



L'Unità di Misura della Materia: L' ATOMO e le sue Particolarità

Emiliano Laudadio



Atomo

Nucleo

Protoni 1_1p $1.67252 \cdot 10^{-24} g \Rightarrow 1.00728 u.m.a.$

$+1.60218 \cdot 10^{-19} C$

Neutroni 1_0n $1.67482 \cdot 10^{-24} g \Rightarrow 1.00867 u.m.a.$

Elettroni

e $9.10939 \cdot 10^{-28} g \Rightarrow 5.486 \cdot 10^{-4} u.m.a.$

$-1.60218 \cdot 10^{-19} C$

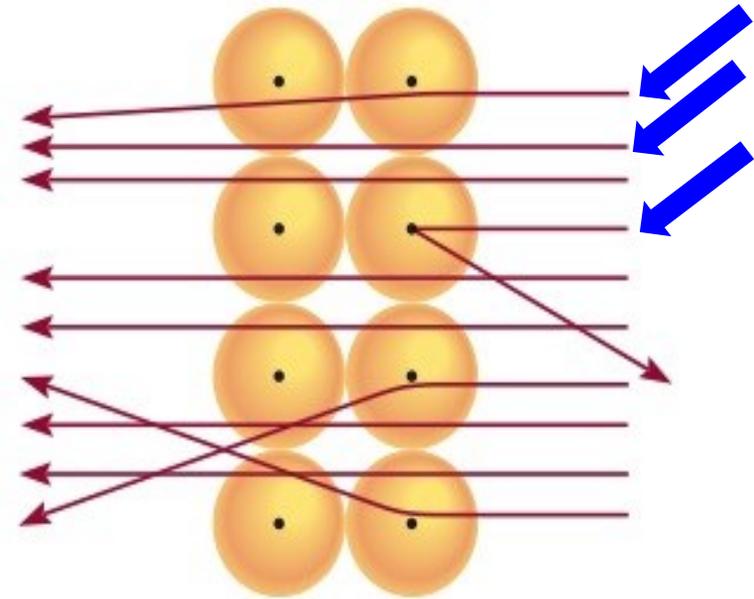
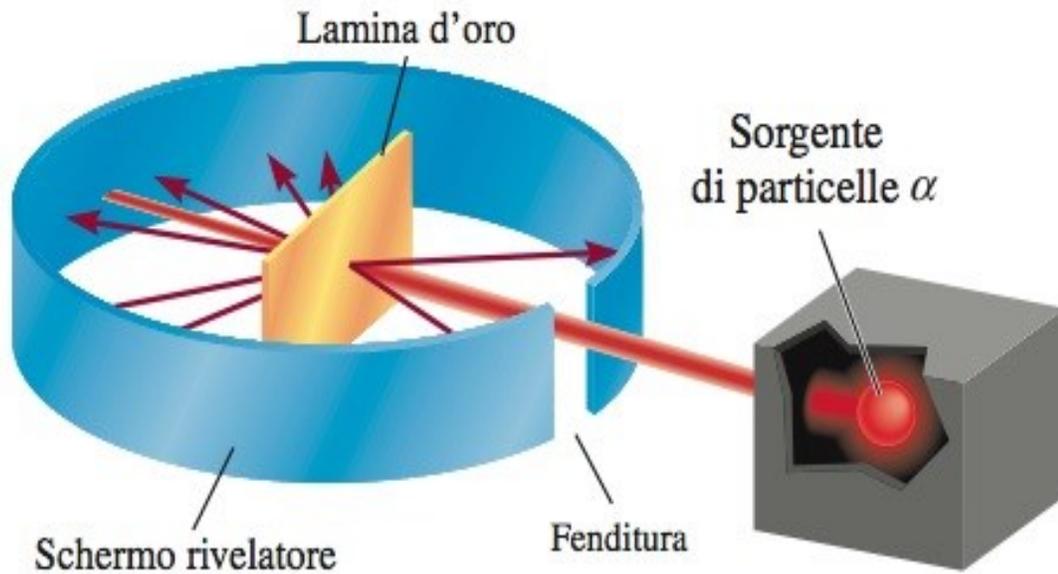
ELETTRONI → NUCLEO



Esperimento di Rutherford (1911)

particella α : massa = 4 u.m.a. ; carica = +2

${}^4_2\alpha$: nuclei di He



raggio del nucleo: $\approx 10^{-12} \text{ cm}$

raggio atomico: $\approx 10^{-8} \text{ cm}$



Modello di Rutherford: contrasto con la fisica classica perché prima o poi l'elettrone avrebbe dovuto cadere sul nucleo irradiando Energia.

Le leggi valide per i **sistemi macroscopici** si dimostravano inadeguate per i **sistemi microscopici**.

Occorrevano dunque **nuove leggi fisiche** capaci di dare una spiegazione plausibile al fenomeno.

Se l'elettrone non cadeva sul nucleo in qualche modo l'Energia ad esso associata doveva essere **costante**.

OSCILLATORI ARMONICI: l'Energia non può variare linearmente ma solo per **quantità discrete** e **caratteristiche**.



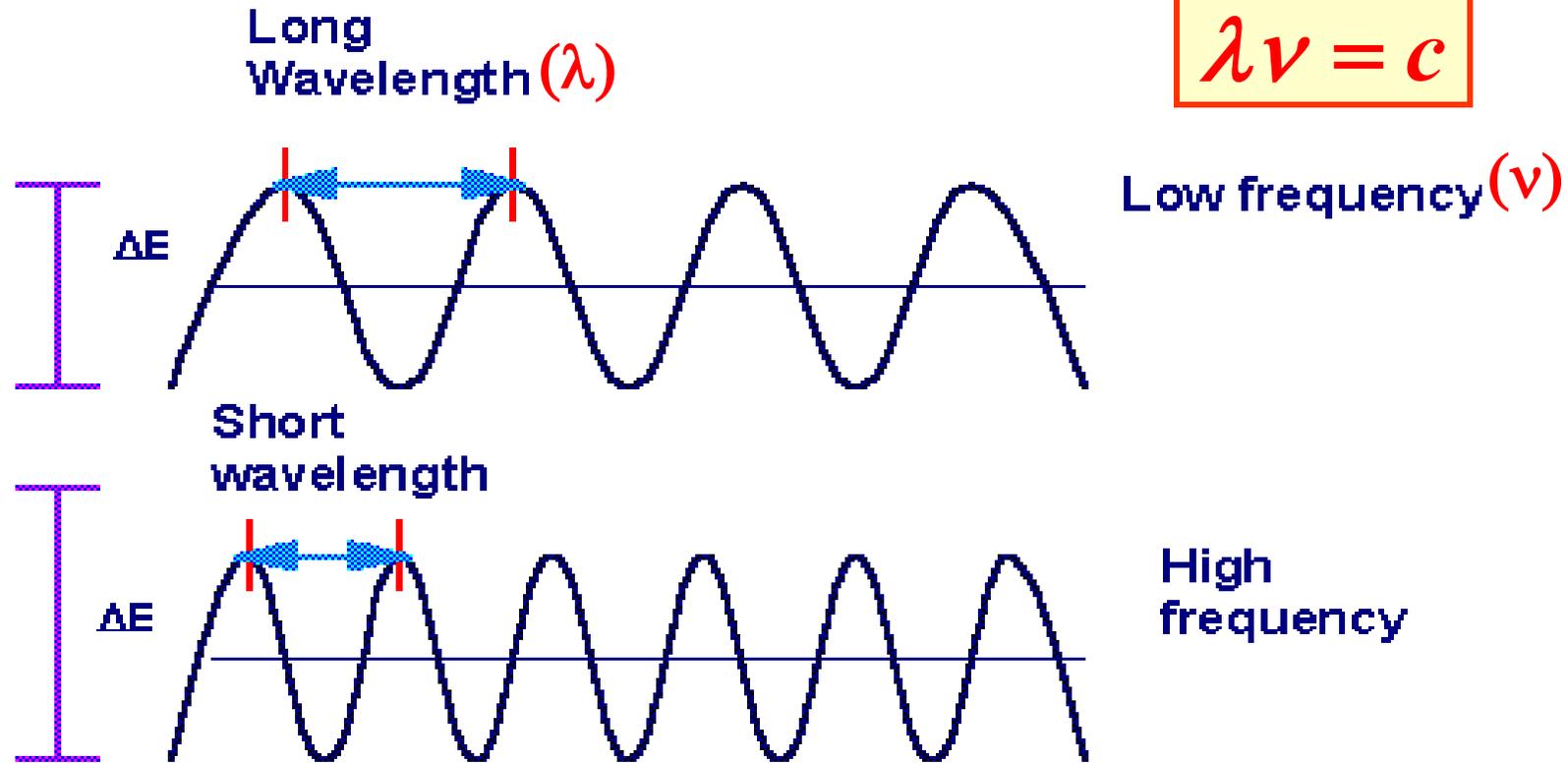
Anche nelle onde elettromagnetiche...

Maxwell (1865)

Electromagnetic Radiation

$$E = h\nu$$

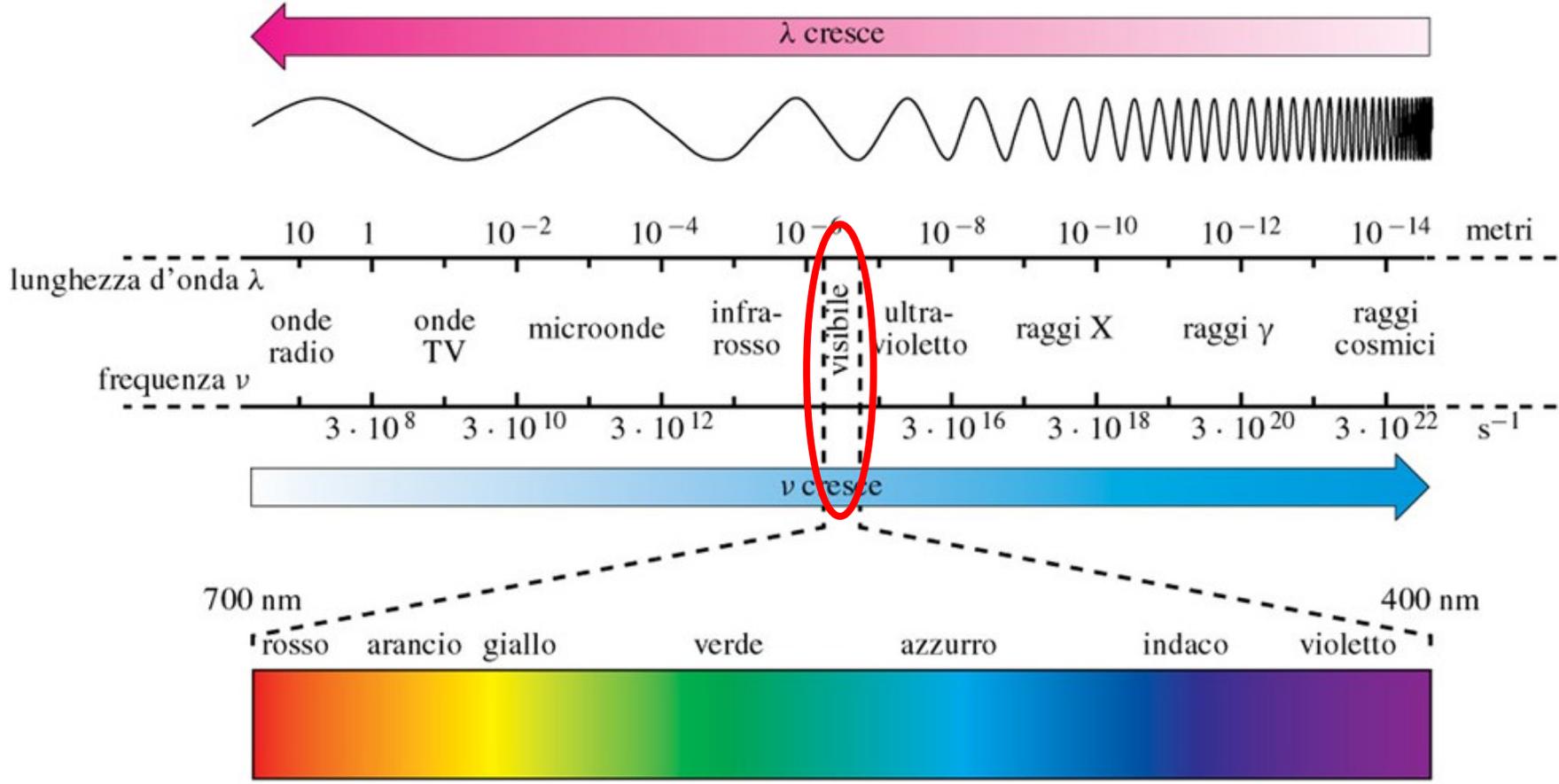
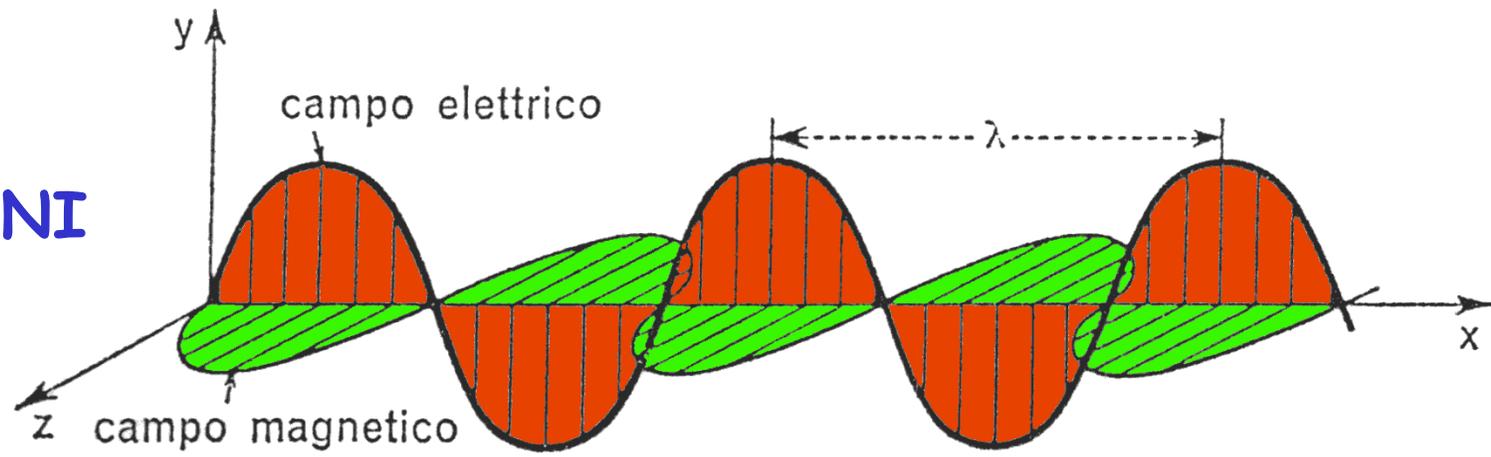
$$\lambda\nu = c$$



$$c = \lambda\nu = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$$

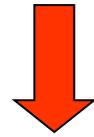


FOTONI





Studi sulle onde elettromagnetiche



Interazioni Materia/Onde (luce)

$$E = h \nu$$



La teoria dei "quanti" di Planck (1900)

OSCILLATORI ARMONICI: l'Energia non può variare linearmente ma solo per **quantità discrete** e **caratteristiche**.

Quanto : la più piccola quantità di energia che può essere assorbita o emessa sotto forma di **onda elettromagnetica**.

Quantizzazione dell'Energia

$$E = h \nu$$

dove: **E** è l'energia di un singolo quanto di energia (*fotone*)

$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J s} = 6.63 \times 10^{-27} \text{ erg s}$$

ν è la frequenza della radiazione.

$$\frac{E}{\nu} = h$$



Modello Planetario di BOHR (1913)

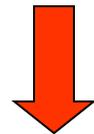
La quantità di moto (velocità) dell'elettrone è
COSTANTE
e multipla di una quantità finita

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

momento angolare → *numeri interi* → *quantità multipla*

$$h = \text{costante di Plank} = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{sec} = 6.6 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec}$$

L'Energia è funzione di r secondo n (numero quantico)



Quantizzazione dell'Energia



Come nasce il modello planetario di Bohr

Ipotesi quantica di Planck

Lo scambio di energia fra materia e radiazione avviene per quanti.

Non è possibile fornire ad un atomo un valore qualsiasi di energia; l'energia è quantizzata e multipla di una quantità minima (**quanto**) il cui valore è:

Einstein: natura corpuscolare della luce

La radiazione elettromagnetica è formata da particelle dette fotoni.

Ogni **fotone** trasporta una quantità discreta di energia definita da:

$$E = h\nu = h (c/\lambda)$$

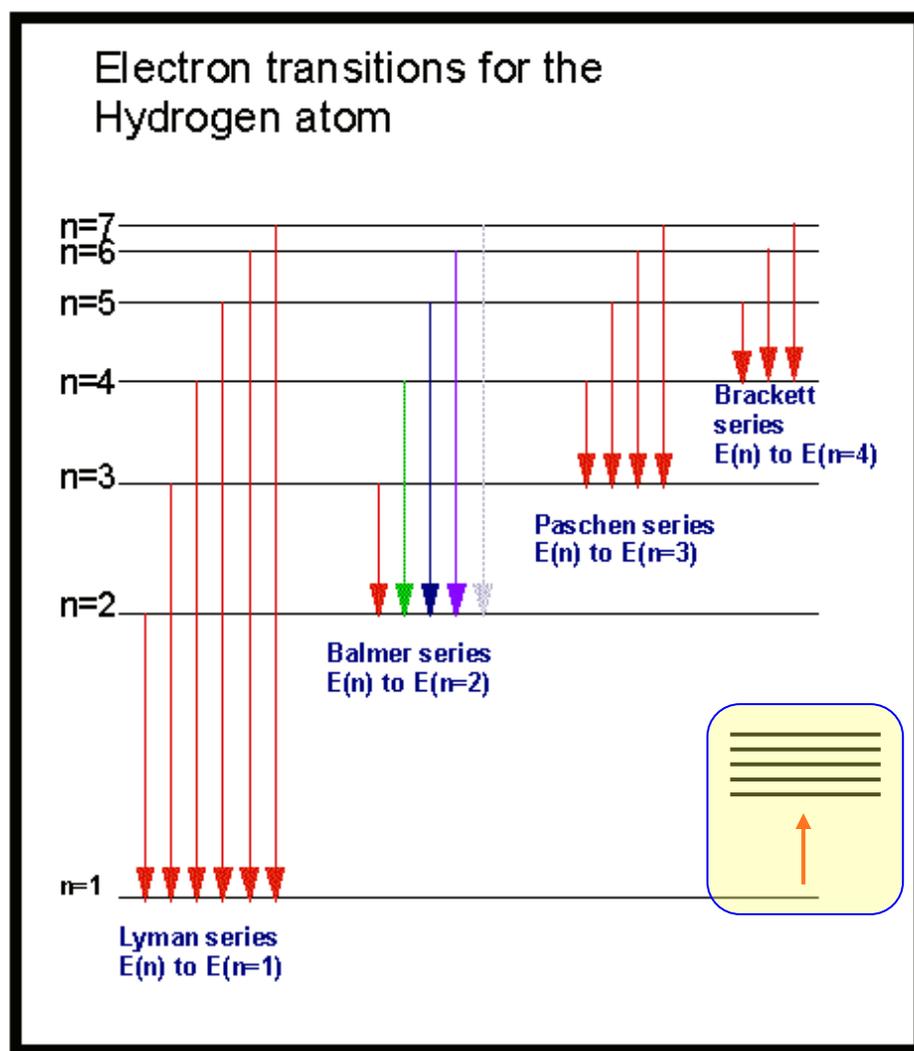
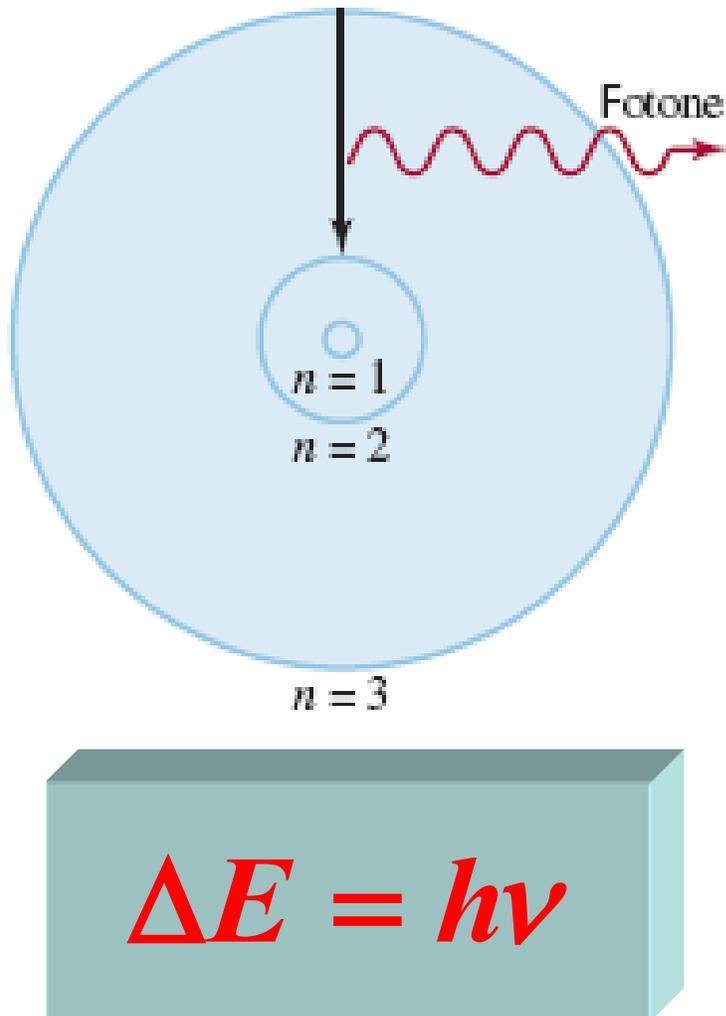


Studi sulle onde elettromagnetiche



Interazioni Materia/Onde (luce)

"...l'atomo assorbe od emette Energia solo quando si verificano passaggi elettronici da uno stato quantico all'altro: l'Energia corrispondente alla differenza tra i due livelli del passaggio viene assorbita o emessa sotto forma di unico **quanto**."



...l'atomo assorbe od emette Energia solo quando si verificano **passaggi elettronici da uno stato quantico all'altro**: l'Energia corrispondente alla differenza tra i due livelli coinvolti nel passaggio viene **assorbita od emessa sotto forma di unico quanto**...



**Tutto sembrava (più o meno)
"tornare". Finchè....**



PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE (Heisenberg) (1927)

"...è impossibile misurare esattamente la posizione e la quantità di moto di una particella di massa molto piccola lungo una certa direzione..."

Conseguenza: non possiamo determinare esattamente né la posizione né la velocità dell'elettrone.

grado di indeterminazione:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi}$$

l'errore è inversamente
proporzionale alla massa

poichè: $\Delta p = m \cdot \Delta v$

\Rightarrow

$$\Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi m}$$

proporzionalità inversa



l'errore è inversamente proporzionale alla massa

Per una pallina del peso di 1 mg:

$$\Delta v \cdot \Delta x \approx \frac{10^{-27}}{10^{-3}} \approx 10^{-24} \quad \Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi m}$$

Per un elettrone che pesa $\approx 10^{-27}$ g:

$$\Delta v \cdot \Delta x \approx \frac{10^{-27}}{10^{-27}} \approx 1$$

Se invece ci accontentassimo di determinarne la posizione dell'elettrone con una precisione dell'ordine di grandezza del raggio atomico (10^{-8} cm), avremmo una indeterminazione sulla sua velocità pari a :

$$\Delta v \approx \frac{10^{-27}}{10^{-27} \Delta x} \approx \frac{10^{-27}}{10^{-27} \cdot 10^{-8}} \approx 10^8 \text{ cm/sec}$$

paragonabile alla velocità della luce

"...è impossibile misurare esattamente la posizione e la quantità di moto di una particella di massa molto piccola lungo una certa direzione..."

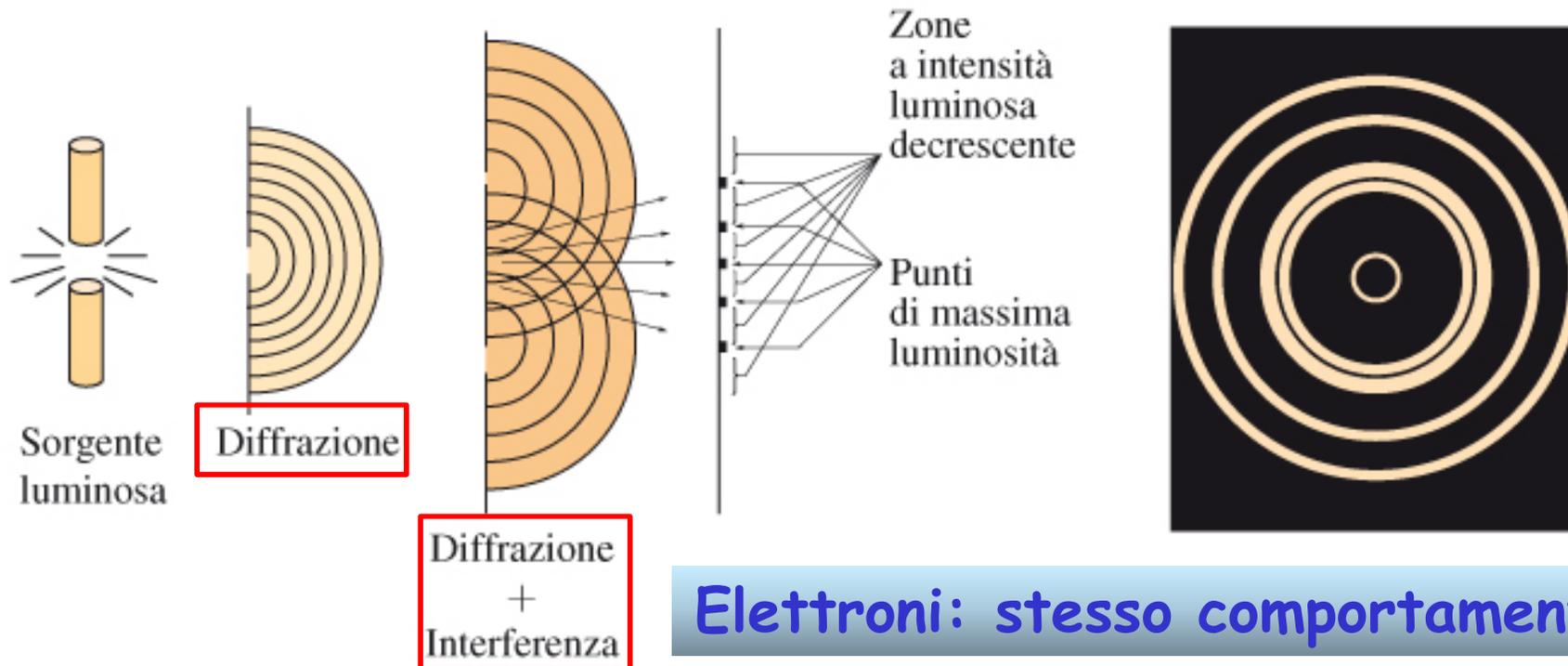


inoltre...

Diffrazione: onde che si sovrappongono generate da sorgenti continue

Interferenza: onde che si sovrappongono generate da singole sorgenti puntiformi

De Broglie (1924): *ad una particella di massa m in movimento si può associare una lunghezza d'onda. Se l'energia è di natura ondulatoria, forse lo è anche la materia?*





ONDA / PARTICELLA

diffrazione

massa determinabile

$$E = h\nu$$

$$E = mc^2$$

combinando queste due equazioni:

$$h\nu = mc^2 \quad \text{poichè:} \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

sostituendo e semplificando:

$$\frac{h}{\lambda} = mc$$



considerando una velocità v anziché quella della luce c :

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

EQUAZIONE DI DE BROGLIE

la *condizione per la diffrazione*

proporzionalità inversa tra mv con λ

le particelle devono essere *piccole* e *particolarmente veloci*

in conclusione: *inadeguatezza della meccanica classica*

MECCANICA ONDULATORIA



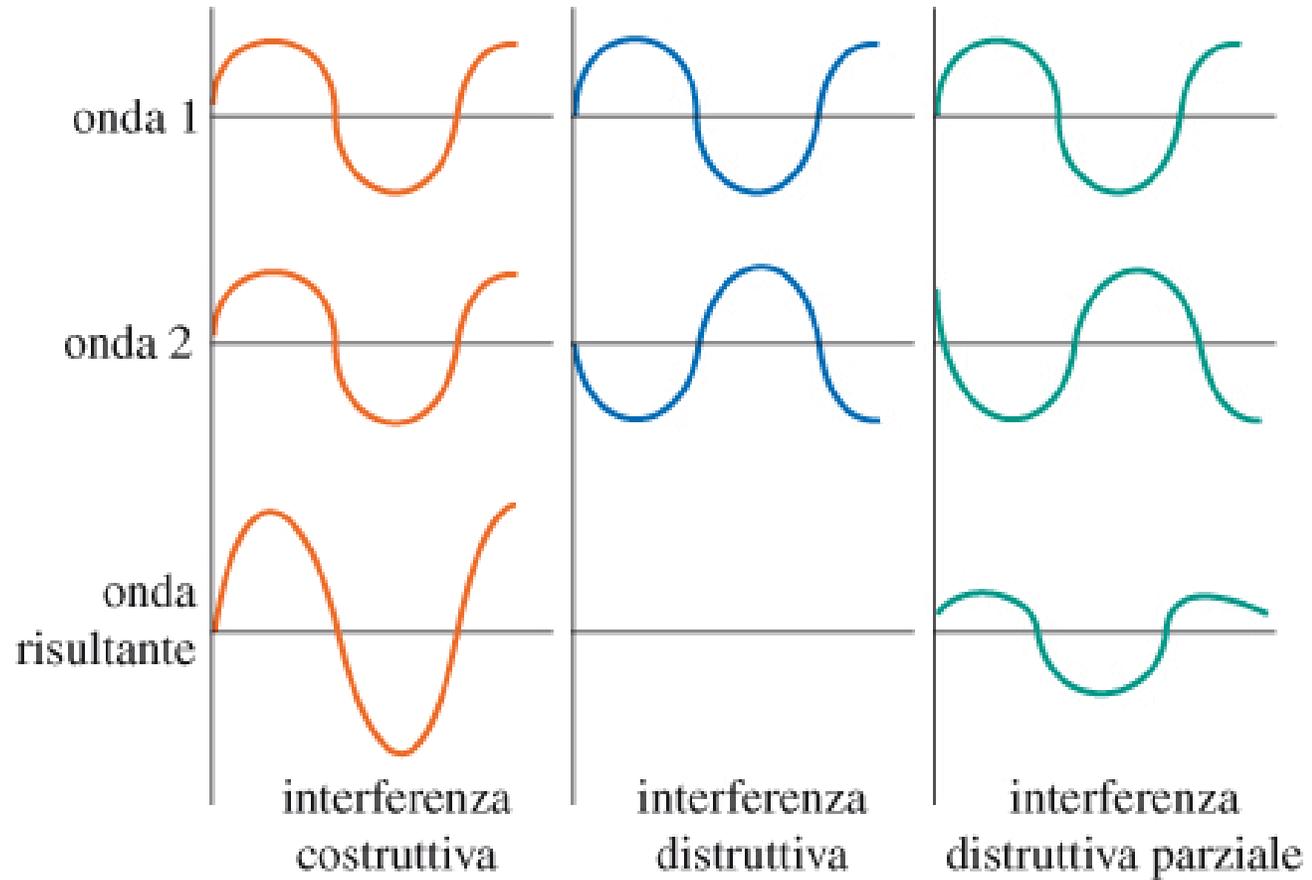
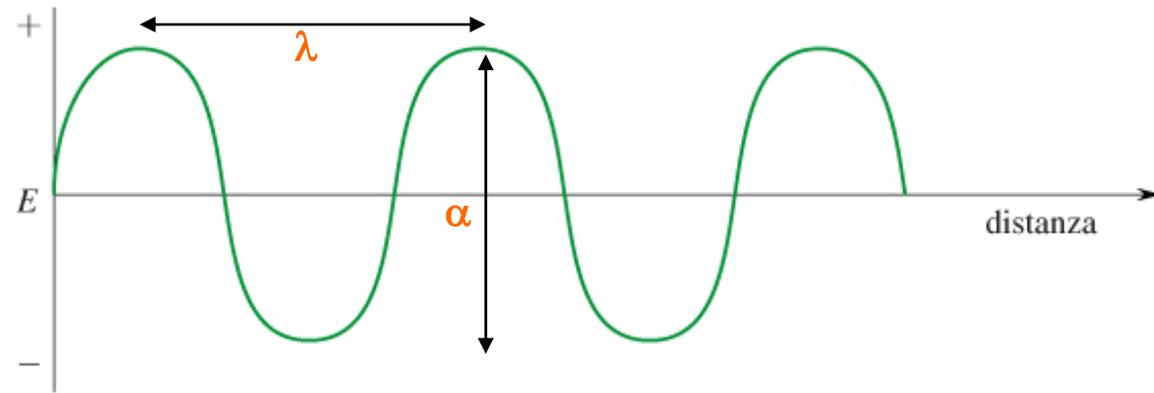
Per descrivere il moto dell'elettrone attorno al nucleo non possiamo prescindere dalla sua natura
ONDULATORIA

l'elettrone dunque si comporta
contemporaneamente come:

particella ha una massa determinata

onda elettromagnetica λ

altrimenti...





...quindi tenendo conto che l'**elettrone**:

particella ha una massa determinata

onda elettromagnetica λ



solo determinati valori di λ sono permessi e poichè:

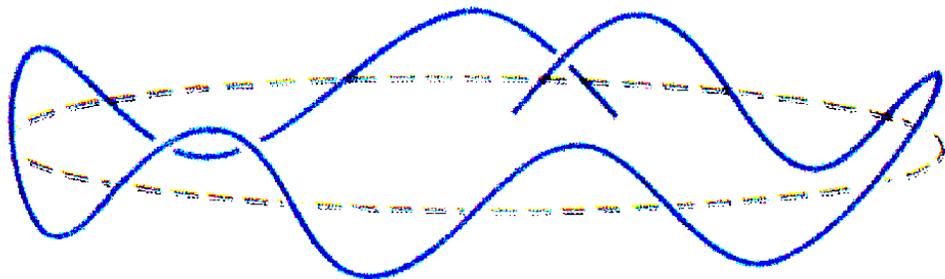
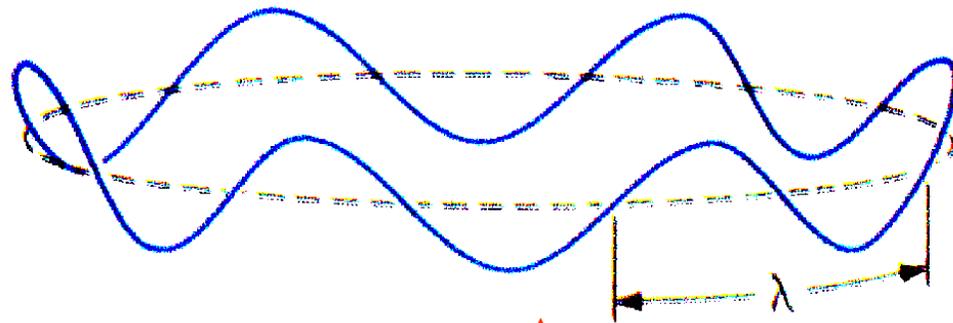
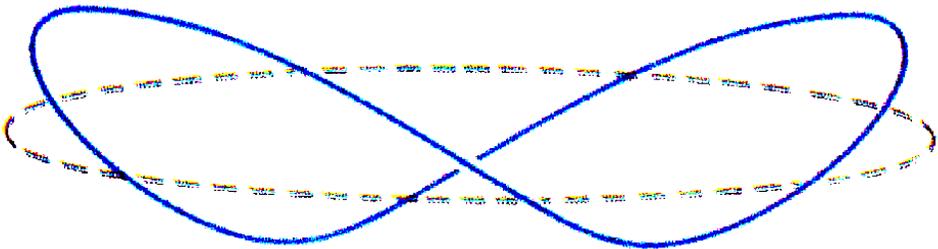
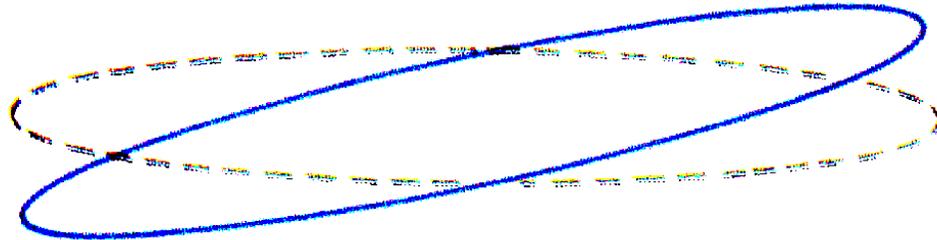
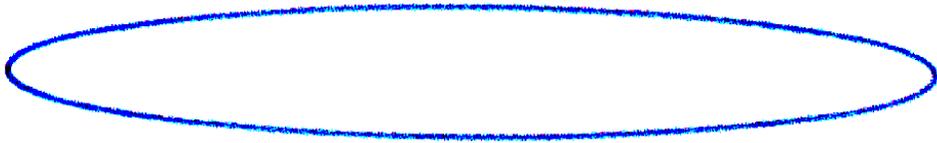
$$v = \frac{c}{\lambda}$$

Saranno permessi solo determinati valori di E



QUANTIZZAZIONE DELL'ENERGIA

La quantizzazione dell'Energia non deriva più da postulati (Bohr) ma è una **conseguenza logica** per avere modelli **fisicamente accettabili**.

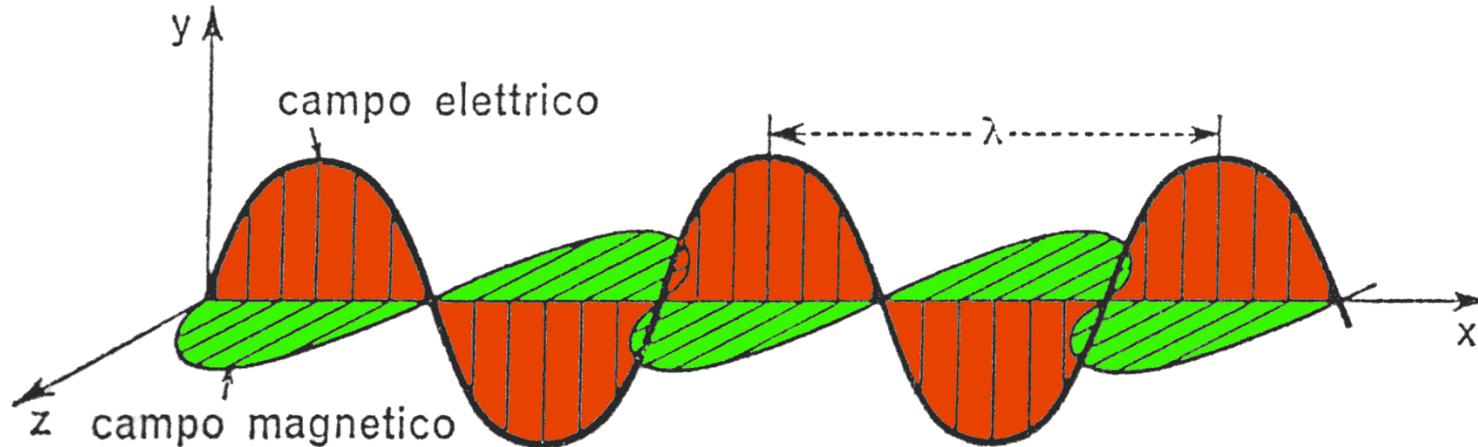


onda stazionaria



Equazione d'**onda stazionaria** per i fotoni:

Definisce le componenti dei campi Elettrico e Magnetico che descrivono la **probabilità di distribuzione** nello spazio



(intensità **illuminazione** di una superficie investita dalla **luce**)



Equazione d'onda stazionaria per i fotoni:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2 \nu^2}{\lambda^2} \psi = 0$$

Definisce le componenti dei campi Elettrico e Magnetico che descrivono la *probabilità di distribuzione* nello spazio

Energia Totale per l'elettrone:

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + E_p \quad \text{da cui:} \quad \frac{1}{2}mv^2 = E - E_p \quad \text{cioè:} \quad v^2 = \frac{2(E - E_p)}{m}$$

Dividendo per λ^2 :

$$\frac{v^2}{\lambda^2} = \frac{2(E - E_p)}{m\lambda^2}$$



Sostituendo λ dall'*Equazione di De Broglie* e considerando che $v=c / \lambda$

si ottiene:
$$v^2 = \frac{2mv^2(E - E_p)}{h^2}$$

che sostituito nell'equazione d'onda

considerando *tutto lo spazio* fornisce l'*Equazione di Schrödinger (1926)*

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

dunque:

probabilità di distribuzione spaziale

Per l'atomo di Idrogeno: $E_p = -\frac{e^2}{r}$ (interazione Coulombiana) Per cui:

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

Ammette *soluzioni fisicamente accettabili* solo per determinati valori di E definiti da :

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



Queste soluzioni sono determinate solo da certi **valori** di E_n e descrivono delle **funzioni d'onda** (ψ)

Ognuna di esse deve:

- ammettere **un solo valore**
- essere **continua**, come pure la sua derivata
- essere **nulla all'infinito**
- soddisfare la **condizione di ortogonalità**
- soddisfare la **condizione di normalizzazione**

Le soluzioni accettabili sono quindi delle funzioni d'onda (ψ) determinate da particolari valori di n che ne specifica l'**Energia** **numero quantico principale**

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

Volume!

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

$n =$ numero intero

(Bohr)



Volume!

la sua soluzione in termini di **coordinate sferiche polari** determina **altri** numeri quantici (**secondari**) **l** ed **m_l**

(**sottolivelli** di Energia **in funzione del volume**)

I valori che questi numeri quantici determinano quindi la funzione d'onda che definisce un **orbitale**: Ψ_{n,l,m_l}

che **fisicamente** rappresenta una porzione dello spazio (elemento di volume) con **densità di probabilità** definita.

condizione di normalizzazione $\int_{V \rightarrow \infty} |\psi|^2 dV = 1$

$\int_{V \rightarrow \infty} |\psi|^2 dV = 0.95$ 95% di probabilità (convenzione)

$|\Psi_{n,l,m_l}|^2 = \text{cost.}$ superfici di livello con stessa probabilità



elemento di volume \Rightarrow orbitale: ψ_{n,l,m_l}

A seconda dei set di valori (**terne**) dei numeri quantici (**soluzioni accettabili**) si avranno orbitali diversi in **energia** (**n**), **forma** (**l**) e **orientazione** (**m_l**) nello spazio.

“.....l'elettrone nel suo moto rimane sempre entro la superficie di contorno dell'orbitale che ne precisa lo stato quantico – il suo moto non è descrivibile da alcuna traiettoria, determinando una distribuzione di carica (nuvola) diffusa per tutta l'estensione dell'orbitale stesso.....”

$|\psi_{n,l,m_l}|^2 = \text{cost.}$ superfici di livello con stessa probabilità



Interpretazioni:

MATEMATICA: insieme di superfici di equiprobabilità

FISICA: elemento di volume con probabilità massima

L'equazione di Schrödinger quindi ammette **soluzioni accettabili** (cioè fisicamente appropriate) solo per **determinati valori di Energia** dati da **n** che, a sua volta, determina i valori dei numeri quantici **l** ed **m_l** - **orbitale**.

La **quantizzazione dell'Energia** non deriva più da postulati (Bohr) ma è una **conseguenza logica** (soluzioni di equazione) per avere dei **valori** fisicamente accettabili.

Quali?

n = 1, 2, 3, numeri interi

l = 0, 1, 2, **$n - 1$**

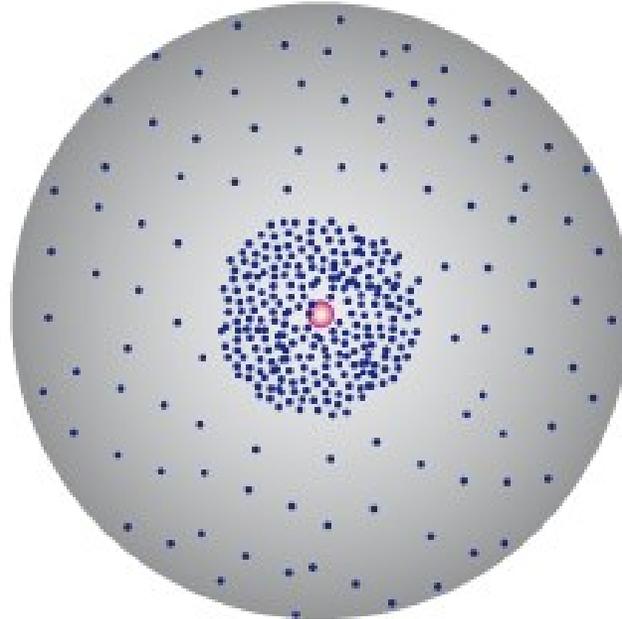
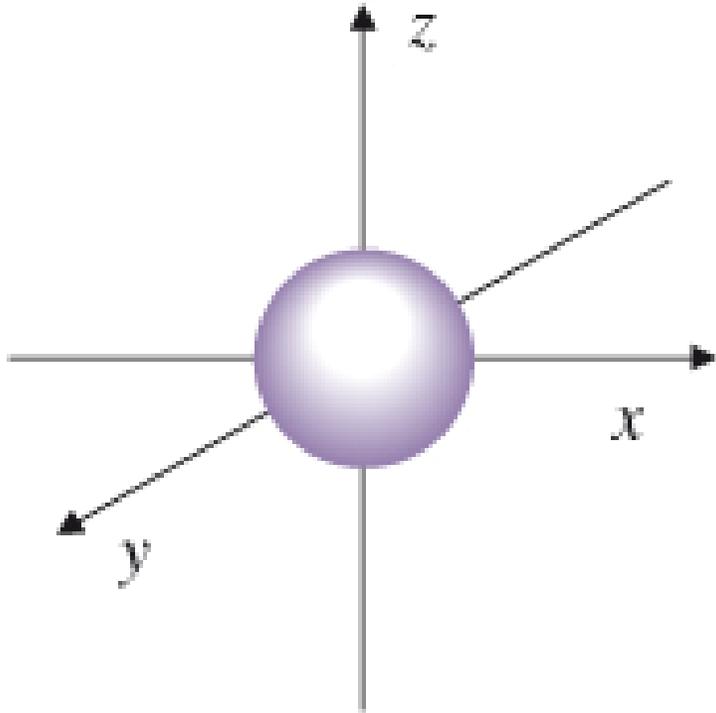
m_l = - **l** , 0, + **l**



I valori che possono assumere questi numeri quantici rappresentano delle **soluzioni dell'Equazione di Schroedinger**.

Essi descrivono così un **orbitale** che può essere quindi identificato solo da determinate combinazioni (**terne**).

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_{1s} = [1, 0, 0]$$



$n = 1, 2, 3, \dots$ numeri interi
 $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$
 $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$



$n = 2$

$$l = 0$$

$$m_l = 0$$



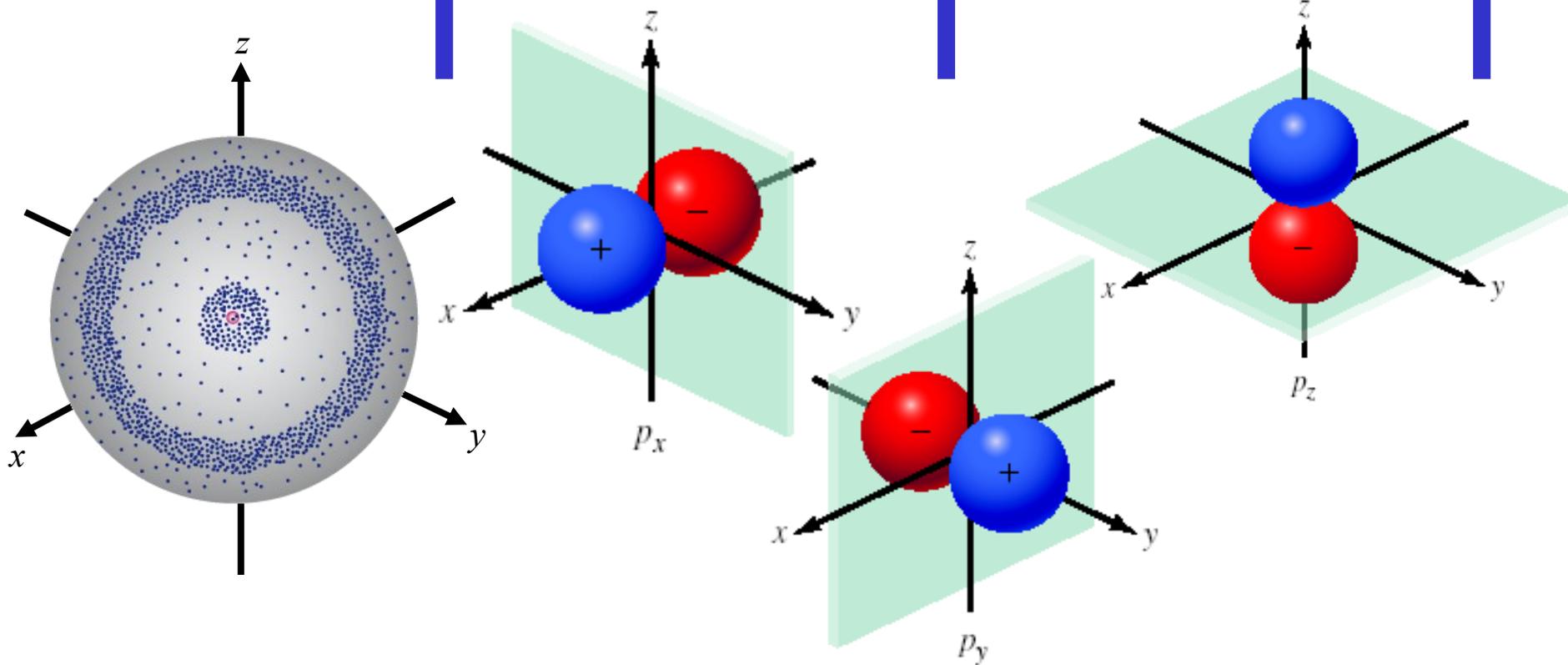
$$\psi_{2s} = [2, 0, 0]$$

$$l = 1$$

$$m_l = 0; m_l = 1; m_l = -1$$



$$\psi_{2p_x} = [2, 1, 0]; \psi_{2p_y} = [2, 1, 1]; \psi_{2p_z} = [2, 1, -1]$$





$$n = 3 \left\{ \begin{array}{l} l = 0 \quad m_l = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_{3s} = [3, 0, 0] \\ l = 1 \quad m_l = 0; m_l = 1; m_l = -1 \end{array} \right.$$

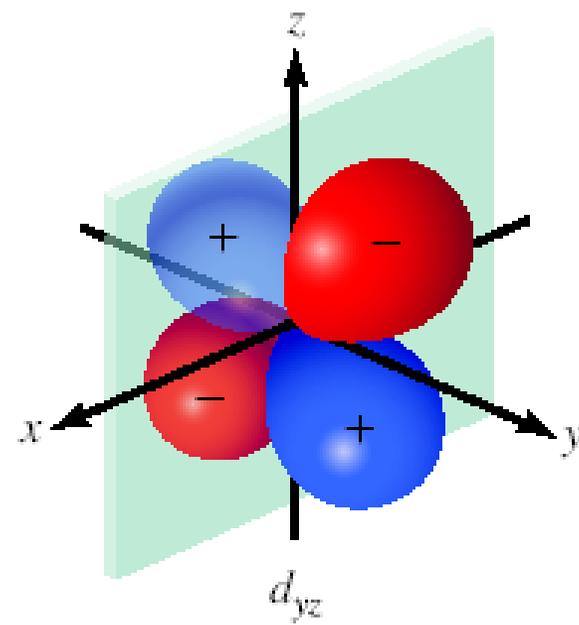
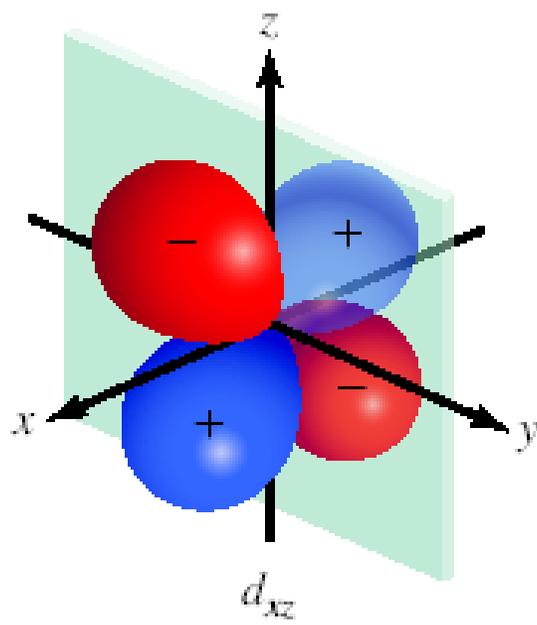
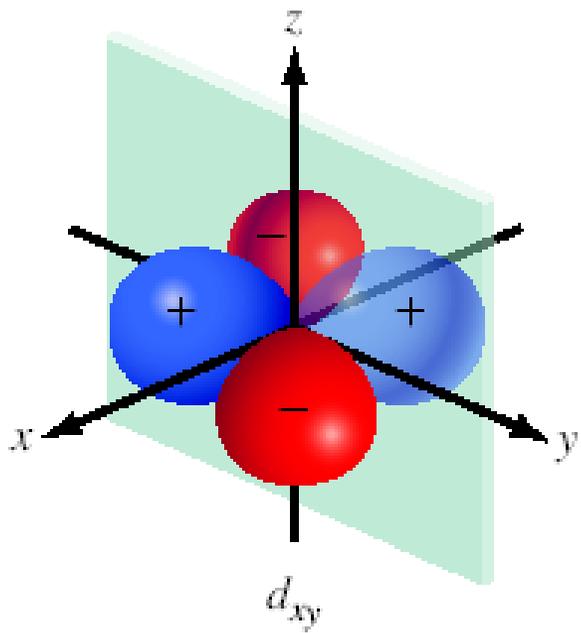
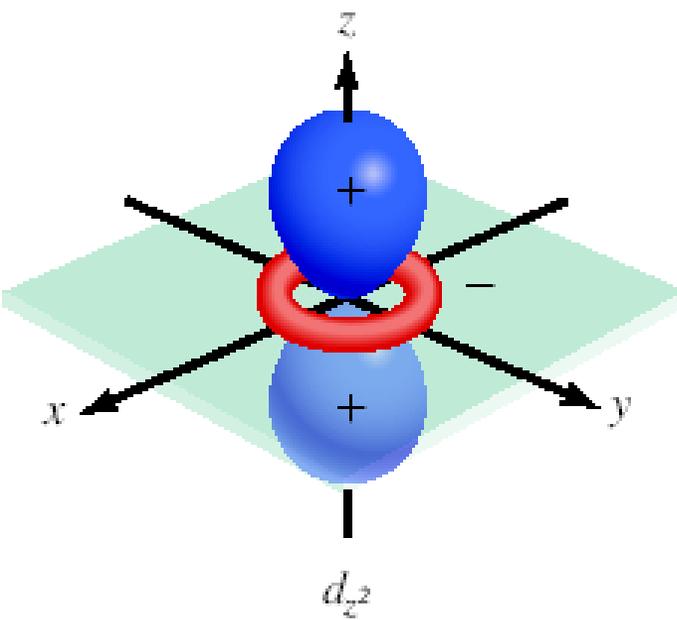
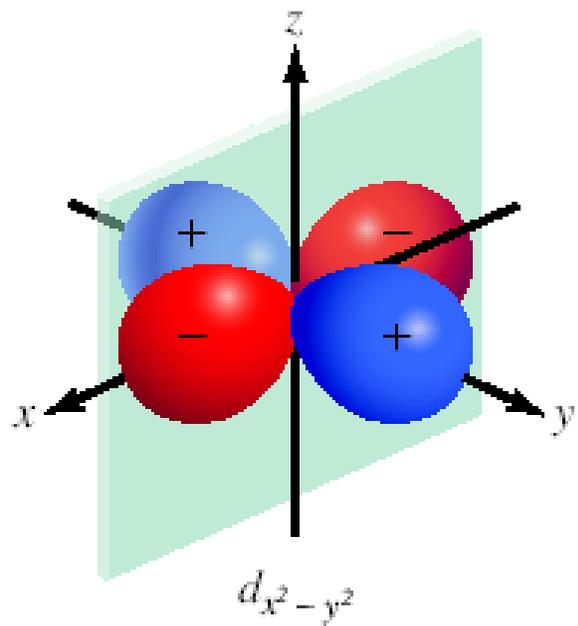
$$\psi_{3p_x} = [3, 1, 0]; \psi_{3p_y} = [3, 1, 1]; \psi_{3p_z} = [3, 1, -1]$$

$$l = 2$$

$$m_l = 1; m_l = 2; m_l = 0; m_l = -1; m_l = -2$$

$$[3, 2, 1]; [3, 2, 2]; [3, 2, 0];$$

$$[3, 2, -1]; [3, 2, -2]$$





$$n = 4 \quad \left\{ \begin{array}{l} l = 0 \quad m_l = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_{4s} = [4, 0, 0] \\ l = 1 \quad m_l = 0; m_l = 1; m_l = -1 \end{array} \right.$$

$$\psi_{4p_x} = [4, 1, 0]; \psi_{4p_y} = [4, 1, 1]; \psi_{4p_z} = [4, 1, -1]$$

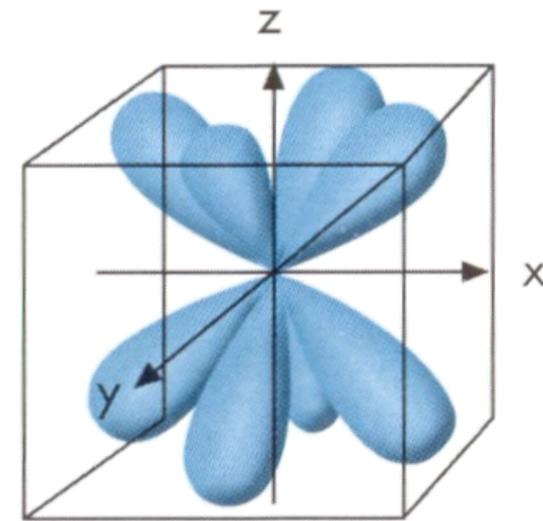
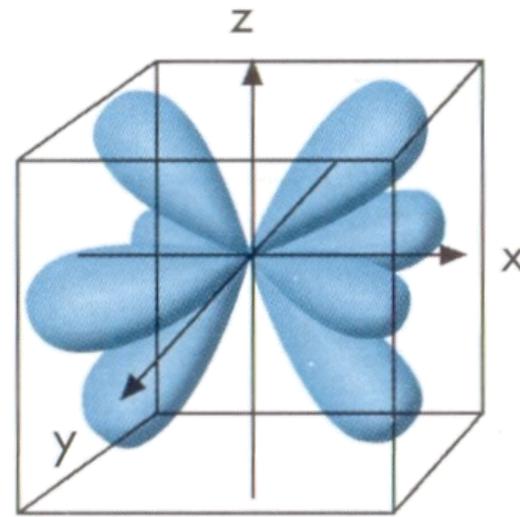
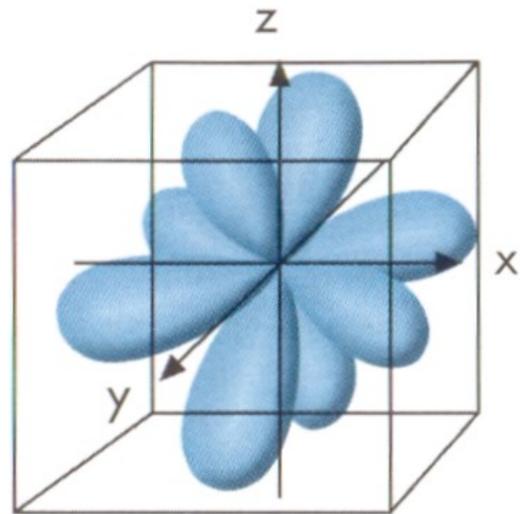
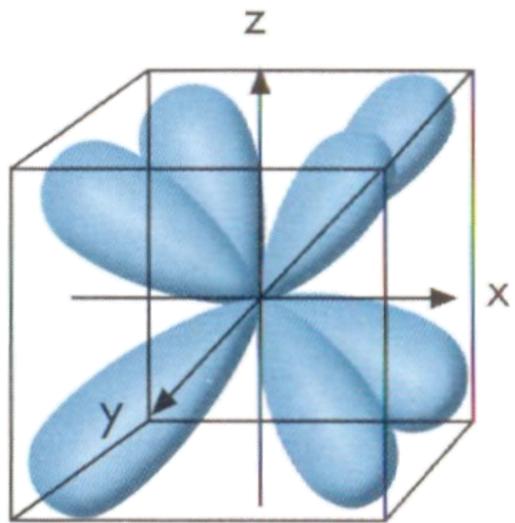
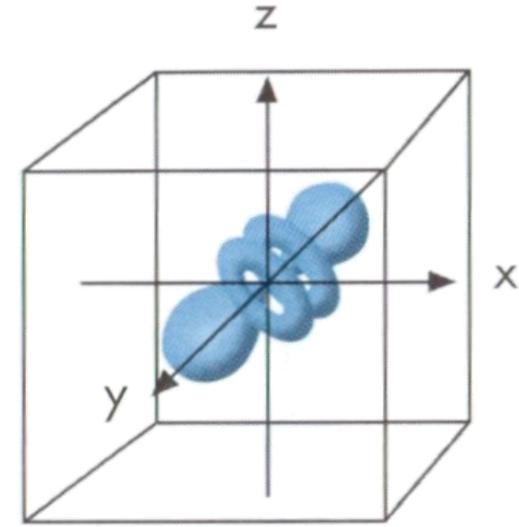
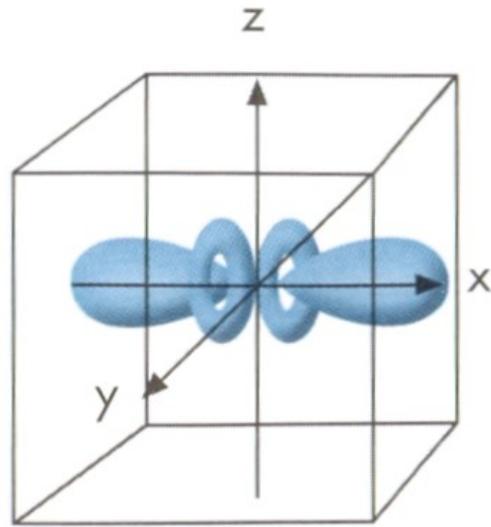
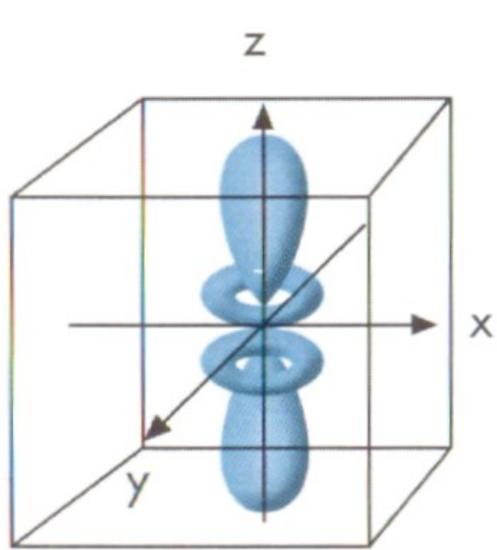
$$l = 2 \quad m_l = 1; m_l = 2; m_l = 0; m_l = -1; m_l = -2$$

$$\psi_{4d} : [4, 2, 1]; [4, 2, 2]; [4, 2, 0]; [4, 2, -1]; [4, 2, -2]$$

$$l = 3$$

$$m_l = 1; m_l = 2; m_l = 3; m_l = 0; m_l = -1; m_l = -2; m_l = -3$$

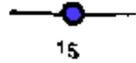
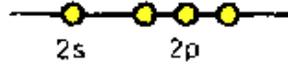
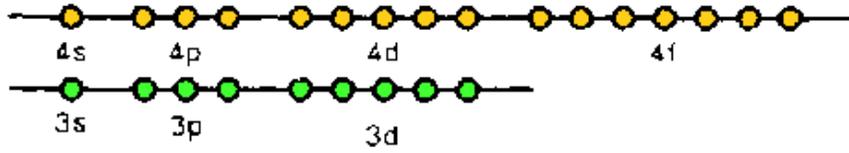
$$[4, 3, 3]; [4, 3, 2]; [4, 3, 1]; [4, 3, 0]; [4, 3, -1]; [4, 3, -2]; [4, 3, -3]$$



Come sono state ottenute queste rappresentazioni?

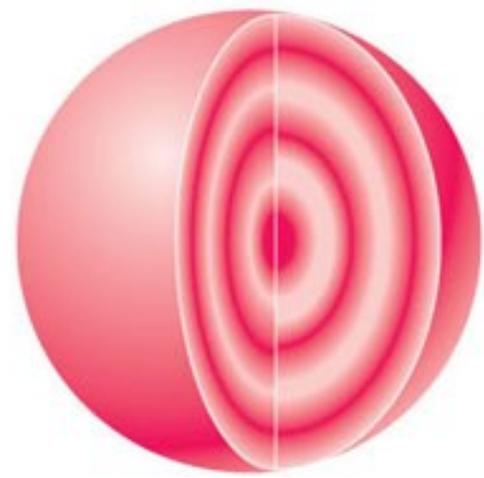
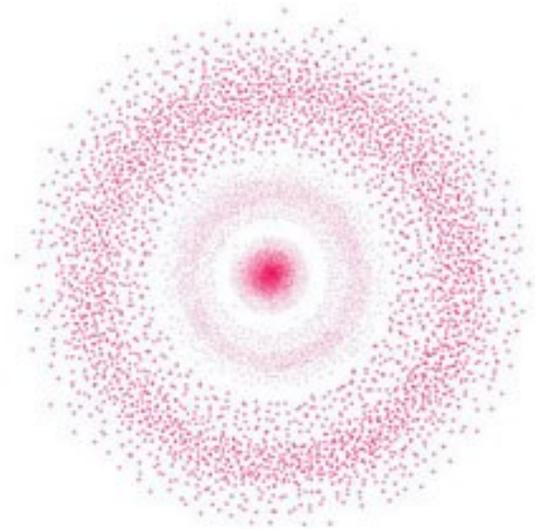
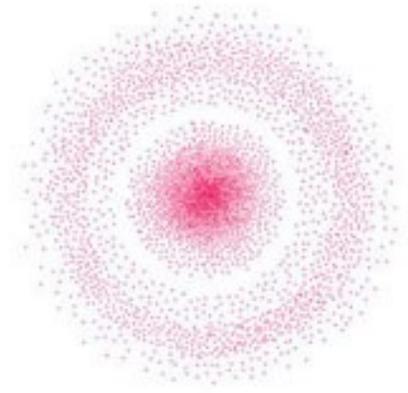
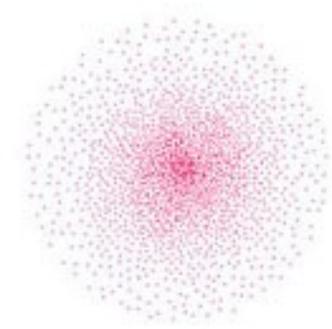
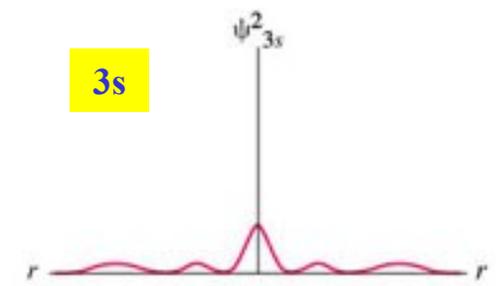
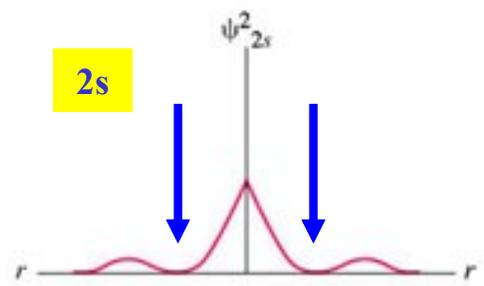
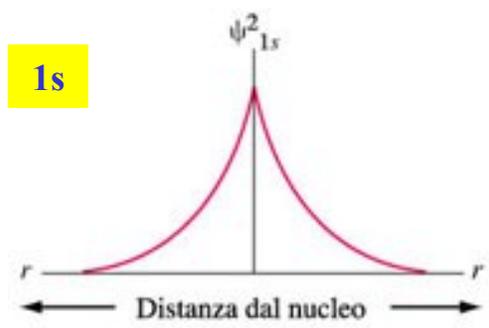


E



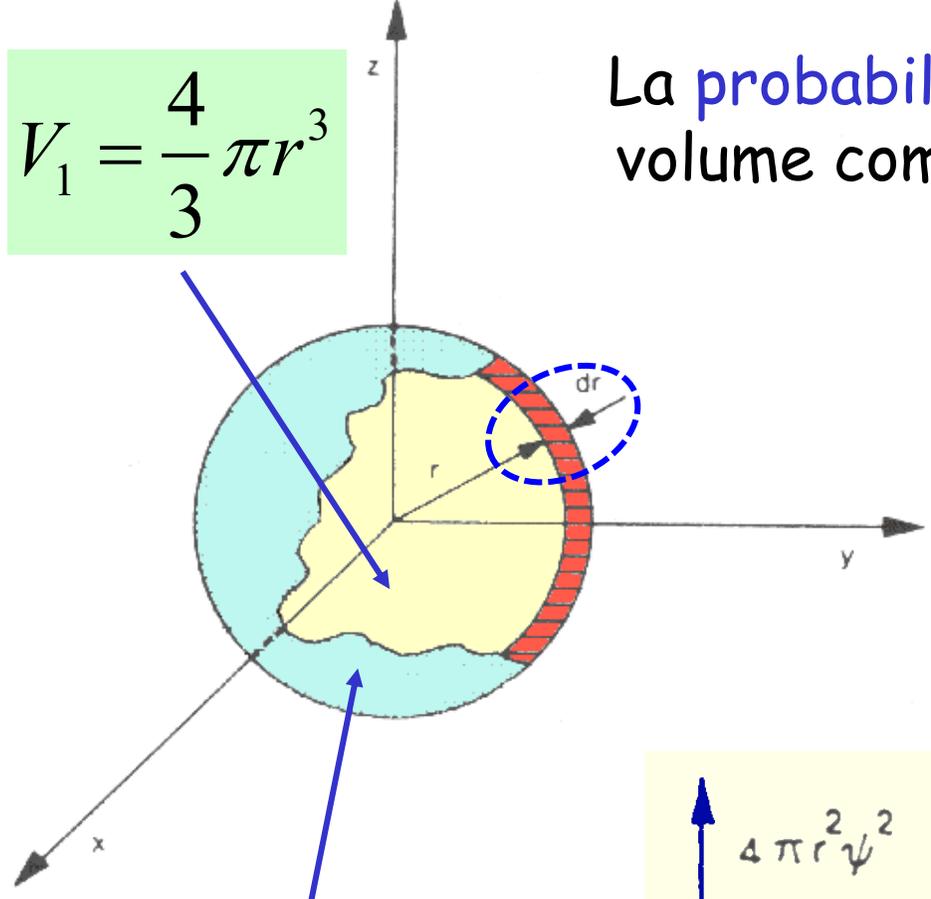
Riassumendo...

n	l	m_l	Simbolo	Numero di orbitali
1	0	0	1s	1 1
2	0	0	2s	1 4
2	1	0, ±1	2p	3 4
3	0	0	3s	1 9
3	1	0, ±1	3p	3 9
3	2	0, ±1, ±2	3d	5 9
4	0	0	4s	1 16
4	1	0, ±1	4p	3 16
4	2	0, ±1, ±2	4d	5 16
4	3	0, ±1, ±2, ±3	4f	7 16





$$V_1 = \frac{4}{3} \pi r^3$$



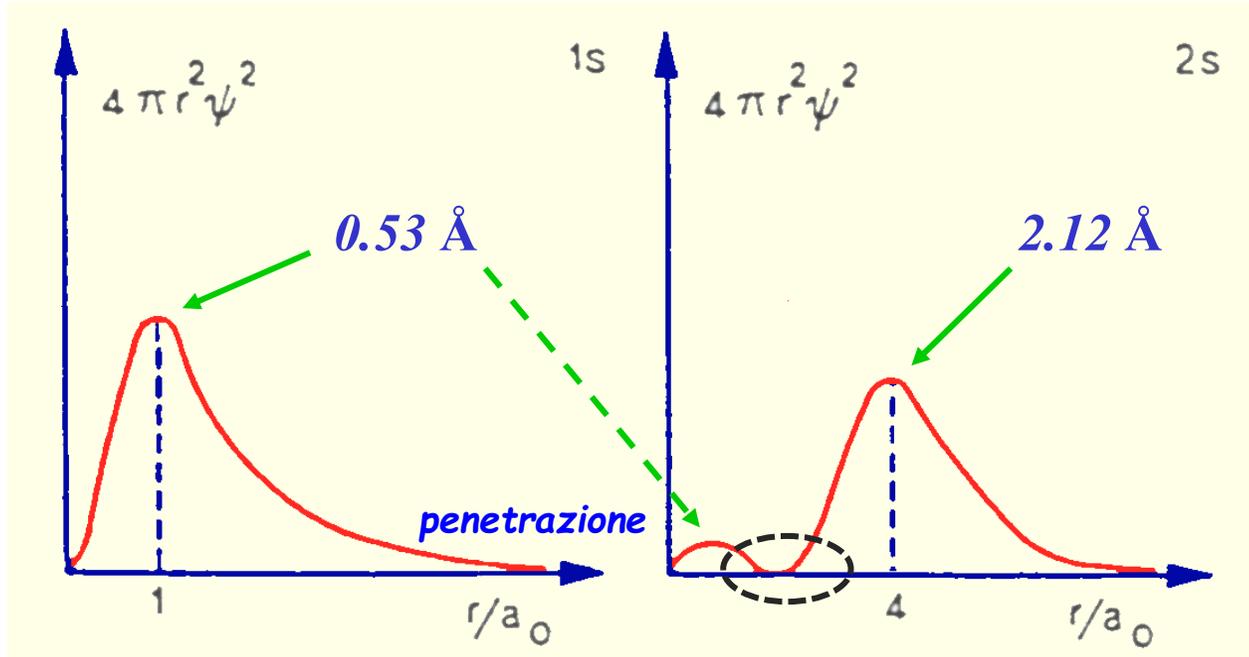
La probabilità di trovare l'elettrone nel volume compreso tra le due sfere vale:

$$|\psi|^2 4\pi r^2$$

DENSITA' DI PROBABILITA' RADIALE

$$V_2 = \frac{4}{3} \pi (r + dr)^3$$

$$dV = 4\pi r^2 dr$$



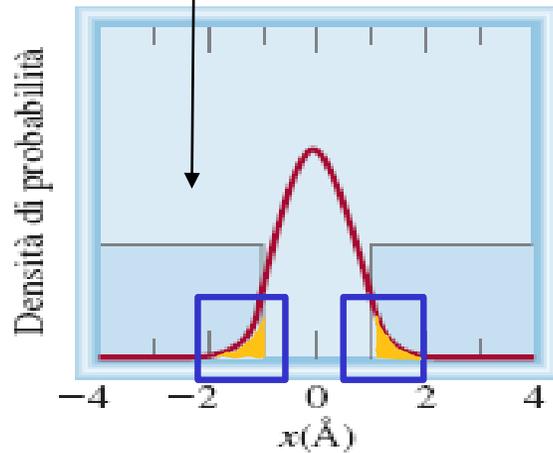
(Bohr)



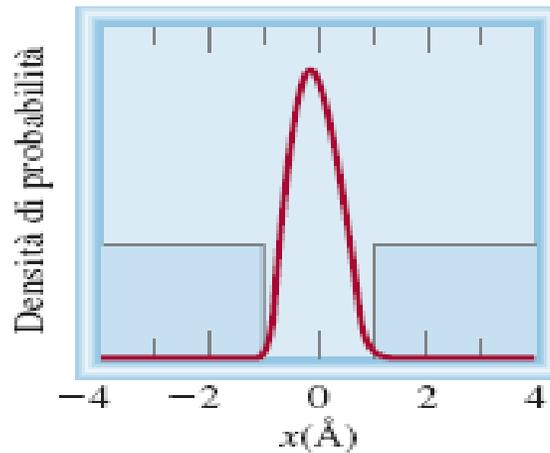
Effetto Tunnel Quantomeccanico

Barriera di Potenziale

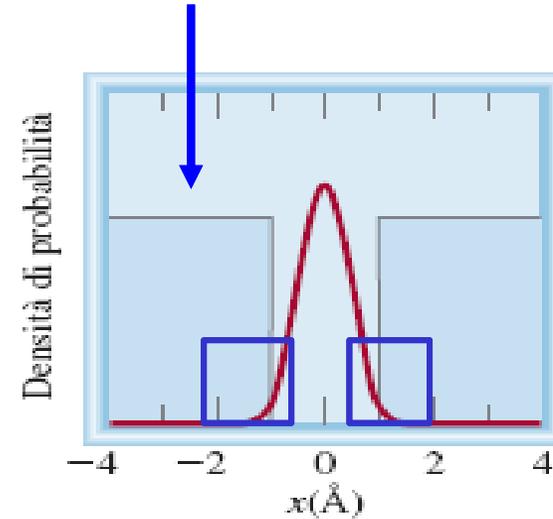
particella in una scatola: ok, ma...



Massa di un elettrone

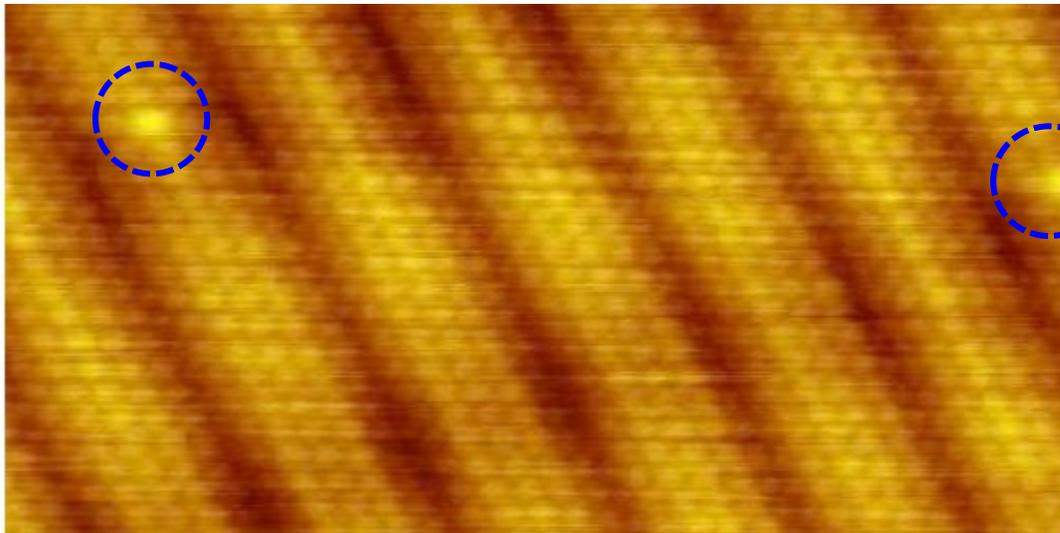
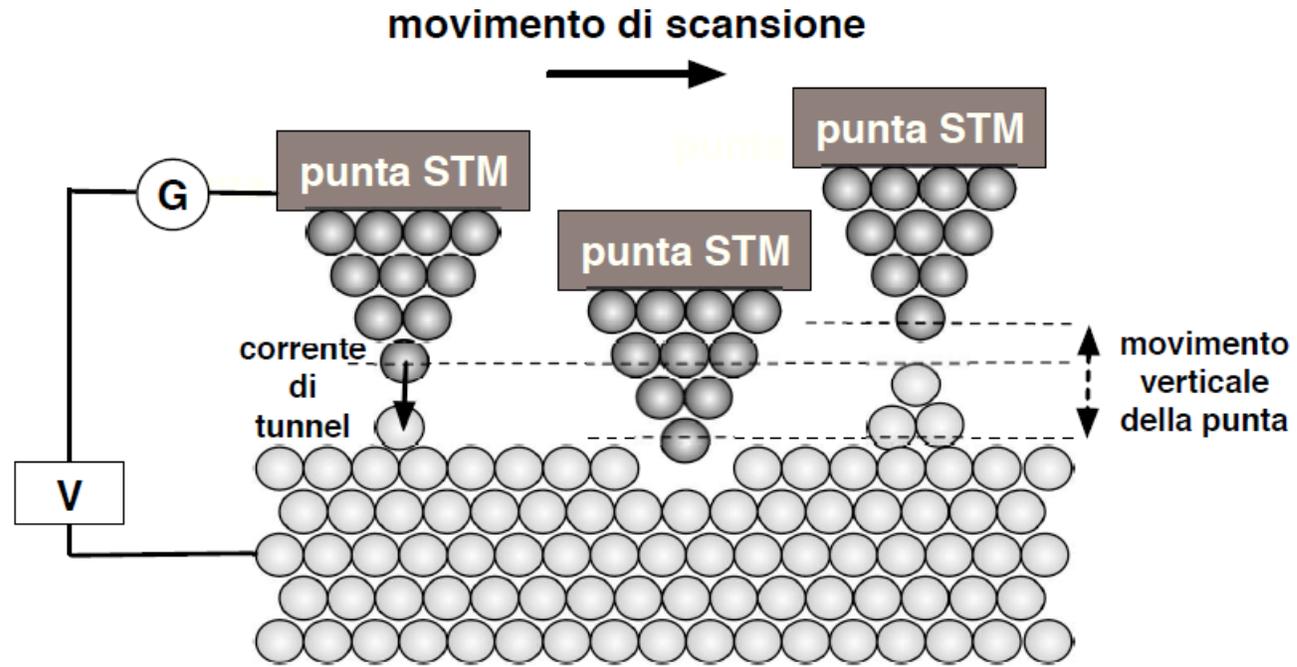


Dieci volte la massa di un elettrone



Massa di un elettrone

L'**effetto tunnel** diminuisce all'aumentare della massa e della barriera di potenziale.



Risoluzione:
laterale = 0.1 nm
profondità = 0.01 nm



per l'atomo di IDROGENO:

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

$$E_P = -\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{1-2}}$$

per l'atomo di ELIO:

$$\text{nucleo} / e_1^- \quad -\frac{2e^+(e^-)}{r_1}$$

$$\text{nucleo} / e_2^- \quad -\frac{2e^+(e^-)}{r_2}$$

$$e_1^- / e_2^- \quad +\frac{(e^-)(e^-)}{r_{1-2}}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E + E_P) \psi = 0$$

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

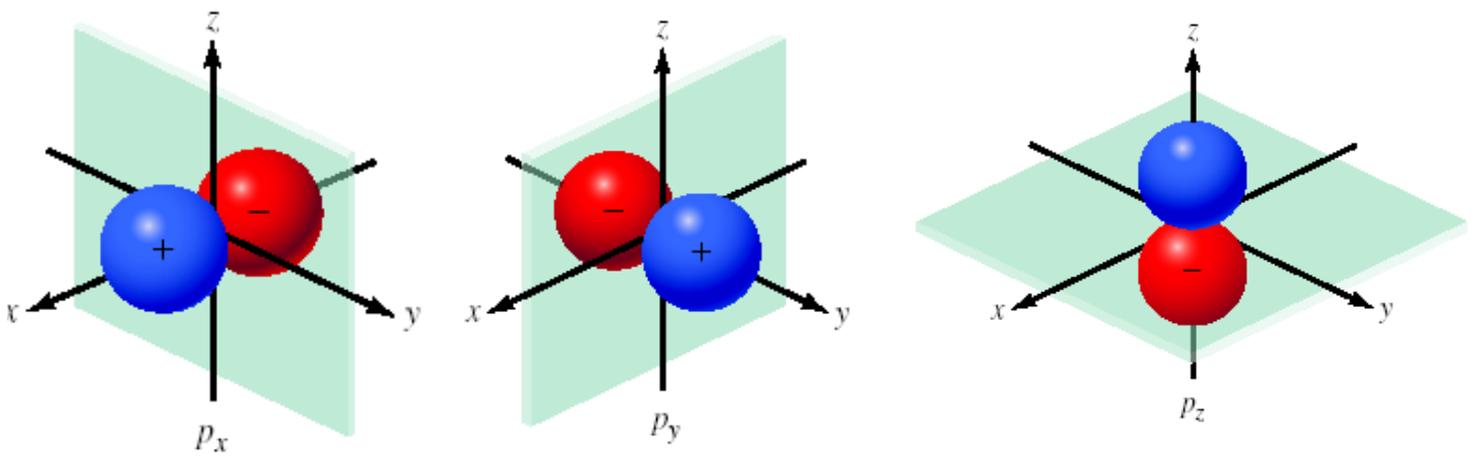
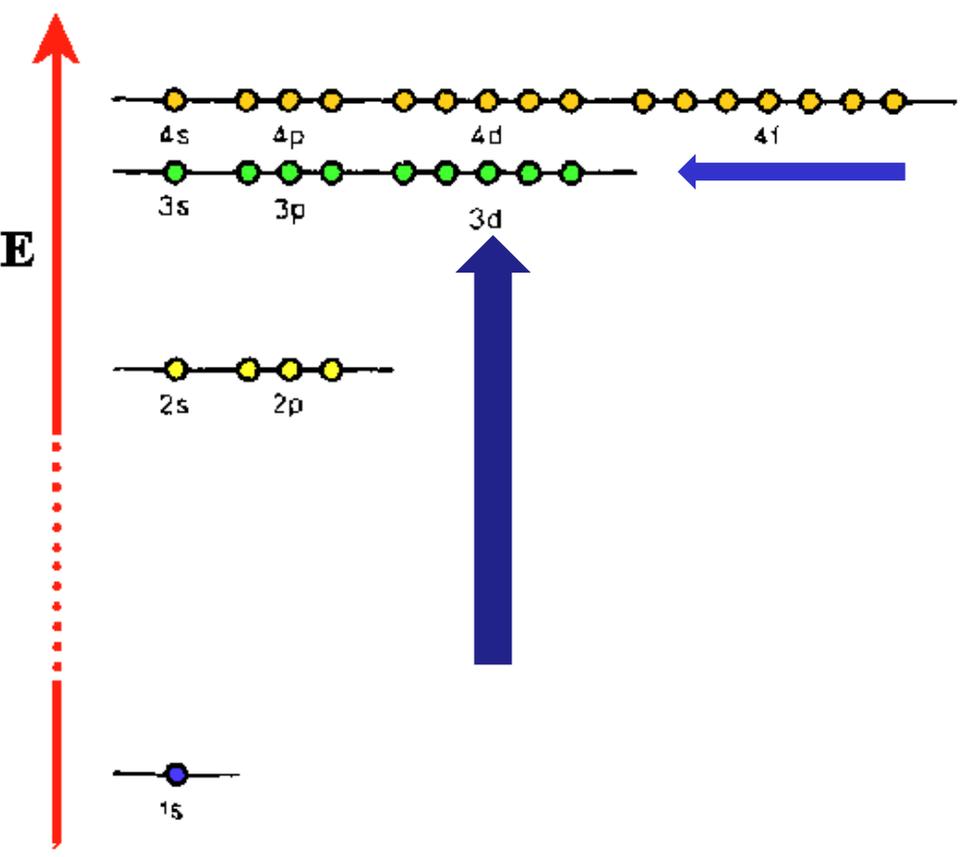
**Interazione
di Configurazione**

DFT (Density Functional Theory)



Atomi Polielettronici: L'Energia non dipende più unicamente da n ma anche da l ed m_l

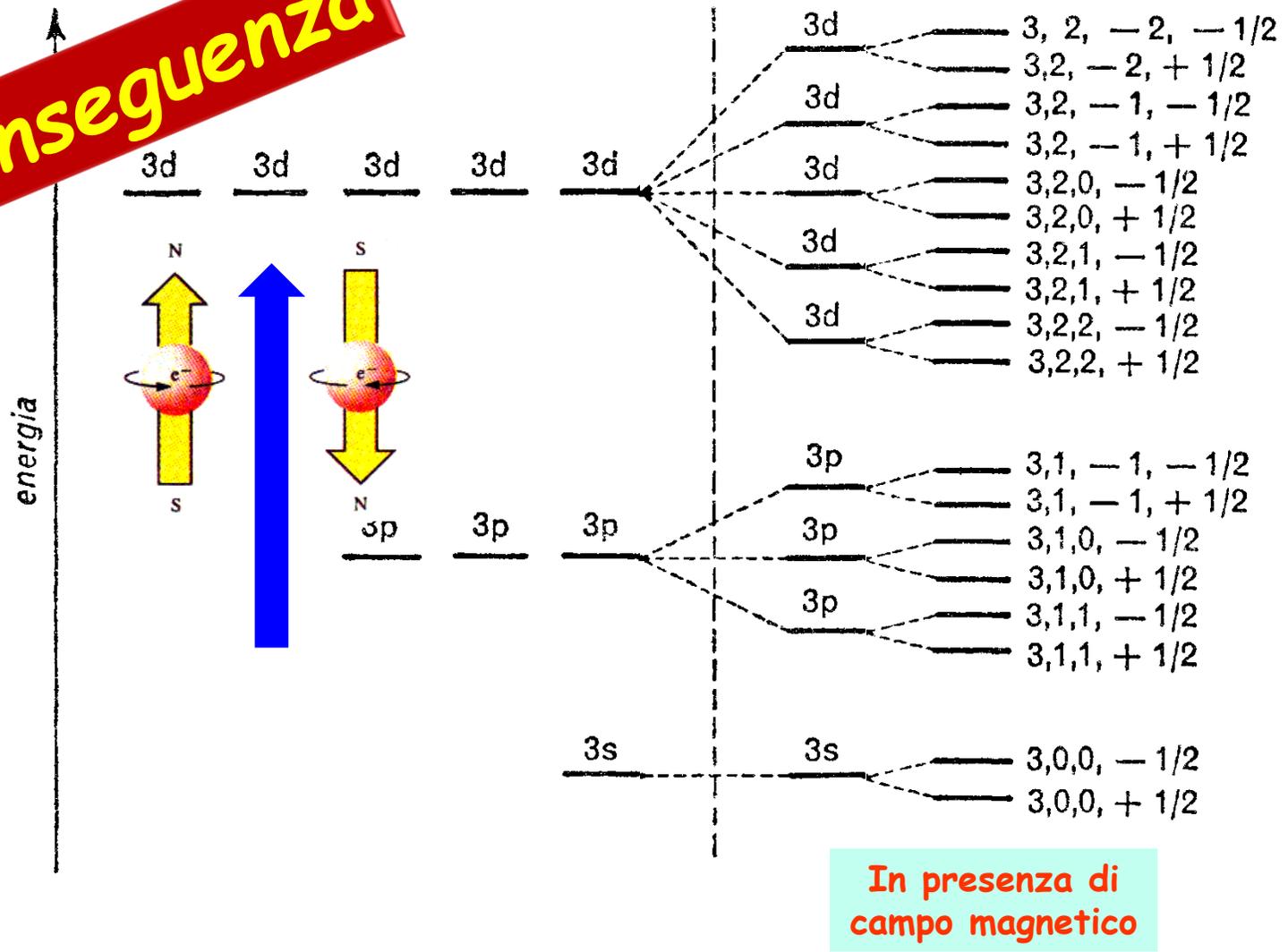
conseguenza





Atomi Polielettronici: L'Energia non dipende più unicamente da n ma anche da l ed m_l

conseguenza



$$p_0 = \pm \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$$

Momento di Spin

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

Numero
quantico
di Spin

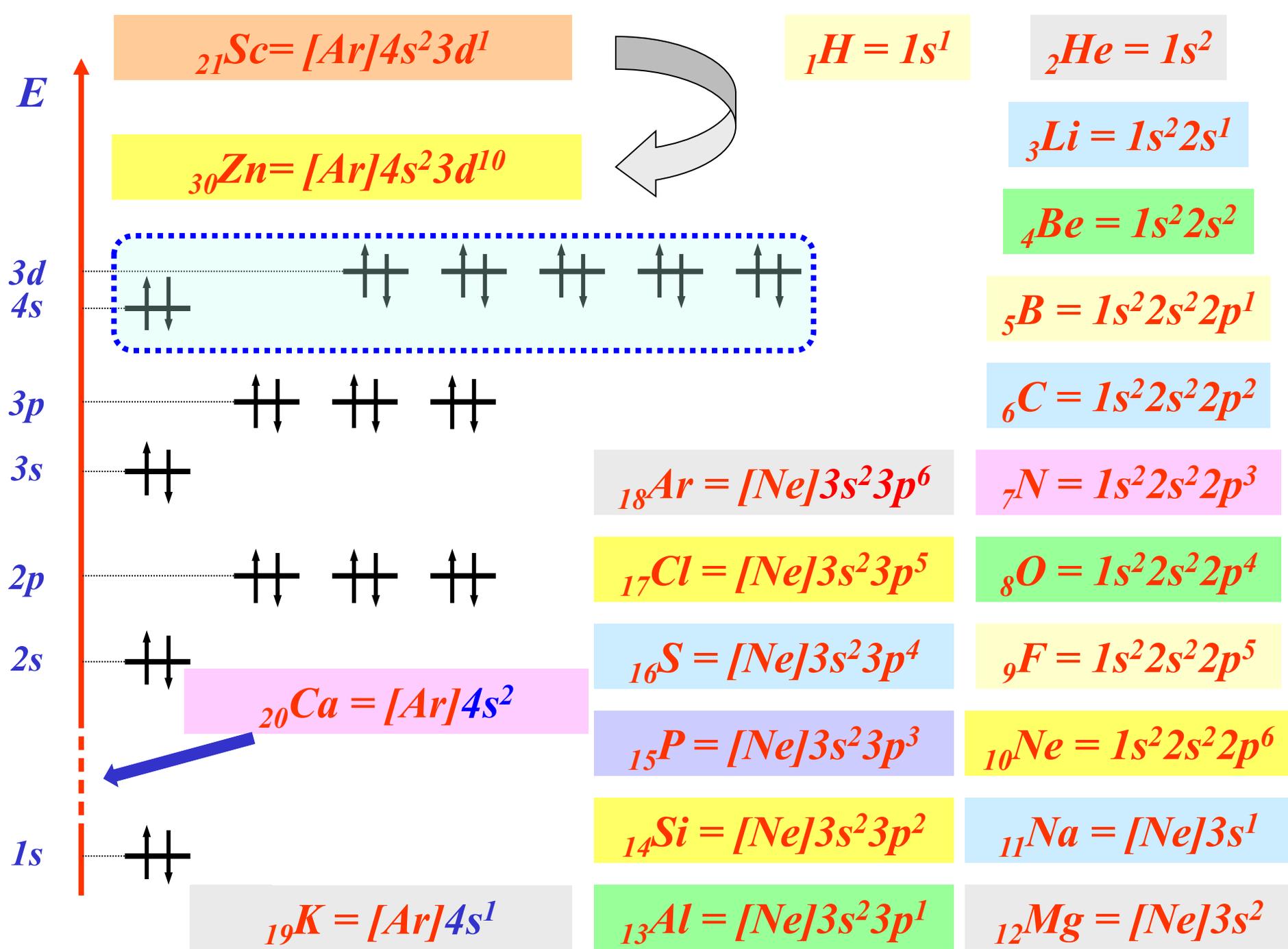
"...in un atomo non può esistere più di un elettrone descritto dalla stessa quaterna di numeri quantici..." (Pauli) **Principio di Esclusione (1925)**

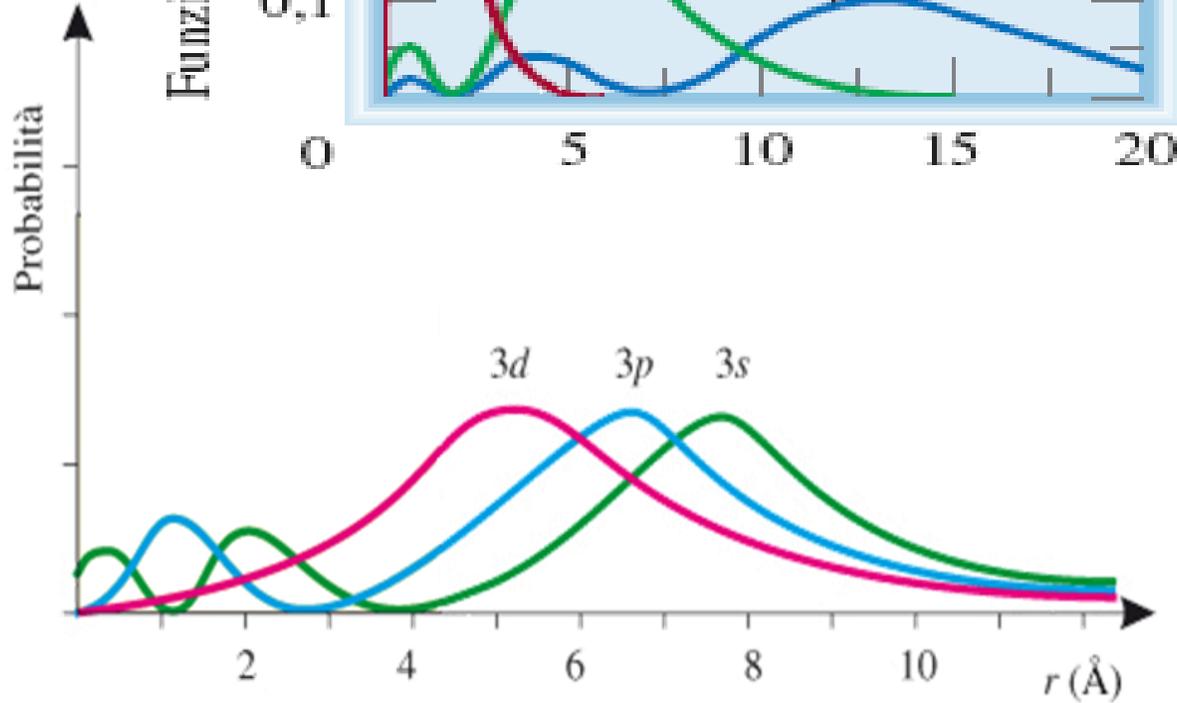
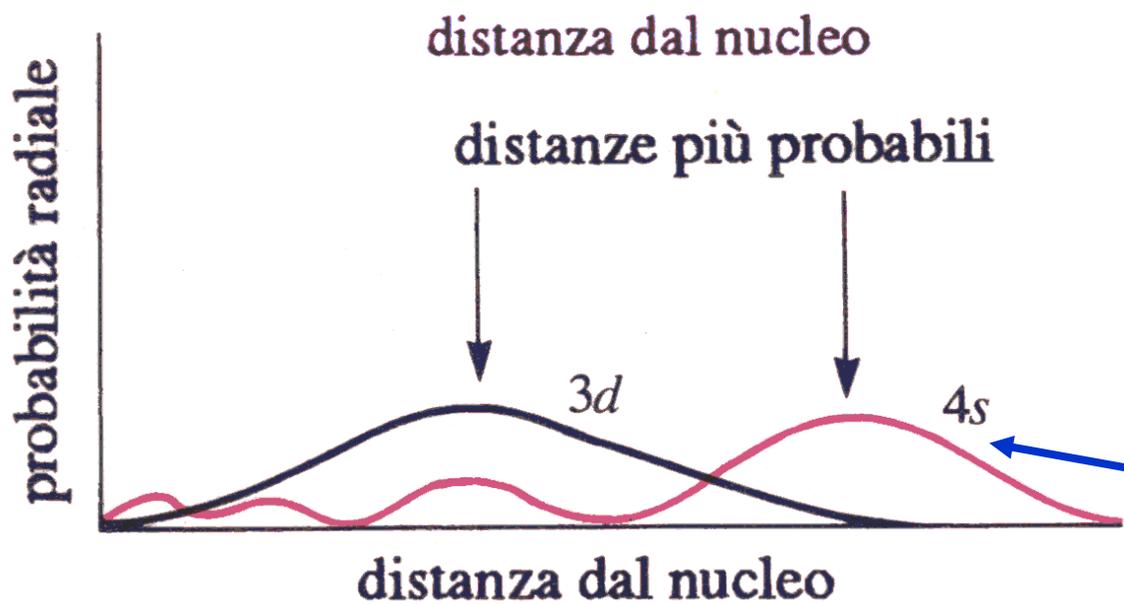
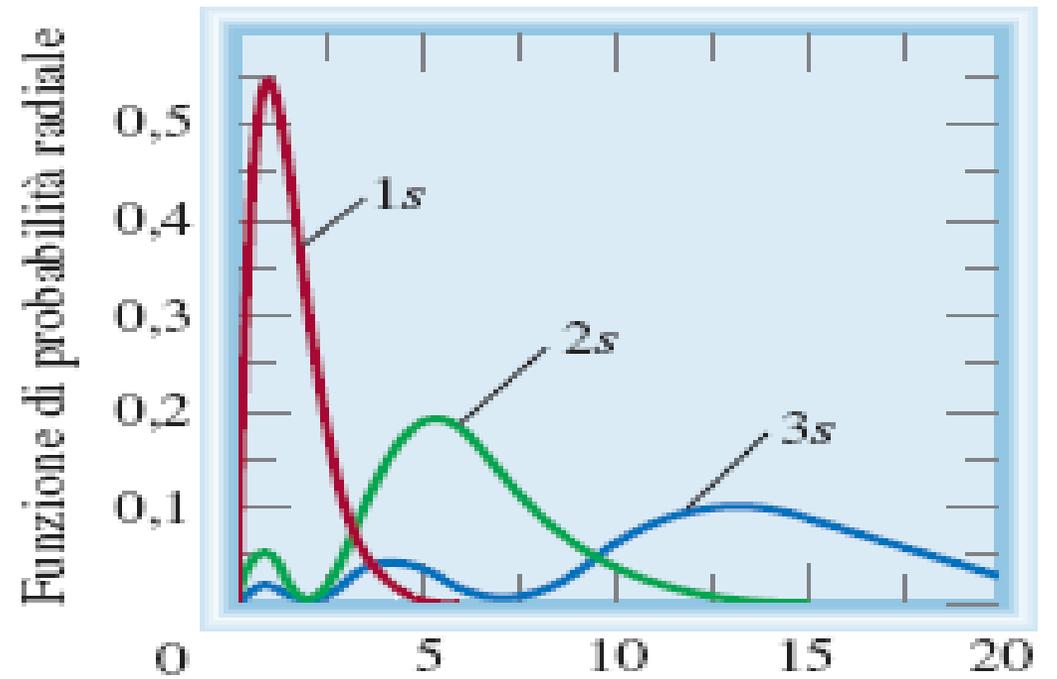


AUFBAU

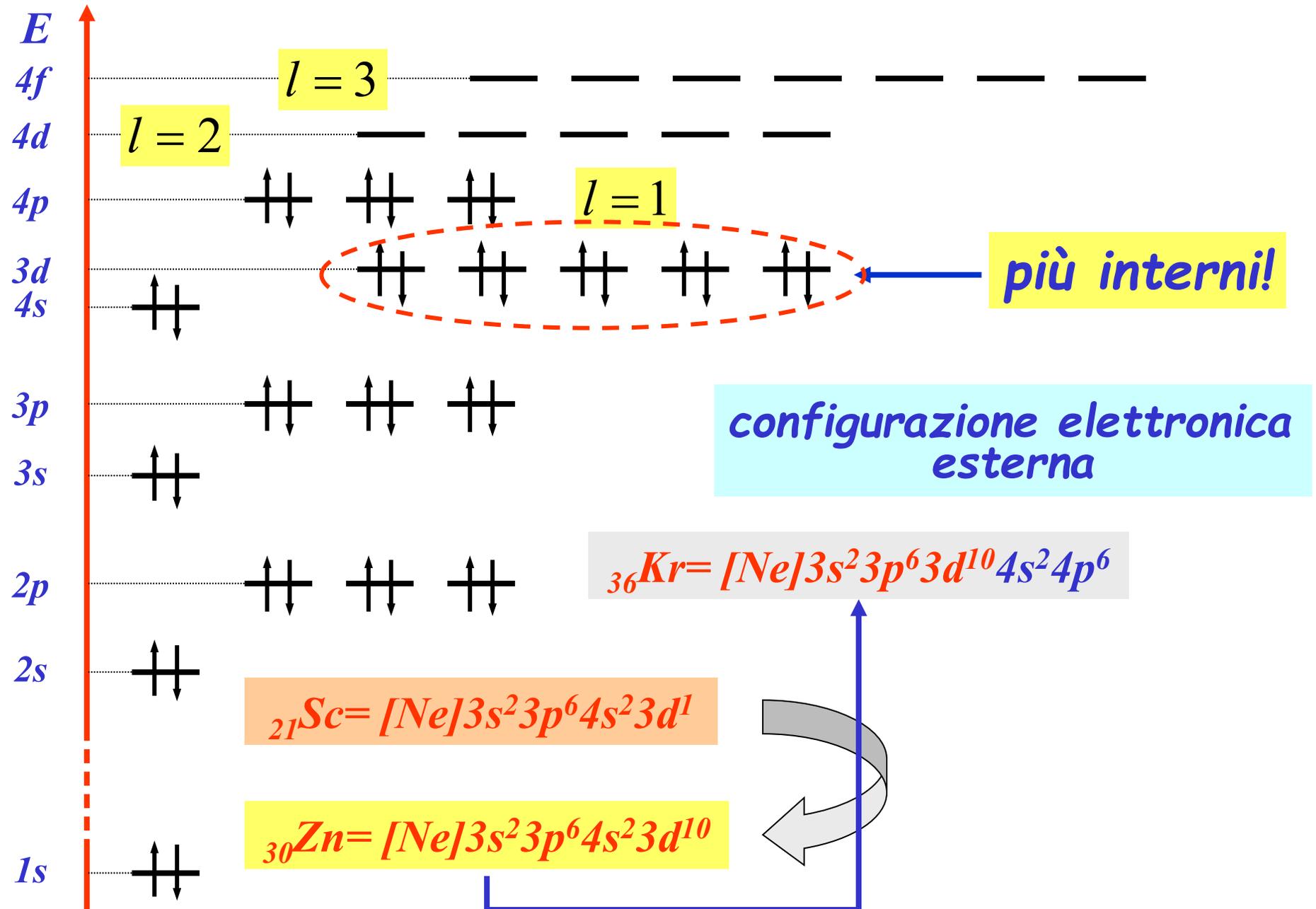
Bohr 1920

Hunde





più esterno!



le configurazioni elettroniche si ripetono **PERIODICAMENTE**

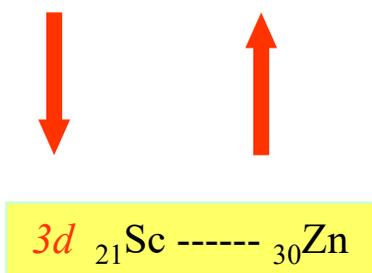


${}^1\text{H}$ $1s^1$	${}^2\text{He}$ $1s^2$						
${}^3\text{Li}$ $1s^2 2s^1$	${}^4\text{Be}$ $1s^2 2s^2$	${}^5\text{B}$ $1s^2 2s^2 2p^1$	${}^6\text{C}$ $1s^2 2s^2 2p^2$	${}^7\text{N}$ $1s^2 2s^2 2p^3$	${}^8\text{O}$ $1s^2 2s^2 2p^4$	${}^9\text{F}$ $1s^2 2s^2 2p^5$	${}^{10}\text{Ne}$ $1s^2 2s^2 2p^6$
${}^{11}\text{Na}$ $[\text{Ne}]3s^1$	${}^{12}\text{Mg}$ $[\text{Ne}]3s^2$	${}^{13}\text{Al}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^1$	${}^{14}\text{Si}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^2$	${}^{15}\text{P}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^3$	${}^{16}\text{S}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^4$	${}^{17}\text{Cl}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^5$	${}^{18}\text{Ar}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^6$
${}^{19}\text{K}$ $[\text{Ar}]4s^1$	${}^{20}\text{Ca}$ $[\text{Ar}]4s^2$	${}^{31}\text{Ga}$ $[\text{Ar}]4s^2 4p^1$	${}^{32}\text{Ge}$ $[\text{Ar}]4s^2 4p^2$	${}^{33}\text{As}$ $[\text{Ar}]4s^2 4p^3$	${}^{34}\text{Se}$ $[\text{Ar}]4s^2 4p^4$	${}^{35}\text{Br}$ $[\text{Ar}]4s^2 4p^5$	${}^{36}\text{Kr}$ $[\text{Ar}]4s^2 4p^6$

${}^{21}\text{Sc}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^1$	${}^{22}\text{Ti}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^2$	${}^{23}\text{V}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^3$	${}^{24}\text{Cr}$ $[\text{Ar}]4s^1 3d^5$	${}^{25}\text{Mn}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^5$
${}^{26}\text{Fe}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^6$	${}^{27}\text{Co}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^7$	${}^{28}\text{Ni}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^8$	${}^{29}\text{Cu}$ $[\text{Ar}]4s^1 3d^{10}$	${}^{30}\text{Zn}$ $[\text{Ar}]4s^2 3d^{10}$



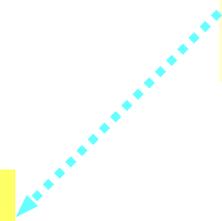
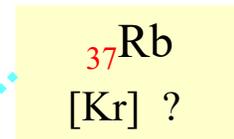
${}^1_1\text{H}$ $1s^1$	${}^2_2\text{He}$ $1s^2$							
${}^3_3\text{Li}$ $1s^2 2s^1$	${}^4_4\text{Be}$ $1s^2 2s^2$	${}^5_5\text{B}$ $1s^2 2s^2 2p_x$	${}^6_6\text{C}$ $1s^2 2s^2 2p_x 2p_y$	${}^7_7\text{N}$ $1s^2 2s^2 2p_x 2p_y 2p_z$	${}^8_8\text{O}$ $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y 2p_z$	${}^9_9\text{F}$ $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z$	${}^{10}_{10}\text{Ne}$ $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$	
${}^{11}_{11}\text{Na}$ $[\text{Ne}]3s^1$	${}^{12}_{12}\text{Mg}$ $[\text{Ne}]3s^2$	${}^{13}_{13}\text{Al}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^1$	${}^{14}_{14}\text{Si}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^2$	${}^{15}_{15}\text{P}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^3$	${}^{16}_{16}\text{S}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^4$	${}^{17}_{17}\text{Cl}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^5$	${}^{18}_{18}\text{Ar}$ $[\text{Ne}]3s^2 3p^6$	
${}^{19}_{19}\text{K}$ $[\text{Ar}]4s^1$	${}^{20}_{20}\text{Ca}$ $[\text{Ar}]4s^2$	${}^{31}_{31}\text{Ga}$ $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^1$	${}^{32}_{32}\text{Ge}$ $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^2$	${}^{33}_{33}\text{As}$ $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^3$	${}^{34}_{34}\text{Se}$ $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^4$	${}^{35}_{35}\text{Br}$ $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^5$	${}^{36}_{36}\text{Kr}$ $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^6$	



5s

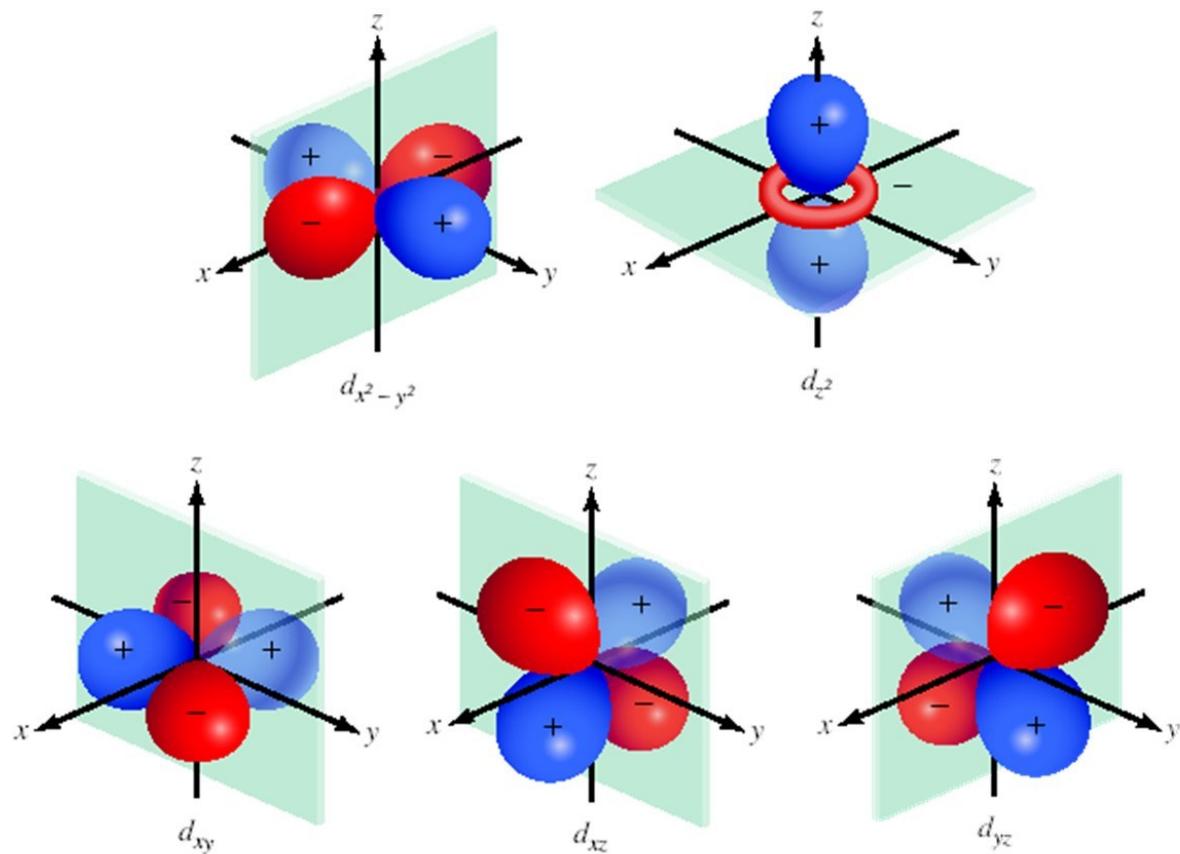
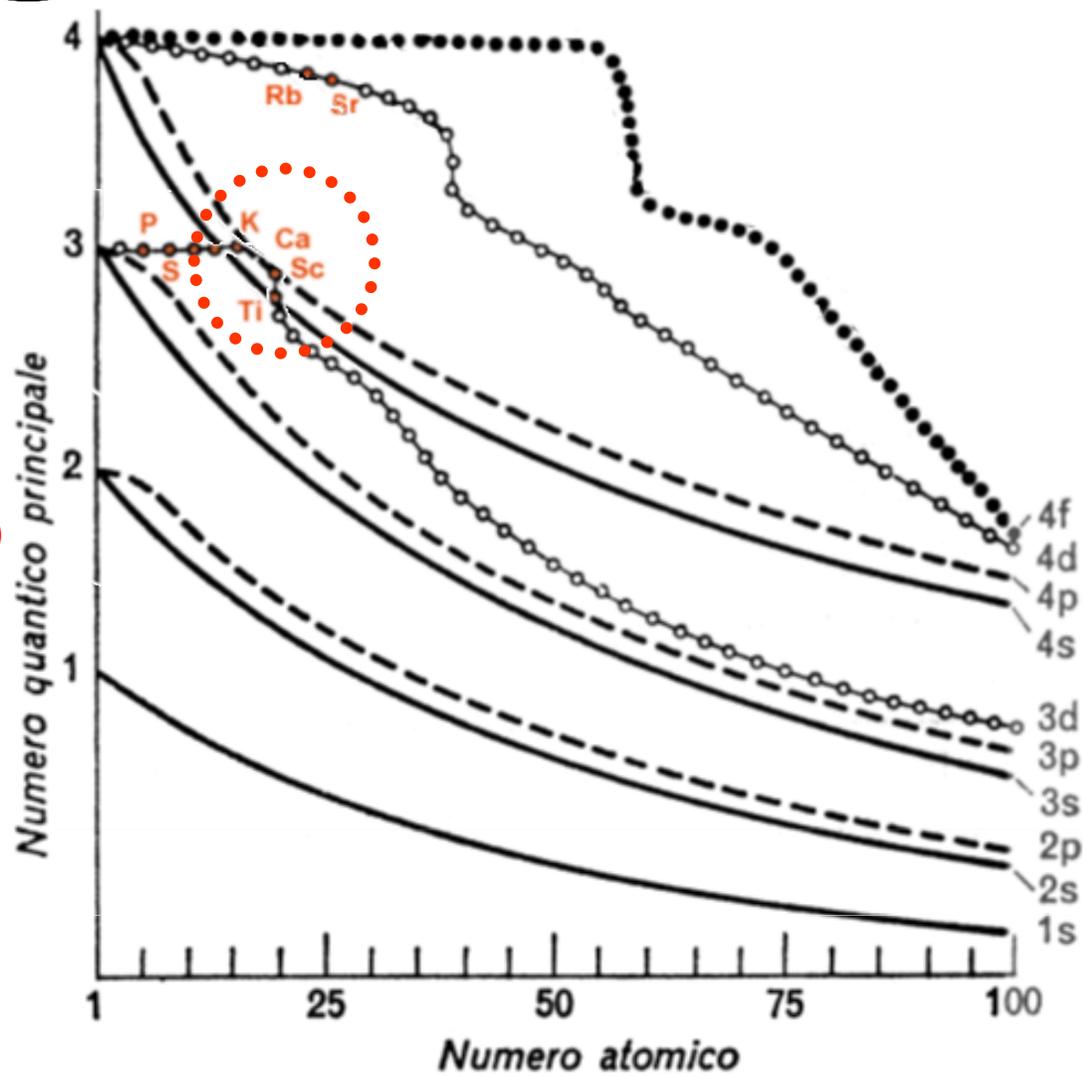
4f

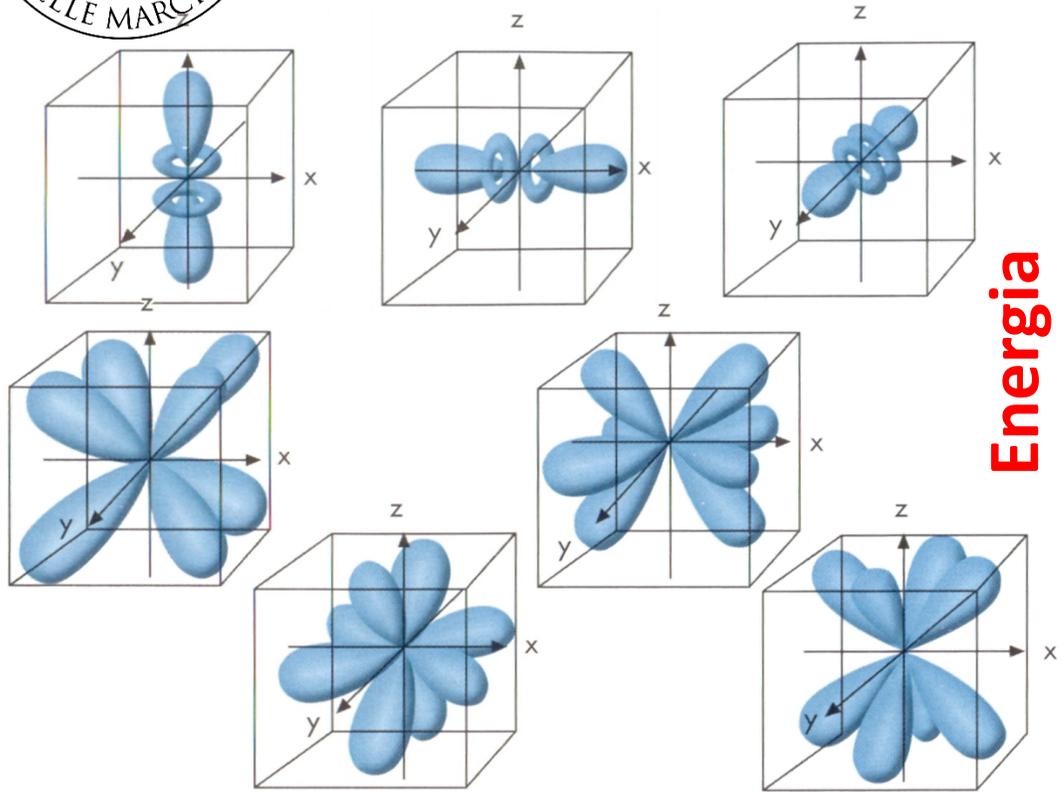
4d



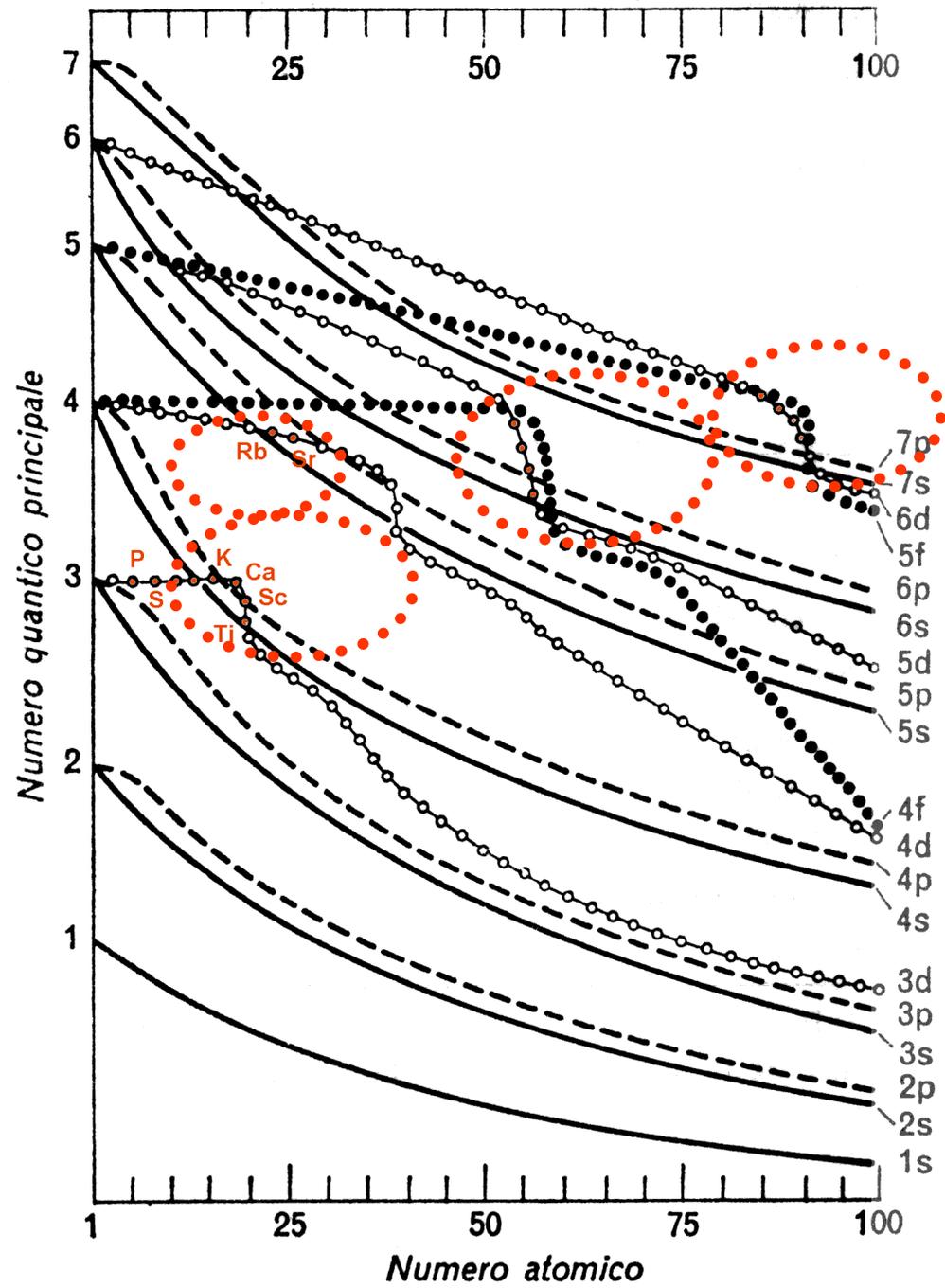


Energia





Energia

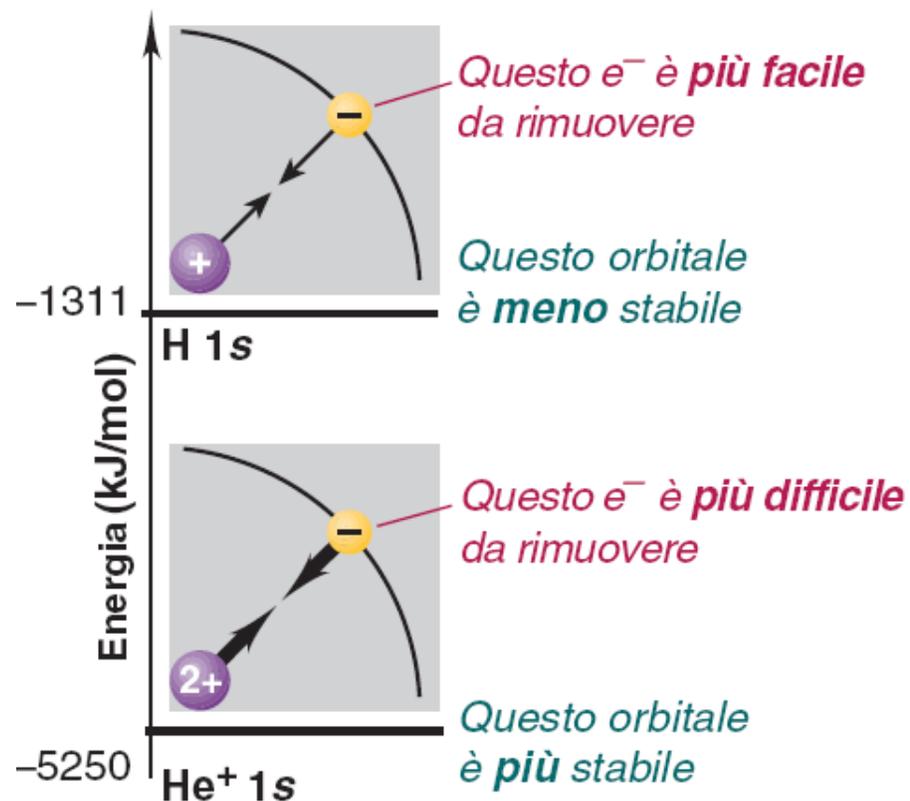




Fattori che influenzano le energie degli orbitali atomici negli atomi polielettronici

Carica nucleare (Z_{eff})

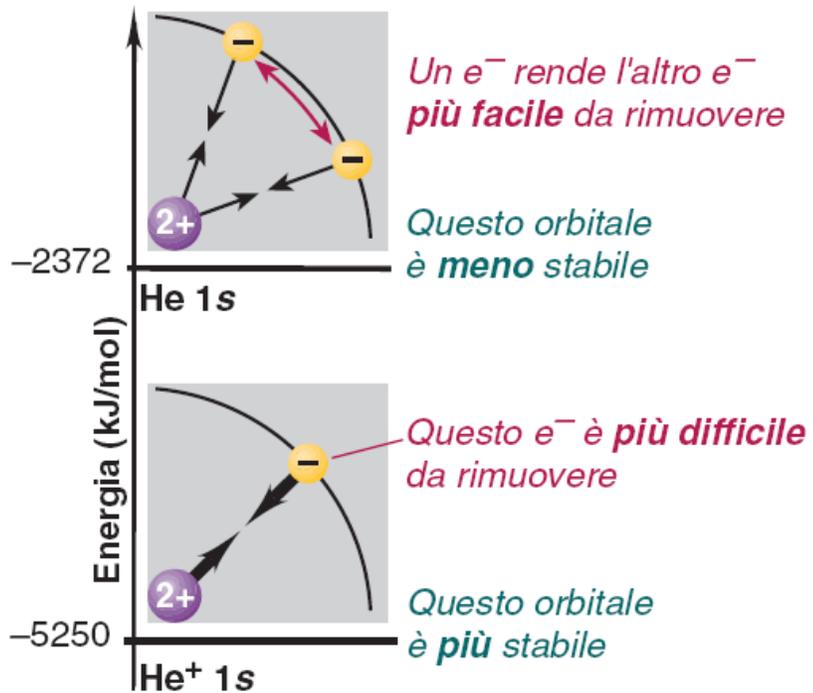
La carica nucleare più elevata abbassa l'energia dell'orbitale (stabilizza il sistema) aumentando le attrazioni nucleo-elettrone.



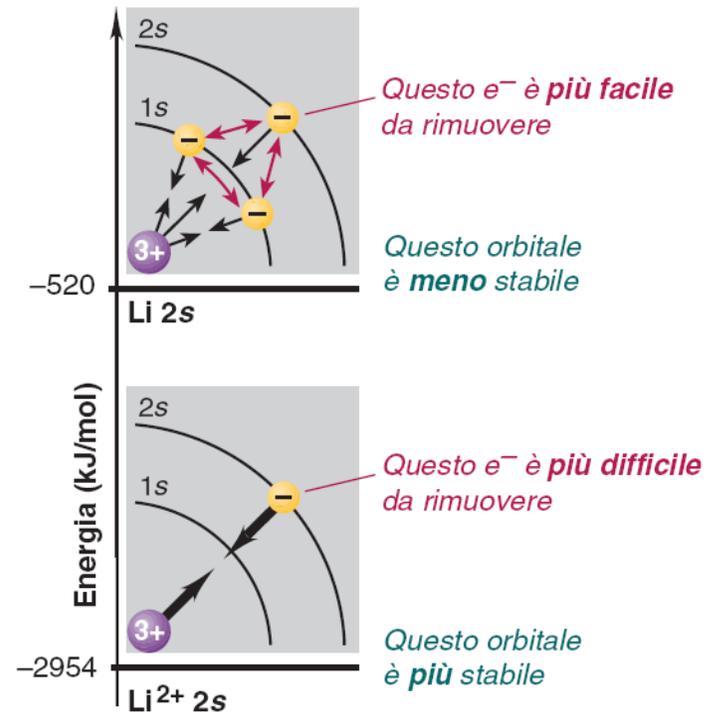


Repulsioni interelettroniche (schermatura)

L'aggiunta di un secondo elettrone nello stesso orbitale innalza l'energia dell'orbitale mediante repulsioni interelettroniche.



Gli elettroni interni schermano gli elettroni esterni più efficacemente di quanto non facciano gli elettroni presenti nello stesso sottolivello.

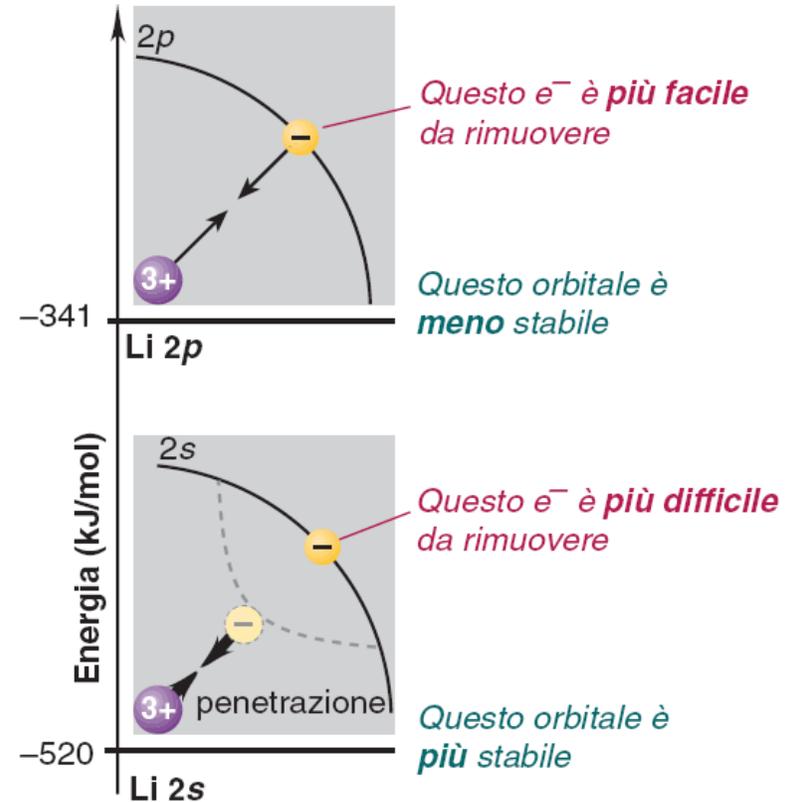
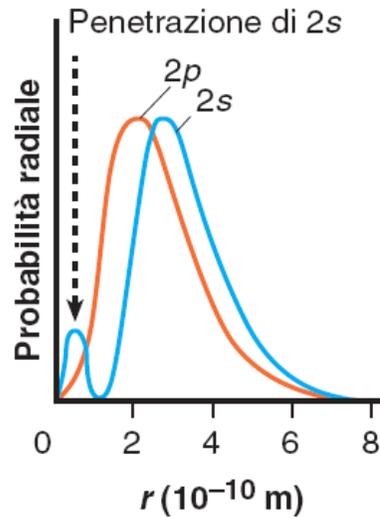




Forma dell'orbitale (penetrazione)

Maggiore è la distribuzione di probabilità radiale vicino al nucleo, più stabile è l'orbitale.

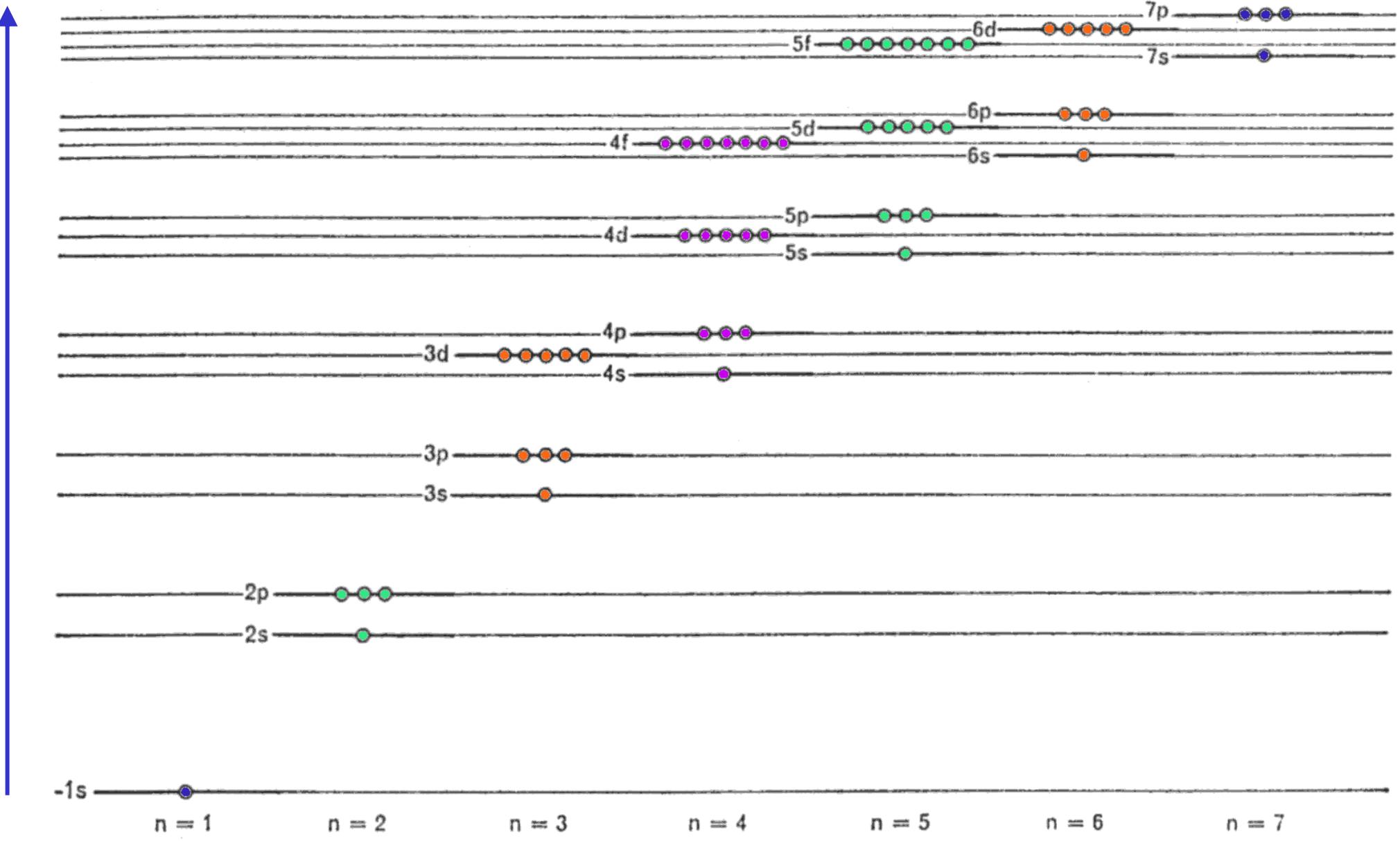
L'orbitale 2s penetra più verso il nucleo rispetto al 2p.

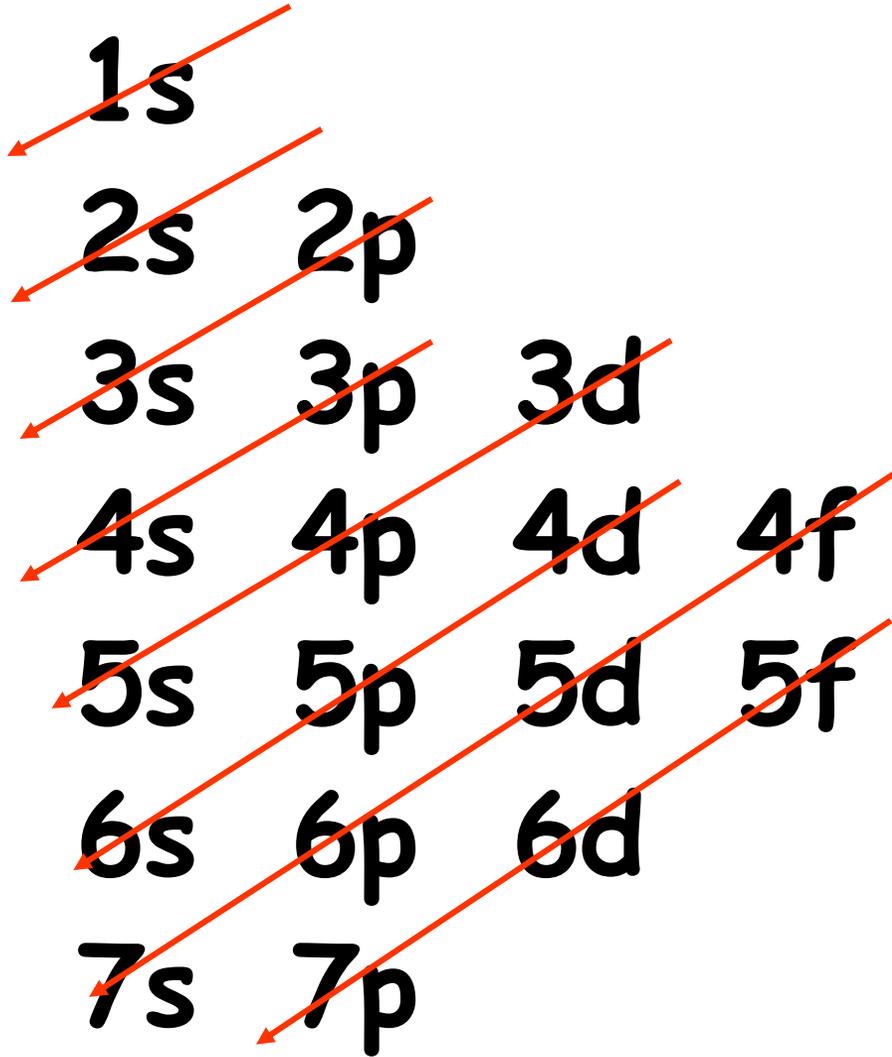


QUINDI: l'energia dell'orbitale dipende anche da l , che determina la distribuzione spaziale dell'orbitale (maggiore o minore penetrazione verso il nucleo).



energia

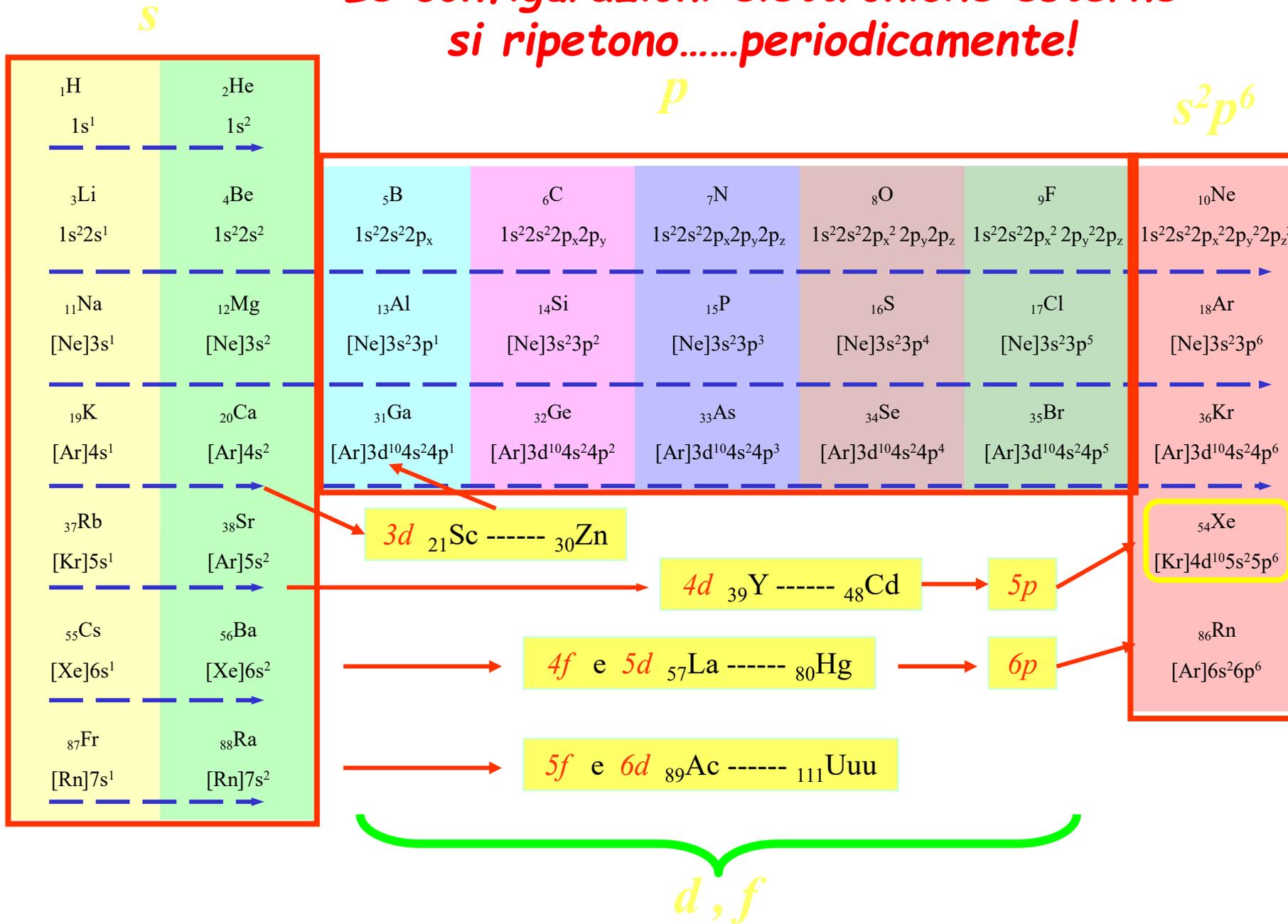


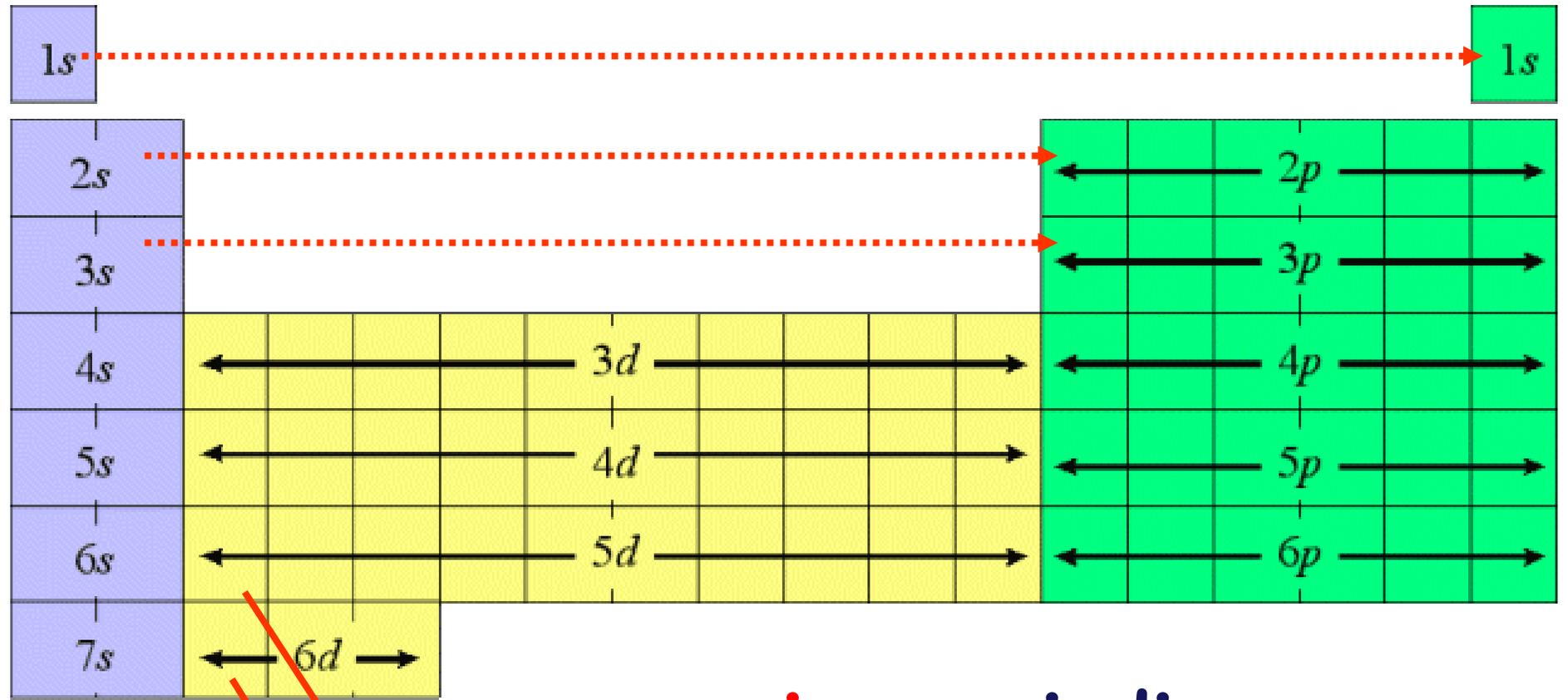


Two orbital filling
mnemonic devices

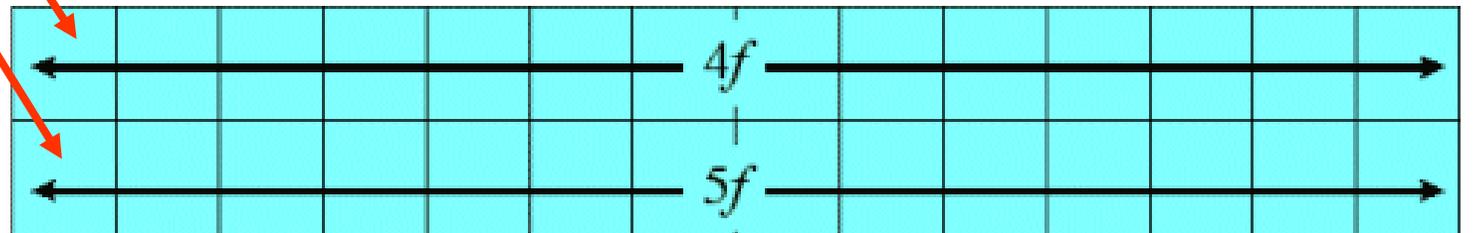


Le configurazioni elettroniche esterne si ripetono.....periodicamente!





gruppi **periodi**





Periodic Table

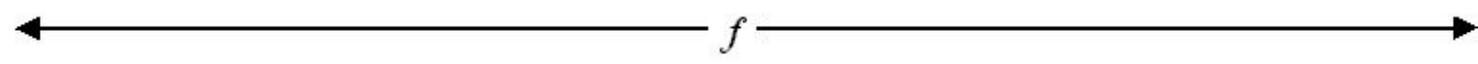
1/IA																	18/VIIIA	
1	2											13/IIIA	14/IVA	15/VA	16/VIA	17/VIIA	18/VIIIA	
1 H 1.008																	2 He 4.003	
2	3 Li 6.941	4 Be 9.012											5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18
3	11 Na 22.99	12 Mg 24.30	← VIII →										13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.05	18 Ar 39.95
4	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
5	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 98.91	44 Ru 101.1	45 Rh 102.9	46 Pd 106.4	47 Ag 107.9	48 Cd 112.4	49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.3
6	55 Cs 123.9	56 Ba 137.3	La-Lu	72 Hf 178.5	73 Ta 180.9	74 W 183.8	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.1	79 Au 197.0	80 Hg 200.6	81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po 210.0	85 At 210.0	86 Rn 222.0
7	87 Fr 223.0	88 Ra 226.0	Ac-Lr	104 Db	105 Jl	106 Rf	107 Bh	108 Hn	109 Mt	110 Uun	111 Uuu							



Mendeleev
1869

Mosley
1913

Lanthanides	57 La 138.9	58 Ce 140.1	59 Pr 140.9	60 Nd 144.2	61 Pm 146.9	62 Sm 150.4	63 Eu 152.0	64 Gd 157.2	65 Tb 158.9	66 Dy 162.5	67 Ho 164.9	68 Er 167.3	69 Tm 168.9	70 Yb 173.0	71 Lu 175.0
Actinides	89 Ac 227.0	90 Th 232.0	91 Pa 231.0	92 U 238.0	93 Np 237.0	94 Pu 239.1	95 Am 241.1	96 Cm 244.1	97 Bk 249.1	98 Cf 252.1	99 Es 252.1	100 Fm 257.1	101 Md 258.1	102 No 259.1	103 Lr 262.1





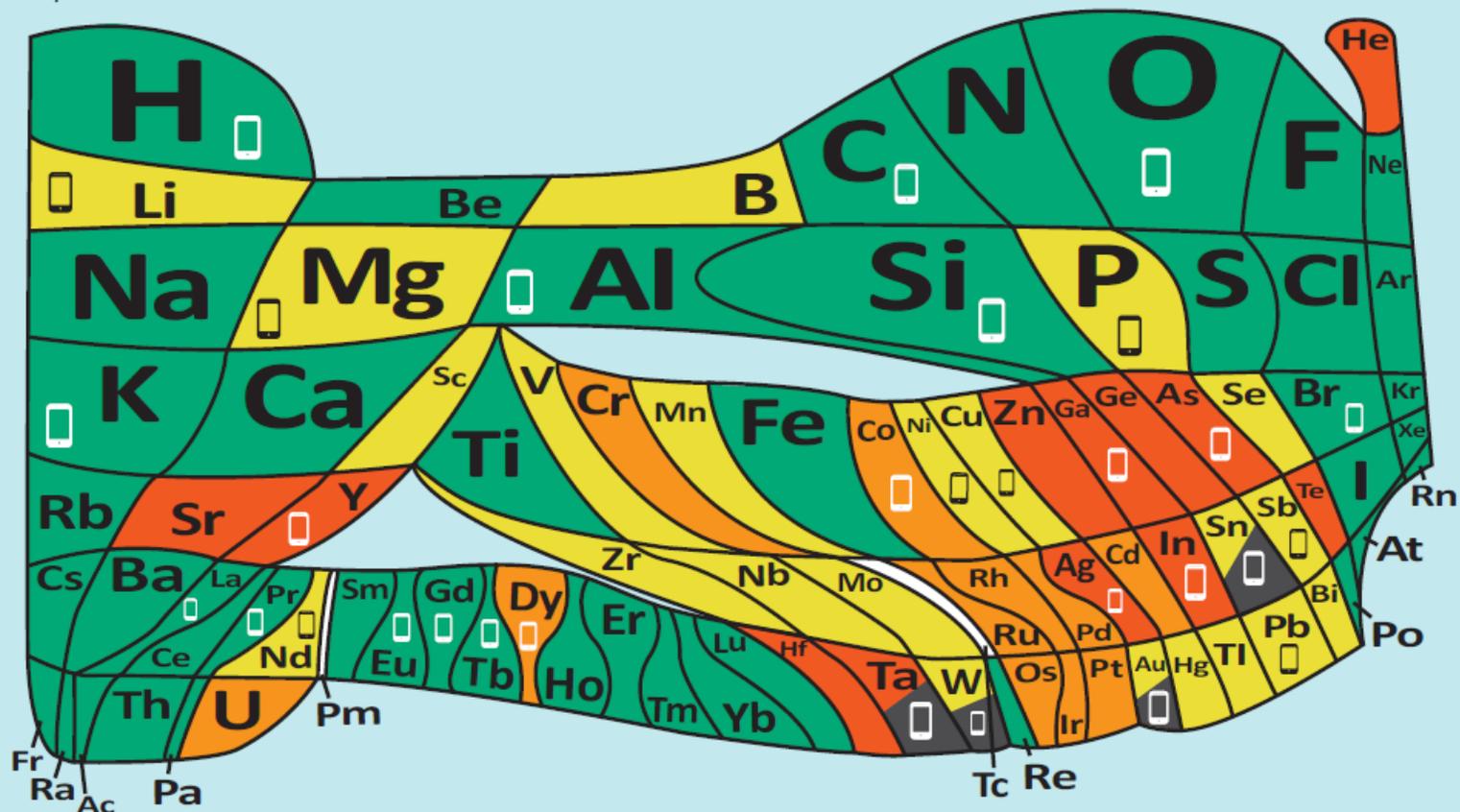
United Nations
Educational, Scientific and
Cultural Organization



International Year
of the Periodic Table
of Chemical Elements

90 elementi chimici e la loro disponibilità relativa sulla Terra

Ci basteranno?



- A grave rischio entro 100 anni
- Sempre più a rischio per il crescente utilizzo
- Disponibilità limitata, a rischio in futuro
- Piena disponibilità
- Di sintesi
- Provenienti da minerali in zone di conflitto
- Presenti negli smartphone

Scopri di più e divertiti con il videogioco su <http://bit.ly/euchems-pt>



Quest'opera è rilasciata con licenza Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs CC-BY-ND

EuChemS
European Chemical Society



è solo grazie a un inesplicabile atto iniziale di incertezza quantistica che ha avuto origine il nostro universo, dando via a una catena di eventi che hanno portato alla comparsa sulla scena di noi che ci domandiamo quale impulso originario abbia portato alla nostra esistenza

David Lindley tratto dal Libro Incertezza

