

## Modello atomico ad orbitali e numeri quantici

Il modello atomico di Bohr permette di scrivere correttamente la configurazione elettronica di un atomo ma ha dei limiti che sono stati superati con l'introduzione di un nuovo modello più approfondito di atomo: il **modello ad orbitali**, alla cui nascita diedero il contributo diversi scienziati:

- Nel 1923 il fisico francese Louis de Broglie ipotizzò che l'elettrone si comportasse sia come particella sia come onda (*dualismo onda – particella*) perché non aveva solo natura corpuscolare, come fino allora si riteneva, ma anche ondulatoria.

Questo dualismo che esiste per qualsiasi corpo in movimento è importante specialmente quando ci si riferisce a particelle molto piccole come gli elettroni mentre è trascurabile per il moto di oggetti di dimensioni molto maggiori (ad esempio, traiettoria di un proiettile) per i quali prevale la natura corpuscolare.

- Nel 1926 il fisico austriaco Erwin Schrodinger formulò una complessa funzione matematica, detta *equazione d'onda*, nella quale vengono attribuite contemporaneamente all'elettrone la natura di un'onda e la natura di una particella e la cui risoluzione, chiamata *funzione d'onda*, permette di calcolare la probabilità di trovare un elettrone in un punto particolare dello spazio attorno al nucleo.
- Nel 1927 il fisico tedesco Werner Heisenberg enunciò il **principio di indeterminazione** secondo il quale non è possibile conoscere contemporaneamente e con la stessa precisione la posizione di un elettrone e la velocità con la quale si sta muovendo. Per vedere un oggetto (dal punto di vista fisico cioè equivale ad analizzare le onde riflesse) è infatti necessario colpirlo con una energia radiante, ma la collisione tra un fotone e un elettrone determina un notevole cambiamento nella sua energia e quindi se si riesce a trovare l'esatta posizione, la collisione ha modificato la velocità dell'elettrone mentre se si riesce a misurare la velocità l'urto ha modificato la sua posizione.

Da queste premesse si sviluppò la meccanica quantistica, secondo la quale gli elettroni in un atomo occupano una serie di livelli energetici che circondano il nucleo. Il primo livello è quello a più bassa energia e più vicino al nucleo e sia la distanza sia l'energia aumentano per i livelli successivi. Ogni livello contiene dei sottolivelli, detti **orbitali atomici**, che hanno forma, energia caratteristiche ed occupano una specifica regione dello spazio, predetta dall'equazione di Schrodinger, in cui la probabilità di trovare l'elettrone è massima (normalmente 90 %).

L'orbitale non è un luogo fisico preciso ma indica sola una probabilità, seppur alta, di contenere l'elettrone che quindi non si trova più in una posizione fissa e determinata (le orbite di Bohr) ma si muove all'interno di una nube di carica negativa creata dai suoi stessi movimenti (l'orbitale).

Gli orbitali sono modelli utili per cercare di localizzare gli elettroni anche se le nuvole elettroniche non hanno confini ben definiti dal momento che la probabilità di trovare gli elettroni anche al di fuori è bassa ma non nulla.

Ogni orbitale può essere definito (dimensione, forma e orientamento nello spazio) grazie a tre **numeri quantici**, che sono dei valori che, inseriti nell'equazione di Schroedinger ne permettono la risoluzione (esiste un quarto numero quantico utilizzato per gli elettroni).

## **I numeri quantici**

I numeri quantici sono quattro: i primi tre interessano gli orbitali in quanto vincolano, nel loro insieme, l'equazione d'onda e la costringono ad assumere determinate configurazioni (soluzioni fisicamente accettabili delle funzioni d'onda), mentre il quarto è associato all'elettrone

### **Numero quantico principale**

- Si indica con la lettera "n"
- Può assumere solo i valori interi 1, 2, ..., 7
- Stabilisce la dimensione e il livello di energia: all'aumentare di n, gli orbitali diventano più grandi, la loro energia aumenta e gli elettroni che in esso sono contenuti si allontanano dal nucleo. Tutti gli orbitali che sono caratterizzati dallo stesso valore di n appartengono allo stesso livello energetico ma, non necessariamente, hanno la stessa energia.

### **Numero quantico secondario**

- Si indica con la lettera "l"
- Può assumere i valori interi compresi da 0 a  $n - 1$  e si indica con lettere:

valore di "l":	0	1	2	3
orbitale:	s	p	d	f

- Determina le caratteristiche geometriche (forma) dell'orbitale e definisce quanti orbitali di forma diversa (sottolivelli) possono esistere nello stesso livello energetico. La forma e il volume dei diversi tipi di orbitali sono molto differenti:

✚ Gli orbitali “s” sono sferici con al centro della sfera il nucleo dell'atomo



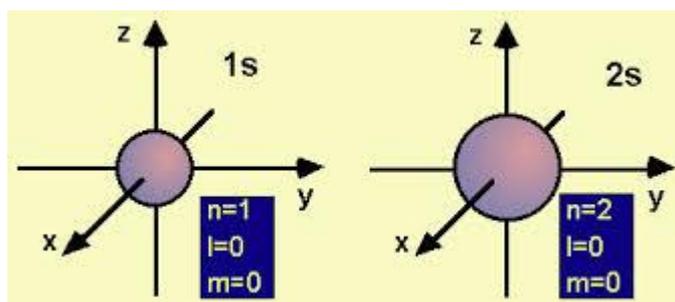
✚ Gli orbitali “p” sono costituiti da un doppio lobo con il nucleo dell'atomo posizionato al punto di contatto tra i due lobi



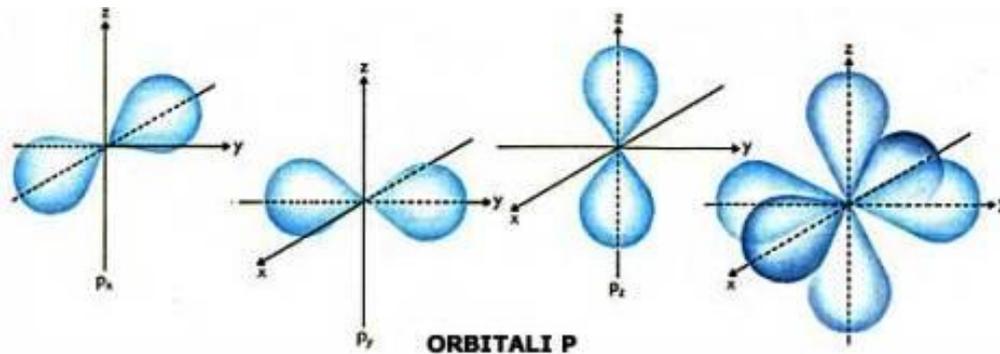
✚ Gli orbitali “d” hanno una forma complessa a quattro lobi e ancora più complessa è la forma e la simmetria degli orbitali “f”. Entrambi non verranno trattati in quanto non coinvolti nell'atomo di carbonio.

### Numero quantico magnetico

- Si indica con la lettera “m”
- Può assumere tutti i valori interi compresi tra  $-1, \dots, 0, \dots, +1$
- Indica la direzione che l'orbitale può assumere nello spazio. In particolare:
  - ✚ Esiste un solo orbitale “s” per ogni livello (per  $l = 0$ , m può assumere solo il valore 0) e infatti l'orbitale “s” è di forma sferica e quindi ha un'unica orientazione nello spazio.

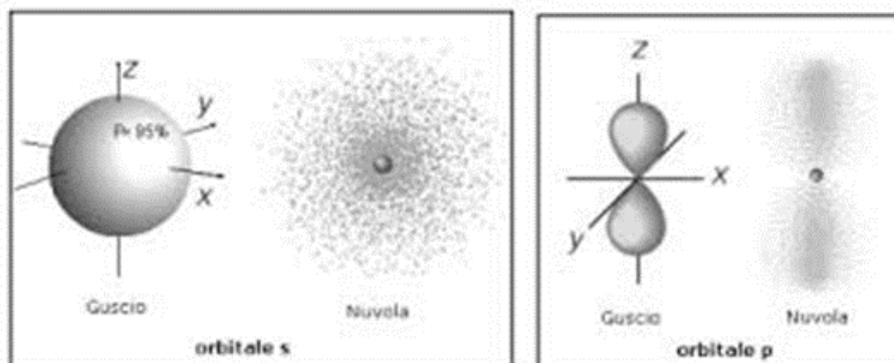


- ✚ Esistono tre orbitali “p” per ogni livello con i doppi lobi orientati lungo i tre assi coordinati x, y, z (per  $l = 1$ ,  $m$  può assumere i valori  $-1, 0, +1$ ).



- ✚ Esistono cinque orbitali “d” (per  $l = 2$ ,  $m$  può assumere i valori  $-2, -1, 0, +1$  e  $+2$ ) anche loro con diverso orientamento e ben 7 orbitali “f”.
- ✚ Gli orbitali che differiscono solo per il valore del numero quantico magnetico hanno lo stesso contenuto energetico

**N.B.** - Gli orbitali sono in realtà nuvole elettroniche e quindi andrebbero più correttamente rappresentati:



### Numero quantico di spin

- Si indica con la lettera “s”.
- Esprime la possibilità dell’elettrone di ruotare intorno al proprio asse creando un campo magnetico.
- Può assumere soltanto due valori:
  - ✚  $+ \frac{1}{2}$  rotazione in senso orario, indicata con una freccia rivolta verso l’alto
  - ✚  $- \frac{1}{2}$  rotazione in senso antiorario, indicata con una freccia rivolta verso il basso

## Configurazioni elettroniche secondo il modello a orbitali

Per descrivere la configurazione elettronica di un atomo gli orbitali si rappresentano con un quadratino. Le regole da tenere presenti sono:

- 1) La sequenza è esattamente quella studiata per l'atomo di Bohr e gli elettroni occupano prima gli orbitali a più bassa energia e poi quelli ad energia più elevata. Vale infatti il **principio dell'aufbau** (in tedesco "costruzione") che afferma che ogni elettrone occupa sempre l'orbitale atomico a più bassa energia possibile

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p$$

- 2) Ogni orbitale può contenere al massimo due elettroni che devono avere spin opposto. Il **principio di esclusione di Pauli** afferma che due elettroni che occupano lo stesso orbitale devono avere spin opposti. In un atomo infatti non possono esistere due elettroni che presentano gli stessi quattro numeri quantici. Le due frecce (numero quantico di spin) di ciascun quadratino (orbitale atomico e quindi gli altri tre numeri quantici) devono quindi puntare in versi opposti.
- 3) Se ci sono più orbitali con la stessa energia (ad esempio, gli orbitali p), si colloca un elettrone su ciascun orbitale vuoto con lo stesso spin e solo in seguito si completano gli orbitali semipieni. La **regola di Hund della massima molteplicità** afferma che, per minimizzare la repulsione, l'elettrone occupa di preferenza, un orbitale vuoto prima di appaiarsi con un altro elettrone).

Ecco alcuni esempi di configurazioni elettroniche secondo il modello ad orbitali

