

La Struttura degli Atomi

- Perché gli atomi si combinano per formare composti?
- Perché differenti elementi presentano differenti proprietà?
- Perché possono essere gassosi, liquidi, solidi, metalli o non-metalli?
- Perché gruppi di elementi hanno proprietà simili e formano composti con formule analoghe?
- Le conoscenze moderne della scienza ci permettono di rispondere a queste domande e altro.

PARTICELLE FONDAMENTALI

Gli atomi e quindi tutta la ,materia sono costituiti principalmente da tre particelle fondamentali :

- elettroni
- protoni
- neutroni

TABELLA 5-1 <i>Particelle fondamentali della materia</i>		
Particella	Massa	Carica (scala relativa)
elettrone (e^-)	0.00054858 uma	1-
protone (p o p^+)	1.0073 uma	1+
neutrone (n o n^0)	1.0087 uma	nessuna

LA SCOPERTA DEGLI ELETTRONI

Le prime evidenze dell'esistenza dell'elettrone vengono dai processi di passaggio di corrente elettrica nelle soluzioni.
(~1870)

L'esperimento più convincente dell'esistenza degli elettroni fu fornito dai **tubi a raggi catodici.**(~1910)

I raggi viaggiano in linea retta verso l'anodo. Un oggetto interposto nel percorso crea una zona d'ombra indicando un movimento in linea retta.

Sono caricati negativamente.

La natura dei raggi catodici.

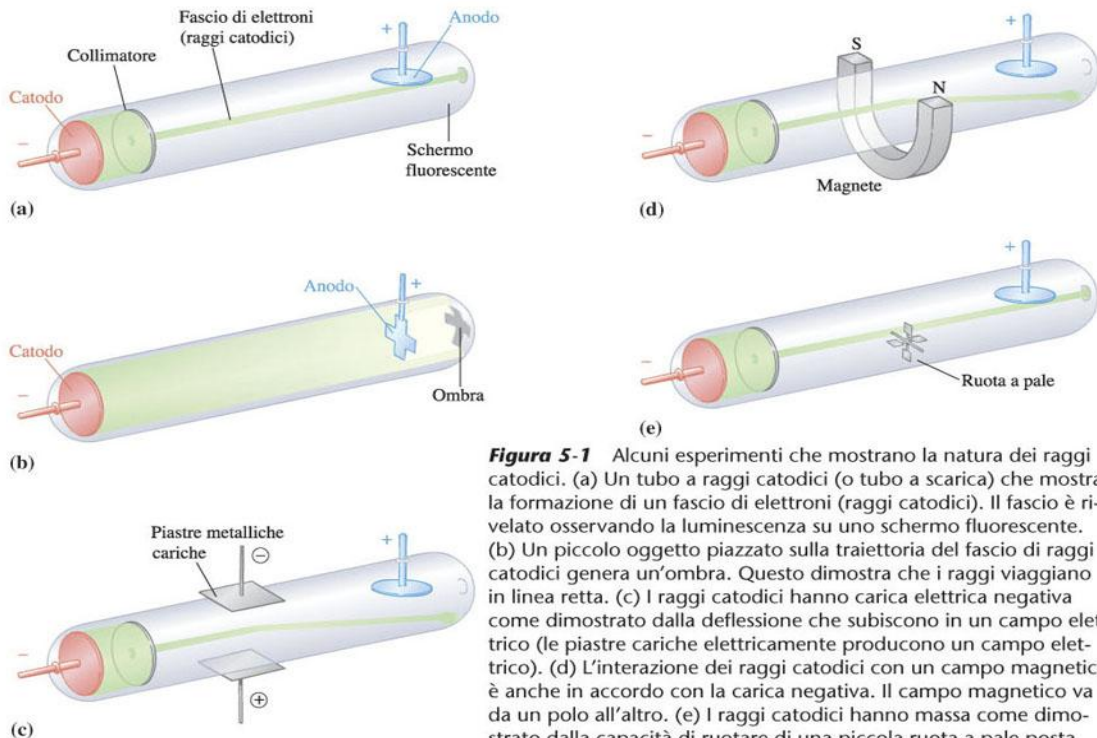


Figura 5-1 Alcuni esperimenti che mostrano la natura dei raggi catodici. (a) Un tubo a raggi catodici (o tubo a scarica) che mostra la formazione di un fascio di elettroni (raggi catodici). Il fascio è rivelato osservando la luminescenza su uno schermo fluorescente. (b) Un piccolo oggetto piazzato sulla traiettoria del fascio di raggi catodici genera un'ombra. Questo dimostra che i raggi viaggiano in linea retta. (c) I raggi catodici hanno carica elettrica negativa come dimostrato dalla deflessione che subiscono in un campo elettrico (le piastre cariche elettricamente producono un campo elettrico). (d) L'interazione dei raggi catodici con un campo magnetico è anche in accordo con la carica negativa. Il campo magnetico va da un polo all'altro. (e) I raggi catodici hanno massa come dimostrato dalla capacità di ruotare di una piccola ruota a pale posta lungo il loro percorso.

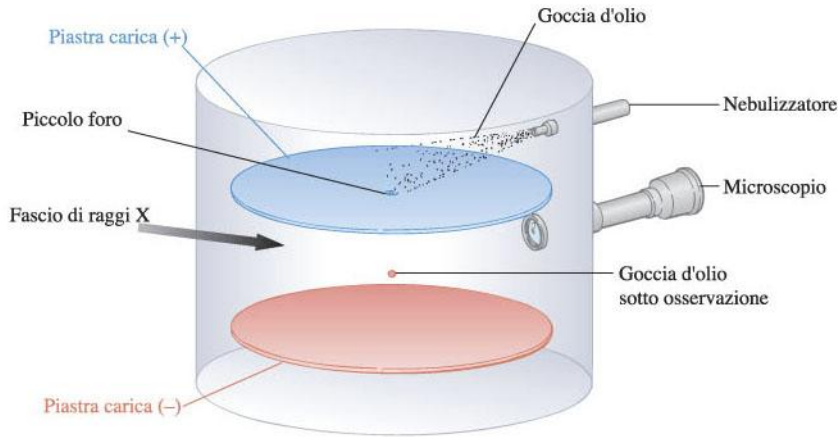
Costanti dell' elettrone

J.J. Thomson li chiamò **elettroni** e calcolò il rapporto **e/m** .

Il valore attuale è **$e/m = 1.75882 \times 10^8$** coulomb (C) / g.

Questo valore non dipende dal tipo di gas, né dai materiali usati per il catodo (-) e anodo (+).

L'esperimento delle gocce d'olio di Millikan



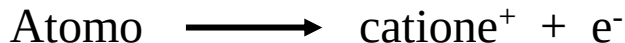
Nel 1909 R. Millikan con l'esperimento della “goccia d'olio” determinò la carica dell'elettrone.

La carica risultò essere 1.60218×10^{-19} coulomb. E da questo si determinò la massa dell'elettrone

$$m = 9.10940 \times 10^{-28} \text{ g}$$

RAGGI CANALI E PROTONI

In concomitanza con la produzione di elettroni si osservò pure un flusso di particelle a carica positiva. Questi ioni positivi sono prodotti dal processo



Si ottennero differenti rapporti e/m . La coincidenza di e/m minima aiutò a concepire l'esistenza di una carica unitaria positiva che fu chiamata protone. Questa carica è esattamente uguale a quella dell'elettrone ma di segno opposto.

Un tubo a raggi catodici con il catodo perforato.

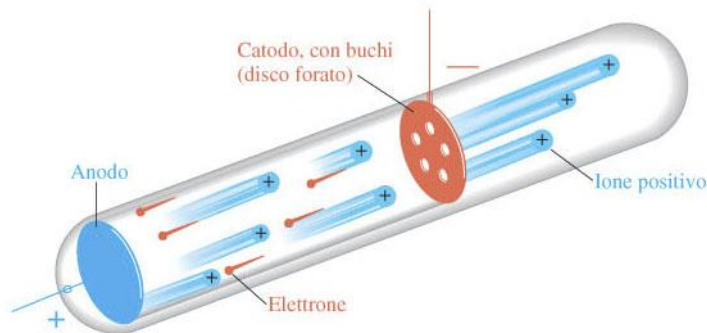


Figura 5-3 Un tubo a raggi catodici con il catodo perforato. Un tubo simile è stato usato per produrre raggi canali e dimostrare che sono attratti verso il catodo. Come i raggi catodici, anche questi raggi *positivi* sono deflessi da campi elettrici e magnetici, ma in direzione opposta rispetto ai raggi catodici (fascio elettronico). I raggi canali hanno il rapporto e/m notevolmente più piccolo rispetto agli elettroni in quanto la loro massa è molto più grande. Quando sono presenti nel tubo elementi diversi, si osservano ioni positivi distinti, ciascuno con un suo particolare rapporto e/m .

RUTHERFORD E L'ATOMO NUCLEARE

J.J. Thomson diceva che l'atomo era costituito da regioni di carica negativa e positiva.

Rutherford definì l'atomo come formato da piccolissimi nuclei molto densi e a carica positiva e circondati da nuvole di elettroni poste a distanze relativamente grandi dai nuclei.

L'esperimento di **Rutherford** consisteva in una sorgente radioattiva per produrre particelle α (He^{++}) che incidevano su una lamina d'oro. Le deviazioni delle particelle α erano rivelate da uno schermo di scintillazione.

Esperimento di Rutherford

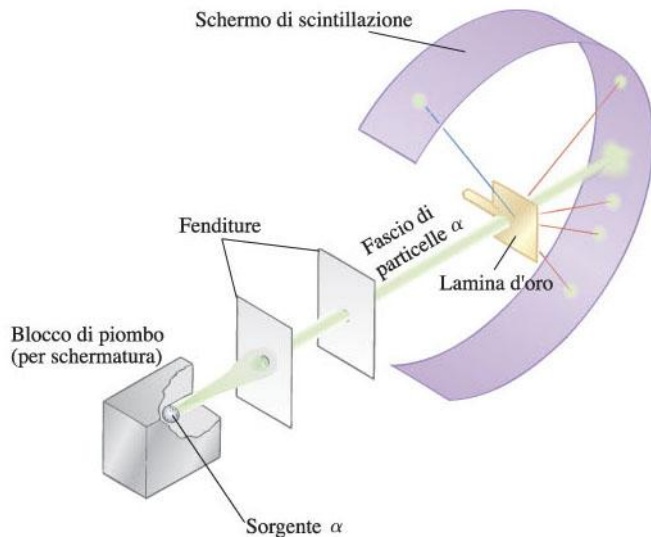


Figura 5-4 L'esperimento di Rutherford. Una sottile lamina di oro è colpita da un fascio di particelle α prodotte da una sorgente radioattiva. La maggior parte di queste passa dritta attraverso la lamina. Molte sono deflesse secondo piccoli angoli (rosso). Tali deviazioni sorpresero i ricercatori, ma totalmente inatteso fu scoprire che lo 0.001% delle particelle α veniva deviato secondo angoli acuti (blu). Risultati simili furono osservati usando fogli di altri metalli.

Interpretazione dell'esperimento di Rutherford.

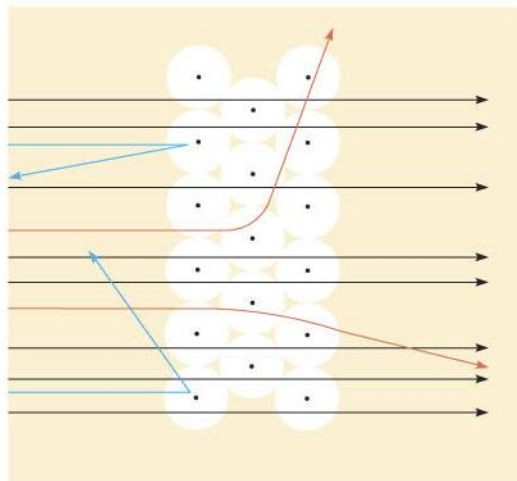


Figura 5-5 Una interpretazione dell'esperimento di Rutherford. L'atomo è raffigurato come costituito principalmente da spazio vuoto. Al centro c'è un piccolo nucleo estremamente denso che contiene tutte le cariche positive dell'atomo e quasi tutta la sua massa. Gli elettroni sono distribuiti in tutto lo spazio vuoto. La maggior parte delle particelle α (*frecce nere*), cariche positivamente, attraversa lo spazio vuoto senza deflessioni poiché passa lontano dai nuclei di oro. Le poche che passano vicino ai nuclei (*frecce rosse*) sono respinte da forze elettrostatiche e perciò deviate. Una minima parte di esse, che trovano sulla loro traiettoria un nucleo di oro, sono respinte secondo angoli acuti (*frecce blu*). I calcoli effettuati sui risultati dell'esperimento indicarono che il diametro della porzione di spazio vuoto è da diecimila a centomila volte più grande del diametro del nucleo.

Il numero Atomico

Dopo l'esperimento di Rutherford , J. Moseley condusse una serie di esperimenti con i raggi X. Dai risultati sperimentali ottenuti concluse che :

Ogni elemento differisce dall'elemento che lo precede per avere una carica positiva in più nel nucleo.

Così fu possibile disporre gli elementi, nella tavola periodica, in ordine di carica nucleare crescente.

Quindi si sa che un atomo neutro di un elemento contiene un numero intero di protoni nel nucleo, uguale esattamente al numero di elettroni fuori dal nucleo.

Generazione di raggi X con un fascio di elettroni ad elevata energia.

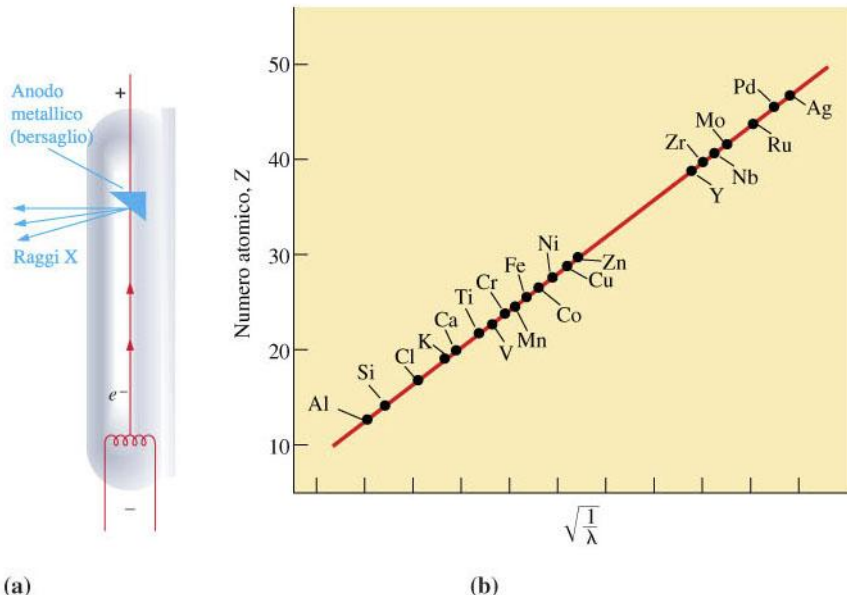


Figura 5-6 (a) Una rappresentazione semplificata della generazione di raggi X per mezzo del bombardamento di un bersaglio solido con un fascio di elettroni ad elevata energia. (b) Un diagramma di alcuni dati di Moseley. Il numero atomico di un elemento è direttamente proporzionale alla radice quadrata del reciproco della lunghezza d'onda di una particolare linea dello spettro. La lunghezza d'onda (Paragrafo 5-10) è indicata con il simbolo λ .

I neutroni

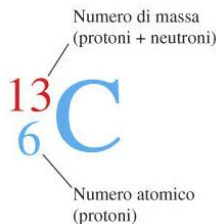


Figura 5-7 Simbolo di un nuclide. In chimica il numero atomico spesso si omette perché il simbolo dell'elemento indica senza ambiguità un ben preciso numero atomico.

Il neutrone fu scoperto nel 1932. Si sono osservati durante un esperimento di bombardamento di atomi di berilio con particelle α ad elevata energia.

In tutti i nuclei degli atomi insieme ai protoni si trovano anche i neutroni, ad eccezione dell'idrogeno ^1H .

Le dimensioni dei nuclei sono dell'ordine di 10^{-5} nanometri (nm) mentre il diametro degli atomi è dell'ordine di 10^{-1} nm.

Il numero di massa e gli isotopi

Quasi tutti gli elementi sono costituiti da atomi di diversa massa, chiamati isotopi.

Gli isotopi di un dato elemento contengono lo stesso numero di protoni ed elettroni, ma un numero differente di neutroni.

Gli isotopi sono atomi dello stesso elemento aventi differenti masse, in quanto contengono lo stesso numero di protoni ma differente numero di neutroni.

Abbondanza isotopi naturali

TABELLA 5-3 *Le abbondanze di alcuni isotopi naturali*

Elemento	Massa atomica (uma)	Isotopo	% Abbondanza naturale	Massa (uma)
boro	10.811	^{10}B	19.91	10.01294
		^{11}B	80.09	11.00931
ossigeno	15.9994	^{16}O	99.762	15.99492
		^{17}O	0.038	16.99913
		^{18}O	0.200	17.99916
cloro	35.4527	^{35}Cl	75.770	34.96885
		^{37}Cl	24.230	36.96590
uranio	238.0289	^{234}U	0.0055	234.0409
		^{235}U	0.720	235.0439
		^{238}U	99.2745	238.0508

I 20 elementi che hanno un solo isotopo presente in natura sono ^9Be , ^{19}F , ^{23}Na , ^{27}Al , ^{31}P , ^{45}Sc , ^{55}Mn , ^{59}Co , ^{75}As , ^{89}Y , ^{93}Nb , ^{103}Rh , ^{127}I , ^{133}Cs , ^{141}Pr , ^{159}Tb , ^{165}Ho , ^{169}Tm , ^{197}Au , and ^{209}Bi . Ci sono comunque isotopi artificiali di questi elementi.

Lo spettrometro di massa.

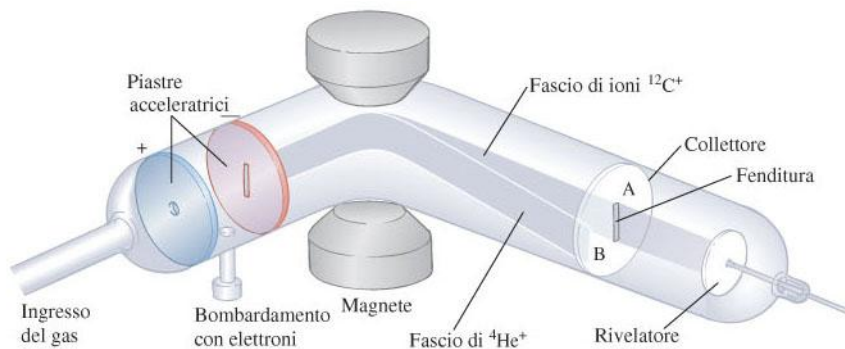


Figura 5-8 Lo spettrometro di massa. Nello spettrometro di massa, molecole di gas a bassissima pressione sono ionizzate ed accelerate da un campo elettrico. Il fascio di ioni è poi fatto passare attraverso un campo magnetico, che lo divide in più componenti, ognuna delle quali formata da particelle con lo stesso rapporto carica/massa. Le particelle più leggere subiscono una deviazione maggiore rispetto a quelle pesanti con la stessa carica. In un fascio contenente ioni $^{12}\text{C}^+$ e $^4\text{He}^+$, le particelle $^{12}\text{C}^+$ sono meno deflesse delle più leggere particelle di $^4\text{He}^+$. Lo spettrometro in figura è tarato per rivelare gli ioni $^{12}\text{C}^+$. Variando l'intensità del campo elettrico o di quello magnetico, è possibile portare il fascio $^4\text{He}^+$ dalla posizione B alla posizione A, dove può essere rivelato. Le masse degli ioni sono calcolate in base ai cambiamenti necessari per rifocalizzare il fascio.

La struttura elettronica degli atomi

Il modello dell'atomo di Rutherford pur spiegando alcune caratteristiche dell'atomo non rispondeva ad alcune domande.

- Perché elementi diversi hanno proprietà chimiche diverse?**
- Perché esistono i legami chimici?**
- Perché ogni elemento forma composti chimici caratteristici?**
- Perché atomi diversi emettono ed assorbono luce solo di ben precisi colori?**

La radiazione elettromagnetica

Frequenza : ν “nu” è il numero di oscillazioni nell’unità di tempo (Hertz).

Lunghezza d’onda: λ “lambda” la distanza tra due punti identici di una stessa onda. (unità di lunghezza)

h : costante di Planck

$\lambda \nu$ = velocità di propagazione dell’onda

$\lambda \nu = c$ (velocità della luce) ; $c = 3.00 \times 10^8$ m/s

$E = h\nu$ (quanto di luce chiamato **fotone**)

Lunghezza d' onda e frequenza di una onda.

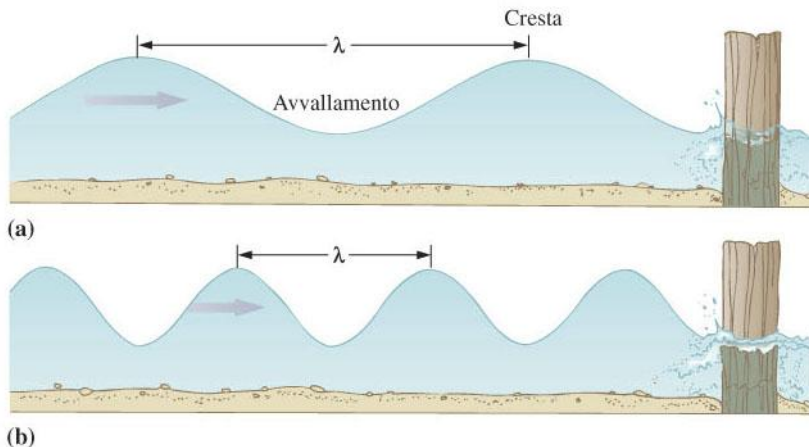


Figura 5-11 Illustrazione della lunghezza d'onda e della frequenza di onde in mare. La distanza tra due punti identici, come le creste, è la lunghezza d'onda, λ . Potremmo misurare la frequenza, ν , osservando quanto spesso il livello dell'acqua sale e scende in un punto definito, o quante creste si infrangono contro un ostacolo. (a) e (b) rappresentano due onde che si stanno muovendo alla stessa velocità. In (a) l'onda ha lunghezza d'onda grande e bassa frequenza; in (b) invece ha lunghezza d'onda minore e frequenza più alta.

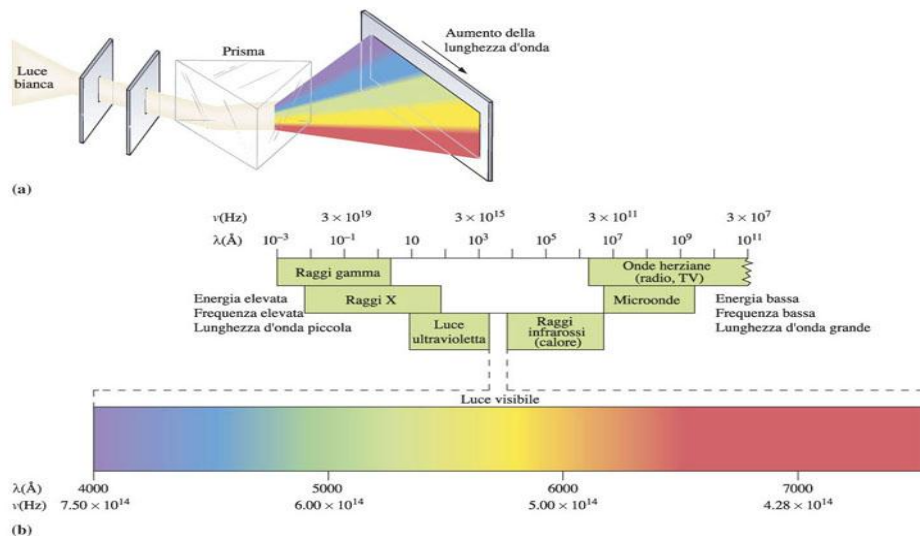


Figura 5-12 Dispersione della luce visibile in un prisma. La luce proveniente da una sorgente di luce bianca passa attraverso una fenditura e successivamente attraverso un prisma. È così separata in tutte le lunghezze d'onda che formano lo spettro continuo del visibile. (b) La luce visibile è solo una minima parte dello spettro della radiazione elettromagnetica. Molte onde elettromagnetiche hanno lunghezze d'onda maggiori o minori di quelle che l'occhio umano può percepire. La parte superiore della figura (b) mostra lo spettro della radiazione elettromagnetica riportato in scala logaritmica. La parte inferiore mostra invece una espansione della regione del visibile. Si noti che la lunghezza d'onda aumenta al decrescere della frequenza.

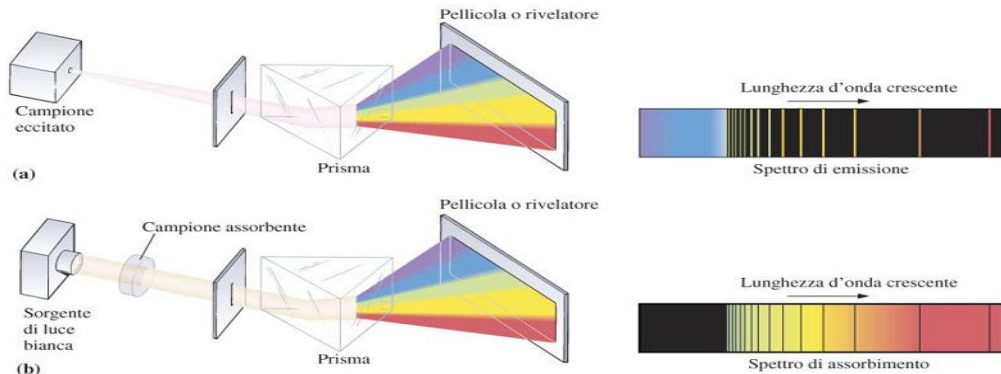


Figura 5-14 (a) *Emissione atomica*. La luce emessa da un campione di atomi di idrogeno eccitati (o di qualsiasi altro elemento) può essere fatta passare attraverso un prisma e separata in ben precise lunghezze d'onda. Così, uno spettro di emissione, il quale è una registrazione fotografica delle lunghezze d'onda scomposte, è chiamato spettro a righe. Qualsiasi campione di dimensioni ragionevoli contiene un numero enorme di atomi. Sebbene un singolo atomo possa passare ad un solo stato eccitato alla volta, l'insieme degli atomi in un campione macroscopico contiene tutti i possibili stati eccitati. Responsabile dello spettro è la luce emessa quando un atomo passa dallo stato eccitato ad uno di minore energia. (b) *Assorbimento atomico*. Quando la luce bianca passa attraverso degli atomi di idrogeno non eccitati e successivamente attraverso una fenditura ed un prisma, la radiazione trasmessa manca di alcune lunghezze d'onda, che sono le stesse emesse eccitando la sostanza (vedi il punto (a)). Lo spettro di assorbimento è anch'esso uno spettro a righe, immagine negativa dello spettro di emissione.

Spettro atomico di alcuni elementi

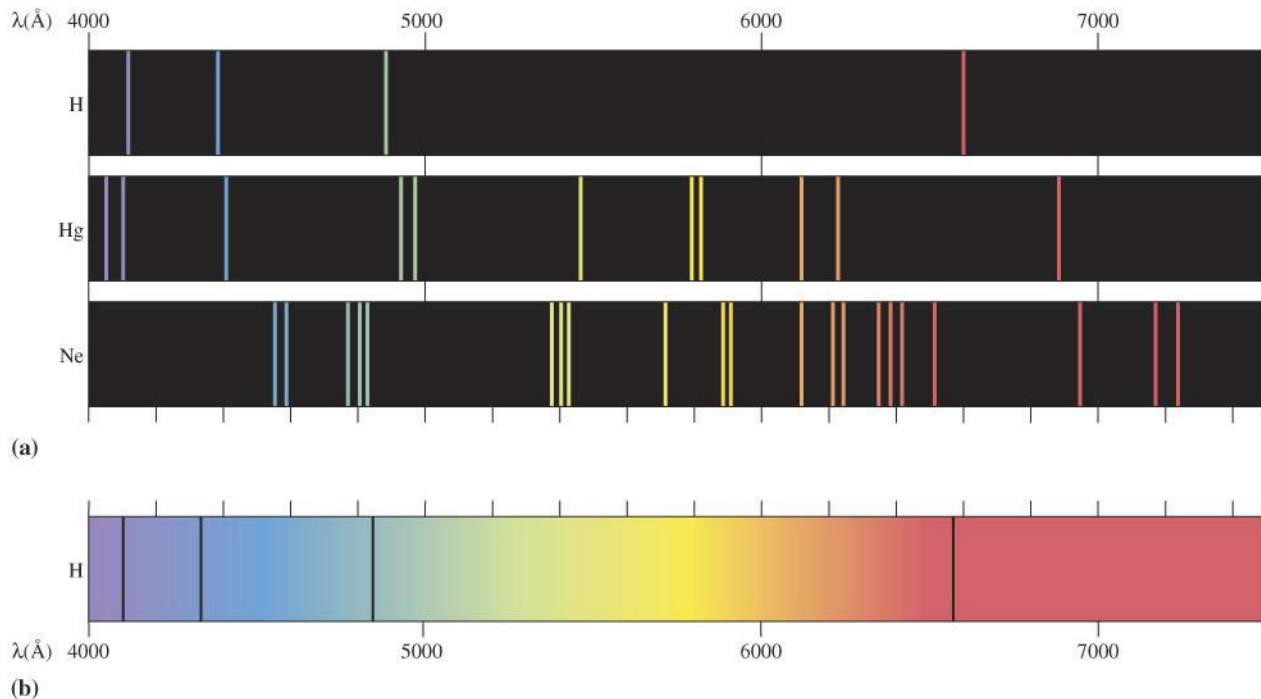


Figura 5-15 Spettri atomici nella regione del visibile per alcuni elementi. La Figura 5-14a mostra come hanno origine gli spettri. (a) Spettri di emissione di alcuni elementi. (b) Spettro di assorbimento per l'idrogeno. Confrontare la posizione di queste linee con quelle dello spettro di emissione dell'idrogeno in (a).

Spettro atomico dell' idrogeno.

Quando si fa passare una corrente elettrica attraverso idrogeno gassoso a bassa pressione, si ottiene uno spettro con diverse linee. Queste linee furono studiate ed alla fine del XIX secolo J. Balmer e J. Rydberg dimostrarono che le lunghezze d'onda corrispondenti alle diverse linee dello spettro dell'idrogeno sono descritte dall' equazione :

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

SPETTRI ATOMICI E ATOMO DI BOHR

Postulati di Bohr

1. All'elettrone che si muove intorno al nucleo sono permessi solo alcuni stati stazionari che corrispondono a un determinato stato di energia.
2. L'atomo che si trova in uno stato stazionario non emette energia. Quando l'elettrone viene portato a uno stato eccitato superiore, dopo breve tempo ritorna allo stato iniziale emettendo un quanto di energia pari a $h\nu$.
3. L'elettrone si muove in una orbita circolare intorno al nucleo.
4. Gli stati permessi di moto degli elettroni sono caratterizzati da un momento angolare dell'elettrone che sia un multiplo intero di $h/2\pi$.

$$(mv)r = n h/2\pi$$

n: numero quantico principale.

Teoria di Bohr

Nel 1913 Neils Bohr fornì una spiegazione teorica all'equazione di Balmer-Rydberg.

- Le orbite intorno al nucleo dell'atomo di idrogeno sono circolari.**
- L'energia dell'elettrone è quantizzata.**
- Gli elettroni possono muoversi solo secondo orbite fisse e quindi possono assorbire o emettere energia secondo quantità discrete.**

La teoria di Bohr spiegava con chiarezza gli spettri dell'idrogeno e delle specie ionizzate con un solo elettrone. Non era applicabile a sistemi con più di un elettrone. Nel 1916 Sommerfeld ipotizzò orbite ellittiche.

Il fallimento della meccanica classica nello spiegare il comportamento degli elettroni nell'atomo diede origine alla meccanica quantistica.

L' atomo di idrogeno

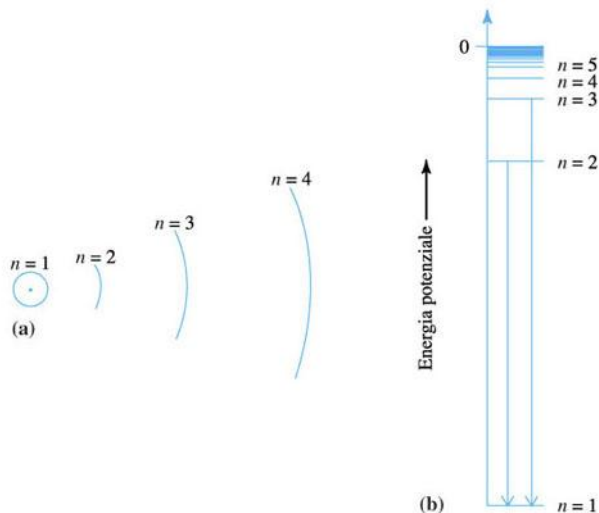


Figura 5-16 (a) I raggi delle prime quattro orbite di Bohr per l'atomo di idrogeno. Il punto al centro rappresenta il nucleo. Il raggio di ogni orbita è proporzionale a n^2 , quindi con l'aumentare di n le orbite sono sempre più spaziate tra loro. Questi quattro raggi sono in rapporto 1 : 4: 9 : 16. (b) Valori relativi per le energie associate con i livelli energetici nell'atomo di idrogeno di Bohr. Per convenzione, l'energia potenziale di un elettrone è posta uguale a zero quando questo si trova ad una distanza infinita dal nucleo. Ogni situazione più stabile comporta una energia potenziale minore. La differenza di energia tra le orbite diminuisce con l'aumentare del valore di n . Per valori di n grandi i livelli di energia sono così vicini da formare un continuo. Le frecce indicano alcune transizioni possibili corrispondenti a linee dello spettro di emissione dell'idrogeno. In direzione opposta avvengono le transizioni corrispondenti alle linee dello spettro di assorbimento. Per passare dal livello $n = 1$ al livello $n = 2$ occorre maggiore energia, rispetto a quella richiesta per passare dal livello $n = 3$ al livello $n = 4$.

La visione quantomeccanica dell'atomo

Principio di indeterminazione di Heisenberg : è impossibile determinare simultaneamente con precisione la quantità di moto (mv) e la posizione di un elettrone o qualsiasi particella piccolissima.

Gli elettroni negli atomi si comportano più come onde che come particelle. Quindi non seguono realmente un percorso di orbita intorno al nucleo dell'atomo.

La meccanica quantistica è basata sulle proprietà ondulatorie della materia e descrive molto meglio le particelle piccolissime come gli elettroni.

In base a questi principi si possono elencare i seguenti concetti della meccanica quantistica.

1. Gli atomi e le molecole possono esistere solo in certi stati energetici. Quando un atomo passa da uno stato ad un altro deve emettere o assorbire una data quantità di energia e questa energia è quantizzata.

2. L'energia persa o guadagnata da un atomo quando passa da un livello energetico superiore a uno inferiore o viceversa è uguale all'energia di un fotone emesso o assorbito durante la transizione.

$$\Delta E = h \nu$$

I livelli energetici permessi per gli atomi e le molecole possono essere descritti da un insieme di numeri definiti numeri quantici.

I NUMERI QUANTICI

Le soluzioni all'equazioni di Schrödinger e di Dirac per l'atomo di idrogeno sono funzioni d'onda ψ , che descrivono gli stati possibili per il singolo elettrone dell'idrogeno.

Ognuno di questi stati energetici è caratterizzato da quattro numeri quantici.

Possiamo utilizzare questi numeri quantici pure per descrivere la disposizione degli elettroni in tutti gli altri atomi.

I numeri quantici hanno un importante ruolo nell'indicare i livelli di energia degli elettroni e la forma degli orbitali che a loro volta descrivono la distribuzione degli orbitali nello spazio.

Un orbitale atomico è una regione di spazio nella quale esiste una elevata probabilità di trovare un elettrone.

Definizione e intervallo di valori dei “numeri quantici”

1. **Numero quantico principale** n , definisce il livello di energia, o guscio che l'elettrone può occupare.

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

2. **Numero quantico secondario** (o di momento angolare), l , descrive la forma della regione di spazio che un elettrone può occupare. All'interno di un determinato guscio, n , sono possibili differenti sottolivelli di energia, a ciascuno dei quali corrisponde una forma caratteristica. Il numero quantico secondario determina un sottolivello ed una forma specifica dell'orbitale atomico che l'elettrone può occupare.

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$$

. s p d f

3. **Numero quantico magnetico**, m_l indica uno specifico orbitale all'interno del sottolivello. Gli orbitali di un determinato sottolivello differiscono per la loro orientazione nello spazio, non per la loro energia.

$$m_l = (-l), \dots, 0, \dots, (+l)$$

4. **Numero quantico di spin.** $m_s = (+\frac{1}{2} \text{ o } -\frac{1}{2})$

Valori consentiti dei numeri quantici

TABELLA 5-4 Valori consentiti dei numeri quantici fino ad $n = 4$

n	ℓ	m_ℓ	m_s	Numero massimo di elettroni in un sottolivello $= 4\ell + 2$	Numero massimo di elettroni per un livello energetico $= 2n^2$
1	0 (1s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	2
2	0 (2s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	8
	1 (2p)	-1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	6	
3	0 (3s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	18
	1 (3p)	-1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	6	
	2 (3d)	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	10	
4	0 (4s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	32
	1 (4p)	-1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	6	
	2 (4d)	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	10	
	3 (4f)	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	14	

Orbitali Atomici

Come distribuire gli elettroni intorno al nucleo di un determinato elemento:

- 1. Per ogni atomo neutro si deve sistemare un numero di elettroni pari al numero di protoni presenti nel nucleo.**
- 2. Ogni elettrone occupa un orbitale atomico definito dai tre numeri quantici n , l , m_l . Ogni orbitale può ospitare due elettroni.**

Per ogni soluzione all'equazione di Schrödinger possiamo calcolare la densità di probabilità dell'elettrone per ogni punto dello spazio intorno al nucleo dell'atomo. Questa è la probabilità di trovare un elettrone in quel punto. Questa densità elettronica è proporzionale a $r^2 \psi^2$, dove r è la distanza dal nucleo.

Nuvola elettronica attorno ad un nucleo atomico.

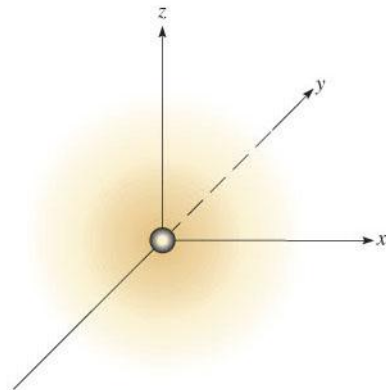


Figura 5-19 Una nuvola elettronica attorno ad un nucleo atomico. La densità degli elettroni decresce progressivamente con l'aumentare della distanza dal nucleo.

Diagrammi della distribuzione della densità elettronica associata a orbitali s.

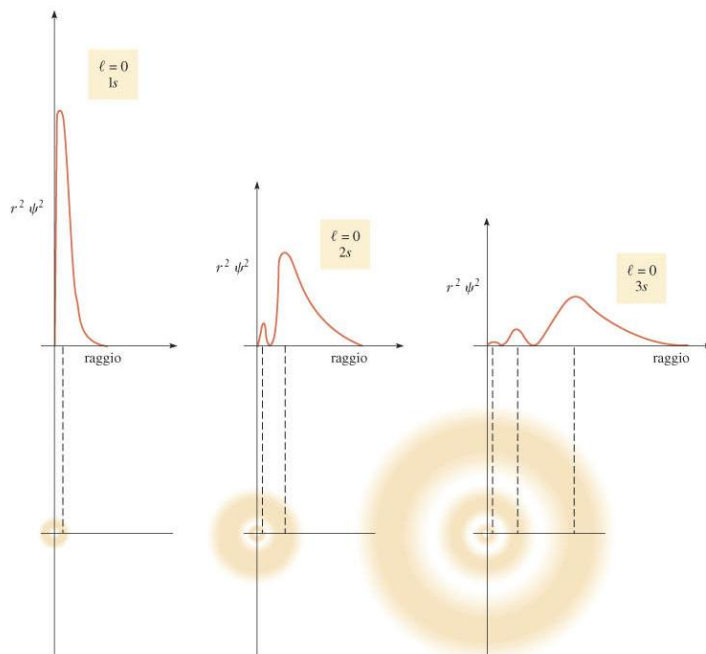


Figura 5-20 Diagrammi della distribuzione della densità elettronica associata a orbitali s. Per ciascun orbitale l'andamento è uguale per qualsiasi direzione (l'orbitale ha simmetria sferica). Sotto ogni grafico è riportata una rappresentazione in sezione trasversale, nel piano del nucleo atomico, della nuvola elettronica associata a quel determinato orbitale. La densità elettronica è proporzionale a $r^2 \psi^2$. Gli orbitali s con $n > 1$ hanno $(n - 1)$ regioni, o nodi, dove la densità elettronica diventa zero. Si possono vedere tali nodi in corrispondenza dei punti in cui la linea della densità elettronica tocca lo zero (diagramma in alto) e delle zone bianche (disegni in basso).

Tre rappresentazioni della forma di un orbitale p .

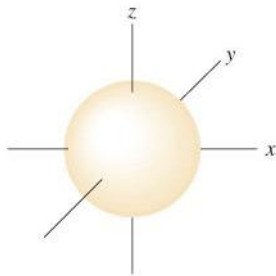
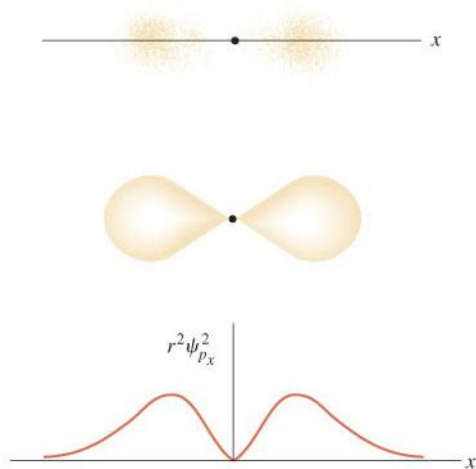


Figura 5-21 La forma dell'orbitale s .

Figura 5-22 Tre rappresentazioni della forma di un orbitale p . In alto è riportata una visione probabilistica, mentre in mezzo è mostrato come l'orbitale p è visto dalla maggior parte dei chimici. Lo schema in basso rappresenta invece l'andamento della densità elettronica per questo orbitale, lungo l'asse principale. Non avendo simmetria sferica, come l'orbitale s , la densità elettronica di un orbitale p non è la stessa in ogni direzione.



Le orientazioni relative di un insieme di orbitali p .

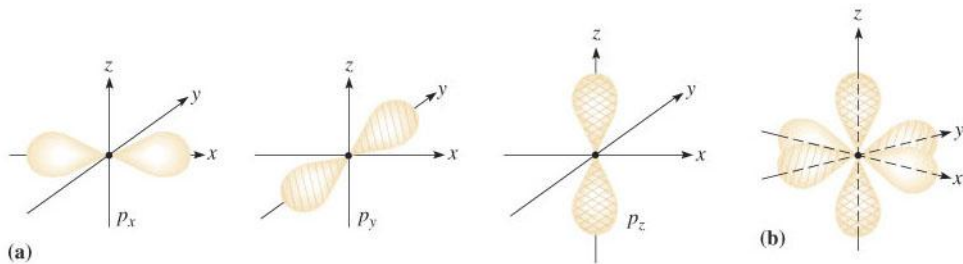


Figura 5-23 (a) Le orientazioni relative di un insieme di orbitali p . (b) I tre orbitali p (p_x , p_y , p_z) visti insieme. Il nucleo è al centro; i lobi sono, in realtà, più diffusi (più "panciuti") di quanto disegnato. Vedere Figura 5-26.

Orientazione spaziale degli orbitali d .

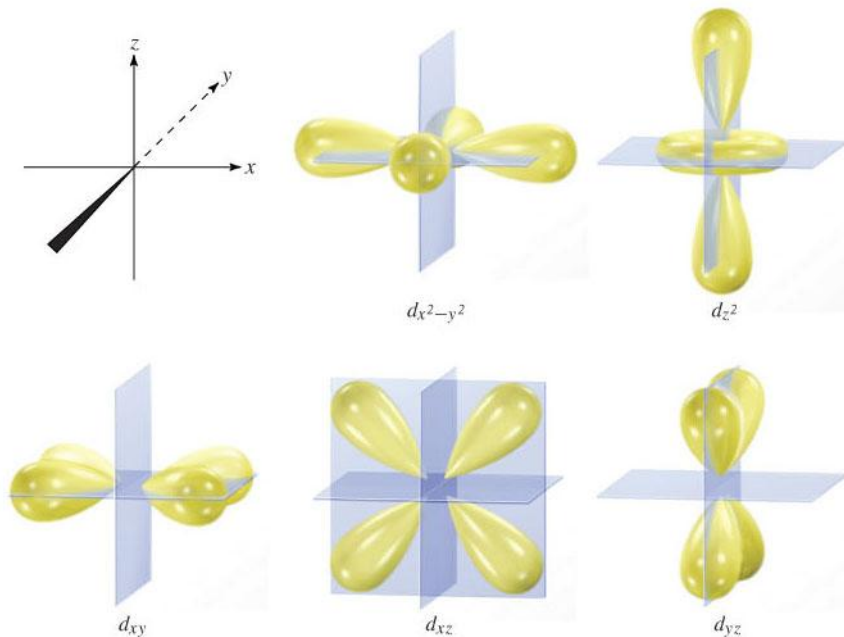


Figura 5-24 Orientazione spaziale degli orbitali d . Si noti come i lobi degli orbitali $d_{x^2-y^2}$ e d_{z^2} giacciono lungo gli assi, mentre i lobi degli altri orbitali siano lungo le bisettrici.

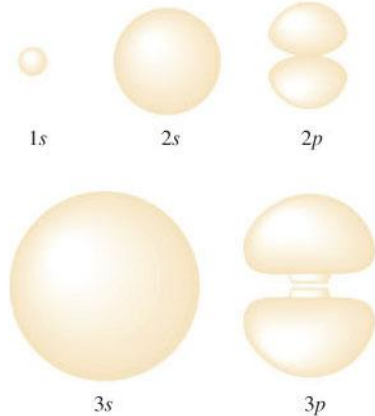
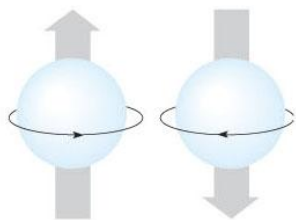


Figura 5-26 Forme e dimensioni relative di alcuni orbitali di uno stesso atomo.

Carattere direzionale relativo degli orbitali.



Il primo elettrone ha $m_s = +\frac{1}{2}$;

Il secondo ha $m_s = -\frac{1}{2}$.

Figura 5-27 Spin elettronico. Gli elettroni si comportano come se ruotassero intorno ad un asse passante per il loro centro. Dato che gli elettroni possono ruotare solo in due direzioni, il numero quantico può assumere solo due valori, $+\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$, a volte indicati anche come “spin su” e “spin giù”. Ogni elettrone che ruota su se stesso produce un campo magnetico. Quando due elettroni hanno spin opposto, l’attrazione dovuta ai loro opposti campi magnetici (*freccia grigia*) contribuisce a compensare la forza repulsiva dovuta alle loro cariche uguali. Questo permette ai due elettroni di occupare la stessa regione di spazio (orbitale).

Configurazioni Elettroniche

La distribuzione degli elettroni intorno al nucleo , di un dato elemento, nel suo stato di minima energia è chiamata **configurazione elettronica nel suo stato fondamentale.**

Per descrivere la configurazione elettronica dello stato fondamentale utilizzeremo il **principio Aufbau**

Ogni atomo si “costruisce”:

- 1. Inserendo un numero appropriato di protoni e neutroni nel nucleo come specificato dal numero atomico e dal numero di massa.**
- 2. Inserendo il numero necessario di elettroni negli orbitali in modo che si abbia la minima energia totale possibile.**

Principio di esclusione di Pauling

L'energia dell' orbitale cresce con l'aumentare del numero quantico n .

Per un dato valore di n , l'energia cresce con il crescere del valore di l .

Un dato orbitale è totalmente identificato dai valori di n , l , m_l . Due elettroni possono occupare lo stesso orbitale solo se hanno il valore di m_s opposto.

Questa regola è chiamata **principio di esclusione di Pauling.**

In questa notazione semplificata il numero di elettroni di un certo sottolivello è posto ad apice del simbolo del sottolivello stesso.

numero quantico
principale n

1s

numero di
elettroni
nell'orbitale

simbolo dell'orbitale
(corrisponde al numero
secondario l)

Il comune ordine di riempimento degli orbitali di un atomo.

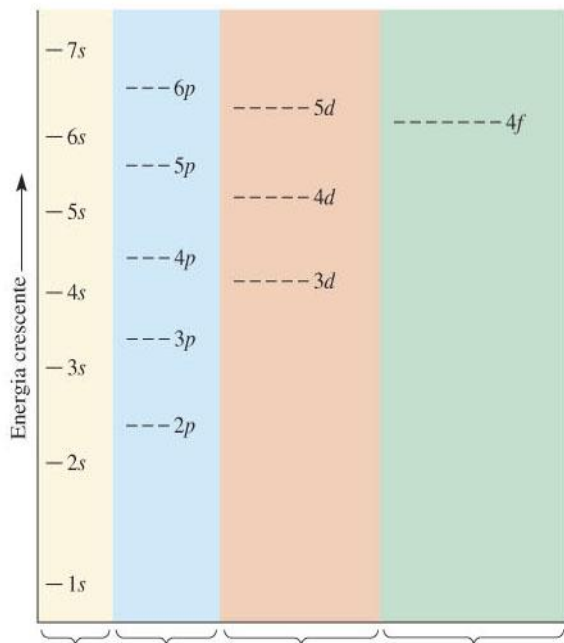


Figura 5-28 Il comune ordine di riempimento degli orbitali di un atomo. Le energie relative sono diverse per differenti elementi, ma si possono notare le seguenti caratteristiche: (1) La maggior differenza di energia si ha tra gli orbitali 1s e 2s. (2) Le energie degli orbitali sono generalmente più ravvicinate all'aumentare dell'energia stessa. (3) L'intervallo di energia tra np e $(n + 1)s$ (per esempio, tra 2p e 3s o tra 3p e 4s) è piuttosto ampio. (4) L'intervallo tra $(n - 1)d$ e ns (per esempio, tra 3d e 4s) è piuttosto piccolo. (5) La differenza di energia tra $(n - 2)f$ e ns (per esempio, 4f e 6s) è anche più piccola.

Un aiuto per ricordare l'ordine consueto di riempimento degli orbitali atomici.

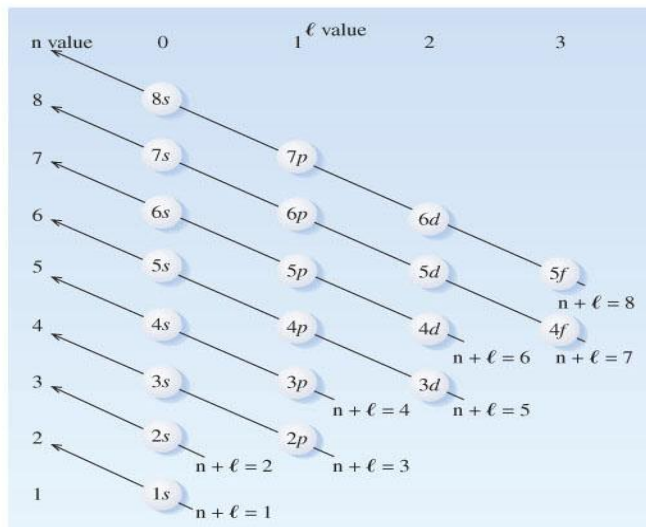


Figura 5-29 Un aiuto per ricordare l'ordine consueto di riempimento degli orbitali atomici. Scrivere ogni guscio (un certo valore di n) su una linea orizzontale, partendo da $n = 1$ al fondo. Scrivere tutti i sottolivelli analoghi (con lo stesso valore di ℓ) nella stessa colonna verticale. I sottolivelli si riempiono per valori crescenti di $(n + \ell)$. Quando due sottolivelli hanno lo stesso $(n + \ell)$ si riempie prima quello con n minore. Questo equivale a seguire le frecce in diagonale riportate partendo dal basso verso l'alto.

Riempimento dei livelli energetici di un atomo nello stato fondamentale

	Notazione orbitalica	
	1s	Notazione semplificata
${}_1\text{H}$	$\uparrow$	$1s^1$
${}_2\text{He}$	$\uparrow\downarrow$	$1s^2$

	1s	2s	2p	Notazione semplificata	
${}_3\text{Li}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$		$1s^2 2s^1$	o $[\text{He}] 2s^1$
${}_4\text{Be}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$1s^2 2s^2$	$[\text{He}] 2s^2$
${}_5\text{B}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$ — —	$1s^2 2s^2 2p^1$	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$
${}_6\text{C}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$ $\uparrow$ —	$1s^2 2s^2 2p^2$	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$
${}_7\text{N}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$1s^2 2s^2 2p^3$	$[\text{He}] 2s^2 2p^3$
${}_8\text{O}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$1s^2 2s^2 2p^4$	$[\text{He}] 2s^2 2p^4$
${}_9\text{F}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$	$1s^2 2s^2 2p^5$	$[\text{He}] 2s^2 2p^5$
${}_{10}\text{Ne}$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$1s^2 2s^2 2p^6$	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$

	3s	3p	Notazione semplificata
${}_{11}\text{Na}$	$[\text{Ne}] \uparrow$		$[\text{Ne}] 3s^1$
${}_{12}\text{Mg}$	$[\text{Ne}] \uparrow\downarrow$		$[\text{Ne}] 3s^2$
${}_{13}\text{Al}$	$[\text{Ne}] \uparrow\downarrow$	$\uparrow$ — —	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$
${}_{14}\text{Si}$	$[\text{Ne}] \uparrow\downarrow$	$\uparrow$ $\uparrow$ —	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$
${}_{15}\text{P}$	$[\text{Ne}] \uparrow\downarrow$	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$
${}_{16}\text{S}$	$[\text{Ne}] \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$
${}_{17}\text{Cl}$	$[\text{Ne}] \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$
${}_{18}\text{Ar}$	$[\text{Ne}] \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$

		Notazione orbitale			Notazione semplificata
		3d	4s	4p	
19K	[Ar]		$\uparrow$		[Ar] 4s ¹
20Ca	[Ar]		$\uparrow\downarrow$		[Ar] 4s ²
21Sc	[Ar]	$\uparrow$ — — —	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ¹ 4s ²
22Ti	[Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ — —	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ² 4s ²
23V	[Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ —	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ³ 4s ²
24Cr	[Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow$		[Ar] 3d ⁵ 4s ¹
25Mn	[Ar]	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁵ 4s ²
26Fe	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁶ 4s ²
27Co	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁷ 4s ²
28Ni	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ⁸ 4s ²
29Cu	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow$		[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹
30Zn	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²
31Ga	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$ — —	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹
32Ge	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$ $\uparrow$ —	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²
33As	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³
34Se	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴
35Br	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵
36Kr	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶

Osservando queste configurazioni elettroniche siamo in grado di notare come la

Gli Eser

LA TAVOLA PERIODICA E LE CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE

Gruppo IA IIA IIIB			IVB VB VIB VIIIB										VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA									
(1) (2) (3)			(4) (5) (6) (7)										(8) (9) (10)			(11)	(12)	(13)	(14)	(15)	(16)	(17)	(18)									
Periodo	1																				1	2										
		H																				H	He									
	1	1s																				1s										
	2	3	4											5	6	7	8	9	10													
		Li	Be											B	C	N	O	F	Ne													
		2s												2p																		
	3	11	12											13	14	15	16	17	18													
		Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar													
		3s												3p																		
	4	19	20	21											22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36			
	K	Ca	Sc											Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
	4s												3d			4p																
5	37	38	39											40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54				
	Rb	Sr	Y											Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe				
	5s												4d			5p																
6	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
	6s		4f										5d			6p																
7	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112						
	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									
	7s		5f										6d																			

Figura 5-31 Una tavola periodica colorata per evidenziare il tipo di orbitali atomici (o il sottolivello) in via di riempimento. Le configurazioni elettroniche degli elementi del gruppo A sono abbastanza regolari e possono essere previste sulla base della loro posizione all'interno della tavola periodica, ma ci sono molte eccezioni nei blocchi *d* ed *f*. I colori di questa figura sono identici a quelli utilizzati nella Figura 5-28.

L'idrogeno e l'elio sono qui mostrati nelle loro posizioni usuali nella tavola periodica. Queste possono parere insolite se ci si basa rigidamente sulla pura configurazione elettronica. Ricordiamo, tuttavia, che il livello ($n = 1$) può ospitare al massimo due elettroni. Questo guscio è completo nell'elio, che si comporta infatti come un gas nobile, e viene collocato dunque nella colonna con gli altri gas nobili (Gruppo VIIIA). L'idrogeno ha un solo elettrone che può perdere facilmente, come i metalli del Gruppo IA, e si può quindi collocarlo in questa colonna anche se non è un metallo. Tuttavia, l'idrogeno ha un solo elettrone in meno rispetto alla configurazione del gas nobile (He), e potremmo anche posizionarlo con altri elementi aventi questa caratteristica nel Gruppo VIIA.

I blocchi s, p, d ed f della Tavola Periodica

TABELLA 5-5 I blocchi s, p, d ed f della Tavola Periodica*

		GRUPPI																				
		IA	IIA	IIIB	IVB VB VIB VIIIB				VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA			
		(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)	(14)	(15)	(16)	(17)	(18)			
		blocco degli orbitali s													blocco degli orbitali p					s ²		
		s ¹	s ²												s ² p ¹	s ² p ²	s ² p ³	s ² p ⁴	s ² p ⁵	s ² p ⁶		
n = 1		1 H																				2 He
n = 2		3 Li	4 Be												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
n = 3		11 Na	12 Mg												13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
n = 4		19 K	20 Ca	21 Sc											31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr		
n = 5		37 Rb	38 Sr	39 Y											49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe		
n = 6		55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce → Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn		
n = 7		87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th → Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112								
= 6		SERIE DEI LANTANIDI				58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	con riempimento del sottolivello 4f		

* n è il numero quantico principale. Le notazioni d¹s², d²s², ... rappresentano configurazioni "regolari" e si riferiscono agli orbitali (n-1)d e ns. Diverse eccezioni alle configurazioni indicate sopra ogni gruppo sono evidenziate in grigio.