

ATOMO

Nel V e IV secolo a.C. con *Democrito* e *Aristotele* nasce il concetto di *atomo* e vengono individuati 4 elementi. La scienza non ha avuto sviluppi in questo ambito fino al 19° secolo quando Dalton formula la sua *Teoria Atomica*.

Teoria Atomica di Dalton (1803)

Secondo la teoria atomica di Dalton:

- La materia è formata da piccolissime particelle elementari estremamente piccole ed indivisibili chiamate atomi, che possono essere diversi e con diverse proprietà.
- Gli atomi di uno stesso elemento sono identici tra loro e hanno la stessa massa (anche se non è propriamente vero in quanto esistono gli isotopi).
- Gli atomi di elementi diversi si combinano tra loro (attraverso reazioni chimiche) in rapporti di numeri interi dando così origine a composti.
- In una reazione chimica gli atomi non si creano o si distruggono e non si trasformano in atomi di altri elementi. Con la chimica nucleare però gli atomi possono variare (Sono ulteriormente divisibili e quelli radioattivi possono andare incontro a decadimento).

Nonostante i suoi errori Dalton diede un fortissimo contributo alla chimica classica. I successivi contributi furono i seguenti:

- Nel 1902 *Thompson* sostiene che l'atomo è una sfera fluida carica positivamente in cui vi erano immersi gli elettroni, carichi negativamente. La struttura nel complesso era neutra (*modello a panettone*).
- Nel 1910 poi *Rutherford* afferma che l'atomo è vuoto per la maggior parte ma al suo interno sono presenti un nucleo atomico carico positivamente che concentra gran parte della massa, mentre gli elettroni ruotano attorno al nucleo come pianeti intorno al sole (*modello planetario*). Per arrivare a questa teoria effettuò un esperimento con una lamina d'oro bombardata a raggi α (radiazione corpuscolare costituita da due protoni e due neutroni). Ci si aspettava che la radiazione corpuscolare non riuscisse a oltrepassare la lamina d'oro. Essa però venne attraversata dalla gran parte della radiazione ma le particelle di questa radiazione veniva deviata in direzioni diverse.
- Nel 1913 poi *Bohr* sostiene che gli elettroni ruotano attorno al nucleo a *distanze determinate* e connesse. Vi sono quindi delle *Orbite stabili* circolari o ellittiche lungo le quali gli elettroni si muovono senza perdere energia. A particolari *livelli di energia* corrispondono specifiche distanze e le due grandezze sono direttamente proporzionali.

Il modello attuale dell'atomo prevede che esso sia costituito da un nucleo (protoni carichi positivamente e neutroni) e gli elettroni, particelle di carica negativa, si muovono attorno al nucleo all'interno degli orbitali. In proporzione, se il nucleo atomico fosse grande quanto una mela, gli elettroni gli ruoterebbero attorno ad una distanza pari a circa un chilometro: la materia è formata soprattutto da spazio vuoto.

Gli elettroni hanno una massa trascurabile rispetto a quella di neutroni e dei protoni. La massa dell'atomo è data dalla somma della massa dei neutroni e dei protoni.

- **Numero di massa (A)** : la somma del numero di neutroni e protoni nel nucleo
- **Numero atomico (Z)** : il numero dei protoni nel nucleo. In un atomo neutro il numero di protoni è uguale a quello di elettroni (in caso contrario siamo in presenza di uno ione). È il numero che caratterizza l'elemento perché il numero di neutroni (isotopi) e il numero di elettroni può variare, ma se cambia il numero di protoni l'elemento è diverso.

A ogni numero atomico corrisponde uno specifico elemento chimico e determina le proprietà dell'elemento. Nella tavola periodica gli elementi sono disposti da sinistra verso destra in base al numero atomico crescente.

Non è vero che gli atomi dello stesso elemento hanno la stessa massa perché esistono i cosiddetti isotopi. Gli isotopi sono atomi dello stesso elemento con lo stesso numero di protoni ma con un numero di neutroni diverso. Gli isotopi hanno un'abbondanza relativa diversa: in natura molto spesso vi sono isotopi più abbondanti e isotopi meno abbondanti. Il comportamento chimico degli isotopi è pressoché identico.

ORBITALI ed ELETTRONI

Il problema del modello di Bohr è che si basa su orbite ellittiche. Il suo modello viene superato anche grazie al principio di indeterminazione di Heisenberg secondo cui è impossibile conoscere simultaneamente e con precisione la posizione e la velocità di una particella elementare. Erwin Schroedinger pubblica nel 1926 un saggio riguardante un'equazione con la quale era possibile calcolare la funzione d'onda dell'elettrone e quindi calcolare la probabilità di trovare un elettrone in un dato punto dell'orbitale e anche il suo livello energetico. La forma delle funzioni d'onda che descrivono gli elettroni, si determina risolvendo l'equazione di Schroedinger. Tuttavia questa equazione è esattamente risolvibile solo per l'H.

Dal lavoro di Schroedinger si sviluppò la teoria secondo la quale è possibile individuare le regioni dello spazio in cui la probabilità di trovare l'elettrone è massima; tali regioni sono chiamate orbitali. Gli orbitali non sono traiettorie, ma regioni di *spazio tridimensionale* in cui c'è una probabilità del 95% di trovare l'elettrone.

- Ogni orbitale è associato a *Numeri Quantici* che ne definiscono energia, forma e l'orientamento.
- Non si può stabilire la precisa posizione dell'elettrone in un dato istante.
- Non si può stabilire la precisa traiettoria dell'elettrone all'interno dell'orbitale.

Per definire un orbitale c'è una funzione d'onda e tre numeri quantici (principale, secondario e magnetico). I numeri quantici sono associati: all'energia, alla forma e all'orientamento nello spazio dell'orbitale. Il numero quantico principale fornisce la dimensione e l'energia dell'orbitale. Maggiore è n, maggiore è l'energia dell'orbitale e più l'orbitale è esteso. Il numero quantico secondario fornisce la forma dell'orbitale.

Il numero quantico magnetico determina l'orientazione dell'orbitale.

Per definire un elettrone invece sono necessari una funzione d'onda e 4 orbitali, oltre ai precedenti si aggiunge quindi il numero quantico di Spin che indica il senso di rotazione dell'elettrone.

Il *numero quantico principale* va da 1 a $+\infty$ e assume solo il valore di numeri interi (1, 2, 3, 4 ...). Ogni riga della Tavola Periodica costituisce un livello energetico. (Un elemento nella terza riga avrà come numero quantico principale 3).

Il *numero quantico Secondario* varia da 0 a (n-1) dove n è il numero quantico principale.

Il *Numero quantico magnetico* varia da $-\ell$ a $+\ell$ dove ℓ è il numero quantico secondario.

Il *numero quantico di Spin* può valere soltanto $\pm \frac{1}{2}$. Secondo il *Principio di Pauli* ogni orbitale può contenere al massimo due elettroni con spin opposto (in ogni orbitale c'è un elettrone di spin $+\frac{1}{2}$ e un elettrone di spin $-\frac{1}{2}$).

Il numero quantico secondario fornisce la forma dell'orbitale. A ogni valore del numero quantico secondario è associata una lettera che indica appunto la forma dell'orbitale. Per $\ell=0$ l'orbitale è chiamato s ed è sferico. Per $\ell=1$ l'orbitale è chiamato p ed è trilobato (ha 3 orbitali degeneri orientati lungo i tre assi cartesiani nello spazio). Per $\ell=2$ l'orbitale è detto d ed ha 5 orbitali degeneri. Per $\ell=3$ l'orbitale è detto f... Man mano che n cresce, l'orbitale s, p o d corrispondente sarà più grande. Per $n=4$ e $\ell=0$ l'orbitale 4s sarà di forma sferica ma ha un raggio molto maggiore rispetto all'orbitale 1s.

Tutti gli orbitali, tranne quello sferico, hanno un piano nodale ovvero il piano su cui giace il punto di intersezione degli orbitali degeneri. Con Piano Nodale si identifica la regione di spazio attorno al nucleo dell'atomo dove è minima la probabilità di trovare un elettrone.

Schermatura:

Oltre a essere attratto dal nucleo, ciascun elettrone subisce la repulsione degli altri elettroni e, di conseguenza, si lega al nucleo meno intensamente di quanto farebbe se gli altri elettroni non ci fossero. Diciamo allora che l'elettrone in esame è schermato e risente di una carica inferiore a quella generata dal nucleo. Supponiamo di avere un atomo con questi orbitali: 1s 2s. Ci sono due elettroni nell'orbitale 1s e uno o due elettroni nell'orbitale 2s. Il/gli elettrone/i nell'orbitale 2s risente della repulsione degli elettroni dell'orbitale 1s. Quindi la carica nucleare positiva attrae gli elettroni ma se ci sono in mezzo elettroni in orbitali più interni, questi faranno sì che gli elettroni più esterni avranno una minor forza di attrazione nei confronti del nucleo.

A parità di n gli orbitali s per forma e distanza dal nucleo schermano più efficientemente le cariche.

Un guscio chiuso ha un'efficacia di schermatura molto elevata. Ci sono cioè molti elettroni che agiscono repulsivamente contro gli elettroni degli orbitali più esterni.

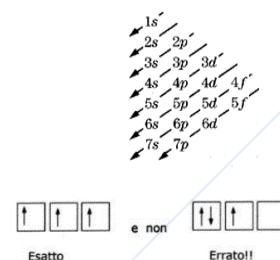
In realtà l'energia degli orbitali non varia solo in base al numero quantico principale ma anche in base al numero quantico secondario. Ne risulta che il 2s ha un'energia inferiore dei 2p, i 3p hanno un'energia inferiore dei 3d.

A parità di numero quantico principale gli orbitali s hanno un'energia minore degli orbitali p, che hanno un'energia minore degli orbitali d etc.

Quando il numero atomico Z è maggiore di 20, l'orbitale 4s ha un'energia minore dell'orbitale 3d.

Regole per lo riempimento degli Orbitali

- ★ **Principio di Aufbau:** Prima si occupano gli orbitali con energia più bassa (a seconda dei numeri quantici primario e secondario). Per fare questo si usa la Regola della Diagonale.
- ★ **Regola di Hund:** nel caso di orbitali degeneri (di uguale energia) gli elettroni tendono a disporsi su orbitali diversi con spin paralleli. Nel caso per esempio degli orbitali 2p (che sono tre), gli elettroni non tendono a riempirne solo uno ma ogni elettrone andrà ad occupare un solo orbitale. Se poi gli elettroni sono sufficienti, un singolo orbitale 2p potrà avere due elettroni.
- ★ **Principio di Pauli:** ogni orbitale può essere occupato al massimo da due elettroni, purché di spin opposto.
 - ⇒ Nello stesso atomo non possono esserci due elettroni con gli stessi numeri quantici (n, ℓ, m, m_s).
 - Per indicare un singolo elettrone bisogna fornire tutti e quattro i numeri quantici.



Atomi Paramagnetici e Diamagnetici :

Quando un orbitale ha un solo elettrone, questo si chiama Elettrone Spaiato. Gli Atomi Paramagnetici sono quelli che hanno elettroni spaiati, gli Atomi Diamagnetici non hanno elettroni spaiati. Il fatto di avere o no elettroni spaiati ha un'influenza sulle proprietà dell'atomo.

GUSCIO ESTERNO o di VALENZA

Gli *Elettroni di Valenza* sono quelli presenti nell'ultimo livello di energia. Non importa se gli elettroni in 3d sono più energetici degli elettroni in 4p. I 4p appartengono al livello energetico 4 quindi i loro orbitali hanno dimensioni maggiori rispetto agli orbitali 3d. Per questo motivo gli elettroni 4p sono più esterni degli elettroni 3d e sono quindi quelli coinvolti nelle reazioni e nei legami chimici. Elementi che hanno lo stesso numero di elettroni di valenza hanno comportamenti chimici molto simili. Elementi che hanno gli stessi elettroni di valenza stanno tutti nello stesso gruppo. Gli atomi reagiscono con altri atomi mettendo in condivisione, cedendo o acquisendo uno o più elettroni di valenza per far sì che il loro guscio più esterno sia un guscio chiuso e sia stabile. Quando negli elettroni di valenza sono coinvolti gli orbitali d, la stabilità non si raggiunge con 8 elettroni ma con 18. Con questa regola, chiamata *Regola dell'Ottetto*, gli atomi raggiungono la conformazione di Gas nobili. Un atomo tenderà a cedere o a acquistare elettroni (formando legami con altri atomi), fino a raggiungere la configurazione del gas nobile che lo precede o lo segue ed assumere così una configurazione elettronica stabile.

- I *metalli* sono più propensi a cedere elettroni e a formare cationi (I, II gruppo e alcuni del III e IV) (Poche eccezioni: noti alcuni rari casi di anioni di metalli, es. Na⁻). I metalli del gruppo I tenderanno a cedere 1e⁻ (stato di ossidazione +1), quelli del gruppo II tenderanno a cedere 2e⁻ (stato di ossidazione +2).
- I *non-metalli* sono più propensi ad acquistare elettroni per completare l'ottetto e a formare anioni.
- *Semimetalli*: Elementi dal comportamento intermedio collocati su una diagonale a gradini che separa metalli e non-metalli (es. sono semiconduttori)

Stato (numero) di ossidazione: differenza tra gli elettroni di valenza dell'atomo neutro e quelli che ha in quel particolare composto, considerando i legami come totalmente ionici, o anche numero di elettroni che l'atomo acquista o cede per formare legami con altri atomi. Può essere minore, maggiore o uguale a zero.

Lo *Strato Chiuso*, o *Guscio Chiuso*, invece è il guscio che contiene il massimo numero di elettroni possibile. Esso è una configurazione molto stabile e chimicamente inerte (tende a non reagire).

Ad esempio nel Bromo per $n=1$ ci sono 2 elettroni, che completano l'orbitale 1s. Per questo motivo l'orbitale 1s è uno Strato Chiuso. Per $n=2$ (sempre nel Bromo) gli orbitali sono completi e contengono 8 elettroni. Per cui anche il livello energetico 2 è uno Strato Chiuso. La stessa cosa vale per il guscio energetico 3. Il guscio di valenza del bromo, quello al livello energetico 4, non è completo e quindi non può essere definito chiuso.

Le reazioni chimiche coinvolgono gli elettroni di Valenza, che determinano le proprietà chimiche di un atomo. Atomi che hanno lo stesso numero di elettroni di valenza, hanno tendenzialmente lo stesso comportamento chimico.