



POLITECNICO  
MILANO 1863

# *CORSO DI CHIMICA GENERALE*

Ing. Informatica/Automazione/Telecomunicazioni

**Struttura elettronica – A.A. 2024-2025**

# ◆ La crisi della fisica classica (*continuo*)

Dall'impossibilità di determinare contemporaneamente posizione (x) e velocità (v) di particelle piccole come l'elettrone, **PERDE OGNI SIGNIFICATO SCIENTIFICO IL MODELLO ATOMICO DI BOHR**, perché in esso l'elettrone compie orbite ben determinate attorno al nucleo, con un valore definito di energia!

OCCORRE ABBANDONARE L'IDEA DI DESCRIVERE L'ATOMO CON IL MODELLO MECCANICISTICO DELLA FISICA CLASSICA!

N.B.: l'energia di un elettrone all'interno di un atomo può essere calcolata (vedi spettri di emissione e/o assorbimento), ma la sua posizione in ogni istante resta del tutto INDETERMINATA.



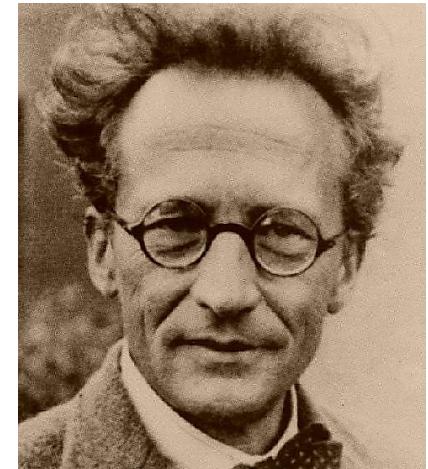
## ✓ L'equazione di Schrödinger

Non è più possibile descrivere il moto dell'elettrone secondo la meccanica classica.

Nel 1927, *Schrödinger* introduce il concetto di *funzione d'onda*  $\Psi$ :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8 \pi^2 m (E - V)}{h^2} \cdot \Psi = 0$$

m = massa e<sup>-</sup>; E = energia totale; V = energia potenziale; x,y,z = coordinate cartesiane; h = costante di Plank



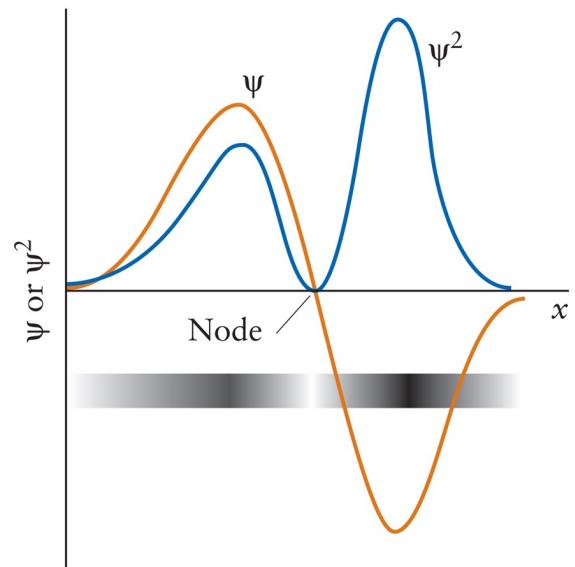
**Erwin Schrödinger**  
(12 agosto 1887 - 4 gennaio 1961)

### ➤ Significato fisico di $\Psi$ :

La probabilità di trovare la particella in una data regione è proporzionale a  $\Psi^2$



*Nuovo modello atomico*

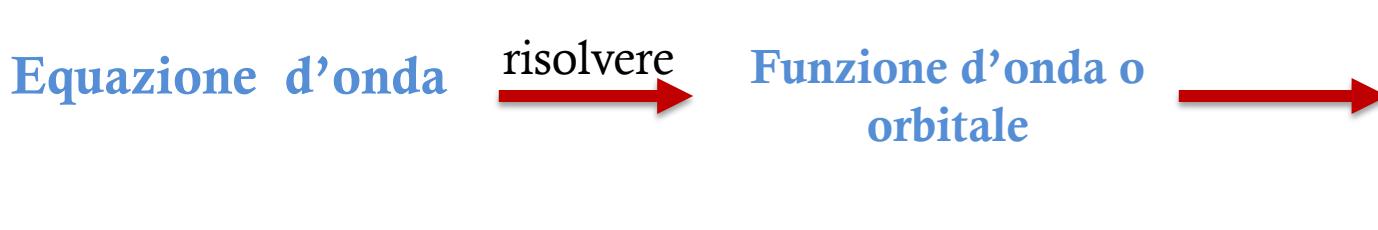


## ✓ L'equazione di Schrödinger

Il modello quanto-meccanico proposto da Schrödinger è descritto da un'equazione matematica chiamata **equazione d'onda**, in quanto simile all'equazione utilizzata per descrivere il comportamento delle onde ordinarie nei fluidi.

- Le soluzioni dell'equazione d'onda sono chiamate **funzioni d'onda o orbitali**. E sono rappresentate dalla lettera greca  $\Psi$ .
- Il quadrato della funzione d'onda,  $\Psi^2$ , definisce la probabilità di trovare un elettrone all'interno di una data regione di spazio attorno al nucleo.

***L'orbitale non è paragonabile all'orbita descritta da Bohr!***



# Riassumiamo...

Nel mondo atomico la meccanica classica fallisce → nasce la meccanica quantistica:

- ✓ *L'energia è quantizzata* (Planck)
- ✓ *Nell'atomo solo determinati livelli energetici sono permessi* (Bohr)
- ✓ L'elettrone si comporta sia come una particella (ha massa) che come un'onda (diffrazione) → *dualismo onda/particella* (De Broglie)
- ✓ *Principio di indeterminazione* (Heisenberg)
- ✓ Il moto dell'elettrone è sostituito dal concetto di *funzione d'onda* (Schrödinger)



***Nuovo modello atomico***



# Riassumiamo...la nascita della fisica quantistica



SOLVAY CONFERENCE 1927

colourized by pastincolour.com

A. PICARD    E. HENRIOT    P. EHRENFEST    Ed. HERSEN    Th. DE DONDER    E. SCHRÖDINGER    E. VERSCHAFFELT    W. PAULI    W. HEISENBERG    R.H FOWLER    L. BRILLOUIN

P. DEBYE    M. KNUDSEN    W.L. BRAGG    H.A. KRAMERS    P.A.M. DIRAC    A.H. COMPTON    L. de BROGLIE    M. BORN    N. BOHR

I. LANGMUIR    M. PLANCK    Mme CURIE    H.A. LORENTZ    A. EINSTEIN    P. LANGEVIN    Ch.E. GUYE    C.T.R. WILSON    O.W. RICHARDSON

Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL

# ◆ Il modello atomico attuale

L'**elettrone** è assimilabile ad un'**onda materiale stazionaria** ( $\Psi$ ), con stati stazionari di energia ( $E = \text{costante}$ ), che si propaga nelle tre direzioni dello spazio ( $x, y, z$ ) disegnando “figure” intorno al nucleo.

Queste *funzioni d'onda* ( $\Psi$ ) risultano matematicamente descritte da tre numeri interi detti **numeri quantici**, indicati con le lettere  $n, l$  ed  $m_l$ . I numeri quantici descrivono il livello energetico e la forma tridimensionale della regione di spazio occupata dell'elettrone.

Una funzione d'onda caratterizzata da ben precisi valori di numeri quantici ( $n, l, m_l$ ) si dice **orbitale**.

Un orbitale atomico è quindi una funzione matematica che descrive il comportamento degli elettroni in un atomo.



# ✓ I numeri quantici

## Numero quantico principale $n$

( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) numero intero positivo

Da  $n$  dipendono le dimensioni e livello energetico dell'orbitale. Due elettroni aventi lo stesso  $n$  (nello stesso atomo) sono detti appartenere allo stesso **livello o guscio elettronico**.

All'aumentare del valore di  $n$ , aumenta il numero di orbitali permessi e le dimensioni di tali orbitali diventano maggiori, consentendo quindi a un elettrone di trovarsi più distante dal nucleo.

Dato che per separare una carica negativa (elettrone) da una carica positiva (protone presente nel nucleo) occorre energia, l'aumento della distanza tra l'elettrone e il suo nucleo implica che l'energia dell'elettrone all'interno di un orbitale aumenti all'aumentare del numero quantico  $n$ .



# ✓ I numeri quantici

## Numero quantico secondario $l$

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

Il numero quantico secondario stabilisce il **sottolivello energetico** dell'orbitale, ed è collegato alla forma tridimensionale dell'orbitale stesso. Per un orbitale con numero quantico principale  $n$ ,  $l$  può assumere tutti i valori interi da 0 a  $n-1$ . Quindi all'interno di ciascun guscio ci sono  $n$  forme diverse per gli orbitali! Es.: se  $n=3$ ,  $l$  può avere essere 0, 1 o 2. A ciascun valore di  $l$  corrisponde una diversa forma tridimensionale.

Invece di indicare il valore di  $l$ , si usa un codice a lettere:

- orbitale  $s$  se  $l=0$ ,
- orbitale  $p$  con  $l=1$ ,
- orbitale  $d$  con  $l=2$ ,
- orbitale  $f$  con  $l=3$



# ✓ I numeri quantici

## Numero quantico magnetico $m_l$

( $m_l = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l$ )

$m_l$  definisce l'orientamento nello spazio degli orbitali del sottolivello corrispondente.

Per un orbitale per cui il numero quantico secondario è  $l$ ,  $m_l$  può assumere ogni valore tra  $-l$  e  $+l$ . Quindi all'interno dello stesso sottoguscio (*i.e.* orbitali con la stessa forma o lo stesso valore di  $l$ ) ci sono  $2l+1$  orbitali con diverso orientamento spaziale.

Relazione tra i numeri quantici:

- $n$  è anche il numero di sottolivelli del guscio in oggetto
- $2l + 1$  è il numero di orbitali per ogni sottolivello
- $n^2$  è il numero di orbitali per ogni livello elettronico



# ✓ Gli orbitali

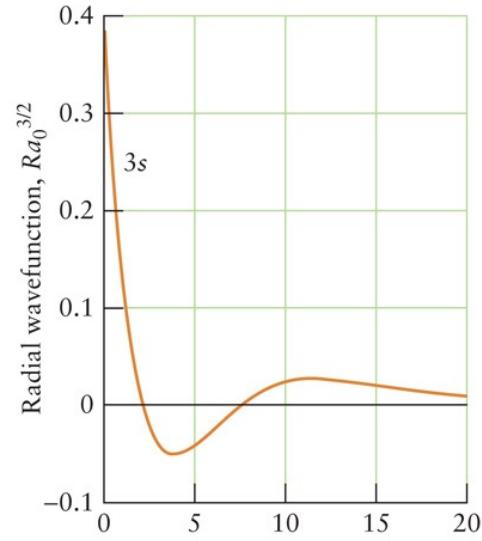
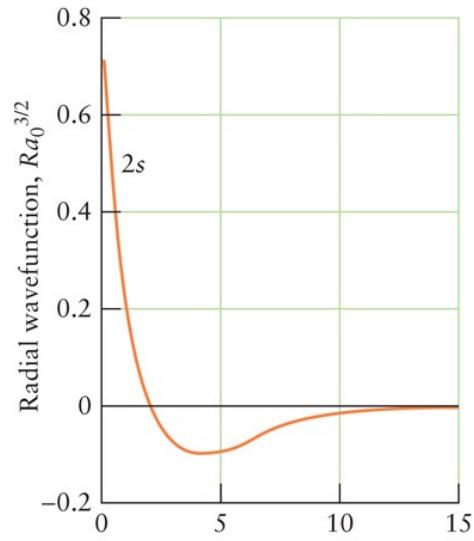
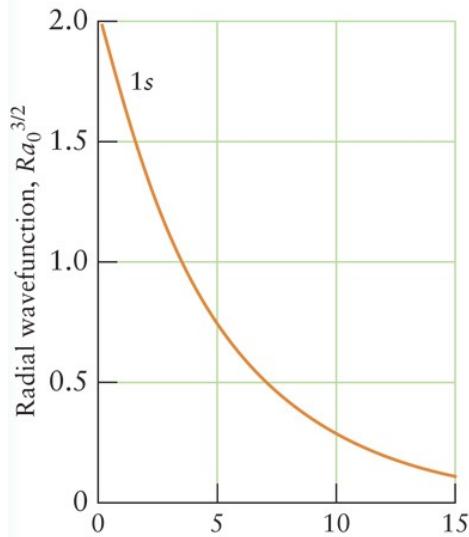
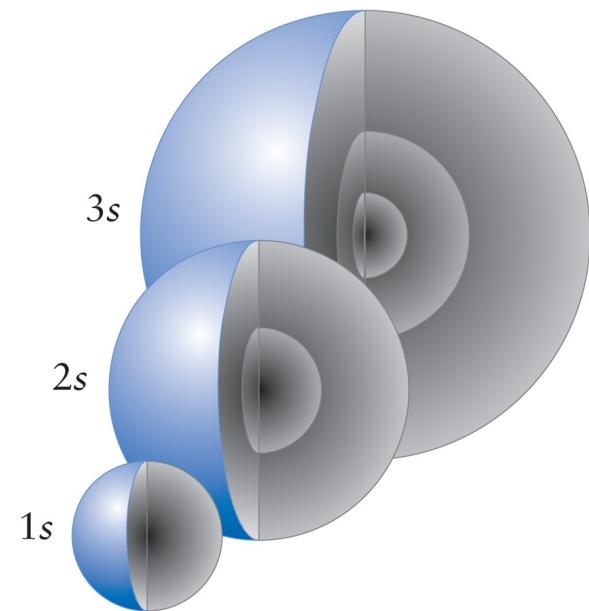
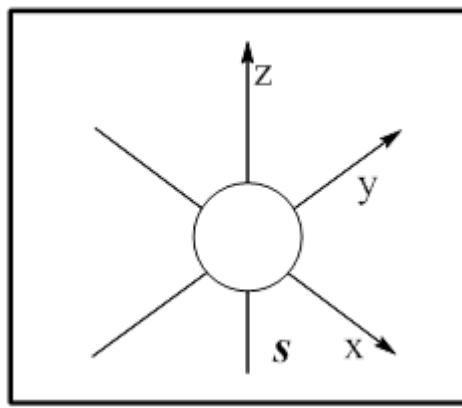
**TABELLA 6.1** Riepilogo dei numeri quantici, delle loro relazioni e delle informazioni sugli orbitali contenute

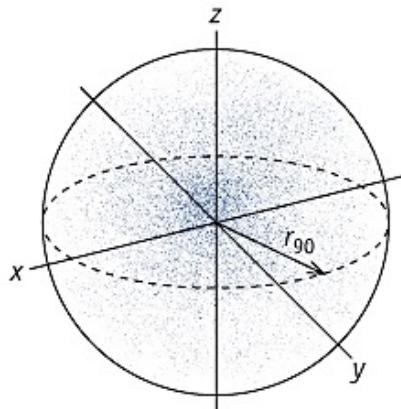
Numero quantico principale	Numero quantico secondario	Numero quantico magnetico	Numero e tipo di orbitali nel sottostrato
<b>Simbolo = <math>n</math></b> Valori = 1, 2, 3, ... $n$ = numero di sottostrati	<b>Simbolo = <math>\ell</math></b> Valori = 0 ... $n - 1$	<b>Simbolo = <math>m_\ell</math></b> Valori = $+\ell \dots 0 \dots -\ell$	<b>Numero di orbitali nello strato = <math>n^2</math> e numero di orbitali nel sottostrato = <math>2\ell + 1</math></b>
1	0	0	un orbitale 1s (un orbitale di un tipo nello strato con $n = 1$ )
2	0 1	0 $+1, 0, -1$	un orbitale 2s tre orbitali 2p (quattro orbitali di due tipi nello strato con $n = 2$ )
3	0 1 2	0 $+1, 0, -1$ $+2, +1, 0, -1, -2$	un orbitale 3s tre orbitali 3p cinque orbitali 3d (nove orbitali di tre tipi nello strato con $n = 3$ )
4	0 1 2 3	0 $+1, 0, -1$ $+2, +1, 0, -1, -2$ $+3, +2, +1, 0, -1, -2, -3$	un orbitale 4s tre orbitali 4p cinque orbitali 4d sette orbitali 4f (16 orbitali di quattro tipi nello strato con $n = 4$ )



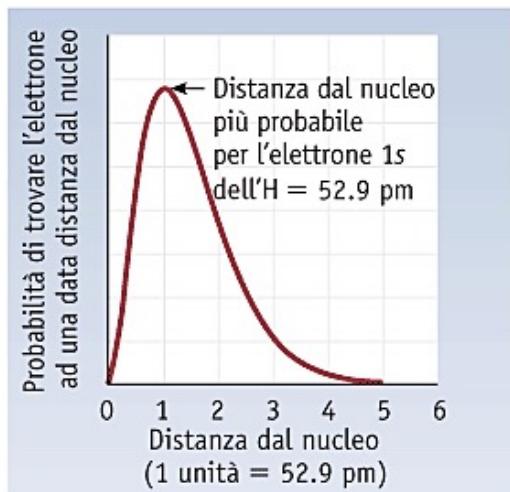
## ➤ *Gli orbitali s*

- $l=0, m_l=0$
- simmetria sferica
- può contenere **2 e<sup>-</sup>**

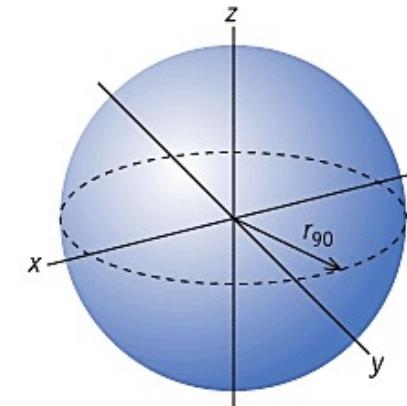




(a) Rappresentazione di un elettrone in un orbitale  $1s$ . Ciascun punto rappresenta la posizione di un elettrone in un dato istante. Si noti che i punti sono maggiormente concentrati nelle vicinanze del nucleo.  $r_{90}$  è il raggio della sfera che racchiude la probabilità di trovare l'elettrone presente al 90% del tempo.



(b) Grafico della densità superficiale ( $4\pi r^2 \psi^2$ ) in funzione della distanza per un orbitale  $1s$  dell'idrogeno. Questo grafico mostra la probabilità di trovare l'elettrone ad una data distanza dal nucleo.



(c) La superficie della sfera di un orbitale  $1s$  nella quale l'elettrone resta il 90% del suo tempo. Questa superficie è spesso detta "superficie di confine" (la superficie del 90% è stata scelta arbitrariamente. Se si fosse scelta la superficie all'interno della quale l'elettrone fosse presente per il 50% del suo tempo, la stessa sarebbe stata molto più piccola).

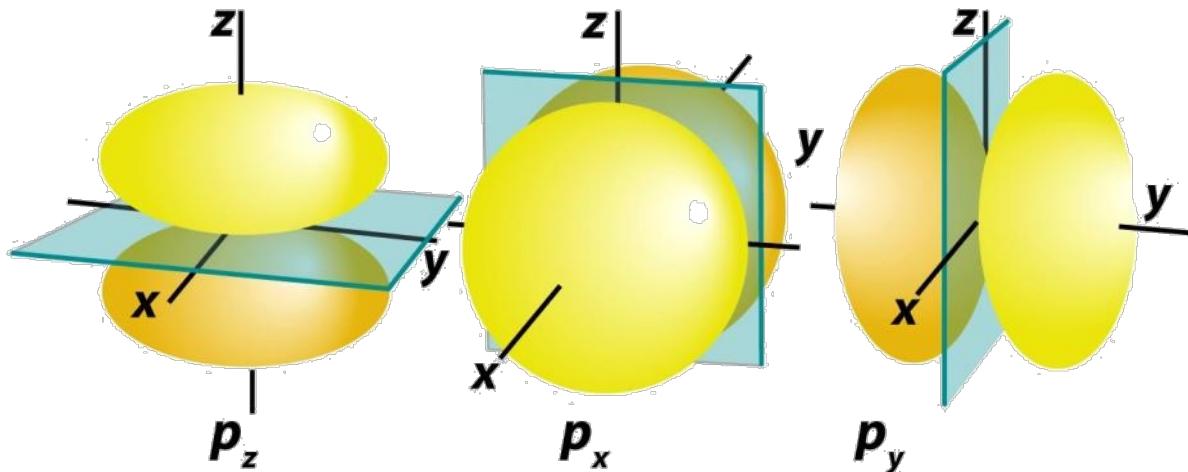
**FIGURA 6.13** Differenti rappresentazioni di un orbitale  $1s$  ( $n = 1$  e  $\ell = 0$ ).



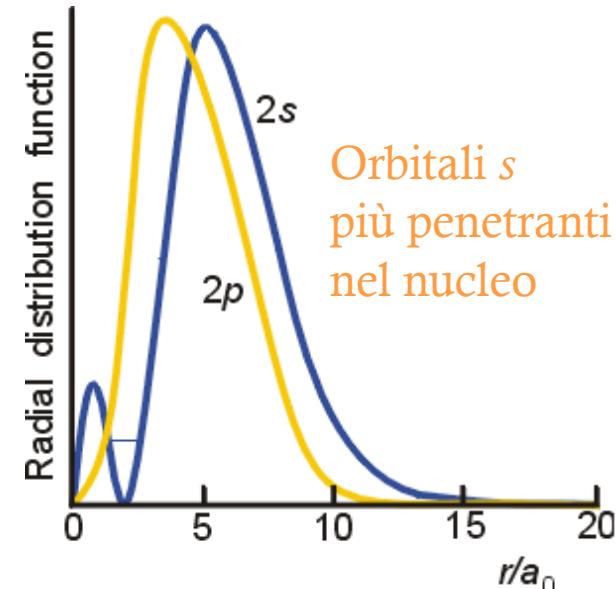
## ➤ *Gli orbitali p*

- $l=1, m_l=-1, 0, 1$
- sono tre **orbitali degeneri** orientati verso gli assi cartesiani  $x, y, z$
- complessivamente possono contenere **6 e<sup>-</sup>**

Gli orbitali  $p$  hanno una forma bilobata, con la densità elettronica concentrata in due lobi identici separati da un piano nodale che attraversa il nucleo. Di conseguenza la probabilità di trovare un elettrone  $p$  vicino al nucleo è nulla.



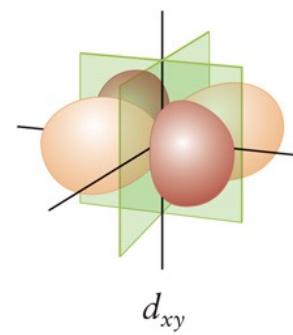
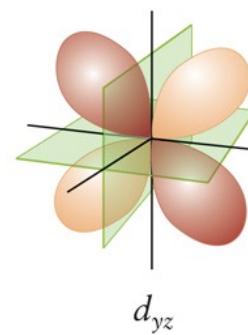
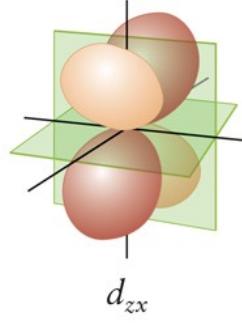
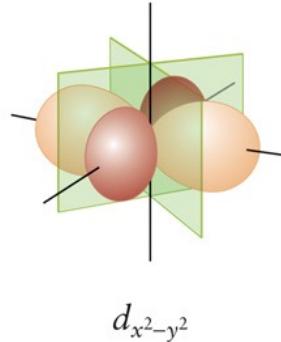
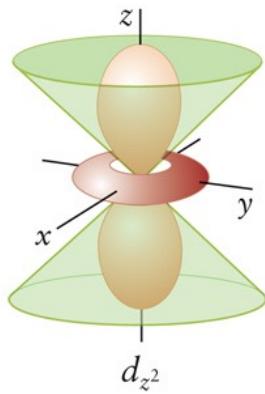
Orbitali  $p$  orientati con angoli di  $90^\circ$  l'uno rispetto all'altro lungo gli assi.



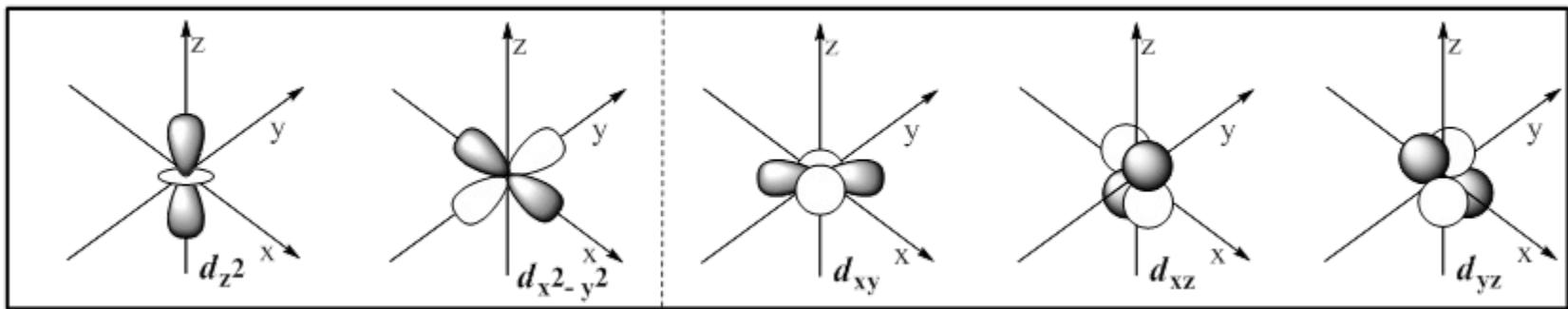
## ➤ *Gli orbitali d*

- $l=2$ ,  $m_l=-2, -1, 0, 1, 2$
- sono cinque orbitali degeneri in 5 direzioni diverse dello spazio
- complessivamente possono contenere **10 e<sup>-</sup>**

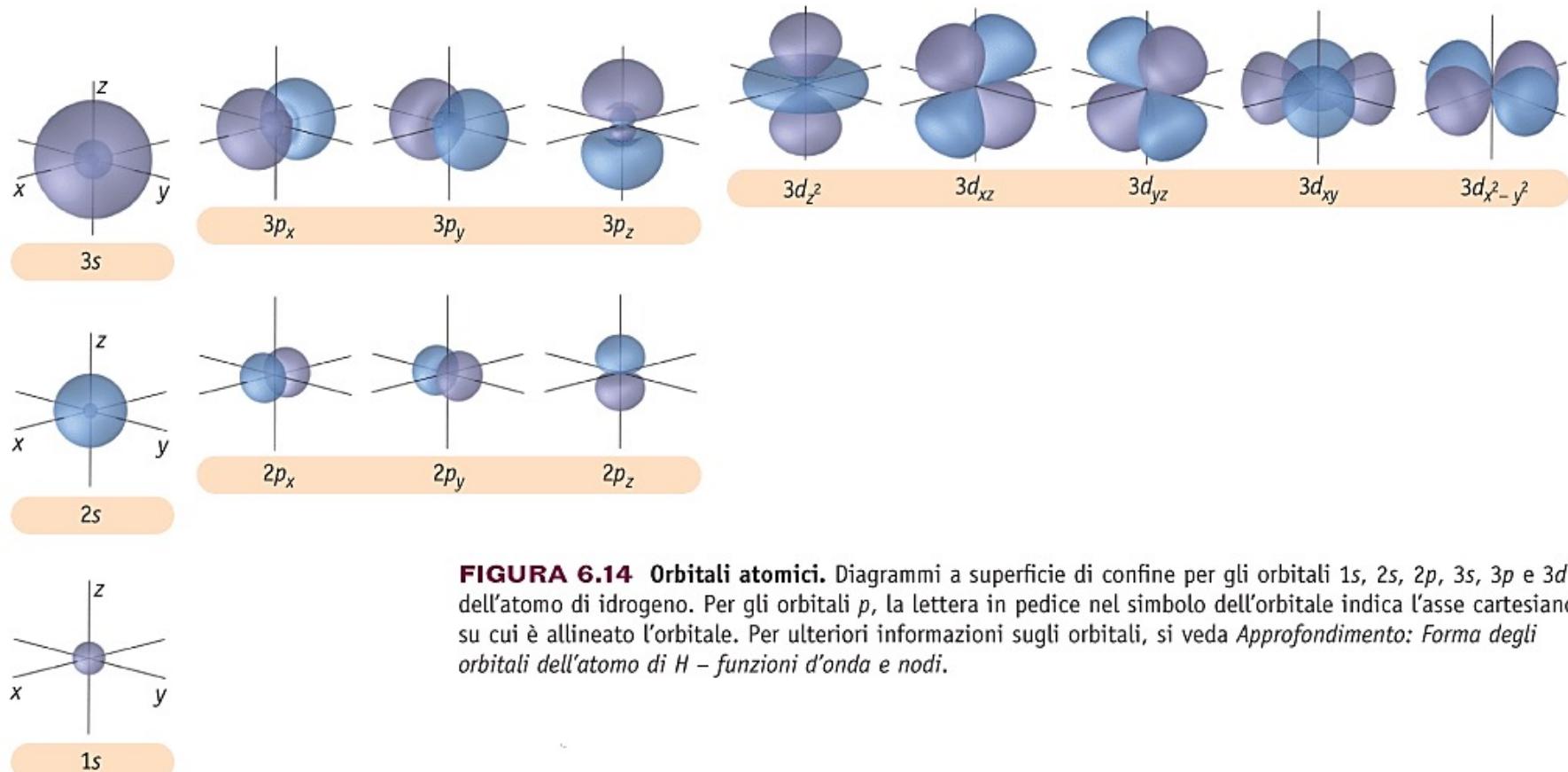
Quattro dei cinque orbitali *d* hanno forma di quadrifoglio, con quattro lobi, in cui si ha stessa probabilità di trovare l'elettrone, separati da piani nodali che attraversano il nucleo. In quinto orbitale *d* ha una forma simile agli orbitali *p*, ma presenta una regione aggiuntiva a forma di ciambella, in cui si ha alta probabilità di incontrare l'elettrone.



I **lobi** degli orbitali  $d_{z^2}$  e  $d_{x^2-y^2}$  sono localizzati **lungo gli assi**, mentre i lobi degli orbitali  $d_{xy}$ ,  $d_{xz}$  e  $d_{yz}$  sono localizzati **fra gli assi**.



# Riassumiamo...gli orbitali atomici *s*, *p* e *d*

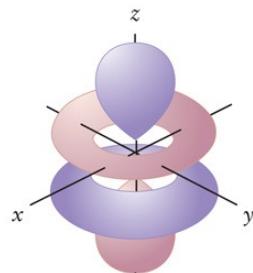


**FIGURA 6.14 Orbitali atomici.** Diagrammi a superficie di confine per gli orbitali 1s, 2s, 2p, 3s, 3p e 3d dell'atomo di idrogeno. Per gli orbitali *p*, la lettera in pedice nel simbolo dell'orbitale indica l'asse cartesiano su cui è allineato l'orbitale. Per ulteriori informazioni sugli orbitali, si veda *Approfondimento: Forma degli orbitali dell'atomo di H – funzioni d'onda e nodi*.

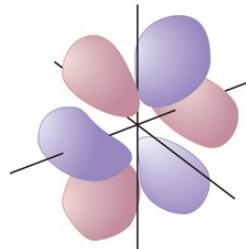


## ➤ *Gli orbitali f*

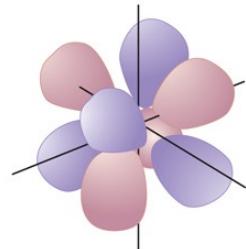
- $l=3, m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$
- sono sette orbitali degeneri in direzioni diverse dello spazio
- complessivamente possono contenere **14 e<sup>-</sup>**



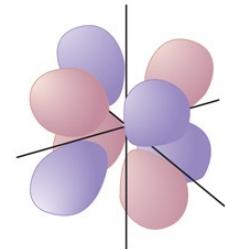
$$5z^3 - 3zr^2$$



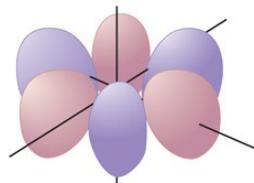
$$5xz^2 - xr^2$$



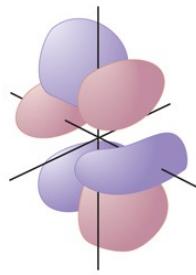
$$zx^2 - zy^2$$



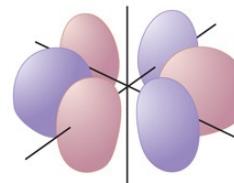
$$xyz$$



$$y^3 - 3yx^2$$



$$5yz^2 - yr^2$$



$$x^3 - 3xy^2$$



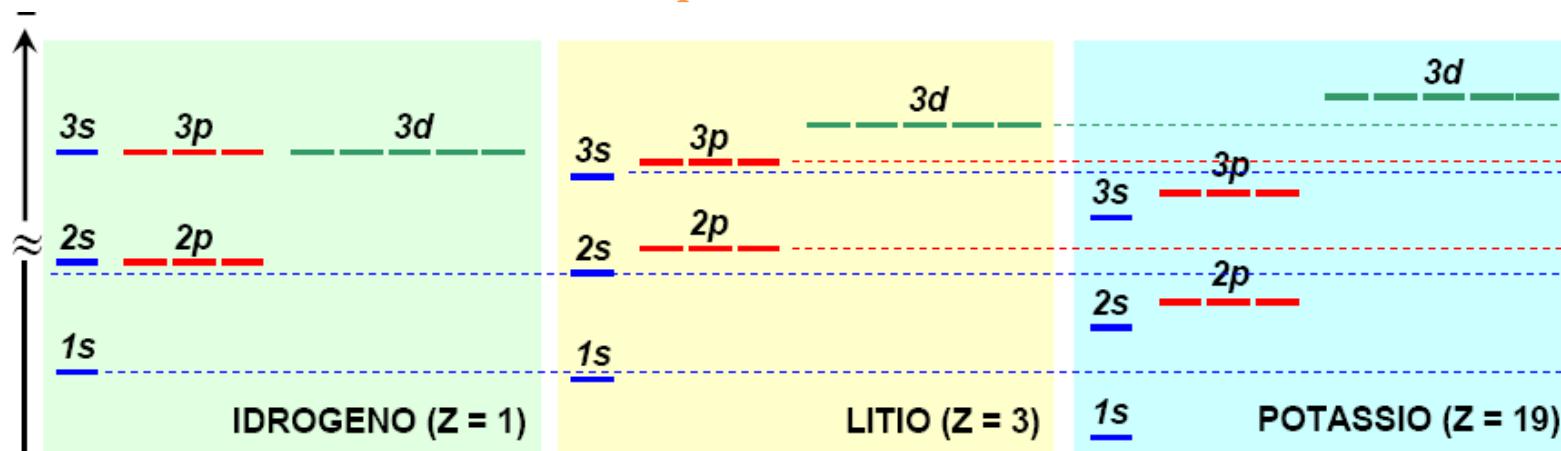
# ❖ Atomi polielettronici: energia degli orbitali

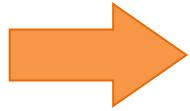
Per  $Z = 1$  (atomo di H: *monolettronico*) l'energia degli orbitali dipende solo dal numero quantico principale  $n$ .

Per  $Z > 1$  (tutti gli altri atomi: *polielettronici*) l'energia dipende sia dal numero quantico  $n$  che dal numero quantico secondario  $l$ .

Quindi, per  $Z > 1$  si ha:  $E_{2s} < E_{2p}$

$$E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$$





## Perché?

- ✓ **Effetto schermo**: se in un atomo ci sono più elettroni, questi risentiranno non solo della forza attrattiva del nucleo (- vs +), ma anche della forza repulsiva tra gli elettroni (- vs -).

Si osserva così uno schermaggio della carica nucleare (di valore  $Z$ , *numero atomico*), nei confronti di un  $e^-$  da parte degli  $e^-$  più interni che «mitigano» la carica + del nucleo.

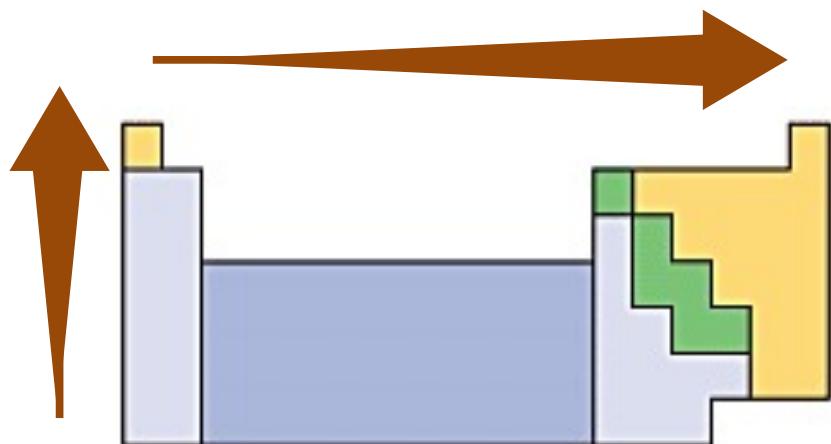


## ✓ *La carica nucleare efficace (Z<sub>eff</sub>)*

La *carica nucleare efficace* (o *effettiva*; Z<sub>eff</sub>) è la carica positiva netta di cui un elettrone risente tenendo conto dell'*azione di schermo* degli elettroni più interni.

Esempio: Li (litio) 1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup> Z=3 Z<sub>eff</sub>= 3-2 = 1 per l'elettrone 2s

Nella spiegazione delle proprietà periodiche, la *carica nucleare effettiva* gioca un ruolo importante.



**TABELLA 7.2** Cariche nucleari effettive, Z\*, per gli elementi con n = 2.

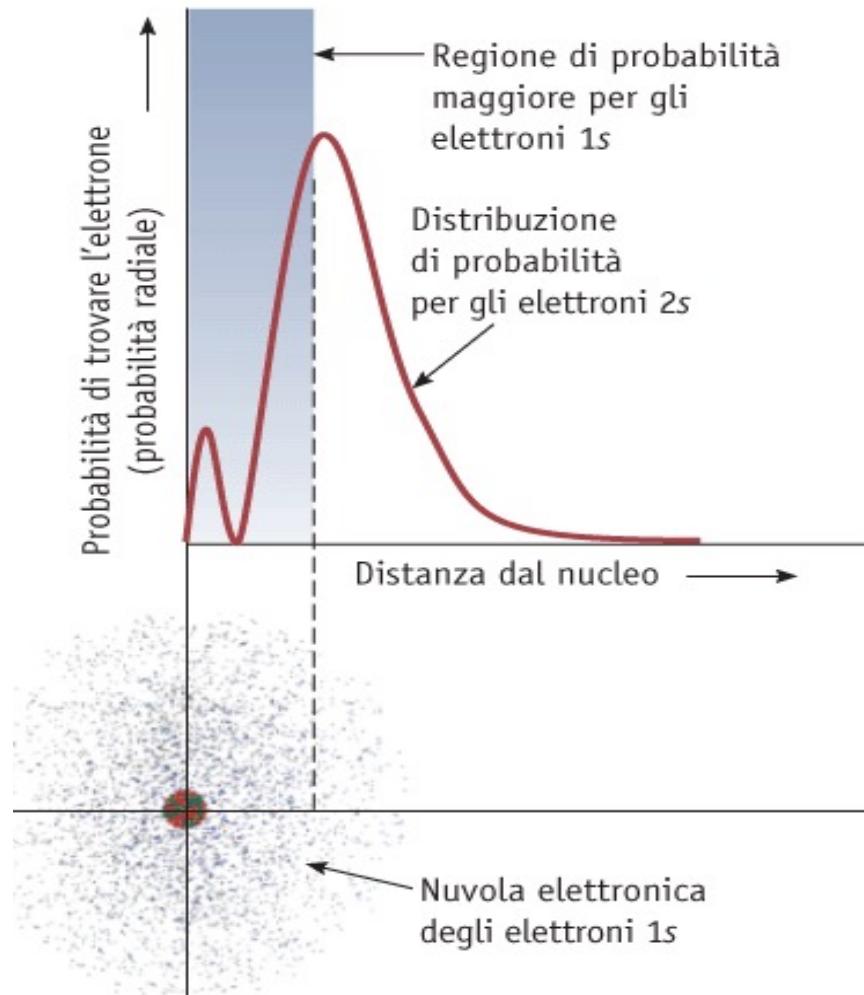
Atomo	Z*(2s)	Z*(2p)
Li	1.28	
B	2.58	2.42
C	3.22	3.14
N	3.85	3.83
O	4.49	4.45
F	5.13	5.10

Aumenta da sinistra verso destra lungo i periodi e si abbassa passando a un periodo successivo.



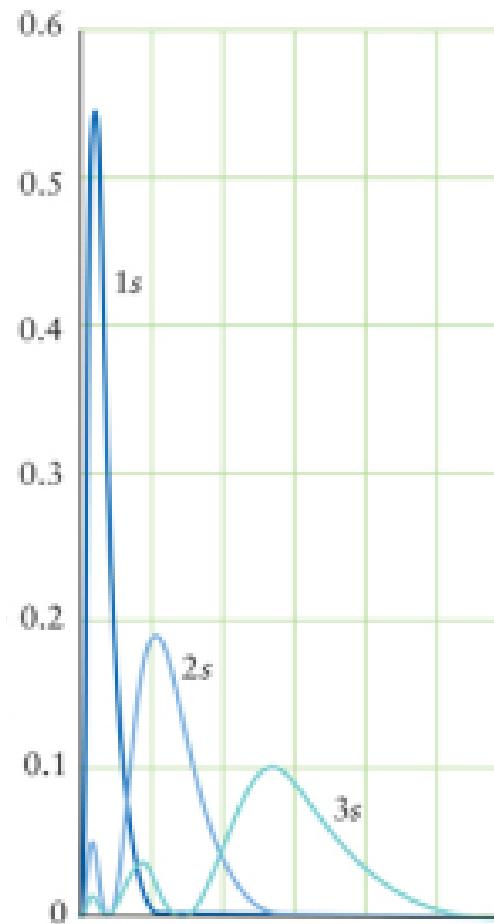
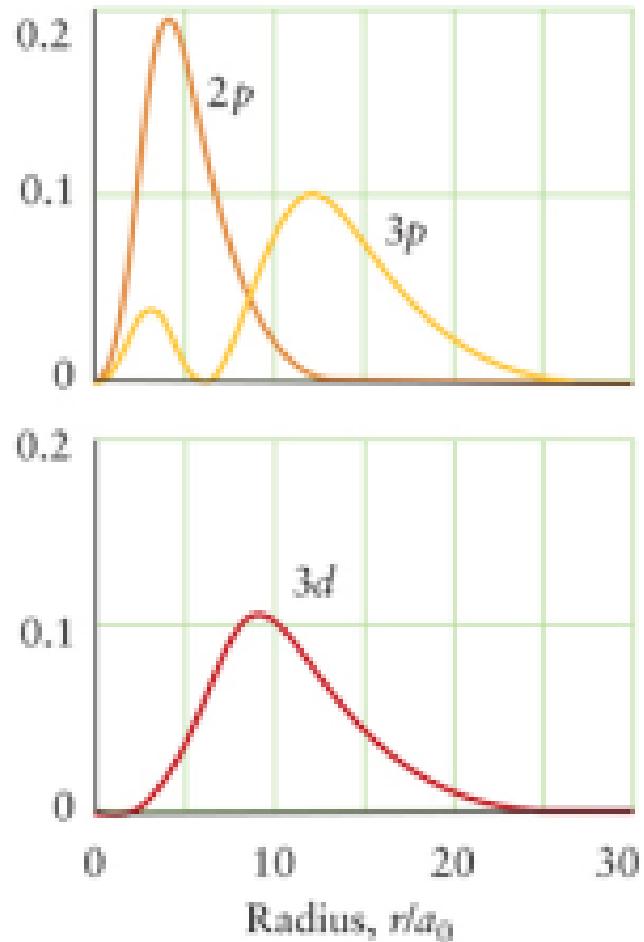
## ✓ *Effetto schermo & carica nucleare effettiva*

**FIGURA 7.3** La carica nucleare effettiva,  $Z^*$ . I due elettroni  $1s$  del litio occupano approssimativamente la regione ombreggiata, ma questa regione è penetrata dell'elettrone  $2s$  (la cui curva di distribuzione di probabilità approssimata è qui mostrata). Quando l'elettrone è piuttosto distante dal nucleo, risente di una carica +1, poiché la carica +3 del nucleo del litio è schermata dai due elettroni  $1s$ . Quando l'elettrone  $2s$  penetra la regione  $1s$ , però, l'elettrone risente di una carica sempre maggiore, fino ad un massimo di +3. In media, l'elettrone risente di una carica, detta carica nucleare effettiva ( $Z^*$ ), che è molto minore di +3, ma è maggiore di +1.

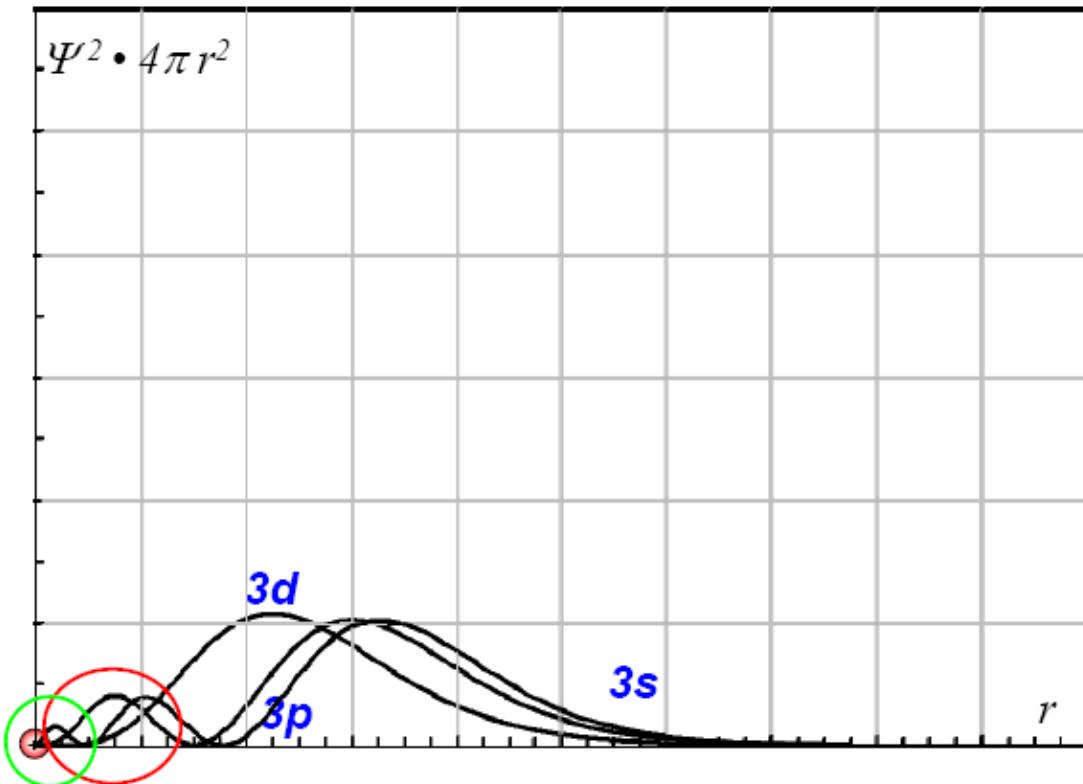




# Penetrazione degli orbitali



## ✓ Atomi polielettronici & densità radiale



L'elettrone nell'orbitale  $s$  spende più tempo vicino al nucleo dell'elettrone  $p$  avente lo stesso numero quantico  $n$ .

**Capacità penetrante:**

$$3s > 3p > 3d$$

$$Z_{eff} (3s) > Z_{eff} (3p) > Z_{eff} (3d)$$

### Esempio:

per  $n = 2$ :  $2s$  è più penetrante di  $2p$  perché  $2s$  scherma  $2p$ , quindi  $2p$  risente di una carica nucleare  $Z_{eff} <$  dell'elettrone  $2s$  ed  $E_{2s} < E_{2p}$

per  $n = 3$ : analogo discorso per gli orbitali  $d \rightarrow 3s$  è più penetrante di  $3p$  (lo scherma) e  $3p$  è più penetrante di  $3d$  (lo scherma). Quindi:  $E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$



## ✓ *Effetto schermo & carica nucleare effettiva*

• Atom	Z* Experienced by Electrons in Valence Orbitals
• Li	+1.28
• Be	-----
• B	+2.58
• C	+3.22
• N	+3.85
• O	+4.49
• F	+5.13

**Increase in  
Z\* across a  
period**

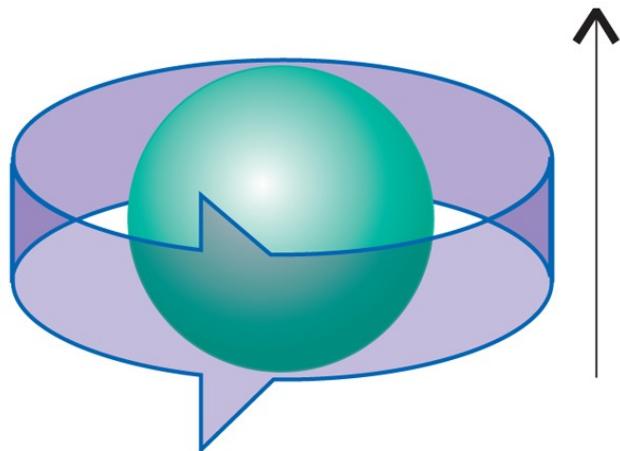


**[Values calculated using Slater's Rules]**

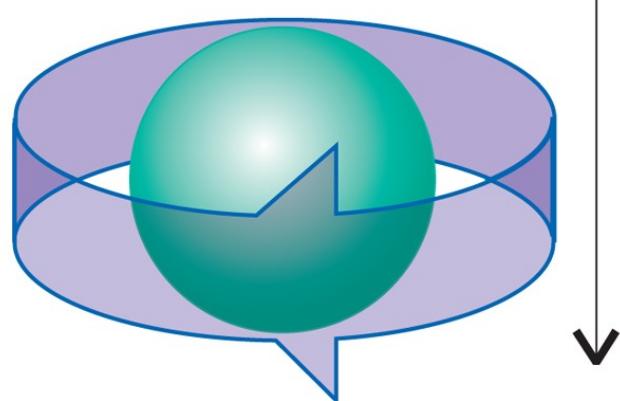


# ❖ Lo spin elettronico

$$m_s = +\frac{1}{2}$$



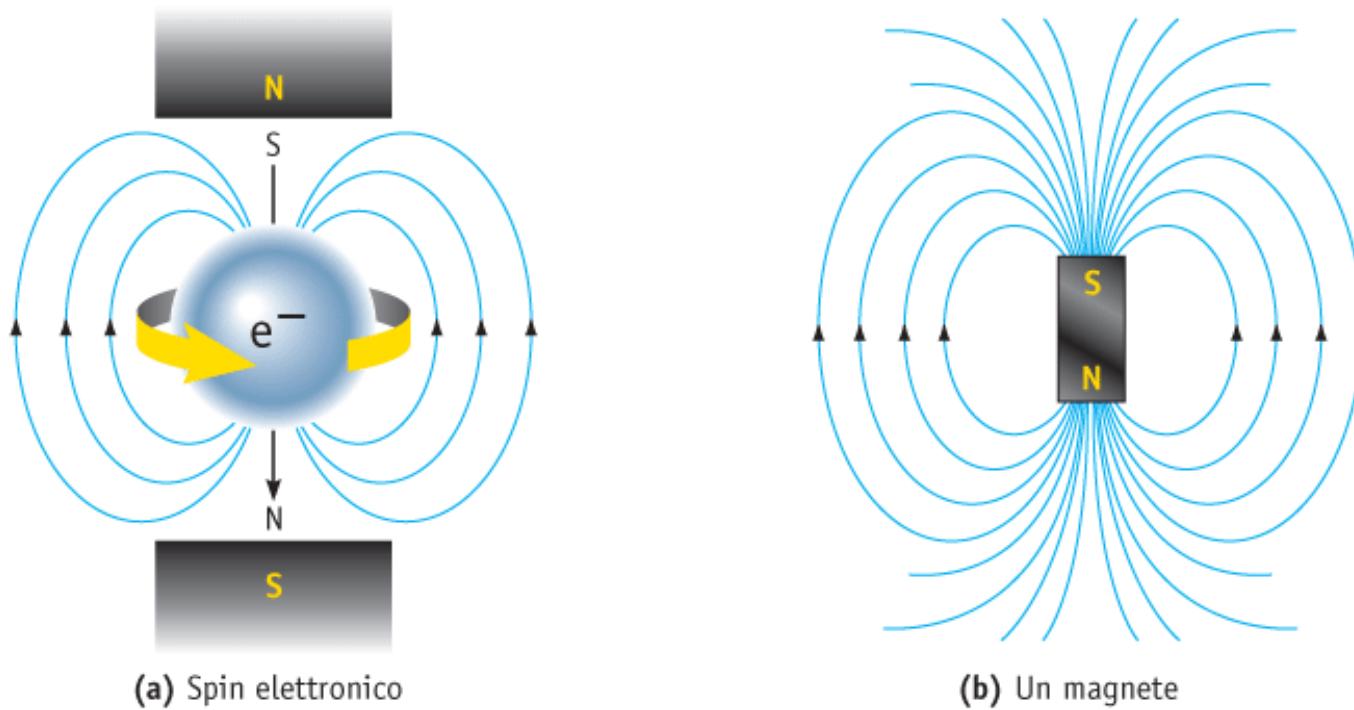
$$m_s = -\frac{1}{2}$$



Il ***numero quantico magnetico di spin ( $m_s$ )*** non va a caratterizzare l'orbitale, ma solo lo stato dell'elettrone.



# ✓ Lo spin elettronico e il magnetismo



**FIGURA 6.17 Campi magnetici: un magnete ed un elettrone.** L'elettrone, con la sua rotazione (spin) e la carica elettrica negativa, si comporta come un "micromagnete". Solo due direzioni dello spin elettronico sono permesse rispetto ad un campo magnetico, rotazione in senso orario oppure in senso antiorario. Il polo nord dell'elettrone in rotazione può perciò essere o allineato al campo magnetico esterno, oppure opposto rispetto ad esso.

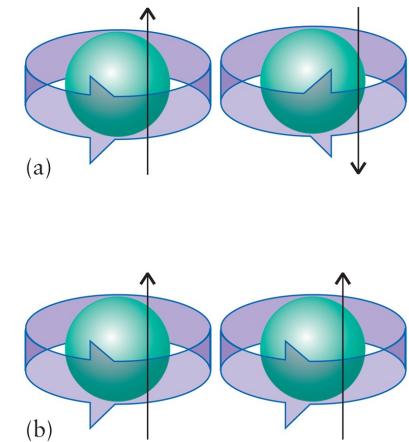


# ❖ Come si costruisce la configurazione elettronica?

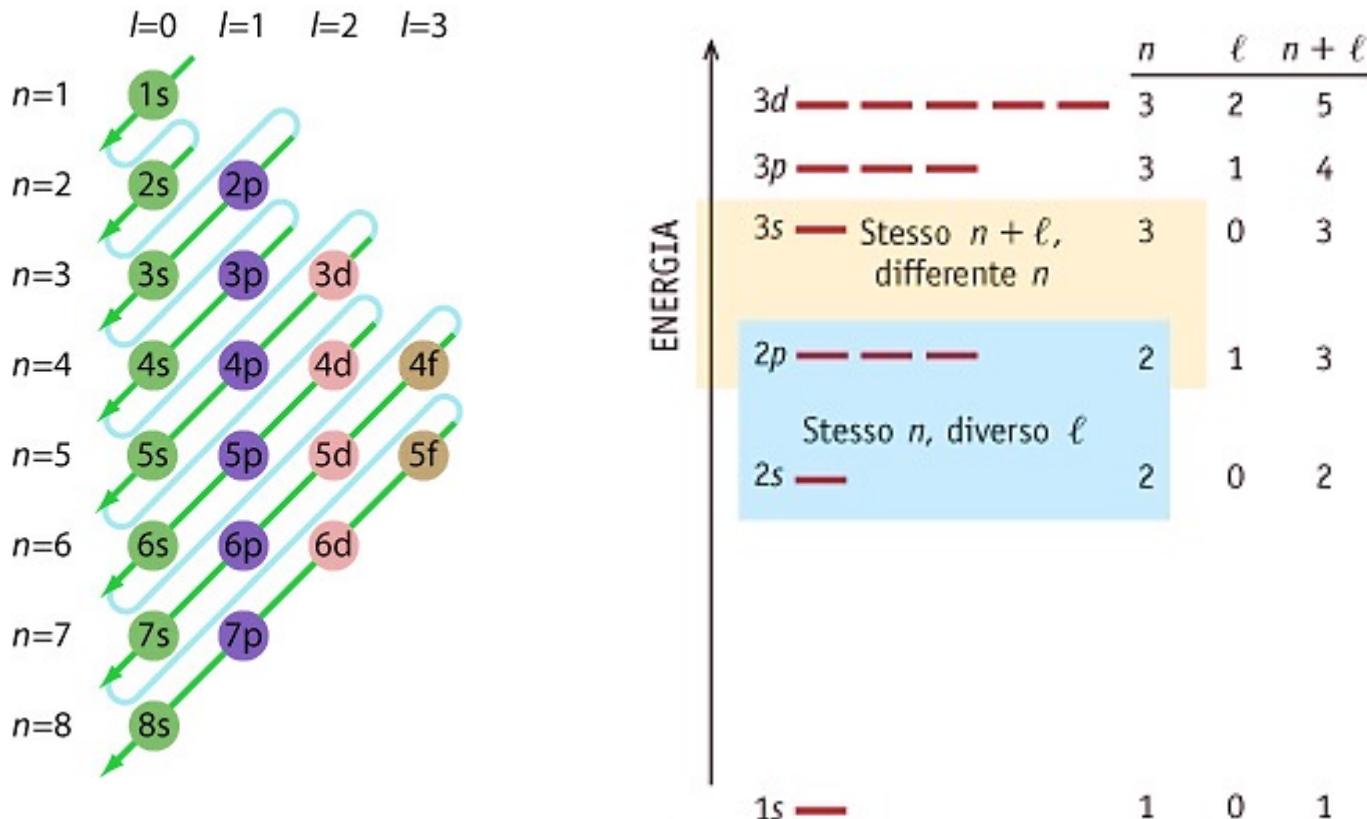
1) **Principio di Aufbau:** il riempimento degli orbitali avviene a partire dagli stati di energia più bassa. Si passa agli stati di energia superiore quando l'occupazione è completa.

2) **Principio di esclusione di Pauli:** due elettroni appartenenti allo stesso atomo non possono avere lo stesso stato quantico (cioè gli stessi  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$ ). Di conseguenza, ogni orbitale può essere occupato al massimo da due e<sup>-</sup> con *spin antiparalleli*.

3) **Regola di Hund:** per una data configurazione elettronica, lo stato con la maggiore *molteplicità di spin* ( $2 \times m_s + 1$ ) è quello più stabile. In pratica, nel caso di orbitali degeneri (come i 3 orbitali  $p$ ) gli e<sup>-</sup> tendono a distribuirsi in tutti gli orbitali ed ad avere spin parallelo prima di occupare uno stesso orbitale e avere spin antiparallelo.



# ✓ Principio di Aufbau:



Gli orbitali  $s$  sono particolarmente penetranti: il  $4s$  si riempie prima del  $3d$  !!





# La configurazione elettronica

Rappresentazione della configurazione elettronica di un atomo:

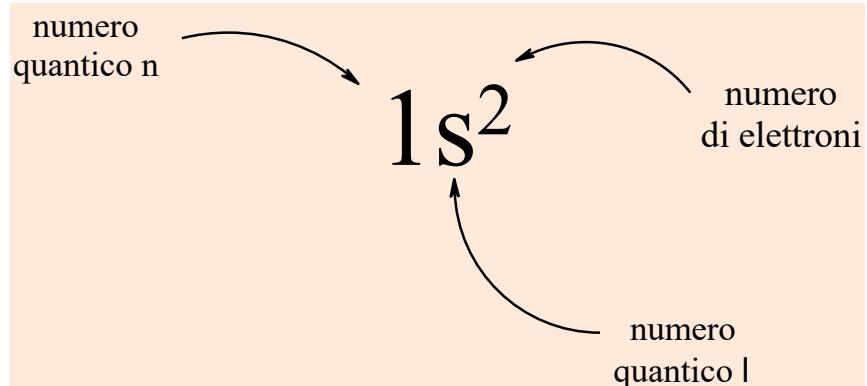
- ✓ *Aufbau*
- ✓ *Regola di Hund*
- ✓ *Principio di esclusione di Pauli*

*Esempi:*

Atomo di He:  $Z = 2$ , quindi  $2 e^-$ ;  $1s^2$

Atomo di C:  $Z = 6$ , quindi  $6 e^-$ ;  $1s^2 2s^2 2p^2$

Atomo di F:  $Z = 9$ , quindi  $9 e^-$ ;  $1s^2 2s^2 2p^5$



**Un atomo è particolarmente stabile  
quando ha riempito un livello energetico !**

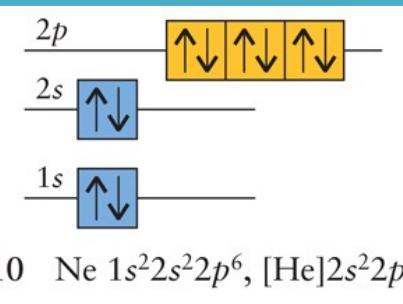
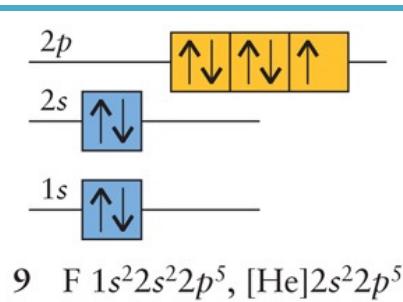
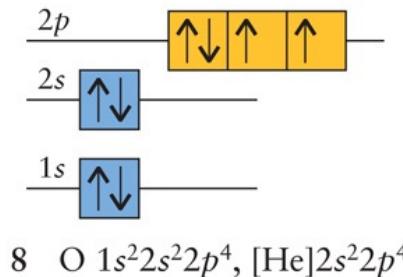
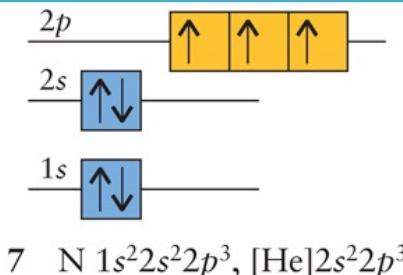
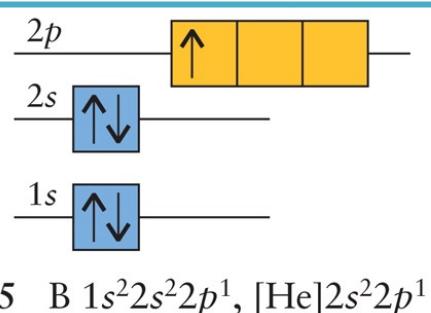
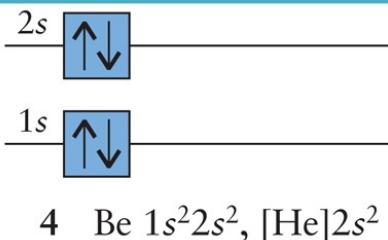
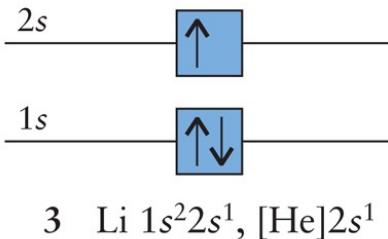
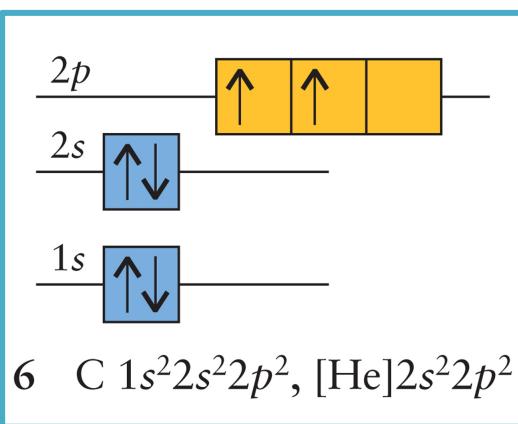
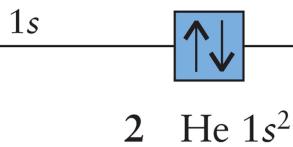
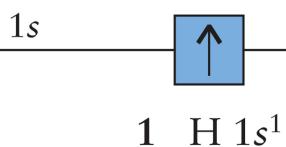
*Esempio:* i gas nobili

... nella formazione dei legami  
ricordarsi la *regola dell'ottetto*...



# ✓ Rappresentazione della configurazione elettronica

E' possibile rappresentare graficamente il posizionamento degli elettroni nei singoli orbitali atomici.



# ✓ Ordine di riempimento orbitali 4s-3d

**TABELLA 7.4** Diagrammi a caselle degli elementi nello stato fondamentale

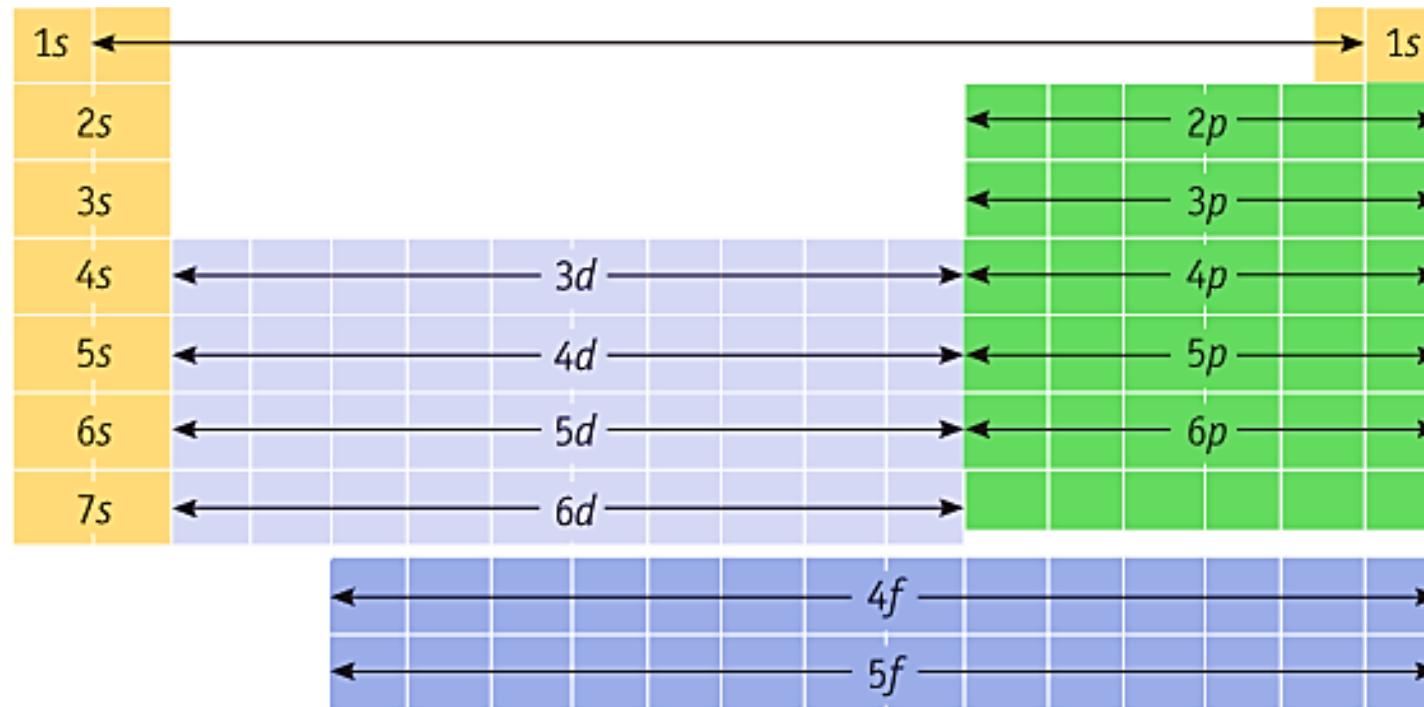
		3d	4s					
Ca	[Ar]4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></table>					<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓
↑↓								
Sc	[Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑</td><td></td><td></td><td></td></tr></table>	↑				<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓
↑								
↑↓								
Ti	[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↑</td><td></td><td></td><td></td></tr></table>	↑↑				<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓
↑↑								
↑↓								
V	[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↑↑</td><td></td><td></td></tr></table>	↑↑↑			<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓	
↑↑↑								
↑↓								
Cr*	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↑↑↑↑</td></tr></table>	↑↑↑↑↑	<table border="1"><tr><td>↑</td></tr></table>	↑			
↑↑↑↑↑								
↑								
Mn	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↑↑↑↑</td></tr></table>	↑↑↑↑↑	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓			
↑↑↑↑↑								
↑↓								
Fe	[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↓↑↑↑↑</td></tr></table>	↑↓↑↑↑↑	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓			
↑↓↑↑↑↑								
↑↓								
Co	[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↓↑↑↑↑</td></tr></table>	↑↓↑↑↑↑	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓			
↑↓↑↑↑↑								
↑↓								
Ni	[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↓↑↑↑↑</td></tr></table>	↑↓↑↑↑↑	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓			
↑↓↑↑↑↑								
↑↓								
Cu*	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↓↑↑↑↑↑↑</td></tr></table>	↑↓↑↑↑↑↑↑	<table border="1"><tr><td>↑</td></tr></table>	↑			
↑↓↑↑↑↑↑↑								
↑								
Zn	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	<table border="1"><tr><td>↑↓↑↓↑↓↑</td></tr></table>	↑↓↑↓↑↓↑	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓			
↑↓↑↓↑↓↑								
↑↓								

\*Queste configurazioni non seguono la regola “ $n + \ell$ ”.



# ❖ Configurazione elettronica e tavola periodica

C'è una forte corrispondenza tra la struttura della tavola periodica e la struttura elettronica degli atomi.



- [Yellow square] elementi del blocco s
- [Light Blue square] elementi del blocco d (elementi di transizione)
- [Green square] elementi del blocco p
- [Dark Blue square] elementi del blocco f: lantanidi ( $4f$ ) e attinidi ( $5f$ )

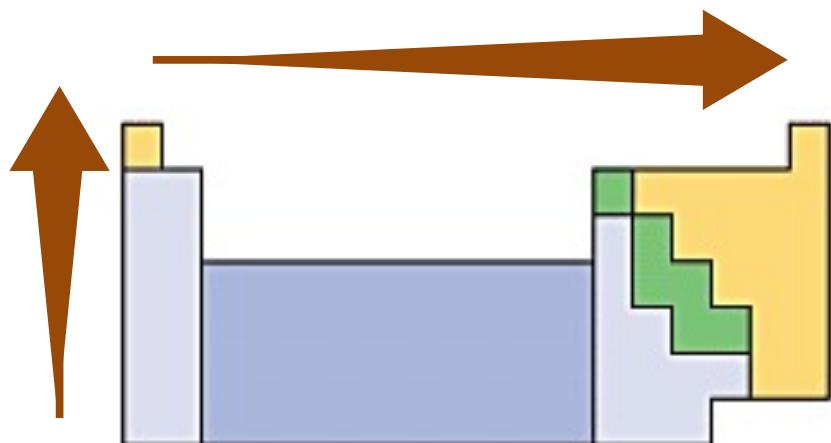


## ✓ *La carica nucleare effettiva (Z<sub>eff</sub>)*

La *carica nucleare effettiva (Z<sub>eff</sub>)* è la carica positiva netta di cui un elettrone risente tenendo conto dell'*azione di schermo* degli elettroni più interni.

Esempio: Li (litio) 1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup> Z=3 Z<sub>eff</sub>= 3-2 = 1 per l'elettrone 2s

Nella spiegazione delle proprietà periodiche, la *carica nucleare effettiva* gioca un ruolo importante.



**TABELLA 7.2** Cariche nucleari effettive, Z\*, per gli elementi con n = 2.

Atomo	Z*(2s)	Z*(2p)
Li	1.28	
B	2.58	2.42
C	3.22	3.14
N	3.85	3.83
O	4.49	4.45
F	5.13	5.10

Aumenta da sinistra verso destra lungo i periodi e si abbassa passando a un periodo successivo.



# ✓ Il raggio atomico

1A  
H, 37

1A Li, 152      2A Be, 113

Na, 186      Mg, 160

K, 227      Ca, 197

Rb, 248      Sr, 215

3A B, 83      4A C, 77

Al, 143      Si, 117

Ga, 122      Ge, 123

In, 163

5A N, 71      6A O, 66

P, 115      S, 104

As, 125      Se, 117

Sn, 141      Sb, 141

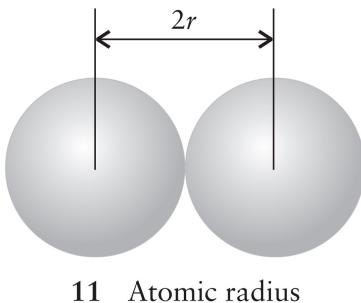
F, 71

Cl, 99

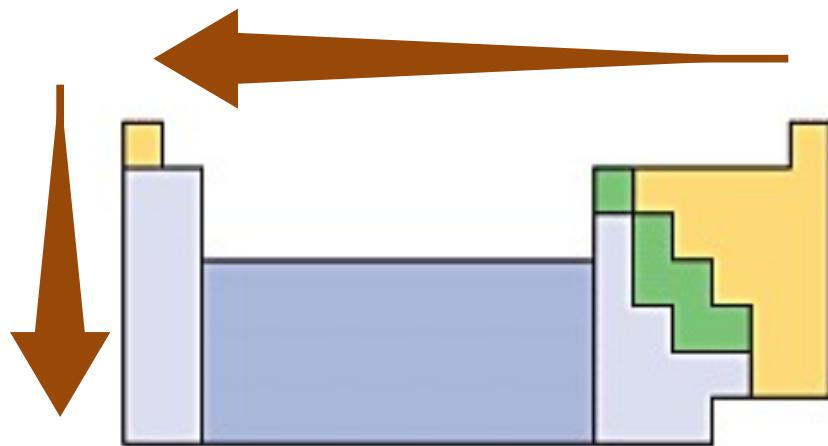
Br, 114

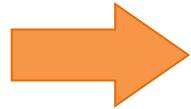
Te, 143

I, 133

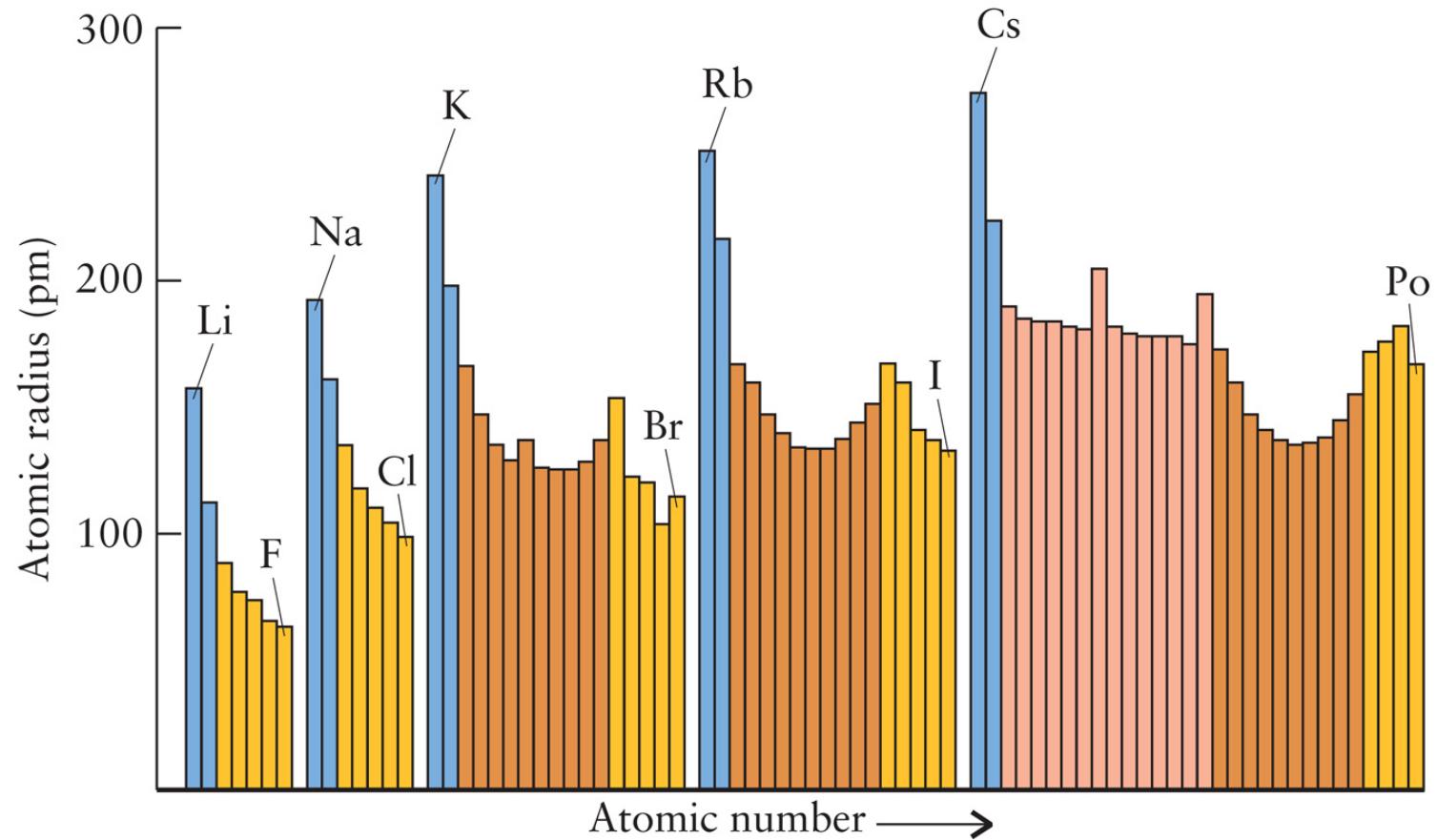


In generale diminuisce da sinistra verso destra lungo il periodo e aumenta discendendo lungo il gruppo.



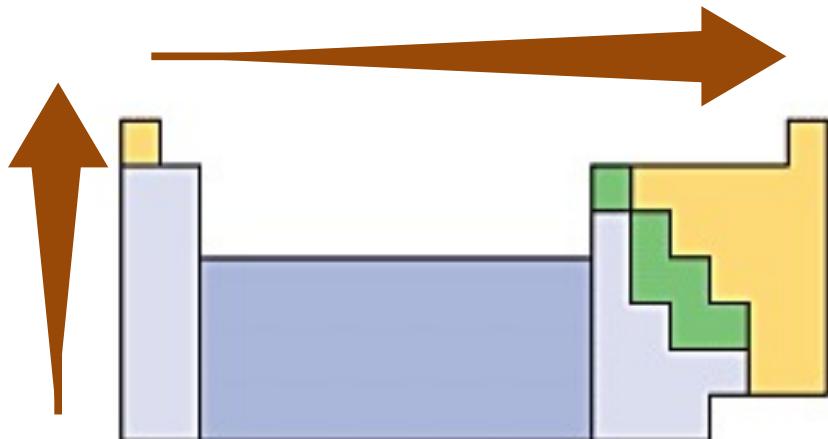


**Da notare la *periodicità* del raggio atomico !!**

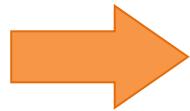
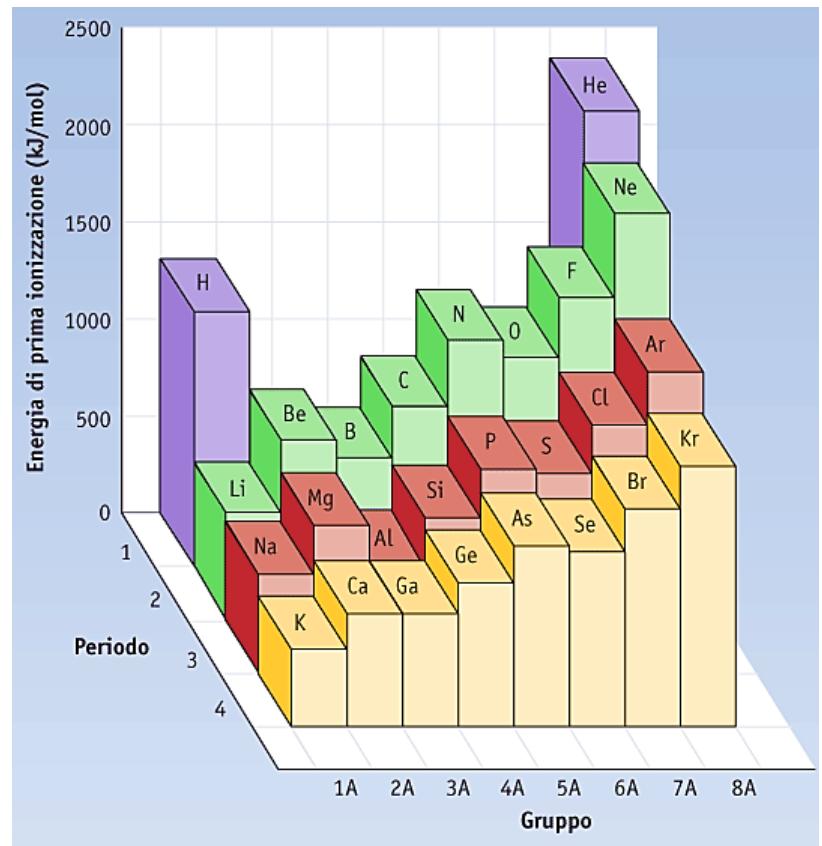


## ✓ Energia di ionizzazione

È l'energia richiesta al processo di perdita di un elettrone da parte di un atomo neutro:  $A \rightarrow A^+ + e^-$



Aumenta (molto) lungo il periodo e aumenta (poco) salendo lungo il gruppo.

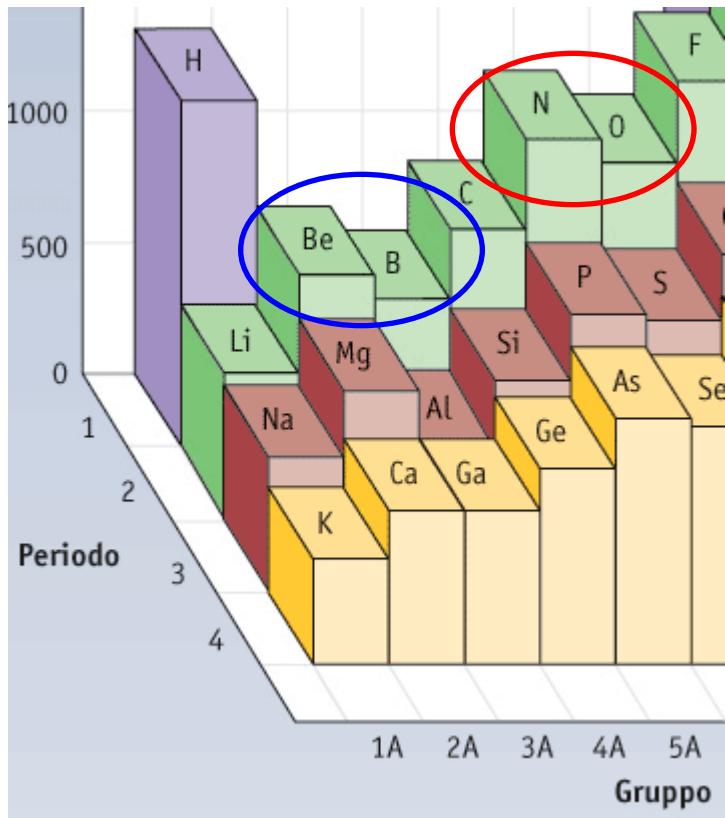


Da notare la periodicità dell'energia di ionizzazione!!





## Da notare la periodicità dell'energia di ionizzazione!!

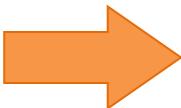


Un orbitale pieno ( $s^2$ ) è più stabile (simmetria sferica). Ecco perché il Boro ha IE < del Berillio



I tre orbitali  $p$  semipieni sono più stabili (*regola di Hund*). Ecco perché l'Ossigeno ha IE < dell'Azoto.





## Da notare la periodicità dell'energia di ionizzazione!!

Le energie di ionizzazione successive, finalizzate all'espulsione di un secondo o terzo elettrone (IE secondaria, terziaria, etc.) sono sempre nettamente superiori alla energia di ionizzazione primaria (cresce  $Z_{eff}$ ).



### ★ Carattere metallico

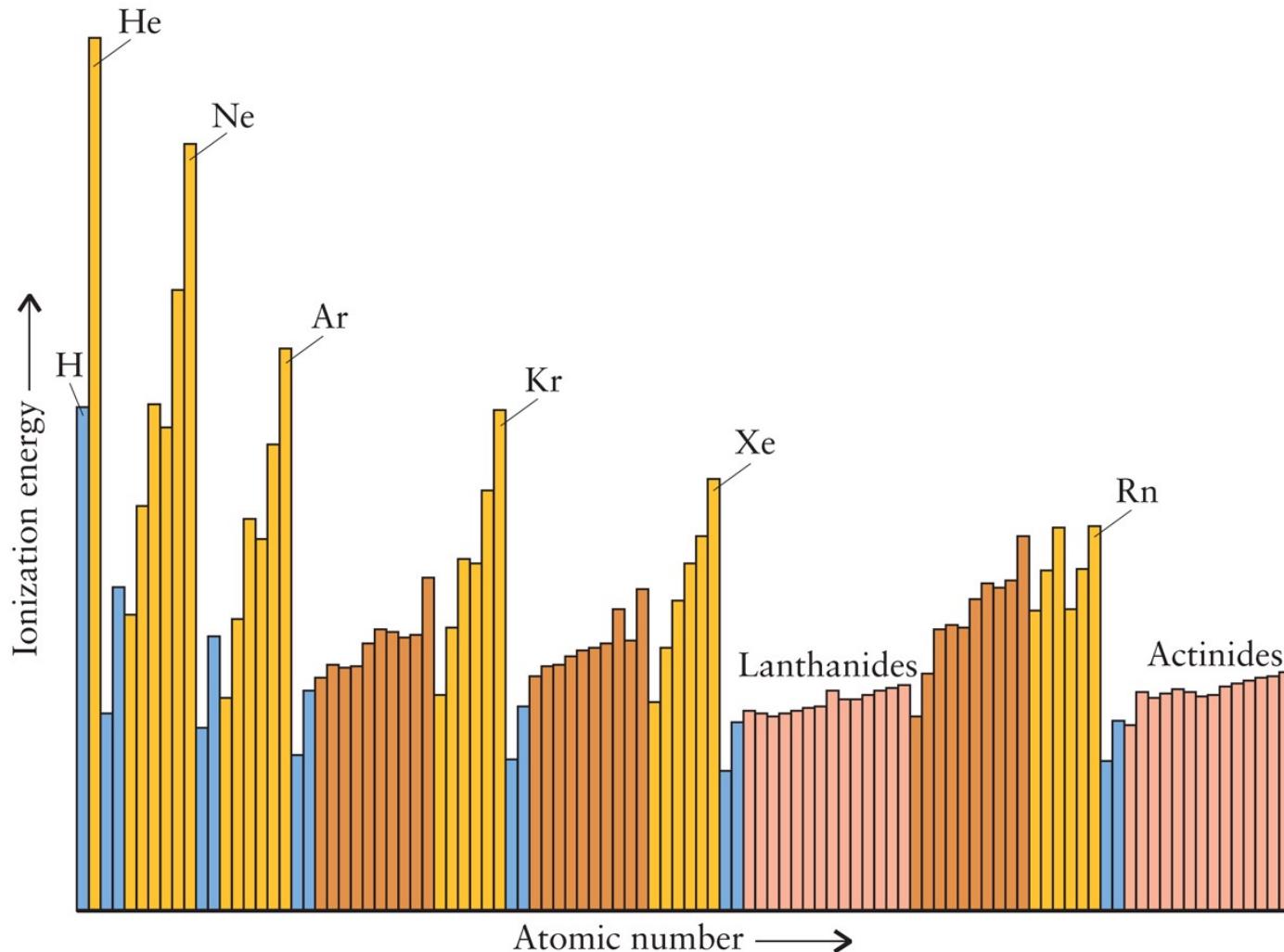
Quanto minore è IE tanto più facilmente si forma  $X^+$ , tanto maggiore è il *carattere metallico* dell'elemento (l'80% degli elementi ha carattere metallico).

Ne consegue che il **carattere metallico diminuisce lungo il periodo da sinistra a destra e aumenta lungo il gruppo dall'alto al basso.**



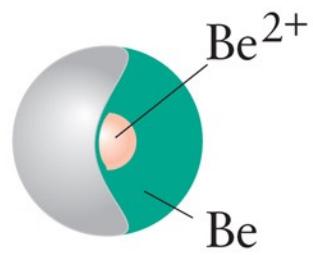
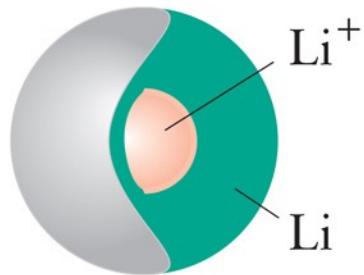


**Da notare la *periodicità* dell'energia di ionizzazione!!**

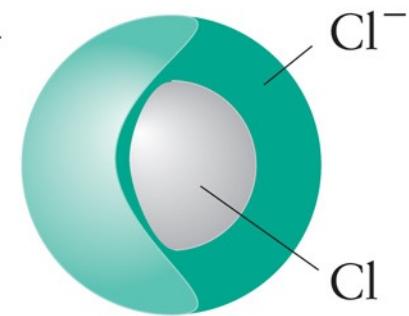
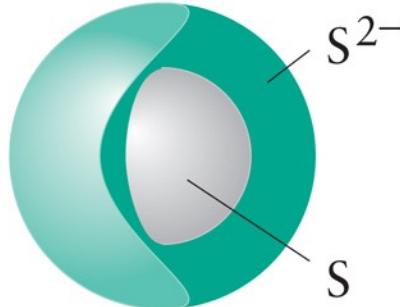
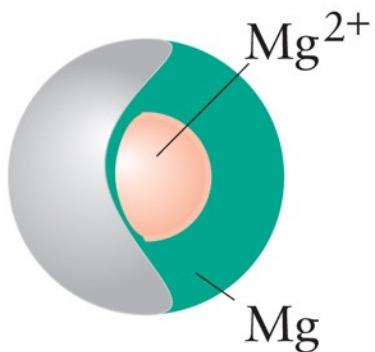
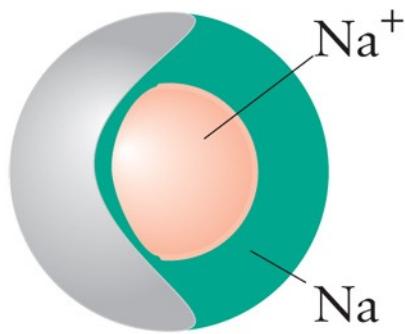
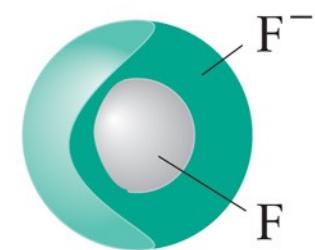
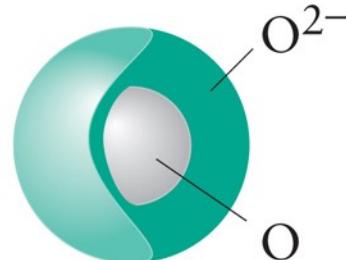


✓ Dimensioni degli ioni: cationi vs anioni

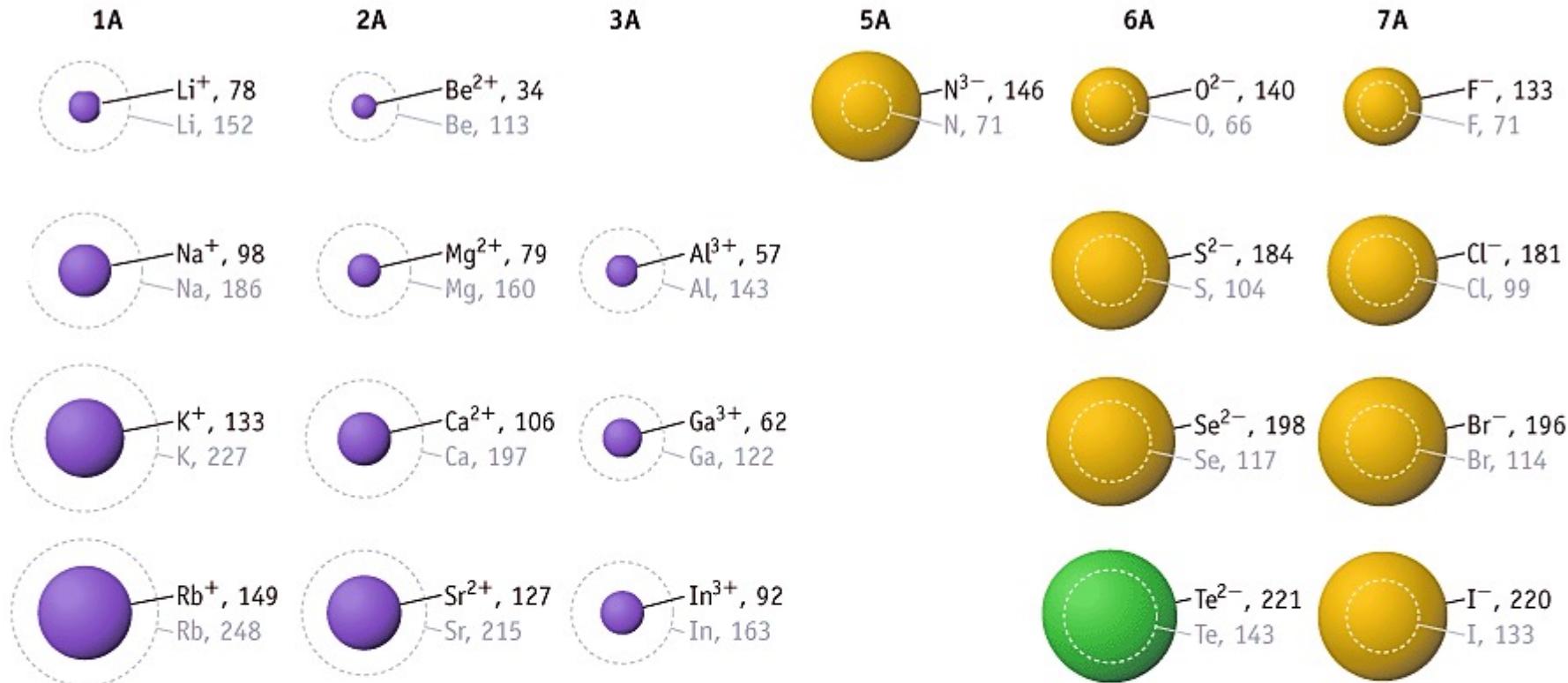
100 pm



100 pm

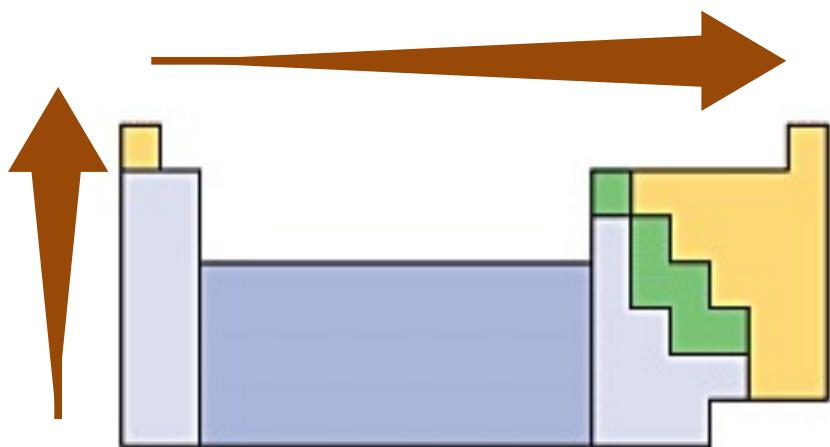
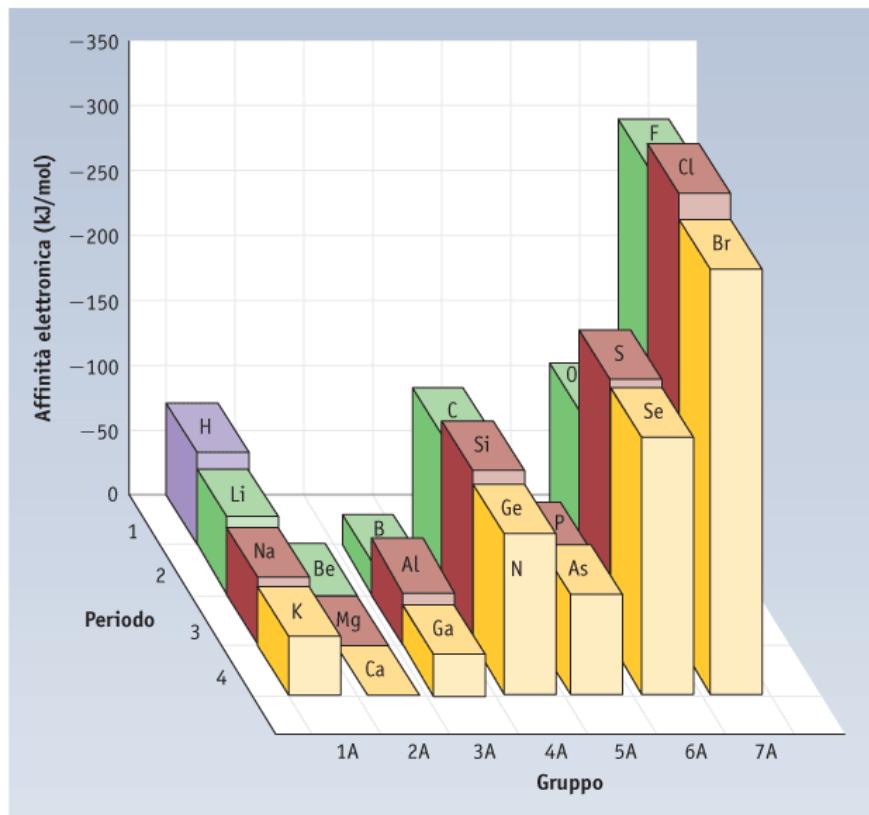


# ✓ Dimensioni degli ioni: un confronto tra gruppi



## ✓ L'affinità elettronica

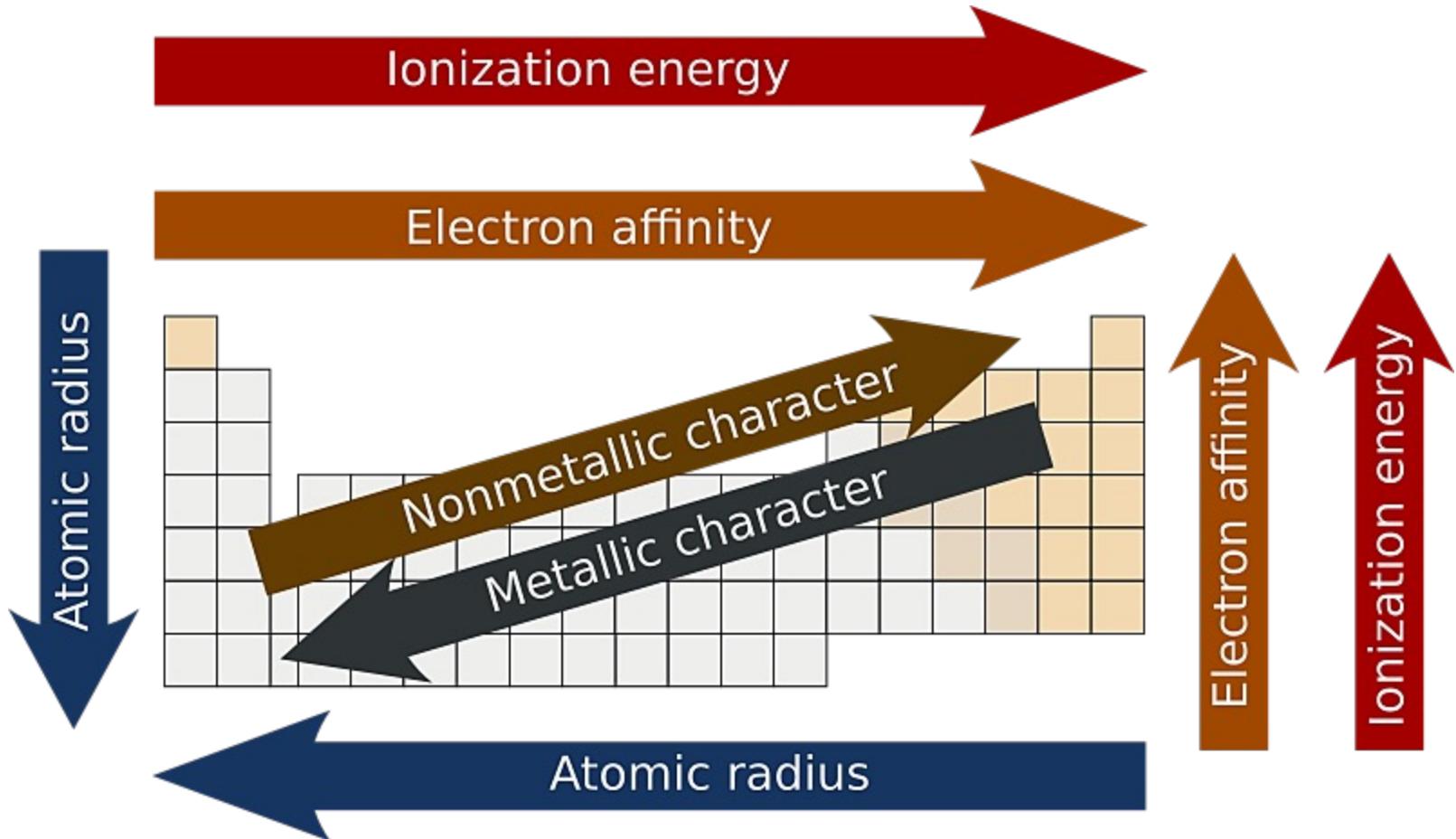
È l'energia associata alla capacità di un atomo neutro di legare a sé un elettrone nel processo:  $A + e^- \rightarrow A^-$



È particolarmente elevata nella porzione superiore destra della tavola periodica. Aumenta lungo un periodo da sinistra a destra, e lungo un gruppo dal basso all'alto.



# ◆ Riassumendo i trends delle *periodicità*:



PERIODO	GRUPPO
1	IA
2	IIA
3	III A
4	IVA
5	VVA
6	VI A
7	VIIA
8	VIB
9	VIIIB
10	VIB
11	IB
12	IIIB
13	IIIA
14	IV A
15	V A
16	VI A
17	VIIA
18	VIIA

# TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

<http://www.periodni.com/it/>

18 VIIA

2 4.0026

He

Elio

10 20.180

Ne

NEO

18 39.948

Ar

ARGO

36 83.798

Kr

CRYPTO

54 131.29

Xe

XENO

52 127.60

I

IOIO

53 126.90

Rn

RADON

86 (222)

Uuo

UNUNDIO

117 (...)

Uus

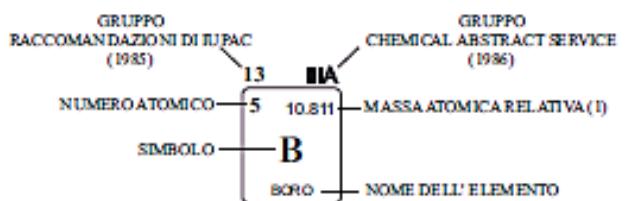
UNUNSEPTIO

118 (...)

Uuo

UNUNDIO

Copyright © 2012 Eni Generali



1 1.0079	H
1 IDROGENO	2 II A
3 6.941	4 9.0122
LITIO	BERILLIO
11 22.990	12 24.305
3 Na	Mg
SODIO	MAGNESIO
4 K	Ca
POTASSIO	CALCIO
5 Sc	Ti
SCANDIO	TITANIO
6 V	Cr
VANADIO	CROMO
7 Mn	Fe
MANGANESE	FERRO
8 Co	Ni
COBALTO	NICHEL
9 Cu	Zn
RAME	ZINCO
10 Ga	Ge
GALLIO	GERMANIO
11 In	Sn
INDIO	STACNO
12 Sb	Te
ANTIMONIO	TELLURIO
13 Tl	Pb
TALLIO	PIOMBO
14 Bi	Po
BISMUTO	POLONIO
15 At	Rn
ASTATO	RADON
16 Fr	Ra
FRANCIO	RADIO
17 Ac-Lr	Attnidi
ATTINIDI	RUTHERFORDIO
18 Rf	Dubio
DUBNIO	SEABORGIO
19 Db	Sg
DUBNIO	BOHRIO
20 Sg	Bh
SEABORGIO	HASSIO
21 Bh	Hs
BOHRIO	METTERIO
22 Hs	Mt
HASSIO	METTERIO
23 Mt	Ds
METTERIO	DARMSTADIO
24 Ds	Rg
DARMSTADIO	RENTENIO
25 Rg	Cm
RENTENIO	COPERNICIO
26 Cm	Uut
COPERNICIO	UNUNTRIO
27 Uut	Fm
UNUNTRIO	FLEROMIO
28 Fm	Uwp
FLEROMIO	UNUNPENTIO
29 Uwp	Lv
UNUNPENTIO	LIMERMORIO
30 Lv	Uus
LIMERMORIO	UNUNSEPTIO
31 Uus	Uuo
UNUNSEPTIO	UNUNDIO

(1) Pure Appl. Chem., 81, No. 11, 2131-2158 (2009)

Le masse atomiche relative sono espresse con cinque cifre significative. L'elemento non ha atomi stabili e un valore in parentesi, e.g. [209], indica il numero totale dell'isotopo lungo-vita dell'elemento. Tuttavia, tre elementi (Th, Pa ed U) hanno una composizione isotopica terrestre caratteristica e così la loro massa atomica data.

## LANTANIDI

57 138.91	58 140.12	59 140.91	60 144.24	61 (145)	62 150.36	63 151.96	64 157.25	65 158.93	66 162.50	67 164.93	68 167.26	69 168.93	70 173.05	71 174.97
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

## ATTINIDI

89 (227)	90 232.04	91 231.04	92 238.03	93 (237)	94 (244)	95 (243)	96 (247)	97 (247)	98 (251)	99 (252)	100 (257)	101 (258)	102 (259)	103 (262)
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

