

Struttura dell'atomo e Tavola periodica

Struttura atomica e meccanica quantistica

Equaz. di Schrödinger (1926): calcolo della funzione d'onda $\psi(x,y,z)$:
 $|\psi(x,y,z)|^2$ dà la probabilità di trovare l'e⁻ in un punto attorno al nucleo

ORBITALI = zone dello spazio attorno al nucleo con
alta probabilità di trovare l'e⁻

Orbitali atomici descritti da 3 numeri quantici:

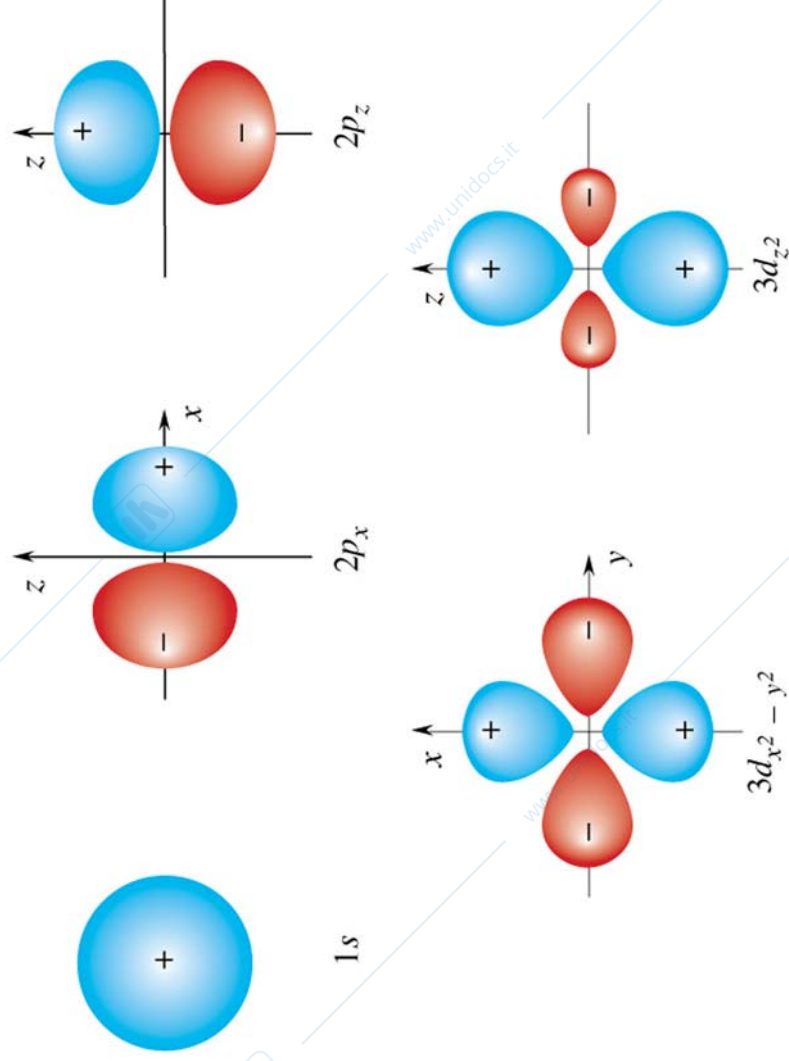
- n = n. quantico principale = 1, 2, 3 ... \Rightarrow livello energetico
 - l = n. quantico azimutale = 0, 1, 2, ... $n - 1 \Rightarrow$ forma orbitale
- | | | | | | | |
|---|-------|-----|-----|-----|-----|------|
| — | $l =$ | 0 | 1 | 2 | 3 | |
| | | s | p | d | f | |
- m_l = n. quantico magnetico = 0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm l$

\Rightarrow orientazione orbitale

Orbitali dell'atomo di idrogeno [Tavola Periodica](#)

Funzioni d'onda e orbitali

La funzione d'onda $\psi(x,y,z)$ ha un segno
(ma la probabilità $|\psi(x,y,z)|^2 > 0$)



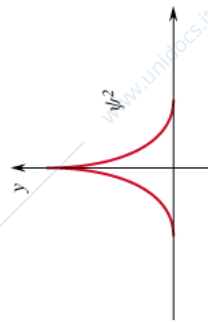
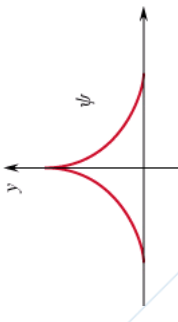
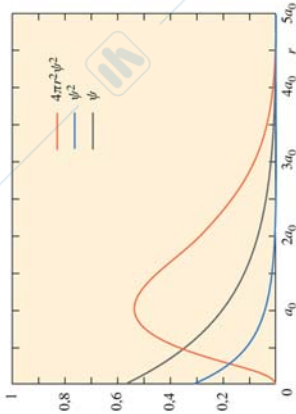
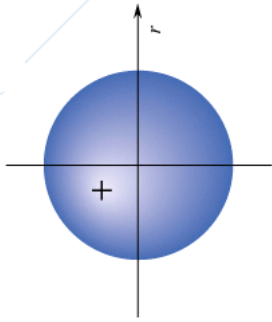
Chimica

I. Bertini, C. Luchinat, F. Mani
Copyright © 2004 Casa Editrice Ambrosiana

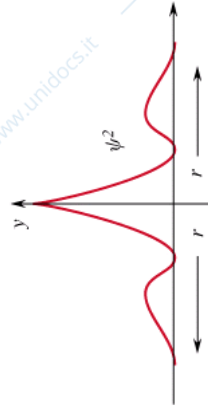
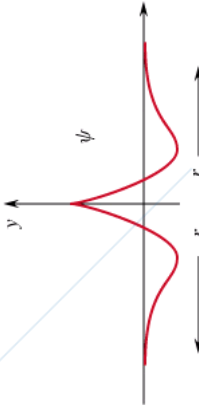
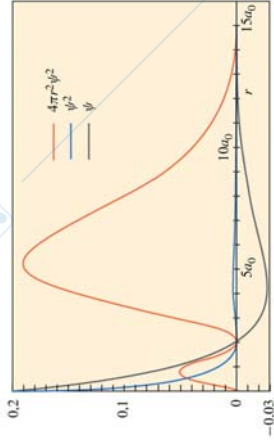
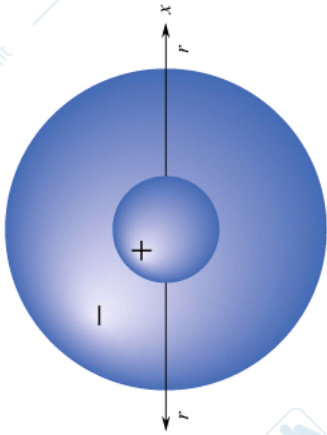


Funzioni d'onda e orbitali

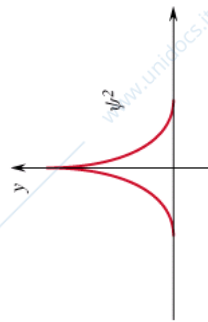
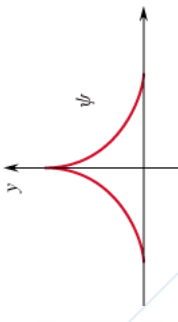
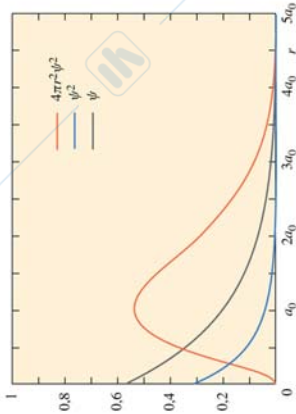
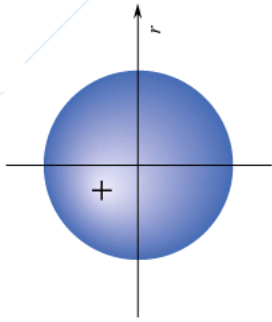
$n=1$
 $l=0$



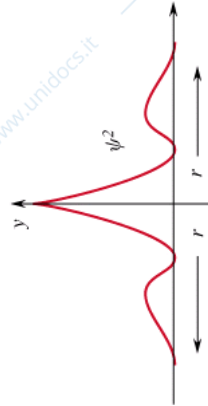
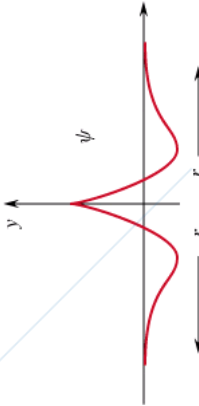
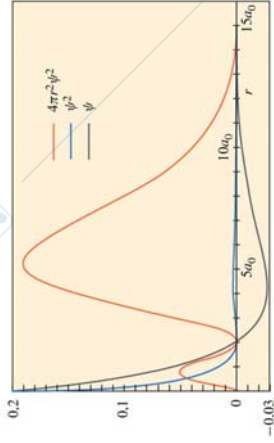
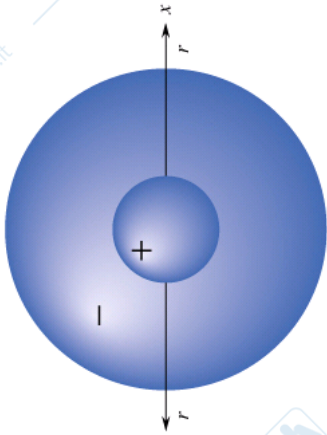
$n=2$
 $l=0$



$n=1$
 $l=0$



$n=2$
 $l=0$



Chimica
I. Bertini, C. Luchinat, F. Mani
Copyright © 2004 Casa Editrice Ambrosiana

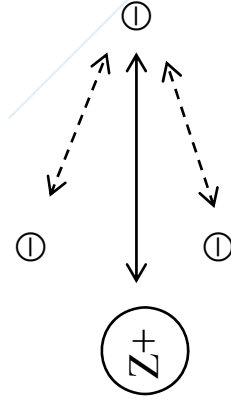
ATOMI POLIELETRONICI Tavola periodica

Orbitali come per atomo H, ma

1. maggior carica nucleare;
2. maggior numero di e^-

Quindi:

1. maggior attrazione da parte del nucleo al crescere di Z
2. repulsione fra e^-



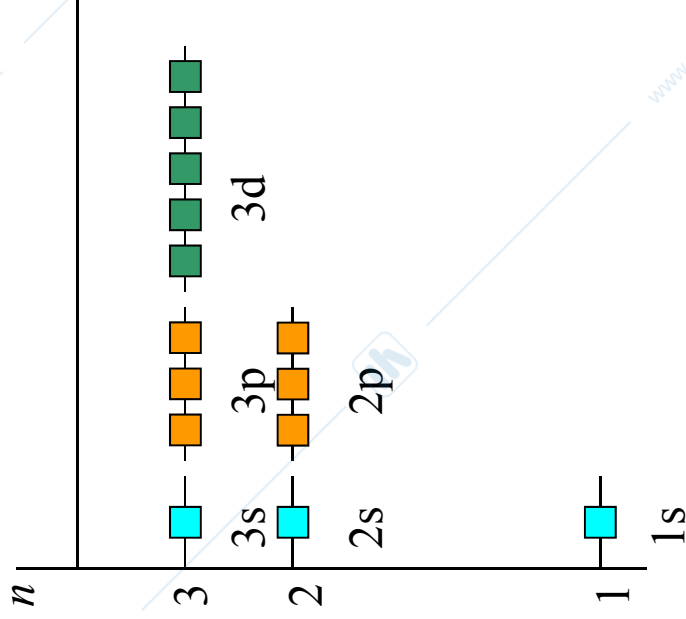
e^- interni schermano in parte la carica nucleare

e^- esterni subiscono una carica nucleare (schermata) minore $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$

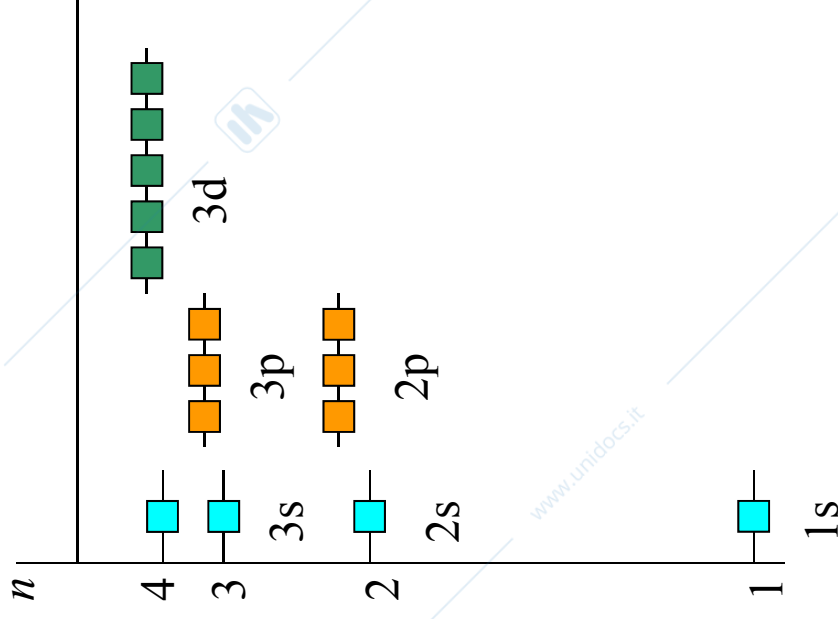
Inoltre: e^- dello stesso livello n sono più attratti dal nucleo se sono in orbitali che gli penetrano più vicino.

Schermo: e^- nel livello n : un elettrone nel livello $n-1$ dà $\sigma = 0.85$, nei livelli più interni dà $\sigma = 1$, nello stesso livello n dà $\sigma = 0.35$

Atomo di idrogeno



Atomo polielettronico



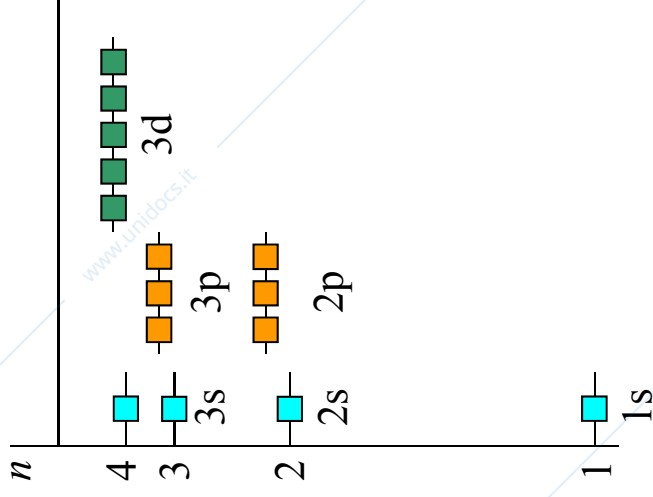
Orbitali

Proprietà dell' e^- : spin = momento magnetico quantizzato
n. quantico $m_s = \pm \frac{1}{2}$, o anche \uparrow (su) oppure \downarrow (giù)

Occupazione degli orbitali

- Principio di esclusione di Pauli (1924): ogni e^- può avere un solo insieme di 4 numeri quantici distinti n, l, m_l, m_s
 - un orbitale può contenere un max di 2 e^- con spin antiparallelo
- livelli energetici degli orbitali
 - orbitali s max 2 e^- , orbitali p max 6 e^- , orbitali d max 10 e^-
- Regola di Hund: se un sottolivello non è completo, gli e^- occupano il no. max di orbitali con spin parallelo.
 - dove si metteranno 3 e^- nel livello $2p$? Forma degli orbitali
 - 3 e^- : $2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

Aufbau degli elementi e Tavola Periodica



- **Cationi** carica \oplus = perdita di e^- più esterni.
 - K^+ : $[Ar] 4s^1 - e^- \rightarrow [Ar]$
 - Ca^{2+} : $[Ar] 4s^2 - 2 e^- \rightarrow [Ar]$
- **Anioni** carica \ominus = acquisto di e^- negli orbitali esterni.
 - Cl^- : $[Ne] 3s^2 3p^5 + e^- \rightarrow [Ar]$
 - O^{2-} : $[He] 2s^2 2p^4 + 2e^- \rightarrow [Ne]$

In tutti i casi si ha il livello più esterno completo

- \Rightarrow (relativa) facilità a completare un (sotto) livello
- \Rightarrow gas nobili poco reattivi.

PROPRIETA' PERIODICHE

- **EI** = energia di ionizzazione
= energia necessaria per strappare un e^- dall'atomo isolato.



- **AE** = affinità elettronica
= energia necessaria per strappare un e^- dall'anione con carica -1 .



Ionizzazioni successive

Raggio atomico = dimensione atomica in un composto raggi atomici

Raggi ionici raggi ionici

Cationi: raggio minore dell'atomo neutro
(perdita di e^- , che si respingono)

Anioni: raggio maggiore dell'atomo neutro
(acquisto di e^- che si respingono)