

STORIA DELL'ATOMO DA DEMOCRITO A SCHRÖDINGER

DEMOCRITO

Democrito, IV sec. a.c., deduce l'esistenza di atomi (atomòs = indivisibile) da un processo logico e puramente teorico attraverso il quale comprende che scomponendo la materia in parti sempre più piccole non si può che arrivare a dei costituenti fondamentali e indivisibili. Attribuisce alla disposizione degli atomi le qualità della materia (colore, forma, odore...) e ipotizza l'esistenza di 'atomi psichici' cioè dell'anima. L'aria, il vuoto, è considerata assenza di atomi.

LA TEORIA ATOMICA DI DALTON

Lo studioso inglese J.Dalton (1766-1844) all'inizio del XIX secolo, attraverso l'ingegnosa interpretazione delle leggi fondamentali della chimica a quel tempo note (la legge della conservazione della massa e la legge delle proporzioni definite), alle quali aggiunse quella da lui stesso formulata (la legge delle proporzioni multiple) arrivò alla conclusione che la materia è discontinua cioè formata da particelle. Sulla base di queste tre leggi Dalton nel 1803 formulò la prima teoria atomica della materia. Tale teoria può essere così schematizzata:

La materia non è continua, ma è composta da particelle che non possono essere ulteriormente divisibili né trasformabili, gli atomi:

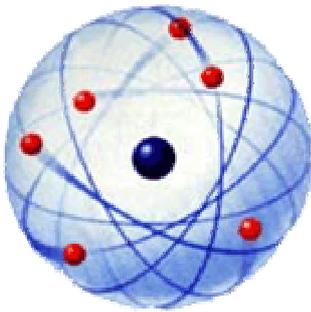
- Gli atomi di un particolare elemento sono tutti uguali tra loro e hanno la stessa massa;
- Gli atomi di elementi diversi hanno massa e proprietà differenti;
- Le reazioni chimiche avvengono tra atomi interi e non tra frazioni di essi;
- In una reazione chimica tra due o più elementi gli atomi, pur conservando la propria identità, si combinano secondo rapporti definiti dando luogo a composti.
-

IL MODELLO ATOMICO DI THOMSON



Nel modello atomico di Thomson (1856–1940), formulato nel 1898, da J.J.Thomson, mediante l'esperimento col tubo di Crookes, si ammetteva che l'atomo, piuttosto che la sferetta solida e compatta ipotizzata da Dalton, fosse un aggregato di particelle più semplici. Alla luce dei pochi dati sperimentali in suo possesso, J.J.Thomson ipotizzò che l'atomo fosse costituito da una sfera omogenea carica di elettricità positiva in cui gli elettroni erano distribuiti in maniera uniforme e senza una disposizione spaziale particolare.

IL MODELLO ATOMICO DI RUTHERFORD



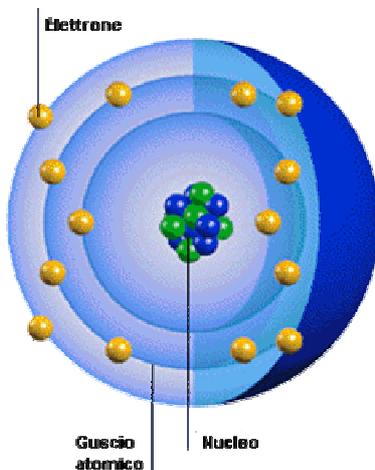
Rutherford (1871–1937) ipotizzò che la massa e la carica positiva fossero concentrate in una parte molto piccola dell'atomo chiamata nucleo, e che gli elettroni si trovavano nella zona periferica, a grande distanza dal nucleo.

Questa ipotesi nasceva da un'importante esperienza, effettuata da due allievi di Rutherford. Una lamina sottilissima di metallo veniva bombardata con particelle alfa veloci; uno schermo rivelatore indicava poi i punti di arrivo della particelle alfa, permettendo quindi di stabilirne la traiettoria dopo il passaggio attraverso la lamina.

Se fosse stato valido il modello di Thomson, cioè se l'atomo avesse avuto una struttura omogenea, le particelle alfa avrebbero dovuto comportarsi tutte nello stesso modo, perché in qualunque punto avessero colpito la lamina metallica avrebbero trovato situazioni equivalenti.

In realtà le particelle alfa si comportarono in modo diverso: per la maggior parte passarono senza subire nessuna deviazione, ma alcune vennero deviate secondo vari angoli e alcune vennero addirittura respinte. Questo comportamento spinse Rutherford a formulare la sua ipotesi; le particelle che non venivano deviate erano quelle che passavano abbastanza distanti dai nuclei. Quelle che si avvicinavano ai nuclei venivano deviate per effetto della repulsione elettrica, visto che sia le particelle che i nuclei sono positivi; tanto più si avvicinavano ai nuclei, tanto più fortemente venivano deviate. Quelle che andavano direttamente verso i nuclei venivano respinte: queste ultime erano poche, perché il nucleo occupa una parte molto piccola rispetto allo spazio occupato da un atomo e quindi la probabilità che una particella si dirigesse proprio contro un nucleo era bassa.

IL MODELLO ATOMICO DI BOHR



Il nuovo modello di atomo fu proposto da Niels Bohr (1871-1937) nel 1913.

Alcuni anni prima Max Planck aveva introdotto un concetto che non faceva parte della fisica classica, quello di quantizzazione. Se una grandezza può assumere soltanto determinati valori e non altri. Planck aveva dovuto introdurre questo concetto per spiegare un altro fenomeno che aveva costituito un rompicapo per i fisici: la radiazione del corpo nero. Bohr pensò che un'ipotesi analoga potesse permettere di spiegare i fenomeni che riguardano gli atomi. Il modello di Bohr si basa su alcune ipotesi

fondamentali:

- PRIMA IPOTESI: Nell'atomo gli elettroni ruotano intorno al nucleo su orbite circolari. Ognuna di queste orbite ha un raggio ben determinato.
- SECONDA IPOTESI: Il momento angolare degli elettroni é quantizzato. Esso può assumere soltanto certi valori (valori permessi), ma non può assumere i valori intermedi fra quelli permessi.

Dopo aver introdotto queste ipotesi, Bohr studia la situazione dell'elettrone utilizzando le leggi della fisica classica. L'elettrone é soggetto alla forza di attrazione del nucleo. Questa forza provoca il suo moto di rotazione e quindi costituisce la forza centripeta. Gli elettroni nelle loro orbite possiedono una certa quantità di energia; essi infatti sono in moto, e quindi hanno energia cinetica; inoltre hanno energia potenziale dovuta all'attrazione elettrostatica tra elettrone e nucleo.

- TERZA IPOTESI: Finché un elettrone rimane nella sua orbita, non emette e non assorbe energia.

Per passare da un'orbita con energia minore a un'orbita con energia maggiore (cioé da un'orbita piú interna a una piú esterna), l'elettrone deve ricevere dall'esterno una quantità di energia corrispondente alla differenza di energia fra le due orbite; se invece passa da un'orbita con energia maggiore a un'orbita con energia minore, l'elettrone emette una quantità di energia pari alla differenza di energia fra le due orbite. L'energia viene emessa o assorbita sotto forma di radiazione elettromagnetica. Esiste una relazione matematica fra i valori di energia delle orbite di partenza e di arrivo e la frequenza della radiazioni:

$$E_1 - E_2 = h \nu$$

dove:

- E_1 é l'energia dell'orbita sulla quale si trovava l'elettrone all'inizio
- E_2 é l'energia dell'orbita sulla quale si é portato l'elettrone
- h é la costante di Planck
- ν é la frequenza della radiazione emessa o assorbita
- L'ipotesi di Bohr sulla struttura dell'atomo spiega quindi perché gli spettri di emissione degli atomi sono spettri discontinui, a righe: ogni riga corrisponde a un ben determinato valore di energia, che a sua volta corrisponde alla differenza di energia fra due orbite.

LA TEORIA MODERNA

LA VARIETÀ DEGLI ORBITALI:

- de Broglie cercò una spiegazione per tutta la materia il concetto del dualismo onda-corpuscolo messo attraverso la radiazione elettromagnetica e suggerì che le particelle materiali potessero assumere un comportamento di tipo ondulatorio in determinate situazioni.
- Heisenberg: "Non è possibile conoscere simultaneamente posizione e quantità di moto di un dato oggetto con precisione arbitraria". In Fisica moderna, quello che si può definire, in conformità con il Principio di Heisenberg, è al più una probabilità che la particella ad un certo istante sia in una data posizione dello spazio e con un dato impulso.

Il principio di indeterminazione di Heisenberg e la scoperta della doppia natura dell'elettrone da parte di de Broglie indicavano chiaramente una cosa: non era più possibile trattare l'elettrone come una particella classica.

Bohr nel suo modello, aveva introdotto l'ipotesi della quantizzazione, ma per il resto aveva trattato l'elettrone come una particella classica, che si muove su orbite ben determinate il cui raggio può essere calcolato in base a semplici considerazioni meccaniche sulle forze in gioco. Le nuove scoperte però imponevano un modo completamente diverso di affrontare il problema, che portò all'elaborazione di una nuova fisica, la meccanica quantistica.

Il termine "orbitali" indica le funzioni che si ottengono come soluzione dell'equazione di Schrödinger, che sono visualizzabili come regioni dello spazio intorno al nucleo, nelle quali è possibile trovare l'elettrone. Si può dire che gli orbitali hanno varie forme e si protendono lontano dal nucleo in modo diverso, in relazione ai numeri quantici che ne caratterizzano la funzione d'onda. Ogni funzione d'onda, o orbitale, descrive uno stato dell'atomo. Le diverse funzioni d'onda di un atomo si denotano indicando i valori dei tre numeri quantici: n , l , m ; a ogni terzetto di numeri quantici corrisponde un orbitale ben preciso.

IL NUMERO QUANTICO PRINCIPALE, n : può assumere valori positivi interi (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 ...), indica il livello in cui si colloca l'elettrone, e quindi è in relazione con le dimensioni e l'energia dell'orbitale.

IL NUMERO QUANTICO ANGOLARE, l : può assumere valori interi positivi da 0 a $n-1$ (n è il numero quantico principale) ed indica la forma geometrica dell'orbitale.

IL NUMERO QUANTICO MAGNETICO, m : può assumere ogni valore intero, zero incluso, compreso tra $+l$ e $-l$ (l è il numero quantico angolare) e può essere messo in relazione con l'orientamento dell'orbitale nello spazio.

IL NUMERO QUANTICO DI SPIN, s : esprime il senso di rotazione dell'elettrone attorno al proprio asse e può assumere i valori di $1/2$ e $-1/2$, indicati convenzionalmente con \uparrow e con \downarrow , come viene usato nel riempimento degli orbitali.

Il significato generale dei numeri quantici n , l ed m rimane inaltera seguenti precisazioni:

- a) Il valore assunto da " n " determina l'energia dell'orbitale ed individua i livelli detti anche strati o gusci.
- b) il valore assunto da " l " è associabile al tipo ed alla forma dell'orbitali, gli orbitali " s " presentano simmetria sferica, gli orbitali " p " presentano dei lobi, gli orbitali " d " ed " f " hanno forme più complesse.
- c) il valore assunto da " m " è associabile al numero di orbitali per livello energetico e ne indica l'orientazione nello spazio.
- d) Naturalmente anche il modello di Schrödinger prevede l'esistenza del moto di spin e non possono essere presenti più di due elettroni per orbitale
- 1° Livello energetico
1 orbitale s ($1s$) capienza max: 2 elettroni
- 2° Livello energetico
1 orbitale s ($2s$) capienza max: 2 elettroni
3 orbitali p ($2p$) capienza max: 6 elettroni
- 3° Livello energetico
1 orbitale s ($3s$) capienza max: 2 elettroni
3 orbitali p ($3p$) capienza max: 6 elettroni
5 orbitali d ($3d$) capienza max: 10 elettroni
- 4° Livello energetico
1 orbitale s ($4s$) capienza max: 2 elettroni
3 orbitali p ($4p$) capienza max: 6 elettroni
5 orbitali d ($4d$) capienza max: 10 elettroni
7 orbitali f ($4f$) capienza max: 14 elettroni

TIPI DI ORBITALE: s, p, d, fLivello 1 (n=1)

$$l = 0$$

$$m = 0$$

Si ha un solo orbitale di tipo : s

Poiché ogni orbitale può contenere al massimo 2 elettroni (di spin opposto), nel primo livello troviamo solo 2 elettroni. Ciò che cambia tra i vari livelli è la distanza dal nucleo, ovvero la dimensione dell'orbitale. Esempio il 2s conterrà l'1s.

Livello 2 (n=2)

$$l = 0, 1$$

per $l = 0$ abbiamo sempre un orbitale 's'.

per $l = 1 \rightarrow m = -1, 0, +1$

Ci sono quindi 3 orbitali, detti di tipo 'p', che sono orientati nelle 3 direzioni degli assi dello spazio (x, y e z).

Nel livello 2 abbiamo quindi un orbitale 's' e 3 orbitali 'p' per un totale di 8 elettroni massimo.

Livello 3 (n=3)

$$l = 0, 1, 2$$

per $l = 0$ e 1 valgono le considerazioni già fatte.

per $l = 2 \rightarrow m = -2, -1, 0, +1, +2$

Ci sono 5 orbitali diversi, detti di tipo 'd' le cui forme e le cui orientazioni sono riportate nelle figure seguenti.

Il livello 3 può contenere al massimo 18 elettroni. Nella tavola periodica gli elementi del 3° livello, però, non hanno abbastanza elettroni, per cui i loro orbitali 'd' sono vuoti. Gli orbitali di tipo 'd' iniziano a riempirsi con il livello 4 (dallo Scandio).

Livello 4 (n=4)

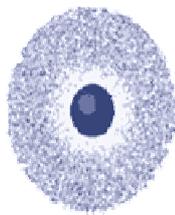
$$l = 0, 1, 2, 3$$

per $l = 0, 1, 2$ valgono le considerazioni degli altri livelli.

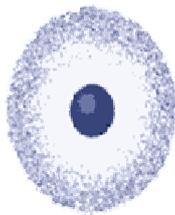
per $l = 3 \rightarrow m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$

Ci sono 5 orbitali diversi, detti di tipo 'f'. Le figure sono riportate di seguito.

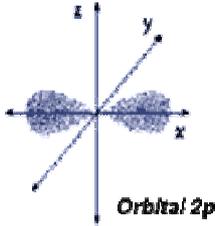
Il livello 4 può contenere al massimo 32 elettroni. Nella tavola periodica gli elementi del 4° livello, però, non hanno abbastanza elettroni, per cui i loro orbitali 'd' sono vuoti. Gli orbitali di tipo 'f' iniziano a riempirsi dal livello 6 (coi Lantanidi).



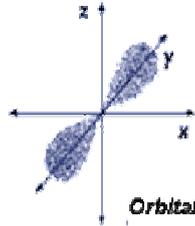
Orbital 1s



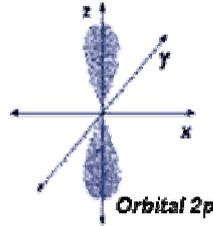
Orbital 2s



Orbital 2p

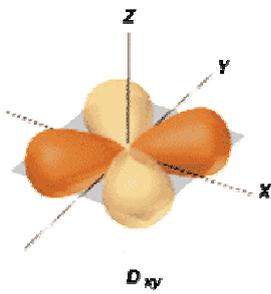


Orbital 2p

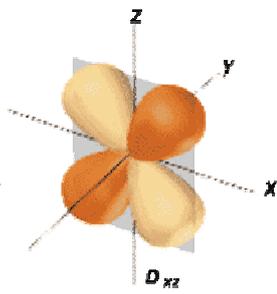


Orbital 2p

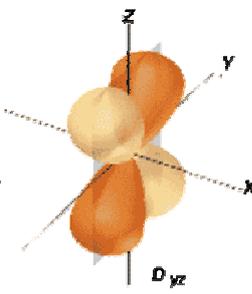
Orbitali 'd'



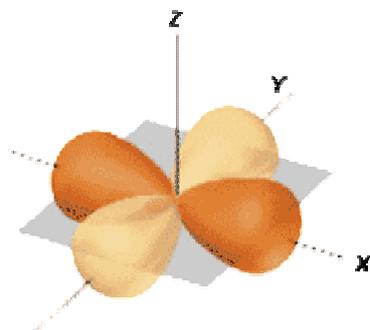
d_{xy}



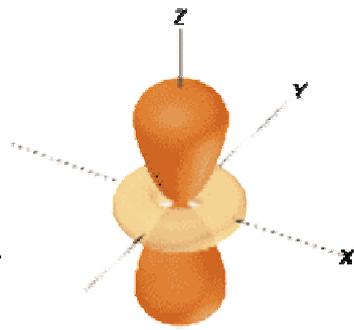
d_{xz}



d_{yz}



$d_{x^2-y^2}$



d_{z^2}

Orbitali 'f'

