

Struttura Atomica

1900 inizi: Thomson sperimentalmente determina la presenza all'interno degli atomi di **elettroni** (particelle negative) e di ioni positivi. **Modello atomico:** atomo come una sfera di diametro dell'ordine del nanometro (10^{-9} m) dotata di carica positiva uniforme con gli elettroni distribuiti casualmente al suo interno

1900 inizi: a Rutherford viene attribuita la scoperta del nucleo (1911). Stabilisce che l'atomo è fondamentalmente vuoto con una parte centrale (nucleo) più densa e di carica positiva attorno al quale si muovono gli elettroni.

1913: Bohr propone il suo modello basato su una serie di postulati

- Stato stazionario: un sistema atomico può esistere solo con livelli discreti di energia (variazione non continua dell'energia) ottenuti imponendo la quantizzazione del momento angolare (forma generale ricavata da Sommerfeld – 1917). Ad ogni stato stazionario corrisponde un orbita circolare (o ellittica – Sommerfeld) dell' e^- attorno al nucleo.
- Nella transizione da uno stato stazionario ad un altro l' e^- può perdere o acquistare energia. Se l' e^- passa da un livello E_1 a un livello E_2 con $E_1 > E_2$ l' atomo perde energia come radiazione (fotone) con frequenza ν tale che

$$E_1 - E_2 = h\nu$$

G. Sotgiu

Struttura Atomica

Teoria ondulatoria della luce

1700 – 1800: La luce è un fenomeno ondulatorio

1873 : Maxwell sviluppa la teoria del campo elettromagnetico

onde elettromagnetiche costituite da un campo elettrico e da un campo magnetico che oscillano su piani perpendicolari

Frequenza della radiazione: ν numero di cicli completi al secondo, unità di misura Hz (Hertz) $\Rightarrow 1 \text{ Hz} = 1 \text{ ciclo al secondo}$

luce visibile $\nu \approx 5 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$

Ampiezza: Φ altezza massima dell'onda

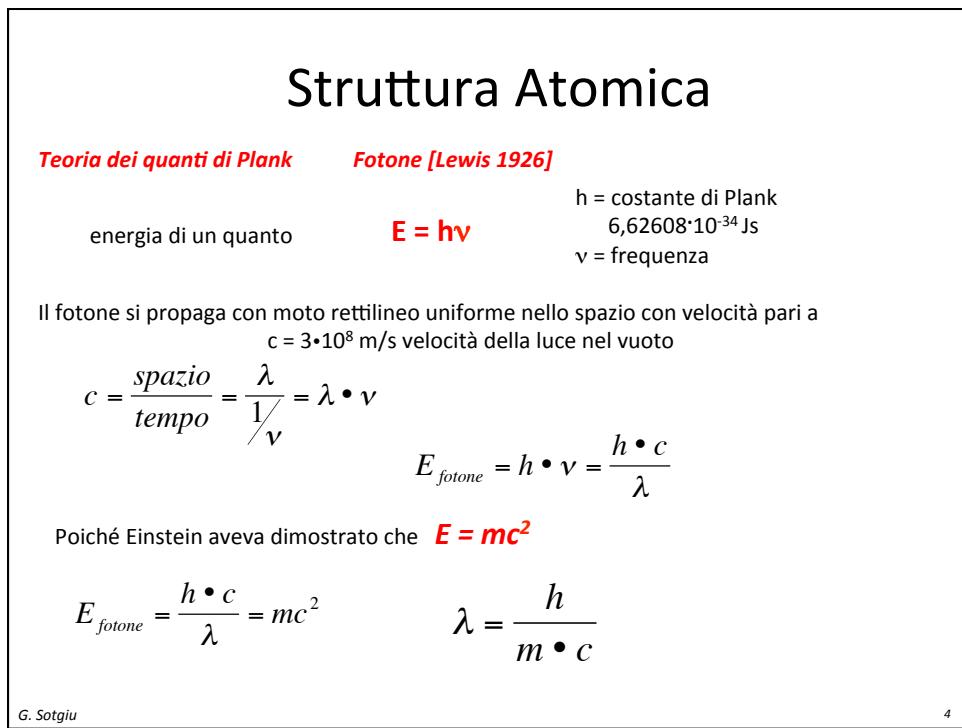
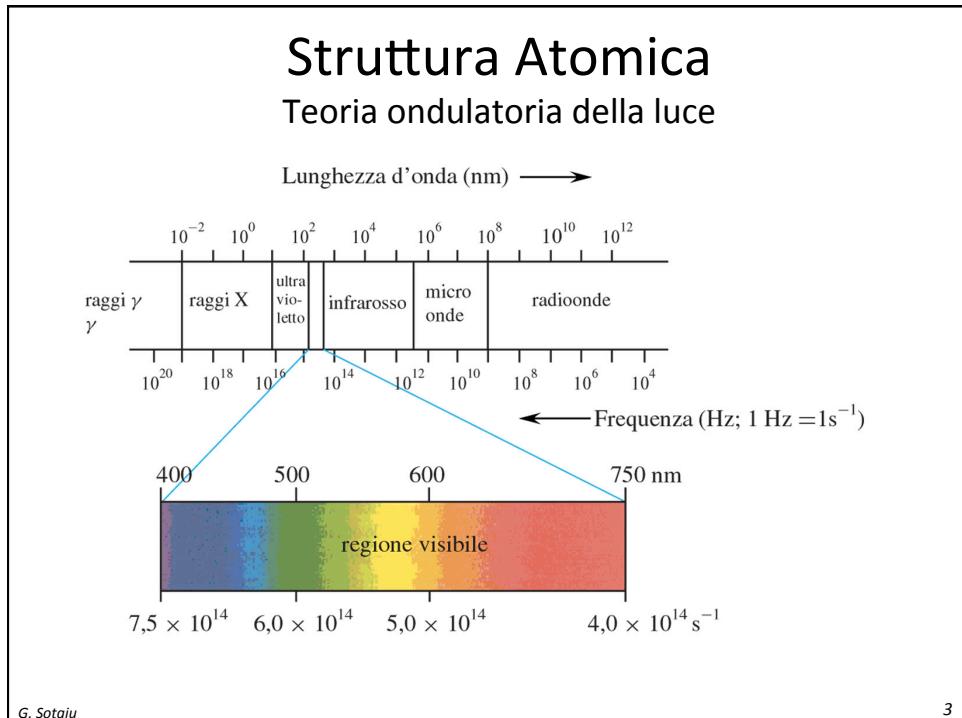
Lunghezza d'onda: λ distanza tra due picchi successivi

luce visibile: $\lambda \approx 500 \text{ nm}$ ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) (l'occhio umano vede tra 700 nm [rosso] e 400 nm [violetto])

$\nu \cdot \lambda = c$

G. Sotgiu

2



Struttura Atomica

Teoria di De Broglie [1924]

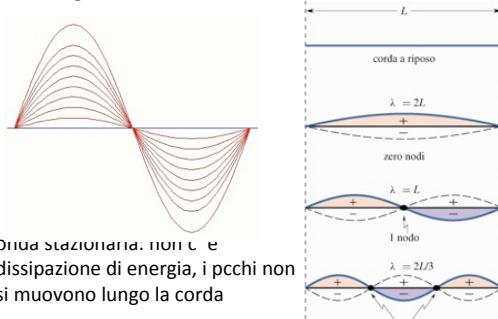
particelle dotate di massa ed in movimento possono avere proprietà ondulatorie

Per un corpo dotato di massa m e velocità v

$$\lambda = h/m \cdot v$$

Particelle pesanti hanno lunghezze d'onda molto corte che non possono essere osservate

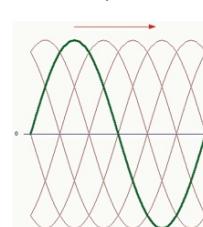
lunghezza d'onda dell'onda stazionaria associata al moto della particella di massa m



Onde STAZIONARIE. NON C'è dissipazione di energia, i picchi non si muovono lungo la corda

Il postulato di De Broglie ha come conseguenza la quantizzazione del momento angolare e dei livelli energetici dell'atomo di idrogeno

G. Sotgiu



per la vibrazione a più bassa energia (fondamentale) esiste una sola possibile vibrazione ==> $n = 1$

- per $n = 1$ non vi sono nodi (ampiezza = 0)
- al crescere di n cresce il numero di nodi pari a $(n-1)$
- permessi solo alcuni modi di vibrare

5

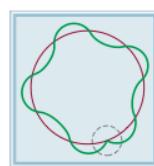
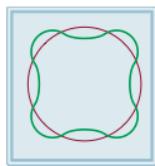
Struttura Atomica

Teoria di De Broglie [1924]

✓ Ci possono essere solo alcune lunghezze d'onda per ciascuno dei modi permessi della corda (per stazionarietà)

✓ Esistenza di stati discreti e di valori discreti di energia come naturale conseguenza del confinamento di un oggetto con natura ondulatoria in una regione finita dello spazio

Se l'elettrone si comporta come un'onda stazionaria nell'atomo di idrogeno, allora la lunghezza d'onda deve stare esattamente dentro l'orbita.



$$2\pi r = n\lambda \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

$$2\pi r = nh/m \cdot v$$

$$\lambda = h/m \cdot v$$

$$mvr = nh/2\pi$$

Il postulato di De Broglie ha come conseguenza la quantizzazione del momento angolare e dei livelli energetici dell'atomo di idrogeno

G. Sotgiu

6

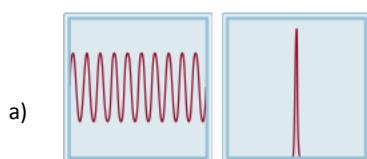
Struttura Atomica

Principio di Indeterminazione di Heisemberg [1926]

Un' onda si estende su una regione dello spazio: come localizzarla?

Non è possibile determinare simultaneamente ed accuratamente la posizione e il momento di una particella di massa m

$$\Delta x \bullet \Delta mv \geq h/4\pi$$



dove
 Δx = incertezza sulla posizione
 Δmv = incertezza sul momento

- a) un'onda è estesa su una ampia porzione di spazio , con una lunghezza d'onda ben definita. Quindi piccola incertezza sul momento (lunghezza d'onda), ma ampia incertezza su posizione
- b) si ha una elevata localizzazione nella posizione (Δx molto piccolo) ma la lunghezza d'onda è difficilmente definibile (ampia incertezza sul momento).

Struttura Atomica

Principio di Indeterminazione di Heisemberg [1926]

è impossibile attribuire all'elettrone un moto tipo orbita ben definito



L'Equazione di Schrödinger [1926]

Describe le proprietà ondulatorie dell'elettrone: posizione, massa, E totale, E potenziale

Ψ = funzione d'onda descrive l'onda associata all'elettrone nello spazio
 descrive un orbitale atomico

$$H\Psi = E\Psi$$

H = operatore Hamiltoniano
 E = energia dell'elettrone

Differenti orbitali hanno differenti Ψ e quindi differenti E



<https://www.youtube.com/watch?v=LXf35oISYcw>

Struttura Atomica 2

L'Equazione di Schrödinger [1926]

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right] \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$$

Energia Cinetica

Energia Potenziale

$$V = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

h = costante di Planck

m = massa della particella

E = Energia totale del sistema

e = carica dell'elettrone

$(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} = r$ = distanza dal nucleo

Z = carica del nucleo

$4\pi\epsilon_0$ = permittività del vuoto

Struttura Atomica

L'Equazione di Schrödinger [1926]

Esistono infinite soluzioni dell'eq. di Schrödinger, ciascuna descrive un elettrone in un orbitale atomico

Il significato di Ψ

- Ψ non ha un significato fisico, è solo un'espressione matematica
- Ψ^2 = probabilità di trovare l'elettrone in un dato punto dello spazio
 - Se si considera tutto lo spazio allora $\Psi^2 = 100\%$
 - Se si considera dove l'elettrone sta per il 90% del tempo, Ψ^2 = orbitale atomico

Vincoli fisici su Ψ

- Ψ deve avere un solo valore perché un dato elettrone ha una sola energia
- Ψ ed Ψ^2 devono essere continue perché l'elettrone non può "saltare"
- $\Psi \rightarrow 0$ come $r \rightarrow \infty$ perché la probabilità deve decrescere allontanandosi
- La probabilità totale di trovare l'elettrone deve essere = 1

G. Sotgiu

11

Struttura Atomica

L'Equazione di Schrödinger [1926]

Funzioni d'onda atomiche

Risoluzione matematica per l'atomo H: nucleo carico + ed un elettrone -

Si ottengono soluzioni contenenti 4 parametri detti numeri quantici

Regole di selezione

Simbolo	Nome	Valori	Ruolo
n	Principale	1,2, 3,...	Determina la maggior parte dell'energia
ℓ	Angolare	0, 1, 2,...,n - 1	Describe la dipendenza angolare e contribuisce all'energia
m	Magnetico	$0, \pm 1, \pm 2, \pm l$	Describe l'orientazione nello spazio (momento angolare nella direzione z)
m_s	Spin	$\pm \frac{1}{2}$	Describe l'orientazione dello spin elettronico nello spazio (momento magnetico)

Se non è presente un campo magnetico, tutti i valori di m hanno la stessa energia ed anche entrambi i valori di m_s

G. Sotgiu

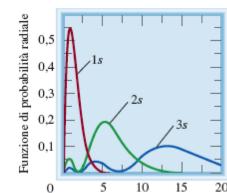
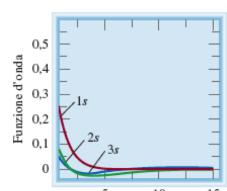
12

Struttura Atomica

Forma degli orbitali atomici nell'atomo di idrogeno

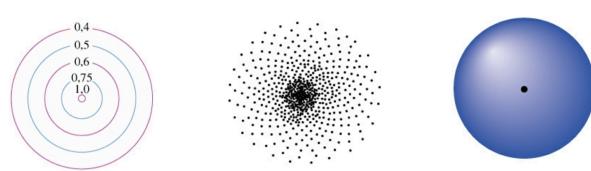
La forma degli orbitali, e quindi la distribuzione spaziale della probabilità di trovare l'elettrone in un punto attorno al nucleo, dipende dai valori dei numeri quantici

Rappresentazione grafica



G. Sotgiu.

13



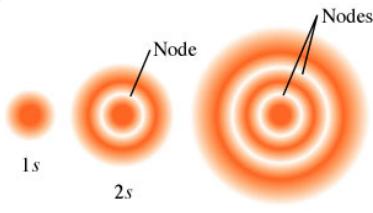
Superficie limite: superficie che contiene il 90% della densità elettronica totale (definita come ψ^2).

Struttura Atomica

Forma degli orbitali atomici nell'atomo di idrogeno

$\ell = 0$

orbitale tipo *s*



(a)

contenuto energetico

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

volume

1s

2s

3s

4s

5s

G. Sotgiu

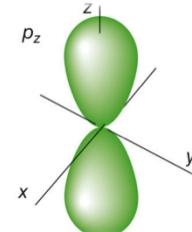
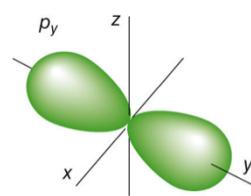
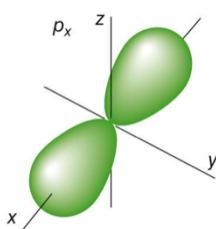
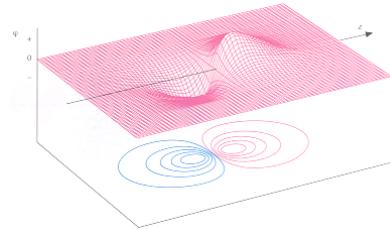
14

Struttura Atomica

Forma degli orbitali atomici nell'atomo di idrogeno

$$\ell = 1 \quad m = 1, 0, -1 \quad \text{orbitale tipo } p$$

- Non hanno simmetria sferica
- Sono definiti dalla parte angolare della funzione d'onda
- La lettera in pedice indica l'asse lungo il quale sono orientati gli orbitali
- Contiene un piano nodale perpendicolare all'asse lungo il quale l'orbitale è orientato



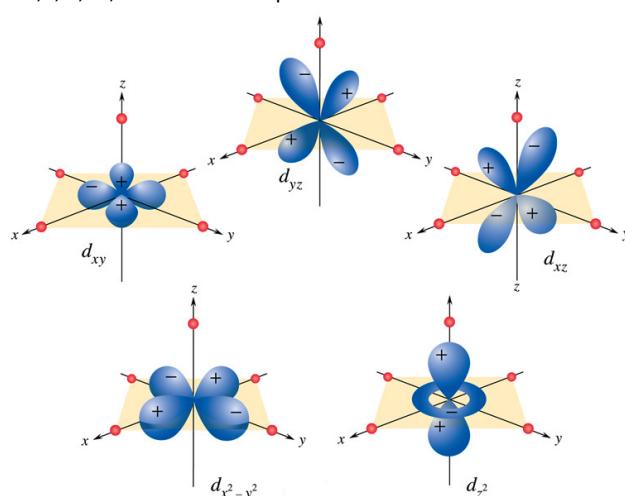
G. Sotgiu

15

Struttura Atomica

Forma degli orbitali atomici nell' atomo di idrogeno

$$\ell = 2 \quad m = 2, 1, 0, -1, -2 \quad \text{orbitale tipo } d$$



G. Sotgiu

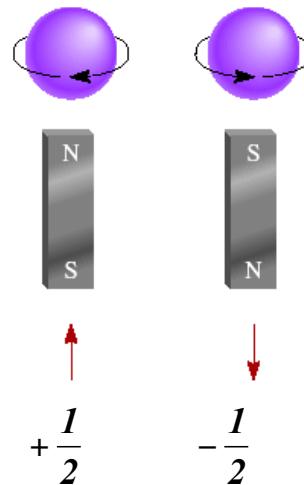
16

Struttura Atomica

Spin elettronico

Numero quantico di spin elettronico (m_s):

$$m_s = +\frac{1}{2} \text{ o } -\frac{1}{2}$$



G. Sotgiu

17

Struttura Atomica

Orbitali atomici nell' atomo di idrogeno

N° quantico ℓ	0	1	2	3	4	5	6
sottolivello	s	p	d	f	g	h	i
valore di n (numero)	Simbolo orbitale			Numeri quantici			Numero orbitali n^2
	1s	1	0	0			1
	2s	2	0	0	1		4
	2p	2	1	0, ±1	3		
	3s	3	0	0	1		9
	3p	3	1	0, ±1	3		
	3d	3	2	0, ±1, ±2	5		
	4s	4	0	0	1		16
	4p	4	1	0, ±1	3		
	4d	4	2	0, ±1, ±2	5		
	4f	4	3	0, ±1, ±2, ±3	7		

G. Sotgiu

18

Struttura Atomica

Orbitali atomici nell' atomo di idrogeno

N° quantico ℓ	0	1	2	3	4	5	6
sottolivello	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>	<i>i</i>

Per l'atomo di idrogeno l'energia dipende solo da ***n***, per cui tutti gli orbitali dello stesso guscio hanno la stessa energia (es: 3s, 3p, 3d)

Energia degli orbitali: **QUANTIZZAZIONE!!**
il valore dell'energia di un orbitale è, in modulo, il valore dell'energia necessaria a portare l'elettrone a distanza infinita rispetto al nucleo

E ha valori sempre negativi
 $E \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$ per $n \rightarrow \infty$

↑
E
1s —
2s — 2p ——
3s — 3p —— 3d —————

G. Sotgiu 19

Struttura Atomica

1890: Balmer e Rydberg descrivono lo spettro di emissione dell'idrogeno

Luce bianca Spettro continuo

Gas eccitato Spettro di emissione

$E = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_h^2} \right)$

$n_h = \text{intero} > 2$
 $R_H = \text{costante di Rydberg} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu}$

$h = \text{costante di Planck's} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
 $\nu = \text{frequenza della luce s}^{-1}$
 $c = \text{velocità della luce} = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$
 $\lambda = \text{lunghezza d'onda nm}$
 $\bar{\nu} = \text{numero d'onda cm}^{-1}$

$n = \text{numero quantico principale} = \text{le energie permesse per gli elettroni dell'atomo di H sono discrete}$

Costante di Rydberg Ry $10973731.534 \pm 0.013 \text{ m}^{-1}$
Costante di Rydberg in Hz $3.2898419499 \times 10^{15} \pm 3.9 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$
Costante di Rydberg in joule $2.1798741 \times 10^{-18} \pm 1.3 \times 10^{-24} \text{ J}$
Costante di Rydberg in eV $13.6056981 \pm 4.0 \times 10^{-6} \text{ eV}$

G. Sotgiu 20

Struttura Atomica

Orbitali atomici per atomi poli-elettronici

- TIPO orbitali
 - FORMA orbitali
 - DIMENSIONE orbitali
- ≈ orbitali idrogeno

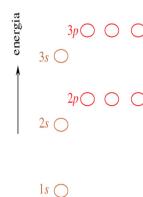
Per atomi multi-elettronici le energie sono in parte determinate anche da 

Sequenza energetica orbitali

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \approx 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s \dots$



Orbitali sullo stesso livello di energia sono detti *degeneri*



G. Sotgiu

21

Struttura Atomica

Configurazione Elettronica

Rappresenta la distribuzione degli elettroni nei vari orbitali per un dato atomo cioè fornisce le combinazioni di numeri quantici che permettono di definire le funzioni d'onda associate agli elettroni costituenti l'atomo.

TRE principi:

- 1) Scala di energia: gli e^- sono collocati su orbitali per dare la più bassa energia
 - Si riempiono prima i più bassi valori di n e l
 - i valori di m_l e non influenzano l'energia
- 2) Principio di esclusione di Pauli = ogni e^- ha un unico set di numeri quantici
Almeno un num. quantico deve essere differente: 2 e^- sullo stesso orbitale devono avere $m_s = +/\sqrt{2}$
- 3) Regola di Hund: gli e^- collocati su orbitali degeneri, devono avere il massimo valore di spin possibile

Number of electrons	Arrangement	Unpaired e^-
1	↑	1
2	↑↑	2
3	↑↑↑	3
4	↑↑↑↑	2
5	↑↑↑↑↑	1
6	↑↑↑↑↑↑	0

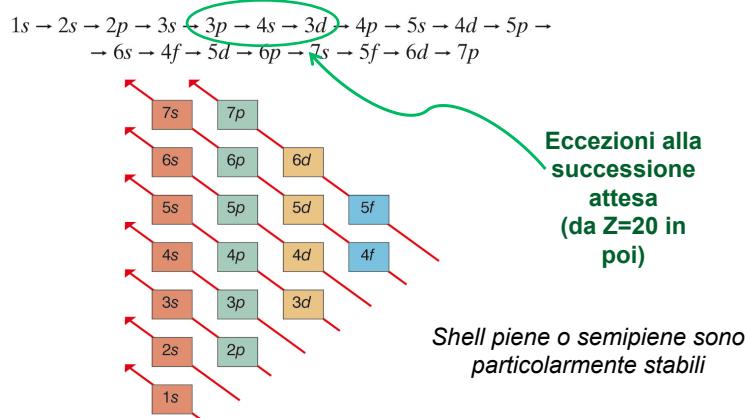
G. Sotgiu

22

Struttura Atomica

Riempimento degli orbitali atomici

Ordine di riempimento degli orbitali in base all'energia crescente:



G. Sotgiu

23

Struttura Atomica

Aufbau

Atomo di Ossigeno (O), Z=8

2p	<table border="1"><tr><td>↑↓</td><td>↑</td><td>↑</td></tr></table>	↑↓	↑	↑
↑↓	↑	↑		
2s	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓		
↑↓				
1s	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓		
↑↓				
$1s^2 2s^2 2p^4$				

Atomo di sodio (Na), Z=11

3s	<table border="1"><tr><td>↑</td></tr></table>	↑		
↑				
2p	<table border="1"><tr><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓	↑↓	↑↓
↑↓	↑↓	↑↓		
2s	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓		
↑↓				
1s	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓		
↑↓				

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

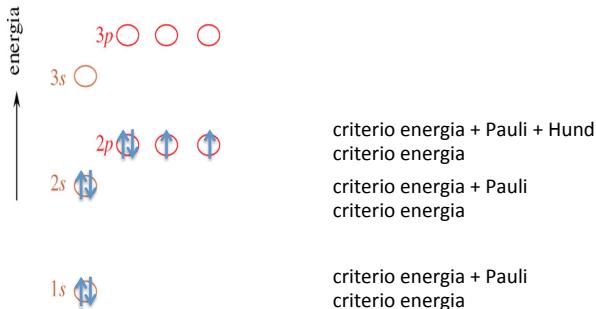
G. Sotgiu

24

Struttura Atomica

Configurazione Elettronica

Esempio di Aufbau:
atomo di ossigeno $Z = 8 \Rightarrow 8$ elettroni (stato fond.)



Notazione per ossigeno: $1s^2 2s^2 2p^4$

Notazione abbreviata: sodio Na $Z = 11 \Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ **[Ne] 3s¹**

Notazione di Lewis $\ddot{\bullet} \ddot{\bullet} \ddot{\bullet}$

G. Sotgiu

25

Struttura Atomica

Configurazione Elettronica

Nickel: $(1s^2)(2s^22p^6)(3s^23p^6)(3d^8)(4s^2)$

Ma poiché la sequenza energetica orbitali era
 $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \approx 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s \dots$

si "riempiono" prima gli orbitali 4s che i 3d

Eccezioni: (da $Z = 20$ in poi) nel riempimento di alcuni orbitali *d* e *f*

Esempio: cromo Cr $Z = 24 \quad [Ar]3d^54s^1 \quad$ e non $[Ar]3d^44s^2$
rame Cu $Z = 29 \quad [Ar]3d^{10}4s^1 \quad$ e non $[Ar]3d^94s^2$

Spiegazione classica: shell piene o semi-piene sono particolarmente stabili

28	^{3F₄}
Ni	
58.6934	
[Ar]3d ⁸ 4s ²	
7.6398	

29	^{2S_{1/2}}
Cu	
Copper	
63.546	
[Ar]3d ¹⁰ 4s	
7.7264	

24	^{7S₃}
Cr	
Chromium	
51.9961	
[Ar]3d ⁵ 4s	
6.7665	

G. Sotgiu

26

Struttura Atomica

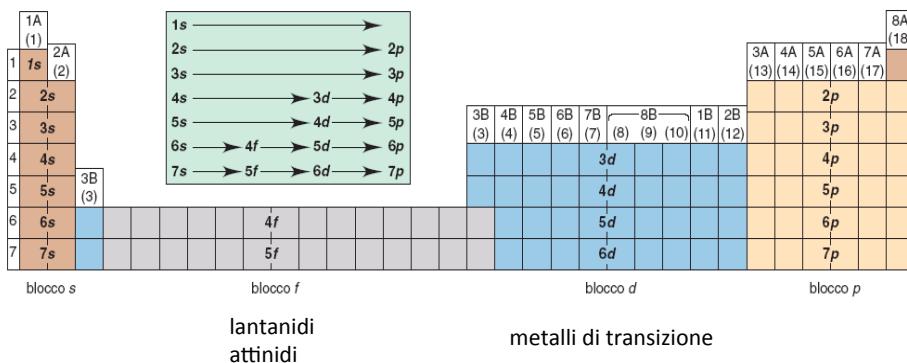
PERIODICITA'

- La configurazione elettronica esterna si ripete periodicamente al crescere di Z. Esempio: **ns¹**

$n = 1$	\Rightarrow	H	$Z = 1$	
$n = 2$	\Rightarrow	Li	$Z = 3$	↓ 2 elementi
$n = 3$	\Rightarrow	Na	$Z = 11$	↓ 8 elementi
$n = 4$	\Rightarrow	K	$Z = 19$	↓ 8 elementi
$n = 5$	\Rightarrow	Rb	$Z = 37$	↓ 18 elementi
$n = 6$	\Rightarrow	Cs	$Z = 55$	↓ 18 elementi
$n = 7$	\Rightarrow	Fr	$Z = 87$	↓ 32 elementi

2, 8, 8, 18, 18, 32 rappresentano i sottogusci da riempire per riottenere un orbitale esterno dello stesso tipo.

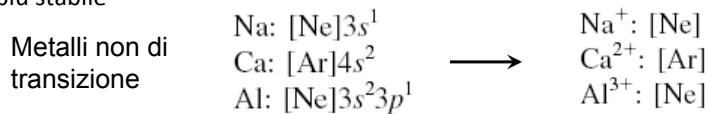
Struttura Atomica



Struttura Atomica 2

Configurazioni elettroniche di anioni e cationi

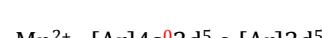
Cationi – atomi che hanno perso elettroni per ottenere una configurazione elettronica più stabile



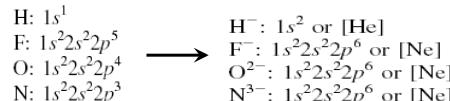
Metalli pesanti non di transizione – **effetto coppia inerte**



Metalli di transizione – con perdita degli elettroni s e poi $n-1$ d (diversi cationi)



Anioni – si ottengono per aggiunta di uno o più elettroni nel livello n più esterno parzialmente riempito H^- : $1s^1$ He^- : $1s^2$ Li^- : $1s^2\ 2s^1$



G. Sotgiu

29

Configurazioni elettroniche dello stato fondamentale degli elementi

Configurazione elettronica delle state fondamentali degli elementi																		
	ns ¹		ns ²															
1	1A	H 1s ¹	2A															
2	3Li 2s ¹	4Be 2s ²																8A He 1s ²
3	11Na 3s ¹	12Mg 3s ²	3B	4B	5	5B	6	6B	7	d ⁵	8	9	10	11	12	d ¹⁰		
4	19K 4s ¹	20Ca 4s ²	21Sc 4s ² 3d ¹	22Ti 4s ² 3d ²	23V 4s ² 3d ³	24Cr 4s ² 3d ⁵	25Mn 4s ² 3d ⁶	26Fe 4s ² 3d ⁷	27Co 4s ² 3d ⁸	28Ni 4s ² 3d ⁹	29Cu 4s ² 3d ¹⁰	30Zn 4s ² 3d ¹⁰	31Ga 4s ² 4p ¹	32Ge 4s ² 4p ²	33As 4s ² 4p ³	34Se 4s ² 4p ⁴	35Br 4s ² 4p ⁵	36Kr 4s ² 4p ⁶
5	37Rb 5s ¹	38Sr 5s ²	39Y 5s ² 4d ¹	40Zr 5s ² 4d ²	41Nb 5s ² 4d ³	42Mo 5s ² 4d ⁴	43Tc 5s ² 4d ⁵	44Ru 5s ² 4d ⁶	45Rh 5s ² 4d ⁷	46Pd 5s ² 4d ⁸	47Ag 5s ² 4d ⁹	48Cd 5s ² 5p ¹	49In 5s ² 5p ²	50Sb 5s ² 5p ³	51Bi 5s ² 5p ⁵	52Te 5s ² 5p ⁶	53I 5s ² 5p ⁷	54Xe 5s ² 5p ⁸
6	55Cs 6s ¹	56Ba 6s ²	57La 6s ² 5d ¹	72Hf 6s ² 5d ²	73Ta 6s ² 5d ³	74W 6s ² 5d ⁴	75Re 6s ² 5d ⁵	76Os 6s ² 5d ⁶	77Ir 6s ² 5d ⁷	78Pt 6s ² 5d ⁸	79Am 6s ² 5d ⁹	80Hg 6s ² 5d ¹⁰	81Tl 6s ² 5p ¹	82Pb 6s ² 5p ²	83Bi 6s ² 5p ³	84Po 6s ² 5p ⁴	85At 6s ² 5p ⁵	86Rn 6s ² 5p ⁶
7	87Fr 7s ¹	88Ra 7s ²	89Ac 7s ³	104Rf 7s ² 6d ¹	105Db 7s ² 6d ²	106Sg 7s ² 6d ³	107Bb 7s ² 6d ⁴	108He 7s ² 6d ⁵	109Mt 7s ² 6d ⁶	110Ds 7s ² 6d ⁷	111Rg 7s ² 6d ⁸	112	(113)	114	(115)	116	(117)	118
				4f	58Ce ns ² 4f ¹	59Pr ns ² 4f ²	60Nd ns ² 4f ³	61Pm ns ² 4f ⁴	62Sm ns ² 4f ⁵	63Eu ns ² 4f ⁶	64Gd ns ² 4f ⁷	65Tb ns ² 4f ⁸	66Dy ns ² 4f ⁹	67Ho ns ² 4f ¹⁰	68Er ns ² 4f ¹¹	69Tm ns ² 4f ¹²	70Yb ns ² 4f ¹³	71Lu ns ² 4f ¹⁴
				5f	90Th 7s ² 5f ¹	91Pa 7s ² 5f ²	92U 7s ² 5f ³	93Np 7s ² 5f ⁴	94Pu 7s ² 5f ⁵	95Am 7s ² 5f ⁶	96Cm 7s ² 5f ⁷	97Bk 7s ² 5f ⁸	98Cf 7s ² 5f ⁹	99Md 7s ² 5f ¹⁰	100Fm 7s ² 5f ¹¹	101Md 7s ² 5f ¹²	102Lr 7s ² 5f ¹³	103Lu 7s ² 5f ¹⁴

G. Sotaj

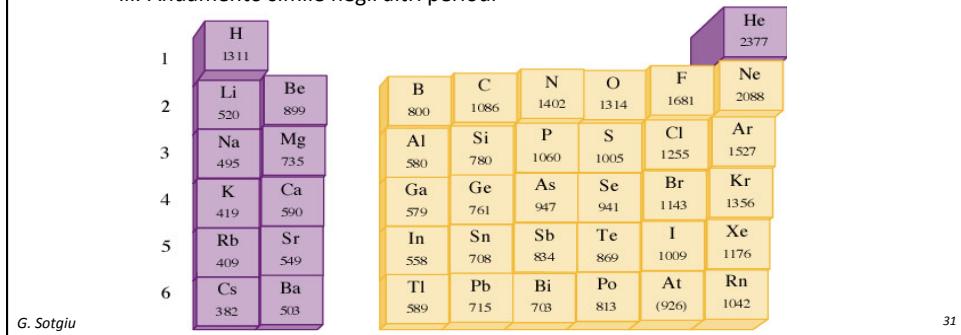
30

Struttura Atomica 2 - Proprietà Periodiche

Energia di prima ionizzazione: energia minima necessaria per allontanare completamente un e^- (il più esterno) da un atomo gassoso nel suo stato fondamentale



- a) Aumento di E_{ion} lungo un periodo al crescere di Z in linea con l'attrazione per l' e^-
- b) Successive ionizzazioni
- c) Eccezioni
 - i. B p-orbital $2s^22p^1$ più facile da rimuovere
 - ii. O $2s^22p^4$: e^- più facile da rimuovere
 - iii. Andamento simile negli altri periodi

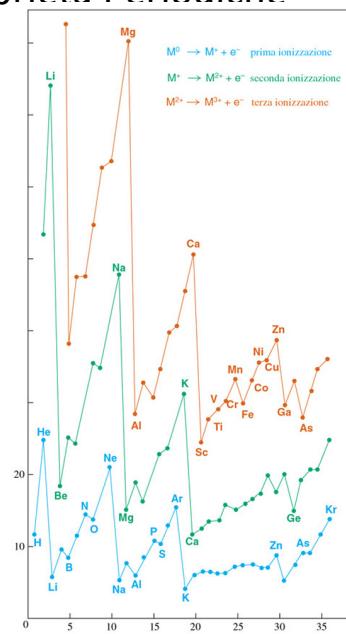


31

Struttura Atomica 2 - Proprietà Periodiche

Energia di Ionizzazione

- d) Metalli di transizione hanno solo piccole differenze
- e) Ampia diminuzione all'inizio di un nuovo periodo perché un nuovo orbitale s possiede una energia molto più elevata
- f) Per i gas nobili diminuisce al crescere di Z perché e^- più lontani dal nucleo
- g) Ionizzazioni successive tengono conto della struttura elettronica



G. Sotgiu

32

Struttura Atomica 2 - Proprietà Periodiche

Affinità per l'elettrone (EA) = Variazione di energia associata all'acquisto di un e^- per un atomo gassoso

$$X_{(g)} + e^- \longrightarrow X^{-}_{(g)}$$

1. Energie di solito inferiori rispetto alla ionizzazione
 2. EA in generale diventa più negativo da sin a ds

Atom	Electron Affinity (kJ/mol)
F	-327.8
Cl	-348.7
Br	-324.5
I	-295.2

3. EA diminuisce lungo un gruppo
 L' e^- è più lontano dal nucleo, si osserva minore interazione

G. Sotgiu

33

Struttura Atomica 2 - Proprietà Periodiche

Raggio Atomici

Le dimensioni di un atomo sono difficili da determinare:

- distribuzione radiale degli orbitali (curva che va a zero solo a distanza infinita); come fissare un limite per l'atomo
- presenza di altri atomi (cambiano da un composto ad un altro)
- Diverse definizioni per il "raggio atomico"

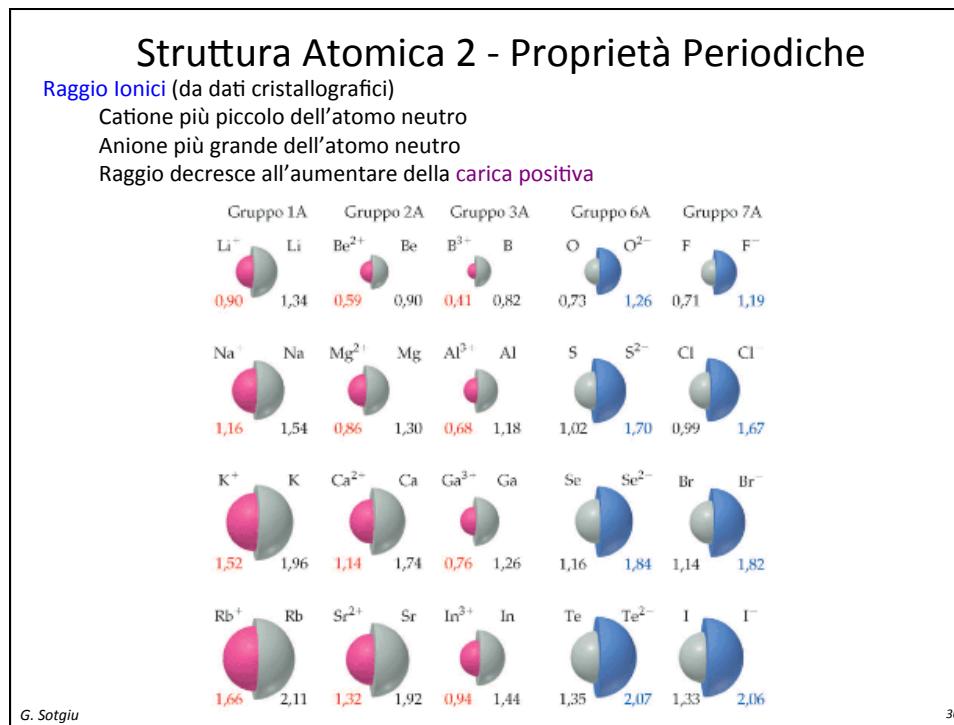
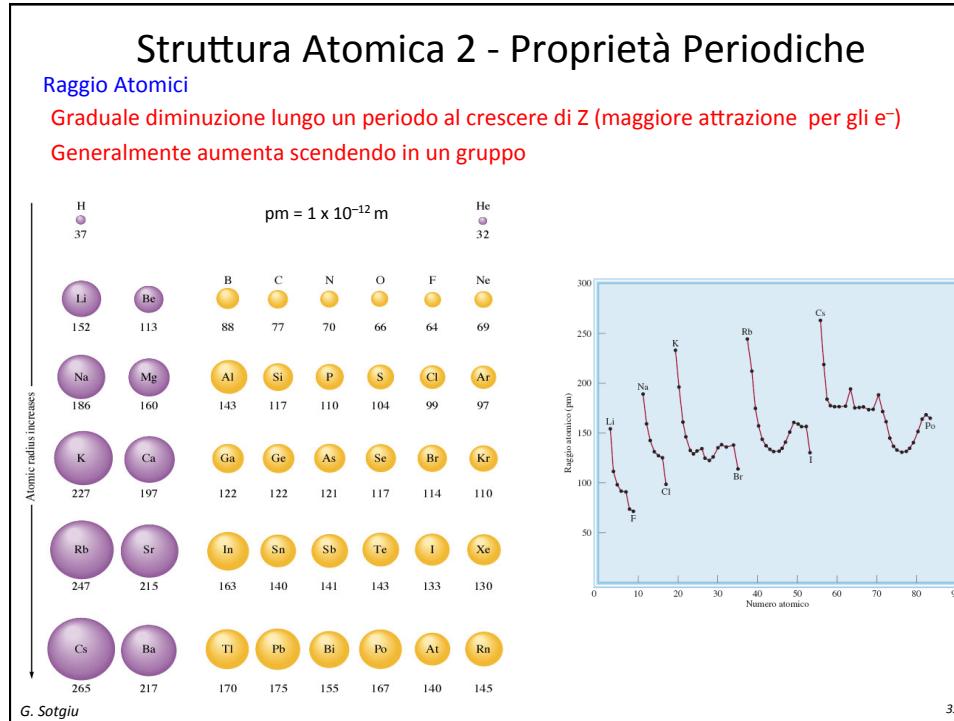
Raggio metallico (Al) Raggio Ionico ($NaCl$) Raggio covalente (Cl_2)

Raggio covalente (o atomico)

E' definito come metà della distanza fra due atomi dello stesso tipo uniti da un legame covalente singolo in una molecola.

G. Sotgiu

34



Struttura Atomica 2 - Proprietà Periodiche

Elettronegatività

Capacità di un atomo (coinvolto in un legame chimico) di attirare su di sé gli e^- di legame

Scala di elettronegatività di Pauling

Definizioni

D = Energia di dissociazione del legame (es $A-A \rightarrow A\cdot + A\cdot$)

Δ = Energia di risonanza ionica (kJ)

χ_A = Elettronegatività of A

Equazioni

$$\Delta(A-B) = D(A-B) - \frac{[D(A-A) + D(B-B)]}{2}$$

$$\chi_A - \chi_B = k\sqrt{\Delta}$$

Per F (fluoro) viene posto $\chi = 4.0$ e per gli altri atomi si parte da esso

Struttura Atomica 2 - Proprietà Periodiche

Elettronegatività

Graduale aumento lungo un periodo (da sn a ds)

Generalmente diminuisce scendendo in un gruppo

