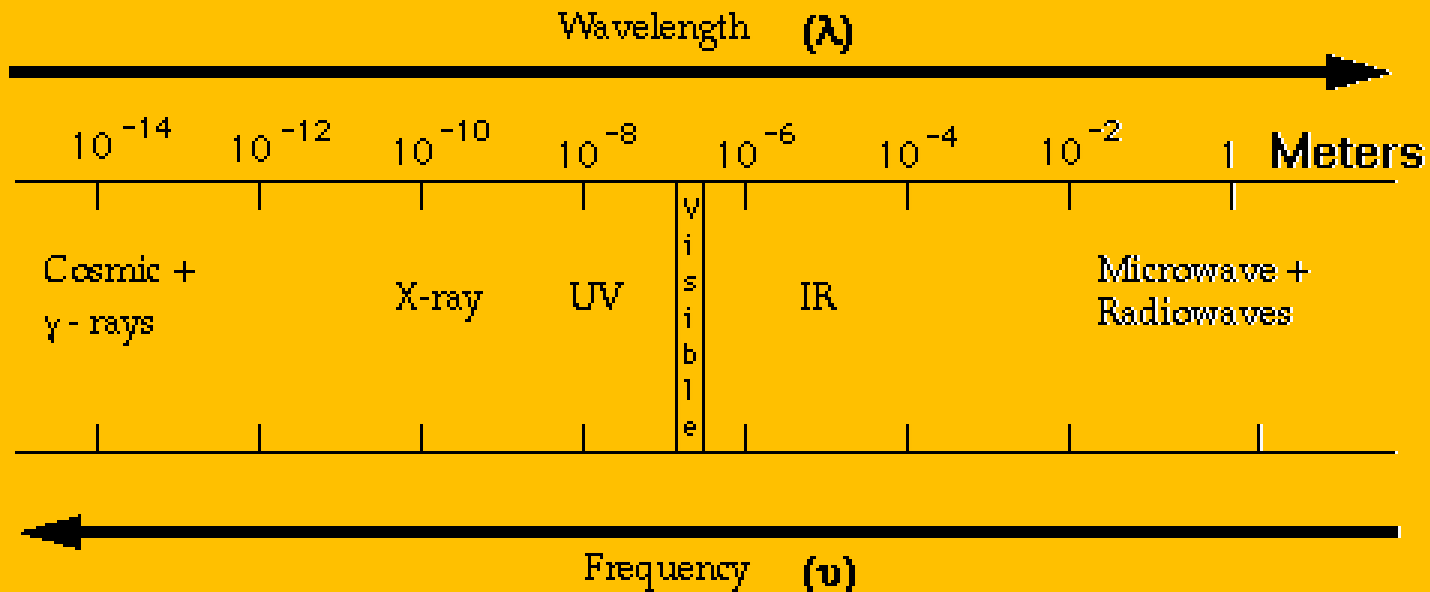
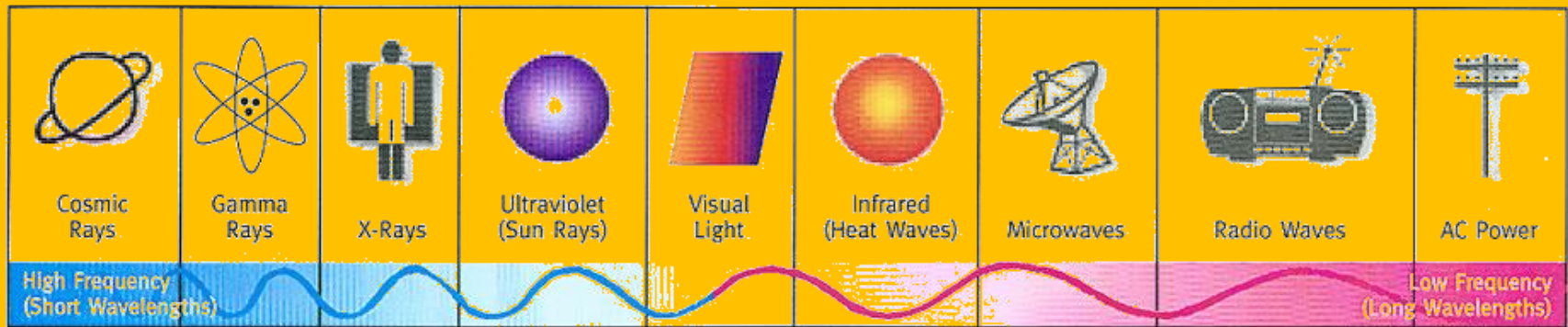
The Dark Side of the Moon



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 :

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

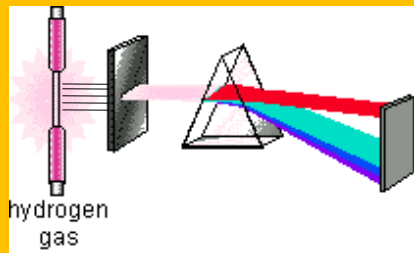
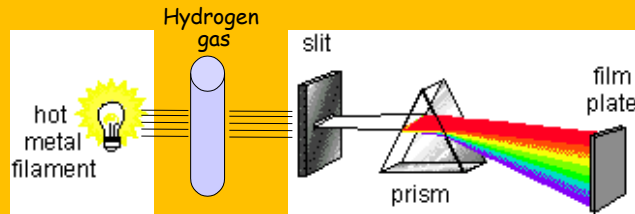
$$\text{da cui : } r = \frac{ke^2}{mv^2}$$

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

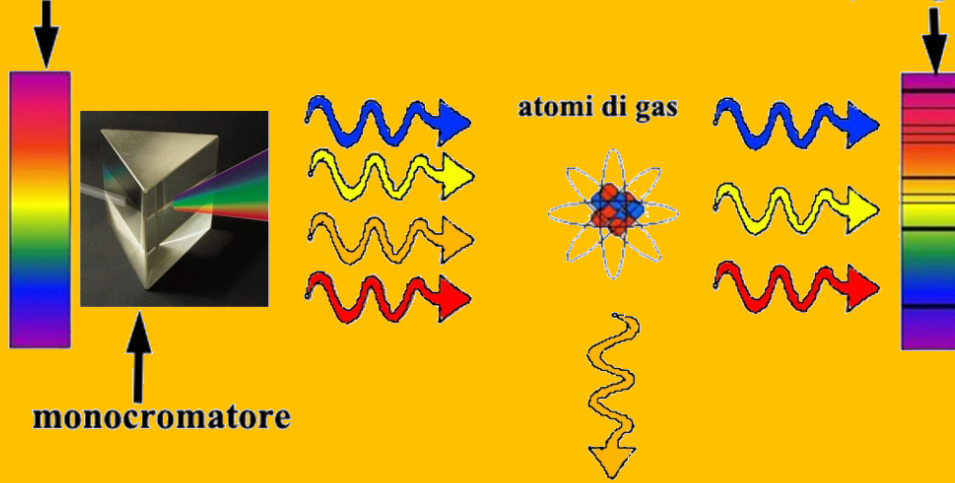
Balmer (1885) e Rydberg hanno trovato equazioni che descrivono le lunghezze d'onda emesse dall'idrogeno

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

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

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)

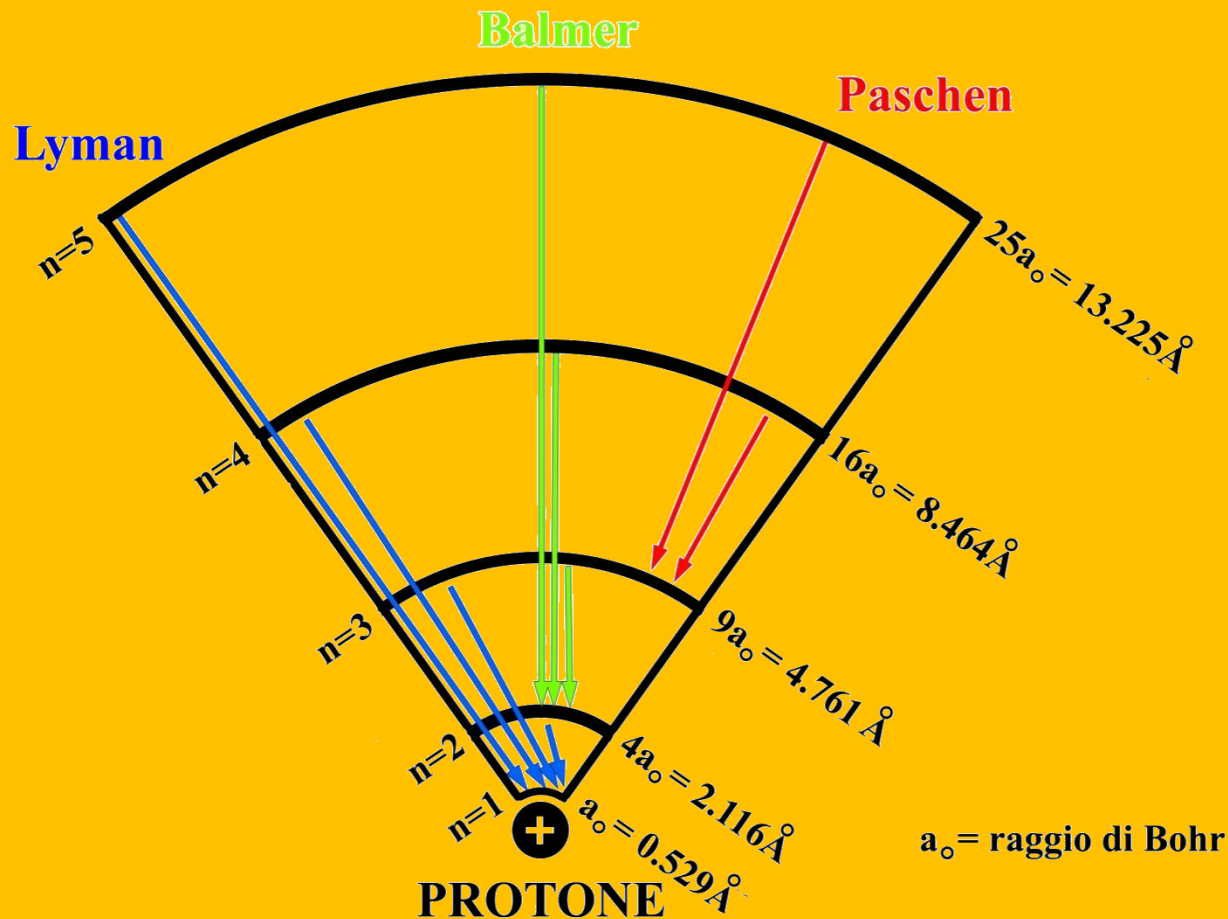
λ/nm

2000 1000 800 600 500 400 300 200 150 120 100

visibile



Emissione

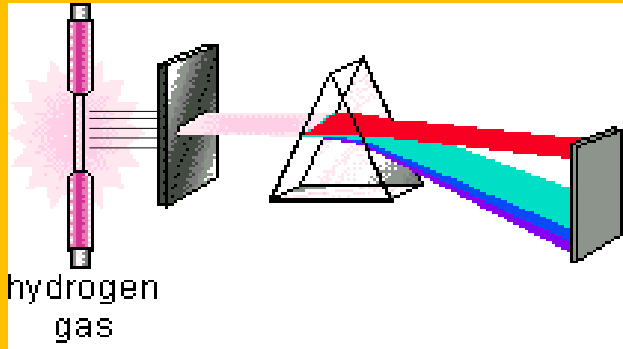


$$\nu = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

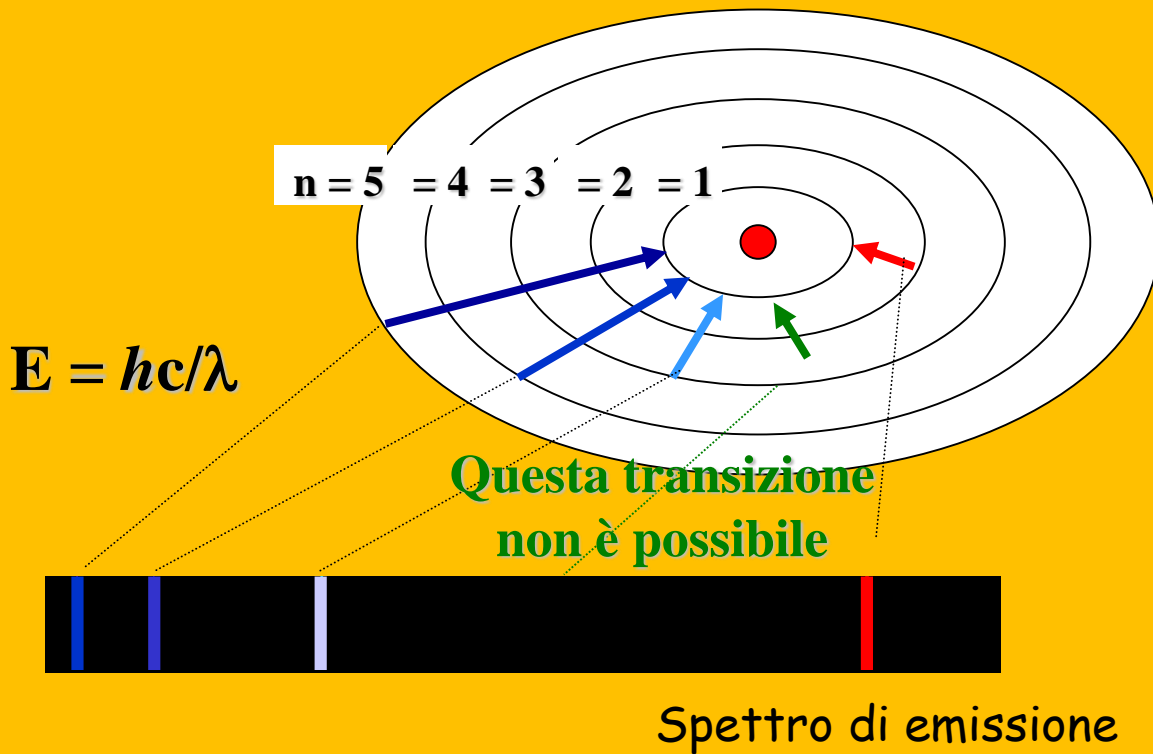
(L, $n_f = 1$; B, $n_f = 2$; P, $n_f = 3$)

$R_H = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$; 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.



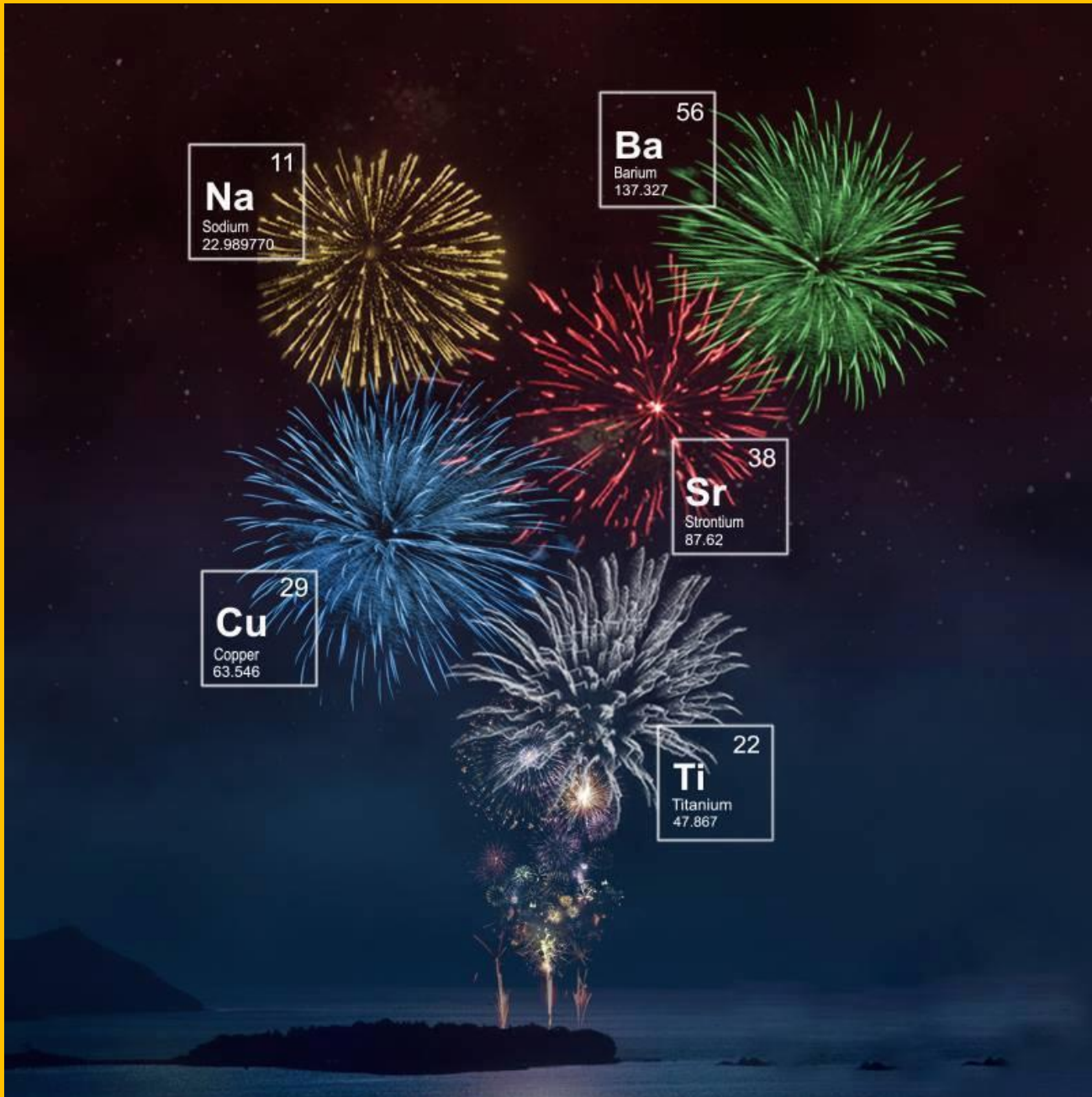
11
Na
Sodium
22.989770

56
Ba
Barium
137.327

29
Cu
Copper
63.546

38
Sr
Strontium
87.62

22
Ti
Titanium
47.867





RbCl

CsCl



CaCl₂

SrCl₂

BaCl₂

CuCl₂

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

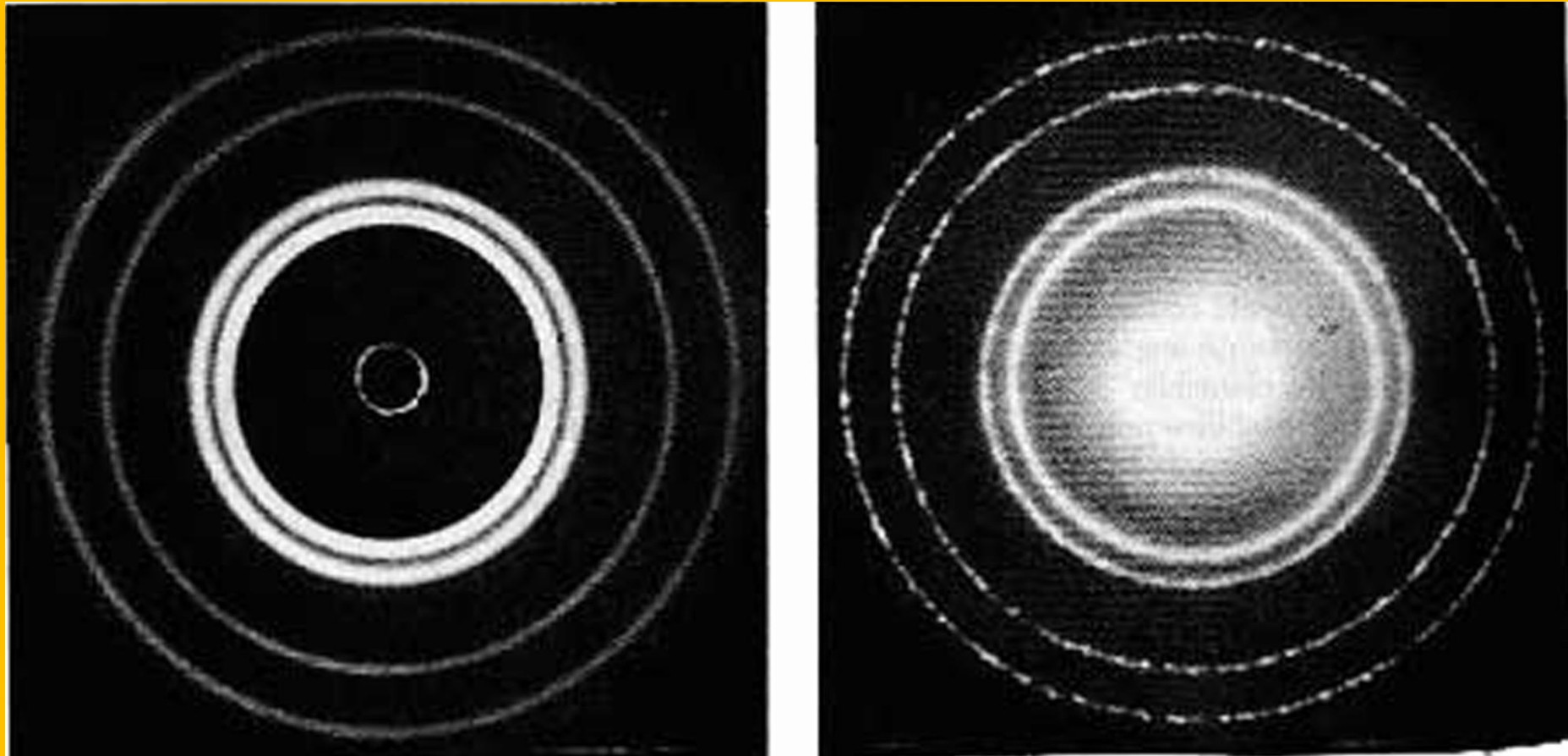
Gli elettroni si comportano da onda/particella

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 Δ 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:

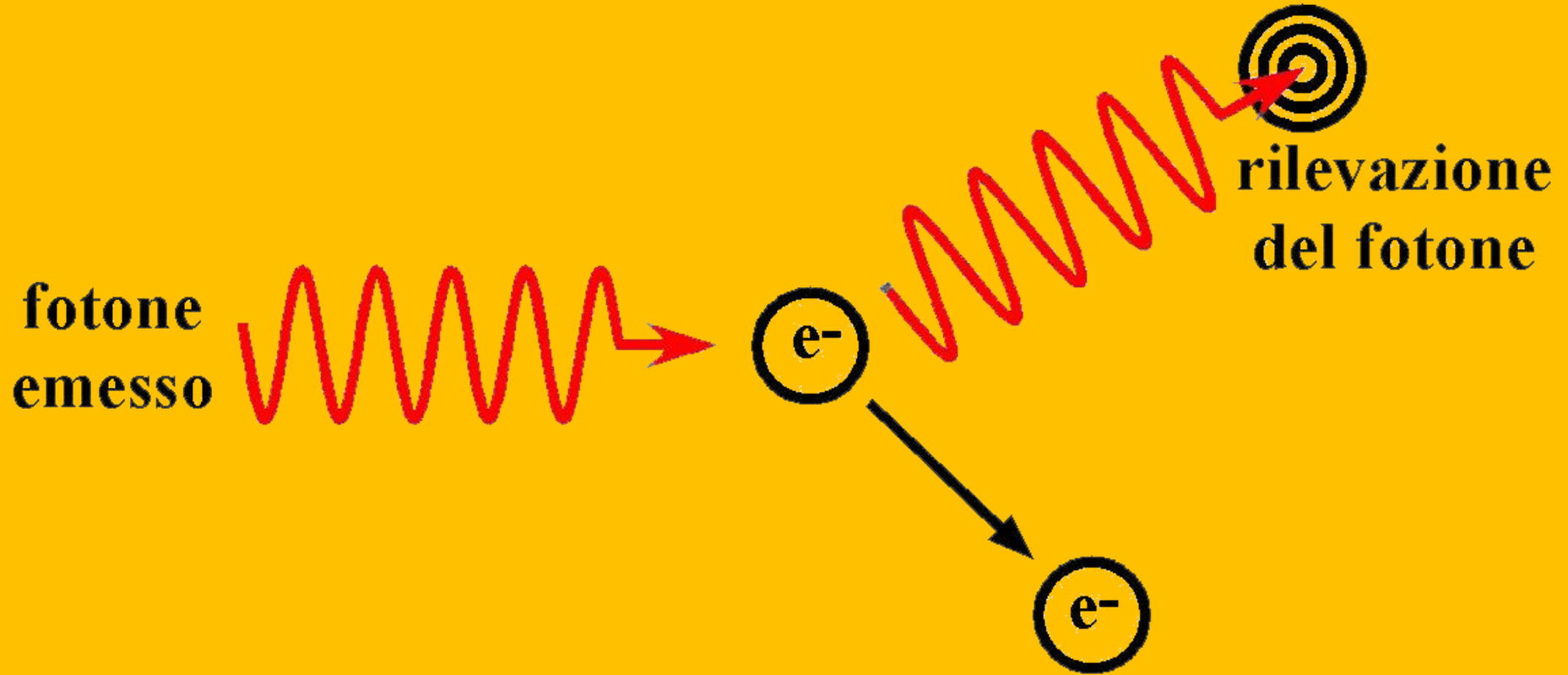
Nessuna conseguenza
pratica

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

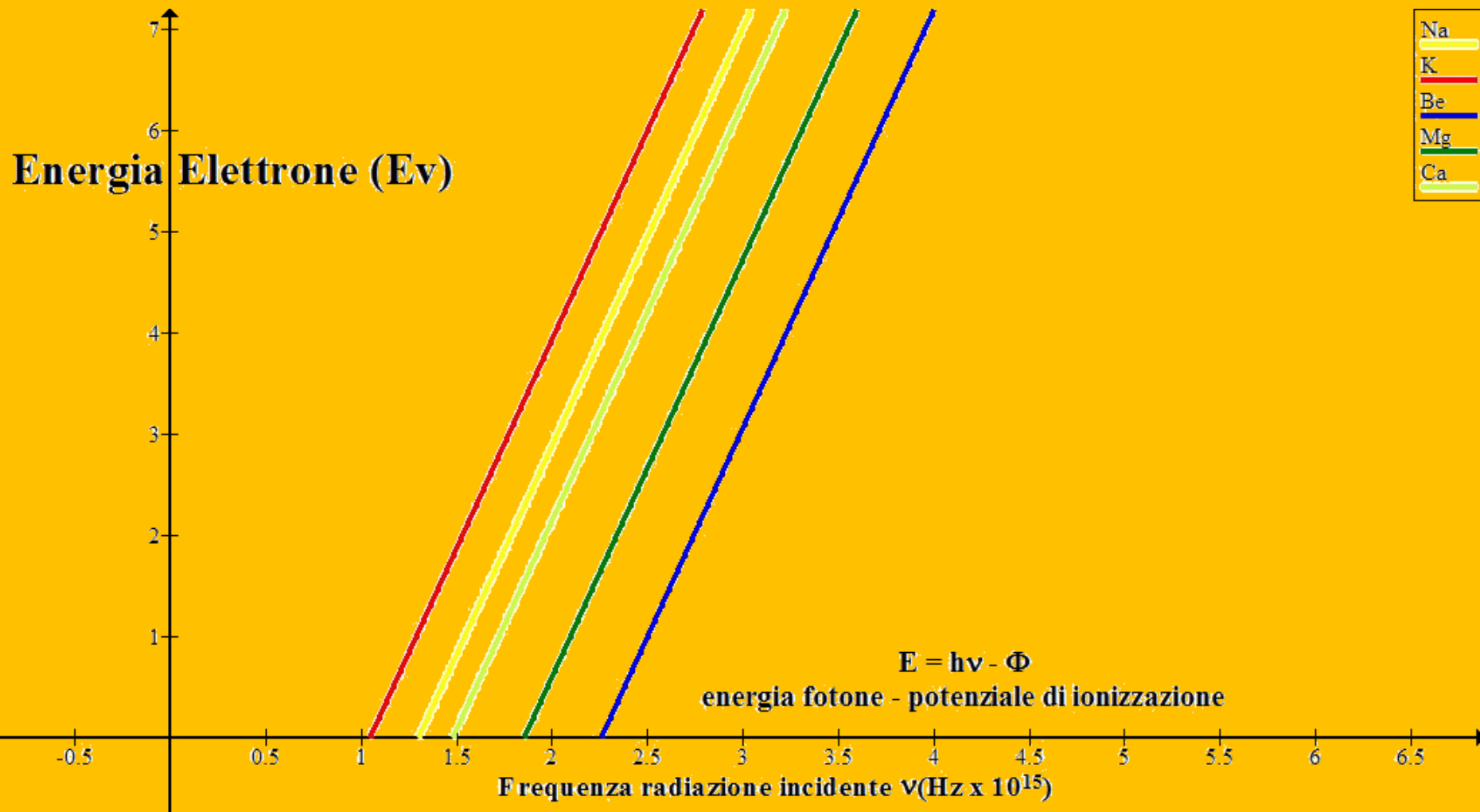


Energia delle radiazioni elettromagnetiche

- 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.
- $E = h \cdot \nu$

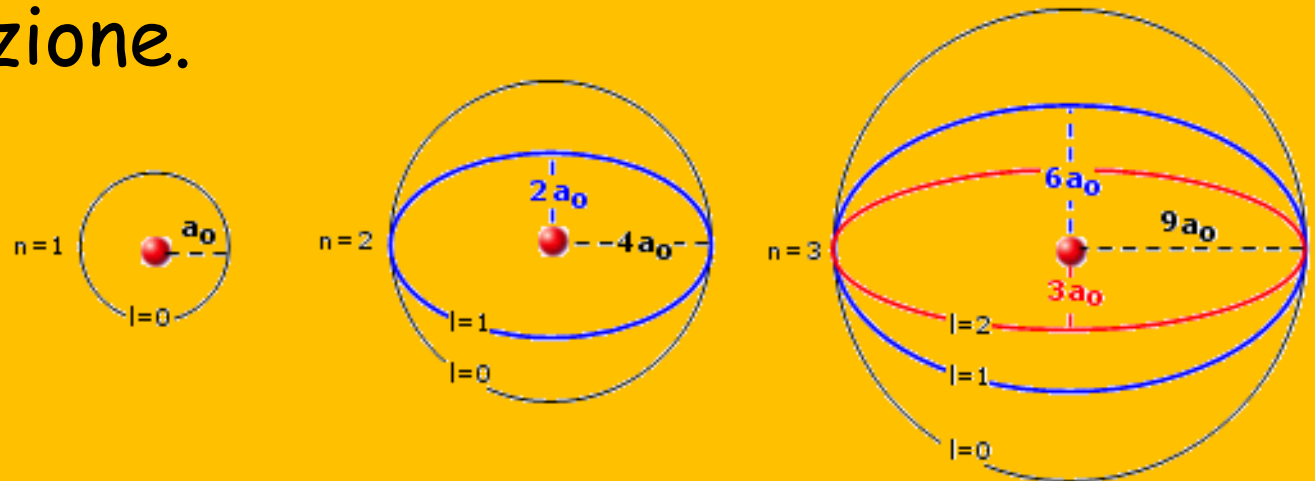
Effetto fotoelettrico

A. Einstein, 1905 (Nobel 1921)

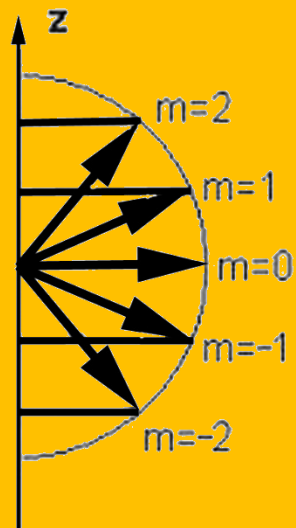
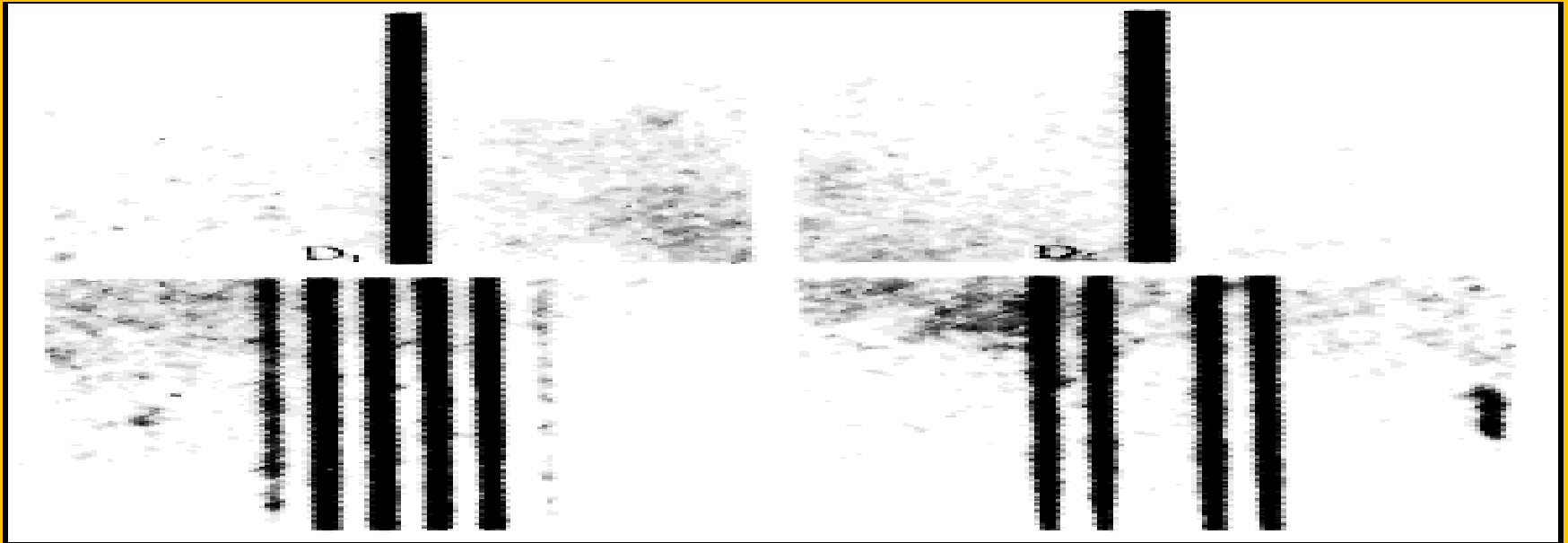


Sommerfeld

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.



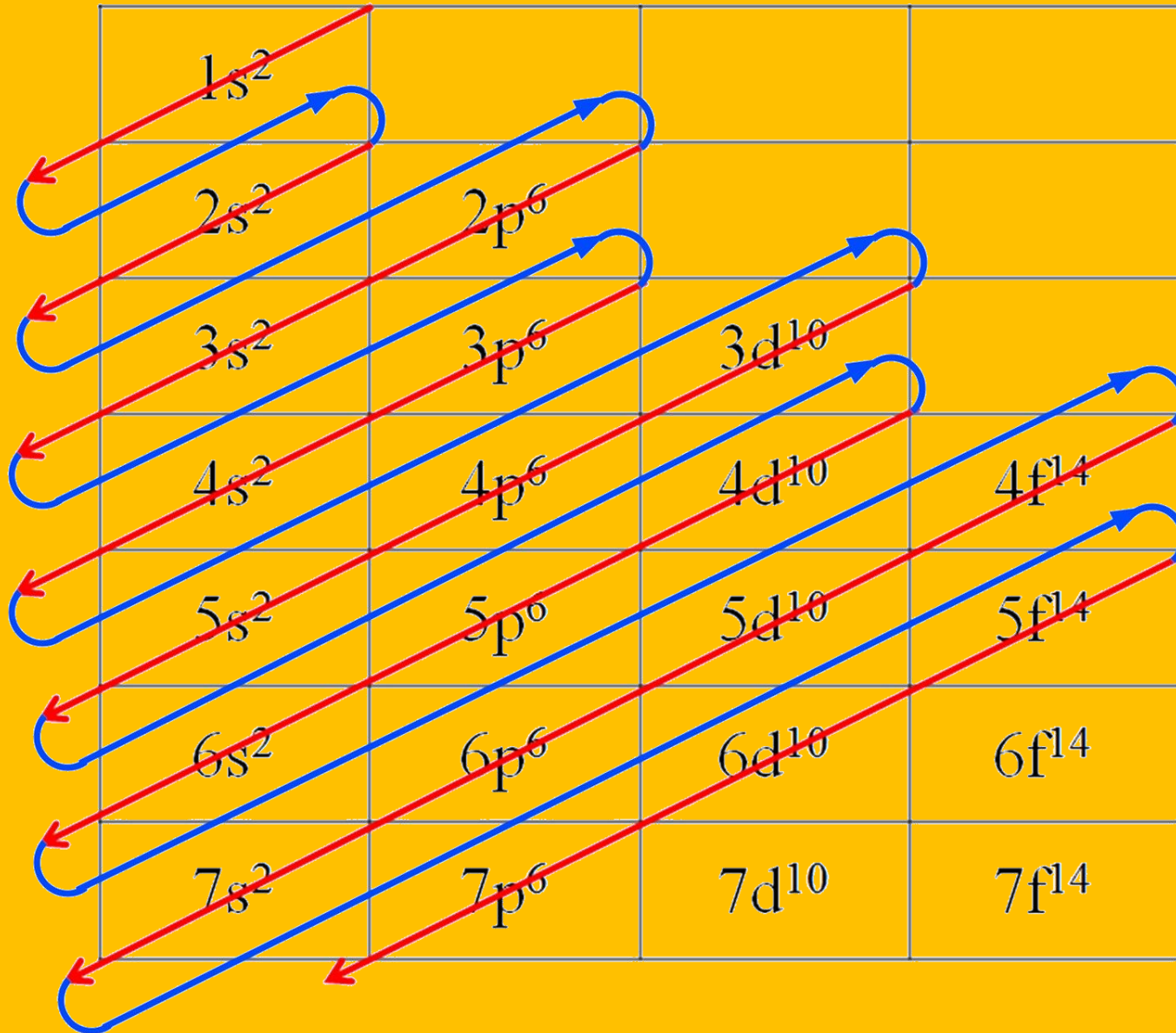
Zeeman



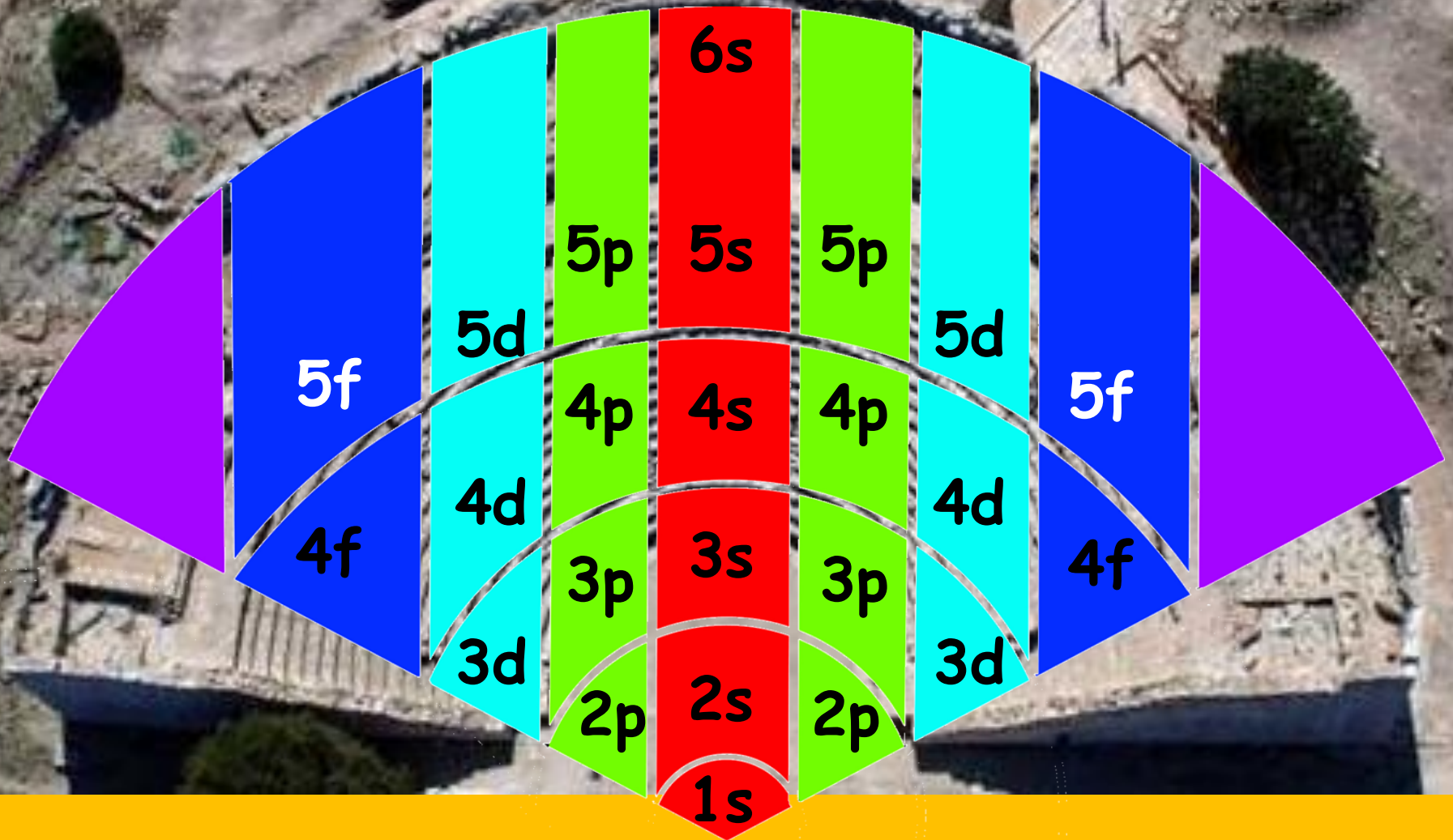
Numeri quantici

- 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



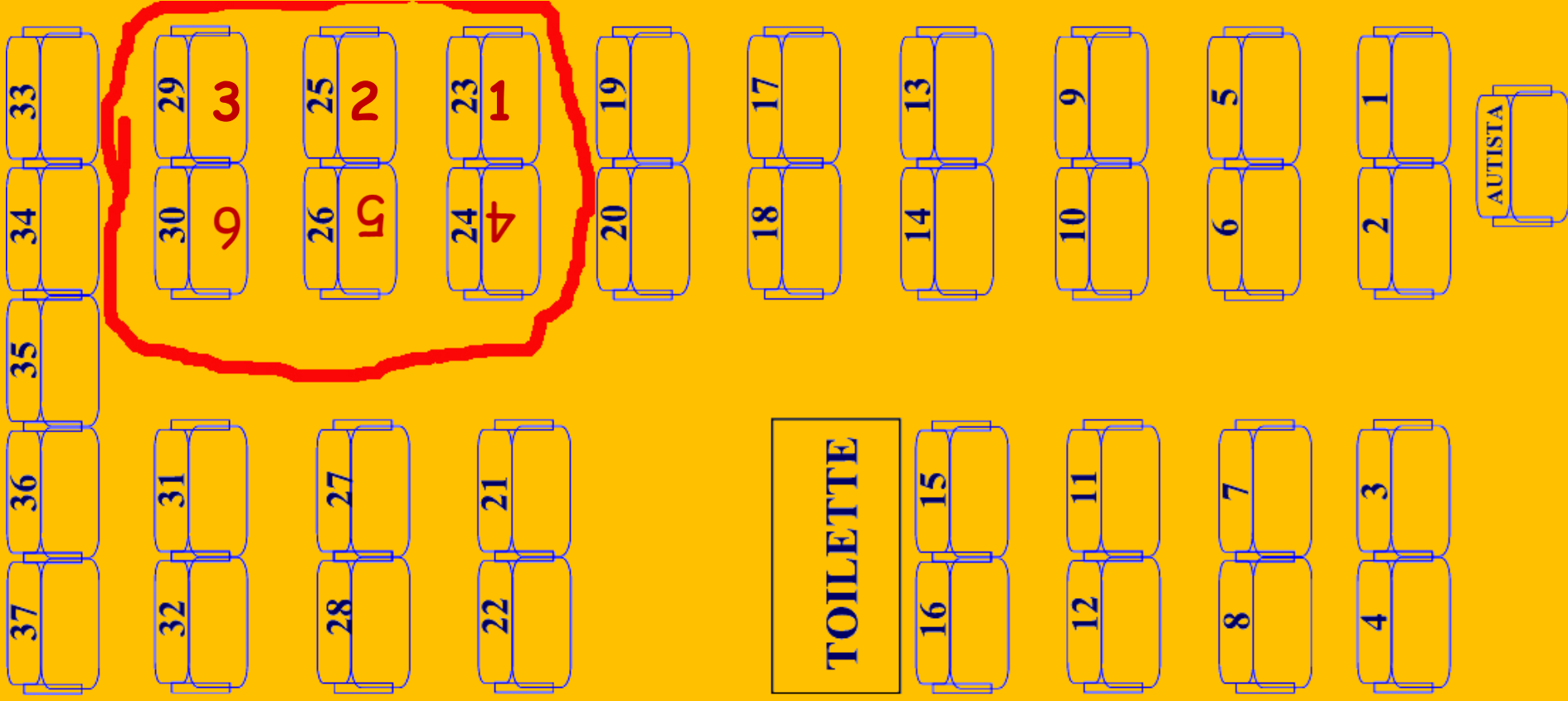
Aufbau e il teatro di Segesta



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:

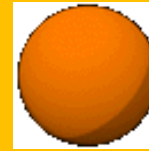
- **Livello (n):** Da 1 a 7. Maggiore è il numero maggiore la distanza dal nucleo
- **Sottolivello (l):** gruppo di orbitali all'interno di un livello. Identificati dalle lettere **s, p, d, f**. Il numero di sottolivelli è uguale a n (numero quantico principale)
- **Orbitali singoli:** sono identificati 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

$$n = 2$$

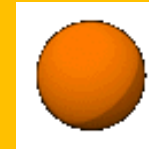
$$l = 1, \quad m = +1, 0, -1$$



2p

$$n = 3$$

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



3s

$$n = 3$$

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



3p

$$n = 3$$

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



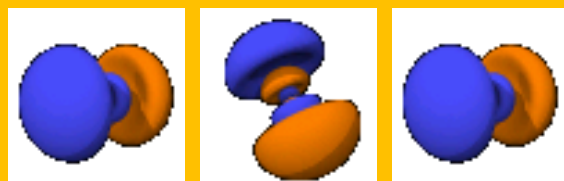
3d

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



4s

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



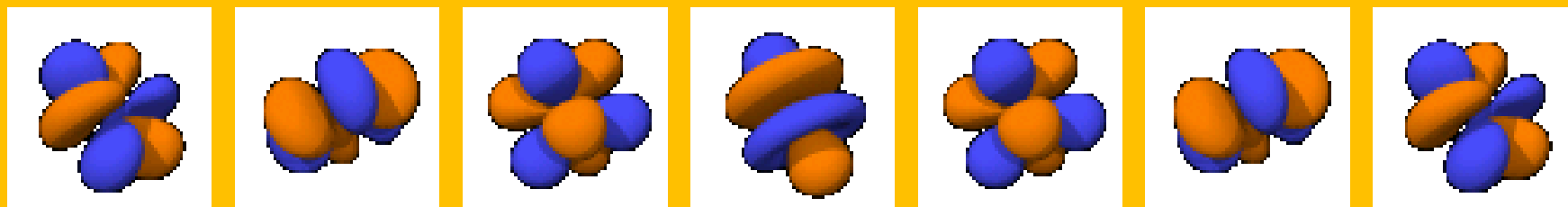
4p

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



4d

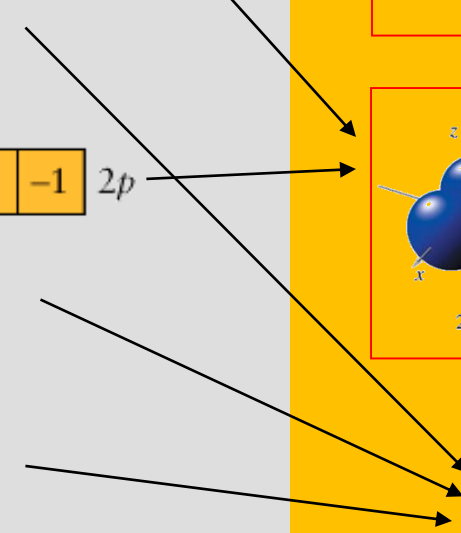
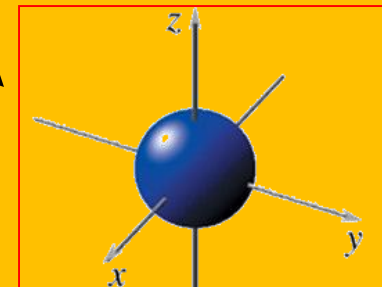
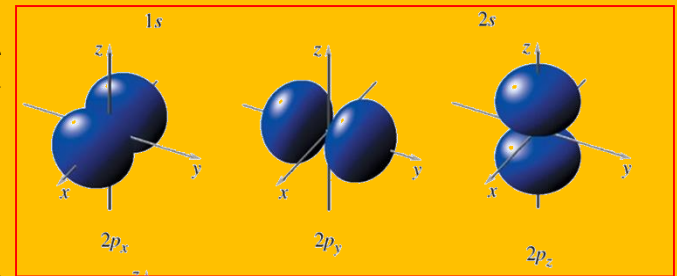
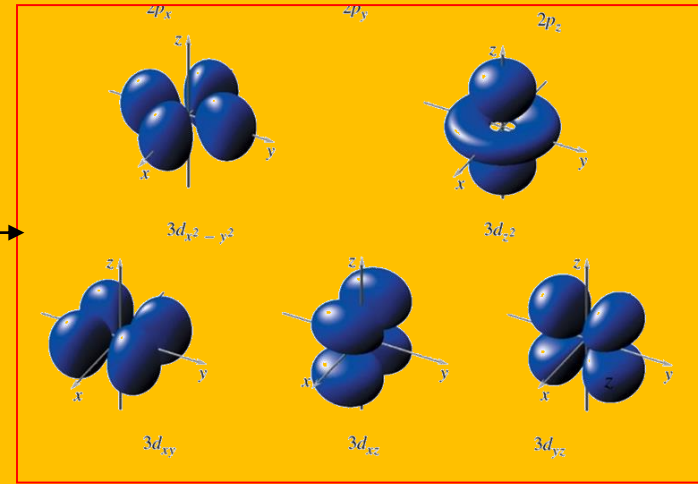
$n = 4$
 $l = 3, m = +3, +2, +1, 0, -1, -2, -3$



4f

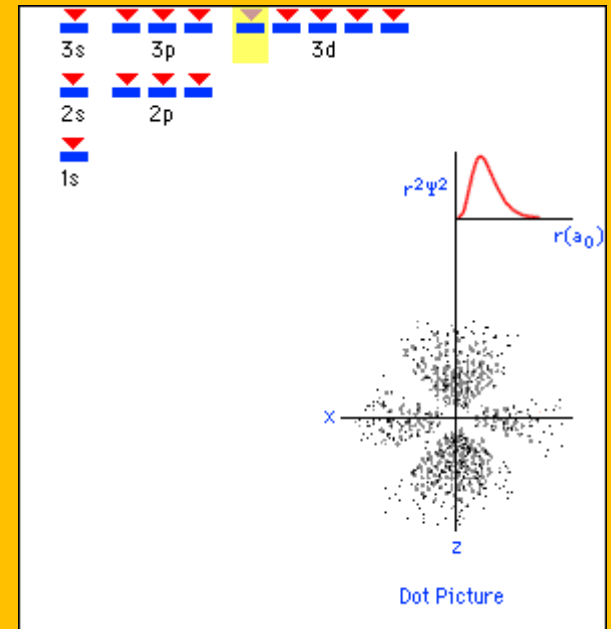
Orbitali nei primi tre livelli

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**, Ψ
- The probability of finding an electron in a given region of space is found to be proportional to Ψ^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: ∇ , is a triple derivative in x, y, and z; Ψ , 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

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

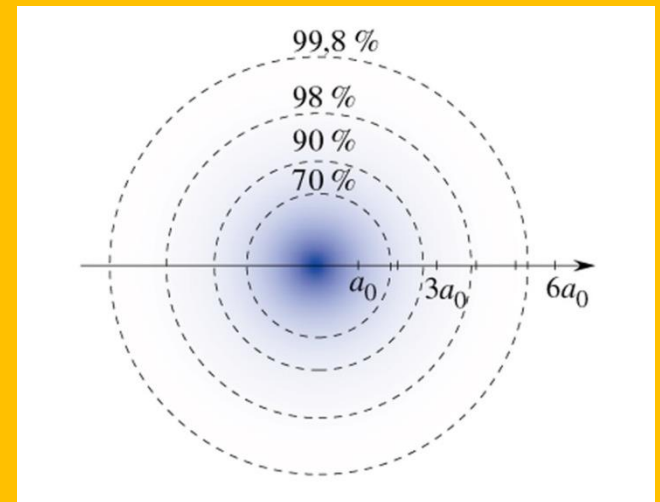
- Incognite sono sia E che ψ (funzione d'onda).
- Il risultato sono infinite ψ a ciascuna delle quali è associato un valore di energia E .
- Può essere risolta esattamente per l'atomo di idrogeno e in modo approssimato per gli atomi polielettronici.

$\Psi^2 \Delta V$: 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** Ψ ottenute dalla risoluzione della equazione di Schroedinger

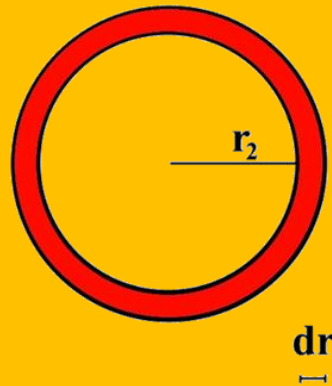
la probabilità di trovare un elettrone entro una certa area, $d\tau$, è data dal valore di $\Psi^2 d\tau$.



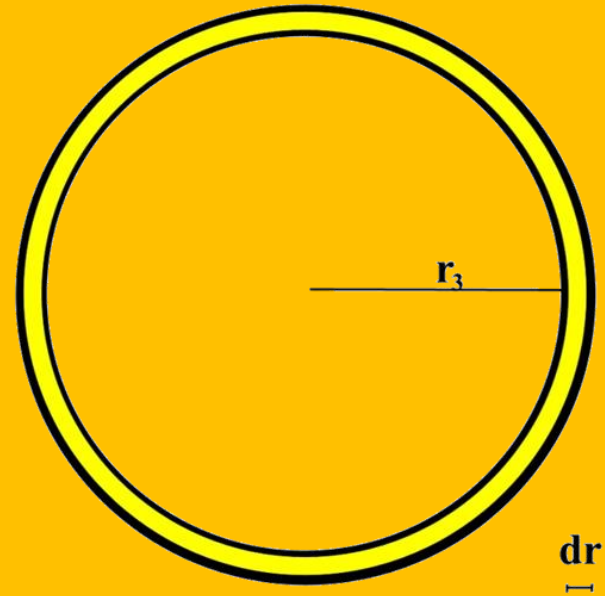
Funzione elementi di volume sferici



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

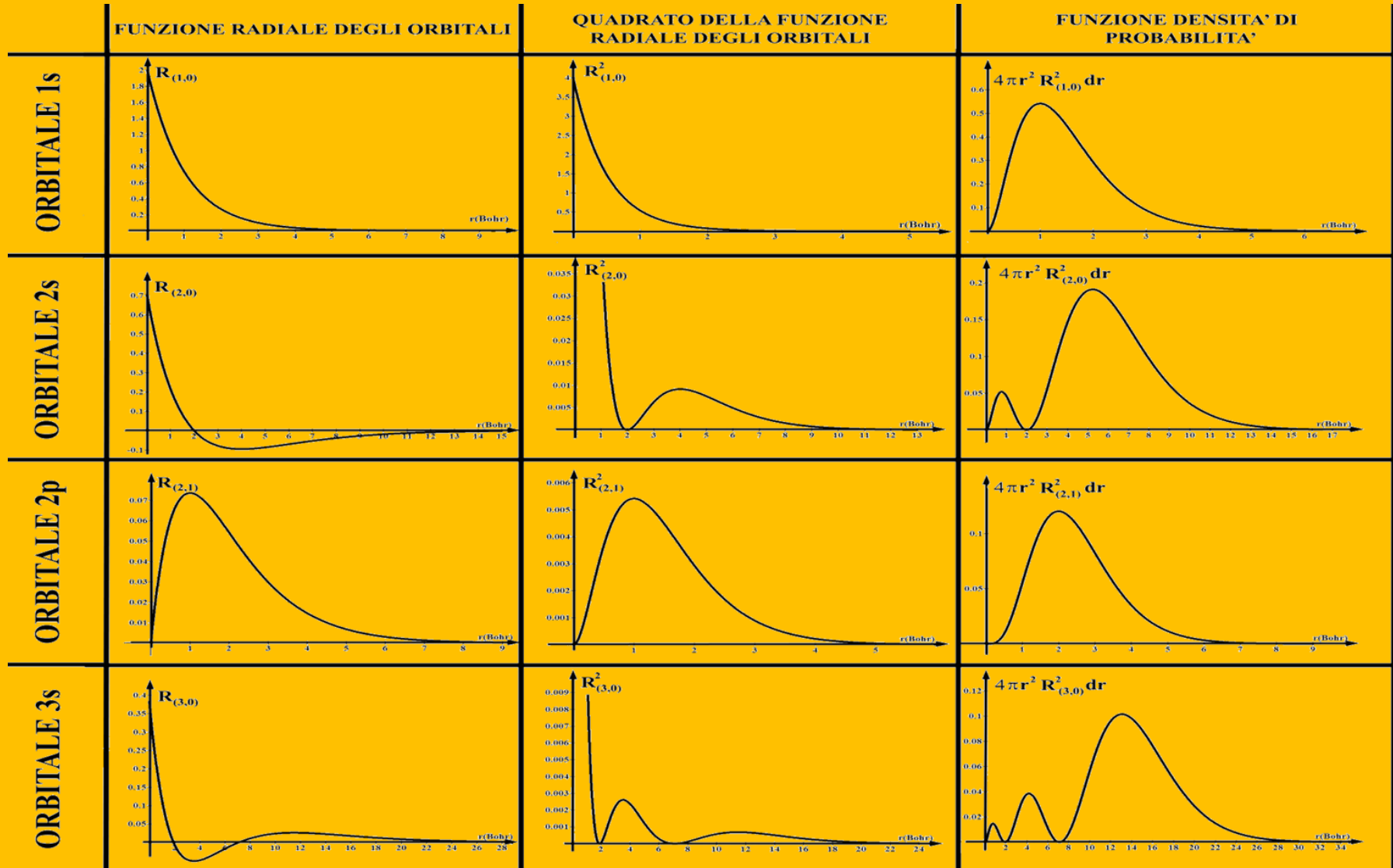


$$V_2 = 4 \pi r_2^2 dr$$



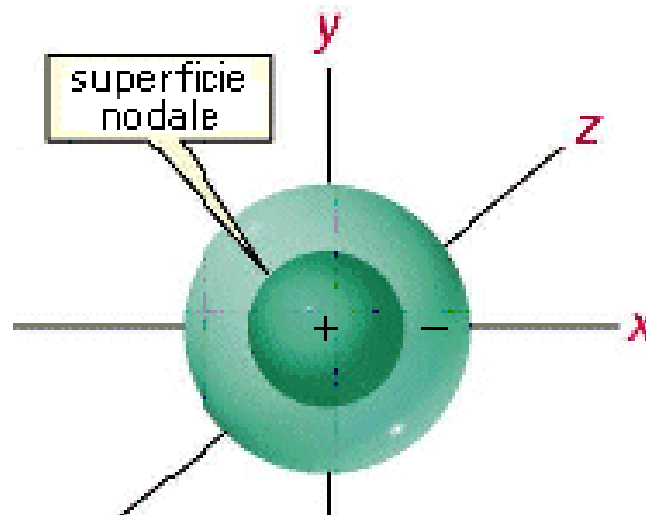
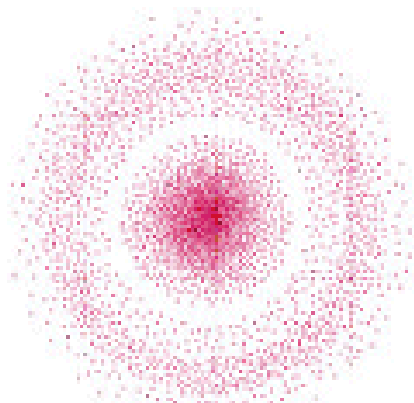
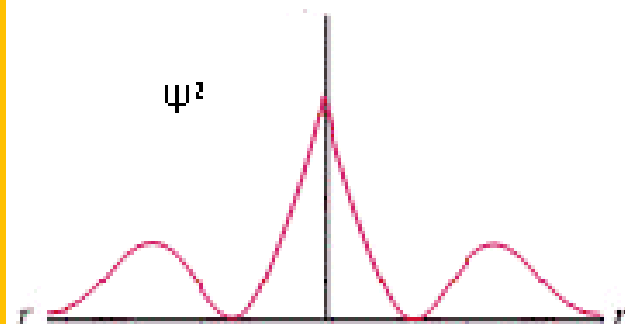
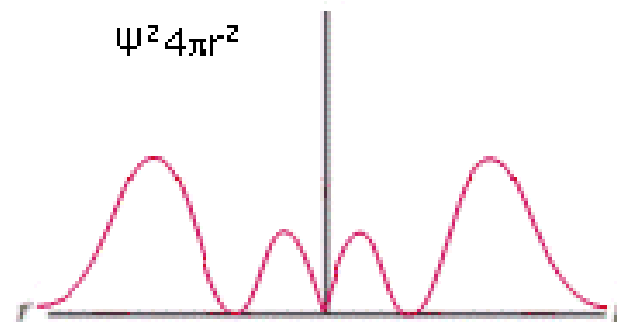
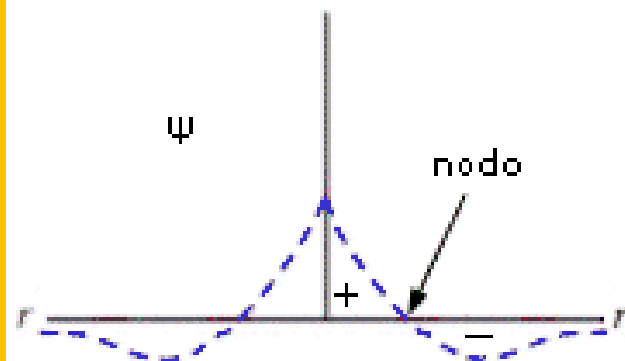
$$V_3 = 4 \pi r_3^2 dr$$

Funzioni d'onda Ψ e derivate



Densità di probabilità

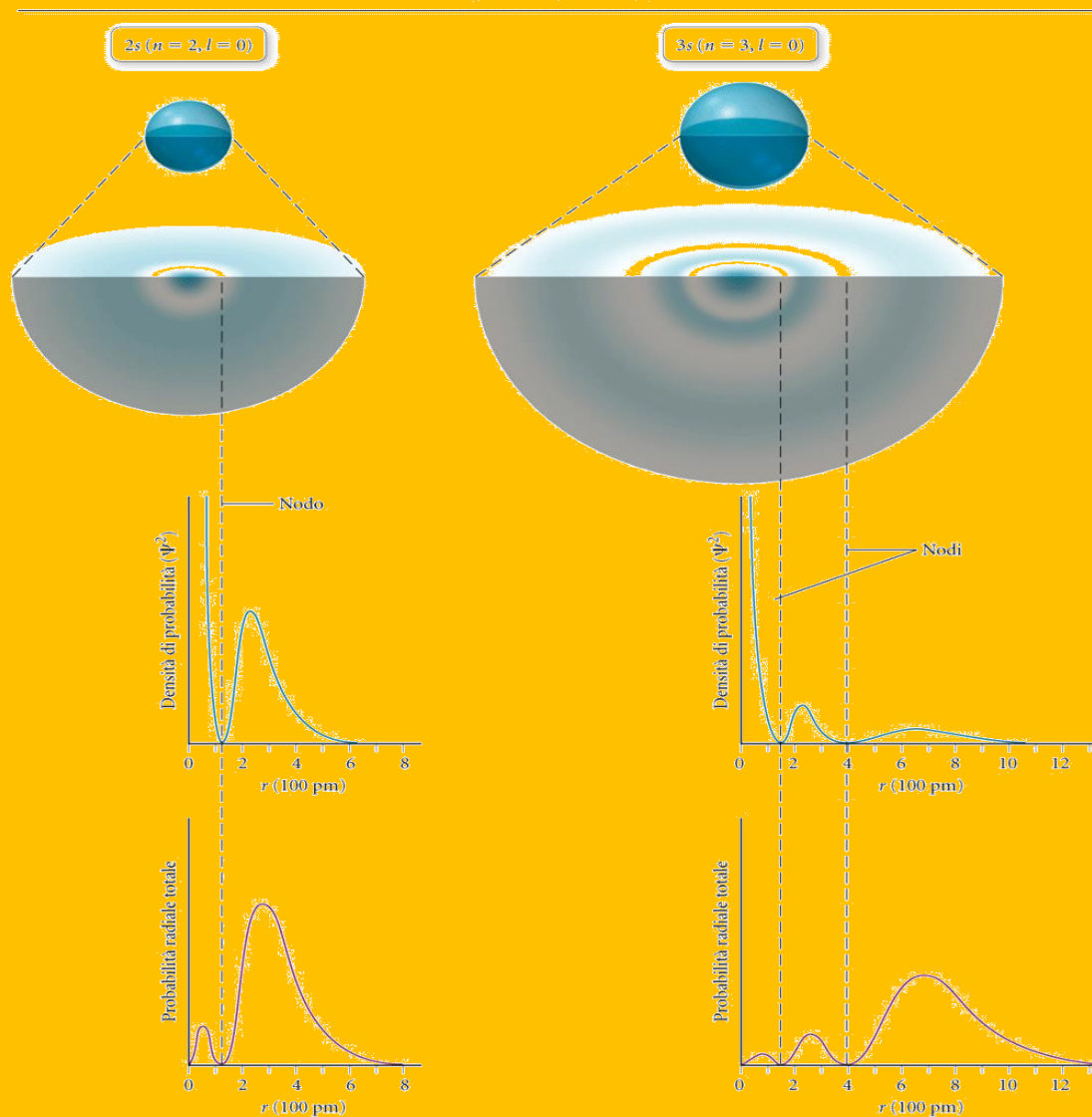
orbitale 2s



5s-2D



Orbitali 2s 3s

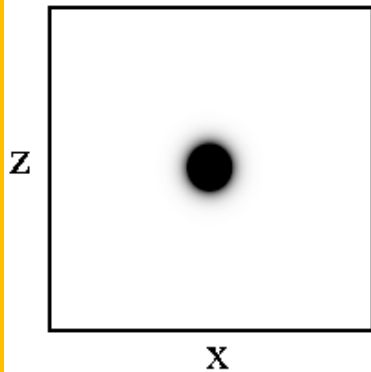


▲ FIGURA 7.25 Densità di probabilità e funzioni di distribuzione radiale per gli orbitali 2s e 3s

Densità di probabilità

Strato K

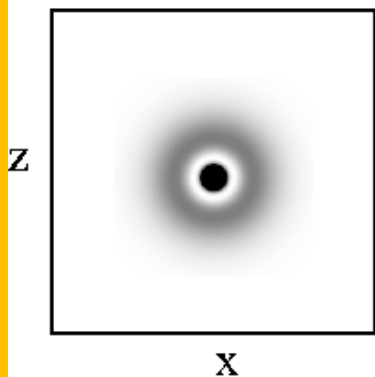
1s



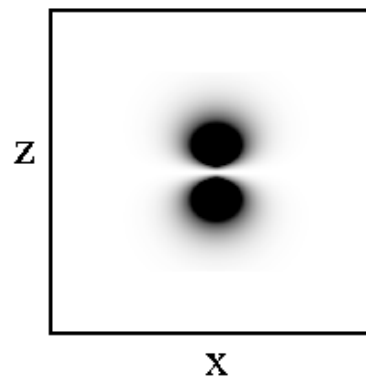
Densità di probabilità elettronica
per gli orbitali dei primi tre strati K, L ed M
dell'atomo di idrogeno
sui piani indicati dalle coordinate x, y, z .

Strato L

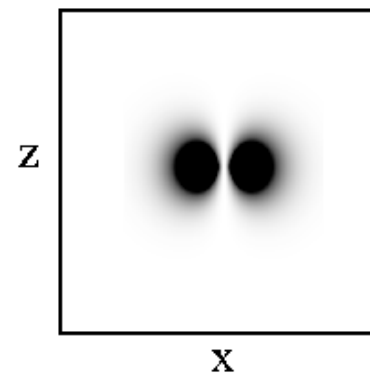
2s



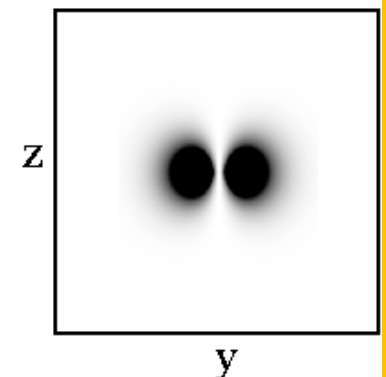
2p_z



2p_x

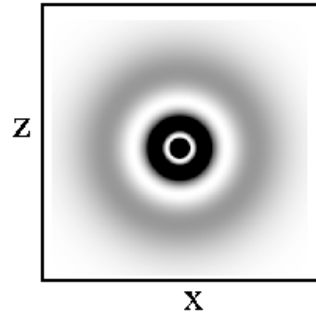


2p_y

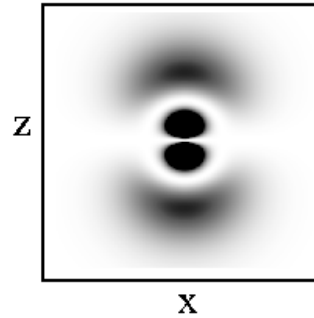


Strato M

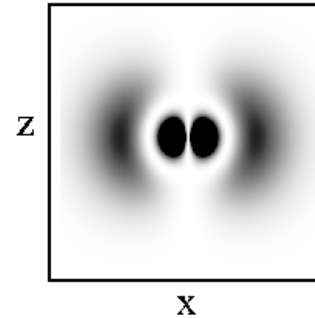
3s



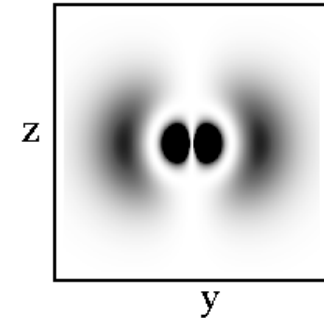
3p_z



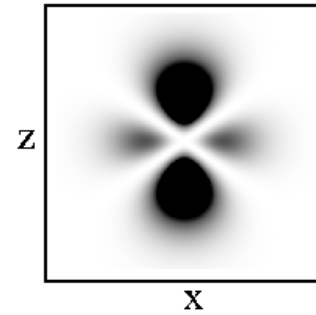
3p_x



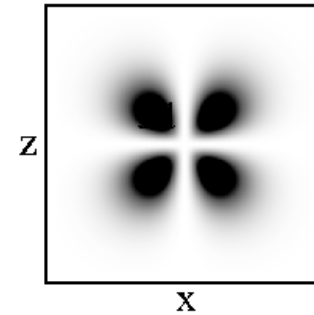
3p_y



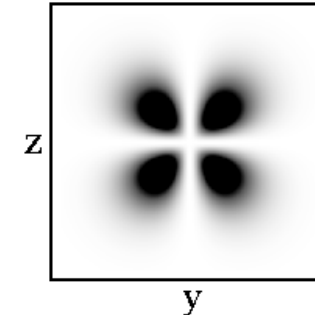
3d_{z²}



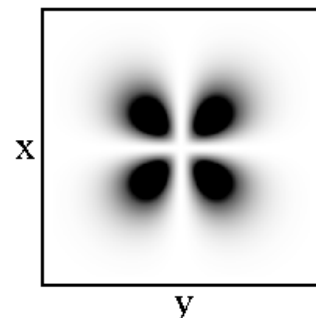
3d_{xz}



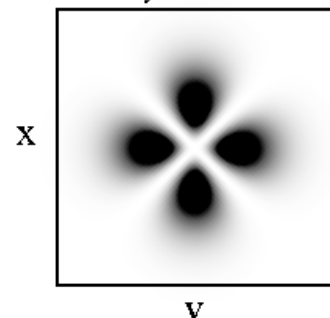
3d_{yz}



3d_{xy}



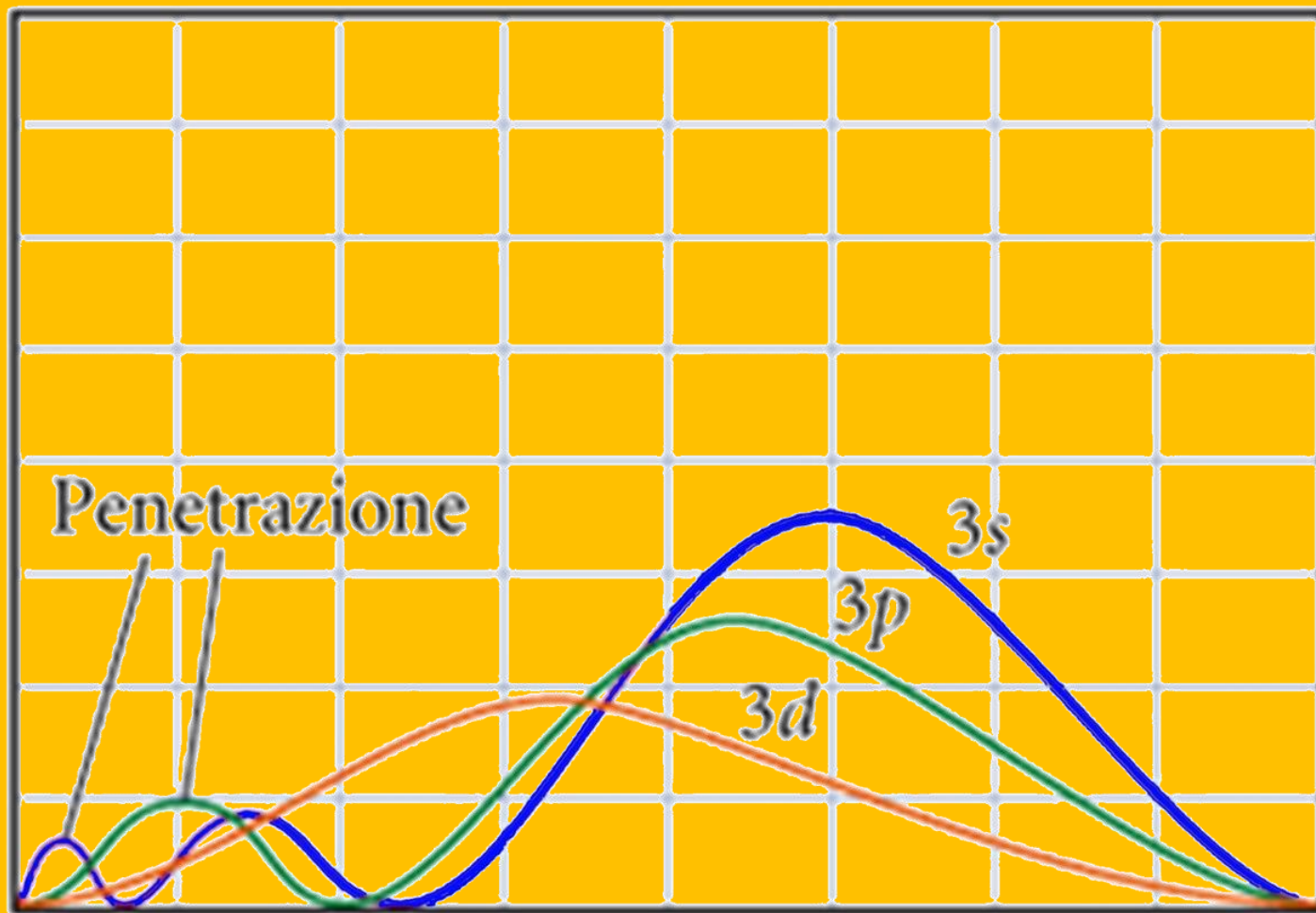
3d_{x²-y²}



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

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

Tendenze

Figura 8.21

Tendenze in tre proprietà atomiche

