

Il modello quantomeccanico dell'atomo

La materia-onda associata all'elettrone si muove nello spazio attorno al nucleo da cui è continuamente influenzata. L'elettrone è descritto da una **funzione d'onda**.

FUNZIONE D'ONDA $\psi(q,t)$, in cui t è un parametro che rappresenta il tempo e q rappresenta le coordinate del sistema. La funzione d'onda **deve** essere continua, a valore singolo ed avere un quadrato integrabile

Il modello quantomeccanico dell'atomo

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

Il prodotto

$$\psi^*(q, t) \psi(q, t) dq$$

Il modello quantomeccanico dell'atomo

L'equazione d'onda di *Schrödinger* ci permette di calcolare i livelli di energia permessi per gli elettroni in un atomo .

Per un elettrone all'interno di un atomo avente un nucleo con Z cariche positive, esistono varie onde stazionarie

$$\psi_{nlm}(q)$$

Ognuna delle quali è caratterizzata dal valore assunto dai tre numeri quantici n , l e m . Ognuna di queste onde è associata ad un valore definito dell'energia e viene chiamata ORBITALE

I numeri quantici

- Numero quantico principale - n

n = 1, 2, 3, 4, “gusci”

n = K, L, M, N,

L'energia dell'elettrone dipende principalmente da n

$$E = -\frac{1}{n^2} Z^2 E_0$$

I numeri quantici

- Numero quantico secondario - ℓ
 $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots(n-1)$
= s, p, d, f, g, h,
- È collegato alla “forma” degli orbitali
- Volume che gli elettroni occupano per il 90-95% del tempo

I numeri quantici

- Numero quantico magnetico - m_ℓ

$$m_\ell = -\ell, (-\ell + 1), (-\ell + 2), \dots, 0, \dots, (\ell - 2), (\ell - 1), \ell$$

- $\ell = 0, m_\ell = 0$ solo 1 valore possibile

Orbitale s

- $\ell = 1, m_\ell = -1, 0, +1$ 3 valori possibili

Orbitali p

I numeri quantici

- $\ell = 2, m_\ell = -2, -1, 0, +1, +2$

– 5 valori possibili

Orbitali d

- $\ell = 3, m_\ell = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$

– 7 valori possibili

Orbitali f

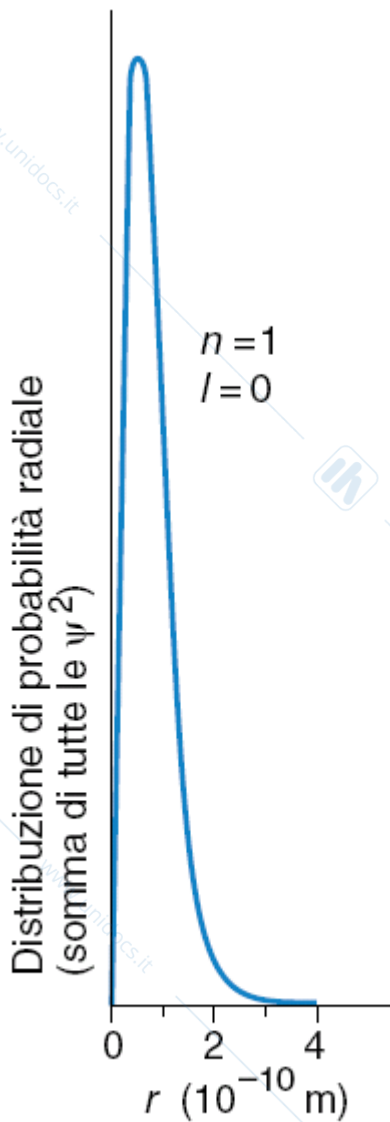
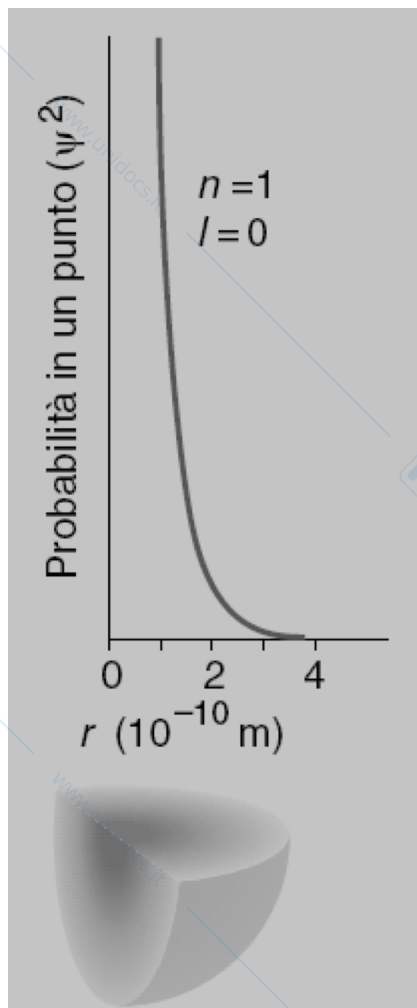
n	l	m_l	ψ	n	l	m_l	ψ
1	0	0	1s	4	0	0	4s
2	0	0	2s	4	1	-1	4p
2	1	-1	2p	4	1	1	
2	1	0		4	2	-2	
2	1	1		4	2	-1	
3	0	0	3s	4	2	0	4d
3	1	-1	3p	4	2	2	
3	1	0		4	3	-3	
3	1	1		4	3	-2	
3	2	-2	3d	4	3	-1	4f
3	2	-1		4	3	0	
3	2	0		4	3	1	
3	2	1		4	3	2	
3	2	2		4	3	3	

I numeri quantici

- Numero quantico di spin - m_s
 - $m_s = +\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$
 - $m_s = \pm \frac{1}{2}$
- Indica lo spin e l'orientazione del campo magnetico generato dalla rotazione degli elettroni intorno al loro asse
- Wolfgang Pauli - 1925
 - Principio di esclusione
 - Due elettroni di un atomo **NON** possono avere la stessa serie dei 4 numeri quantici. Ciò equivale a dire che un orbitale può descrivere **DUE** elettroni purché abbiano spin **ANTIPARALLELO**

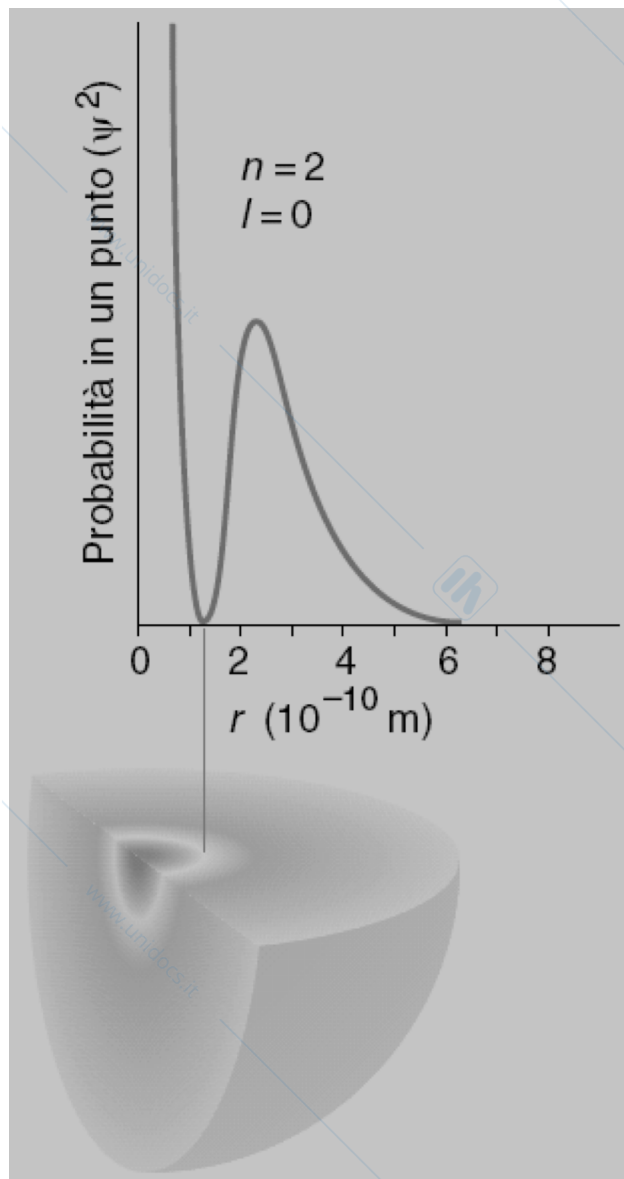
Orbitali Atomici

- Regioni di spazio in cui la probabilità di trovare un elettrone di un atomo è massima
- Orbitali s
 - Simmetria sferica
 - 1 orbitale s per livello
 - $\ell = 0$ 1 valore di m_ℓ



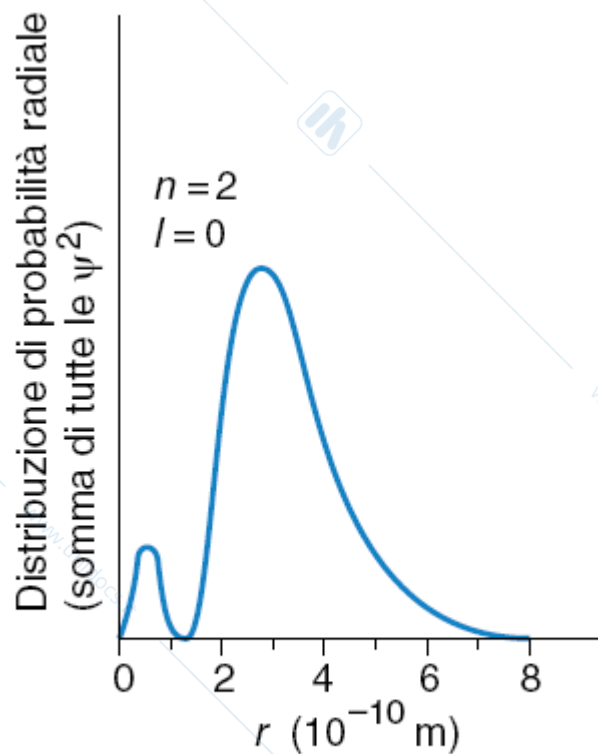
A L'orbitale 1s

L'orbitale 1s



$$\Psi_{200} \equiv \Psi_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - Z \frac{r}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

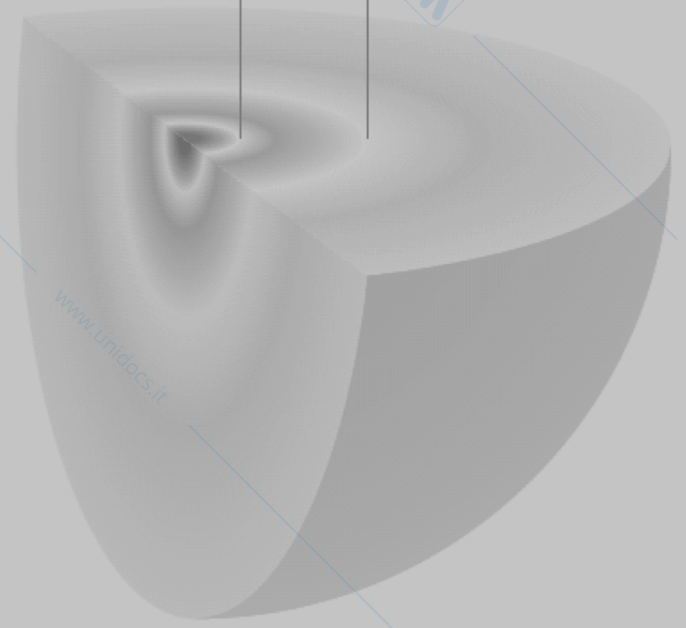
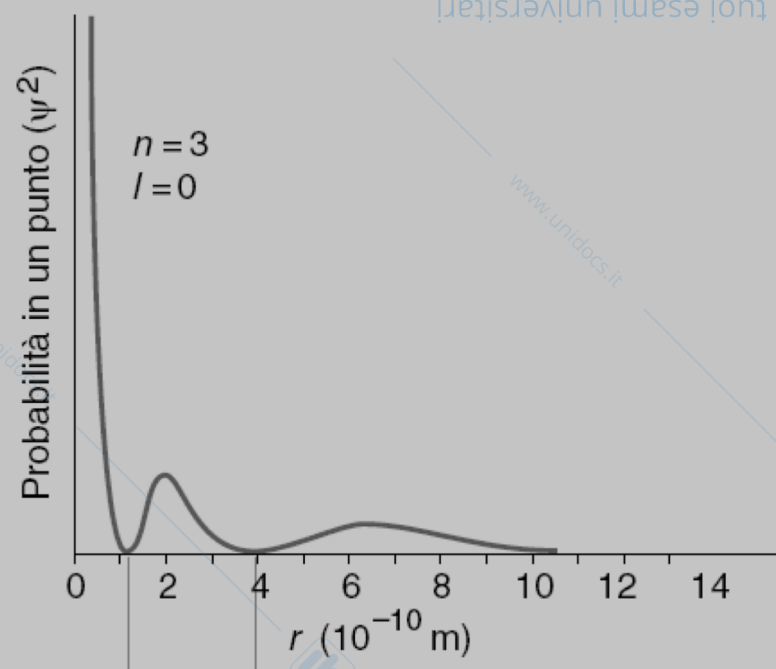
$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2} = 52,9 \text{ pm}$$



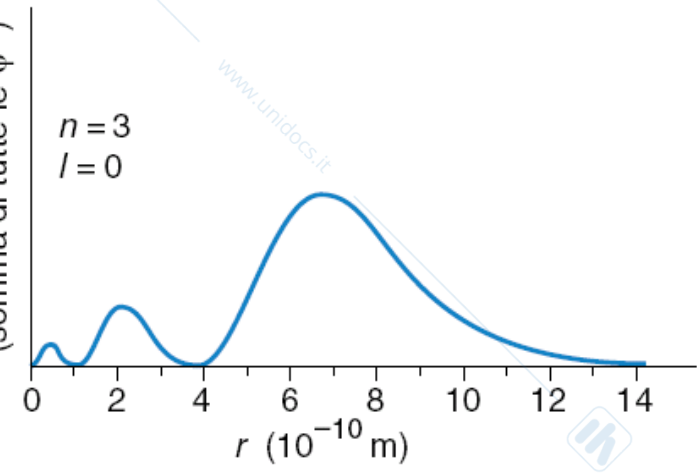
L'orbitale 2s

B L'orbitale 2s

L'orbitale 3s



Distribuzione di probabilità radiale (somma di tutte le ψ^2)

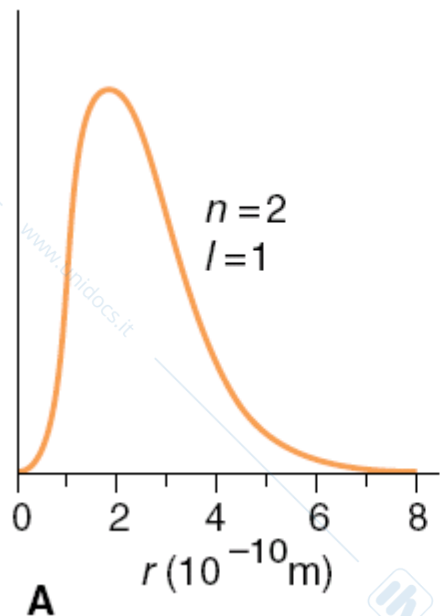


C L'orbitale 3s

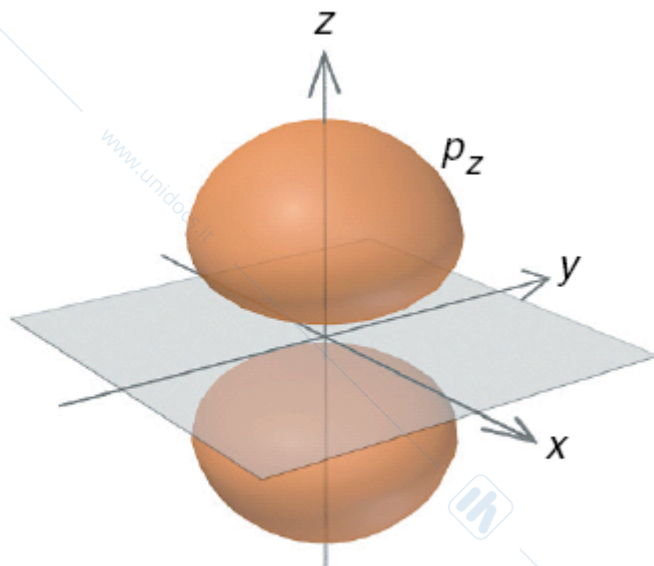
Orbitali Atomici

- Orbitali p
 - Iniziano con $n = 2$
- 3 volumi a forma di nocciolina mutuamente perpendicolari
 - diretti lungo gli assi di un sistema di coordinate Cartesiano
- 3 per livello n ,
 - p_x, p_y, p_z
 - $\ell = 1$
 - $m_\ell = -1, 0, +1$ 3 valori di m_ℓ

Distribuzione di
probabilità radiale

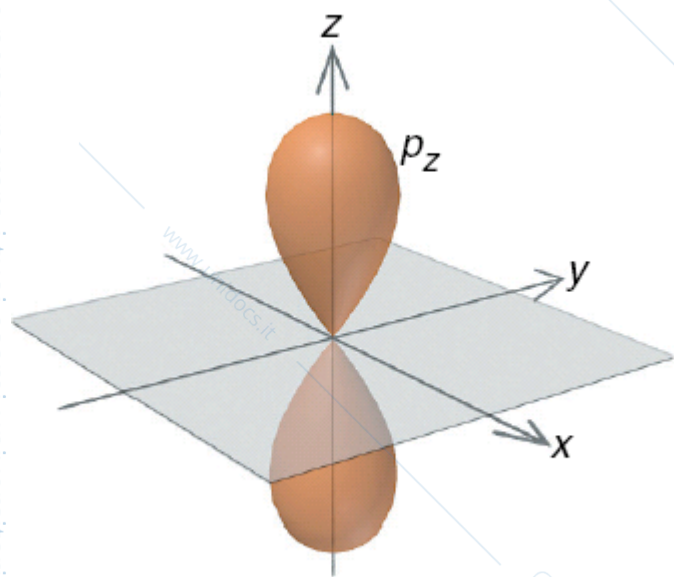


A

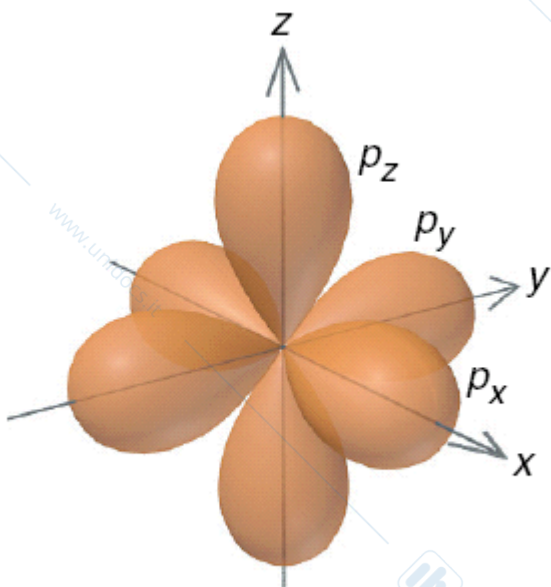


B

Gli orbitali $2p$



C

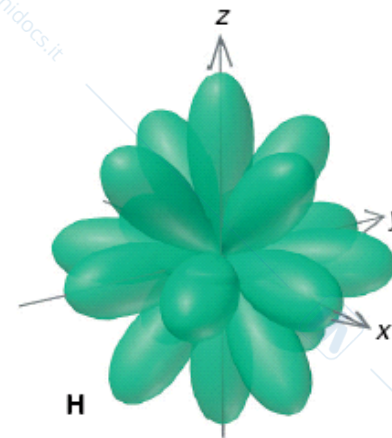
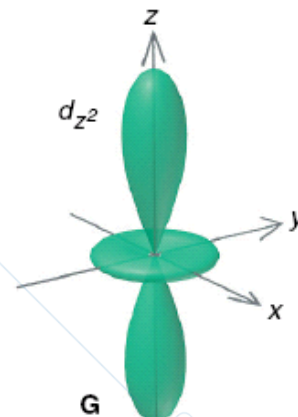
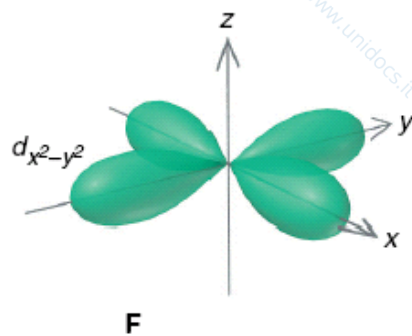
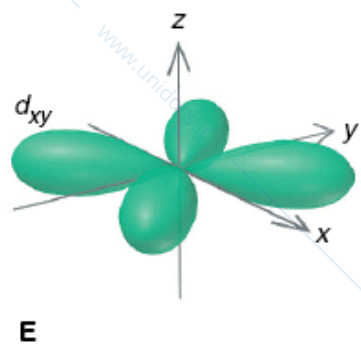
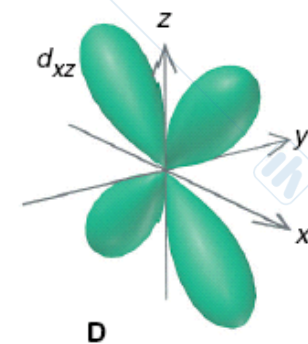
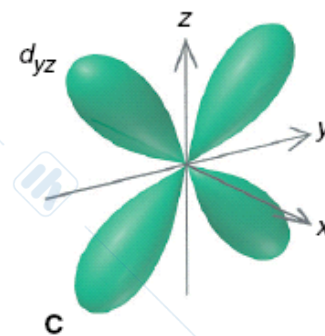
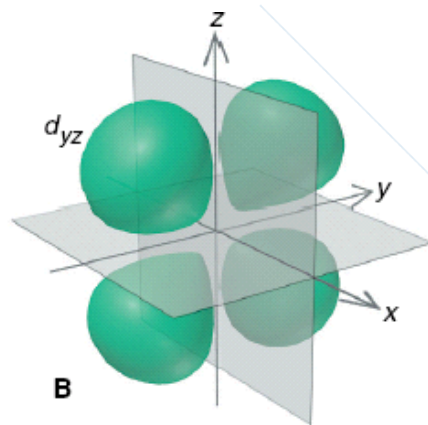
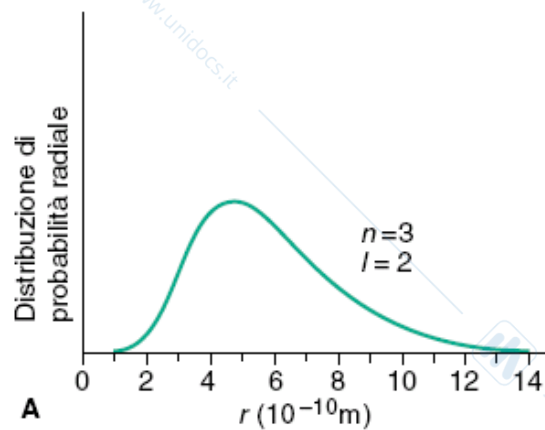


D

Orbitali Atomici

- Orbitali d
 - Iniziano con $n = 3$
- 5 per livello n
 - $\ell = 2$
 - $m_\ell = -2, -1, 0, +1, +2$ 5 valori di m_ℓ

Gli orbitali 3d



Orbitali Atomici

- Orbitali f
 - Iniziano con $n = 4$
- 7 per livello n
 - $\ell = 3$
 - $m_\ell = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$ 7 valori di m_ℓ

Uno dei sette possibili orbitali $4f$

