

Numeri Quantici degli Elettroni

n = **numero quantico principale** ($n \geq 1$): energia, grandezza

l = **numero quantico (del momento angolare) orbitale**: forma

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, n-1$ (in totale n valori interi)

La grandezza del momento angolare orbitale è data da $\hbar/2\pi \times \sqrt{l(l+1)}$

m_l = **numero quantico magnetico**: orientazione

$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ (in totale $2l+1$ valori interi)

s = **numero quantico di spin**: definisce il momento angolare di spin

$s = 1/2$

La grandezza del vettore momento angolare di spin è data da $\hbar/2\pi \times \sqrt{s(s+1)}$

m_s = **numero quantico magnetico di spin**: orientazione del momento angolare di spin

$m_s = -1/2, +1/2$

Un orbitale atomico è definito in maniera univoca da 3 numeri quantici n , l , e m_l .

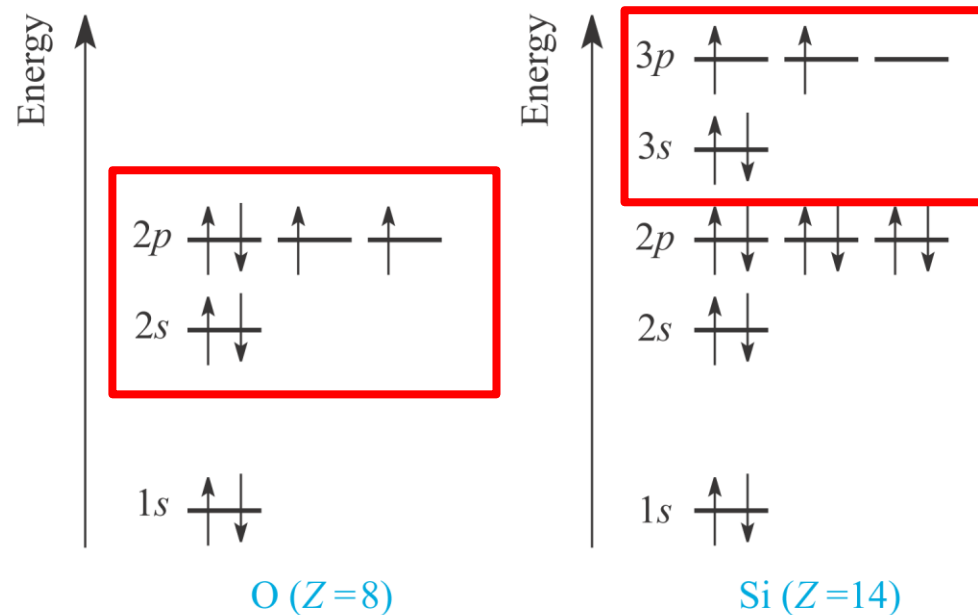
Un elettrone in un orbitale atomico è definito in maniera univoca da 4 numeri quantici: n , l , m_l , m_s .

Atomi Polielettronici

Principio di esclusione di Pauli

in un dato atomo non vi possono essere 2 elettroni con la stessa quaterna di numeri quantici, cioè ogni orbitale può contenere al massimo 2 elettroni con spin **opposto** (spin accoppiati)

Negli atomi polielettronici l'energia dipende da n e da l



Per un certo valore di n , si trova che l'energia degli orbitali segue l'ordine

$$s < p < d < f$$

che non è altro che l'ordine della penetrazione dei vari orbitali

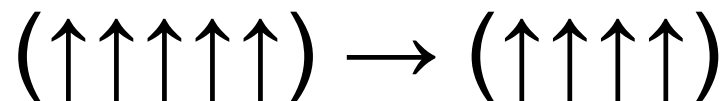
Regola di Hund o della massima molteplicità
in un set di orbitali degeneri gli elettroni non possono
avere spin accoppiati in un orbitale finché ogni
orbitale nel set non contenga un elettrone, tutti con
spin parallelo

Energia di correlazione di spin

Energia di scambio

correlazione di spin: *due elettroni che occupano regioni di spazio diverse con spin paralleli tendono a stare lontani l'uno dall'altro e quindi si respingono meno elettrostaticamente. L'energia associata a questo effetto viene chiamata **energia di correlazione o correlazione di scambio***

*La massima **energia di scambio** si ottiene nei gusci semi-pieni, nei quali si ha il massimo numero di elettroni a spin paralleli.*

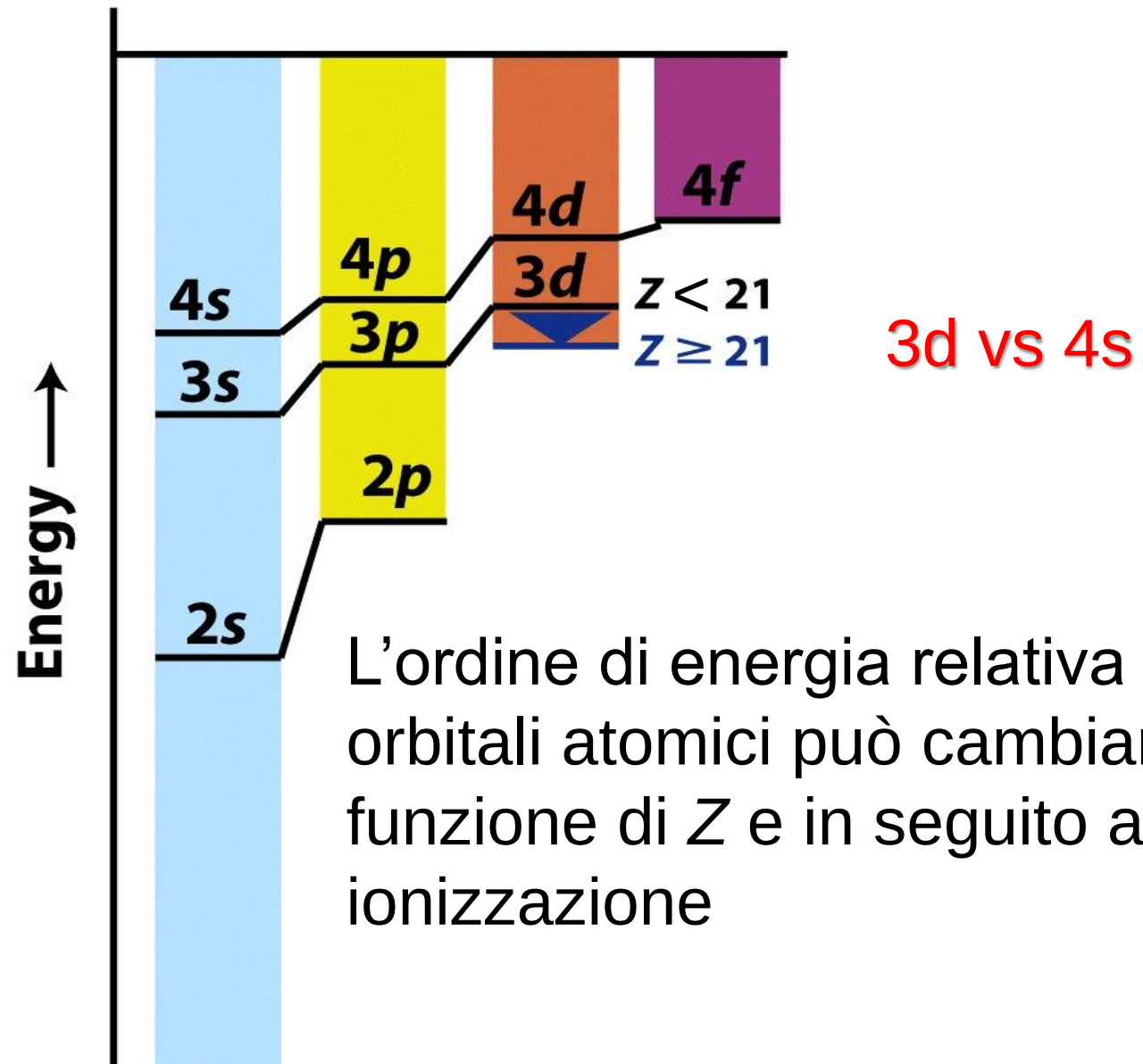


10 coppie $\rightarrow$ 6 coppie

i gusci semi-pieni, come p^3 , d^5 , e f^7 , sono particolarmente stabili

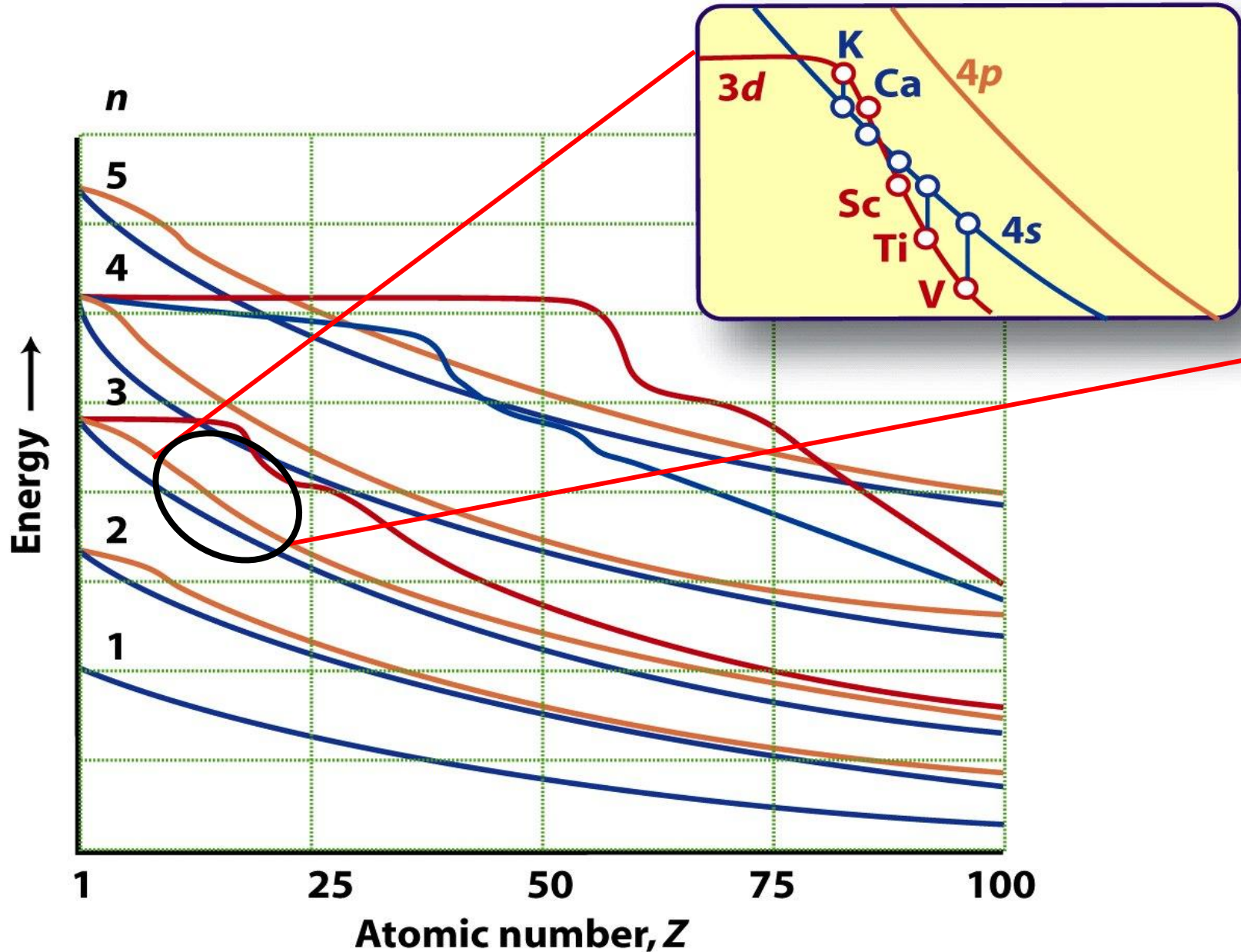
non è che elettroni con spin paralleli si respingano fisicamente più (o meno) degli elettroni con spin appaiati (la repulsione coulombiana sarebbe la stessa per entrambi, se fossero separati dalla stessa distanza). Ma poiché il loro comportamento spaziale è descritto da una funzione d'onda che comprende anche una componente di spin (e deve essere antisimmetrica), la probabilità di trovare due elettroni a spin parallelo vicini l'un l'altro è molto minore di quella che si ha con due elettroni i cui spin sono accoppiati (cioè opposti).

Principio del riempimento progressivo (*Aufbau*)



L'ordine di energia relativa degli orbitali atomici può cambiare in funzione di Z e in seguito a ionizzazione

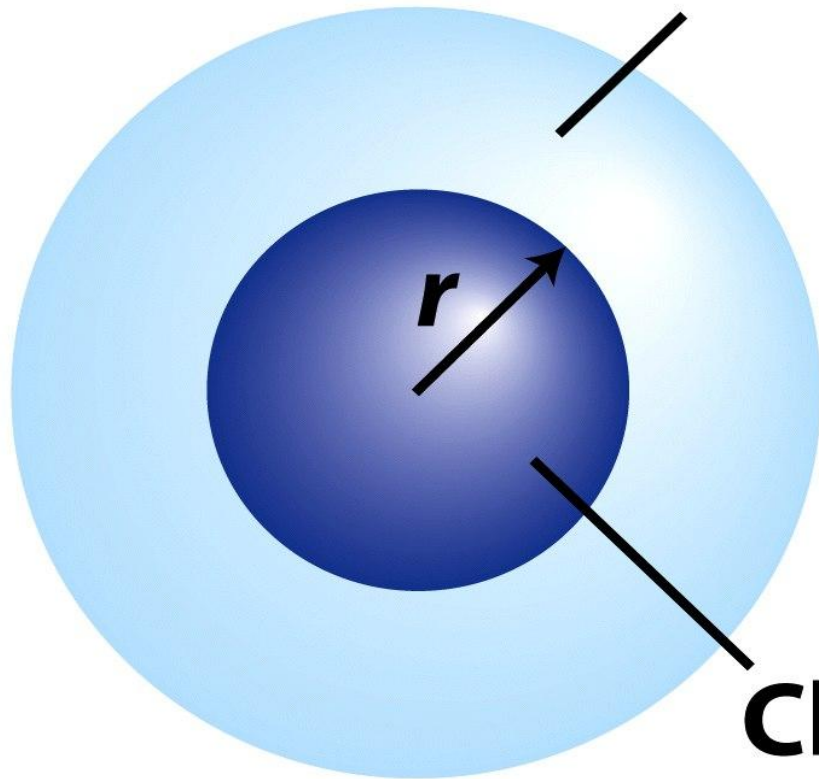
$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 5d \approx 4f < 6p < 7s < 6d \approx 5f$$



la configurazione degli elementi di transizione della prima serie – per via della **repulsione interelettronica** – è **sperimentalmente** del tipo $3d^n 4s^2$ (e non $3d^{n+2} 4s^0$)

Penetrazione e schermatura

**Charge does
not contribute**



**Charge
contributes**

Regole di Slater (ca. 1930)

(empiriche) per il calcolo della **costante di schermo S**

$$Z_{\text{eff}} = Z - S$$

1. si scrive la configurazione elettronica dell'elemento nel seguente ordine e con questi raggruppamenti: (1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p)...
2. gli elettroni in ogni gruppo a destra dell'elettrone considerato non contribuiscono a S
3. per un elettrone in un orbitale ns o np:
 - ogni altro elettrone nello stesso gruppo contribuisce $S = 0.35$;
 - ogni elettrone nel livello n-1 contribuisce $S = 0.85$;
 - ogni elettrone nei livelli n-2 o inferiori contribuisce $S = 1$
4. per un elettrone in un orbitale nd o nf:
 - ogni altro elettrone nello stesso gruppo (nd, nf) contribuisce $S = 0.35$
 - ogni elettrone in un gruppo a sinistra di quello considerato contribuisce $S = 1$.

Applicazione delle regole di Slater per confermare che la configurazione elettronica di K ($Z = 19$) trovata sperimentalmente ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$) è energeticamente più stabile di $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$

Si calcola $Z_{\text{eff}} = Z - S$ per l'elettrone più esterno, cioè 4s o 3d

Per 4s: $Z_{\text{eff}} = 19 - [(10 \times 1) + (8 \times 0.85)] = 2.20$

Per 3d: $Z_{\text{eff}} = 19 - (18 \times 1) = 1.00$

Table 1.3 Effective nuclear charges, Z_{eff}

	Z_{eff}							
	H							He
<i>Z</i>	1							2
1s	1.00							1.69
	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
<i>Z</i>	3	4	5	6	7	8	9	10
1s	2.69	3.68	4.68	5.67	6.66	7.66	8.65	9.64
2s	1.28	1.91	2.58	3.22	3.85	4.49	5.13	5.76
2p			2.42	3.14	3.83	4.45	5.10	5.76
	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
<i>Z</i>	11	12	13	14	15	16	17	18
1s	10.63	11.61	12.59	13.57	14.56	15.54	16.52	17.51
2s	6.57	7.39	8.21	9.02	9.82	10.63	11.43	12.23
2p	6.80	7.83	8.96	9.94	10.96	11.98	12.99	14.01
3s	2.51	3.31	4.12	4.90	5.64	6.37	7.07	7.76
3p			4.07	4.29	4.89	5.48	6.12	6.76
				0.69	0.62			

s-block elements

d-block elements

p-block elements

Group 1	Group 2	Group 3	Group 4	Group 5	Group 6	Group 7	Group 8	Group 9	Group 10	Group 11	Group 12	Group 13	Group 14	Group 15	Group 16	Group 17	Group 18
1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57–71 La–Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89–103 Ac–Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub						

f-block elements

Lanthanoids	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
Actinoids	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Mendeleev, 1849

			Ti = 50	Zr = 90	? = 180.
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182.
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186.
			Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4
			Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198.
			Ni = Co = 59	Pt = 106,6	Os = 199.
			Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200.
H = 1	Be = 9,4	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112	
	B = 11	Al = 27,4	? = 68	Ur = 116	Au = 197?
	C = 12	Si = 28	? = 70	Sn = 118	
	N = 14	P = 31	As = 75	Sb = 122	Bi = 210?
	O = 16	S = 32	Se = 79,4	Te = 128?	
	F = 19	Cl = 35,5	Br = 80	J = 127	
Li = 7	Na = 23	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133	Tl = 204.
		Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137	Pb = 207.
		? = 45	Ce = 92		
		? Er = 56	La = 94		
		? Yt = 60	Di = 95		
		? In = 75,6	Th = 118?		

Д. Менделеев.

The 32-column version of the periodic table published by IUPAC

H																									He							
Li	Be																							B	C	N	O	F	Ne			
Na	Mg																							Al	Si	P	S	Cl	Ar			
K	Ca															Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr															Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

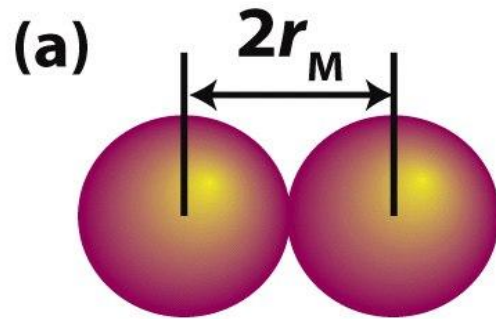
H 1																	He 2																
Li 3	Be 4																	B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10										
Na 11	Mg 12																	Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18										
K 19	Ca 20																	Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36
Rb 37	Sr 38																	Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54
Cs 55	Ba 56	La 57	Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63	Gd 64	Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70	Lu 71	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86		
Fr 87	Ra 88	Ac 89	Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102	Lr 103	Rf 104	Db 105	Sg 106	Bh 107	Hs 108	Mt 109	Ds 110	Rg 111	Cn 112	Nh 113	Fl 114	Mc 115	Lv 116	Ts 117	Og 118		

H 1																	He 2															
Li 3	Be 4											B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10															
Na 11	Mg 12											Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18															
K 19	Ca 20											Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36					
Rb 37	Sr 38											Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54					
Cs 55	Ba 56	La 57	Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63	Gd 64	Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70	Lu 71		Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86
Fr 87	Ra 88	Ac 89	Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102	Lr 103		Rf 104	Db 105	Sg 106	Bh 107	Hs 108	Mt 109	Ds 110	Rg 111	Cn 112	Nh 113	Fl 114	Mc 115	Lv 116	Ts 117	Og 118

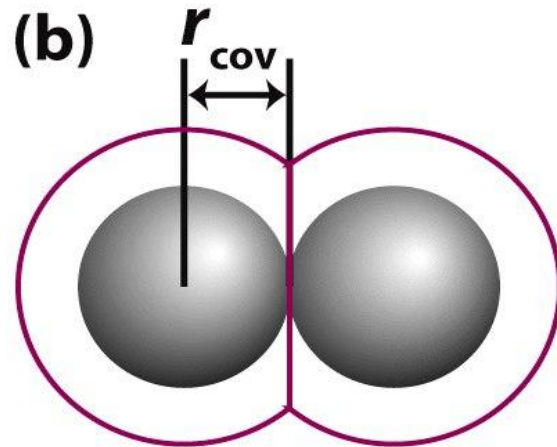
H 1																	He 2														
Li 3	Be 4											B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10														
Na 11	Mg 12											Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18														
K 19	Ca 20											Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36				
Rb 37	Sr 38											Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54				
Cs 55	Ba 56	La 57	Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63	Gd 64	Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70	Lr 71	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86
Fr 87	Ra 88	Ac 89	Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102	Lr 103	Rf 104	Db 105	Sg 106	Bh 107	Hs 108	Mt 109	Ds 110	Rg 111	Cn 112	Nh 113	Fl 114	Mc 115	Lv 116	Ts 117	Og 118

(E. Scerri, *Chem. Int.* **2019**, *41*, 16-20)

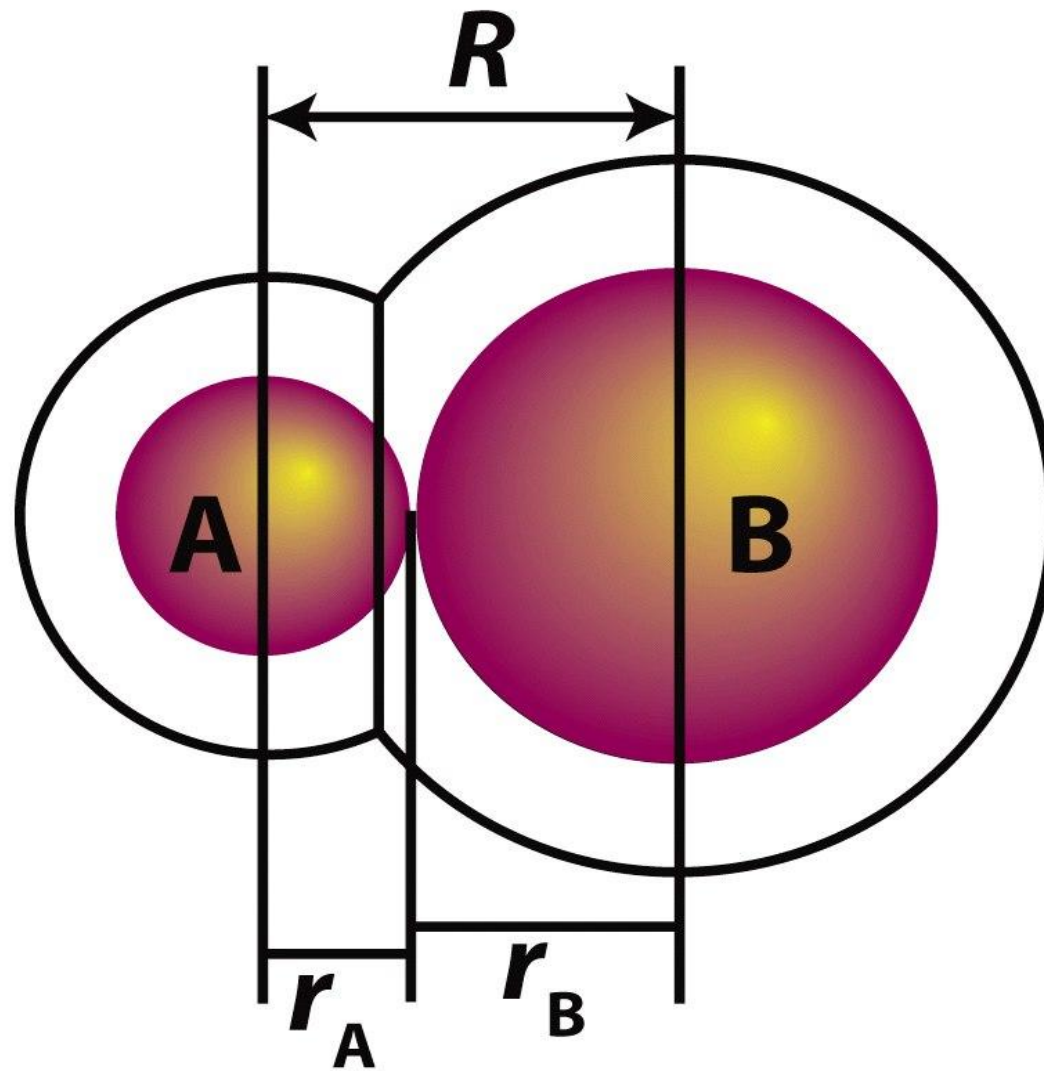
Raggio Atomico



Raggio metallico

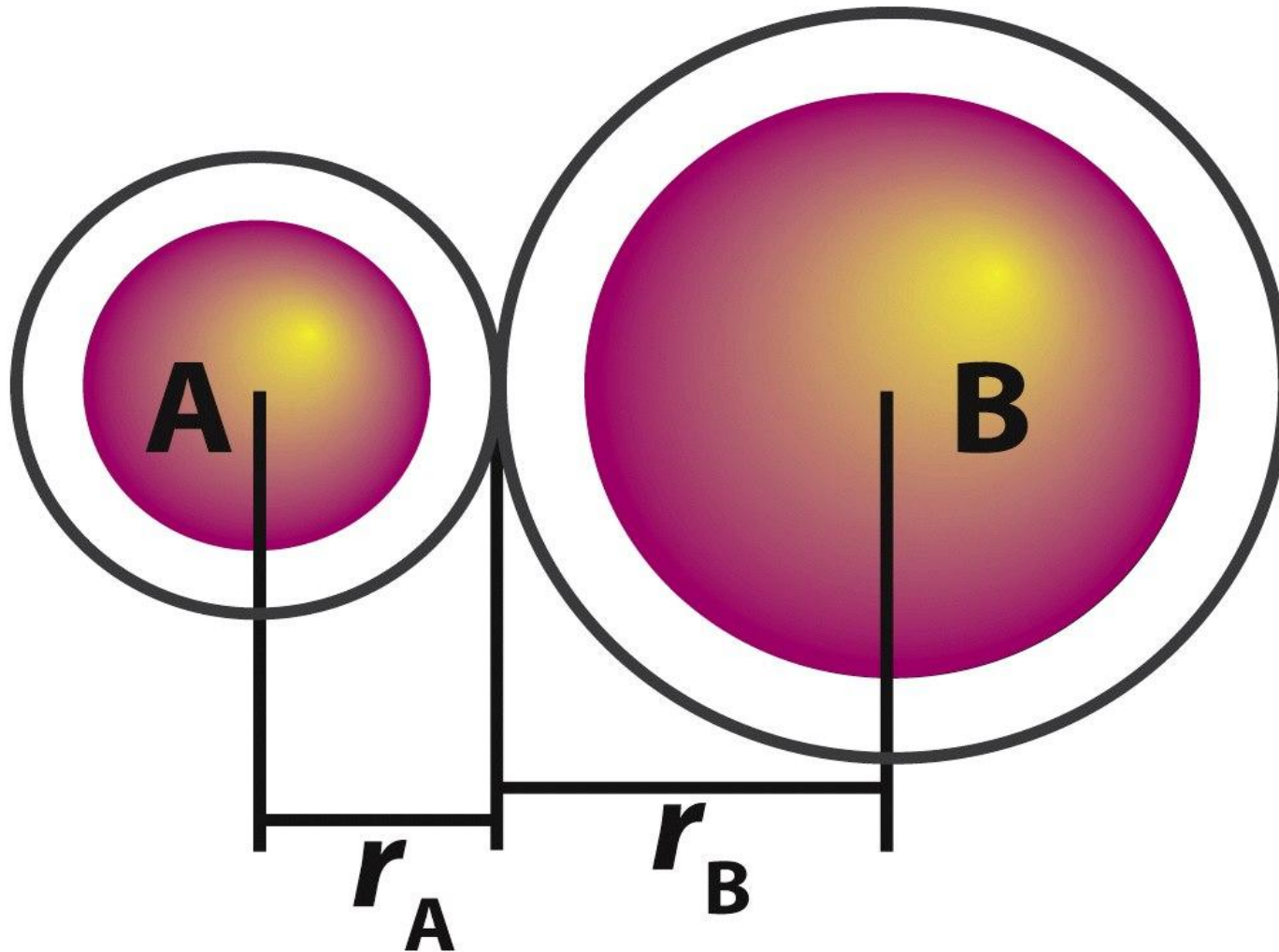


Raggio covalente



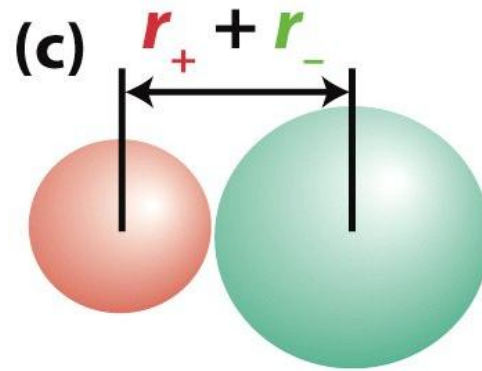
Raggio covalente

Atomi non legati

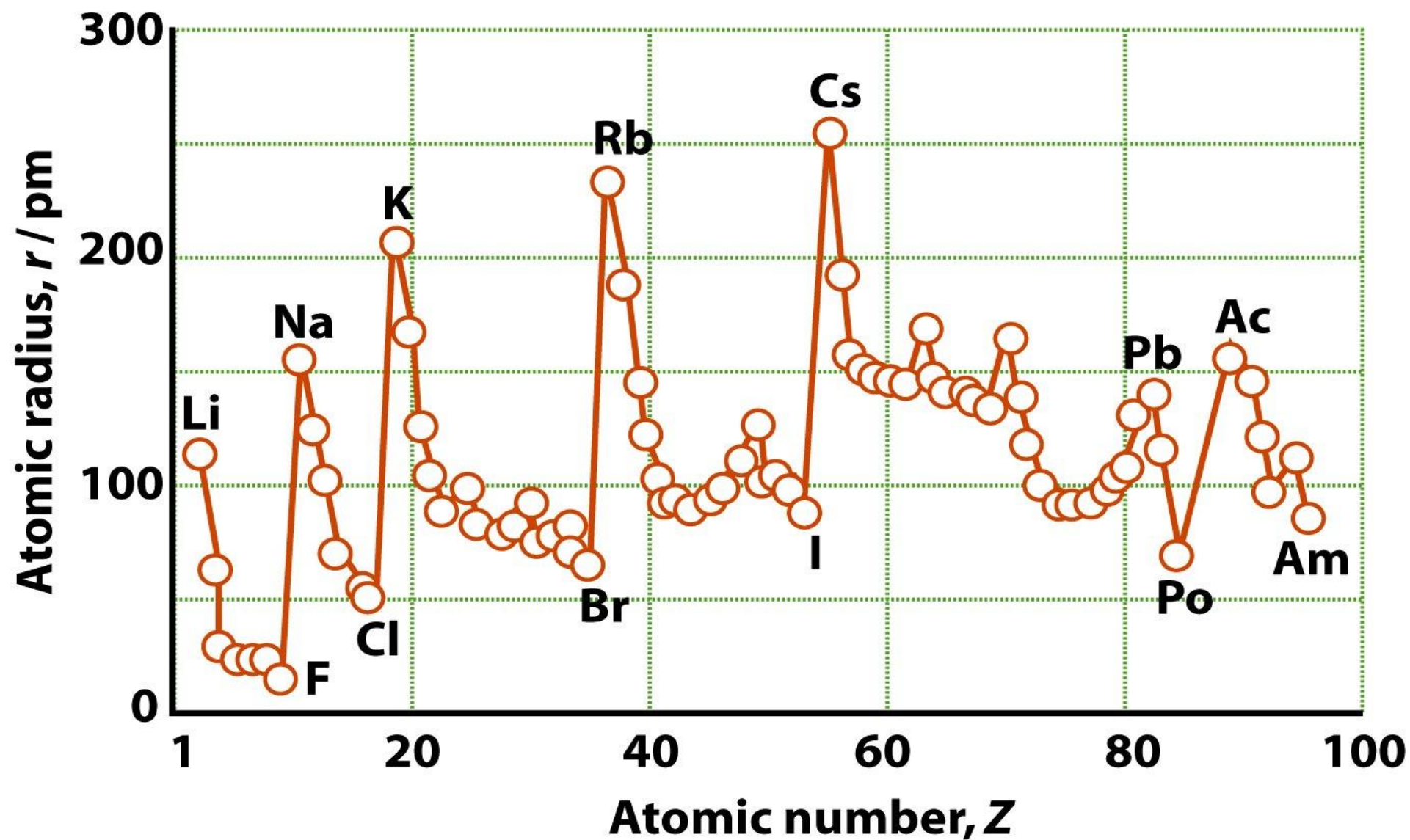


Raggio di van der Waals

Raggio Ionico



$$r_{\text{O}^{2-}} = 140 \text{ pm}$$



Raggi atomici

The periodic table displays atomic radii trends. Elements are color-coded: yellow for s-block, green for p-block, blue for d-block, and red for f-block. A red box highlights the elements Al (143) and Ga (122), illustrating the lanthanide contraction. The table is organized by periods (2 to 6) and groups (1 to 18).

	1	2	13	14	15	16	17	18
2	Li 152	Be 113	B 83	C 77	N 75	O 73	F 71	Ne
3	Na 180	Mg 160	Al 143	Si 117	P 115	S 104	Cl 99	Ar
4	K 227	Ca 197	Ga 122	Ge 123	As 125	Se 117	Br 114	Kr
5	Rb 248	Sr 215	In 163	Sn 141	Sb 141	Te 143	I 133	Xe
6	Cs 265	Ba 217	Tl 170	Pb 175	Bi 155	Po 167	At	Rn

Fig. 9.1
Pag 268

La Chimica Inorganica di Atkins, Zanichelli, III edizione

TABELLA 1.3 Raggi atomici, r/pm^* .

Li	Be											B	C	N	O	F
157	112											88	77	74	73	71
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl
191	160											125	118	110	104	99
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
235	197	164	147	135	129	137	126	125	125	128	137	140	122	122	117	114
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
250	215	182	160	147	140	135	134	134	137	144	152	150	140	141	135	133
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi		
272	224	188	159	147	141	137	135	136	139	144	155	155	154	152		

* Dati da A.F. Wells, *Structural inorganic chemistry*, Clarendon Press, Oxford, 1984. Per i metalli i valori si riferiscono al raggio metallico per il numero di coordinazione 12, per gli altri elementi al raggio covalente.

Pag 20

TABELLA 13.1 Proprietà rappresentative degli elementi.

	B	Al	Ga	In	Tl
Raggio covalente/pm	80	125	125	150	155
Raggio metallico/pm		143	141	166	171
Raggio ionico, $r(\text{M}^{3+})/\text{pm}^*$	27	53	62	80	89
Punto di fusione/ $^{\circ}\text{C}$	2300	660	30	157	304
Punto di ebollizione/ $^{\circ}\text{C}$	3930	2470	2403	2072	1473
Energia di prima ionizzazione, $I_1/\text{kJ mol}^{-1}$	799	577	577	556	590
Energia di seconda ionizzazione, $I_2/\text{kJ mol}^{-1}$	2427	1817	1979	1821	1971
Energia di terza ionizzazione, $I_3/\text{kJ mol}^{-1}$	3660	2745	2963	2704	2878
Affinità elettronica, $E_a/\text{kJ mol}^{-1}$	26,7	42,5	28,9	28,9	19,2
Elettronegatività di Pauling	2,0	1,6	1,8	1,8	2,0
$E^{\circ}(\text{M}^{3+}, \text{M})/\text{V}$	-0,89	-1,68	-0,53	-0,34	+0,72

* Per numero di coordinazione 6.

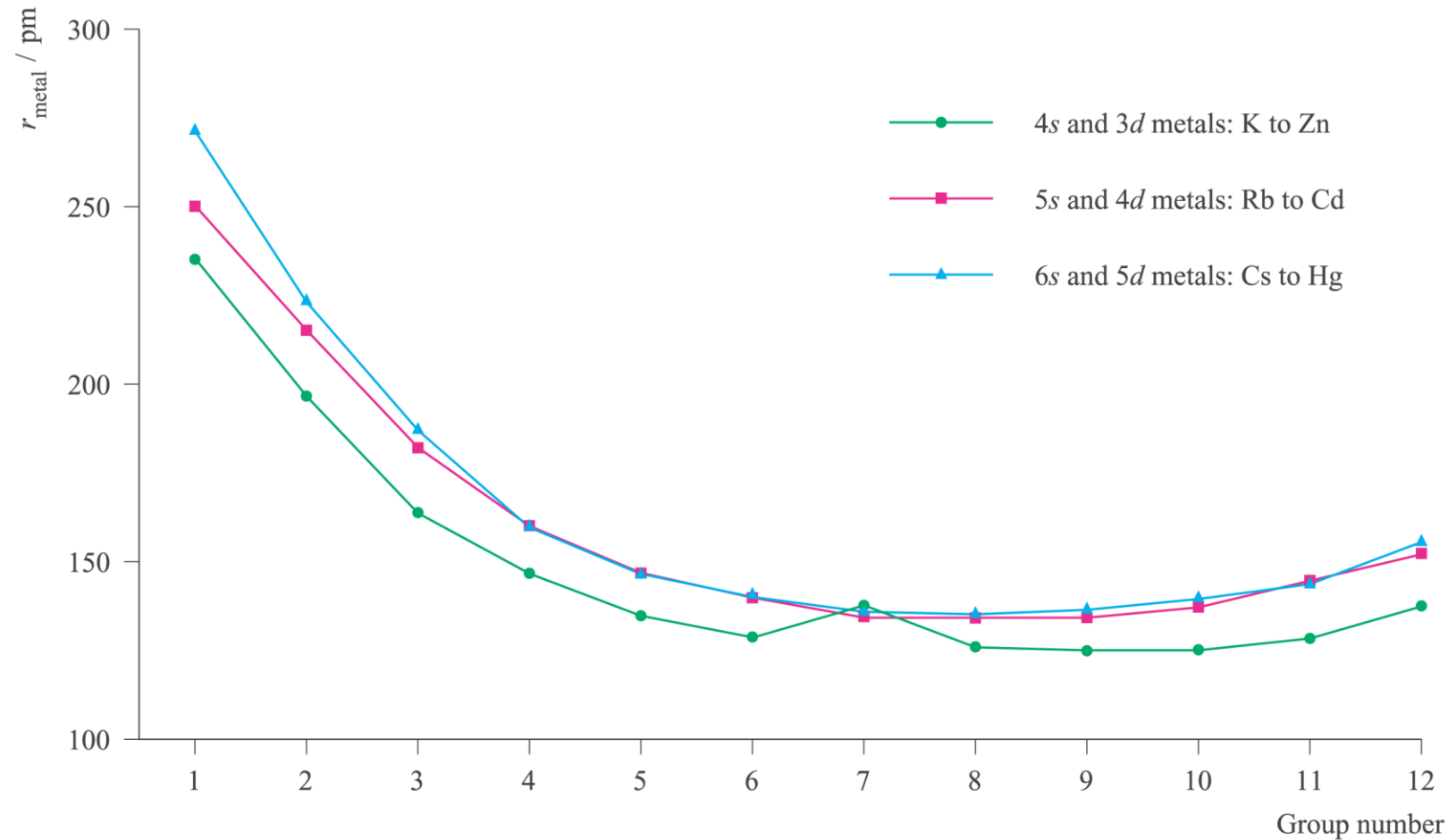
Pag 340

	1	2	13	14	15	16	17	18
2	Li 152	Be 113	B 83	C 77	N 75	O 73	F 71	Ne
3	Na 154	Mg 160	Al 125	Si 117	P 115	S 104	Cl 99	Ar
4	K 227	Ca 197	Ga 122	Ge 123	As 125	Se 117	Br 114	Kr
5	Rb 248	Sr 215	In 163	Sn 141	Sb 141	Te 143	I 133	Xe
6	Cs 265	Ba 217	Tl 170	Pb 175	Bi 155	Po 167	At	Rn

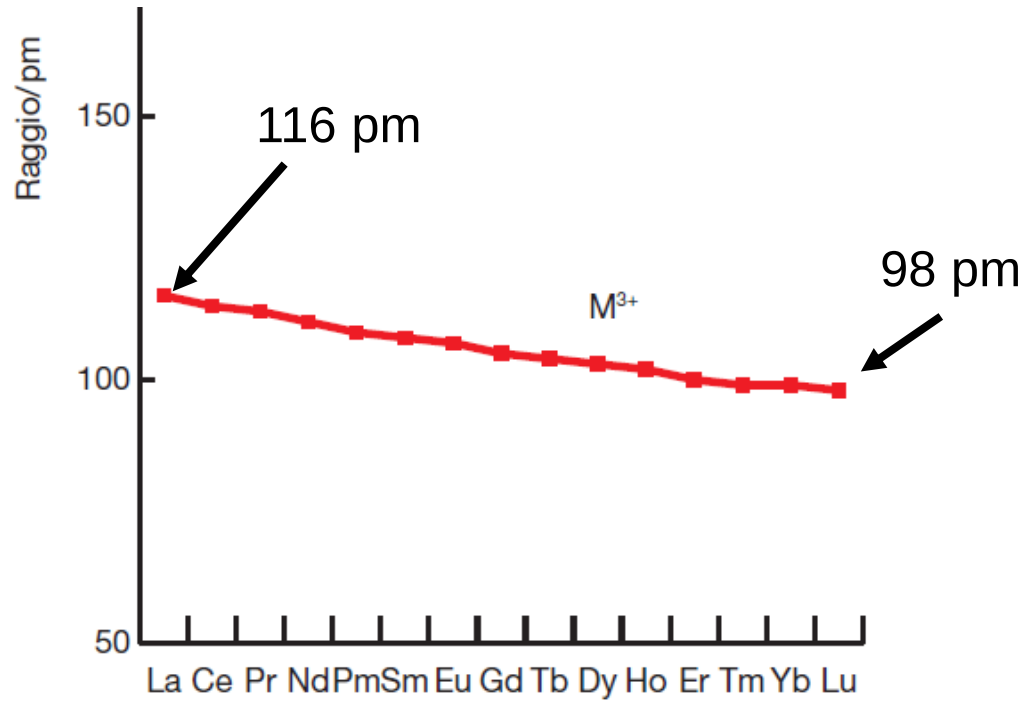
Fig. 9.1
Pag 257

	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
2	Sc 161	Ti 145	V 139	Cr 125	Mn 137	Fe 124	Co 125	Ni 125	Cu 128	Zn 133
3	Y 178	Zr 159	Nb 143	Mo 136	Tc 135	Ru 133	Rh 134	Pd 138	Ag 144	Cd 149
4	La 187	Hf 156	Ta 143	W 137	Re 137	Os 134	Ir 136	Pt 139	Au 144	Hg 150

Raggio metallico: blocco d



Contrazione lantanidica



Conseguenze della contrazione lantanidica

Table 1.4 Atomic radii, r/pm^*

Li 157	Be 112											B 88	C 77	N 74	O 66	F 64
Na 191	Mg 160											Al 143	Si 118	P 110	S 104	Cl 99
K 235	Ca 197	Sc 164	Ti 147	V 135	Cr 129	Mn 137	Fe 126	Co 125	Ni 125	Cu 128	Zn 137	Ga 153	Ge 122	As 121	Se 117	Br 114
Rb 250	Sr 215	Y 182	Zr 160	Nb 147	Mo 140	Tc 135	Ru 134	Rh 134	Pd 137	Ag 144	Cd 152	In 167	Sn 158	Sb 141	Te 137	I 133
Cs 272	Ba 224	Lu 172	Hf 159	Ta 147	W 141	Re 137	Os 135	Ir 136	Pt 139	Au 144	Hg 155	Tl 171	Pb 175	Bi 182		

* The values refer to coordination number 12 (see Section 3.2).

Effetti relativistici

Al crescere della carica nucleare, aumenta la velocità degli elettroni, soprattutto di quelli in orbitali più penetranti.

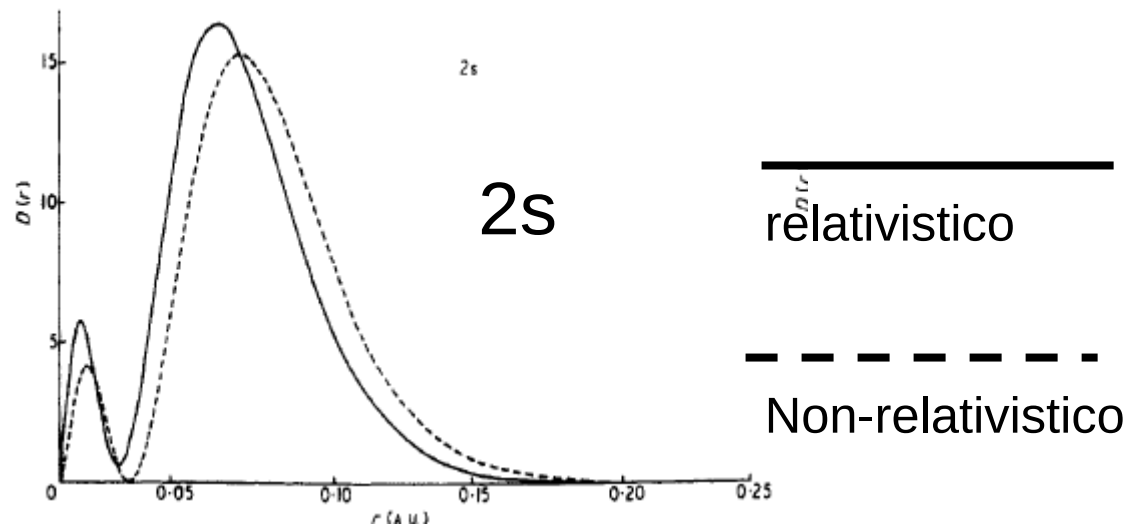
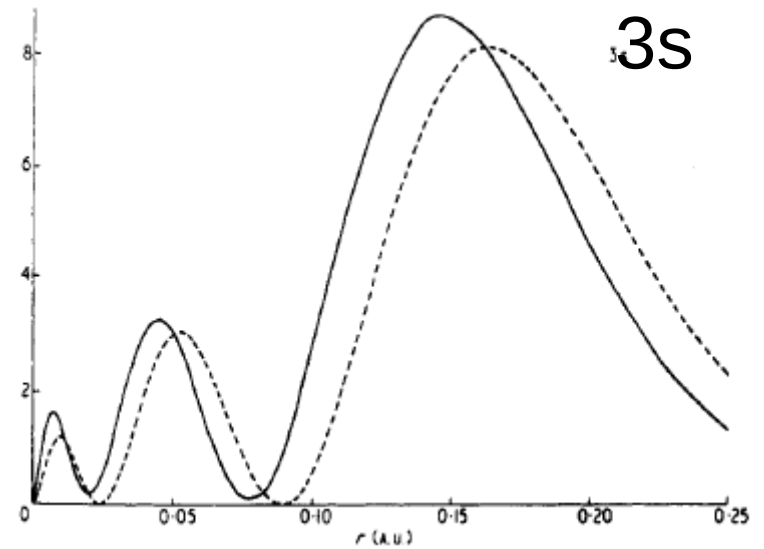
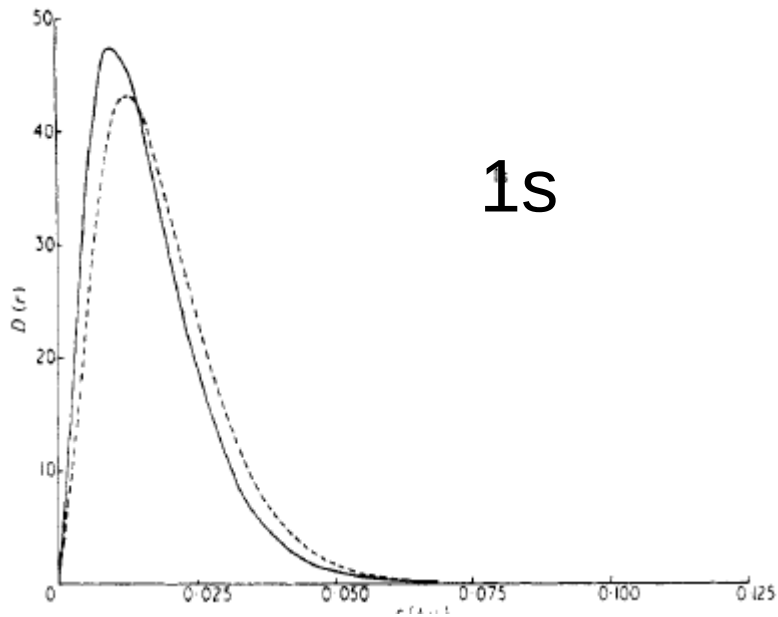
$$m_{\text{rel}} = m_{\text{rest}} / \sqrt{1 - (v/c)^2}$$

Al crescere della velocità degli elettroni, la loro **massa relativistica aumenta** rispetto a quella a riposo (formula di Einstein)

$$a_0 = (4\pi\epsilon_0)(\hbar^2/me^2)$$

L'aumento di massa comporta una **contrazione dell'orbitale**, che per gli atomi pesanti come Au e Hg può arrivare al 20%

Funzioni di distribuzione radiale per $Z = 80$



Effetto della coppia inerte

L'effetto della coppia inerte $6s^2$ riguarda **gli elementi più pesanti del blocco p (gruppi 13 – 15)** e consiste in un aumento della stabilità di uno stato di ossidazione che è di 2 unità minore del numero di ossidazione del gruppo.

Raggi ionici

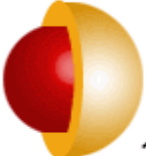
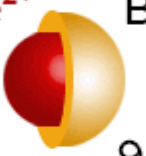
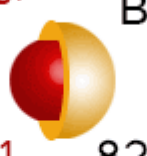
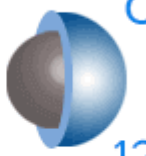
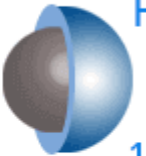
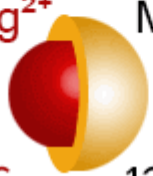
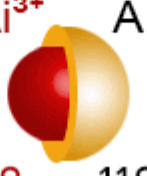
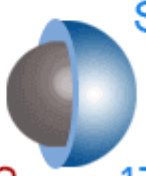
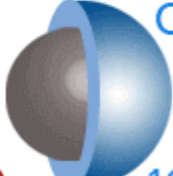
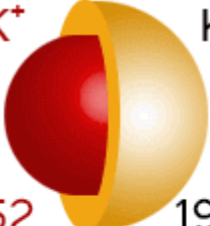
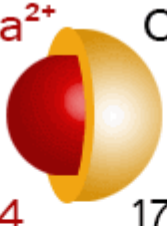
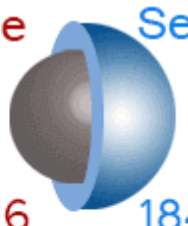
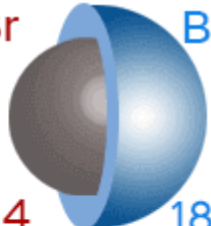
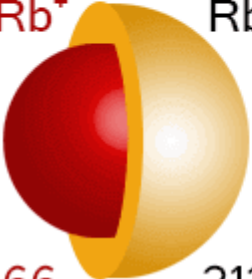
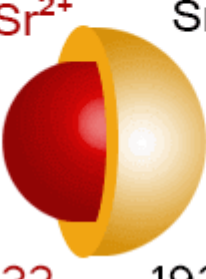
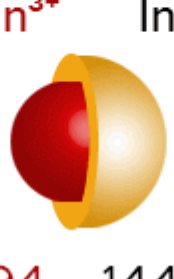
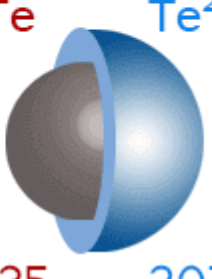
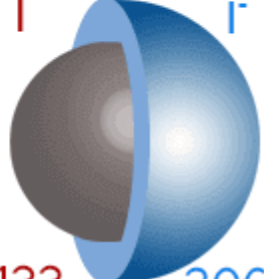
Table 1.5 Ionic radii, r/pm^*

Li⁺	Be²⁺	B³⁺			N³⁻	O²⁻	F⁻
59(4)	27(4)	11(4)			146	135(2)	128(2)
76(6)						138(4)	131(4)
						140(6)	133(6)
						142(8)	
Na⁺	Mg²⁺	Al³⁺			P³⁻	S²⁻	Cl⁻
99(4)	49(4)	39(4)			212	184(6)	181(6)
102(6)	72(6)	53(6)					
118(8)	89(8)						
K⁺	Ca²⁺	Ga³⁺			As³⁻	Se²⁻	Br⁻
138(6)	100(6)	62(6)			222	198(6)	196(6)
151(8)	112(8)						
159(10)	123(10)						
160(12)	134(12)						
Rb⁺	Sr²⁺	In³⁺	Sn²⁺	Sn⁴⁺		Te²⁻	I⁻
152(6)	118(6)	79(6)	83(6)	69(6)		221(6)	220(6)
160(8)	125(8)	92(8)	93(8)				
173(12)	144(12)						
Cs⁺	Ba²⁺	Tl³⁺					
167(6)	149(6)	88(6)					
174(8)	156(8)	Tl⁺					
188(12)	175(12)	164(6)					

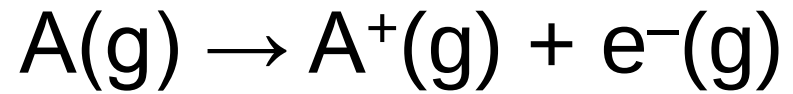
* Numbers in parentheses are the coordination number of the ion. For more values, see *Resource section 1*.

Raggi ionici

Steps of atoms and their ions in pm

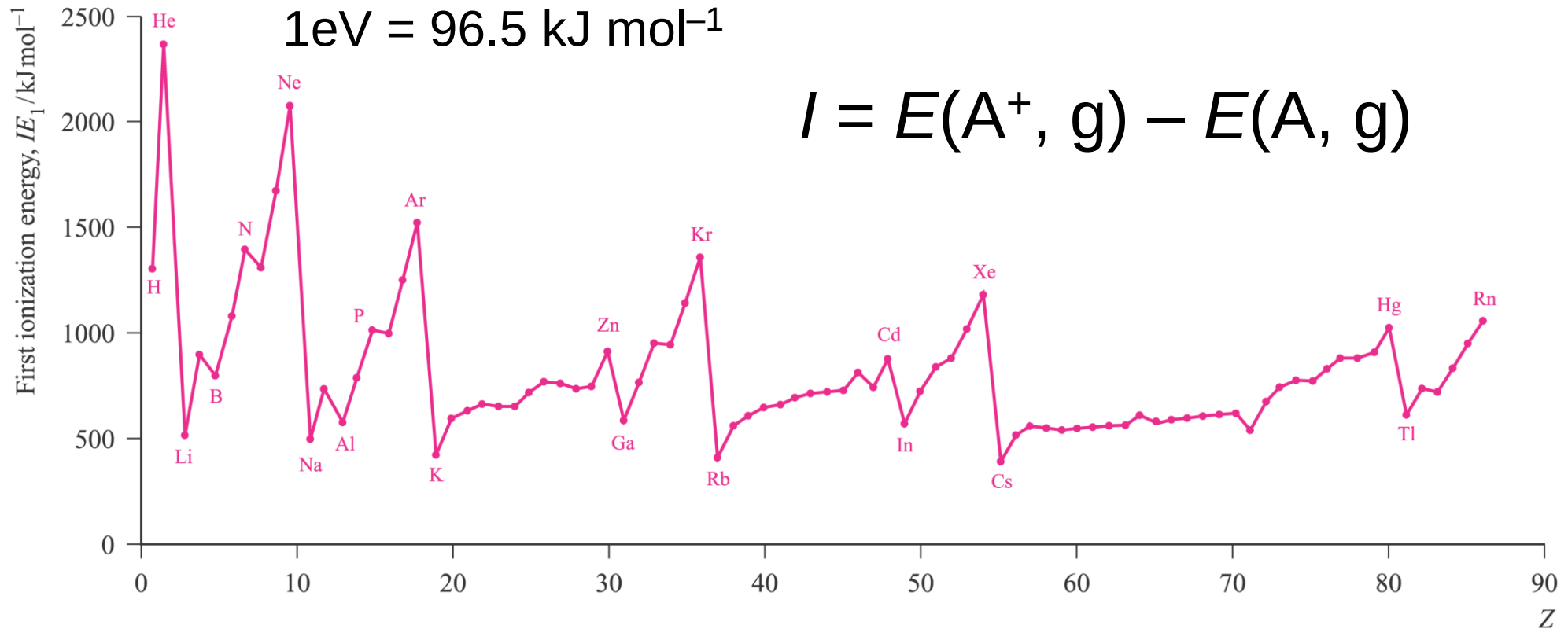
Group 1		Group 2		Group 13		Group 16		Group 17	
Li ⁺  90 134	Li	Be ²⁺  59 90	Be	B ³⁺  41 82	B	O  73 126	O ²⁻	F  71 119	F ⁻
Na ⁺  116 154	Na	Mg ²⁺  86 130	Mg	Al ³⁺  68 118	Al	S  102 170	S ²⁻	Cl  99 167	Cl ⁻
K ⁺  152 196	K	Ca ²⁺  114 174	Ca	Ga ³⁺  76 126	Ga	Se  116 184	Se ²⁻	Br  114 182	Br ⁻
Rb ⁺  166 211	Rb	Sr ²⁺  132 192	Sr	In ³⁺  94 144	In	Te  135 207	Te ²⁻	I  133 206	I ⁻

Energia di Ionizzazione

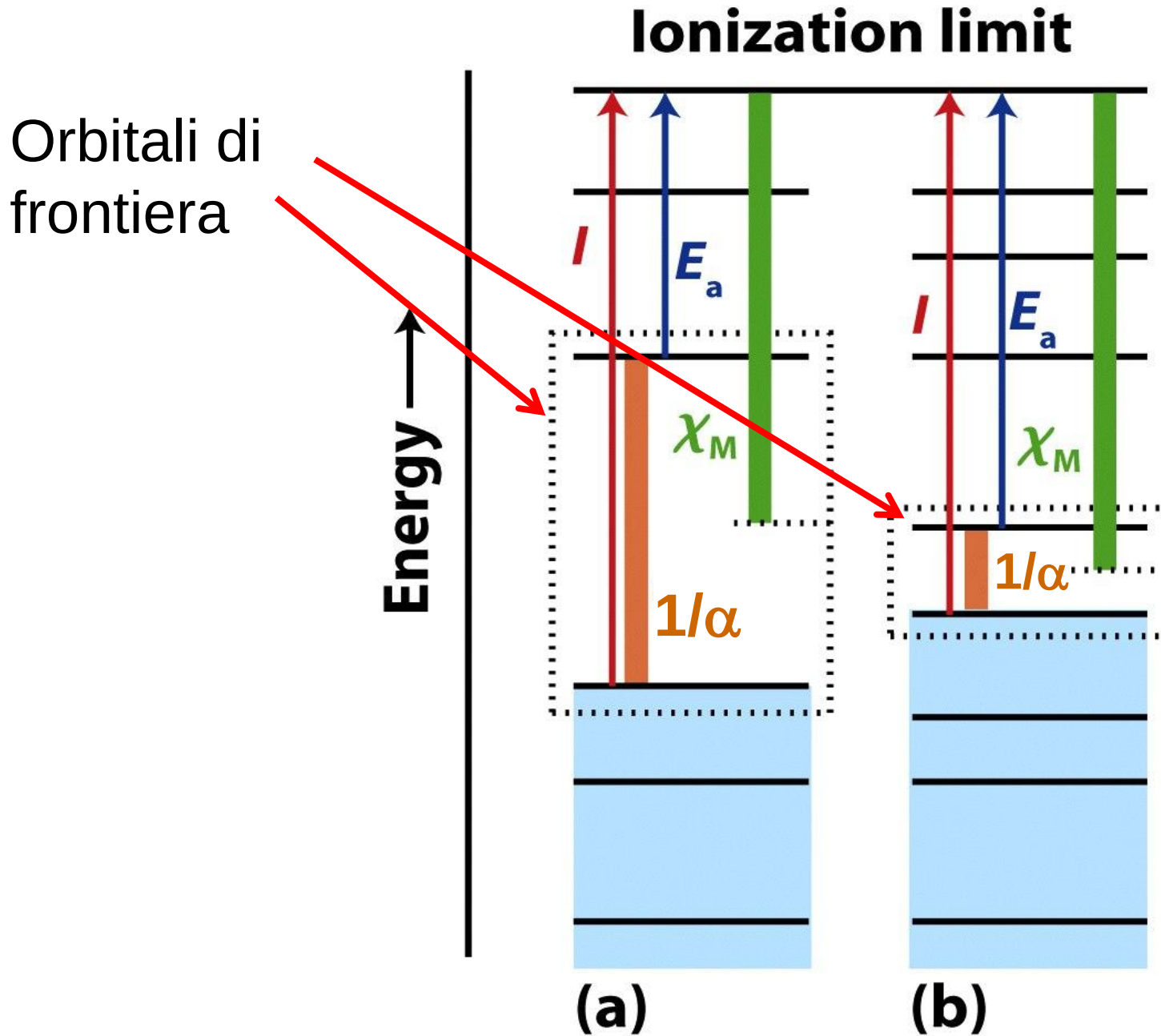


$$1\text{eV} = 96.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$I = E(A^+, g) - E(A, g)$$



L'energia di prima ionizzazione di un atomo è largamente determinata dall'energia del suo più alto orbitale occupato nello stato fondamentale e il suo **andamento regolare** segue quelli di Z_{eff} e raggio atomico.



L'energia di ionizzazione di un elemento è largamente determinata dall'energia del più alto orbitale occupato (o semi-occupato) nel *ground state* dell'atomo.

Energie di prima ionizzazione

				H 1312			18 He 2373
	1	2	13	14	15	16	17
2	Li 513	Be 899	B 801	C 1086	N 1402	O 1314	F 1681
3	Na 495	Mg 737	Al 577	Si 786	P 1011	S 1000	Cl 1251
4	K 419	Ca 589	Ga 579	Ge 762	As 947	Se 941	Br 1139
5	Rb 403	Sr 549	In 558	Sn 708	Sb 834	Te 869	I 1008
6	Cs 375	Ba 502	Tl 590	Pb 716	Bi 704	Po 812	At 926
							Rn 1036

Energie di ionizzazione

Table 1.6 First and second (and some higher) ionization energies of the elements, $I/(kJ\ mol^{-1})$

H							He
1312							2373
							5259
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
513	899	801	1086	1402	1314	1681	2080
7297	1757	2426	2352	2855	3386	3375	3952
11809	14844	3660	4619	4577	5300	6050	6122
		25018					
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
495	737	577	786	1011	1000	1251	1520
4562	1476	1816	1577	1903	2251	2296	2665
6911	7732	2744	3231	2911	3361	3826	3928
		11574					
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
419	589	579	762	947	941	1139	1351
3051	1145	1979	1537	1798	2044	2103	3314
4410	4910	2963	3302	2734	2974	3500	3565
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
403	549	558	708	834	869	1008	1170
2632	1064	1821	1412	1794	1795	1846	2045
3900	4210	2704	2943	2443	2698	3197	3097
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
375	502	590	716	704	812	926	1036
2420	965	1971	1450	1610	1800	1600	
3400	3619	2878	3080	2466	2700	2900	

Affinità elettronica

Table 1.7 Electron affinities of the main-group elements, $E_a/(\text{kJ mol}^{-1})^*$

$\text{A(g)} + \text{e}^-(\text{g}) \rightarrow \text{A}^-(\text{g})$ $E_a = E(\text{A, g}) - E(\text{A}^-, \text{g})$							
H 72							He -48
Li 60	Be ≤ 0	B 27	C 122	N -8	O 141 -780	F 328	Ne -116
Na 53	Mg ≤ 0	Al 43	Si 134	P 72	S 200 -492	Cl 349	Ar -96
K 48	Ca 2	Ga 29	Ge 116	As 78	Se 195	Br 325	Kr -96
Rb 47	Sr 5	In 29	Sn 116	Sb 103	Te 190	I 295	Xe -77

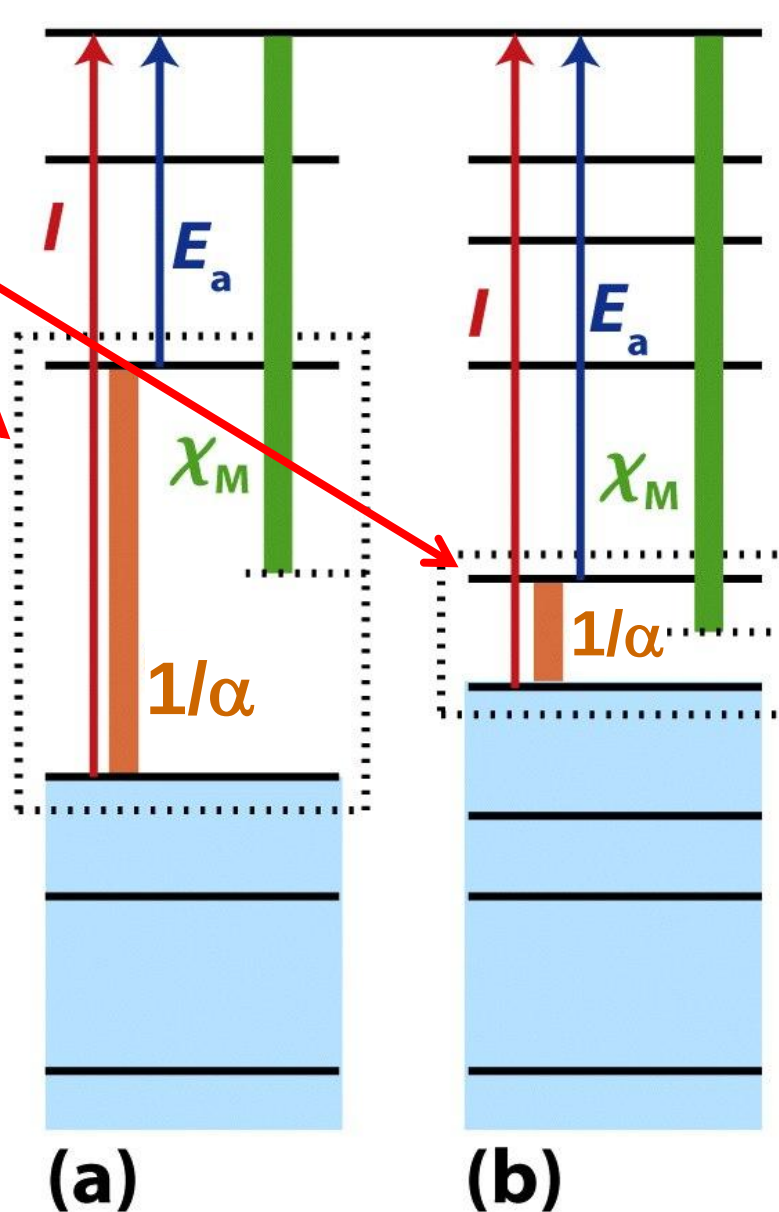
* The first values refer to the formation of the ion X^- from the neutral atom; the second value to the formation of X^{2-} from X^- .

l'affinità elettronica ha segno opposto alla variazione di energia

Orbitali di
frontiera

Energy ↑

Ionization limit



(a)

(b)

L'affinità elettronica di un elemento è largamente determinata dall'energia del più basso orbitale non occupato (o semi-occupato) nel *ground state* dell'atomo.

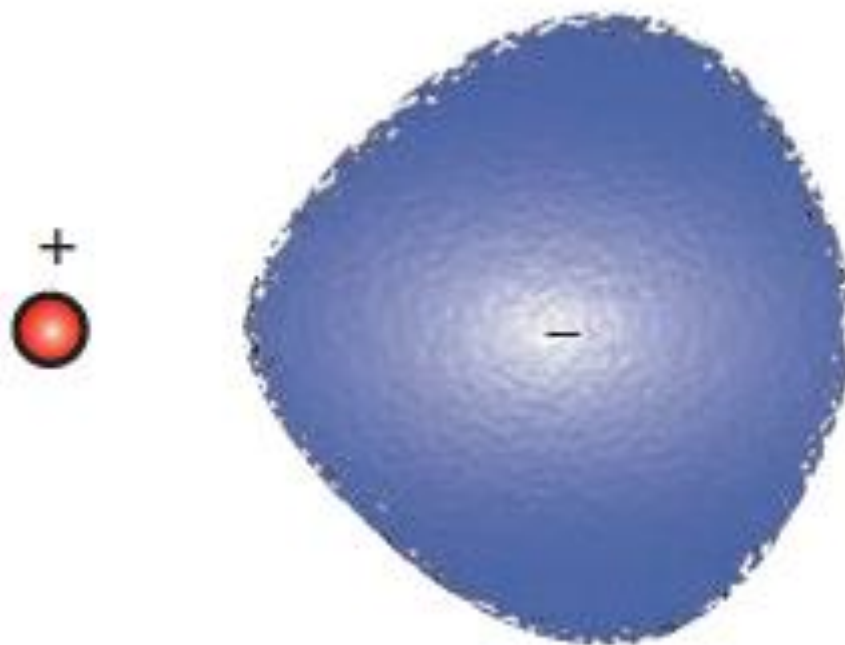
Electron affinity/kJ mol⁻¹



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

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

Polarizzabilità (α)

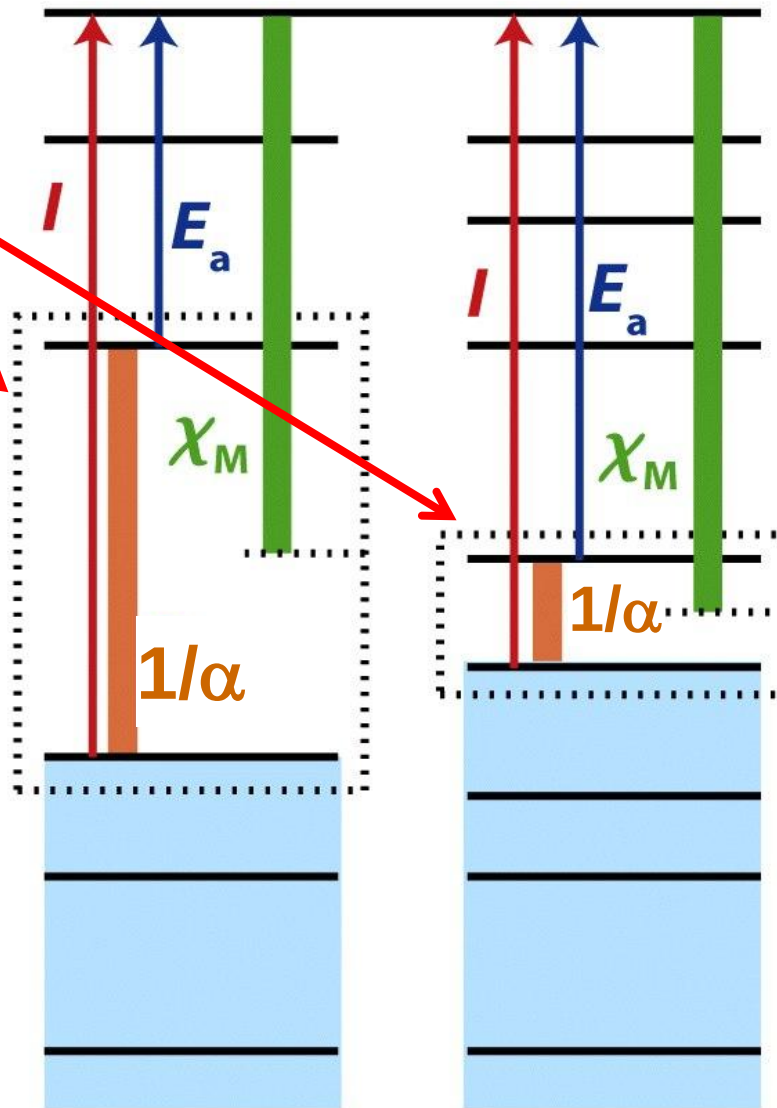


Un atomo o ione è polarizzabile (*soft*) quando gli orbitali di frontiera sono vicini in termini di energia; atomi e ioni pesanti, di grosse dimensioni, tendono a essere altamente polarizzabili.

Ionization limit

Orbitali di
frontiera

Energy ↑



(a) *Hard*

(b) *Soft*

α = polarizzabilità

Polarizzabilità e Regole di Fajans

(per predire se un legame sarà ionico o covalente)

1. cationi piccoli e a carica elevata (e.g. Li^+ , Mg^{2+}) hanno forte **potere polarizzante**
2. anioni larghi e con carica elevata sono **facilmente polarizzabili** (e.g. I^- , Se^{2-} , Te^{2-} , As^{3-} , P^{3-})
3. cationi che non hanno una configurazione elettronica di gas nobile (e.g. quasi tutti quelli dei metalli di transizione) sono **più polarizzanti** di quelli con guscio chiuso (e.g. cationi dei metalli alcalini o alcalino-terrosi) perché avranno una maggiore Z_{eff} , cioè una carica più alta sulla loro superficie (*cfr* Hg^{2+} e Ca^{2+} , 116 pm).

Cationi molto polarizzanti tenderanno a fare legami covalenti (e.g. Li^+ e Mg^{2+}). Non possono esistere cationi con carica troppo elevata (e.g. Si^{4+} o P^{5+}).

Fajans at the Bunsen Congress, Munich, 1928



Friedrich Hund

Oskar von Miller

Walther Kossel

Kasimir Fajans

Alwin Mittasch

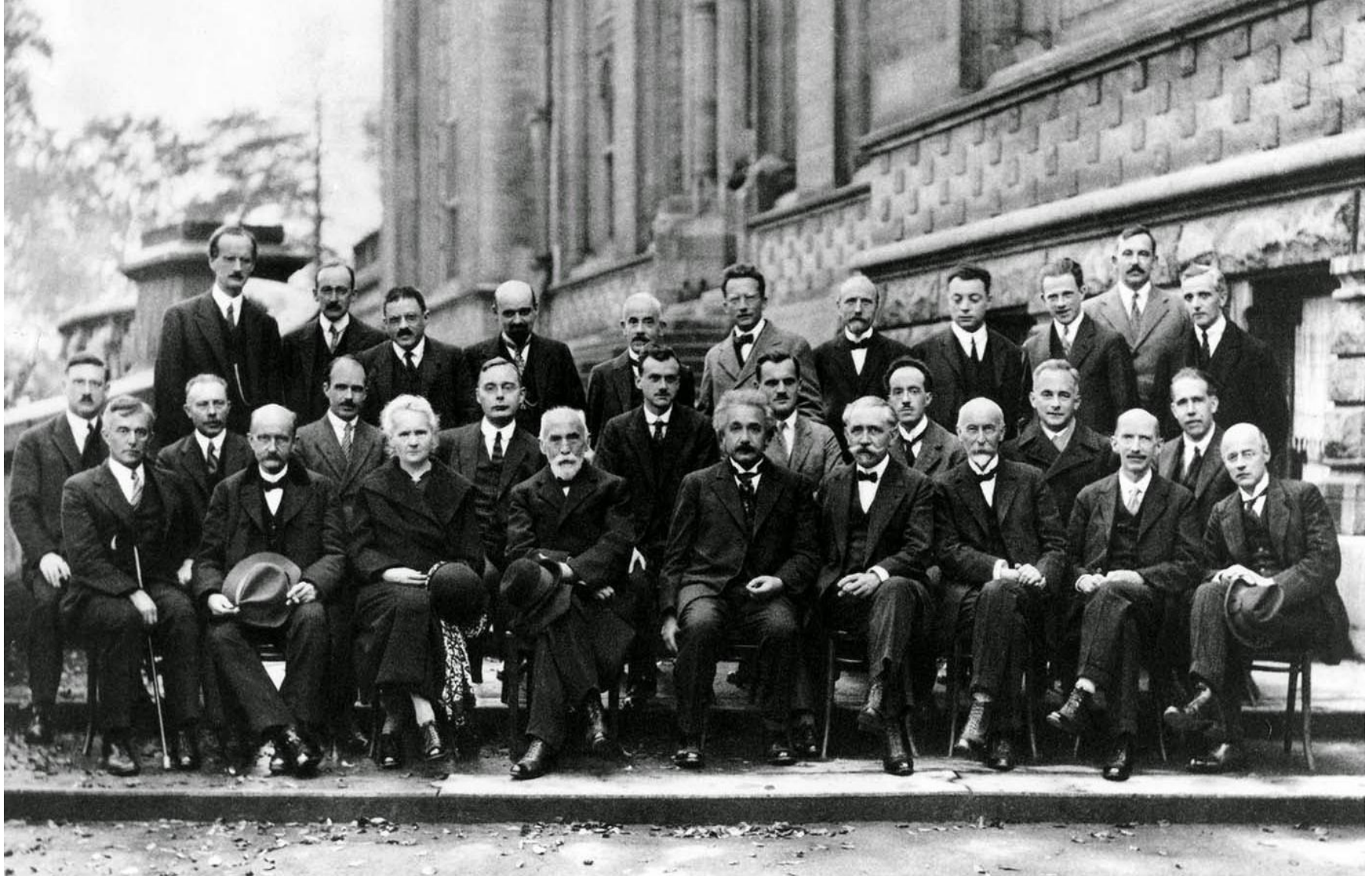
Franz Eugen Simon

Frl. Vohsen

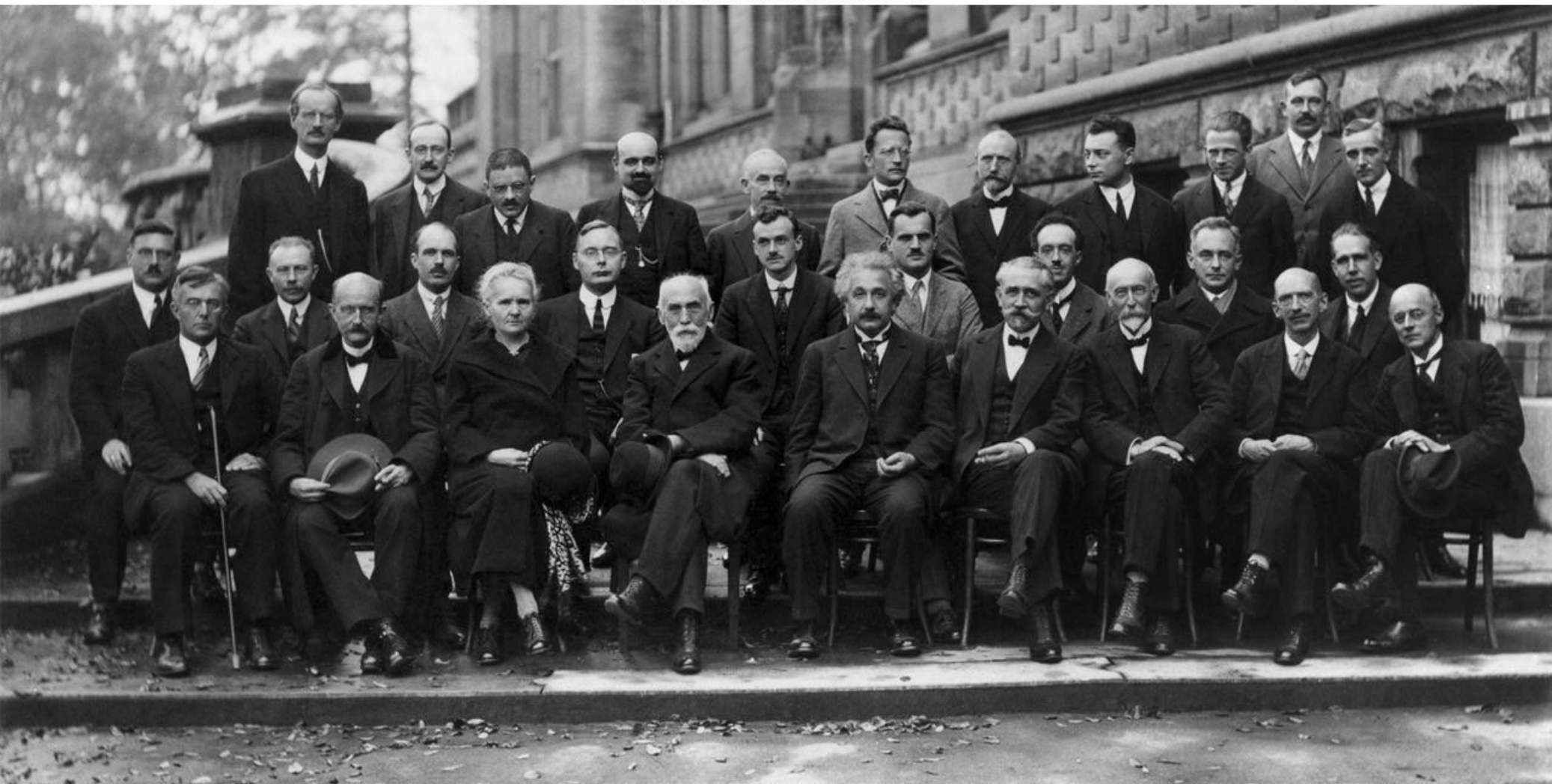
Peter Debye

Fritz London

The Solvay Conference (*Electrons and Photons*), 1927



A. PICCARD E. HENRIOT P. EHRENFEST Ed. HERZEN Th. DE DONDER E. SCHRÖDINGER E. VERSCHAFFELT W. PAULI W. HEISENBERG R.H. FOWLER L. BRILLOUIN
 P. DEBYE M. KNUDSEN W.L. BRAGG H.A. KRAMERS P.A.M. DIRAC A.H. COMPTON L. de BROGLIE M. BORN N. BOHR
 I. LANGMUIR M. PLANCK Mme CURIE H.A. LORENTZ A. EINSTEIN P. LANGEVIN Ch.E. GUYE C.T.R. WILSON O.W. RICHARDSON
 Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL



29 fisici, 17 premi Nobel