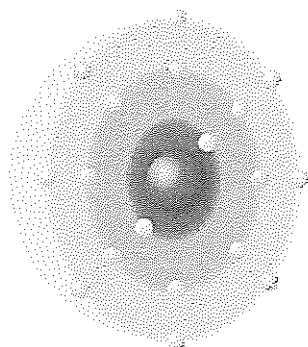
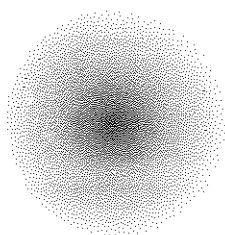


[ Gli orliti ]



■ Modello atomico planetario (o a gusci): gli elettroni ruotano intorno al nucleo percorrendo orbite prefissate.



■ Gli elettroni si muovono all'interno di un orbitale, uno spazio tridimensionale (una specie di "nuvola" elettronica) definito matematicamente (come probabilità di trovare l'elettrone in quello spazio).

## Gli orbitali: modello atomico probabilistico

Il modello atomico "planetario" o a gusci concentrici considera l'atomo come un sistema di pianeti (gli elettroni) che ruotano intorno a una stella (il nucleo) secondo orbite prefissate. In realtà, gli elettroni non si muovono lungo orbite fisse (come un treno lungo i binari), ma si allontanano e si avvicinano al nucleo, viaggiando a una velocità così elevata (prossima alla velocità della luce, circa 300.000 km al secondo), che è praticamente impossibile stabilire contemporaneamente, in un determinato istante, la loro posizione e la loro velocità (**principio di indeterminazione di Heisenberg**).

Di ogni elettrone possiamo solamente definire lo spazio tridimensionale intorno al nucleo all'interno del quale abbiamo un'elevata probabilità di trovare l'elettrone stesso. È come se l'elettrone fosse "contenuto" (con alta probabilità) all'interno di una nube (di dimensioni, forma e orientamento spaziale definiti matematicamente), che chiamiamo orbitale.

■ **L'orbitale è quindi la porzione di spazio tridimensionale disposta intorno al nucleo, all'interno della quale abbiamo un'alta probabilità (più del 90%) di trovare l'elettrone.**

## I numeri quantici

Ogni orbitale è caratterizzato da una determinata dimensione, forma e orientamento spaziale, indicati da 3 numeri interi, detti numeri quantici:

1. Il **numero quantico principale** (indicato con la lettera  $n$ ) si riferisce alle dimensioni dell'orbitale e può variare da 1 a 7 (numeri interi): la dimensione dell'orbitale aumenta con l'aumentare di  $n$ ;  $n$  identifica il livello energetico a cui appartiene ogni elettrone;
2. Il **numero quantico secondario o angolare** ( $\ell$  - elle) indica la forma dell'orbitale; esso può assumere tutti i valori interi positivi compresi tra 0 e  $n - 1$ .
  - Se  $n = 1$ , il numero quantico  $\ell$  (elle) potrà essere solo 0 (valore a cui corrisponde l'orbitale  $s$  di forma sferica);
  - se  $n = 2$ ,  $\ell$  (elle) potrà essere 0 (orbitale  $s$ , sferico) o 1 (perché  $n - 1$  con  $n = 2$  dà:  $2 - 1 = 1$ ); a  $\ell$  (elle) = 1 corrispondono gli orbitali  $p$  (di forma a doppia goccia, con l'apice verso il nucleo, vedi disegno in tabella);
  - se  $n = 3$ ,  $\ell$  (elle) può essere 0, 1 e 2 ( $\ell = 2$  corrisponde agli orbitali  $d$ , di forma più complessa);
  - se  $n = 4$ ,  $\ell$  (elle) può essere 0, 1, 2 e 3 (quest'ultimo indica gli orbitali  $f$ , ancora più complessi);
  - con  $n = 5$ , pur essendo teoricamente possibili 5 diversi tipi di orbitali, sono presenti orbitali  $s$ ,  $p$ ,  $d$  ed  $f$  come per  $n = 4$ ;
  - con  $n = 6$  sono presenti solo orbitali  $s$ ,  $p$  e  $d$  e con  $n = 7$  solo orbitali  $s$  e  $p$ . In ogni livello energetico gli orbitali hanno un contenuto energetico differente ( $s$  minore di  $p$ ,  $p$  minore di  $d$  e  $d$  minore di  $f$ ) per cui possiamo distinguere (a partire da  $n = 2$ ) diversi **sottolivelli** energetici.

### Livelli e sottolivelli

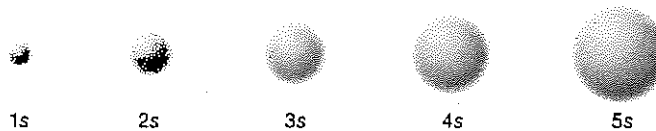
Livello ( $n$ )	Sottolivelli	
	numero	tipi
1	1	$s$
2	2	$s, p$
3	3	$s, p, d$
4	4	$s, p, d, f$
5	4	$s, p, d, f$
6	3	$s, p, d$
7	2	$s, p$

■ **Orbitale s:** in ogni livello energetico troviamo un solo orbitale s (che può contenere 0, 1 o 2 elettroni).

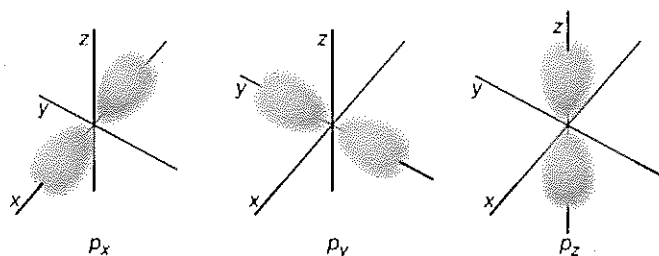
contenuto energetico

1s, 2s, 3s, 4s, 5s, 6s, 7s,

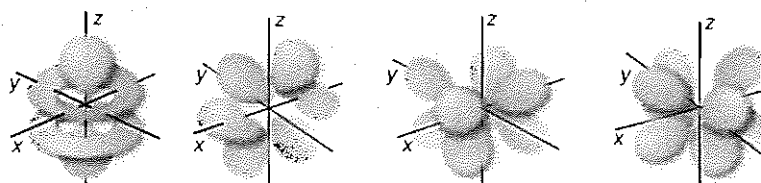
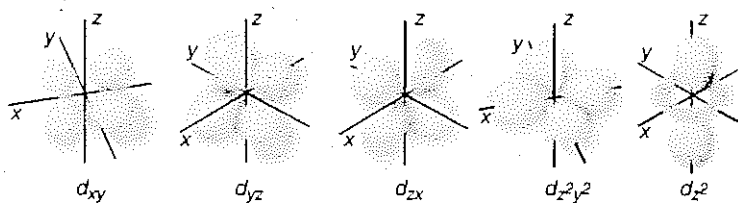
volume



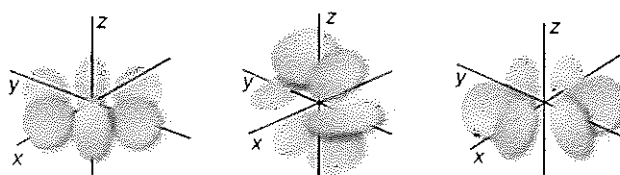
■ **Orbitali p:** a partire dal 2° livello, ogni livello presenta 3 orbitali p diversi (aventi cioè orientamento spaziale diverso), che possono contenere fino a un massimo di 6 elettroni (2 per ogni orbitale).



■ **Gli orbitali d,** presenti nel 3°, 4°, 5° e 6° livello, sono in tutto 5 e possono contenere complessivamente fino a 10 elettroni.



■ **Gli orbitali f,** presenti nel 4° e 5° livello, sono 7 e ospitano fino a 14 elettroni.





### Glossario

**Spin:** in inglese significa trottola, a indicare la rotazione dell'elettrone sul proprio asse.



### Spin

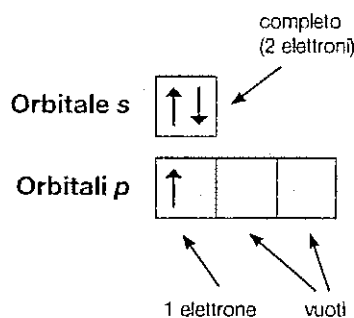
In realtà lo spin indica il diverso orientamento assunto dai due elettroni presenti in uno stesso orbitale caratterizzato dagli stessi tre numeri quantici sopra elencati, quando viene sottoposto a un campo magnetico disomogeneo.

3. Il numero quantico magnetico ( $m$ ) indica l'orientamento dell'orbitale nello spazio e può assumere tutti i valori (interi) compresi tra  $-\ell$  e  $+\ell$ , per cui:

- se  $\ell = 0$  (orbitale  $s$ , sferico),  $m = 0$  ed esiste un solo orientamento spaziale possibile (la sfera da qualunque parte la guardiamo è sempre uguale), ossia per ogni livello energetico  $n$ , esiste un solo orbitale  $s$ ;
- se  $\ell = 1$  (orbitali  $p$ , presenti solo dal secondo livello energetico  $n = 2$  in poi),  $m$  potrà essere  $-1$ ,  $0$  o  $+1$ , il che vuol dire che gli orbitali  $p$  di ogni livello sono 3, orientati diversamente nello spazio, rispetto alle 3 coordinate e vengono perciò indicati con una lettera ( $x$ ,  $y$  o  $z$ ) corrispondente alla coordinata lungo la quale sono orientati:  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$ ;
- se  $\ell = 2$  (orbitali  $d$ ),  $m$  potrà essere  $-2$ ,  $-1$ ,  $0$ ,  $+1$  e  $+2$ , per cui esisteranno 5 diversi orbitali  $d$ ;
- se  $\ell = 3$  (orbitali  $f$ )  $m$  sarà  $-3$ ,  $-2$ ,  $-1$ ,  $0$ ,  $+1$ ,  $+2$ ,  $+3$  ed esisteranno 7 diversi orbitali  $f$ .

4. Numero quantico di spin ( $m_s$ ): un altro numero quantico, detto di *spin*, può assumere solo due valori:  $+1/2$  o  $-1/2$ ; secondo il modello dell'elettrone rotante, lo spin indica il senso di rotazione dell'elettrone sul proprio asse, in senso orario o in senso antiorario. Due elettroni che hanno la stessa serie di numeri quantici  $n$ ,  $\ell$  e  $m$  (ossia che occupano lo stesso orbitale) non possono avere lo stesso numero quantico di spin (principio di esclusione di Pauli), devono cioè avere **spin opposto**. Ogni orbitale può essere pertanto occupato al massimo da due elettroni i quali devono avere spin opposto.

■ Gli orbitali vengono rappresentati graficamente mediante quadratini: uno per l'orbitale  $s$ , tre uniti in fila per gli orbitali  $p$ , cinque per gli orbitali  $d$  e sette per gli orbitali  $f$ . Gli elettroni vengono rappresentati da frecce verticali. Ogni orbitale può contenere 0, 1 o 2 elettroni. Il verso della freccia (la sua punta) indica lo spin. Se l'orbitale è occupato da due elettroni, le due frecce che li rappresentano sono parallele, ma il verso è opposto, antiparallelo, a indicare lo spin opposto.



## Configurazione elettronica

L'elettrone, dotato di carica elettrica negativa, è attratto dal nucleo (positivo), dal quale può allontanarsi in funzione dell'energia che possiede: più energia possiede e tanto più riesce ad allontanarsi dal nucleo.

Pertanto la dimensione dell'orbitale è proporzionale al contenuto energetico degli elettroni in esso contenuti. Il numero quantico principale  $n$  definisce la dimensione e il contenuto energetico dell'orbitale.

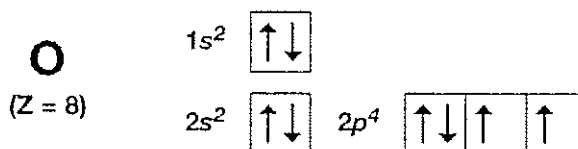
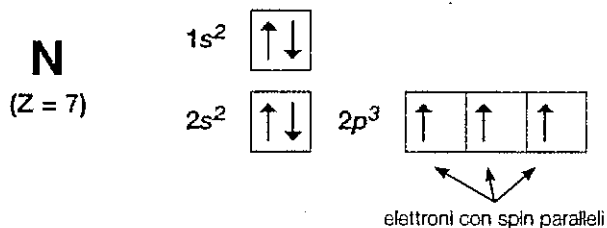
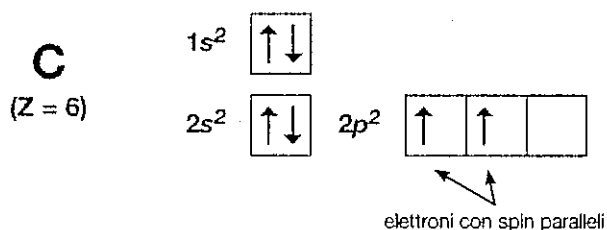
Negli atomi che possiedono più di un elettrone, all'azione attrattiva del nucleo si somma anche l'azione di repulsione reciproca degli elettroni (cariche di ugual segno si respingono), per cui in uno stesso livello energetico gli orbitali *s* hanno un contenuto energetico inferiore agli orbitali *p*, gli orbitali *p* inferiore agli orbitali *d* e questi ultimi inferiore agli orbitali *f*. Quando il numero di elettroni è elevato (dal 4° livello energetico in poi) può capitare che un orbitale appartenente a un livello energetico inferiore (per esempio un orbitale *3d*) abbia un contenuto energetico superiore a un orbitale (di diverso tipo) appartenente a un livello energetico superiore (nell'esempio, *4s*).

Nel suo stato fondamentale, ogni atomo dispone gli elettroni all'interno degli orbitali in ordine crescente di energia.

**Per stato fondamentale (o stazionario) di un atomo si intende la condizione di minima energia che contraddistingue l'atomo, in contrapposizione allo stato eccitato, nel quale gli elettroni, assorbendo energia, possono passare a livelli energetici superiori, per poi ritornare allo stato fondamentale (emettendo l'energia assorbita sotto forma di fotoni).**

Gli elettroni appartenenti allo stesso sottolivello (*p*, *d* o *f*), nella condizione di maggior stabilità dell'atomo (condizione di minor energia), tendono ad assumere spin parallelo (regola di Hund) e, poiché in un orbitale possono "convivere" due elettroni solo se hanno spin opposto (antiparallelo), ogni orbitale del sottolivello viene prima occupato da un solo elettrone e il secondo elettrone completa l'orbitale solo se prima tutti gli orbitali del sottolivello contengono già un elettrone.

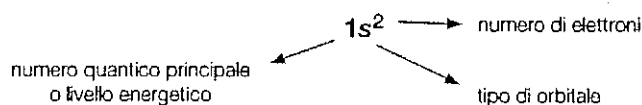
■ I sottolivelli *p*, *d* e *f*, costituiti rispettivamente da 3, 5 e 7 orbitali, devono essere riempiti inserendo prima un solo elettrone per orbitale e solo dopo aver occupato con un elettrone tutti gli orbitali del sottolivello si inserisce il secondo elettrone nell'orbitale (con spin anti-parallelo): sono qui rappresentati gli atomi di carbonio (C, numero atomico 6), azoto (N, 7) e ossigeno (O, 8).



La distribuzione degli elettroni di un atomo all'interno degli orbitali dei diversi livelli viene definita **configurazione elettronica dell'atomo**.

Ogni orbitale viene identificato indicando il numero quantico principale (il livello a cui appartiene l'orbitale) seguito dalla lettera che indica il tipo di orbitale (*s*, *p*, *d* o *f*), riportando come esponente il numero di elettroni contenuti in quel tipo di orbitale (1 o 2, per *s*; da 1 a 6 per *p*; da 1 a 10 per *d* e da 1 a 14 per *f*).

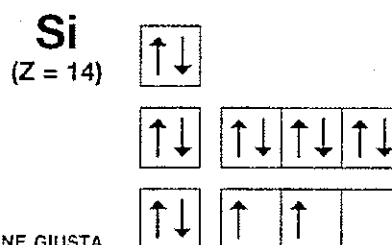
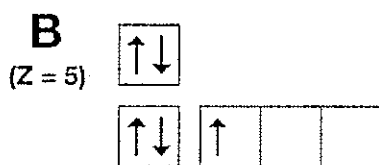
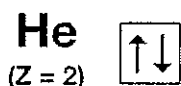
Così la configurazione elettronica dell'atomo di elio (He, numero atomico 2, possiede due elettroni) è:



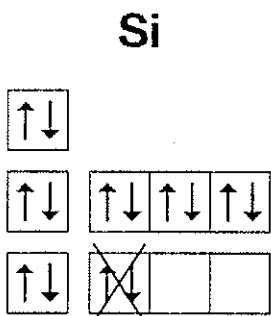
Quella del boro (B, numero atomico 5):  $1s^2 2s^2 2p^1$

Quella del silicio (Si, numero atomico 14):  $1s^2 2s^2 2p^2 3s^2 3p^2$

Se rappresentiamo gli orbitali con i quadratini e gli elettroni con le frecce verticali, la configurazione dei tre atomi sopra elencati sarà:



CONFIGURAZIONE GIUSTA



CONFIGURAZIONE SBAGLIATA

Rispettando la **regola di Hund**, gli elettroni (due) del sottolivello *3p* del silicio si dispongono paralleli uno per orbitale e non entrambi in un solo orbitale. La rappresentazione riportata a lato è perciò sbagliata.

Da quanto detto prima, possiamo indicare le seguenti **regole di riempimento degli orbitali**:

- ogni orbitale può contenere non più di due elettroni;
- vengono riempiti per primi gli orbitali del primo livello, poi quelli del secondo, del terzo e così via, tenendo presente che di ogni livello vengono riempiti prima gli orbitali *s* (a minor contenuto energetico), poi gli orbitali *p* (presenti dal secondo livello energetico in poi), poi gli orbitali *d* e, infine, gli orbitali *f*;
- esiste un solo orbitale *s* per ogni livello, che può contenere fino a due elettroni; dal secondo livello al settimo troviamo gli orbitali *p*: 3 per livello, possono contenere in totale fino a un massimo di 6 elettroni; dal terzo al sesto livello troviamo gli orbitali *d* (5 per livello, contengono in totale fino a 10 elettroni); al quarto e al quinto livello troviamo 7 orbitali *f* (che possono contenere fino a 14 elettroni);

4. il riempimento degli orbitali *p*, *d* ed *f* rispetta la regola di Hund, per cui prima si riempiono con un solo elettrone tutti gli orbitali di un sottolivello poi si aggiunge il secondo elettrone a ogni orbitale;
5. l'ordine di riempimento degli orbitali (sottolivelli) *d* ed *f* si incrocia con l'ordine di riempimento dei rispettivi livelli, per cui gli orbitali *d* di un livello (dal terzo al sesto) vengono riempiti dopo l'orbitale *s* del livello successivo:
  - *3d* viene dopo *4s* (la sequenza è: *4s 3d 4p...*)
  - *4d* dopo *5s*
  - *5d* dopo *6s* (e dopo *4f*)
  - *6d* dopo *7s* (e dopo *5f*)
6. Gli orbitali *f* (*4f* e *5f*) vengono riempiti subito prima del sottolivello *d* appartenente al livello successivo:
  - *4f* prima di *5d*
  - *5f* prima di *6d*

Integrando tutte queste regole, risulterà il seguente ordine di riempimento degli orbitali:

**1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p**

Il numero degli elettroni presenti nel sottolivello va indicato (come se fosse un esponente) alla destra della lettera che indica l'orbitale.

Nella rappresentazione a quadratini va ricordata anche la regola di Hund.

