

L 2: La struttura dell'atomo

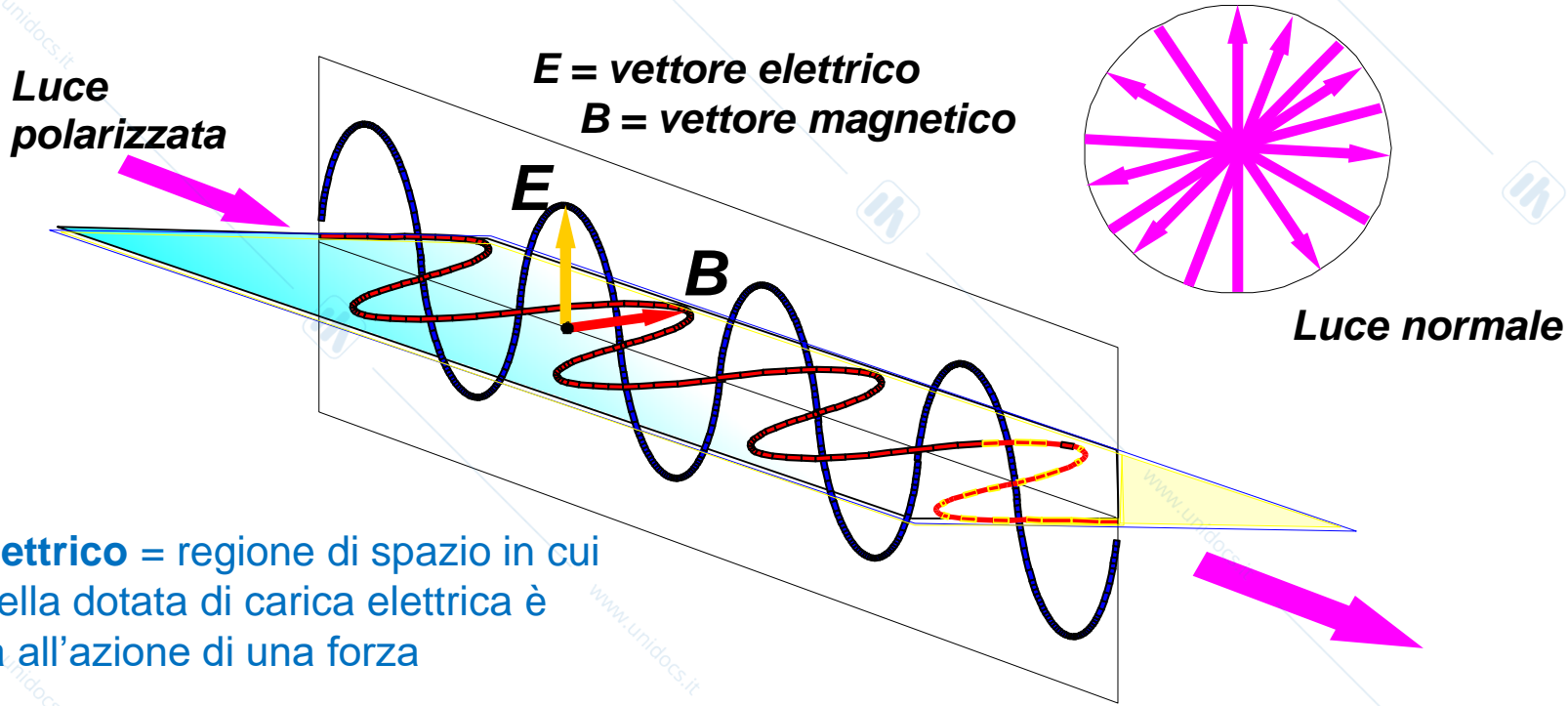
Gli elettroni e le configurazioni elettroniche degli elementi

Capitoli 3 e 4 del libro di testo

La radiazione elettromagnetica (o energia radiante)

Può essere descritta come un'onda composta da un **campo elettrico** e un **campo magnetico** oscillanti che si propagano in piani mutuamente perpendicolari

Tutte le forme di radiazione elettromagnetica si propagano nel vuoto alla velocità della luce $2,99792458 \times 10^8$ m/sec

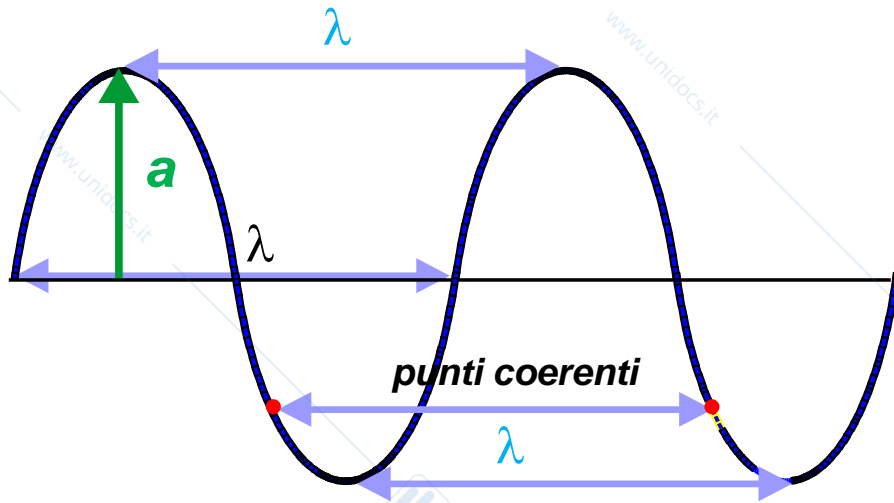


Campo elettrico = regione di spazio in cui una particella dotata di carica elettrica è sottoposta all'azione di una forza

Campo magnetico = regione di spazio in cui una particella magnetica è soggetta ad una forza



● **Parametri caratteristici di un'onda (teoria ondulatoria di Maxwell)**



Lunghezza d'onda λ

periodo T (tempo impiegato a percorrere λ)

ampiezza massima

E_{max} o B_{max}

frequenza ν

$$\nu = \frac{1}{T} \text{ s}^{-1} \text{ (Hertz, Hz)}$$

$$\text{Velocità di propagazione } v = \frac{\lambda}{T} = \lambda \cdot \nu$$

$$\text{Velocità della luce } c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

Numero d'onda $\bar{\nu}$ = inverso di λ

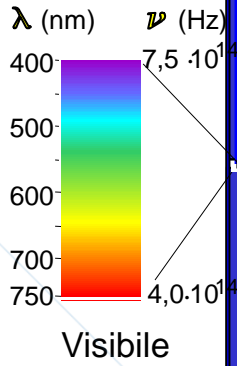
L'intensità dell'onda elettromagnetica = energia che attraversa l'unità di superficie nell'unità di tempo è proporzionale a E^2 è la densità di energia trasportata da un'onda elettromagnetica



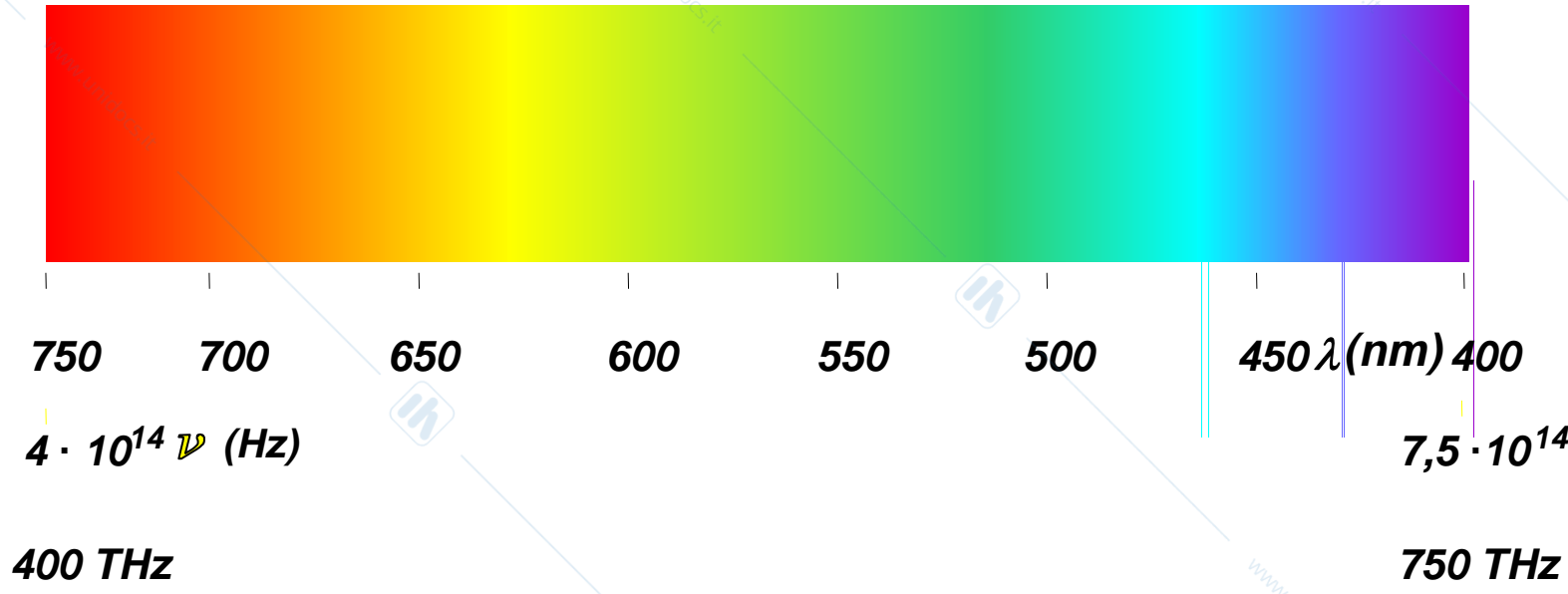
LO SPETTRO DELLE ONDE ELETTROMAGNETICHE

Energia ↑

Frequenza ν (Hz)	Lunghezza d'onda $\lambda = c/\nu$ (m)	Tipo di radiazione	Origine delle radiazioni	Energia (eV)	Numero d'onda $\bar{\nu} = 1/\lambda$ (cm ⁻¹)
10^{21}	10^{-13} (1 unità-X)	Raggi γ	Reazioni nucleari	$(1 \text{ MeV})10^6$	10^{11}
10^{18} (1 EHz)	10^{-10} (1 Å) 10^{-9} (1 nm)	Raggi X	Transizioni intranucleari	$(1 \text{ keV})10^3$	10^8
10^{15} (1 PHz)	10^{-6} (1 μ m)	Ultravioletto nel vuoto Ultravioletto	Transizioni elettroniche interne Ionizzazione elettronica di valenza Transizioni elettroniche di valenza	1	10^5 10^4
10^{12} (1 THz)	10^{-3} (1 mm) 10^{-2} (1 cm)	Vicino infrarosso Infrarosso Lontano ir Microonde	Vibrazioni molecolari	(1 meV)	1
10^9 (1 GHz)	1	Radar UHF-TV VHF-TV Radio-FM Onde corte medie lunghe	Rotazioni molecolari Transizioni di spin elettronici (ESR)	$(1 \mu\text{eV}) 10^{-6}$	10^{-3}
10^6 (1 MHz)	10^3 (1 km)		Transizioni di spin nucleari (NMR)	$(1 \text{ neV})10^{-9}$	10^{-6}
10^3 (1 kHz)	10^6 (1 Mm)			$(1 \text{ peV}) 10^{-12}$	10^{-9}



● Spettro del visibile



$$E = h \times \nu$$

$$\lambda \times \nu = c$$



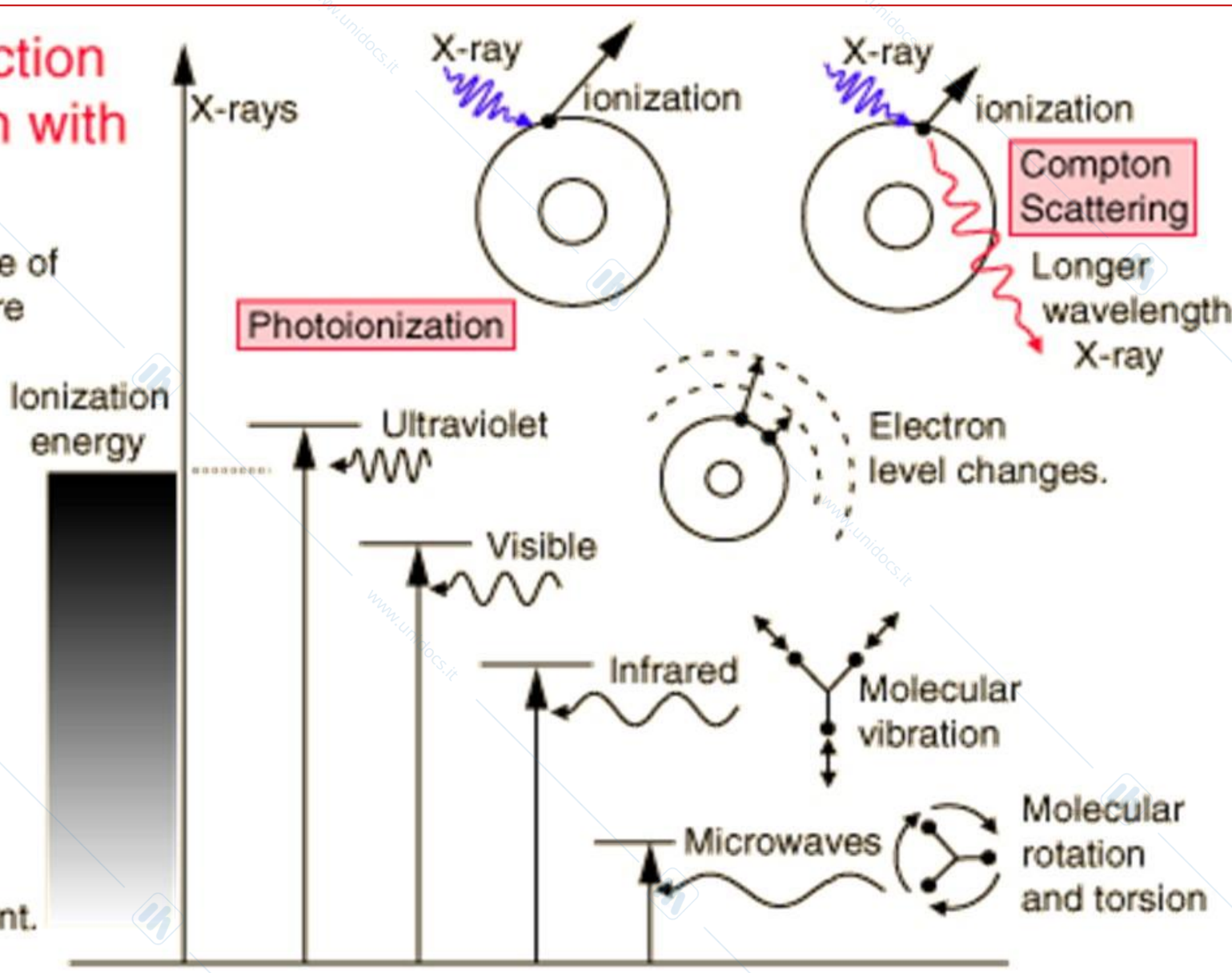
Propagazione della radiazione elettromagnetica = interazione radiazione elettromagnetica/materia è affetta da **riflessione, rifrazione, diffrazione, interferenza**

The interaction of radiation with matter.

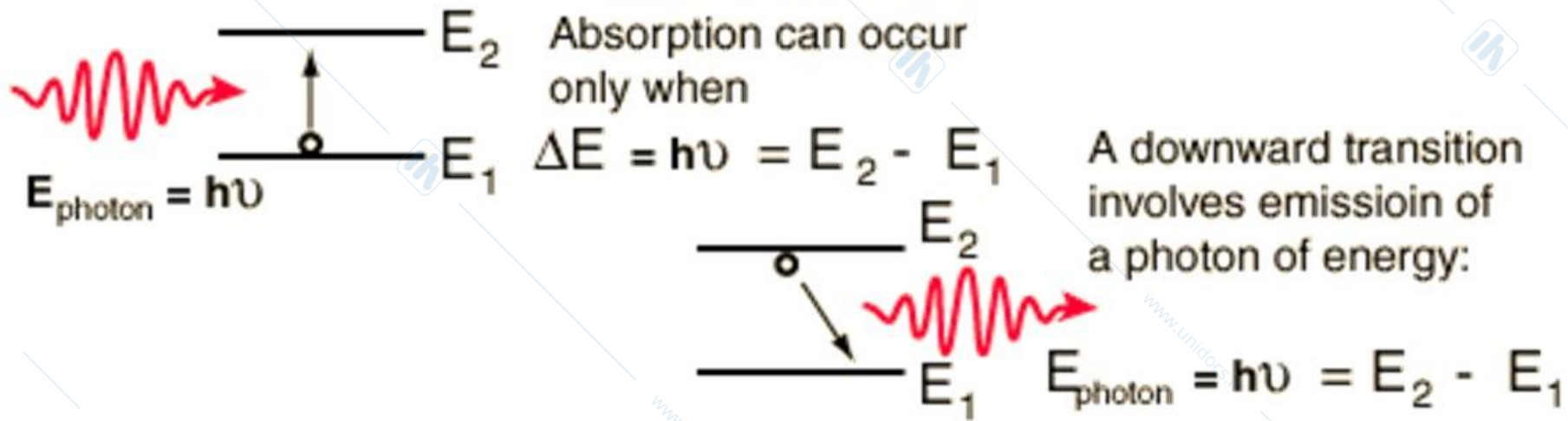
Click on any type of radiation for more information.

Large number of available energy states, strongly absorbed.

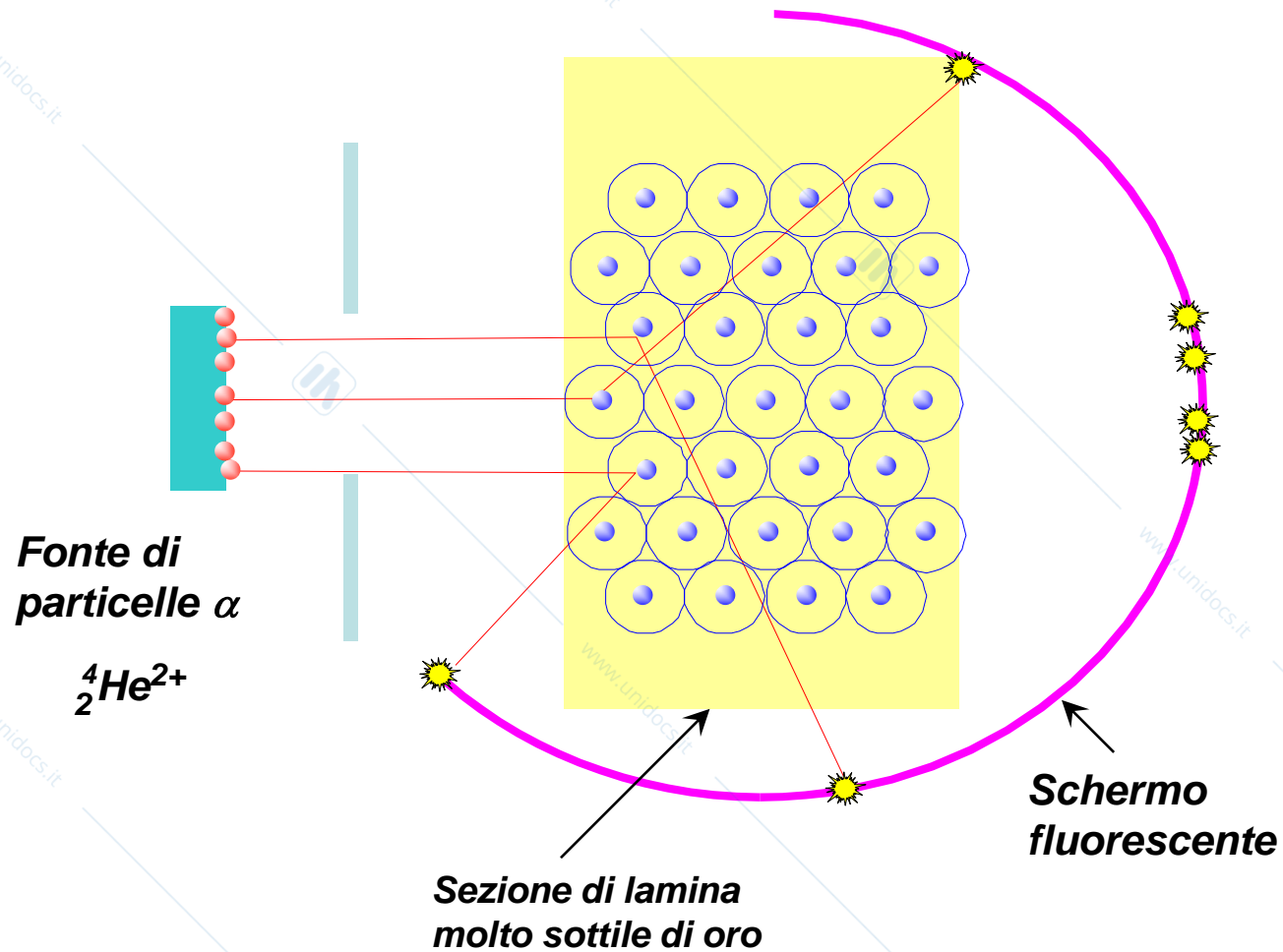
Small number of available states, almost transparent.



Il concetto di assorbimento e di emissione



- **L'atomo risulta quasi vuoto**
(Esperimento di Rutherford, 1910; Esperienza di Geiger-Marsden, 1911)



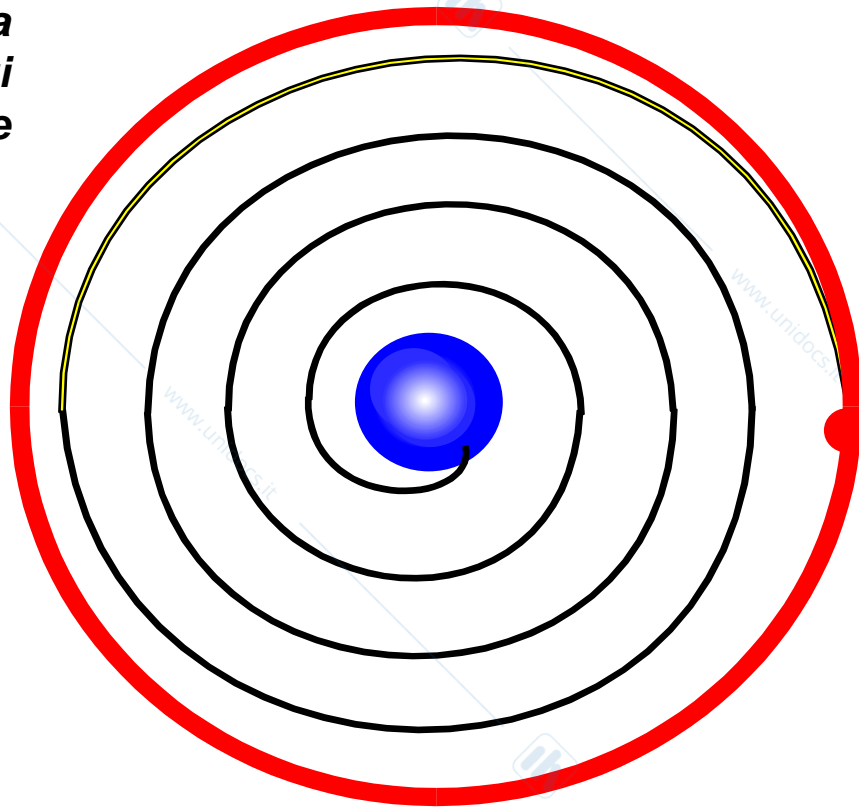
● Scoperta del nucleo

Rutherford (1911): l'atomo è costituito da un nucleo molto piccolo dove si concentra quasi tutta la massa (i protoni).

Gli elettroni ruotano a distanza, come in un sistema solare. L'atomo è stabile per l'equilibrio tra forza coulombiana e forza centrifuga, che agiscono contemporaneamente sugli elettroni.

Tempo calcolato di caduta sul nucleo secondo le leggi di Maxwell sulle cariche elettriche:

$$t = 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ s}$$



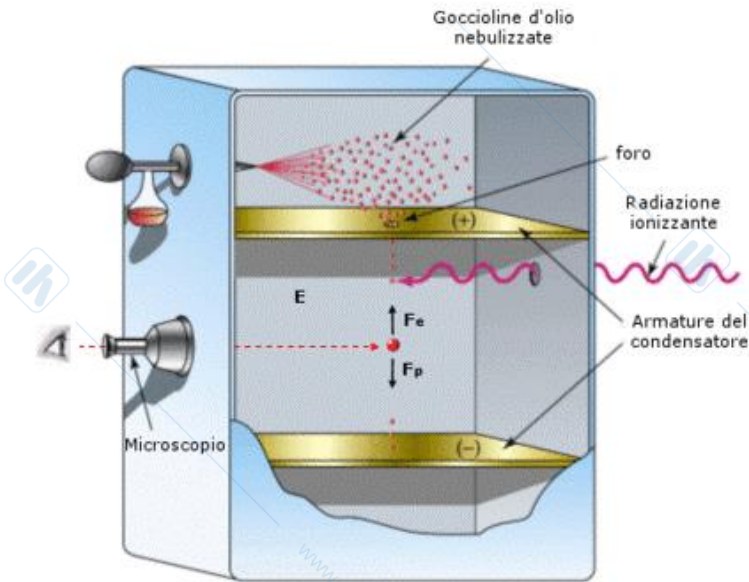
● Scoperta dell'elettrone

Thomson (1897) scopre gli elettroni e ne determina la massa:

$$m_e = \frac{1}{1840} m_{\text{idrogeno}}$$

Millikan (1909) misura la carica $1,60 \times 10^{-19} \text{C}$

(un campo elettrico tra le armature del condensatore deve tenere sospesa la goccia di olio)



● Scoperta del protone

Goldstein (1886)



Modello atomico di Thomson

L'atomo è una massa di elettricità positiva di massa molto grande rispetto all'elettrone. In questa sfera coesistono gli elettroni in modo da dare la più stabile organizzazione elettrostatica



La nascita della teoria dei quanti

Gli elettroni e l'elettromagnetismo classico. La teoria degli elettroni di Lorentz

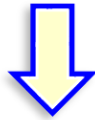
Gli elettroni

Gli **elettroni** muovendosi entro gli atomi con un **moto non rettilineo e uniforme**, determinerebbero **l'emissione di onde elettromagnetiche**



emettitori elementari (microscopici)

oscillatori (oscillazioni di tipo armonico di ben determinata frequenza)



Le **onde elettromagnetiche** emesse sarebbero allora **caratterizzate** dalla stessa frequenza di questi **oscillatori elementari**

Nell'analisi dello spettro di emissione caratteristico d'un corpo, **ogni riga di ben determinata frequenza sarebbe da attribuire a una famiglia di oscillatori elettronici** tutti oscillanti con quella stessa frequenza.

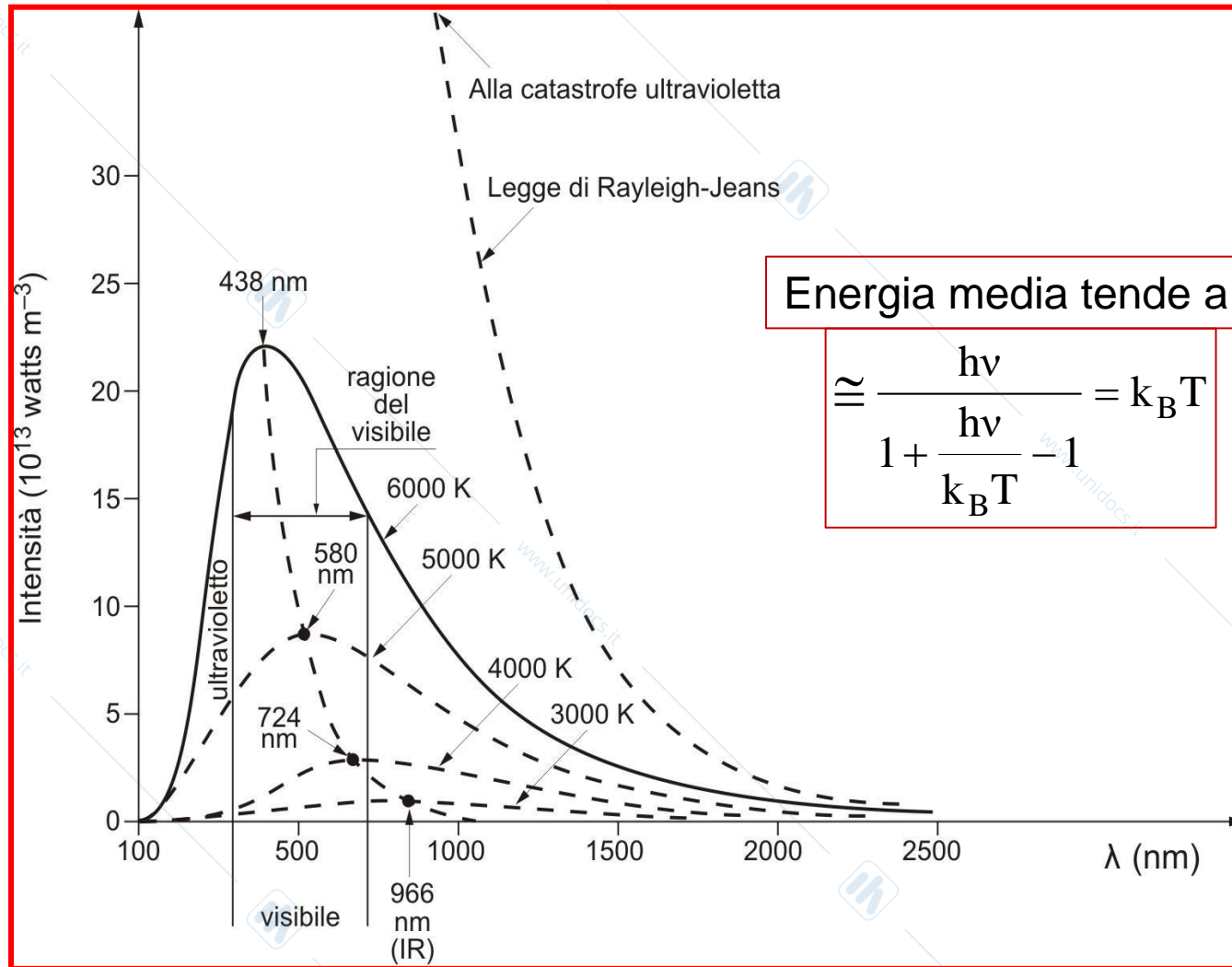
Purtroppo, una descrizione di questo tipo porta per diversi fenomeni a conclusioni del tutto inconsistenti con la realtà.

Emissione di radiazione elettromagnetica da un corpo caldo

Ogni corpo solido, a qualunque temperatura, emette radiazioni a spettro continuo

$I_{\max} T = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$
Legge di Wien

Emittenza di radiazione $F(T) = \sigma T^4$
Legge di Stefan-Boltzmann
 $\sigma = 5,6693 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$

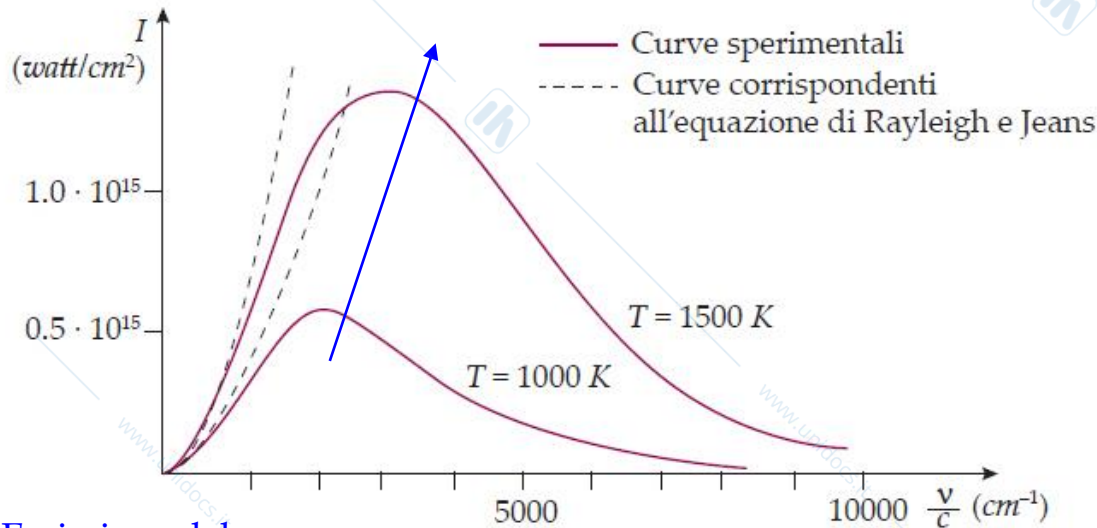


La nascita della teoria dei quanti

Lo spettro di emissione del corpo nero

Se il corpo emittente è un “**corpo nero**”: lo spettro risulta indipendente dalla natura della sostanza stessa e dalla forma del corpo

➡ Fissata T , la distribuzione dell'intensità nell'intero campo spettrale è uguale per tutti i corpi e per qualunque sostanza



Emissione del corpo nero

➡
$$I = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} kT$$

Velocità della luce
Temperatura assoluta

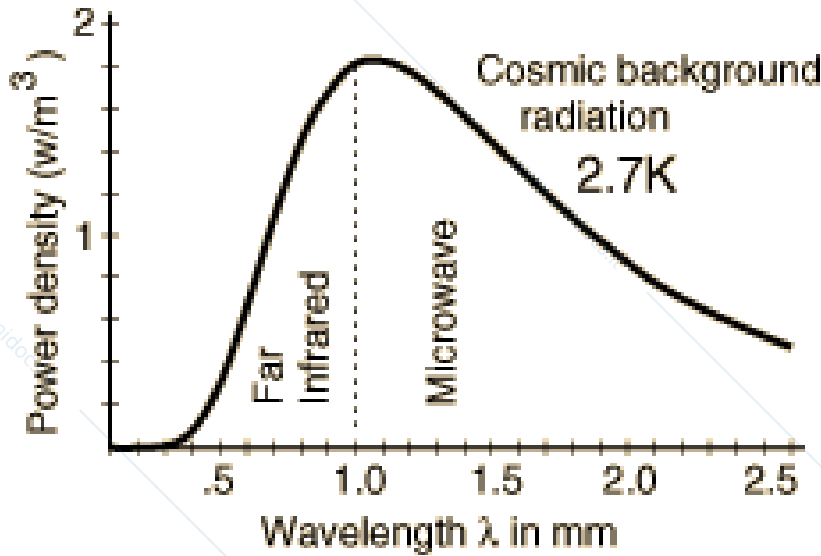
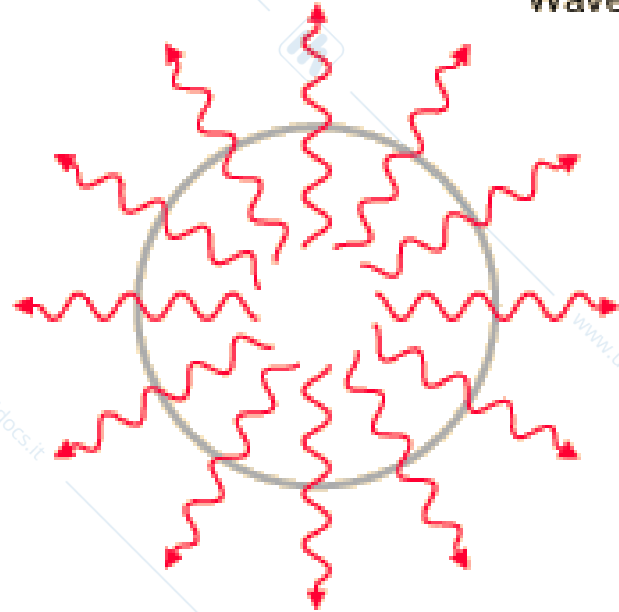
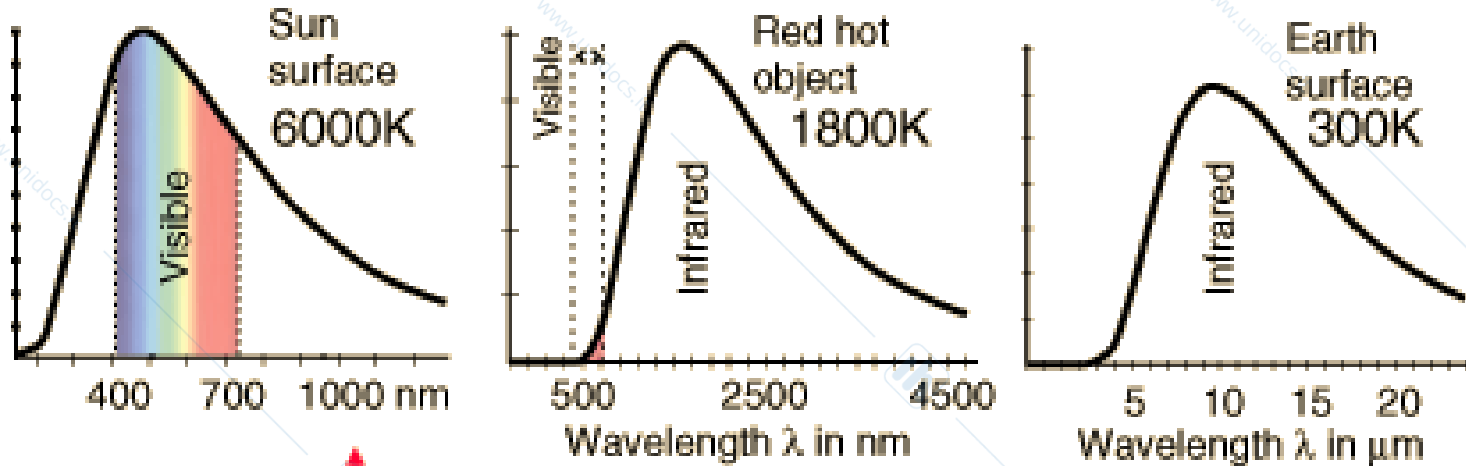
Rayleigh e Jeans determinarono, con le leggi classiche della meccanica e dell'elettromagnetismo (oscillatori elettronici elementari), I in funzione della ν :

$$I = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \bar{\epsilon}$$

con $\bar{\epsilon} = kT$

Costante di Boltzmann
 $k = R/N_A = 1.381 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}$

Emissione di radiazione elettromagnetica da un corpo caldo



→ **Uso delle termocamere**

La teoria corpuscolare di Planck



La legge di Rayleigh e Jeans stabilisce che I diventa infinita al tendere di $\nu \rightarrow \infty$ mentre l'esperienza mostra che $I \rightarrow 0$ per grandi valori di ν

Planck ipotizzò che:

- (1901)**
- ❑ il corpo nero fosse composto di oscillatori armonici, cioè di piccole **particelle legate alle loro posizioni di equilibrio da forze elastiche** di tipo di quelle della legge di Hooke
 - ❑ l'assorbimento o emissione di radiazioni **non è continuo**, anzi, l'energia di ciascun oscillatore deve essere sempre **un multiplo intero di un certo quanto di energia** la cui grandezza dipende dalla frequenza naturale dell'oscillatore secondo la legge **$E = h\nu$**

La teoria elettromagnetica-corpuscolare (1901):

- ❑ le particelle di un solido incandescente si comportano come dei **piccoli oscillatori vibranti** per i quali sono **permesse solo ben determinate frequenze di vibrazione ν**
- ❑ **l'energia emessa o assorbita E** dalla materia è legata alle **frequenze di vibrazione permesse ν** : **$E = h\nu$**

➡ la materia è in grado di emettere o assorbire l'energia in modo discontinuo, «per quantità finite (discrete)».

● Teoria quantistica di Max Planck (1900)

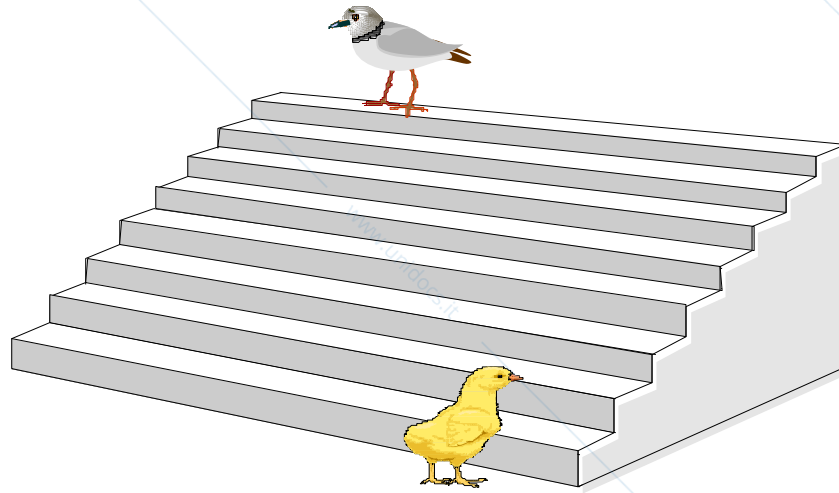
L'energia viene emessa o assorbita da un corpo caldo solo per quantità discrete, chiamate "quanti" o loro multipli.

L'energia associata ai quanti vale:

$$E = h \cdot \nu$$

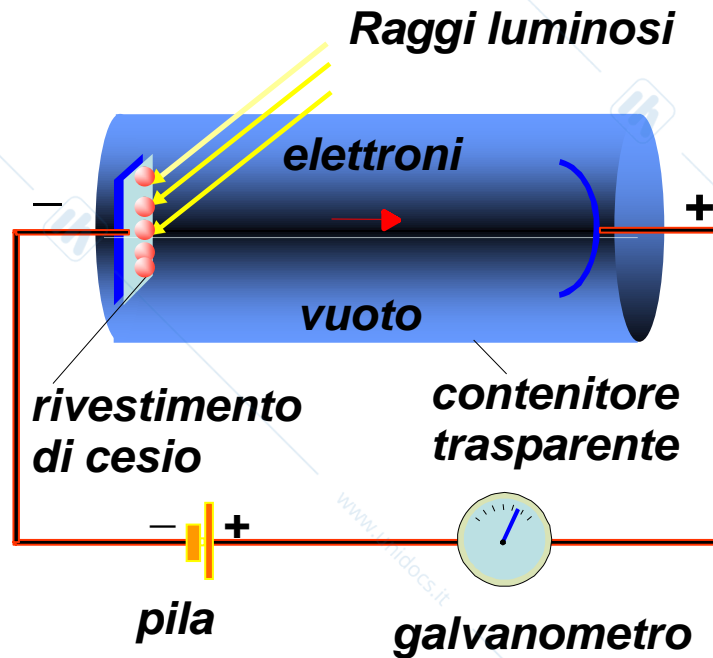
h = costante di Planck = $6,626 \cdot 10^{-34}$ J s

ν = frequenza della radiazione



● **L'effetto fotoelettrico (Einstein, 1905)**

L'energia degli elettroni emessi aumenta con la frequenza ν della luce incidente (purché si superi il valore di soglia), mentre è indipendente dall'intensità della luce incidente.

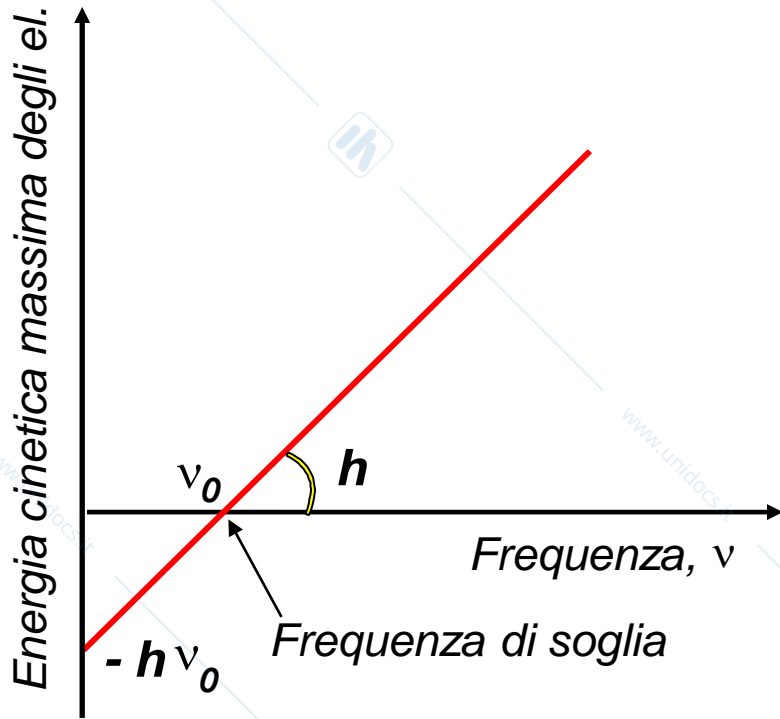


● **Energia di una radiazione: $E = h \nu$**

$$h \nu = E_w + \frac{1}{2} m v^2$$

$$\frac{1}{2} m v^2 = h \nu - E_w = h \nu - h \nu_0$$

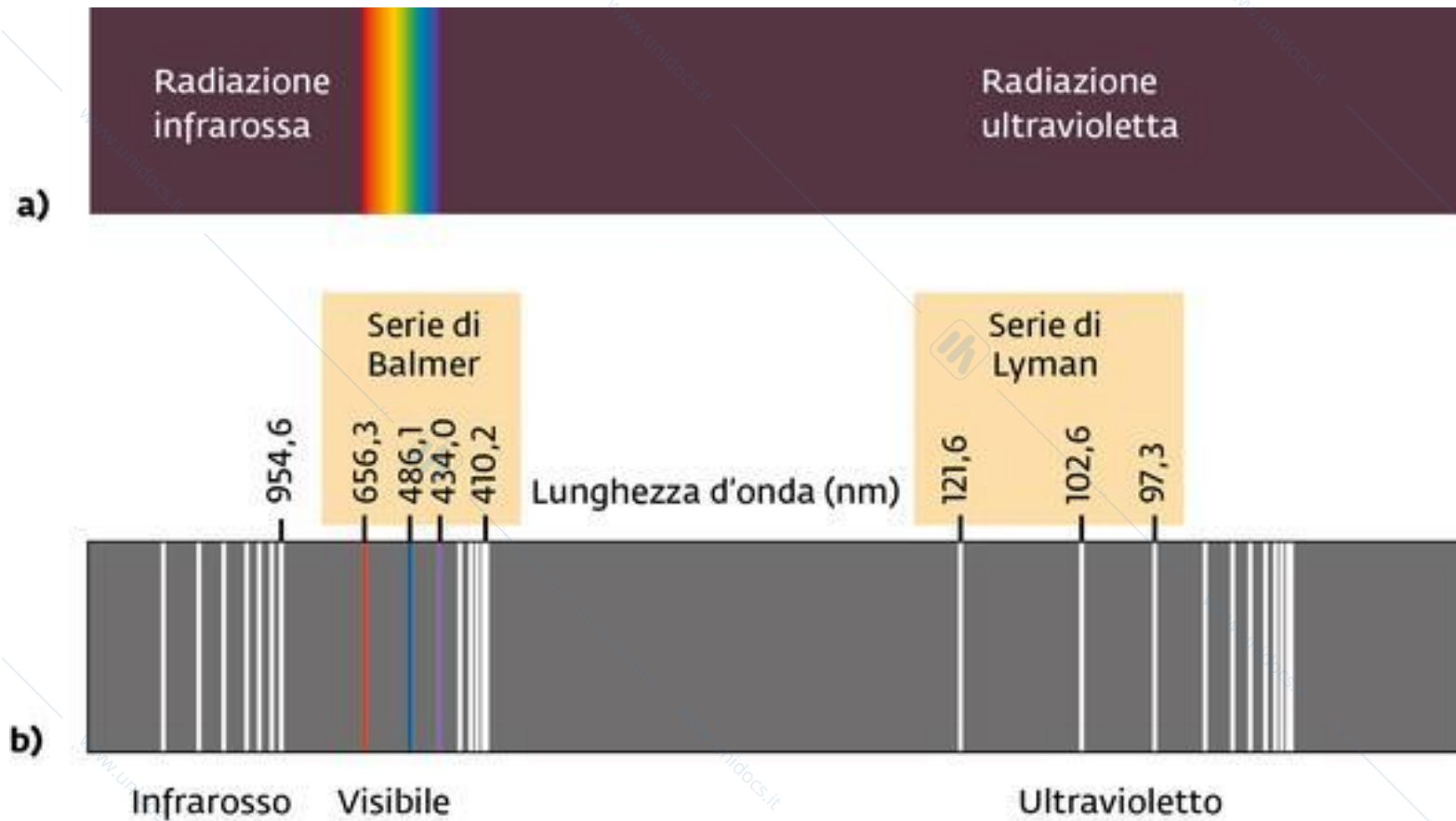
($E_w = h \nu_0 =$ energia di soglia o funzione lavoro)



Elemento	Energia di soglia (joule)
Li	$3,6 \cdot 10^{-19}$
K	$3,5 \cdot 10^{-19}$
Rb	$3,3 \cdot 10^{-19}$
Cs	$3,1 \cdot 10^{-19}$
Zn	$5,5 \cdot 10^{-19}$
Mg	$5,9 \cdot 10^{-19}$



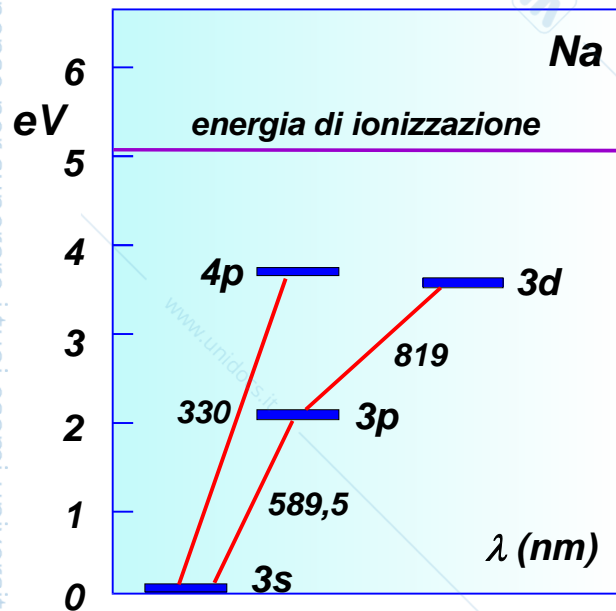
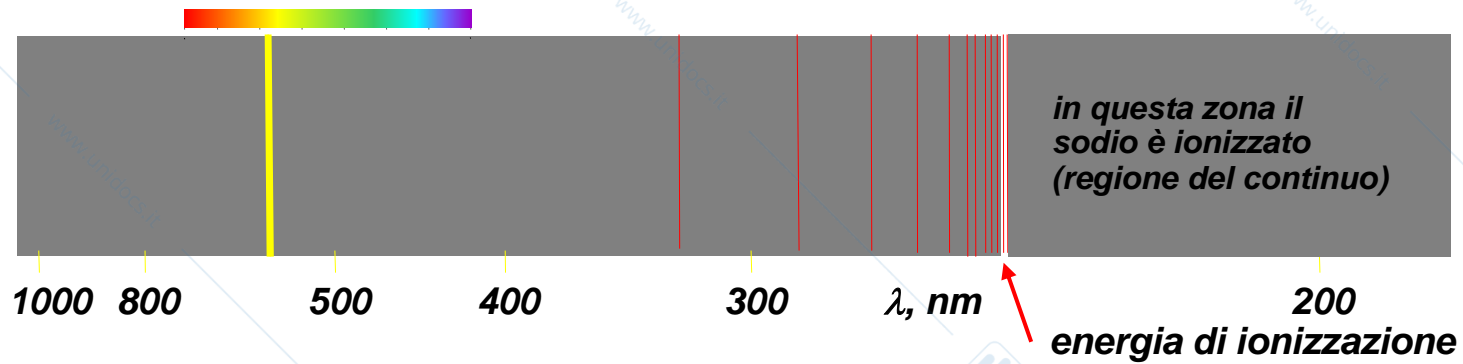
Lo spettro di emissione dell'atomo di idrogeno



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

$$R_H = 109677,759 \pm 0.05 \text{ cm}^{-1}$$

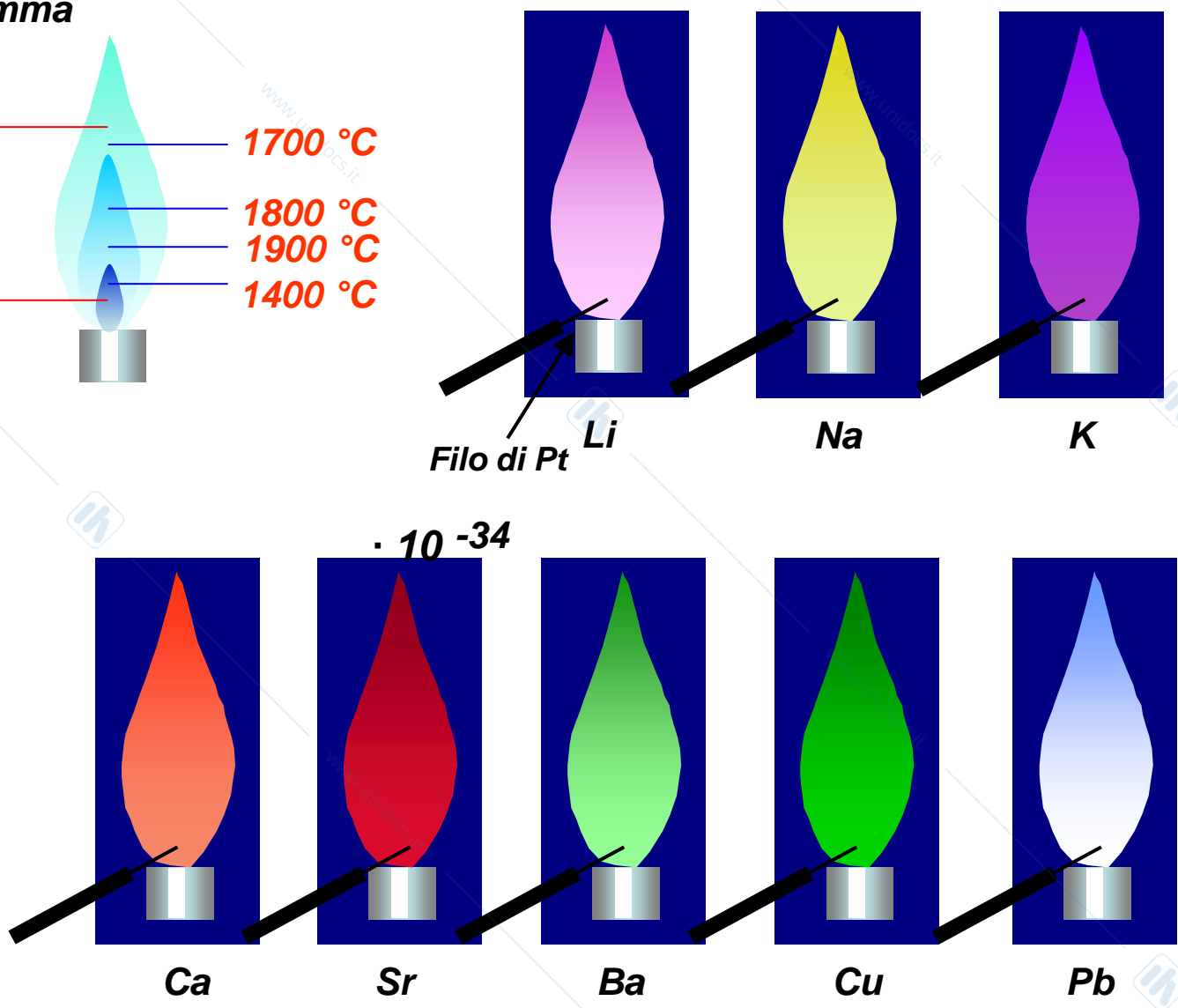
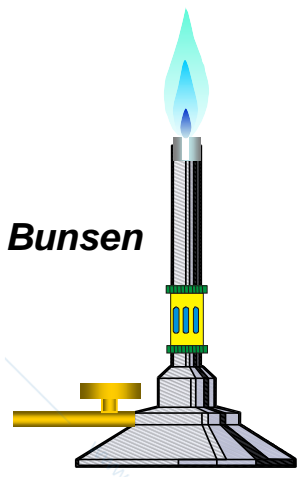
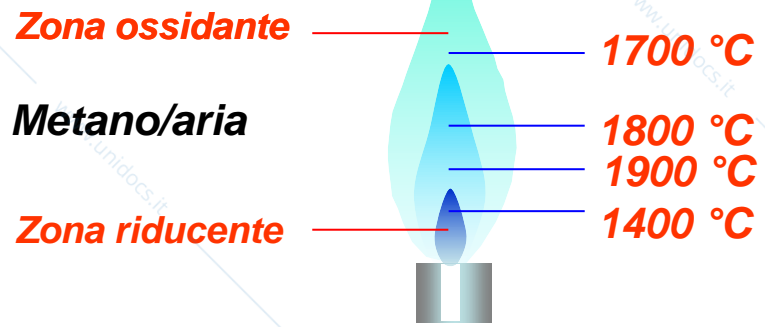
Righe di assorbimento del sodio (a circa 3000 K)



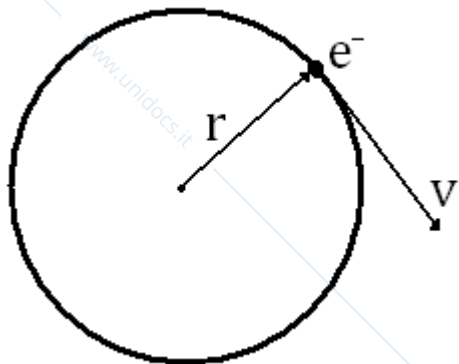
La luce gialla emessa da una lampada a vapori di sodio per l'illuminazione pubblica ha $\lambda = 589$ nm, che corrisponde ad una frequenza data da $\nu = c/\lambda = 5,09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$

Possiamo calcolare l'energia corrispondente?
 $E = h \times \nu$

Saggio alla fiamma



Il primo modello atomico : Bohr (1913)



Nel modello di Bohr un elettrone e^- percorre un'orbita circolare di raggio noto, con una velocità tangenziale v costante.

Forza di attrazione coulombiana $F_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = k \frac{e^2}{r^2} = 8.98755 \cdot 10^9 \frac{e^2}{r^2}$

Affinchè elettrone non cada nel nucleo deve controbilanciare Forza centrifuga

$$F_2 = \frac{mv^2}{r}$$

$$k \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$$r = \frac{ke^2}{mv^2}$$

Primo Postulato
Momento angolare (o della quantità di moto) quantizzato

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

n = numero quantico

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 k e^2 m} \quad r = n^2 0.529 \text{ \AA}$$

L'energia totale

$$E_T = E_C + E_P = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{k e^2}{r}$$

$$E_T = -\frac{1}{2} \frac{k e^2}{\left(\frac{n^2 h^2}{4\pi^2 k e^2 m} \right)} = -\frac{1}{2} k e^2 \frac{4\pi^2 k e^2 m}{n^2 h^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 k^2 e^4 m}{h^2}$$

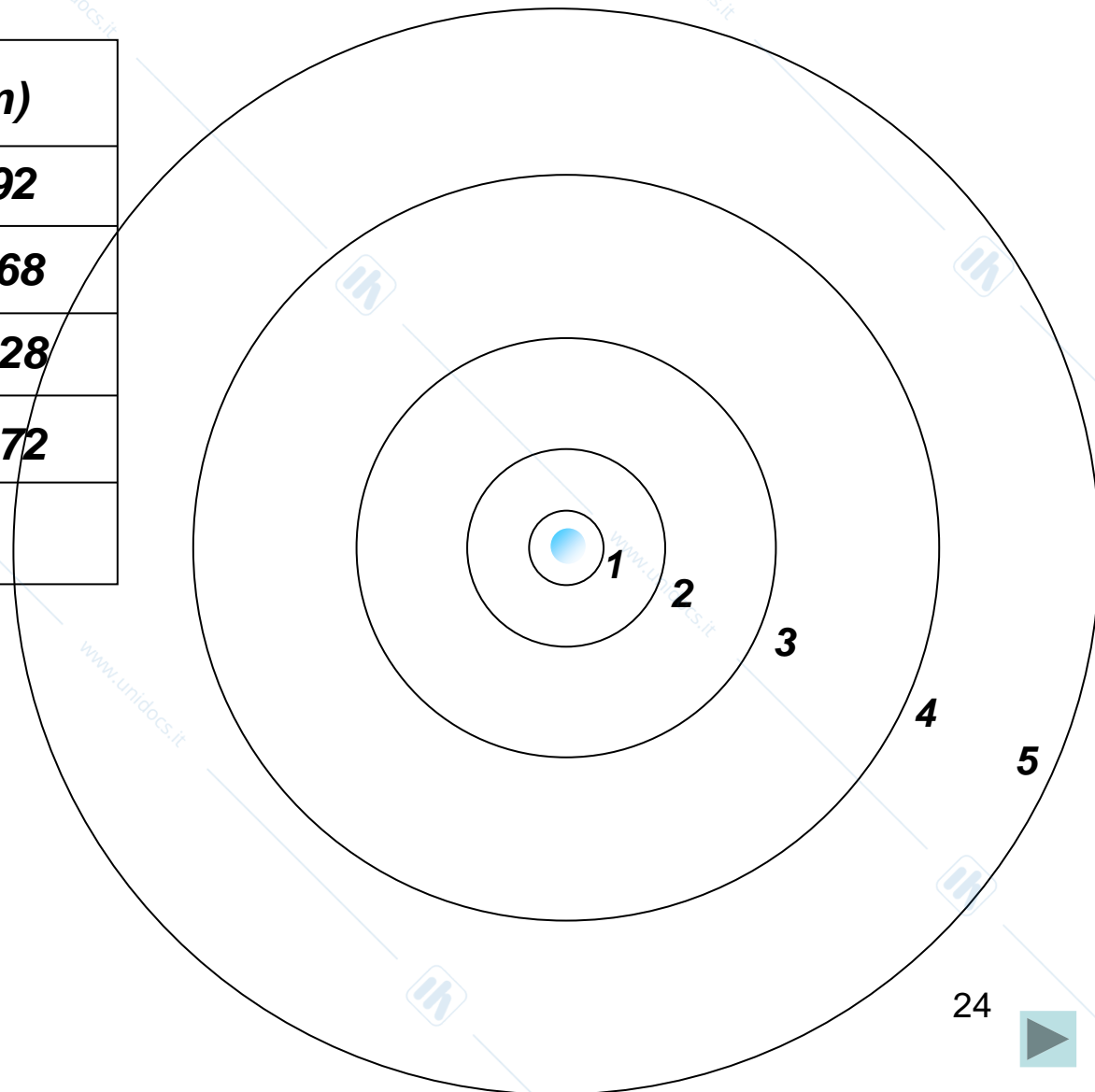
$$E_1 = -2,17896 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -2,17896 \cdot 10^{-18} \cdot 6,248 \cdot 10^{18} \text{ eV} = -13,614 \text{ eV}$$

Secondo Postulato : in assenza di qualsiasi interazione con l'esterno, il sistema atomico continua a sussistere permanentemente in uno dei suoi livelli energetici che per questa ragione sono chiamati *stati stazionari*.

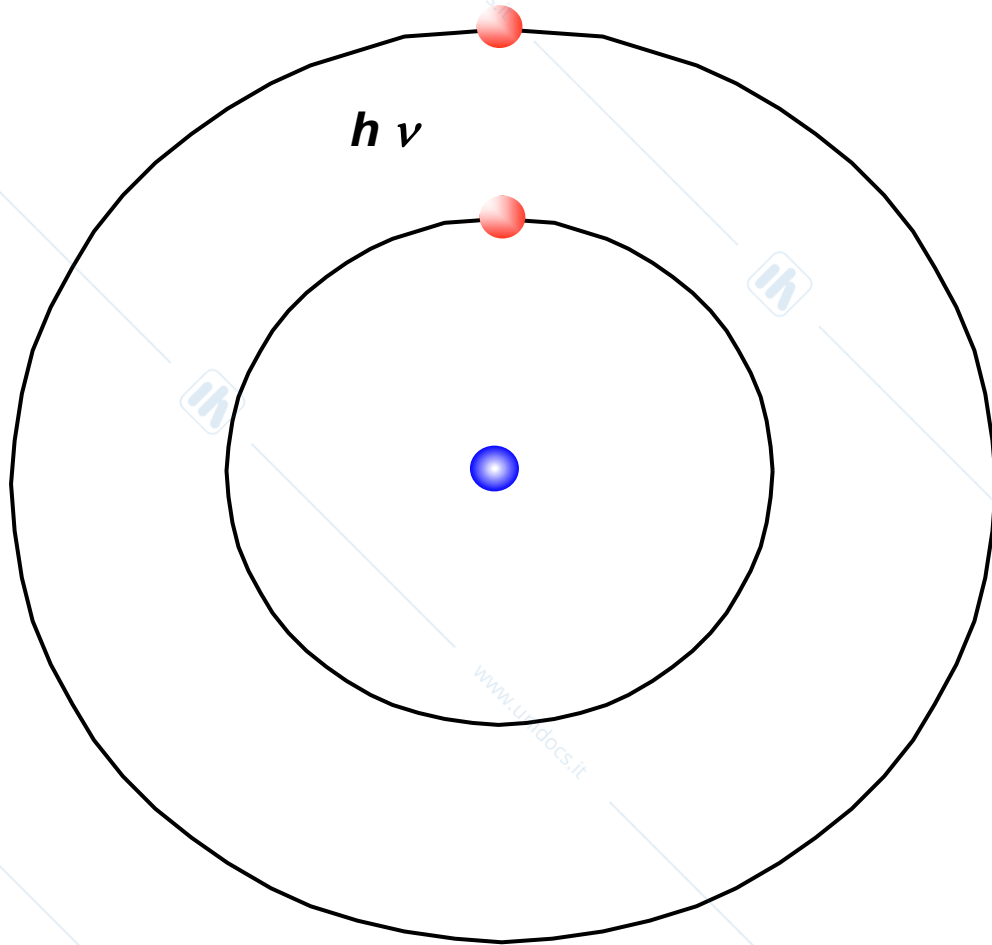
● Raggi di Bohr

$$r = 5,292 \cdot 10^{-11} n^2 \quad (m)$$

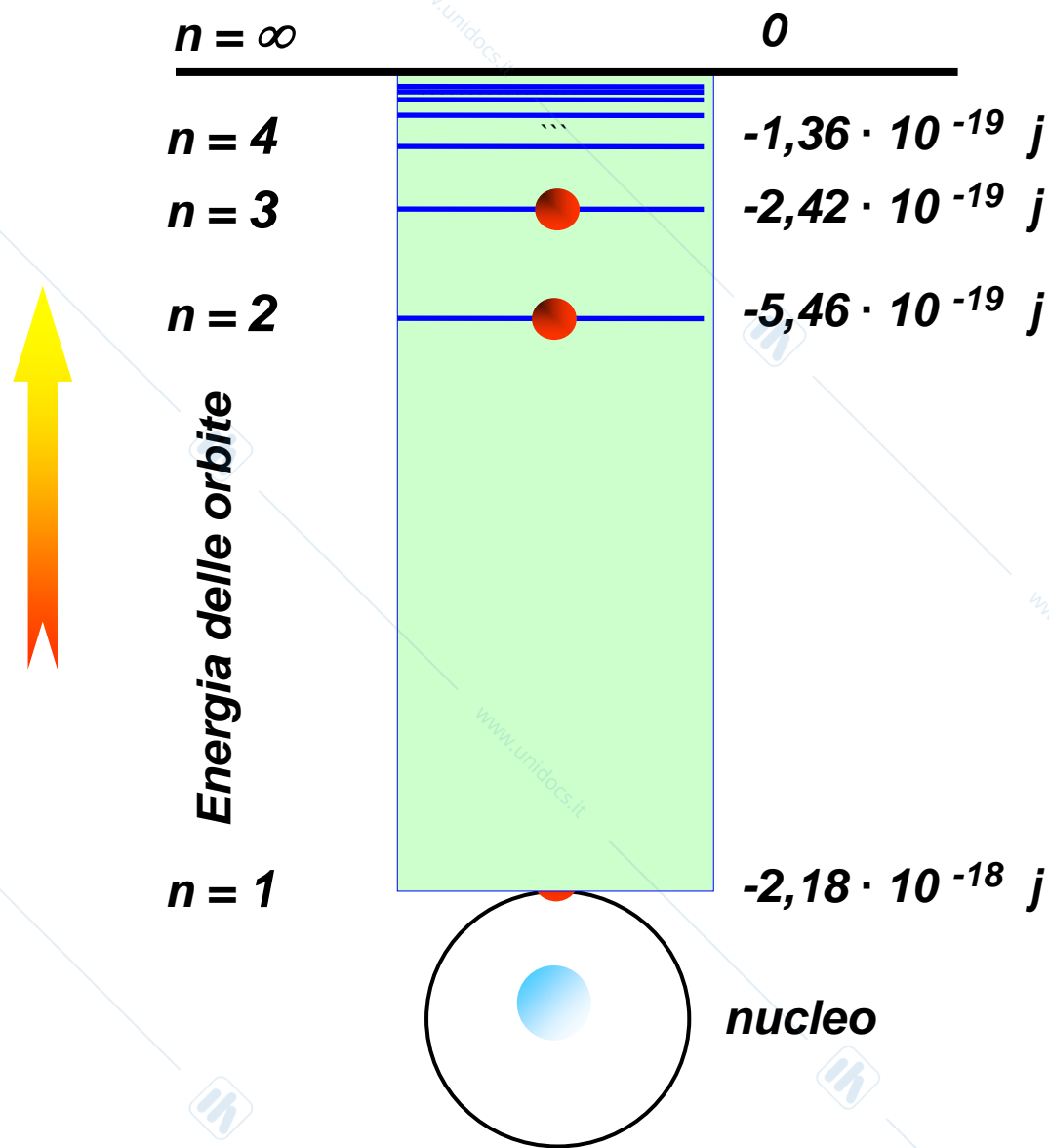
<i>n</i>	<i>r</i>	<i>r</i> (pm)
1	$52,92 \times 1^2$	52,92
2	$52,92 \times 2^2$	211,68
3	$52,92 \times 3^2$	476,28
4	$52,92 \times 4^2$	846,72
5	$52,92 \times 5^2$	1323



L'elettrone assume energia passando da un'orbita alla successiva. La stessa energia viene restituita quando l'elettrone ripassa nell'orbita sottostante



● **Per l'elettrone l'atomo è un "pozzo" di energia**



Se $E(n_1) > E(n_2)$

• **Emissione**

$$v = \frac{E(n_1) - E(n_2)}{h}$$

Se $E(n_2) > E(n_1)$

• **Assorbimento**

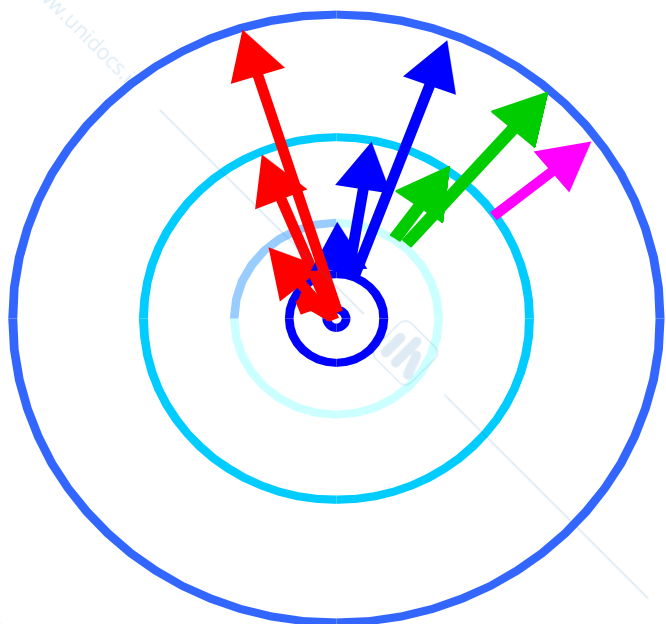
$$v = \frac{E(n_2) - E(n_1)}{h}$$

$$hv = E(n_1) - E(n_2) = -\frac{1}{n_1^2} E_1 + \frac{1}{n_2^2} E_1 = E_1 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

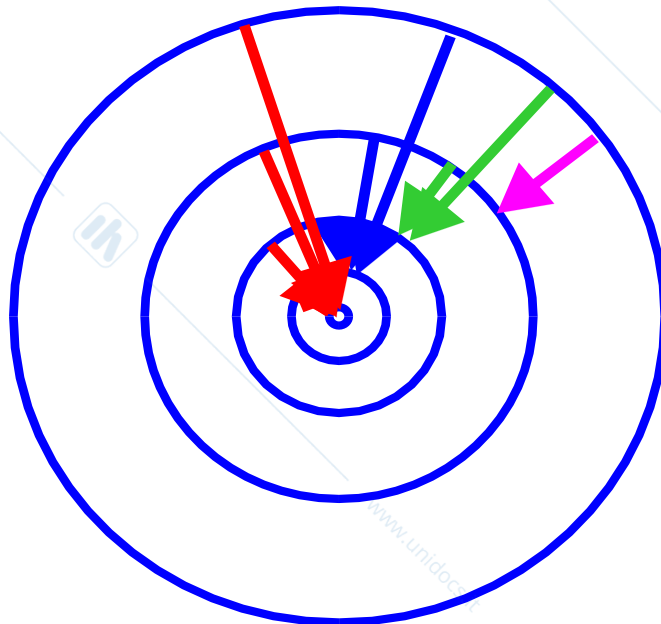
$$hv = \frac{hc}{\lambda} = E_1 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{E_1}{hc} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$$R_H = \frac{E_1}{hc} = \frac{2,17896 \cdot 10^{-18}}{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 2,99792458 \cdot 10^8} = 10969256,76 \text{ m}^{-1}$$

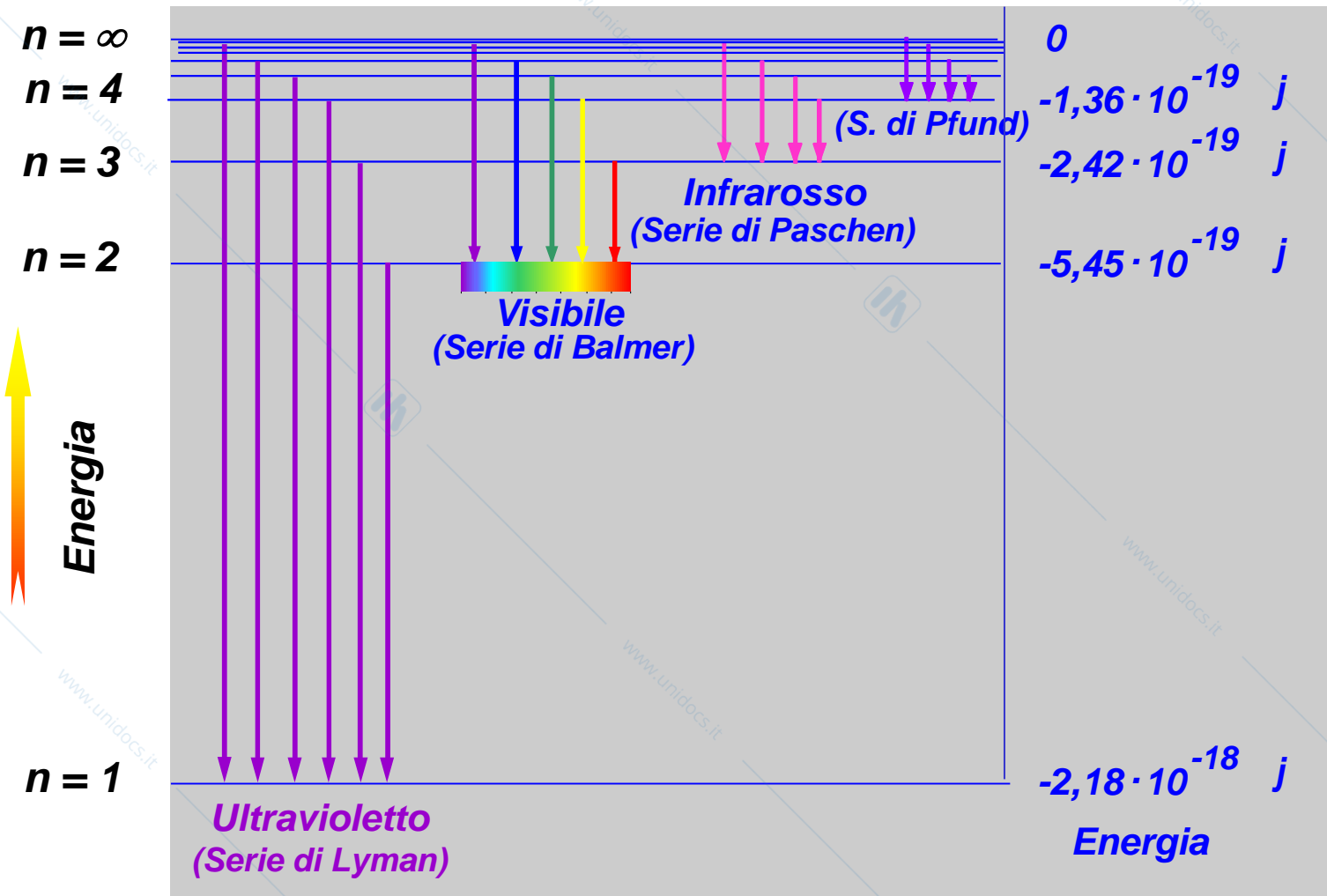
Spettri di assorbimento



Spettri di emissione



● **Origine delle righe di emissione per l'idrogeno**



$$n_1 = 2 \quad n_2 = 1 \quad \frac{1}{\lambda} = 109737.31 \left(1 - \frac{1}{4}\right) = 82302,98 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = 1215,0 \text{ \AA}$$

$$n_1 = 3 \quad n_2 = 1 \quad \frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \cdot 8/9 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = 1025,2 \text{ \AA}$$

$$n_1 = 4 \quad n_2 = 1 \quad \frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \cdot 15/16 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = 972,0 \text{ \AA}$$

$$n_1 = 5 \quad n_2 = 1 \quad \frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \cdot 24/25 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = 949,2 \text{ \AA}$$

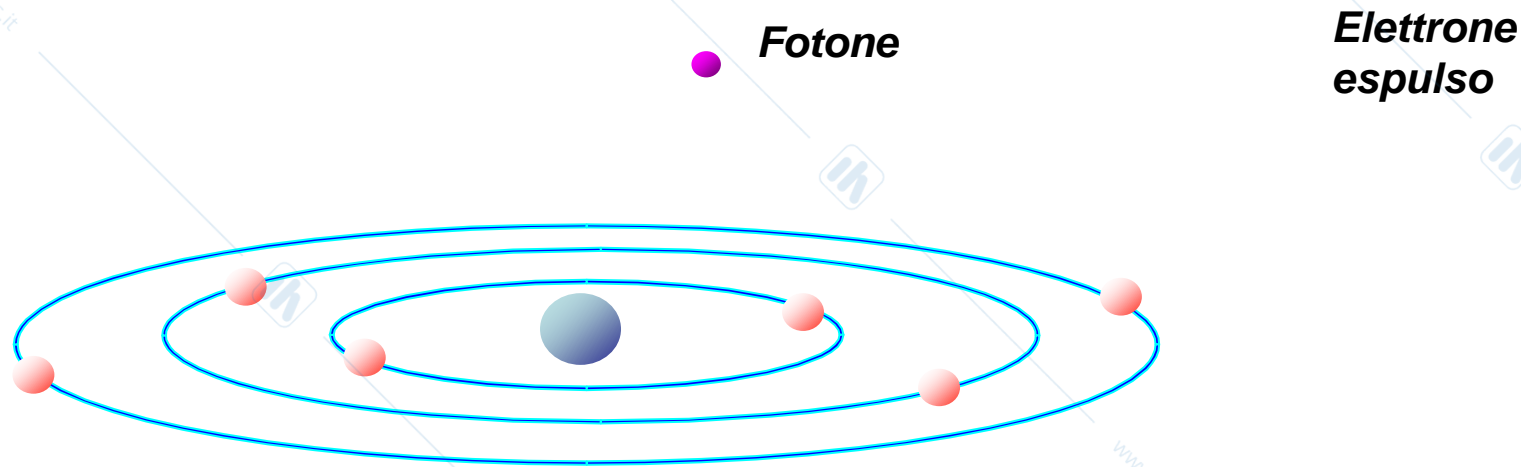
$$n_1 = 6 \quad n_2 = 1 \quad \frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \cdot 35/36 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda = 937,3 \text{ \AA}$$

**Già con l'elio però i calcoli non rispecchiano la realtà →
nuova meccanica (quantistica)**

● **Effetto Compton (1923)** (Dualismo della luce: comportamento corpuscolare)

I raggi X sono radiazioni elettromagnetiche, dotate di energia $E = h \nu$. Essi, convogliati su grafite, diffondono espellendo elettroni, che in questo caso si possono considerare come particelle dotate di massa e velocità (fotoni).



fotone $\left\{ \begin{array}{l} E = h \nu = h \frac{c}{\lambda} \\ E = m c^2 \end{array} \right.$

~~$m c^2 = h \frac{c}{\lambda}$~~

$m c = q = \frac{h}{\lambda}$

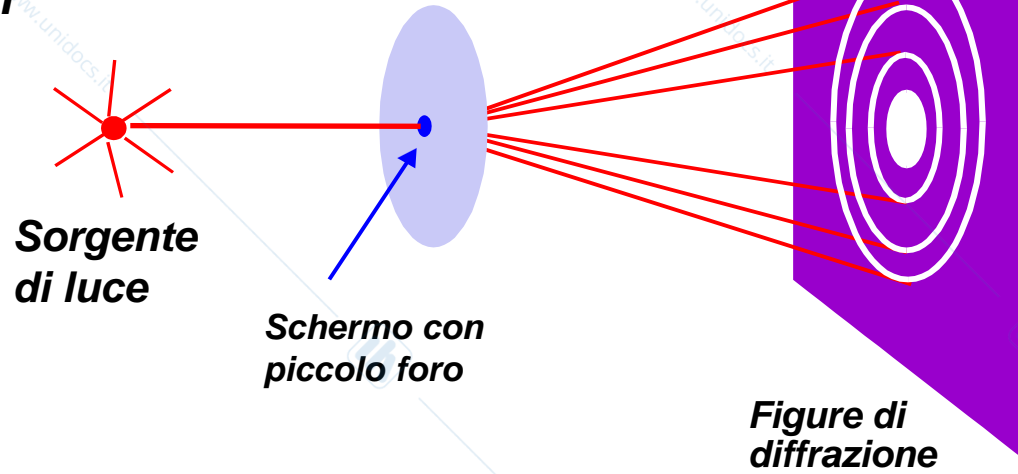
$q = \text{quantità di moto}$ massa del fotone: $m = \frac{h}{c \lambda}$

Fotone uscente

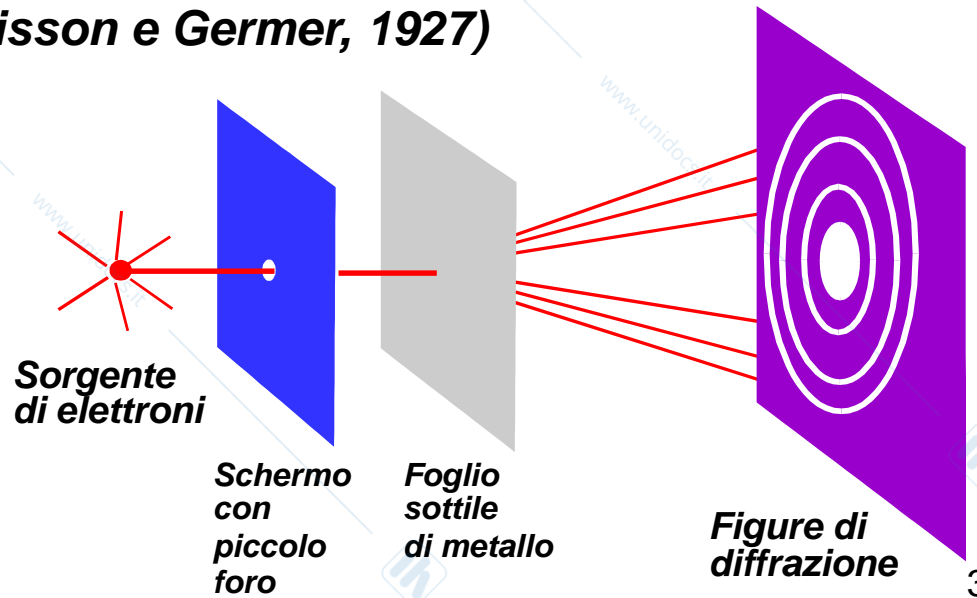


● **Comportamento ondulatorio degli elettroni**

Diffrazione dei raggi luminosi



Diffrazione degli elettroni (Davisson e Germer, 1927)



● **Ipotesi di De Broglie** (onda associata, 1924)

Per qualsiasi particella in movimento (e quindi anche per un elettrone):

$$p = m v = \frac{h}{\lambda} \quad \lambda = \frac{h}{m v}$$

L'onda associata di De Broglie si evidenzia solo per masse piccole:

Ad es. per una massa di 1 kg che si muove a 100 km/h (cioè a 27,8 m/s):

$$\lambda = \frac{h}{m v} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{1 \times 27,8} = 2,38 \cdot 10^{-35} \text{ m}$$

$$\nu = \frac{v}{\lambda} = \frac{27,8}{2,38 \cdot 10^{-35}} = 1,17 \cdot 10^{36} \text{ Hz}$$

Frequenze di questo tipo non sono attualmente misurabili

→ Fenomeni di diffrazione si possono manifestare solo per particelle molto piccole, anche se molto veloci



Invece ad es. per un elettrone ($m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg) che si muove a 10^4 m/s:

$$\lambda = \frac{h}{m v} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \times 10^4} = 73 \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

(73 nm)

$$\nu = \frac{v}{\lambda} = \frac{10^4}{73 \cdot 10^{-9}} = 1,37 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$$

(Frequenza che appartiene alla zona del lontano IR)

Ogni oggetto di massa m e velocità v può originare un'onda caratteristica di
 $\lambda = h/mv$
→ Dipende dal rapporto tra m e h se il valore di lunghezza d'onda ha senso
(è misurabile)



L'equazione di De Broglie

1924

È bene precisare che *l'onda tridimensionale associata a una particella materiale in movimento non è un'onda elettromagnetica*, in quanto essa non viene irradiata nello spazio dal sistema materiale e non può tuttavia mai essere dissociata dalla materia

➔ Per *particelle non appartenenti al mondo microscopico*, il comportamento ondulatorio non riveste particolare importanza ed il *moto di tali particelle può essere descritto adeguatamente dalla meccanica classica*

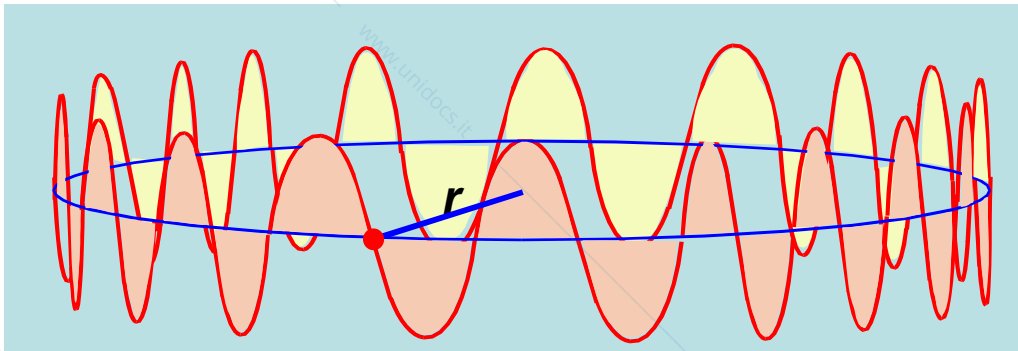
Esercizio 1 Calcolare la massa m associata a una mole di fotoni monocromatici con lunghezza d'onda pari a 3000 \AA

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= 3000 \text{ \AA} = 3000 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 3.0 \cdot 10^{-7} \text{ m} \\ v &= 3.0 \cdot \frac{10^8 \text{ m}}{\text{s}} \text{ velocità del vuoto} \end{aligned} \right\} \Rightarrow m = \frac{h}{\lambda v} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{3.0 \cdot 10^{-7} \text{ m} \cdot 3.0 \cdot 10^8 \text{ m/s}} = 7.3 \cdot 10^{-36} \text{ kg}$$

Per una mole di fotoni si avrà:

$$m = 7.3 \cdot \frac{10^{-36} \text{ kg}}{\text{fotone}} * 6.023 \cdot \frac{10^{23} \text{ fotoni}}{\text{mol}} = 4.4 \cdot 10^{-12} \text{ kg/mol}$$

● Quantizzazione del momento angolare



Per un'onda stazionaria:

$$2 \pi r = n \lambda \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (1)$$

Dall'ipotesi di De Broglie (natura ondulatoria dell'elettrone):

$$m v = \frac{h}{\lambda} \quad \lambda = \frac{h}{m v}$$

Sostituendo in (1):

$$2 \pi r = n \frac{h}{m v}$$

$$m v r = n \frac{h}{2 \pi}$$



● **Principio di indeterminazione di Heisenberg (1927)**

E' impossibile conoscere nello stesso istante la posizione e la velocità di una particella

$$\Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{h}{m}$$

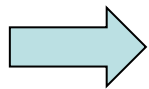
Δv = ***errore nel determinare la velocità***

Δx = ***errore nel determinare la posizione***

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

Se m è molto grande, $\frac{h}{m}$ è molto piccolo e anche $\Delta v \cdot \Delta x$ è molto piccolo

Per particelle a livello atomico o sub-atomico il prodotto $\Delta v \cdot \Delta x$ diventa significativo e impedisce di definire con precisione la posizione e il momento di una particella subatomica (in particolare l'elettrone) in un certo istante



Viene riconosciuta la natura ondulatoria dell'elettrone e il suo comportamento viene descritto con i termini adeguati per un'onda



Il principio di indeterminazione di Heisenberg

Oggetto di dimensioni macroscopiche	Oggetto di dimensioni microscopiche
<i>sferetta</i>	<i>elettrone</i>
$m = 10^{-3} \text{ g} = 10^{-6} \text{ kg}$	$m = 10^{-27} \text{ g} = 10^{-30} \text{ kg}$
$\Delta x \Delta v_x \cong \frac{h}{m} \cong$ $\cong \frac{6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{10^{-6} \text{ kg}} \cong$ $\cong 6.62 \times 10^{-28} \text{ m}^2 / \text{s}$	$\Delta x \Delta v_x \cong \frac{h}{m} \cong$ $\cong \frac{6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{10^{-30} \text{ kg}} \cong$ $\cong 6.62 \times 10^{-4} \text{ m}^2 / \text{s}$
si prenda $\Delta x = 10^{-12} \text{ m}$	si prenda $\Delta x = 10^{-12} \text{ m}$
risulta $\Delta v_x = 6.62 \times 10^{-16} \text{ m/s}$	risulta $\Delta v_x = 6.62 \times 10^8 \text{ m/s}$

I postulati della meccanica quantistica

Nella meccanica classica la luce è descritta solo come un'onda e l'elettrone solo come una particella

La meccanica quantistica descrive la radiazione e la materia sia come un fenomeno ondulatorio che allo stesso tempo come entità particellari

● **Equazione d'onda di Schrödinger (1925) (Teoria quanto-meccanica)**

$$H \psi = E \psi$$

ψ = **funzione d'onda associata all'elettrone (autofunzione)**

H = **operatore Hamiltoniano: derivate parziali seconde**

E = **energia totale dell'elettrone (autovalore)**

L'equazione ammette solo alcuni ben definiti valori di energia E_i , per ognuno dei quali corrisponde una funzione d'onda ψ_i

Ogni funzione d'onda ψ_i è caratterizzata da tre parametri, chiamati numeri quantici:

n = numero quantico principale

ℓ = numero quantico secondario (o azimutale)

m_ℓ = numero quantico magnetico



Molto usati in meccanica quantistica sono gli operatori che moltiplicano la funzione per una costante K reale o complessa, cioè

$$\alpha f(x) = K f(x)$$

dove α è l'operatore.

Tutte le funzioni che si comportano così si chiamano autofunzioni mentre la costante K viene chiamata autovalore.

Per esempio se il nostro operatore è $\alpha = d/dx$, le autofunzioni sono della forma e^{Kx} , dove K può essere un numero reale o complesso, poiché

$$\frac{d}{dx} e^{Kx} = K e^{Kx}$$

e quindi K è un autovalore.

Al contrario e^{Kx^2} non è un autofunzione dell'operatore $\alpha = d/dx$,

in quanto $\frac{d}{dx} e^{Kx^2} = 2Kx e^{Kx^2}$ è il prodotto di una costante

($2K$), ma per una funzione differente, ($x e^{Kx^2}$).

• **Postulato 1**

Ogni stato di un sistema costituito da una particella è completamente descritto da una funzione d'onda $\Psi(x,y,z,t)$ che è chiamata *funzione di stato* di sistema. Essa fissa il comportamento nello spazio e nel tempo della particella quantomeccanica (elettrone, protone, neutrone, mesone, ecc.).

• **Postulato 2**

Il prodotto $\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t)$, che è un numero reale, rappresenta la probabilità di trovare al tempo t la particella quantomeccanica all'interno dell'intervallo $x \leftrightarrow x+dx$. Pertanto la probabilità di trovare la particella nello spazio che va da $-\infty$ fino a $+\infty$, indicherà la certezza che matematicamente è rappresentata dal numero 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) dx = 1$$

non si può più dire che la particella occupa una porzione ben precisa $P(x)$, ma che la particella è contenuta entro un elemento di volume dV , centrato attorno a P , con una probabilità pari a $\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) dV$.

Postulato 3

La funzione d'onda $\Psi(x,t)$ e la sua derivata $(\partial/\partial x) \Psi(x,t)$ devono essere funzioni finite e ad un unico valore rispetto alla variabile x e devono essere continue in un mezzo isotropo

Postulato 4

La meccanica quantistica impiega gli operatori piuttosto che le variabili dinamiche. Gli operatori sostituiscono le variabili dinamiche quali posizione, momento della quantità di moto p , energia totale del sistema, ecc.. Gli operatori agiscono sulla funzione $\Psi(x,t)$ trasformandola in un'altra funzione.

$$E_{\text{totale}} = E_{\text{cinetica}} + E_{\text{potenziale}} = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x)$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + V(x)$$

Quindi l'operatore corrispondente all' E_{totale} =
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Postulato 5

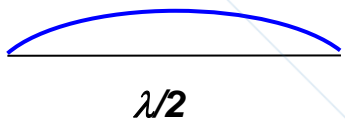
E' possibile calcolare il valore medio o valore di aspettazione $\langle \xi \rangle$ di una variabile dinamica una volta sia nota la funzione d'onda normalizzata $\Psi(x,t)$, con il seguente integrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \hat{\xi} \Psi(x,t) dx$$

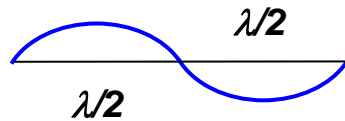
● Equazione d'onda di Schrödinger (1925)

1) Si applica all'elettrone l'equazione di un'onda stazionaria

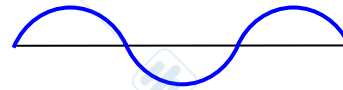
Es. la vibrazione di una corda lunga l tra due estremità fisse.



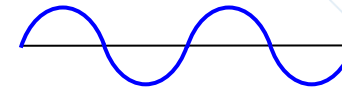
$$l = 1 (\lambda/2)$$



$$l = 2 (\lambda/2)$$



$$l = 3 (\lambda/2)$$



$$l = 4 (\lambda/2)$$

Per un numero n di semilunghezze d'onda: $l = n (\lambda/2)$

da cui si ricava: $\lambda = 2l / n = f(n)$

La lunghezza d'onda λ è funzione della sola n e quindi indipendente dal tempo e, di conseguenza, anche la sua energia E . Se si indica con ψ lo scostamento della corda dalla posizione di quiete lungo un asse x , l'equazione dell'onda risulta:

$$d^2\psi / dx^2 = \frac{-4\pi^2}{\lambda^2} \psi$$



Per descrivere il moto nelle tre direzioni dello spazio (assi x, y, z):

$$d^2\psi / dx^2 + d^2\psi / dy^2 + d^2\psi / dz^2 = \frac{-4\pi^2}{\lambda^2} \psi \quad (1)$$

2) Si accetta che la lunghezza d'onda λ sia legata alla massa m e velocità v dell'elettrone dalla relazione di De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{m v}$$

Questa relazione, opportunamente trasformata, ricordando che l'energia cinetica $E_{cin} = \frac{1}{2} m v^2$, $E_{tot} = E_{cin} + E_{pot}$, $E_{pot} = e^2 / r$ diventa:

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{m^2 v^2}{h^2} = \frac{2 m (0,5 m v^2)}{h^2} = \frac{2 m E_{cin}}{h^2} = \frac{2 m (E_{tot} - E_{pot})}{h^2} = \frac{2 m (E_{tot} + e^2/r)}{h^2}$$

Sostituendo in (1):

$$d^2\psi / dx^2 + d^2\psi / dy^2 + d^2\psi / dz^2 = \frac{-8\pi^2 m}{h^2} (E_{tot} + e^2/r) \psi \quad (2)$$

La (2) è detta **equazione degli stati stazionari**, è ad energia definita e indipendente dal tempo.



- L'operatore hamiltoniano può essere descritto come la somma di

$E_{\text{cin}} + E_{\text{pot}}$ (entrambe sotto forma di operatore) (in una dimensione)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

Le incognite da trovare risolvendo l'equazione sono E e la funzione d'onda ψ . Quando l'equazione è applicata a sistemi reali (es. atomo di H) non può essere risolta a meno che E assuma certi valori correlati a numeri interi (numeri quantici).

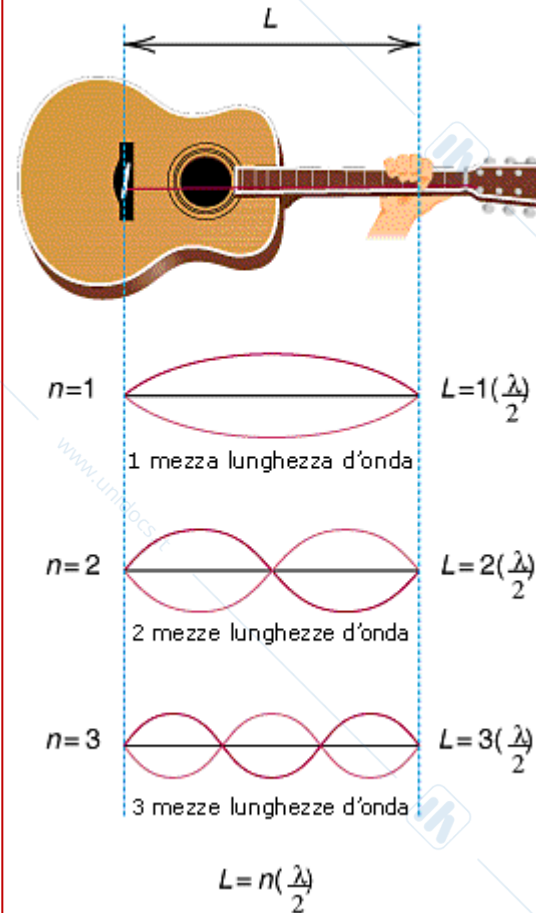
ψ : di per sè stessa non ha significato fisico, ma il quadrato del valore assoluto di ψ , $|\psi|^2$, fornisce l'espressione matematica della probabilità di trovare una particella in una data regione di spazio (**orbitale** definito attraverso numeri quantici).

n

l

m_l

L'elettrone come un'onda stazionaria in 3D



L'equazione di Schrödinger

1926

Nel 1926 E. Schrödinger *partendo dall'idea di De Broglie che una particella materiale (elettrone) può essere considerata un'onda, propose di applicare all'elettrone l'Equazione*

$$\frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial z^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial t^2} = 0$$

valida per onde di qualsiasi tipo.



Che forma assume la funzione $\bar{\Psi}(x,y,z,t)$?

Consideriamo il dualismo onda-particella

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0$$

con $f(x,y,z,t)$ corrisponde al campo **E** o **B**

Nota $f(x,y,z,t)$ è possibile determinare la densità d'energia elettromagnetica in ogni punto dello spazio

L'equazione di Schrödinger

La densità d'energia elettromagnetica in ogni punto dello spazio è direttamente legata alla probabilità dei fotoni di trovarsi in un certo istante entro un determinato elemento di volume dV dello spazio

considerando l'onda elettromagnetica secondo la TEORIA DI MAXWELL		E_{max}^2 oppure B_{max}^2 oppure f^2	è PROPORZIONALE a: energia dell'onda elettromagnetica per unità di volume	
considerando l'onda elettromagnetica secondo la TEORIA DI PLANCK	energia dell'onda elettromagnetica per unità di volume	è PROPORZIONALE a: numero di fotoni per unità di volume	facendo riferimento ad un solo fotone	è PROPORZIONALE a: probabilità per unità di volume di trovare il fotone in un punto OSSIA densità di probabilità di trovare il fotone in un punto

Si può, pertanto, concludere che nel caso delle *onde elettromagnetiche* :
 f^2 è proporzionale alla densità di probabilità di trovare il fotone in un punto



$|\bar{\Psi}^2|$ è proporzionale alla densità di probabilità di trovare l'elettrone in un punto

L'equazione di Schrödinger

Nel caso di:

- ❑ stato stazionario (**energia costante nel tempo**);
- ❑ Ψ una **funzione d'onda monocromatica**, cioè una funzione sinusoidale del tempo:

$$\bar{\Psi}(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) \text{sen} \omega t$$

con $\omega = 2\pi\nu$

energia totale particella



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

massa della particella

energia potenziale particella

L'equazione di Schrödinger

In coordinate cartesiane applicata all'atomo di idrogeno

Applicando all'elettrone in moto attorno al nucleo l'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari (indipendenti dal tempo):

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

nella forma coulombiana, che esprime l'interazione tra $-e$ (elettrone) ed $+e$ (protone)

$$E_p = -\frac{e^2}{r}$$



$$\frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0$$

L'equazione di Schrödinger

In coordinate polari applicata all'atomo di idrogeno

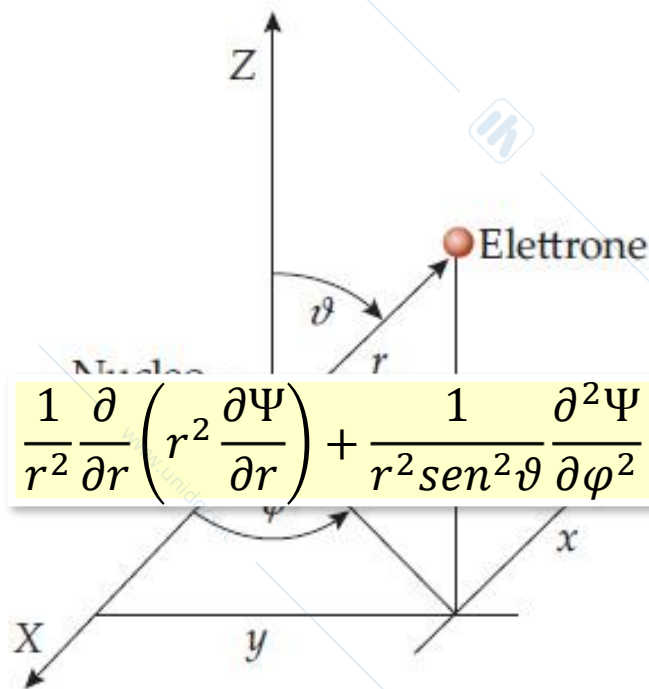
A causa della simmetria sferica dell'atomo è conveniente esprimere le funzioni tramite coordinate polari (r, ϑ, φ)

➔ cambio sistema coordinate $\Psi(x, y, z) \Rightarrow \Psi(r, \vartheta, \varphi)$

Ricordando che:
$$\begin{cases} x = r \operatorname{sen} \vartheta \cos \varphi \\ y = r \operatorname{sen} \vartheta \operatorname{sen} \varphi \\ z = r \cos \vartheta \end{cases}$$



$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\operatorname{sen} \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0$$



L'equazione di Schrödinger

Autovalori, autofunzioni e condizioni al contorno

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0$$

Le soluzioni Ψ sono fisicamente accettabili solo per determinati valori di E (autovalori dell'equazione differenziale):

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$

$$n \in \mathbb{N}$$



$$E_1 = -13.6 \text{ eV}, E_2 = -3.4 \text{ eV}, E_3 = -1.51 \text{ eV}, \text{ etc...}$$

Le soluzioni Ψ , che risolvono l'equazione con questi valori di E , sono denominate **autofunzioni**.

L'equazione di Schrödinger

Autovalori, autofunzioni e condizioni al contorno

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0$$

Per risolvere l'equazione d'onda di Schrödinger nel caso **dell'idrogeno H** bisogna porre le opportune **condizioni al contorno**:

❑ Ψ devono essere:

- ✓ nulle all'infinito,
- ✓ continue e a un solo valore in ogni punto dello spazio, insieme con le loro derivate;

❑ Ψ devono soddisfare la **condizione di normalizzazione**: $\int_{V=\infty} |\Psi|^2 dV = 1$

❑ due funzioni Ψ_m e Ψ_n (soluzioni riferite a E_m e E_n) devono soddisfare la **condizione di ortogonalità**:

$$\int_{V=\infty} \Psi_m \Psi_n dV = 0$$

- **Le funzioni d'onda , soluzioni dell'equazione di S. nel caso di H, sono funzioni complesse che contengono tre parametri :**

I numeri quantici

n = numero quantico principale: definisce i livelli energetici dell'elettrone e può assumere solo valori interi:

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$$

ℓ = numero quantico secondario: determina il momento angolare dell'elettrone, definisce i sottolivelli energetici dell'elettrone con lo stesso numero quantico n ; è legato a n e può assumere tutti i valori interi da 0 a $n-1$:

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

m_ℓ = numero quantico magnetico: definisce le possibili orientazioni del campo magnetico orbitale quando l'atomo è soggetto a un campo magnetico esterno. Poiché l'elettrone determina un campo magnetico che dipende dal momento angolare, esso è legato a ℓ e può assumere tutti i valori di ℓ da $-\ell$ a $+\ell$ compreso lo zero:

$$m_\ell = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \dots 0, \dots \ell-2, \ell-1, \ell$$

Per ogni valore di ℓ , m_ℓ può assumere $2\ell+1$ valori



Ogni terna di numeri quantici individua una funzione d'onda ψ e quindi un "orbitale":

$$\psi(n, \ell, m_\ell)$$

$$\psi_{1s}(1, 0, 0)$$

$$\psi_{2p}(2, 1, -1)$$

$$\psi_{3p}(3, 1, -1)$$

$$\psi_{2s}(2, 0, 0)$$

$$\psi_{2p}(2, 1, 0)$$

$$\psi_{3p}(3, 1, 0)$$

$$\psi_{3s}(3, 0, 0)$$

$$\psi_{2p}(2, 1, 1)$$

$$\psi_{3p}(3, 1, 1)$$

Orbitale : regione di spazio in cui si ha >90% di probabilità di trovare l'elettrone

$$\int_V |\psi|^2 dV = 0,95$$

normalizzazione



● **Valori dei numeri quantici ℓ e m_ℓ per i primi 4 valori di n**

n	ℓ	m_ℓ	Tipo di orbitale	Numero di orbitali
1	0	0	1s	1
2	0	0	2s	1
	1	-1, 0, +1	2p	3
3	0	0	3s	1
	1	-1, 0, +1	3p	3
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5
4	0	0	4s	1
	1	-1, 0, +1	4p	3
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7



● Funzioni d'onda (= orbitali) 1s e 2s

Simbolo dell'orbitale

Funzione d'onda ψ

(a_0 = raggio di Bohr, r = distanza dal nucleo)

1s

$$(\psi_{1s}) = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \cdot e^{-r/a_0}$$

2s

$$(\psi_{2s}) = \frac{1}{4(2\pi a_0^3)^{1/2}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

coordinate cartesiane espresse in funzione delle coordinate polari sferiche :

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

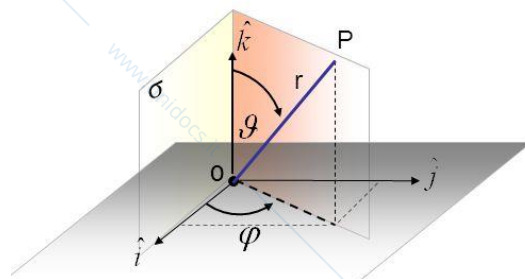
le relazioni inverse sono:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\vartheta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{y}{x}$$

Le funzioni d'onda espresse in coordinate polari sono relativamente semplici



L'equazione di Schrödinger

Le funzioni d'onda orbitali atomici

Se si pone l'origine del sistema di coordinate polari nel nucleo si trova che le funzioni d'onda possono essere espresse come:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

parte radiale

parte angolare

Esprime la dipendenza di Ψ dal nucleo e contiene i numeri n e l .



$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$$

ottenendo in questo modo due soluzioni separate

$R(r)$ è in forma di polinomi (polinomi associati di Laguerre):

$$R_{n,l}(r) = \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \left(\frac{2}{na_0} \right)^{l+3/2} r^l e^{-r/na_0} L_{n+l}^{2l+1} \left[\left(\frac{2}{na_0} \right) r \right]$$

con $a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

● **Energia degli orbitali**

Dall'equazione di Schrödinger per l'atomo di idrogeno si ricava (come nella teoria di Bohr):

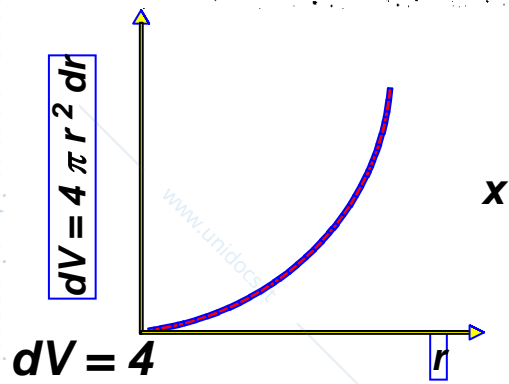
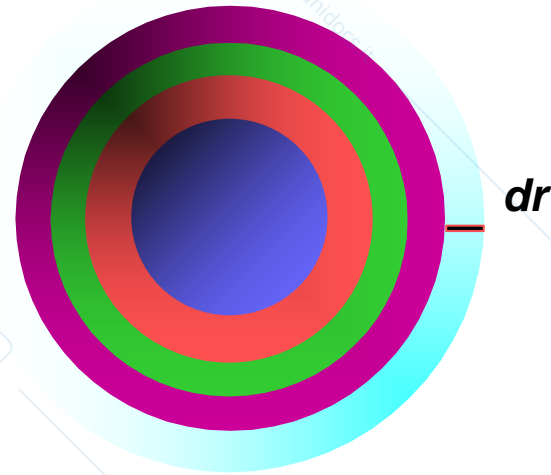
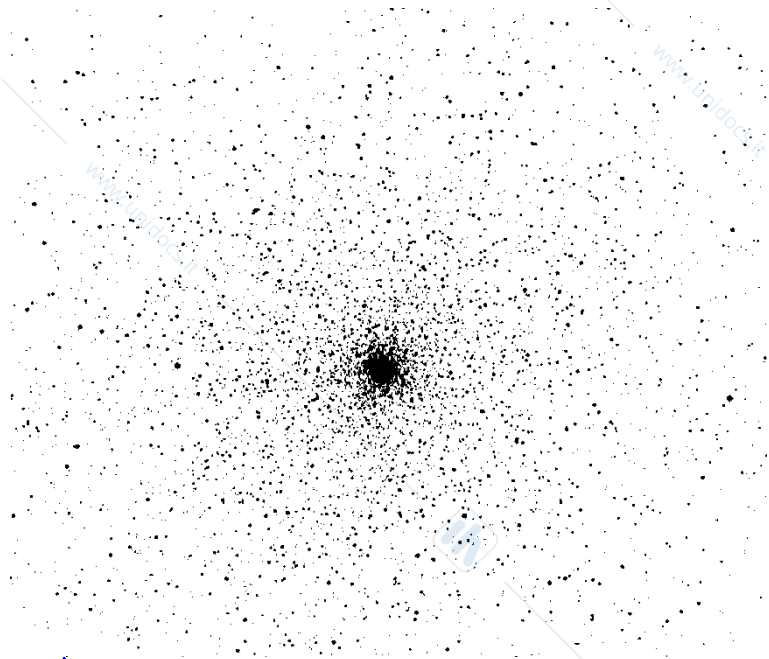
$$E = -\frac{me^4Z^2}{8\epsilon_0^2n^2h^2} \quad E = -2,18 \cdot 10^{-18} \frac{1}{n^2} \quad J$$

Per gli atomi a più elettroni l'energia degli orbitali dipende anche dal numero secondario ℓ , che definisce i sottolivelli

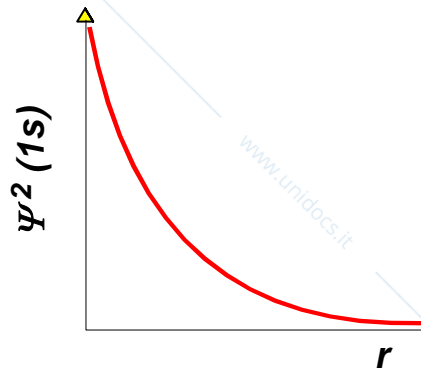
All'interno di ogni sottolivello (es. orbitali 2p, 3p, 3d, ..) gli orbitali sono degeneri (= stessa energia)



● Orbitale 1s (ψ^2_{1s})

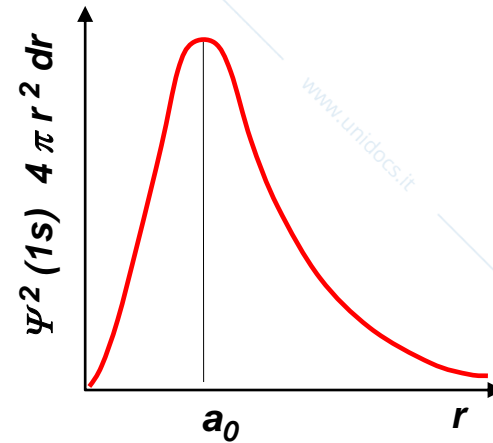


Volume del guscio



Densità di probabilità

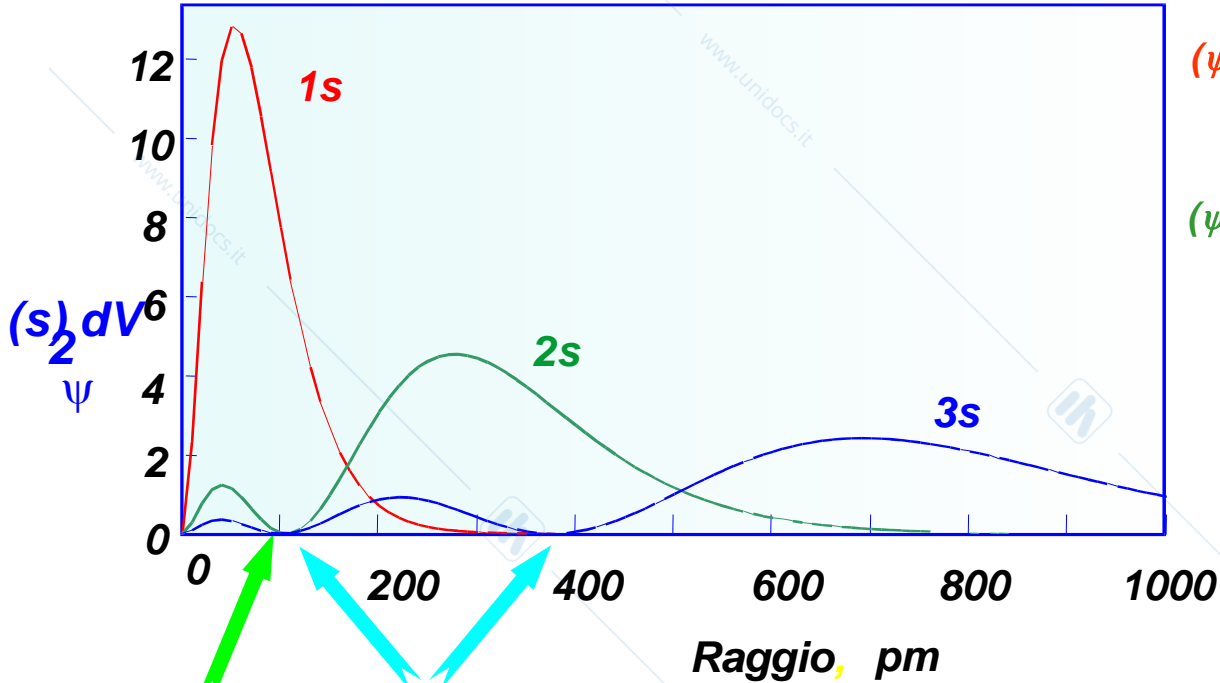
||



**Probabilità radiale
(Funzione di distribuzione della probabilità)**

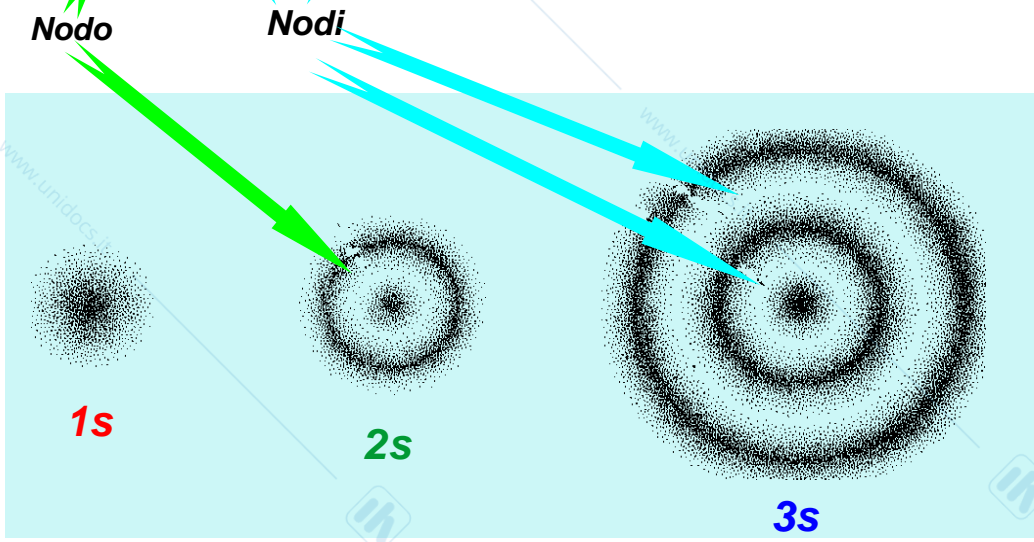


● **Orbitali s: probabilità radiale**



$$(\psi_{1s}) = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} e^{-r/a_0}$$

$$(\psi_{2s}) = \frac{1}{4(2\pi a_0^3)^{1/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2 a_0}$$



● **Nodi degli orbitali s**

Per ogni orbitale di tipo ns esistono (n - 1) nodi

$$\text{Es. } \psi(2s) = \frac{1}{4 (2\pi a_0^3)^{1/2}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2 a_0}$$

Per $r = 2 a_0$ si ottiene: $\psi(2s) = 0$

Pertanto anche $\psi^2(2s) = 0$ Si ha quindi 1 nodo

$$\psi(1s) = 0 \text{ nodi}$$

$$\psi(2s) = 1 \text{ nodo}$$

$$\psi(3s) = 2 \text{ nodi}$$

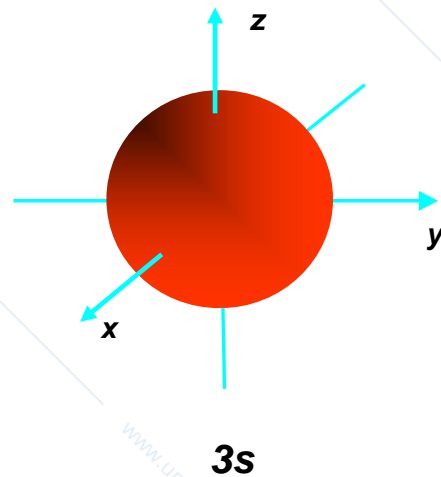
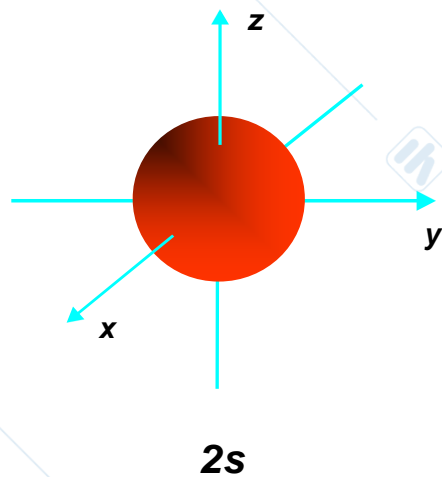
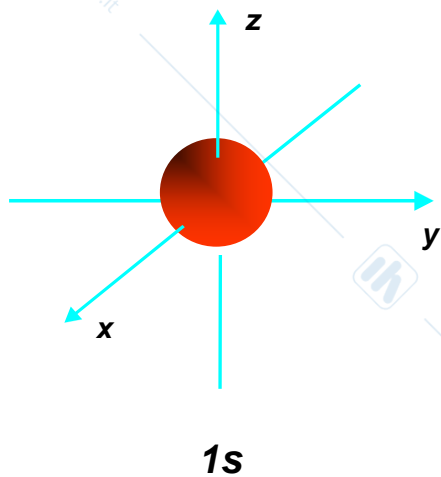
$$\psi(4s) = 3 \text{ nodi}$$

$$\dots = \dots$$



Orbitali s

$$l = 0$$

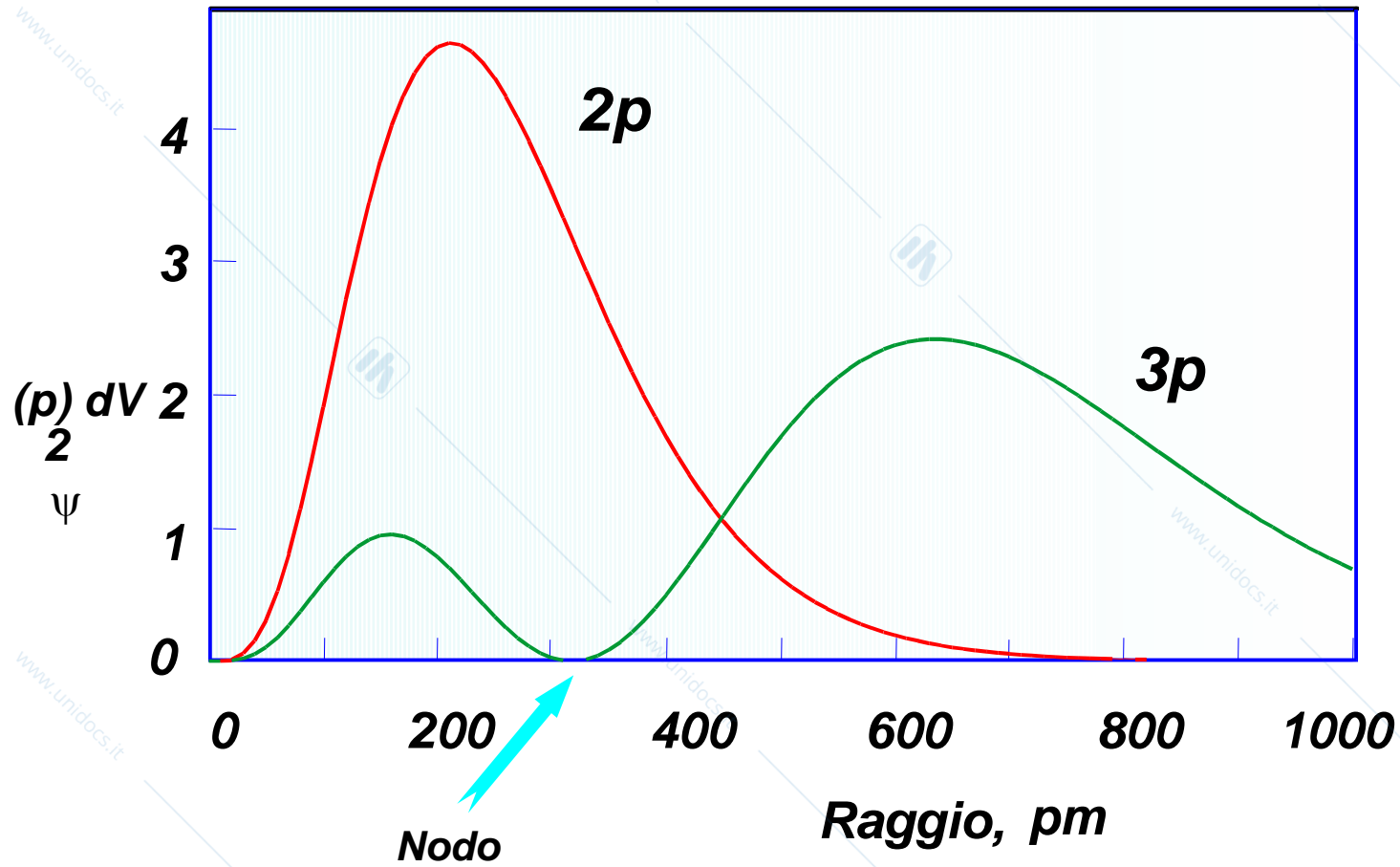


2-16.01.08

63

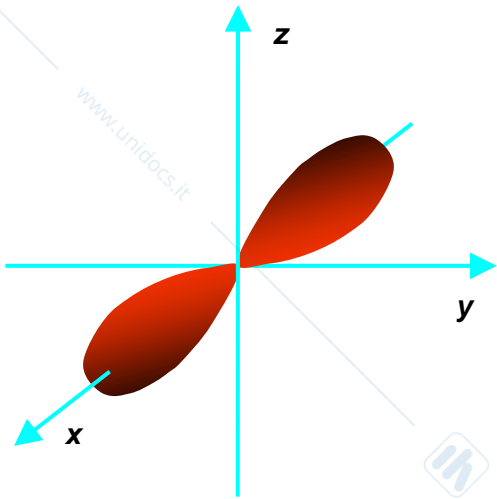


● **Orbitali p: probabilità radiale**

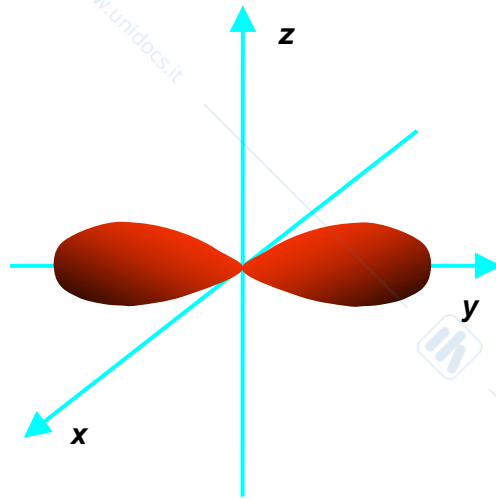


● **Orbitali p**

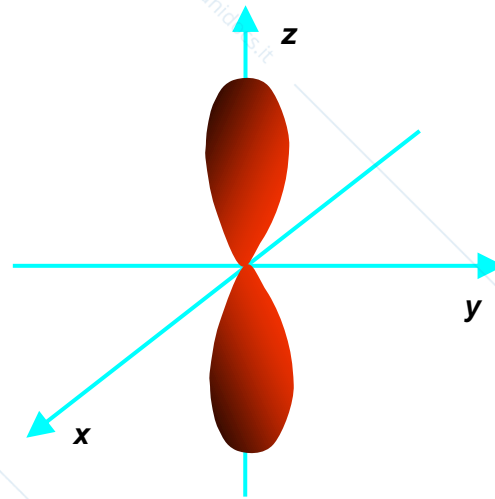
$l = 1$



p_x



p_y

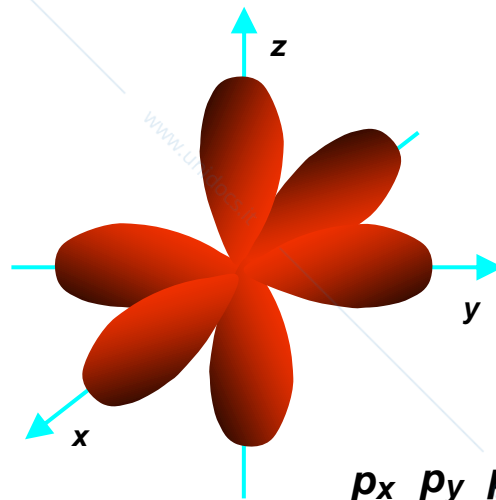


p_z

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \sin\theta \cos\varphi$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \sin\theta \sin\varphi$$

$$\psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} \cos\theta$$



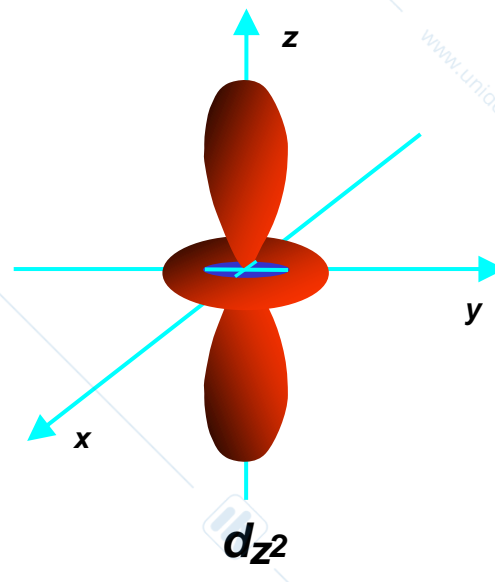
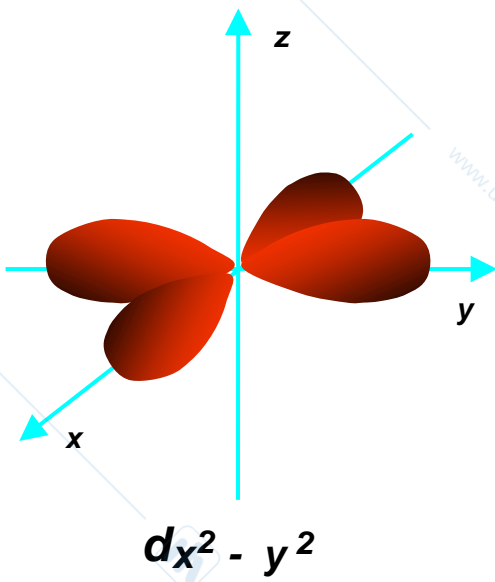
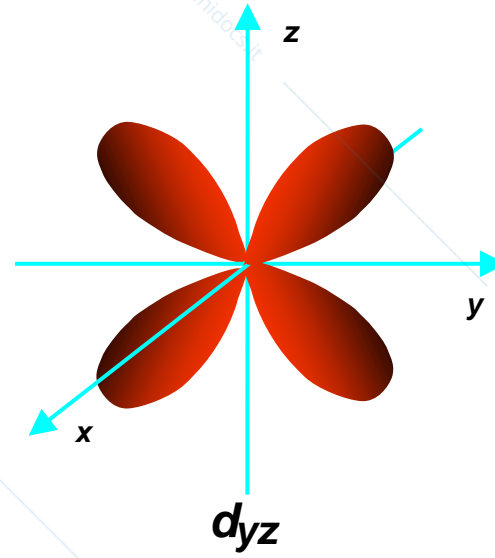
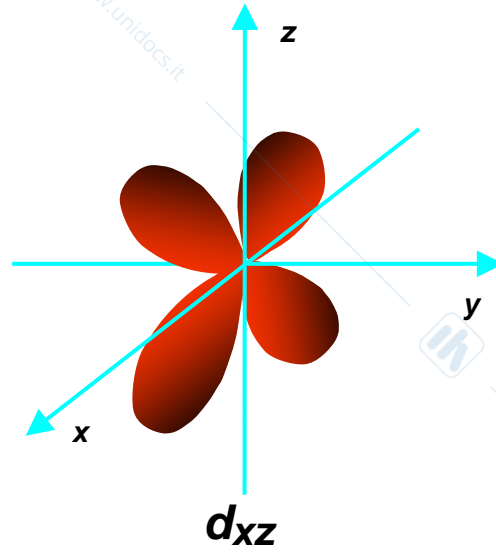
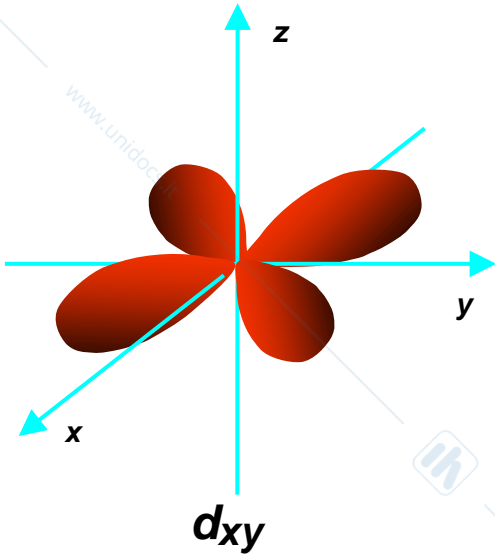
$p_x \ p_y \ p_z$

$$\rho = Zr/a_0$$

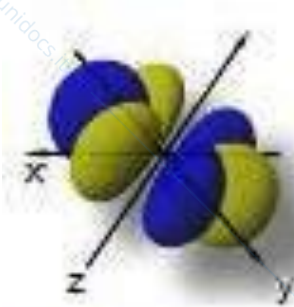


● **Orbitali d**

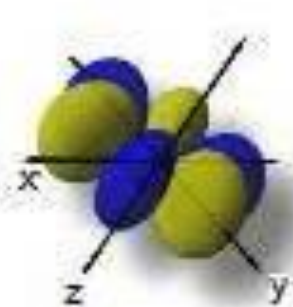
$l = 2$



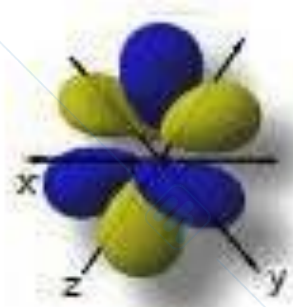
Orbitali f



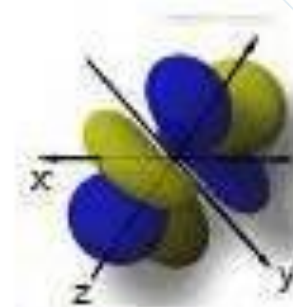
$$4f_{y^3 - 3x^2y}$$



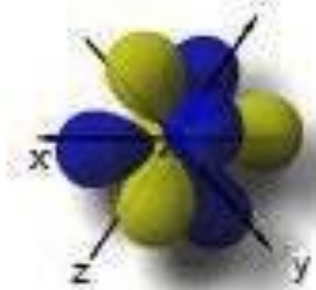
$$4f_{x^3 - 3xy^2}$$



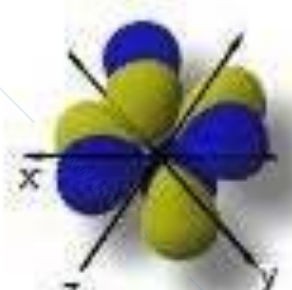
$$4f_{5xz^2 - xr^2}$$



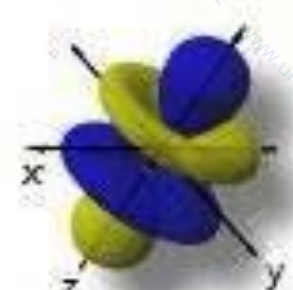
$$4f_{5yz^2 - yr^2}$$



$$4f_{xyz}$$



$$4f_{2z^2 - z^2}$$

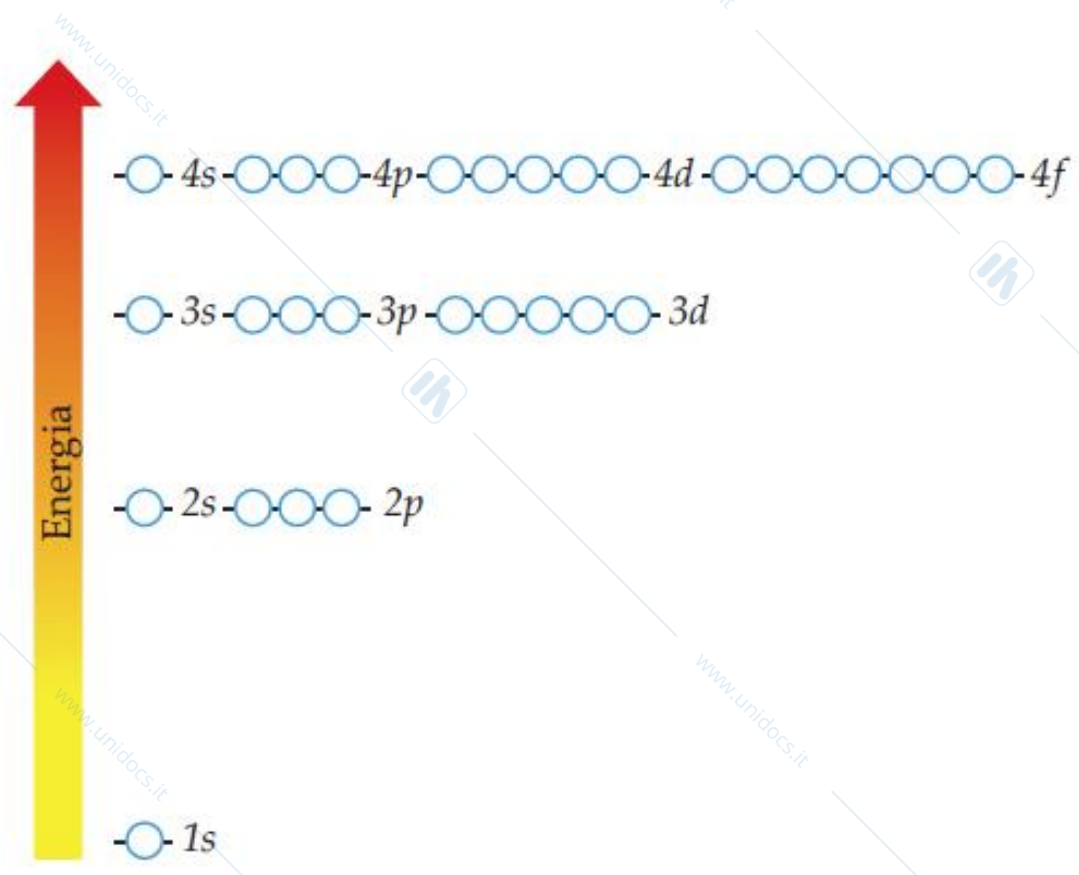


$$4f_{z^3 - 3zr^2}$$

L'equazione di Schrödinger

Orbitali

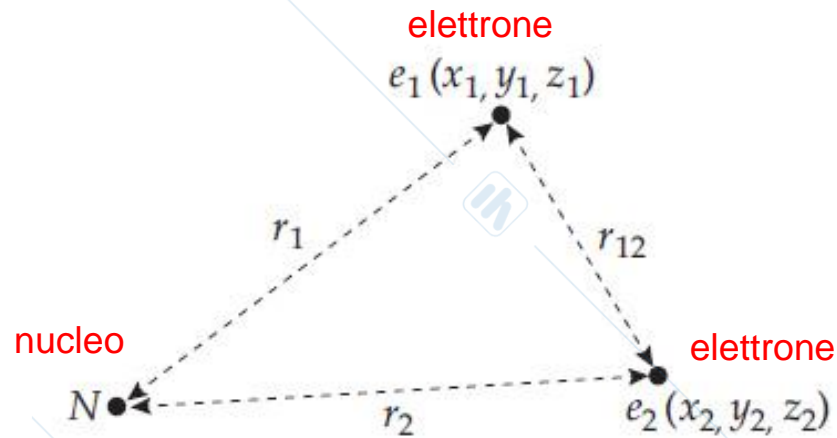
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$



Energia degli orbitali per atomi idrogenoidi

Atomi con più elettroni

Quando si considerano **atomi con più di un elettrone** oltre ai termini che descrivono l'attrazione coulombiana d'ogni elettrone da parte del nucleo, si devono inserire anche i termini che corrispondono alle mutue repulsioni fra gli elettroni, il che conduce ad un'equazione non risolvibile esattamente



Rappresentazione schematica dell'atomo di elio

Energia potenziale è uguale a:

$$E_{pot} = \underbrace{-\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}}_{\text{attrazione elettrone-nucleo}} + \underbrace{\frac{e^2}{r_{12}}}_{\text{repulsione elettrone-elettrone}}$$

L'equazione di Schrödinger per He

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} + \frac{8 \pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{2e^2}{r_1} + \frac{2e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi = 0$$

Atomi con più elettroni

Con un metodo sviluppato da D. R. Hartree è possibile scindere l'equazione di Schrödinger globale in tante equazioni di Schrödinger monoelettroniche quanti sono gli elettroni stessi del sistema stesso

$$\frac{\partial^2 \Psi_i}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 \Psi_i}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2 \Psi_i}{\partial z_i^2} + \frac{8\pi^2 m \left(E_i - E_{pot}^{(i)} \right)}{h^2} \Psi_i = 0$$

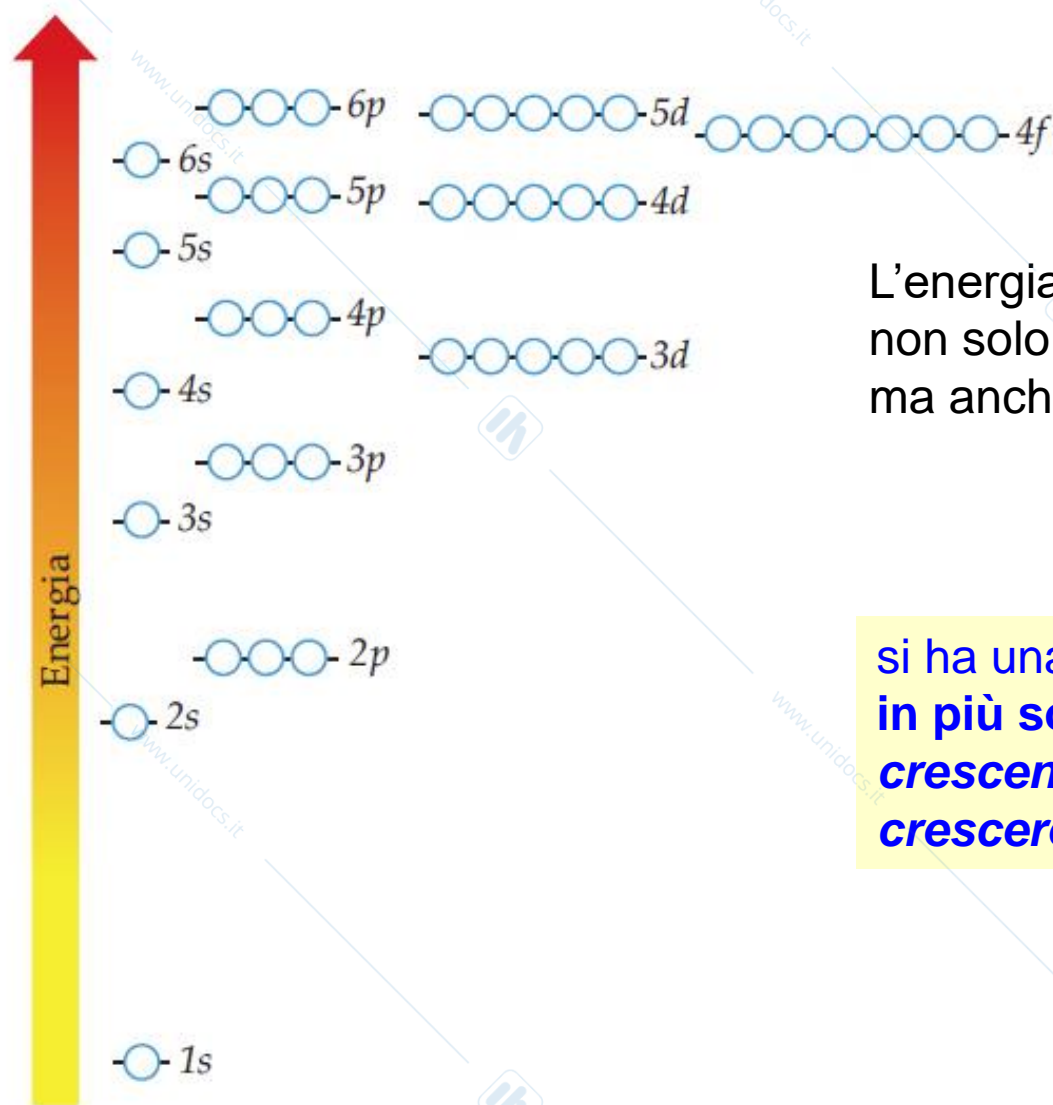
➔ La funzione d'onda complessiva Ψ per un atomo con Z elettroni risulta definita dal prodotto delle funzioni d'onda monoelettroniche Ψ_i :

$$\Psi = \Psi_1 \Psi_2 \cdots \Psi_Z$$

L'energia complessiva E è la somma delle energie E_i dei singoli elettroni:

$$E = E_1 + E_2 + \cdots + E_Z$$

Il diagramma scissione livelli energetici negli atomi polielettronici



L'energia dei vari stati quantici dipende non solo dal numero quantico principale n , ma anche da quello azimutale l



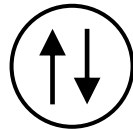
si ha una **scissione dei livelli energetici in più sottolivelli distinti, di energia crescente, per un dato valore di n , col crescere di l**

● **Principio di esclusione di Pauli**

In un atomo ogni elettrone deve avere una serie unica di numeri quantici:

$$n \quad \ell \quad m_\ell \quad m_s$$

pertanto, un orbitale non può contenere più di due elettroni (con spin antiparalleli)

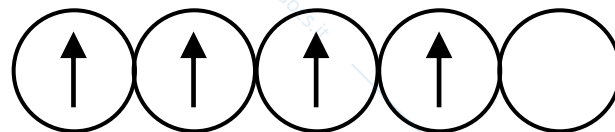


orbitale pieno

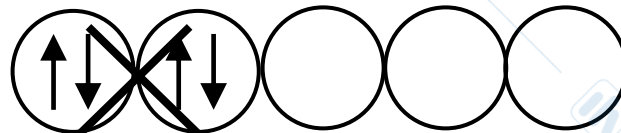
● **Regola di Hund (o della massima molteplicità di spin)**

La configurazione più stabile di un atomo è quella che prevede la massima molteplicità di spin

Es. disposizione di 4 elettroni negli orbitali d:



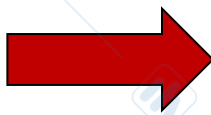
e non:



L'equazione di S. si risolve esattamente solo per l'atomo di idrogeno. Per atomi polielettronici vanno considerate tutte le interazioni tra gli elettroni e degli elettroni col nucleo.

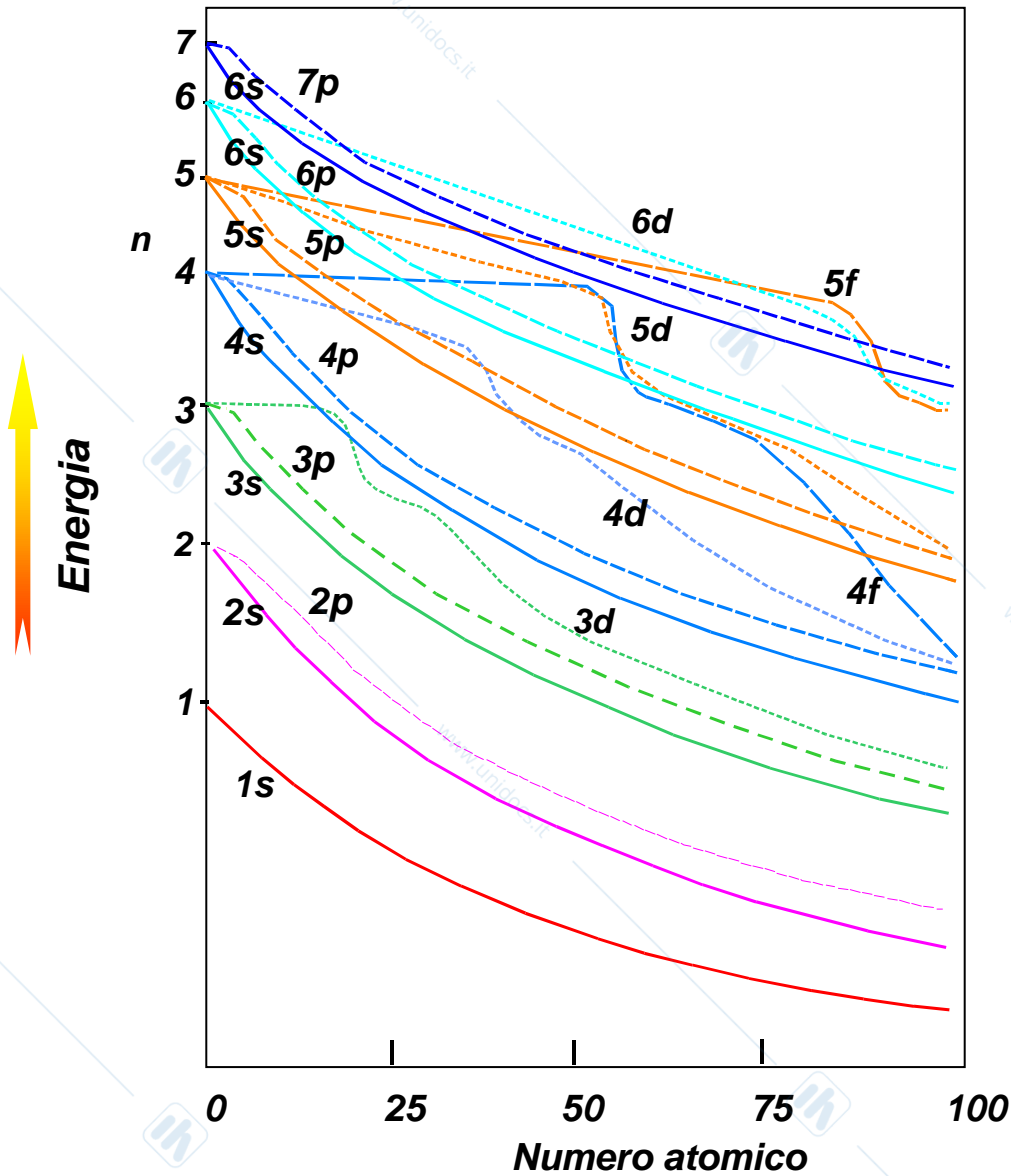
Il Principio di esclusione di Pauli deriva dal fatto che per un atomo polielettronico ogni elettrone è caratterizzato da una funzione d'onda φ individuata dai suoi 3 numeri quantici + il numero quantico di spin. Tutte le terne di numeri quantici possono essere attribuite a tutti gli elettroni che sono indistinguibili \rightarrow si costruisce una **matrice (determinante di Slater)**. Ma in una matrice se 2 colonne o 2 righe sono uguali (cioè 2 elettroni hanno tutti e 4 i numeri quantici uguali) il determinante è nullo.

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \dots & \varphi_N(x_1) \\ \varphi_1(x_2) & \dots & \varphi_N(x_2) \\ \dots & & \dots \\ \varphi_1(x_N) & \dots & \varphi_N(x_N) \end{vmatrix}$$



In un orbitale possono trovarsi solo 2 elettroni con spin antiparalleli

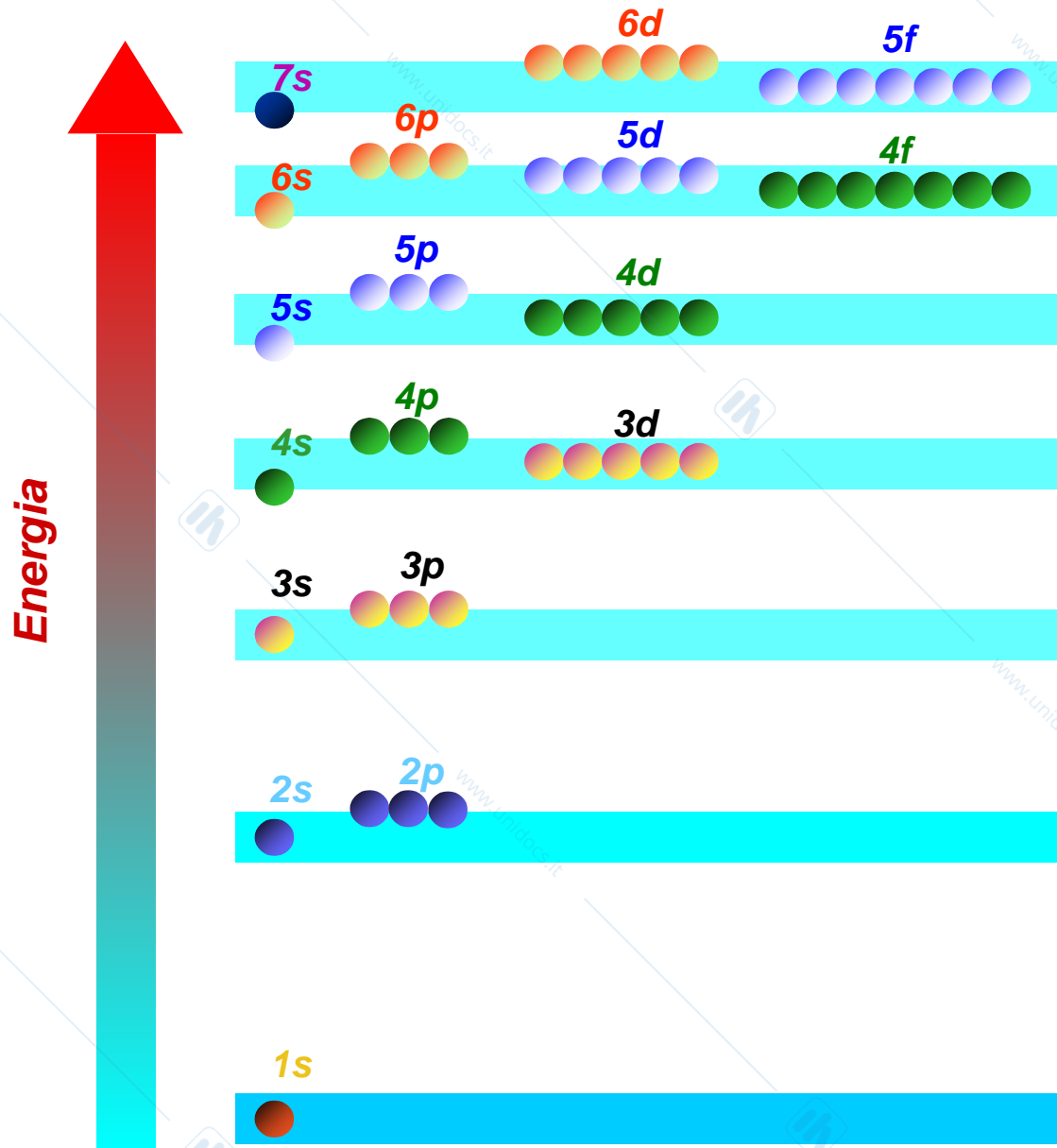
● **Energia degli orbitali in funzione del numero atomico**
In ordinata il valore di n , numero quantico principale



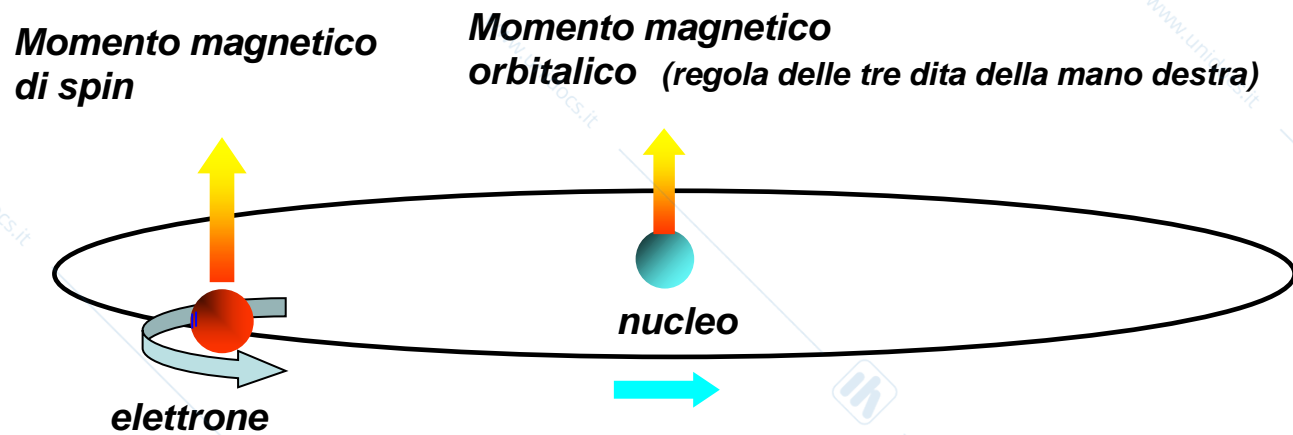
Il valore dell'energia dei livelli successivi tende a scendere e si riduce la distanza tra di essi all'aumentare del numero atomico



● Energia degli orbitali in un atomo a più elettroni



Paramagnetismo e diamagnetismo: a ogni elettrone è associato un momento magnetico risultante di due contributi



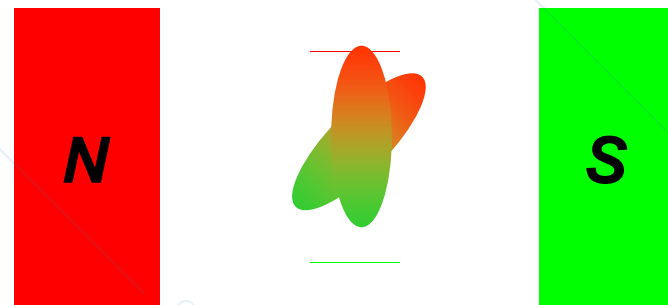
Il momento magnetico di spin è preminente su quello orbitalico dovuto alla rotazione attorno al nucleo: i forti campi elettrici dei legami tra gli atomi producono orientazioni fisse del momento magnetico orbitalico, impedendo un'orientazione con un campo magnetico esterno

Paramagnetismo = uno o più elettroni spaiati

Diamagnetismo = nessun elettrone spaiato. Effetto debole esibito da tutti i materiali



Magnetizzazione parallela a campo magnetico → **attrazione**

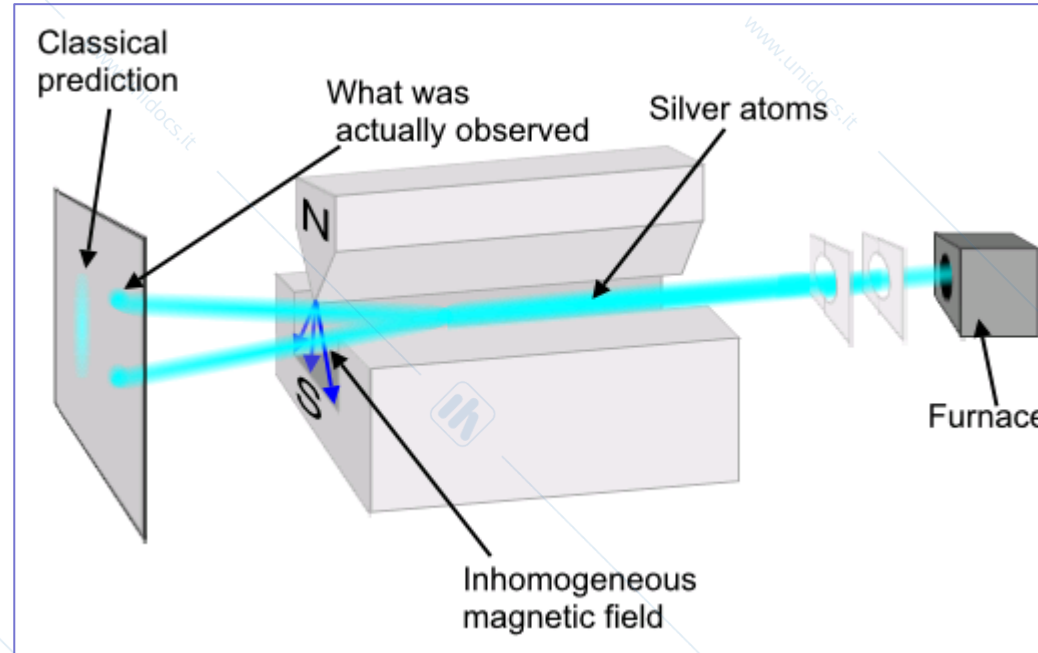


Magnetizzazione opposta a campo magnetico → **repulsione**

Esperimento di Stern e Gerlach

Gli elettroni hanno momento angolare intrinseco?

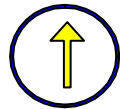
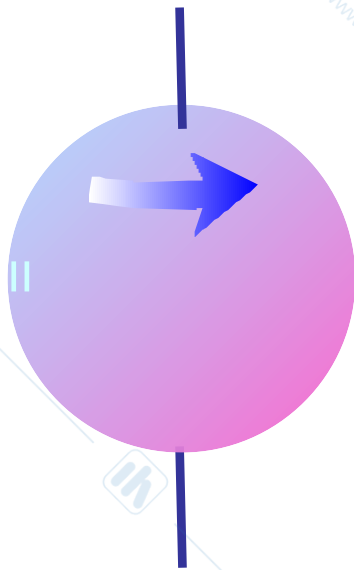
Se si considera un elettrone come un dipolo elettrico classico con due cariche rapidamente rotanti, si osserverà la precessione di Larmor in un campo magnetico, a causa del momento torcente che il campo esercita sul dipolo: come i pianeti



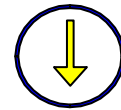
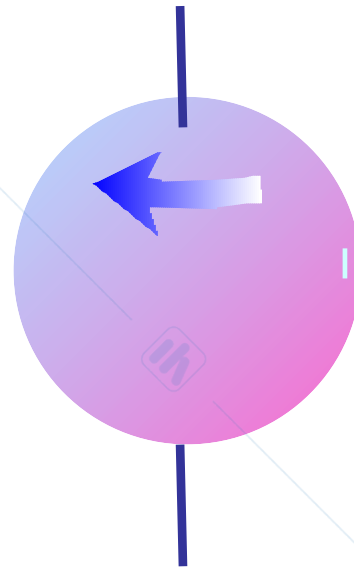
● Se la particella si muove in un campo magnetico omogeneo, le forze esercitate sulle estremità opposte del dipolo si cancellano a vicenda e la traiettoria della particella non è modificata.

● Se la particella attraversa un campo magnetico non omogeneo, la forza ad una estremità del dipolo sarà leggermente maggiore di quella all'estremità opposta; questo causa la deflessione della particella. Gli elettroni che passano attraverso il campo magnetico sono deflesse o in alto o in basso di una quantità precisa → il momento angolare di *spin* è quantizzato, cioè assume solo valori discreti: non c'è quindi una distribuzione continua di possibili valori del momento angolare: **come si osserva**

Ogni elettrone possiede un momento angolare intrinseco chiamato spin elettronico, il cui numero quantico s può assumere solo il valore di $\frac{1}{2}$. Il suo numero quantico magnetico m_s può assumere solo i due valori $+\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$



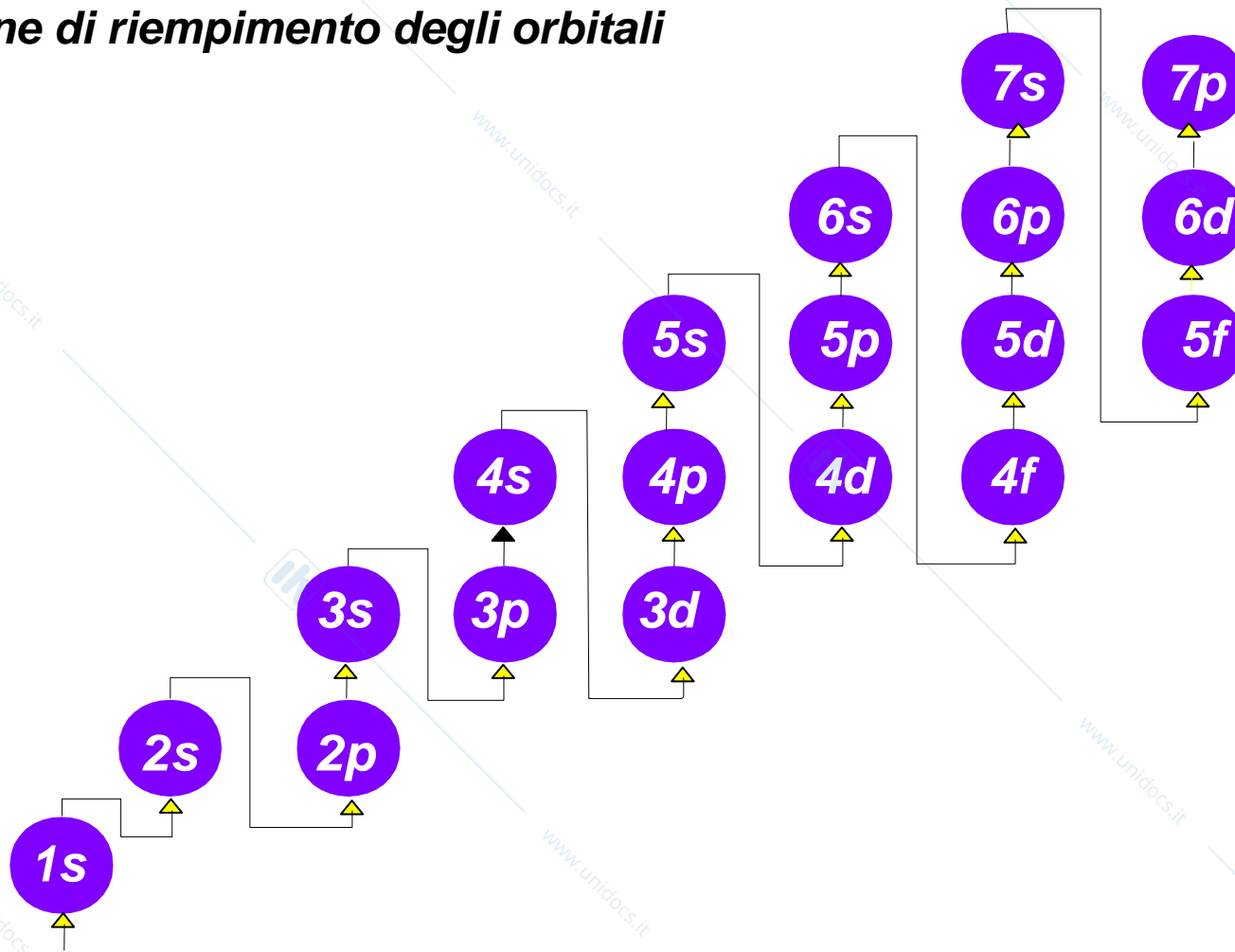
$$m_s = +\frac{1}{2}$$



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



● Ordine di riempimento degli orbitali



$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f < 6d < 7p$

● **Ordine di riempimento degli orbitali (regola “n + l”)**

Il livello più stabile è quello che ha n+l minore

A parità di n+l è più stabile quello con n minore

Es. 3p, 3d, 4s

Orbitali	3p	3d	4s
n + l	3 + 1 = 4	3 + 2 = 5	4 + 0 = 4

$$3p < 4s < 3d$$

Es. 4f, 5p, 6s

Orbitali	4f	5p	6s
n + l	4 + 3 = 7	5 + 1 = 6	6 + 0 = 6

$$5p < 6s < 4f$$



Le configurazioni elettroniche degli atomi

Z = 1	H	\uparrow $1s$	$1s^1$		
Z = 2	He	$\uparrow\downarrow$ $1s$	$1s^2$		
Z = 3	Li	$\uparrow\downarrow$ \uparrow $1s$ $2s$	$1s^2 2s^1$	o anche	[He] $2s^1$
Z = 4	Be	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $1s$ $2s$	$1s^2 2s^2$	“	[He] $2s^2$
Z = 5	B	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow $1s$ $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$	$1s^2 2s^2 2p^1$	“	[He] $2s^2 2p^1$
Z = 6	C	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow $1s$ $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$	$1s^2 2s^2 2p^2$	“	[He] $2s^2 2p^2$
Z = 7	N	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \uparrow $1s$ $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$	$1s^2 2s^2 2p^3$	“	[He] $2s^2 2p^3$
Z = 8	O	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow $1s$ $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$	$1s^2 2s^2 2p^4$	“	[He] $2s^2 2p^4$
Z = 9	F	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow $1s$ $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$	$1s^2 2s^2 2p^5$	“	[He] $2s^2 2p^5$
Z = 10	Ne	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $1s$ $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$	$1s^2 2s^2 2p^6$		
Z = 11	Na	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow $1s$ $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$ $3s$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	“	[Ne] $3s^1$

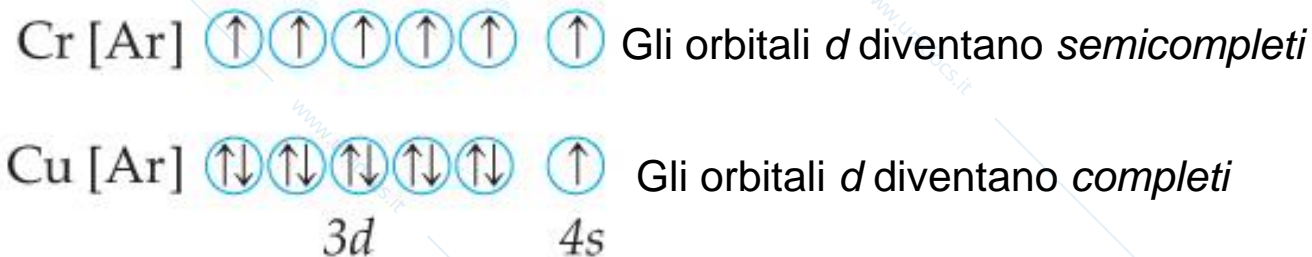
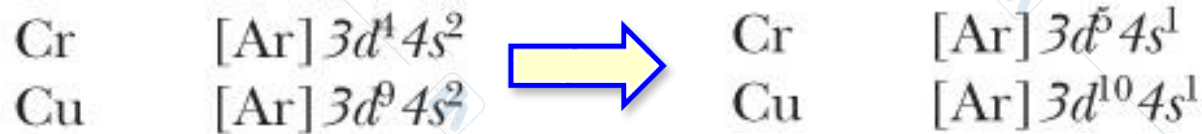
configurazione elettronica abbreviata

Alcune configurazioni elettroniche inattese

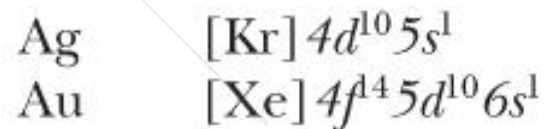
Si deve considerare che:

i sottolivelli completi o semicompleti acquistano ulteriore stabilità, il che alcune volte può influire sulle configurazioni elettroniche

Seguendo la regola di Aufbau dovremmo avere le seguenti configurazioni:



Una cosa simile capita con



● **Eccezioni alla regola del riempimento successivo**

Elemento	Configurazione secondo la regola dell'“aufbau”	Configurazione reale
^{24}Cr	$[\text{Ar}] 4s^2 3d^4$	$[\text{Ar}] 4s^1 3d^5$
^{42}Mo	$[\text{Kr}] 5s^2 4d^4$	$[\text{Kr}] 5s^1 4d^5$
^{29}Cu	$[\text{Ar}] 4s^2 3d^9$	$[\text{Ar}] 4s^1 3d^{10}$
^{47}Ag	$[\text{Kr}] 5s^2 4d^9$	$[\text{Kr}] 5s^1 4d^{10}$

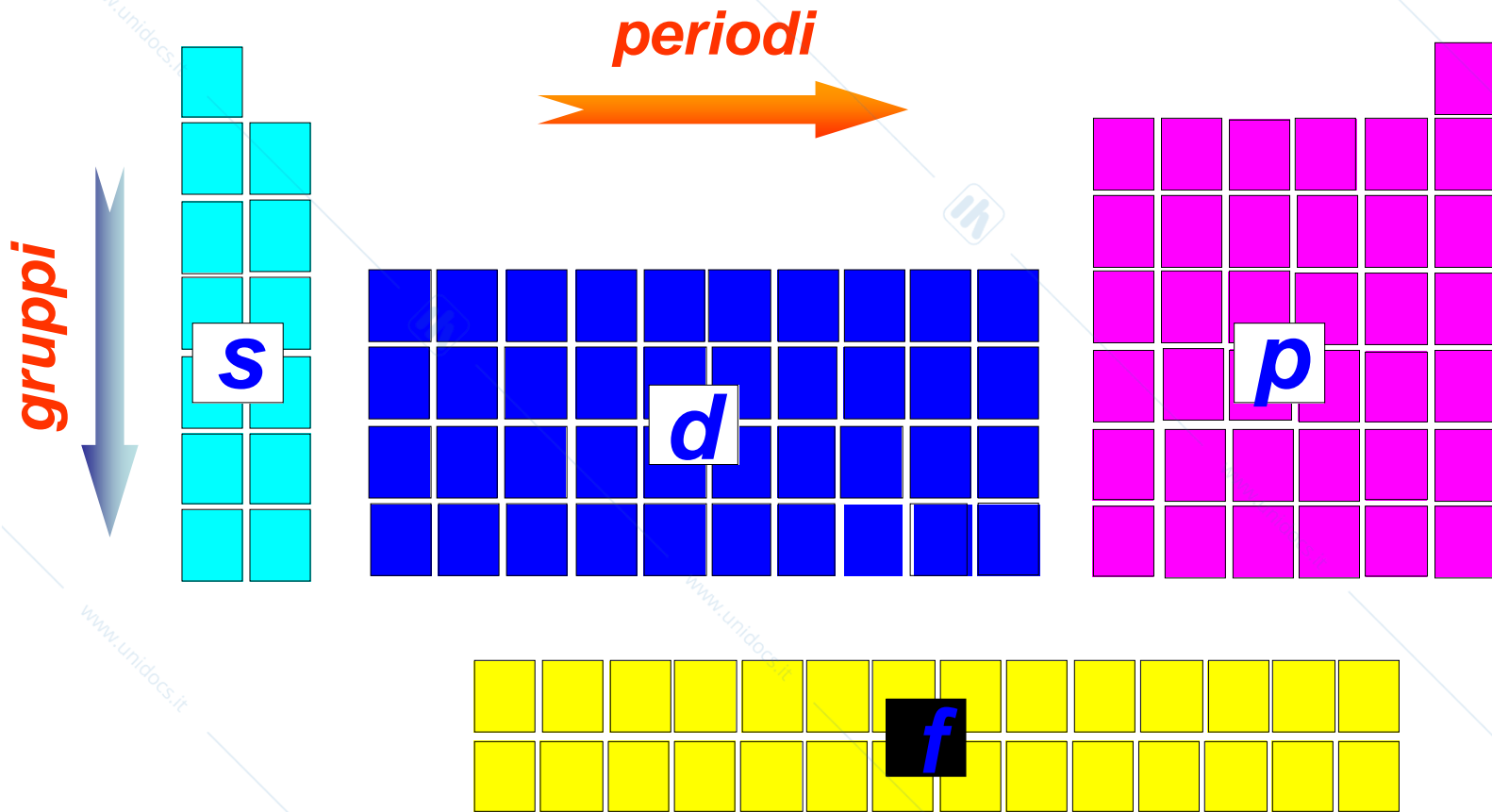
Gli orbitali pieni e semipieni sono particolarmente stabili

● **Eccezioni nella formazione di ioni**

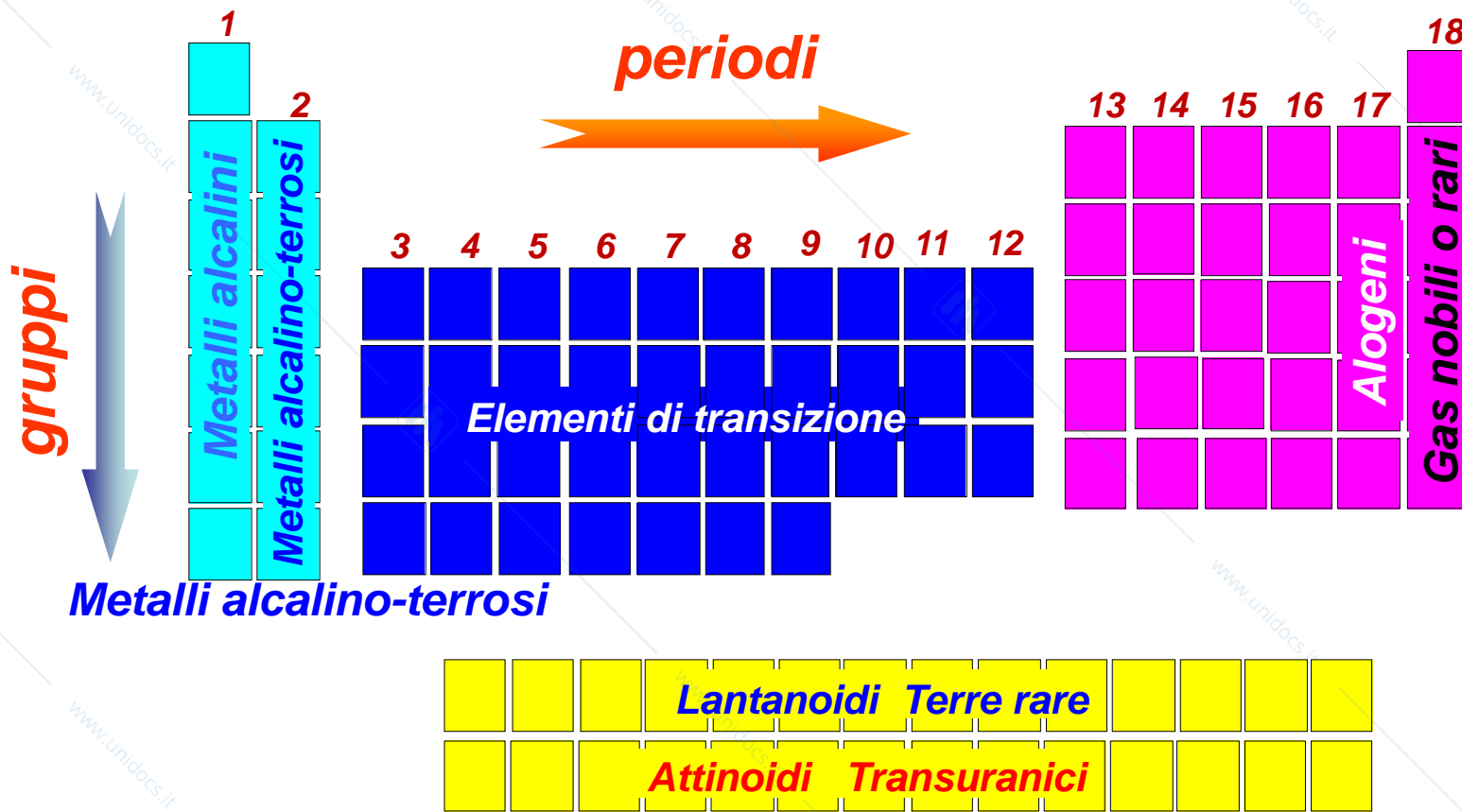
Ione	Configurazione reale	Disposizione degli elettroni negli orbitali d
$^{24}\text{Cr}^{3+}$	$[\text{Ar}] 3d^3$	
$^{26}\text{Fe}^{2+}$	$[\text{Ar}] 3d^6$	
$^{26}\text{Fe}^{3+}$	$[\text{Ar}] 3d^5$	



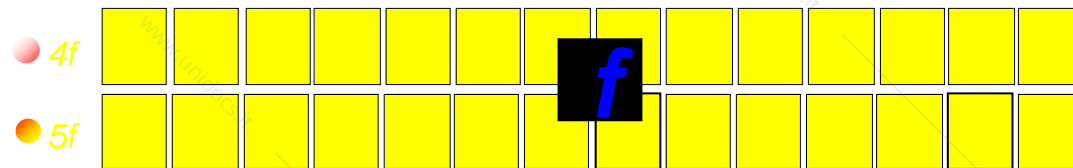
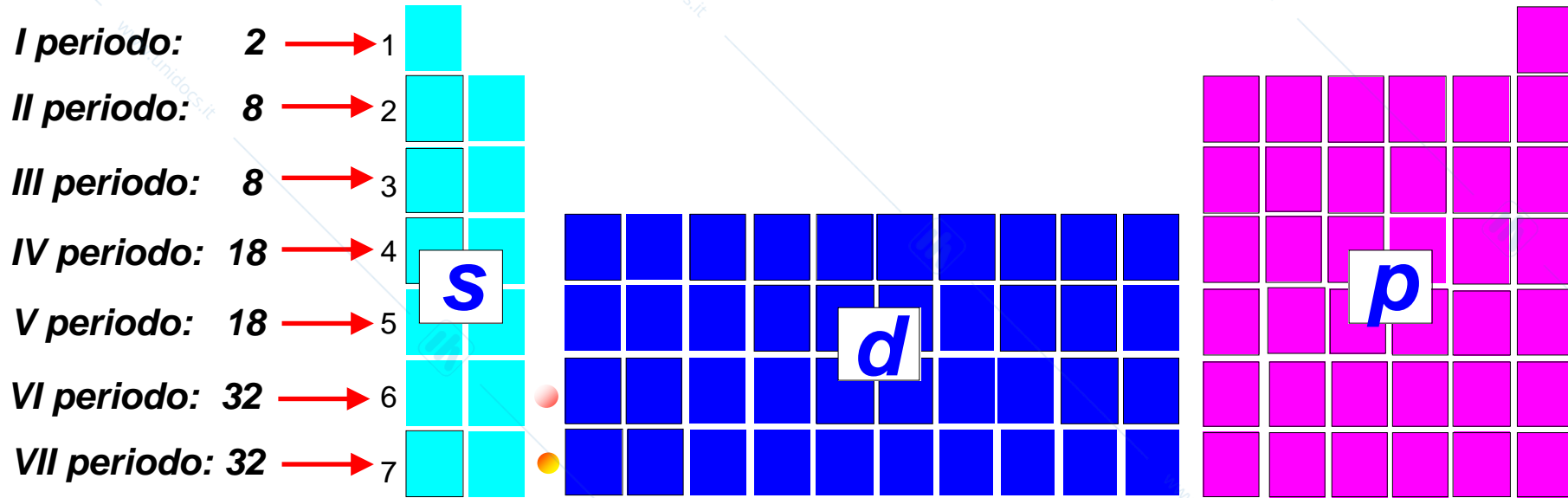
● **Sistema periodico a blocchi**
(Elementi ordinati secondo il numero atomico crescente)



● **Nomi usuali di elementi con caratteristiche comuni**



Numero di elementi per periodo



Sistema Periodico

(IUPAC – Novembre 2004)

1 H 1.0079																	2 He 4.0026
3 Li 6.941	4 Be 9.0122											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305											13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.409	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89-103	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (277)	109 Mt (268)	110 Ds (271)	111 Rg (272)							

57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)

Periodo di scoperta

Prima del 1800	1800-1849	1850-1899	1900-1949	1950-1999
----------------	-----------	-----------	-----------	-----------

http://www.iupac.org/reports/periodic_table/index.html

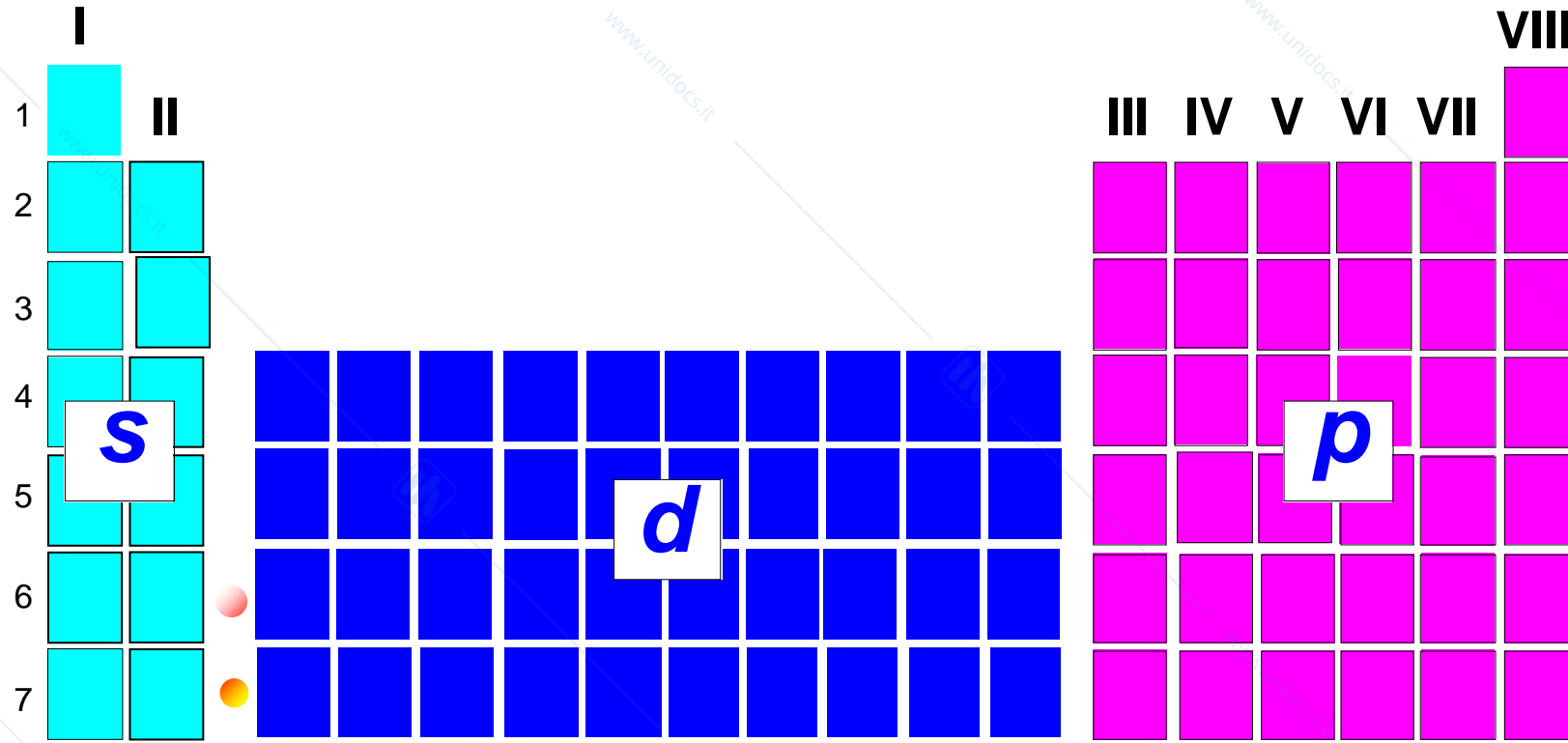
Tavola periodica attuale

1 IA 1A H Hydrogen 1.008																	18 VIIIA 8A He Helium 4.003
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012											5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.998	10 Ne Neon 20.180
11 Na Sodium 22.990	12 Mg Magnesium 24.305	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 VIII 8	9 VIII 8	10 VIII 8	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 Al Aluminum 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.098	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.956	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.942	24 Cr Chromium 51.996	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.631	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.972	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798
37 Rb Rubidium 85.468	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.95	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.906	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.868	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.904	54 Xe Xenon 131.294
55 Cs Cesium 132.905	56 Ba Barium 137.328	57-71 Lanthanide Series	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.948	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.217	78 Pt Platinum 195.085	79 Au Gold 196.967	80 Hg Mercury 200.592	81 Tl Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Po Polonium [209]	85 At Astatine 209	86 Rn Radon 222.018
87 Fr Francium 223.020	88 Ra Radium 226.025	89-103 Actinide Series	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitnerium [278]	110 Ds Darmstadtium [281]	111 Rg Roentgenium [280]	112 Cn Copernicium [285]	113 Nh Nihonium [286]	114 Fl Flerovium [289]	115 Mc Moscovium [289]	116 Lv Livermorium [293]	117 Ts Tennessine [294]	118 Og Oganesson [294]
Lanthanide Series			57 La Lanthanum 138.905	58 Ce Cerium 140.116	59 Pr Praseodymium 140.908	60 Nd Neodymium 144.242	61 Pm Promethium 144.913	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.925	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.930	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.934	70 Yb Ytterbium 173.055	71 Lu Lutetium 174.967
Actinide Series			89 Ac Actinium 227.028	90 Th Thorium 232.038	91 Pa Protactinium 231.036	92 U Uranium 238.029	93 Np Neptunium 237.048	94 Pu Plutonium 244.064	95 Am Americium 243.061	96 Cm Curium 247.070	97 Bk Berkelium 247.070	98 Cf Californium 251.080	99 Es Einsteinium [254]	100 Fm Fermium 257.095	101 Md Mendelevium 258.1	102 No Nobelium 259.101	103 Lr Lawrencium [262]

Nonostante piccole quantità di qualche elemento transuranico si trovino in natura gli elementi con $Z > 98$ sono stati scoperti in laboratorio



● Numerazione dei gruppi nel Sistema Periodico



● 4f

● 5f

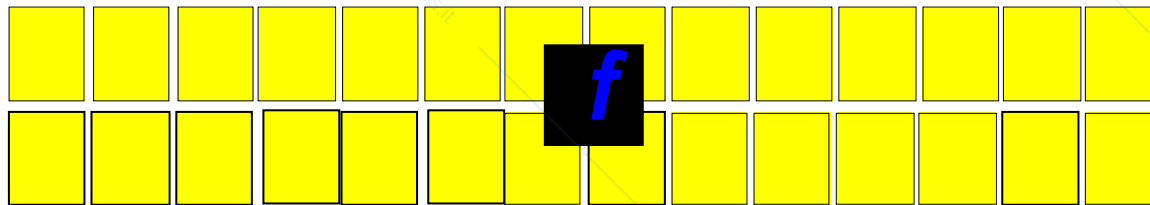


TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

(IUPAC - 1999)

1 IA																	18 VIII o 0			
1s	1 H 1,00795																	2 He 4,003		
2s	3 Li 6,941	4 Be 9,012																	10 Ne 20,18	
3s	11 Na 22,99	12 Mg 24,31																	18 Ar 39,95	
4s	19 K 39,10	20 Ca 40,08	3 IIIA	4 IVA	5 VA	6 VIA	7 VIIA	8	9 VIII	10	11 IB	12 IIB	13 IIIB	14 IVB	15 VB	16 VIB	17 VIIB	18 VIII o 0		
3d	21 Sc 44,96	22 Ti 47,87	23 V 50,94	24 Cr 52,00	25 Mn 54,94	26 Fe 55,85	27 Co 58,93	28 Ni 58,69	29 Cu 63,55	30 Zn 65,39									36 Kr 83,80	
4p											31 Ga 69,72	32 Ge 72,61	33 As 74,92	34 Se 78,96	35 Br 79,90			36 Kr 83,80		
5s	37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	4d	39 Y 88,91	40 Zr 91,22	41 Nb 92,91	42 Mo 95,94	43 Tc 99*	44 Ru 101,07	45 Rh 102,91	46 Pd 106,42	47 Ag 107,87	48 Cd 112,41	5p	49 In 114,82	50 Sn 118,71	51 Sb 121,76	52 Te 127,60	53 I 126,90	54 Xe 131,29
6s	55 Cs 132,91	56 Ba 137,33	5d	71 Lu 174,97	72 Hf 178,49	73 Ta 180,95	74 W 183,84	75 Re 186,2	76 Os 190,23	77 Ir 192,22	78 Pt 195,08	79 Au 196,97	80 Hg 200,59	6p	81 Tl 204,38	82 Pb 207,2	83 Bi 208,98	84 Po 210*	85 At 210*	86 Rn 222*
7s	87 Fr 223	88 Ra 226	6d	103 Lr 262*	104 Rf 261*	105 Db 262*	106 Sg 266*	107 Bh 264*	108 Hs 269*	109 Mt 268*	110 Ds 269*	111 Rg 272*	112 Uub 277*							

Laurenzio Rutherfordio Dubnio Seaborgio Bohrio Hassio Meitnerio Ununbio

■ Metalli ■ Semimetalli
■ Non metalli ■ Gas nobili

- Notazione IUPAC (1986)
- Vecchia notazione
- Numero atomico
- Simbolo dell'elemento
- Massa dell'elemento
- * Isotopo più stabile o importante
- Tipo di orbitale

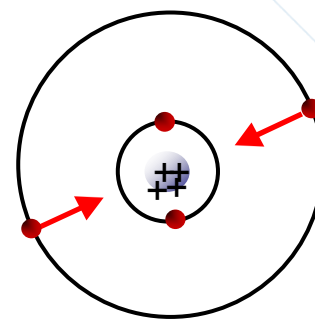
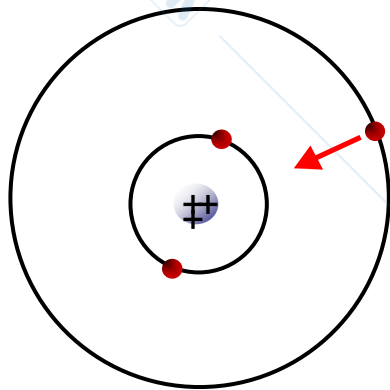
4f	57 La 138,91	58 Ce 140,12	59 Pr 140,91	60 Nd 144,24	61 Pm 147*	62 Sm 150,36	63 Eu 151,96	64 Gd 157,25	65 Tb 158,93	66 Dy 162,50	67 Ho 164,93	68 Er 167,26	69 Tm 168,93	70 Yb 173,04
5f	89 Ac 227*	90 Th 232,04	91 Pa 231*	92 U 238,03	93 Np 237*	94 Pu 239*	95 Am 241*	96 Cm 244*	97 Bk 249*	98 Cf 252*	99 Es 252*	100 Fm 257*	101 Md 258*	102 No 259*

● **Capacità schermante** degli elettroni dello stesso livello n :

$$s > p > d > f$$

La **carica nucleare efficace** (z^*) è la carica nucleare effettiva che agisce su un elettrone. Essa tiene conto delle seguenti interazioni:

- **attrazione elettrone-nucleo**
- **repulsione elettrone-elettroni del proprio livello**
- **repulsione elettrone-elettroni dei livelli sottostanti**



Il raggio atomico diminuisce: schermo non è totale



Raggio cresce



Passando dall'ultimo elemento di un periodo al primo del successivo, schermo è quasi totale



La carica nucleare efficace

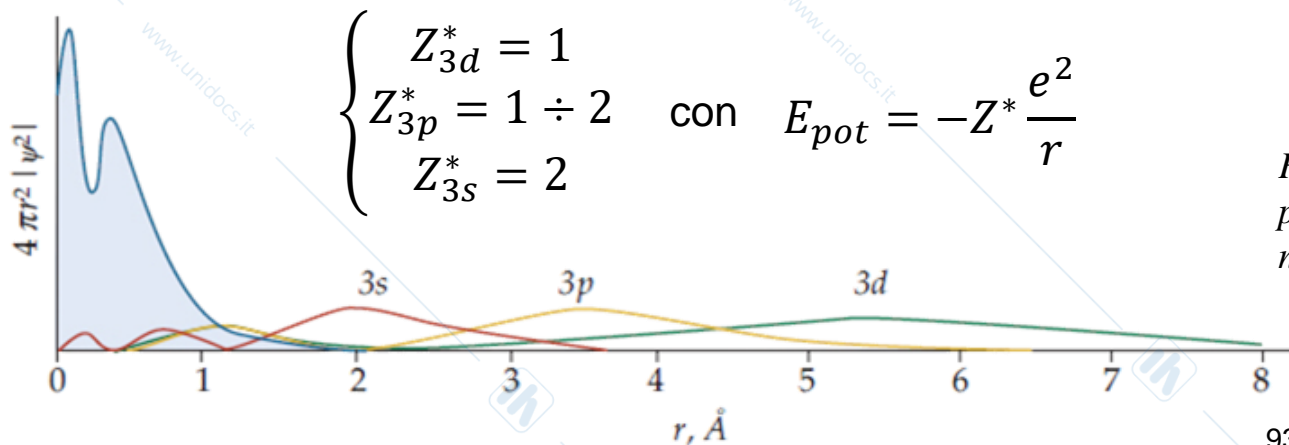
Per l'atomo di H

L'energia dell'elettrone in un orbitale $3s$, $3p$ e $3d$ è la stessa, allora qualunque sia il tipo di orbitale in cui l'elettrone si trova, questo è **soggetto all'azione della carica nucleare effettiva $+e$**

Per un atomo con più elettroni

Gli orbitali di tipo s , p , d , f , ... con lo stesso valore di n , penetrano in misura diversa entro l'involucro degli orbitali più interni occupati da altri elettroni così che l'entità dell'interazione fra il nucleo e un elettrone è diversa secondo:

- ❑ il tipo di orbitale da questo occupato;
- ❑ il suo grado di penetrazione verso il nucleo.

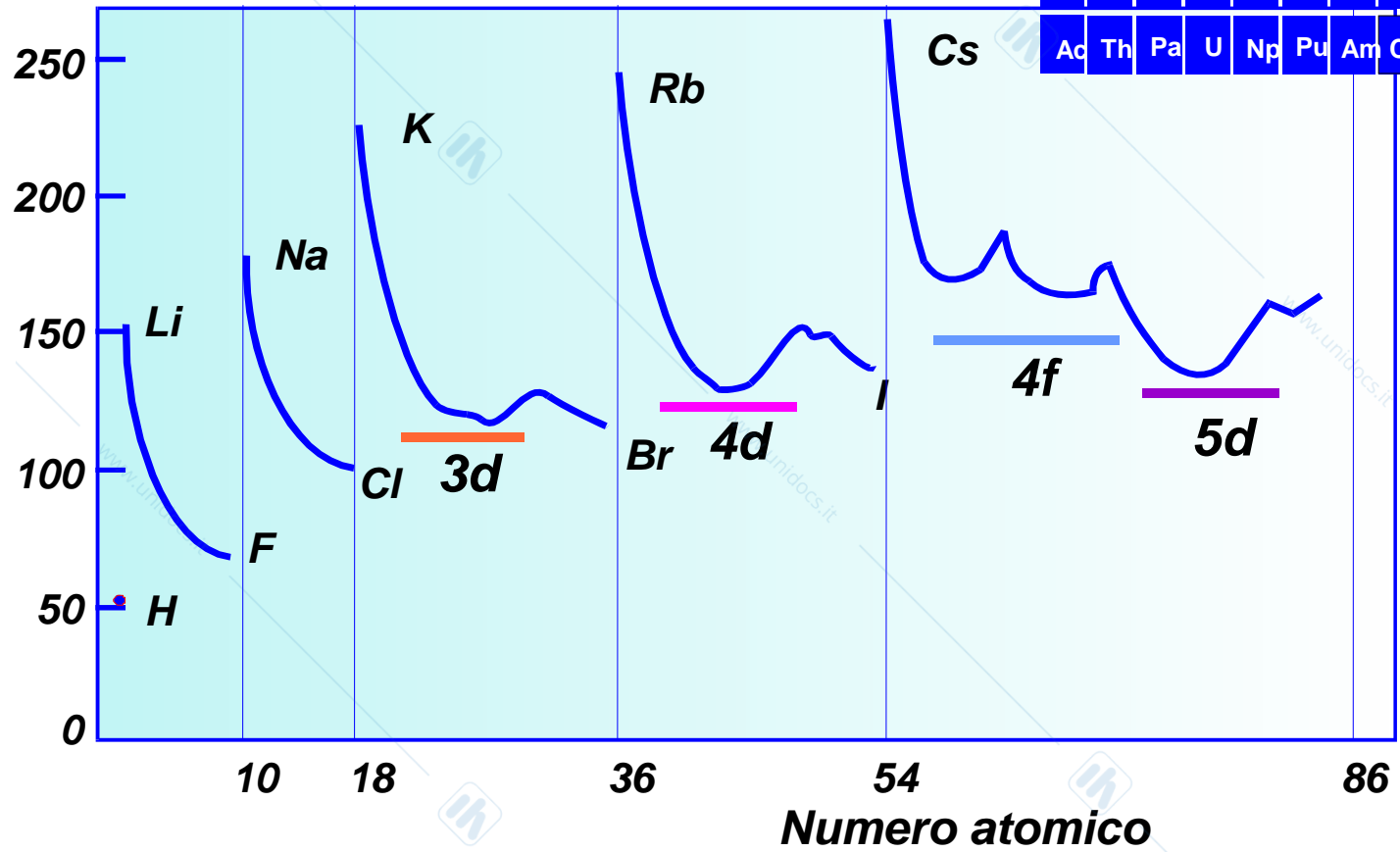


Funzione della distribuzione della probabilità per diversi orbitali nell'atomo di sodio.

Raggio atomico e Sistema Periodico

H																	B	C	N	O	F
Li	Be															Al	Si	P	S	Cl	
Na	Mg															Ga	Ge	As	Se	Br	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	In	Sn	Sb	Te	I					
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	Tl	Pb	Bi	Po	At					
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg										
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uu	Uu	Uu										

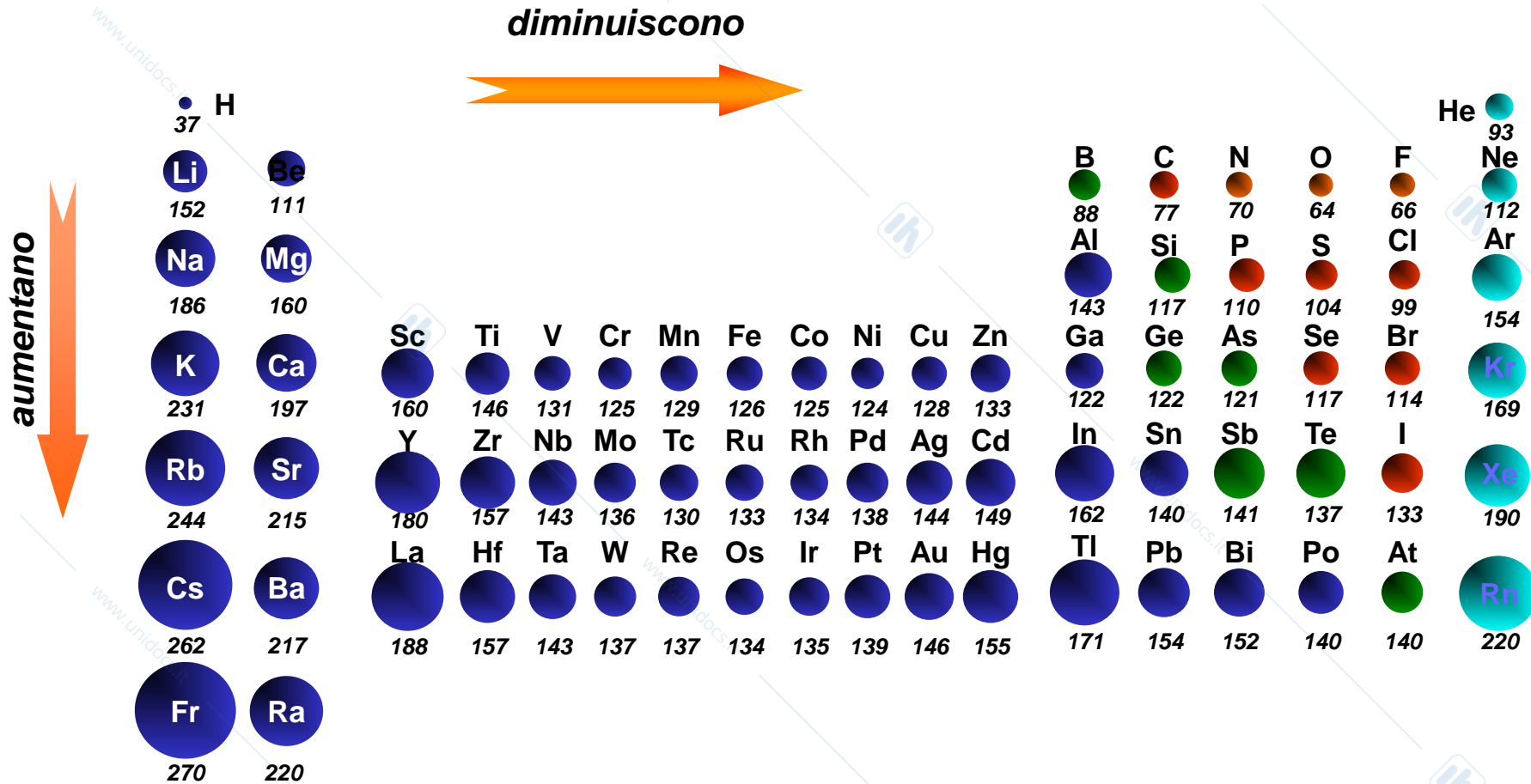
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No



www.unidocs.it - Appunti e dispense per superare i tuoi esami universitari

www.unidocs.it - Appunti e dispense per superare i tuoi esami universitari

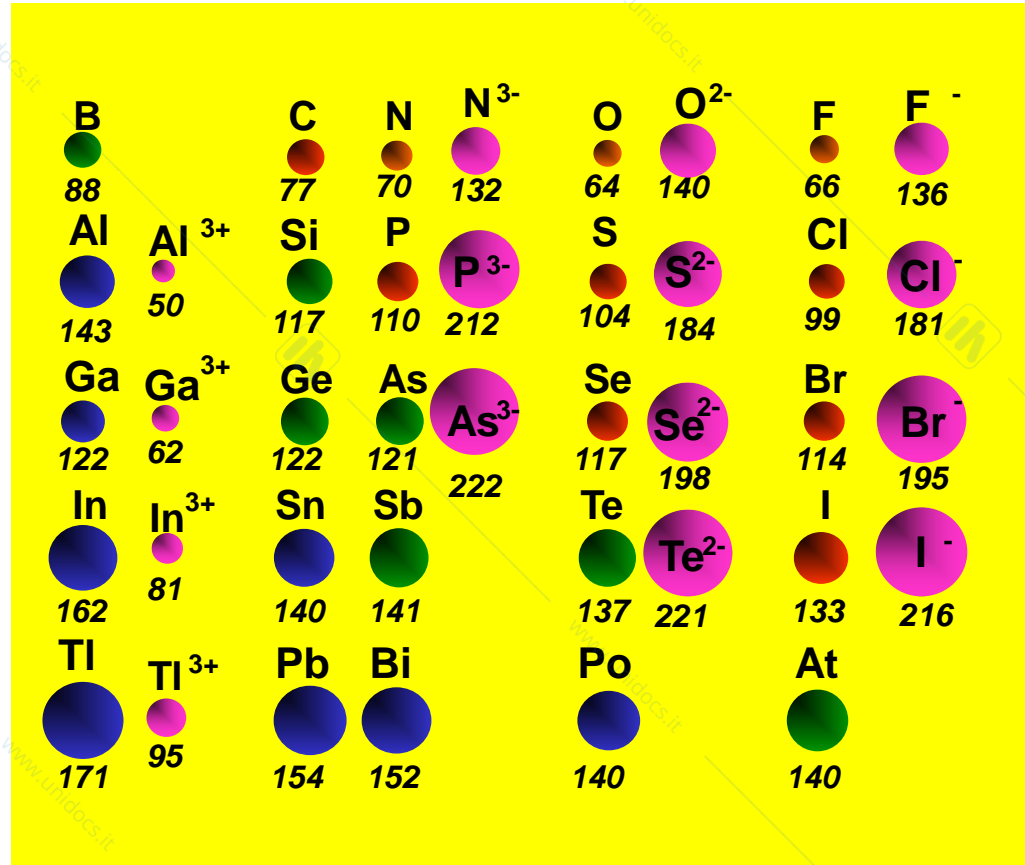
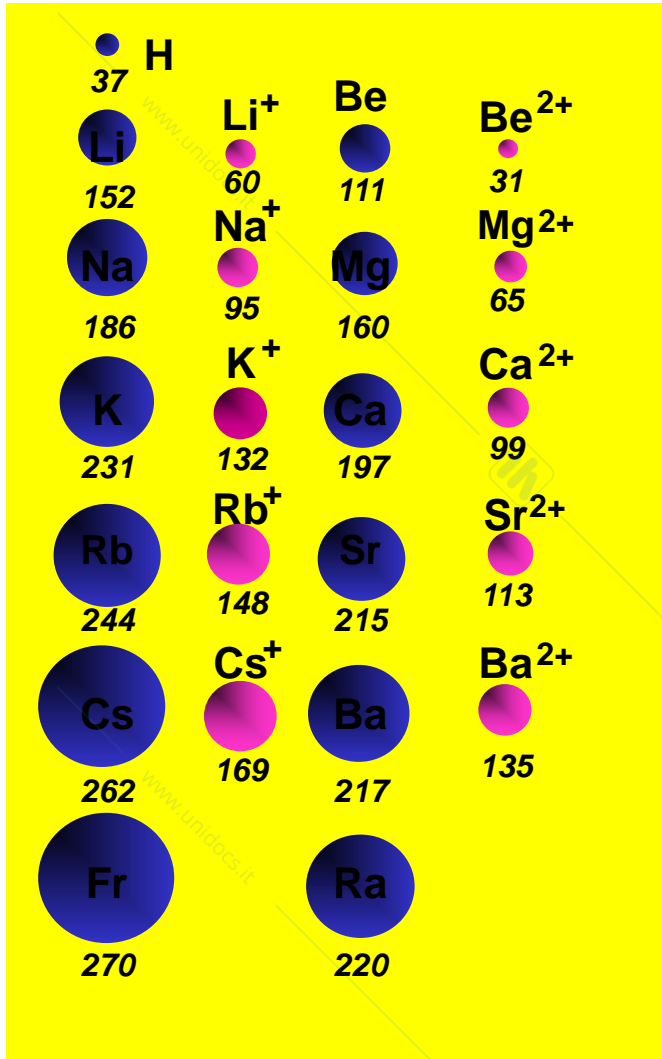
● Raggi atomici nel Sistema Periodico (pm)



Nella serie dei lantanidi, a causa del minore effetto di schermo degli orbitali f si ha la **contrazione lantanidica**



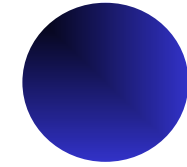
● Confronto tra raggi atomici e ionici nei blocchi s e p (pm)



Raggio atomico



raggio ionico



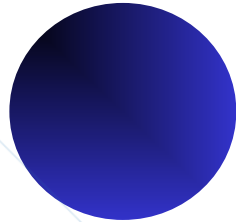
Al 143



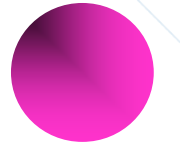
Al⁺ 72



Al³⁺ 50



Ca 197



Ca⁺ 118

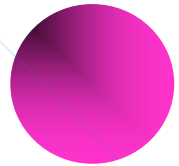


Ca²⁺ 99

cationi



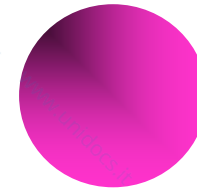
N 70



N³⁻ 132

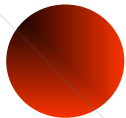


O 64

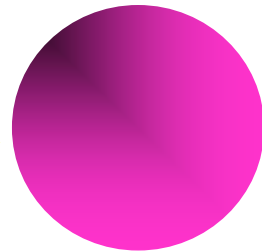


O²⁻ 140

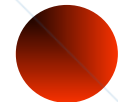
anioni



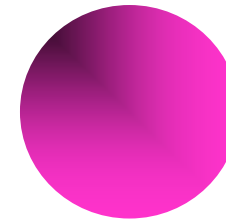
P 110



P³⁻ 212



Cl 99



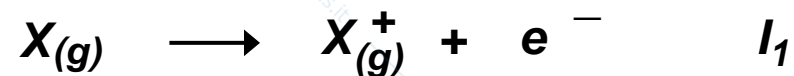
Cl⁻ 181

97



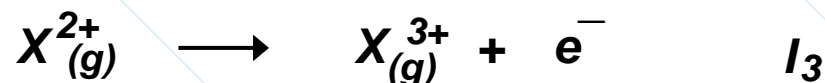
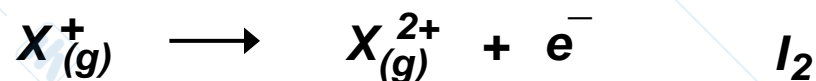
● Energia di ionizzazione

E' l'energia assorbita nel processo:



$X_{(g)}$ = atomo isolato allo stato gassoso e rarefatto

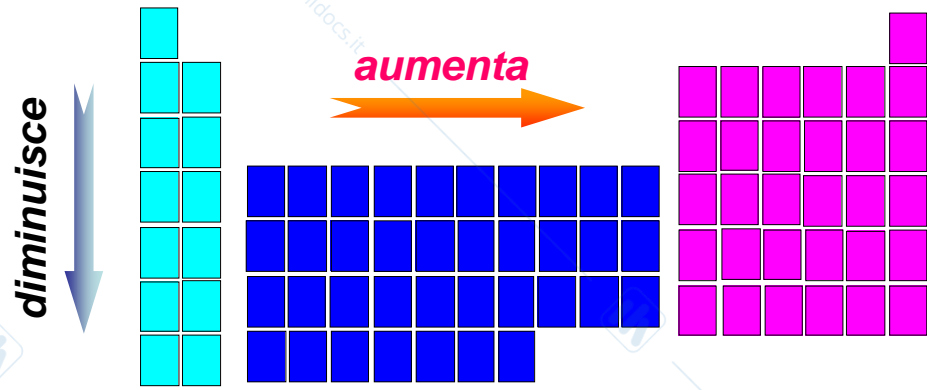
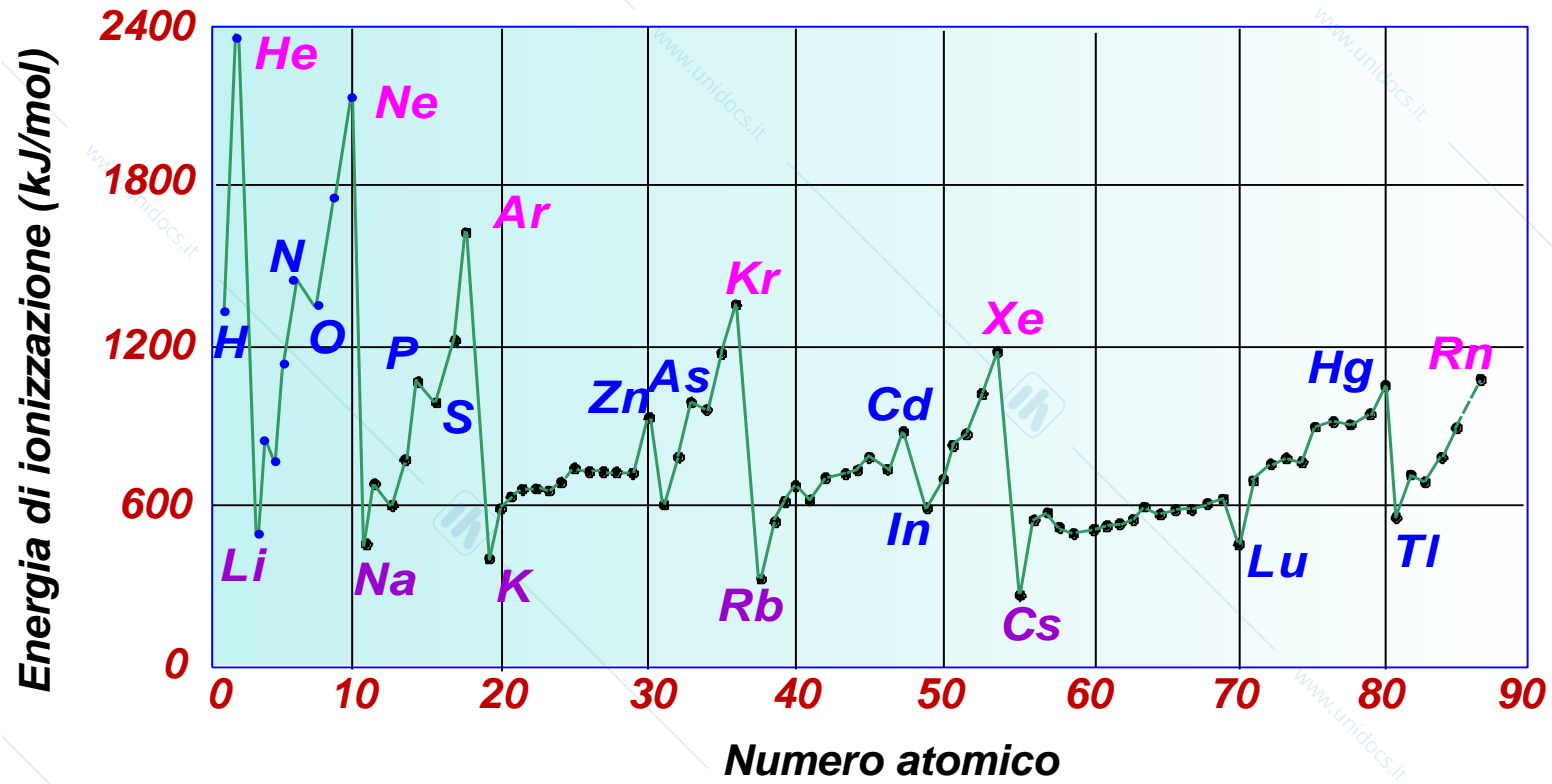
I_1 = energia di prima ionizzazione; è sempre > 0



.....

$$I_1 < I_2 < I_3 < \dots$$

● Energia di ionizzazione e Sistema Periodico



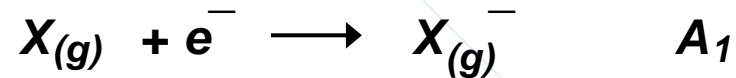
18.01.07

99



● **Affinità elettronica, A_1**

E' l'energia scambiata nel processo:



$X_{(g)}$ = atomo isolato allo stato gassoso e rarefatto

A_1 può essere negativa (cessione di energia) oppure positiva (assorbimento di energia)



Affinità elettroniche nei blocchi s e p (kJ/mol)

aumenta 

diminuisce 

H						He (21)	
Li	Be	B	C	N 0,0	O -141	F -322	Ne (29)
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl -349	Ar (35)
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br -324	Kr (39)
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I -295	Xe (41)
Cs	Ba	Ta	Pb	Bi	Po	At (-270)	Rn (41)
Fr	Ra						

(Tra parentesi quelle stimate)

● **Classificazione degli elementi**

Metalli 68/92

- **sono solidi (eccetto Hg)**
- **lucenti, duttili, malleabili**
- **con densità elevata**
- **formano ossidi a carattere basico**
- **formano facilmente ioni positivi**
- **ottimi conduttori di calore e di elettricità**
- **hanno basse energia di ionizzazione e affinità elettronica**

Semimetalli 7/92

- **B, Si, Ge, As, Sb, Te, At**
- **hanno proprietà intermedie tra metalli e non metalli**
- **sono solidi con lucentezza metallica**
- **formano ossidi con deboli proprietà acide e basiche**

Non metalli 17/92

- **sono gassosi, eccetto bromo (liquido), carbonio, fosforo, iodio e astatio (solidi)**
- **cattivi conduttori di calore e di elettricità (eccetto C come grafite)**
- **formano ossidi a carattere acido**
- **formano facilmente ioni negativi**
- **hanno alte energia di ionizzazione e affinità elettronica**





Stato fisico degli elementi

1 H 1,0079																	2 He 4,003																												
3 Li 6,941	4 Be 9,012																																												
11 Na 22,99	12 Mg 24,31																																												
19 K 39,10	20 Ca 40,08	21 Sc 44,96	22 Ti 47,87	23 V 50,94	24 Cr 52,00	25 Mn 54,94	26 Fe 55,85	27 Co 58,93	28 Ni 58,69	29 Cu 63,55	30 Zn 65,39	31 Ga 69,72	32 Ge 72,61	33 As 74,92	34 Se 78,96	35 Br 79,90	36 Kr 83,80																												
37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	39 Y 88,91	40 Zr 91,22	41 Nb 92,91	42 Mo 95,94	43 Tc 99*	44 Ru 101,07	45 Rh 102,9	46 Pd 106,42	47 Ag 107,87	48 Cd 112,41	49 In 114,82	50 Sn 118,71	51 Sb 121,76	52 Te 127,60	53 I 126,90	54 Xe 131,29																												
55 Cs 132,9	56 Ba 137,33	71 Lu 174,97	72 Hf 178,49	73 Ta 180,95	74 W 183,84	75 Re 186,21	76 Os 190,23	77 Ir 192,22	78 Pt 195,08	79 Au 196,97	80 Hg 200,59	81 Tl 204,38	82 Pb 207,2	83 Bi 208,98	84 Po 210*	85 At 210*	86 Rn 222*																												
87 Fr 223	88 Ra 226	103 Lr 262*	104 Rf 261*	105 Db 262*	106 Sg 266*	107 Bh 264*	108 Hs 269*	109 Mt 268*	110 Uun 269*	111 Uuu 272*	112 Uub 277*																																		
<table border="1"> <tr> <td>57 La 138,91</td> <td>58 Ce 140,12</td> <td>59 Pr 140,91</td> <td>60 Nd 144,24</td> <td>61 Pm 147*</td> <td>62 Sm 150,36</td> <td>63 Eu 151,96</td> <td>64 Gd 157,25</td> <td>65 Tb 158,93</td> <td>66 Dy 162,50</td> <td>67 Ho 164,93</td> <td>68 Er 167,26</td> <td>69 Tm 168,93</td> <td>70 Yb 173,04</td> </tr> <tr> <td>89 Ac 227*</td> <td>90 Th 232,04</td> <td>91 Pa 231*</td> <td>92 U 238,03</td> <td>93 Np 237*</td> <td>94 Pu 239*</td> <td>95 Am 241*</td> <td>96 Cm 244*</td> <td>97 Bk 249*</td> <td>98 Cf 252*</td> <td>99 Es 252*</td> <td>100 Fm 257*</td> <td>101 Md 258*</td> <td>102 No 259*</td> </tr> </table>																		57 La 138,91	58 Ce 140,12	59 Pr 140,91	60 Nd 144,24	61 Pm 147*	62 Sm 150,36	63 Eu 151,96	64 Gd 157,25	65 Tb 158,93	66 Dy 162,50	67 Ho 164,93	68 Er 167,26	69 Tm 168,93	70 Yb 173,04	89 Ac 227*	90 Th 232,04	91 Pa 231*	92 U 238,03	93 Np 237*	94 Pu 239*	95 Am 241*	96 Cm 244*	97 Bk 249*	98 Cf 252*	99 Es 252*	100 Fm 257*	101 Md 258*	102 No 259*
57 La 138,91	58 Ce 140,12	59 Pr 140,91	60 Nd 144,24	61 Pm 147*	62 Sm 150,36	63 Eu 151,96	64 Gd 157,25	65 Tb 158,93	66 Dy 162,50	67 Ho 164,93	68 Er 167,26	69 Tm 168,93	70 Yb 173,04																																
89 Ac 227*	90 Th 232,04	91 Pa 231*	92 U 238,03	93 Np 237*	94 Pu 239*	95 Am 241*	96 Cm 244*	97 Bk 249*	98 Cf 252*	99 Es 252*	100 Fm 257*	101 Md 258*	102 No 259*																																

■ **Solidi**
■ **Gassosi**
■ **Liquidi**
■ **Radioattivi**



Tendenze nel Sistema Periodico

Aumentano l'energia di ionizzazione e l'affinità elettronica

Diminuiscono le dimensioni degli atomi

Diminuisce il carattere metallico

Aumentano le dimensioni degli atomi

Diminuiscono l'energia di ionizzazione e l'affinità elettronica

Aumenta il carattere metallico

1 H 1,0079																	2 He 4,003														
3 Li 6,941	4 Be 9,012											5 B 10,81	6 C 12,011	7 N 14,007	8 O 15,999	9 F 19,00	10 Ne 20,18														
11 Na 22,99	12 Mg 24,31											13 Al 26,98	14 Si 28,085	15 P 30,974	16 S 32,066	17 Cl 35,453	18 Ar 39,95														
19 K 39,10	20 Ca 40,08	21 Sc 44,96	22 Ti 47,87	23 V 50,94	24 Cr 52,00	25 Mn 54,94	26 Fe 55,85	27 Co 58,93	28 Ni 58,69	29 Cu 63,55	30 Zn 65,39	31 Ga 69,72	32 Ge 72,61	33 As 74,92	34 Se 78,96	35 Br 79,90	36 Kr 83,80														
37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	39 Y 88,91	40 Zr 91,22	41 Nb 92,91	42 Mo 95,94	43 Tc 99*	44 Ru 101,07	45 Rh 102,9	46 Pd 106,42	47 Ag 107,87	48 Cd 112,41	49 In 114,82	50 Sn 118,71	51 Sb 121,76	52 Te 127,60	53 I 126,90	54 Xe 131,29														
55 Cs 132,91	56 Ba 137,33	71 Lu 174,97	72 Hf 178,49	73 Ta 180,95	74 W 183,84	75 Re 186,21	76 Os 190,23	77 Ir 192,22	78 Pt 195,08	79 Au 196,97	80 Hg 200,59	81 Tl 204,38	82 Pb 207,2	83 Bi 208,98	84 Po 210*	85 At 210*	86 Rn 222*														
87 Fr 223	88 Ra 226	103 Lr 262*	104 Rf 261*	105 Db 262*	106 Sg 266*	107 Bh 264*	108 Hs 269*	109 Mt 268*	110 Uun 269*	111 Uuu 272*	112 Uub 277*																				
																		57 La 138,91	58 Ce 140,12	59 Pr 140,91	60 Nd 144,24	61 Pm 147*	62 Sm 150,36	63 Eu 151,96	64 Gd 157,25	65 Tb 158,93	66 Dy 162,50	67 Ho 164,93	68 Er 167,26	69 Tm 168,93	70 Yb 173,04
																		89 Ac 227*	90 Th 232,04	91 Pa 231*	92 U 238,03	93 Np 237*	94 Pu 239*	95 Am 241*	96 Cm 244*	97 Bk 249*	98 Cf 252*	99 Es 252*	100 Fm 257*	101 Md 258*	102 No 259*

Metalli

Non metalli

Semimetalli

Gas nobili