LA STRUTTURA DEGLI ATOMI

GLI SPETTRI ATOMICI DI EMISSIONE

Spettro atomico = insieme delle **righe spettrali** derivanti dall'emissione di energia provocata dall'interazione delle **radiazioni elettromagnetiche** con gli atomi ⇒ informazioni dell'organizzazione degli elettroni negli atomi



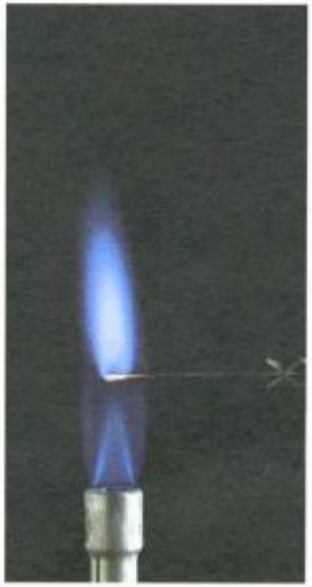
Paul Silvermary/Fundamental Photographs NYC



(a) litio (Li)



(b) sodio (Na)



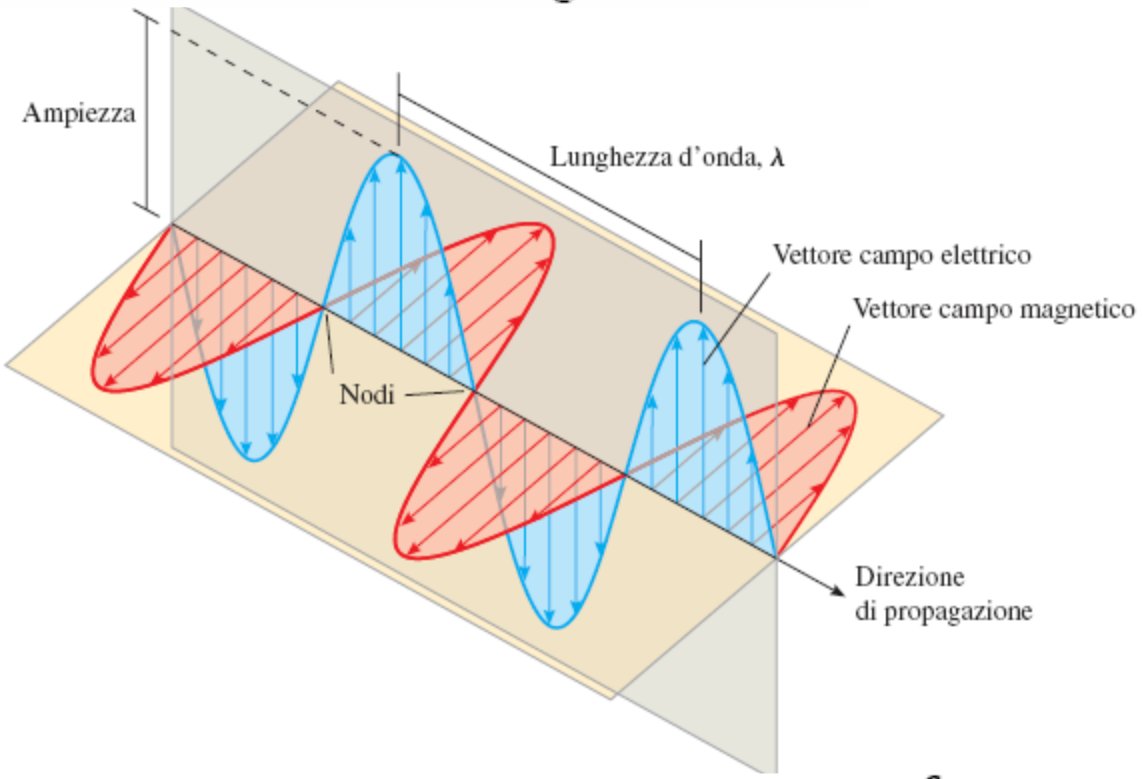
(c) potassio (K)



(d) rubidio (Rb)

LA RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA

Radiazione elettromagnetica = **energia** che si propaga per mezzo di un campo elettrico ed uno magnetico che oscillano perpendicolari alla direzione di propagazione dell'energia.



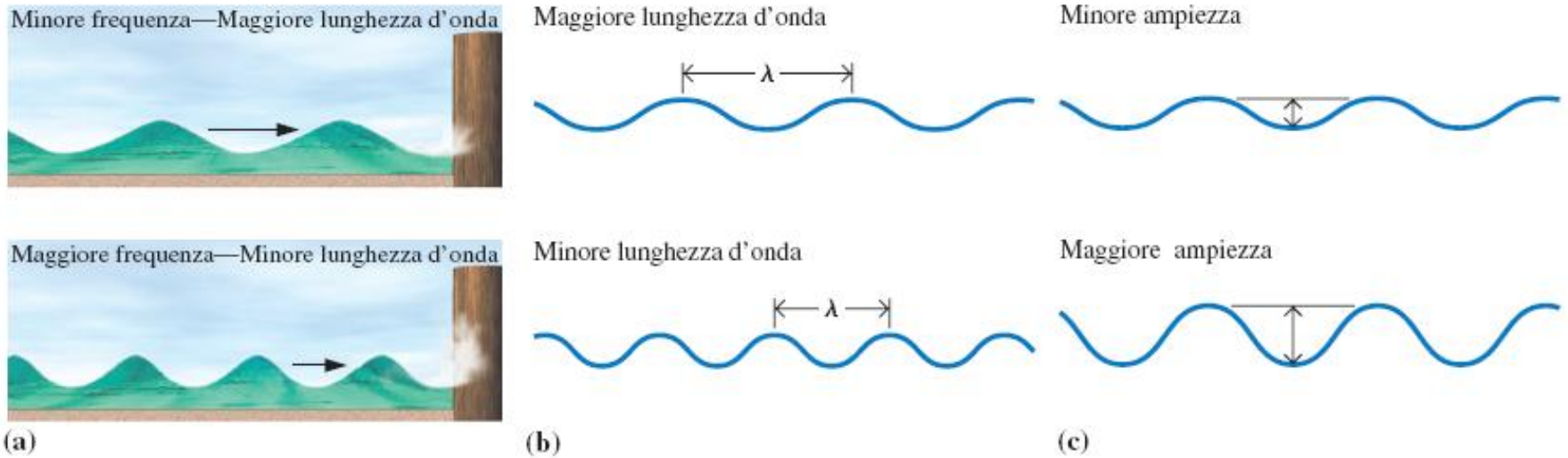
lunghezza d'onda λ
distanza tra due punti identici di onde adiacenti
(nm)

frequenza ν
numero di creste che passano in un determinato punto nell'unità di tempo
(Hz = 1 ciclo al secondo = s^{-1})

LA RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA

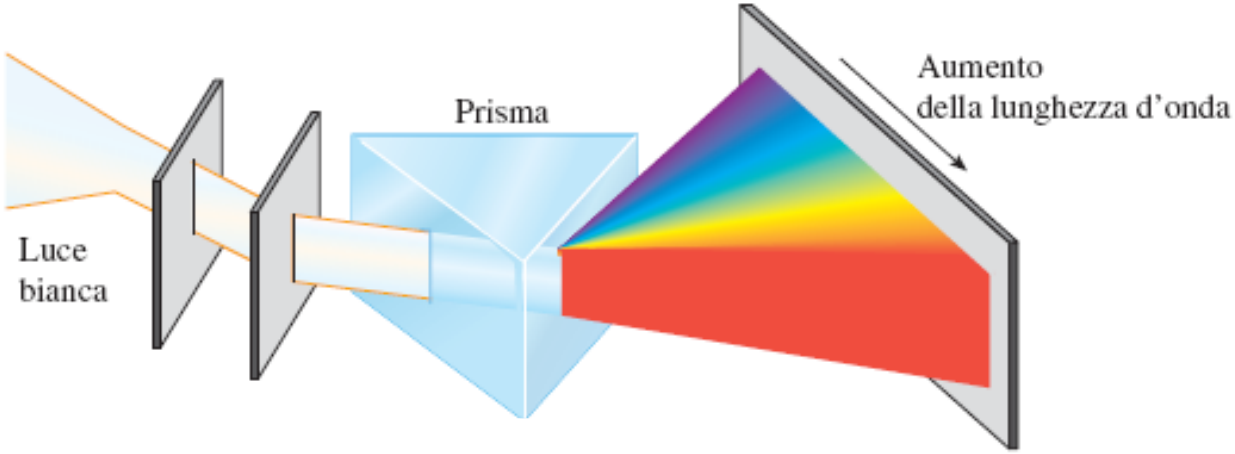
La radiazione elettromagnetica si muove nel vuoto con una velocità $c = 3.00 \times 10^8$ **m**/s uguale per tutte le lunghezze d'onda. La **lunghezza d'onda** (λ) e la **frequenza** (ν) della radiazione sono correlate tra loro e precisamente a lunghezze d'onda brevi corrispondono frequenze elevate mentre a lunghezze d'onda lunghe corrispondono frequenze basse.

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



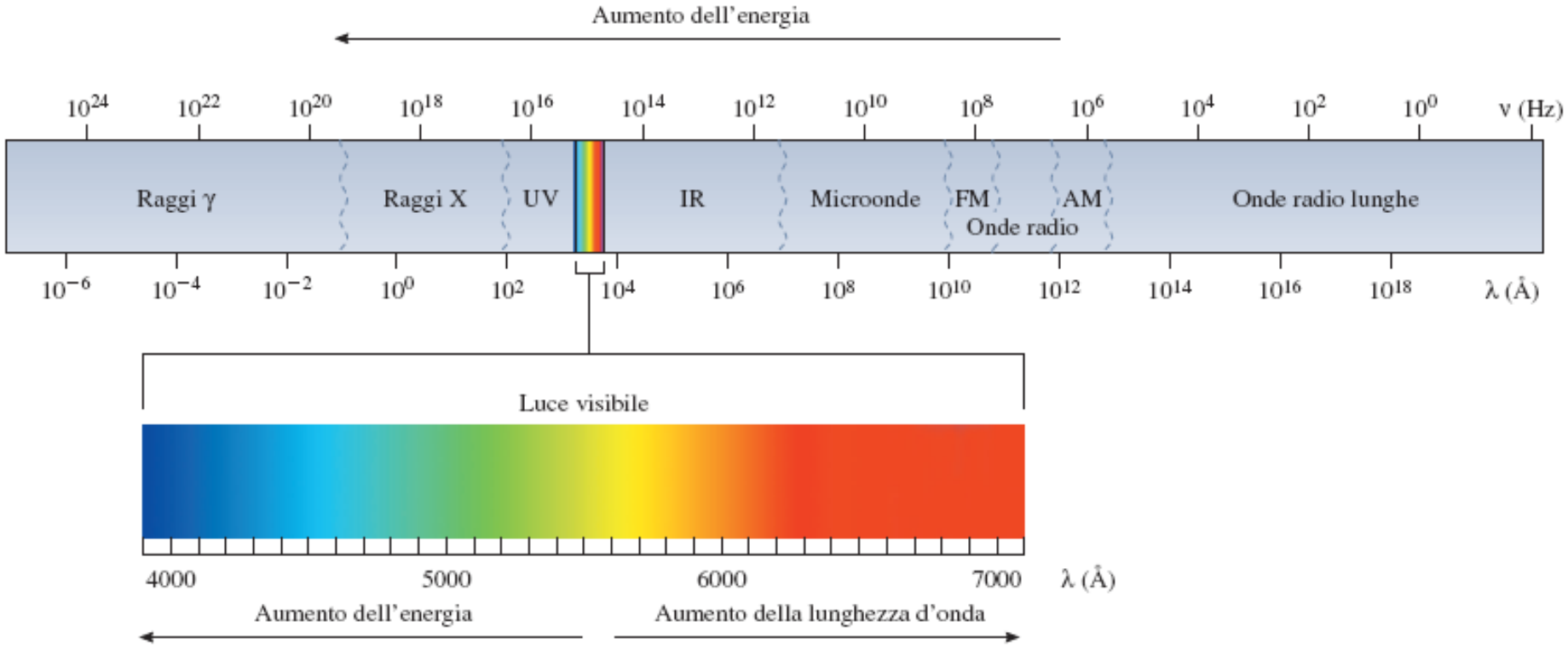
LA RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA

La luce del sole (luce bianca) è composta da radiazioni elettromagnetiche a diverse λ e ν che possono essere separate per passaggio attraverso un prisma.



LO SPETTRO ELETTROMAGNETICO

Spettro elettromagnetico = l'insieme delle radiazioni elettromagnetiche caratterizzate da tutte le possibili lunghezze d'onda, classificate secondo l'ordine crescente o decrescente di λ e ν.



LA QUANTIZZAZIONE DELL'ENERGIA

La luce si può considerare costituita da pacchetti discreti di energia detti fotoni. L'energia di un fotone è direttamente proporzionale alla frequenza della radiazione.

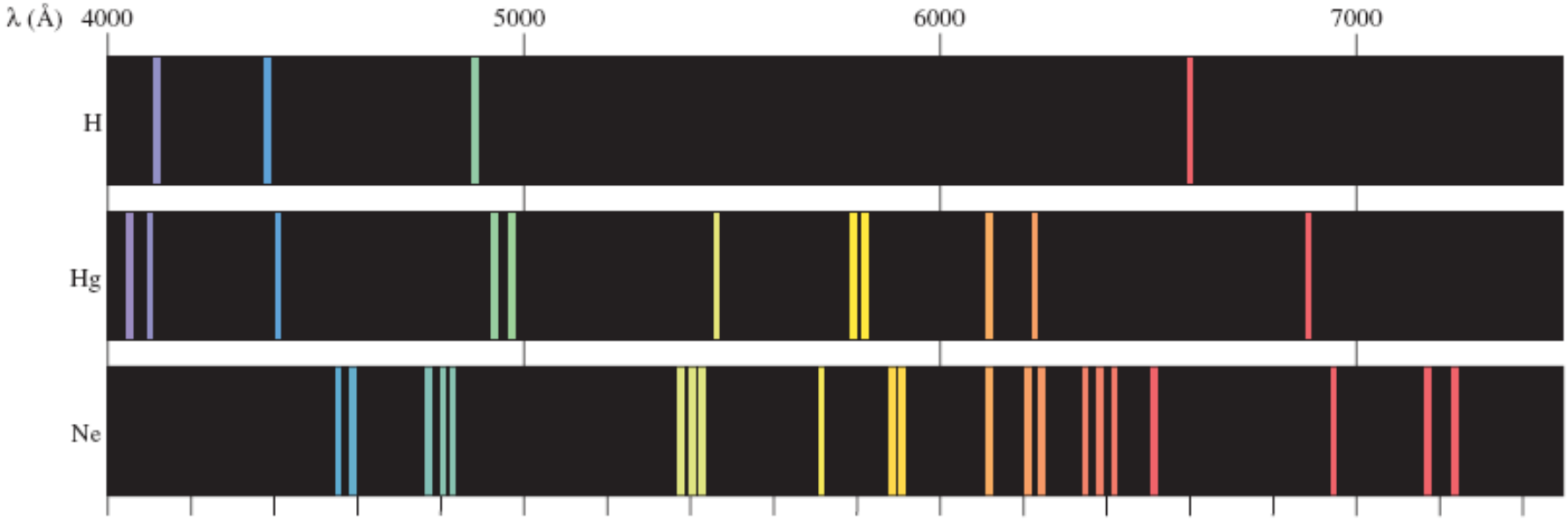
$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$ **Equazione di Planck**

h = **costante di Planck = 6.63 x 10^{-34} J s**

Fotoni = particelle costituenti la luce. Ogni fotone possiede una quantità di energia, detto **quanto**, in relazione alla frequenza della relativa radiazione elettromagnetica

GLI SPETTRI ATOMICI DI EMISSIONE

Ogni elemento ha un suo spettro atomico a righe che lo caratterizza. Gli spettri atomici sono dunque come un'impronta digitale dell'elemento chimico.



L'equazione di Rydberg

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

$$R = 1.097 \cdot 10^7\ m^{-1}$$

Emission Spectra of the Elements



field tested systems

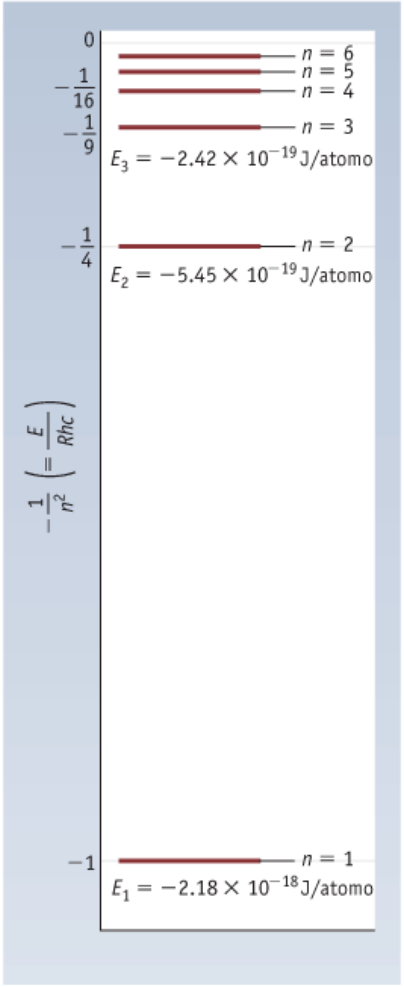
REAL-TIME CLASSROOM SPECTROSCOPY

IL MODELLO ATOMICO DI BOHR: I LIVELLI ENERGETICI DELL'ATOMO DI IDROGENO

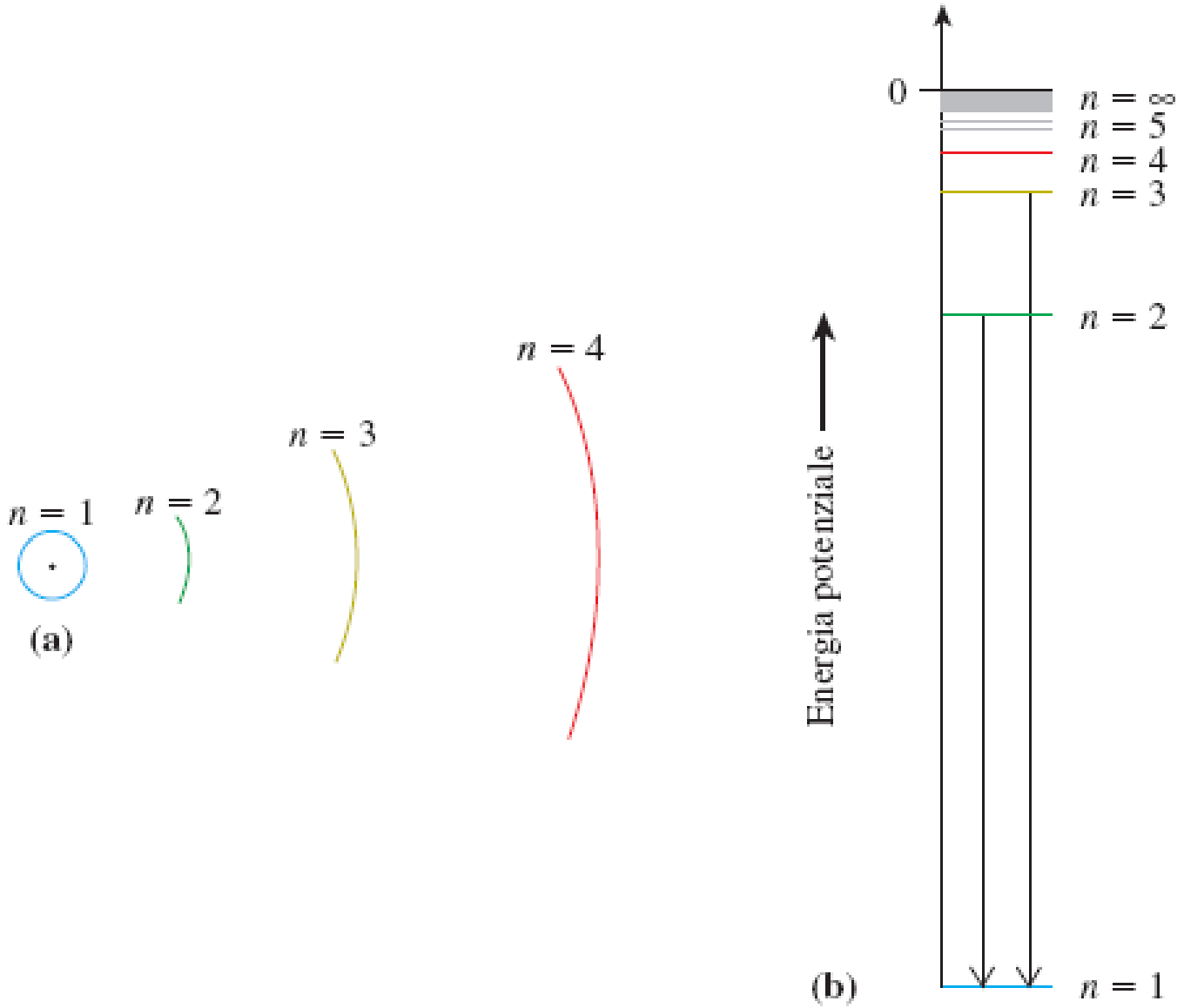
Energia totale dell'elettrone nel livello n

$$E_n = -\frac{R\,h\,c}{n^2}$$

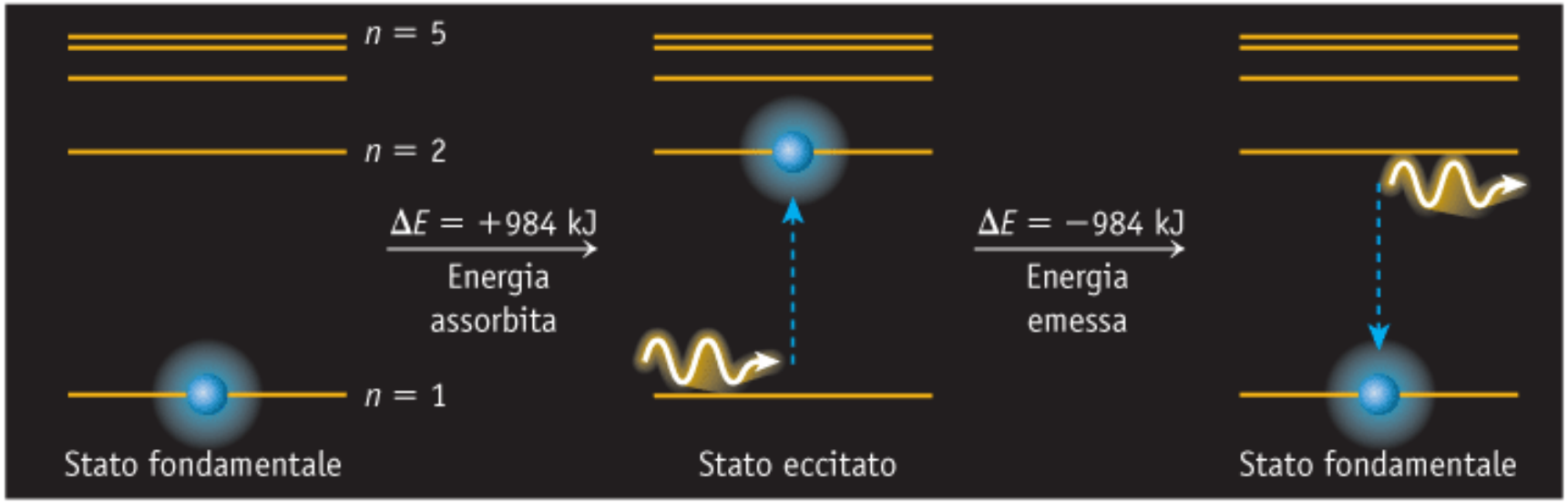
- Bohr stabilì come **energia zero** il punto in cui elettrone e protone sono completamente separati, per cui l'**elettrone** in ogni suo stato energetico **all'interno dell'atomo** ha un'**energia negativa**;
- ***n*** definisce l'energia degli **orbitali permessi**;
- Un atomo che ha i suoi elettroni nei livelli energetici più bassi si trova nello **stato fondamentale**; l'atomo di idrogeno è nel suo stato di **minima energia**: **stato fondamentale** con ***n* = 1**;
- Per l'atomo di idrogeno, gli stati con energia maggiore **n > 1** sono detti **stati eccitati.** Per valori di n maggiori, l'elettrone è più lontano dal nucleo;
- I livelli energetici sono sempre **più vicini tra di loro** al crescere di n.



IL MODELLO ATOMICO DI BOHR



IL MODELLO ATOMICO DI BOHR



Quando un elettrone eccitato passa ad uno stato energetico inferiore emette energia sottoforma di un fotone di luce:

$$\Delta E = h\nu = E_{fin} - E_{in}$$

IL MODELLO QUANTO-MECCANICO

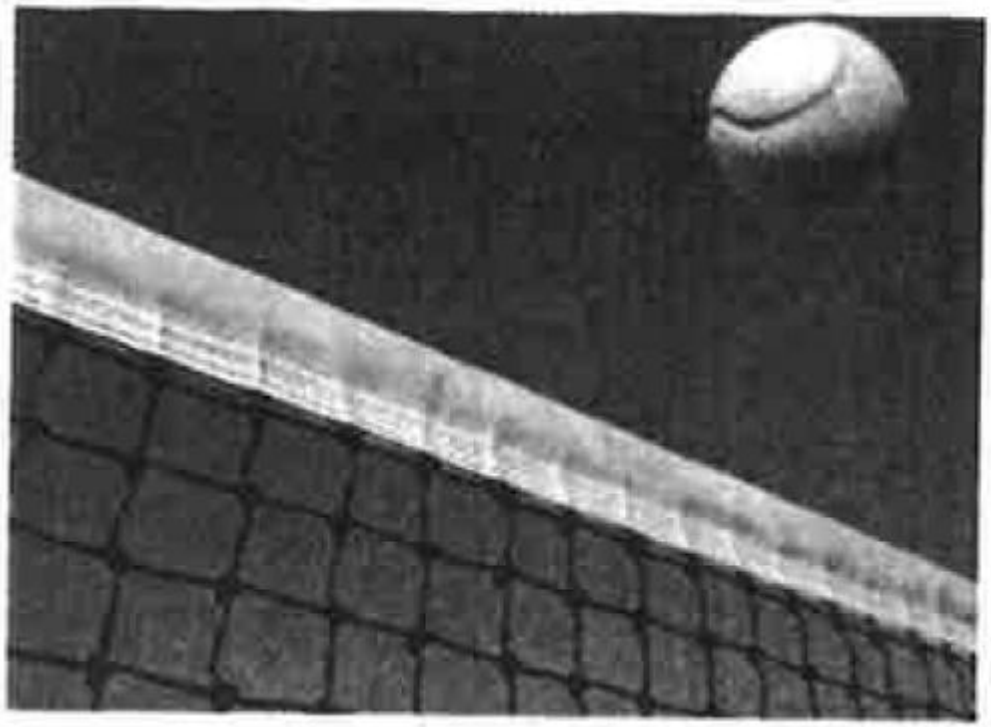
L’equazione di De Broglie e il dualismo onda-particella

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

IL MODELLO QUANTO-MECCANICO

Il principio di Indeterminazione di Heisenberg

E' impossibile conoscere contemporaneamente con precisione la posizione e l'energia di un elettrone.



IL MODELLO QUANTO-MECCANICO

L'equazione di De Broglie e il dualismo onda-particella

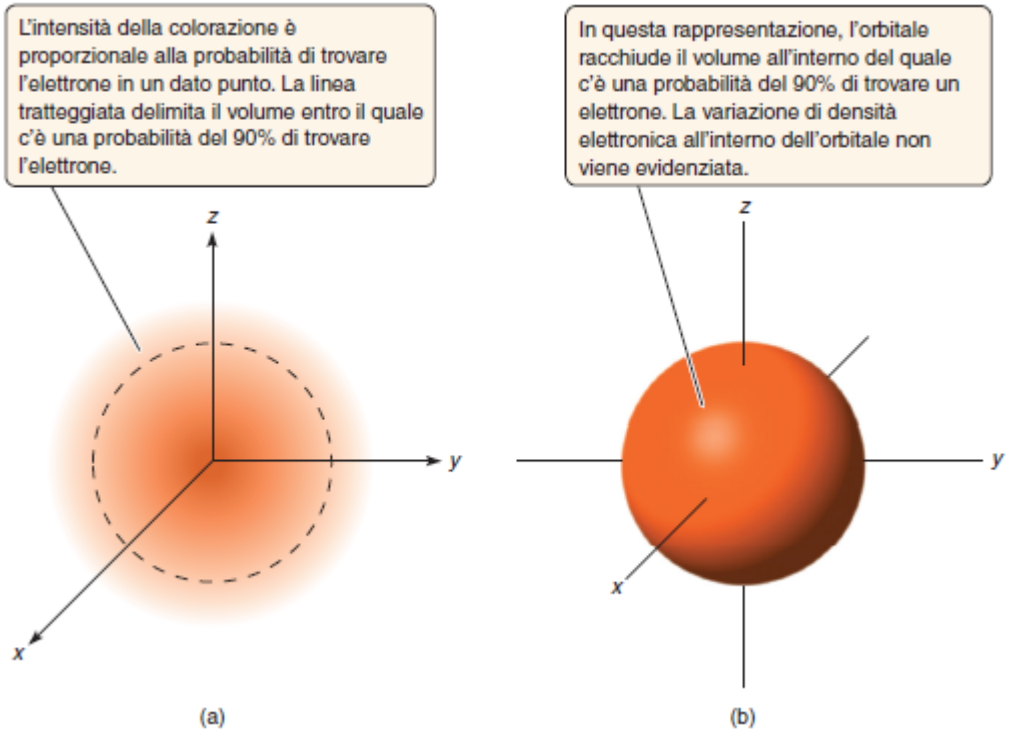
$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Il principio di Indeterminazione di Heisenberg

E' impossibile conoscere contemporaneamente con precisione la posizione e l'energia di un elettrone.

L'equazione di Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi$$



IL MODELLO QUANTO-MECCANICO

L'equazione di Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi$$

- **Solo certe funzioni d'onda sono possibili e a ciascuna di esse è associato un valore di energia: l'energia dell'elettrone è quantizzata;**
- **Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger per un elettrone nello spazio dipendono da 3 numeri interi, detti numeri quantici; solo certe combinazioni dei loro valori sono possibili;**
- **Il valore della funzione d'onda in un dato punto nello spazio è l'ampiezza dell'onda associata all'elettrone; questo valore possiede un segno che può essere negativo o positivo;**
- **Il quadrato della funzione d'onda è legato alla probabilità di trovare l'elettrone in una data zona di spazio, si chiama densità di probabilità o densità elettronica.**

I NUMERI QUANTICI

Numeri quantici : ciascun orbitale è definito da tre numeri quantici. Essi definiscono i livelli di energia e le forme degli orbitali

numero quantico principale *n*: definisce il livello d'energia o guscio che l'elettrone può occupare. Al 1 livello corrisponde $n = 1$ (stato di energia minima $\Rightarrow$ *stato fondamentale*), al 2 livello $n = 2$ *etc.* n può essere qualsiasi numero intero positivo.

$n = 1, 2, 3, 4, \ldots..$

numero quantico secondario *l*: (o di momento angolare) definisce la forma della regione di spazio che un elettrone può occupare. Il numero quantico l identifica un sottolivello d'energia. Può essere qualsiasi numero intero positivo tra 0 e n-1. Ciascun valore corrisponde ad una forma orbitalica.

$l = 0, 1, 2, 3, \ldots..(n\text{-}1)$

$l = 0 \Rightarrow$ orbitale *s*
$l = 1 \Rightarrow$ orbitale *p*
$l = 2 \Rightarrow$ orbitale *d*
$l = 3 \Rightarrow$ orbitale *f*

I NUMERI QUANTICI

numero quantico magnetico m_l: indica uno specifico orbitale all'interno del sottolivello. Gli orbitali di ogni sottolivello differiscono solo per l'orientamento nello spazio ma non per l'energia. Un sottostrato di numero quantico l sarà costituito da $2l + 1$ singoli orbitali di quel genere. m_l può essere qualsiasi numero intero tra $-l$ e $+l$

$$m_l = (-l), \ldots,0,\ldots.(+l)$$

TABELLA 4-8 *Valori consentiti dei numeri quantici fino ad* n = 4

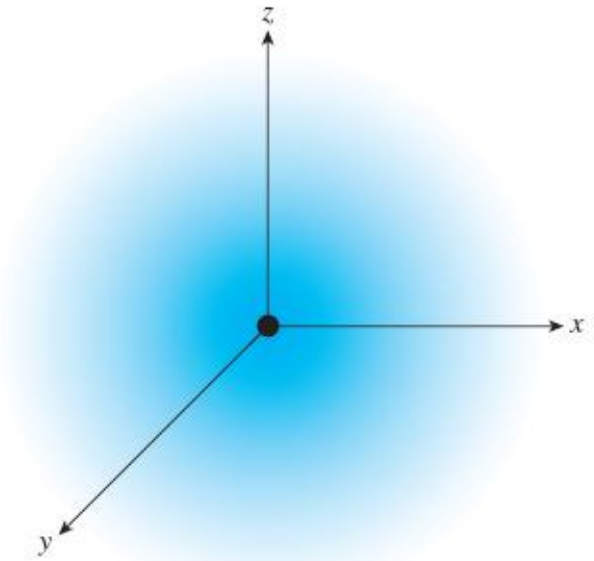
n	ℓ	m_ℓ	m_s	Numero massimo di elettroni in un sottolivello $= 4\ell + 2$	Numero massimo di elettroni per un livello energetico $= 2n^2$
1	0 (1*s*)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	2
2	0 (2*s*)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	8
	1 (2*p*)	−1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	6	
3	0 (3*s*)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	18
	1 (3*p*)	−1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	6	
	2 (3*d*)	−2, −1, 0, +1, +2	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	10	
4	0 (4*s*)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	32
	1 (4*p*)	−1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	6	
	2 (4*d*)	−2, −1, 0, +1, +2	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	10	
	3 (4*f*)	−3, −2, −1, 0, +1, +2, +3	$\pm\frac{1}{2}$ per ogni valore di m_ℓ	14	

GLI ORBITALI ATOMICI

Orbitale atomico = regione nello spazio nella quale esiste una elevata probabilità di trovare l'elettrone

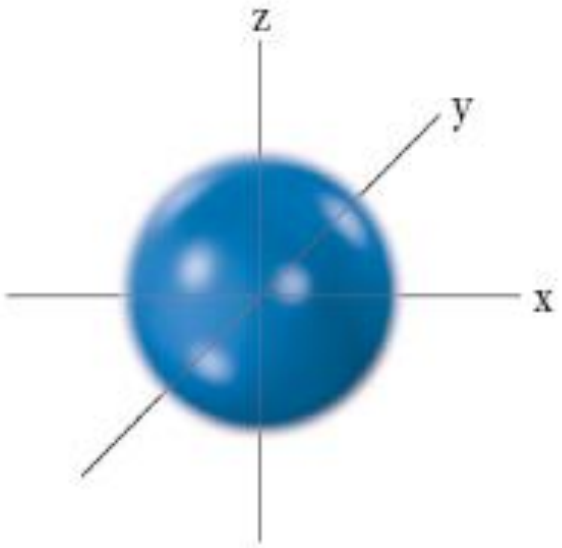
La collocazione dell'elettrone in un atomo si descrive tramite una nube di posizioni probabili. Le sagome più importanti di tali nubi sono quelle corrispondenti agli orbitali sferici, *s*, a quelli bilobati, ***p*** e agli orbitali ***d***.

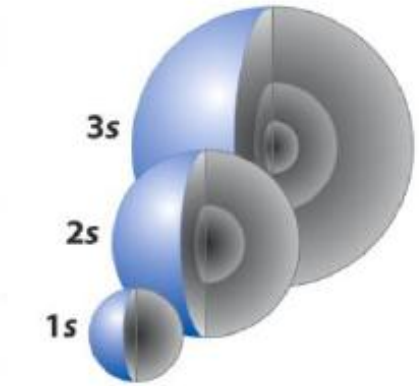
Ad ogni orbitale corrisponde un definito livello energetico



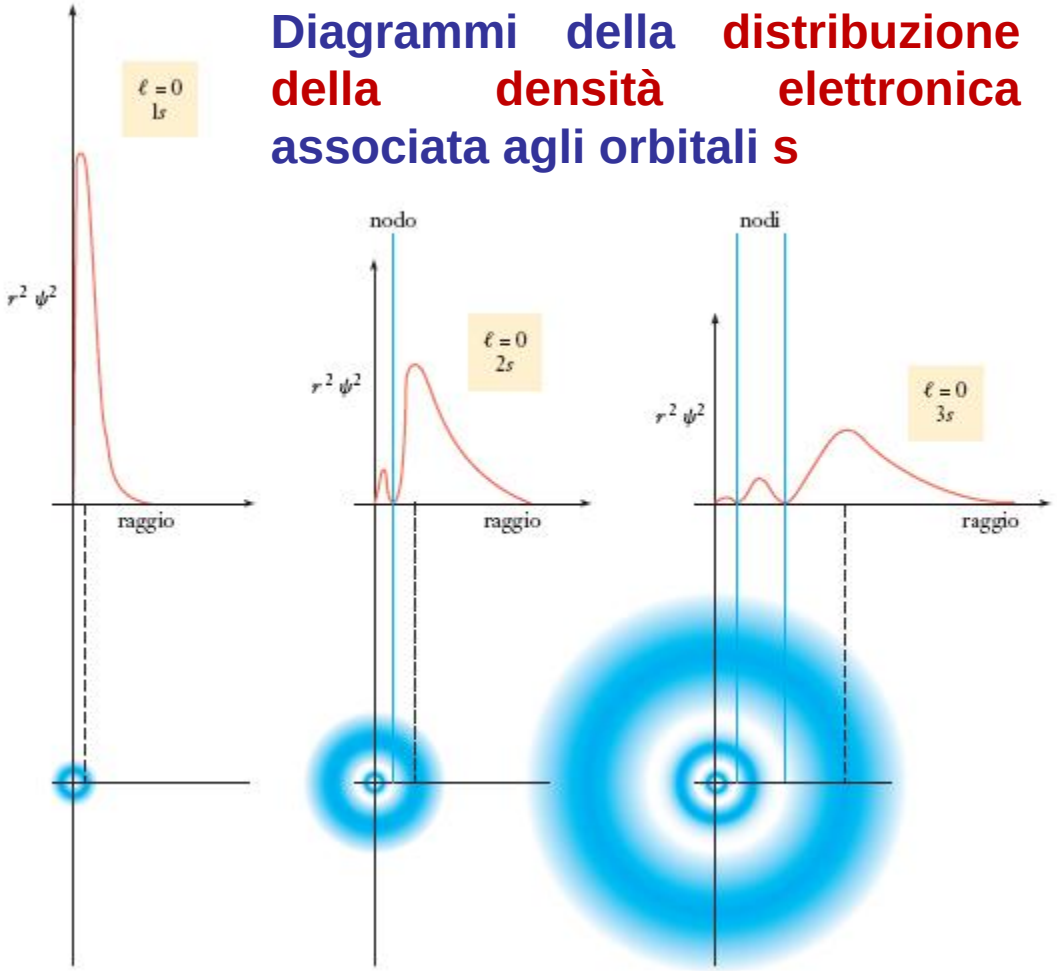
L'ORBITALE s

orbitale s { Possiede una simmetria sferica per cui la densità elettronica è la stessa indipendentemente dalla direzione che si considera partendo dal nucleo.





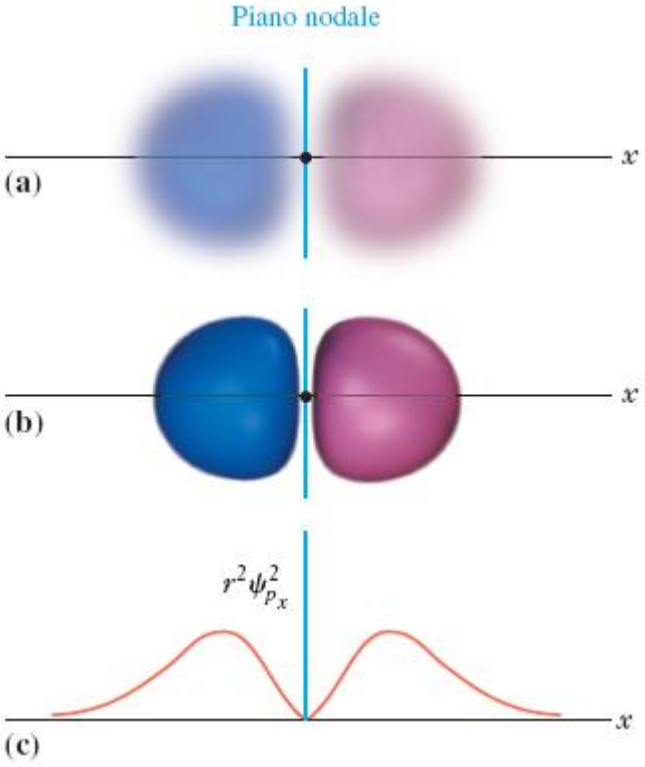
Diagrammi della distribuzione della densità elettronica associata agli orbitali s

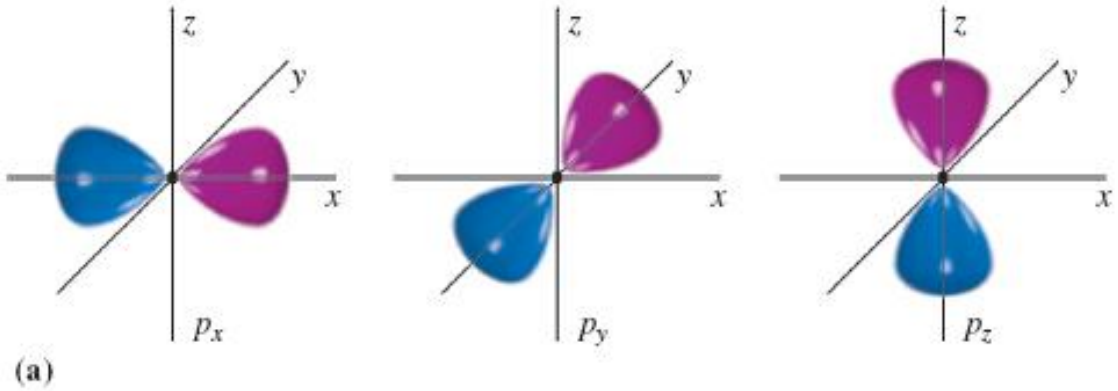


GLI ORBITALI p

orbitale *p*

Corrisponde a una nuvola dotata di due lobi ai lati opposti del nucleo. I lobi sono la regione di spazio in cui la probabilità di trovare l'elettrone è diversa da zero. I due lobi sono separati da una regione piana che chiamiamo **piano nodale** che taglia il nucleo. La probabilità di trovare l'elettrone nel piano nodale e quindi sul nucleo è nulla. La densità elettronica di un orbitale *p* non è la stessa in ogni direzione. Per una data energia esistono tre orbitali *p* orientati secondo tre assi perpendicolari: p_z, p_x, p_y



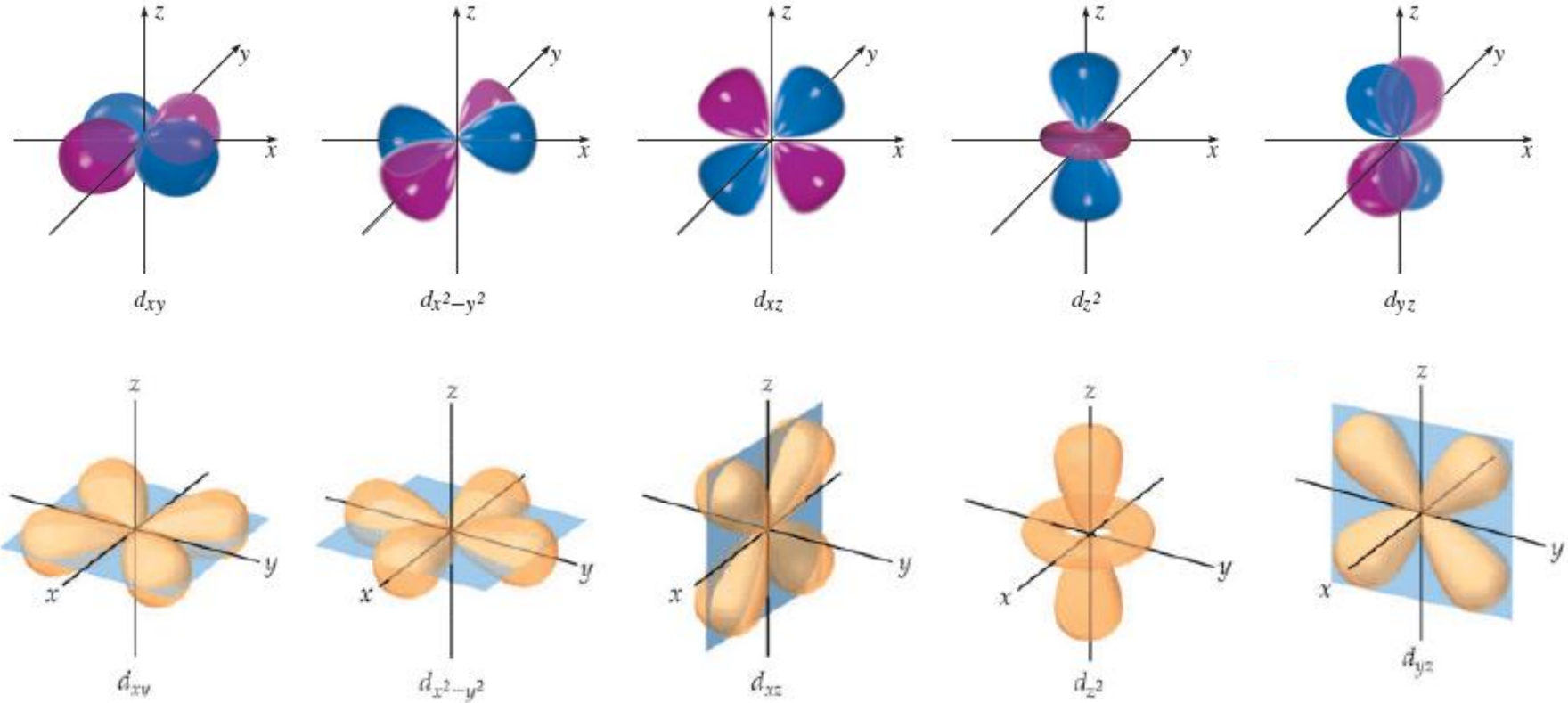


(a)

GLI ORBITALI d

orbitale *d*

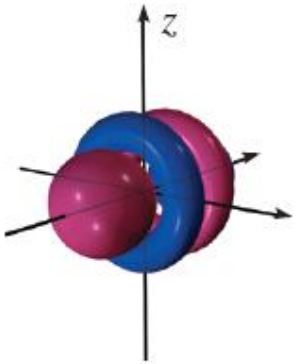
Anche gli orbitali ***d*** sono provvisti di piani nodali in cui la probabilità di trovare gli elettroni è nulla. Per una data energia esistono cinque orbitali ***d***: d_{yz}, d_{xz}, d_{xy}, $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2}. I lobi degli orbitali $d_{x^2-y^2}$ e d_{z^2} giacciono lungo gli assi, mentre i lobi degli altri orbitali sono lungo le bisettrici



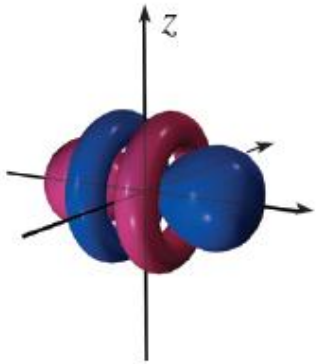
GLI ORBITALI f

orbitale *f*

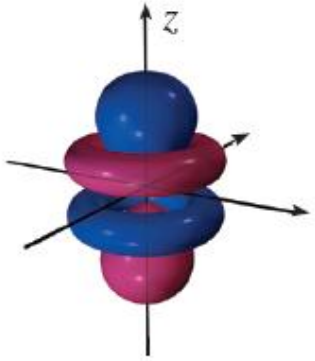
Anche gli orbitali ***f*** sono provvisti di piani nodali in cui la probabilità di trovare gli elettroni è nulla. Per una data energia esistono sette orbitali ***f***



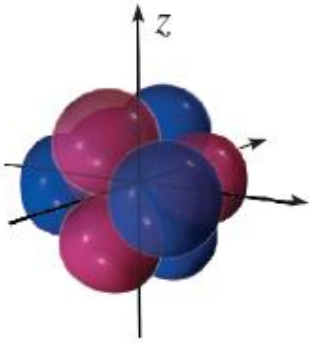
$f_{y^3} - \frac{3}{5} y r^2$



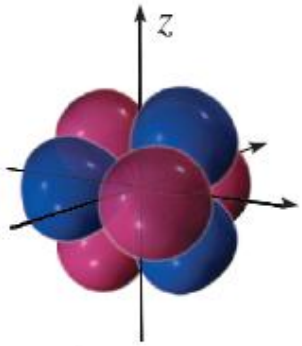
$f_{y^3} - \frac{3}{5} x r^2$



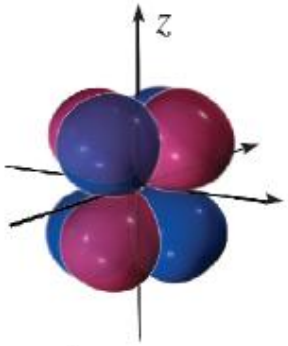
$f_{y^3} - \frac{3}{5} z r^2$



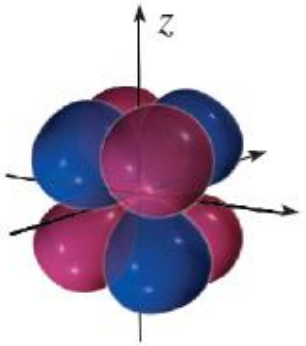
$f_y\ (x^2 - z^2)$



$f_x\ (z^2 - y^2)$



$f_z\ (x^2 - y^2)$



f_{xyz}

IL MODELLO QUANTO-MECCANICO

L'equazione di Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi$$

- **Ogni soluzione dell'equazione di Schrödinger descrive un possibile stato energetico dell'elettrone dentro l'atomo;**
- **Ogni soluzione dell'equazione di Schrödinger è definita da un insieme di numeri quantici;**
- **Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger danno informazioni anche sulla forma e l'orientazione delle probabilità di densità elettronica che sono espresse in termini dei cosiddetti orbitali atomici;**
- **Gli orbitali atomici sono definiti dai numeri quantici;**
- **Un orbitale atomico è una regione di spazio in cui si ha un'elevata probabilità di trovare un elettrone.**

GLI ORBITALI

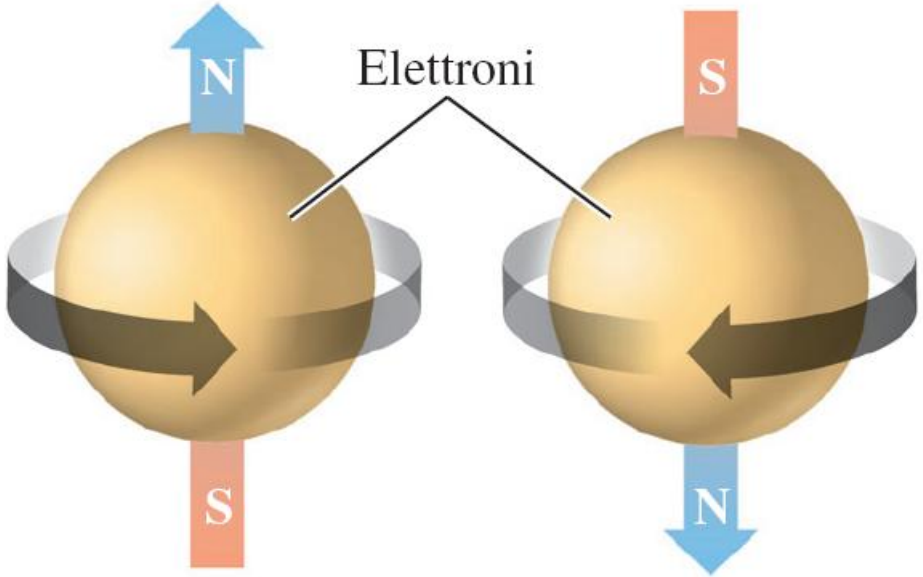


I NUMERI QUANTICI

numero quantico di spin m_s: si riferisce alla rotazione su se stesso di un elettrone

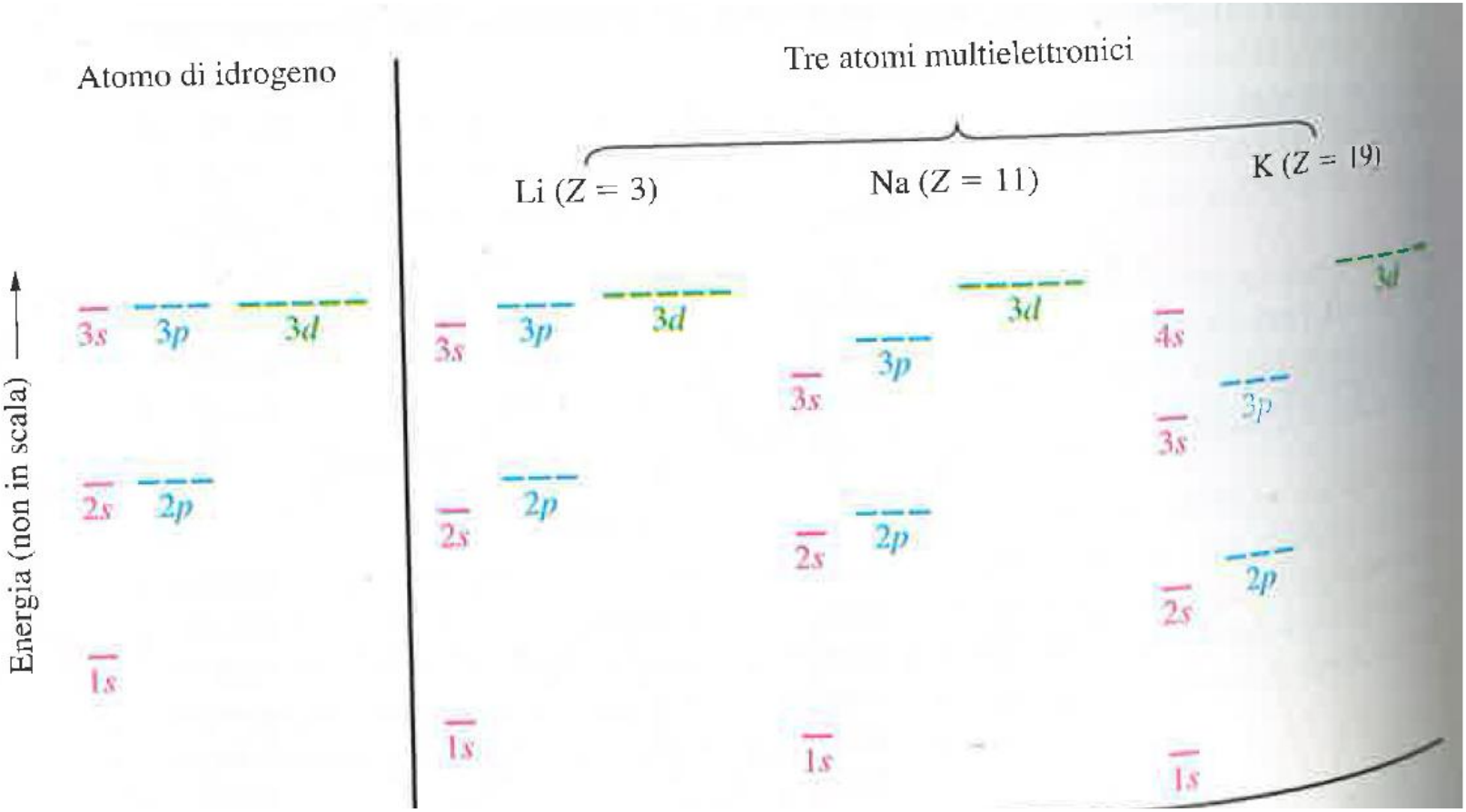
$$m_s = \pm 1/2$$

L'elettrone è in grado di ruotare su se stesso in senso orario o in senso antiorario alla stessa velocità (**spin**).
m_s può essere +1/2 o -1/2

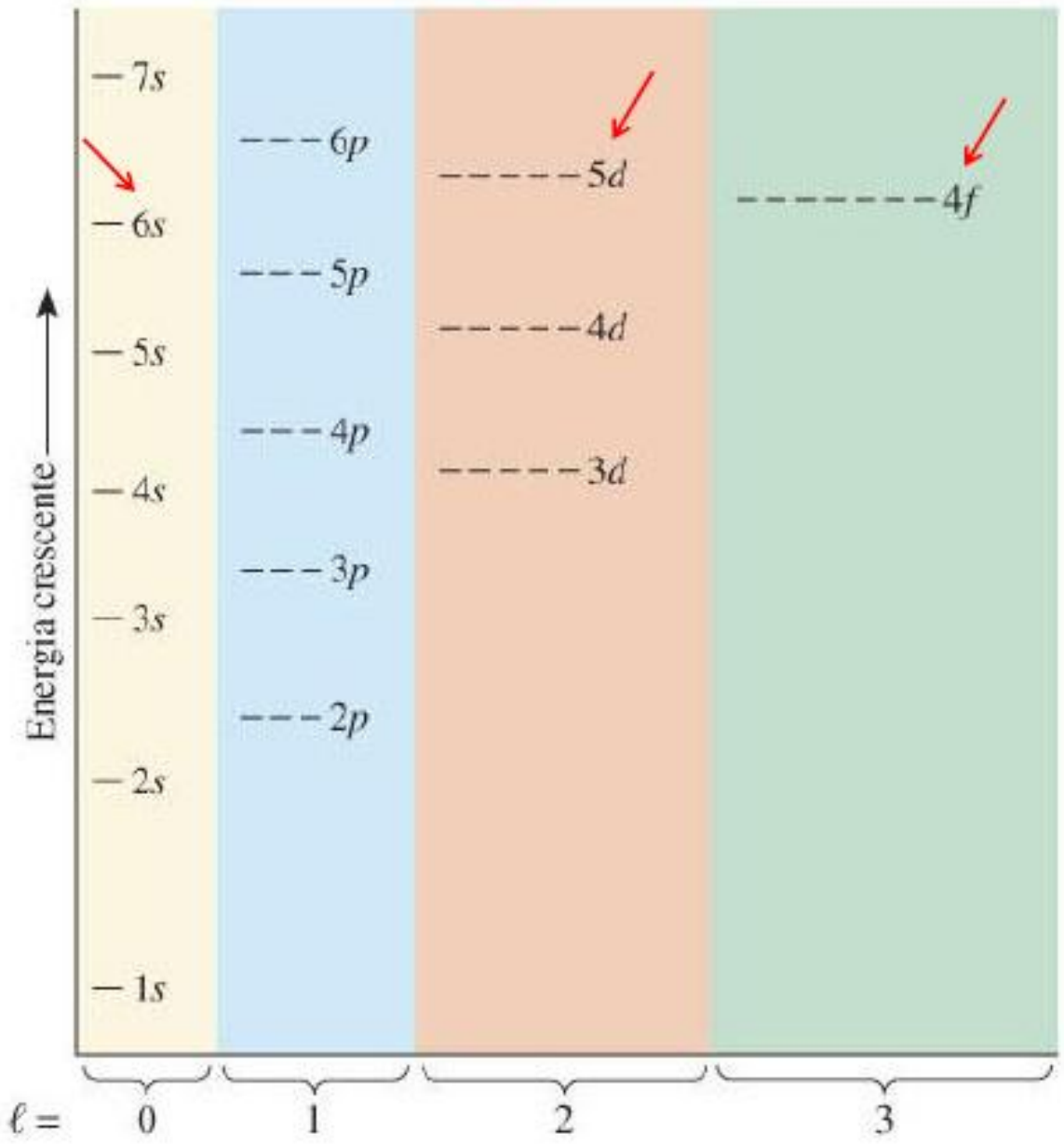


$$m_s = +\frac{1}{2} \qquad m_s = -\frac{1}{2}$$

L'ENERGIA DEGLI ORBITALI



L'ENERGIA DEGLI ORBITALI



CONFIGURAZIONE ELETTRONICA

Nello **stato fondamentale** di un atomo multielettronico gli elettroni occupano gli orbitali atomici in maniera tale che l'energia totale dell'atomo sia la minima possibile

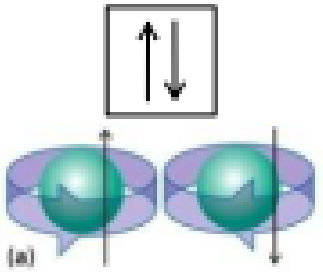
Principio di Aufbau

- ✓Inserire il numero appropriato di protoni e neutroni nel nucleo come specificato dal numero atomico (**Z**) e dal numero di massa (**A**)
- ✓Inserire il numero necessario di elettroni negli orbitali in modo che si abbia la minima energia totale possibile

$${}^{A}_{Z}X$$

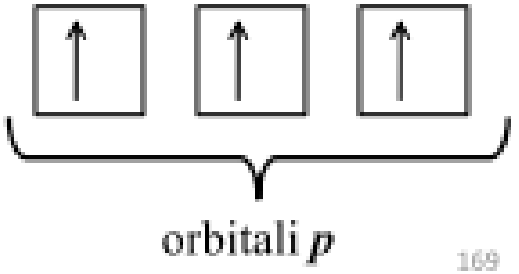
Principio di esclusione di Pauli

Non è possibile che più di due elettroni occupino il medesimo orbitale. Quando lo fanno i loro spin debbono appaiarsi

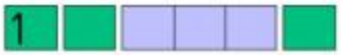


Regala di Hund

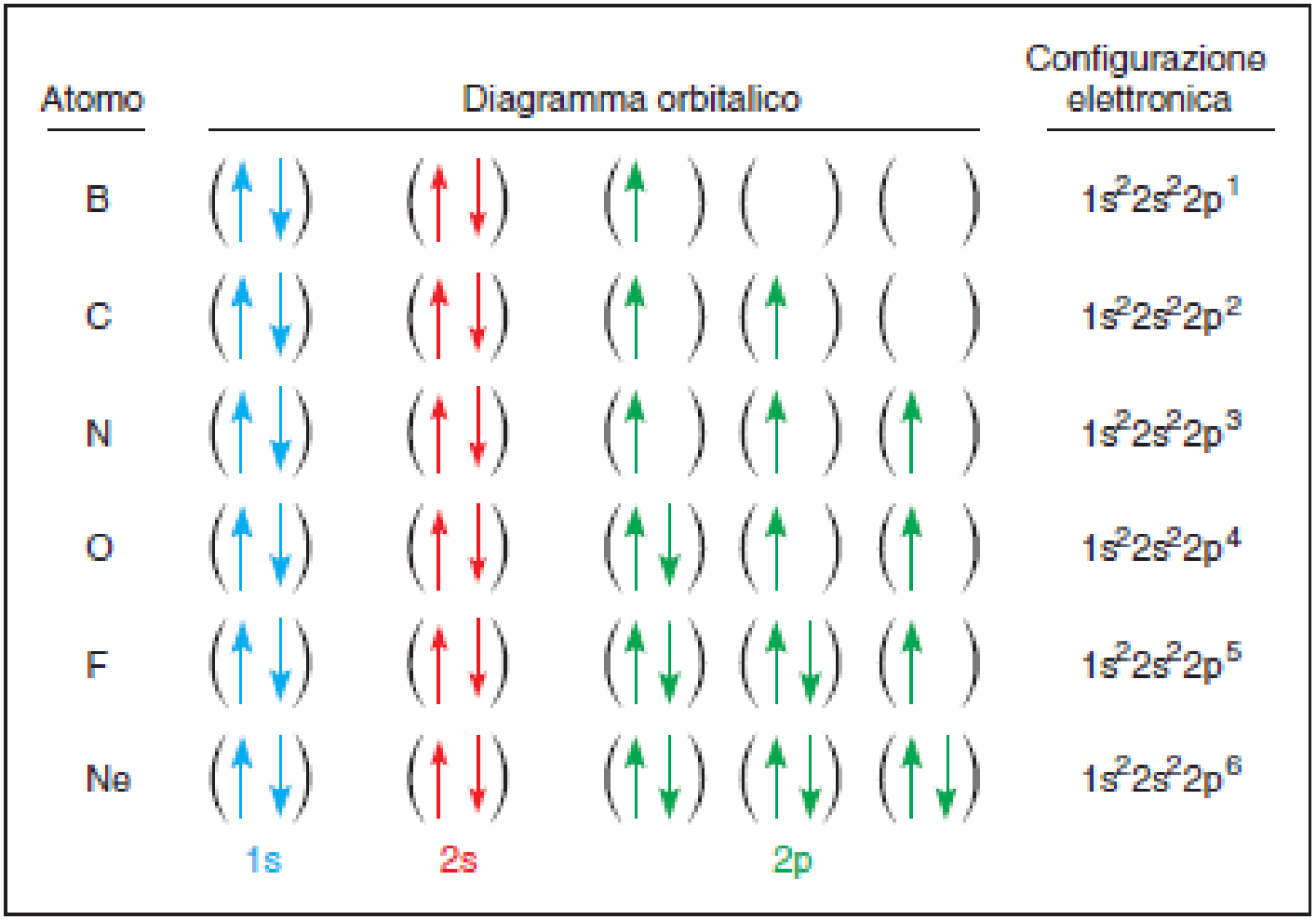
Gli elettroni occupano tutti gli orbitali di un determinato sottolivello prima di accoppiarsi. Questi elettroni spaiati hanno spin paralleli



CONFIGURAZIONE ELETTRONICA

Elemento	N. tot. elettr.	AufBau	Notazione spettroscopica
		1*s* 2*s* 2*p* 3*s*	
H	1		$1s^1$

CONFIGURAZIONE ELETTRONICA



Video: **Orbital names**

Video: **Electron configuration**

La tavola periodica

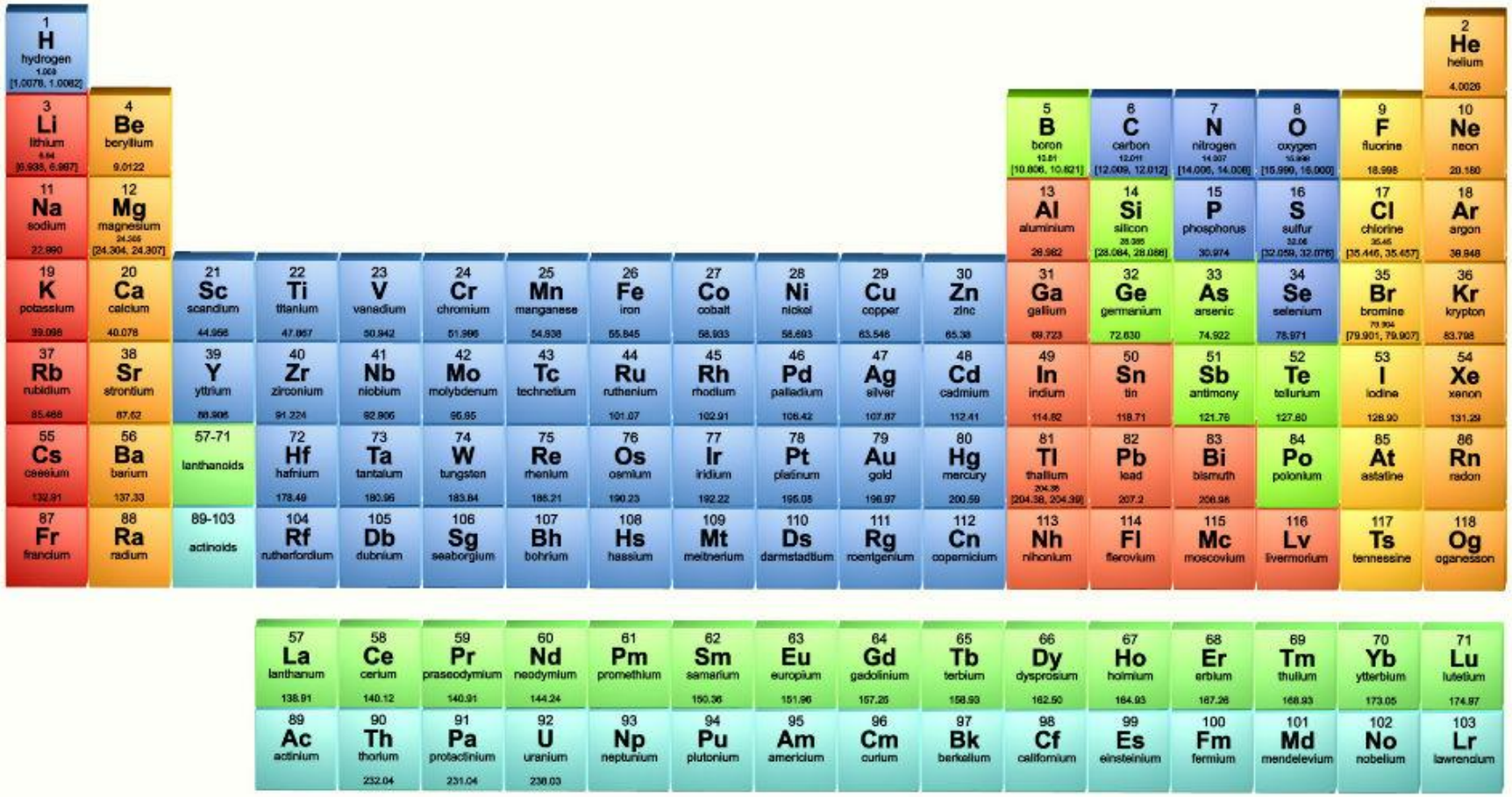
http://www.rsc.org/periodic-table/

http://www.webelements.com/

https://www.youtube.com/watch?v=I5H1SeepnaU (History of Periodic Table)

https://www.youtube.com/watch?v=fPnwBITSmgU (La genialità della tavola periodica di Mendeleev)

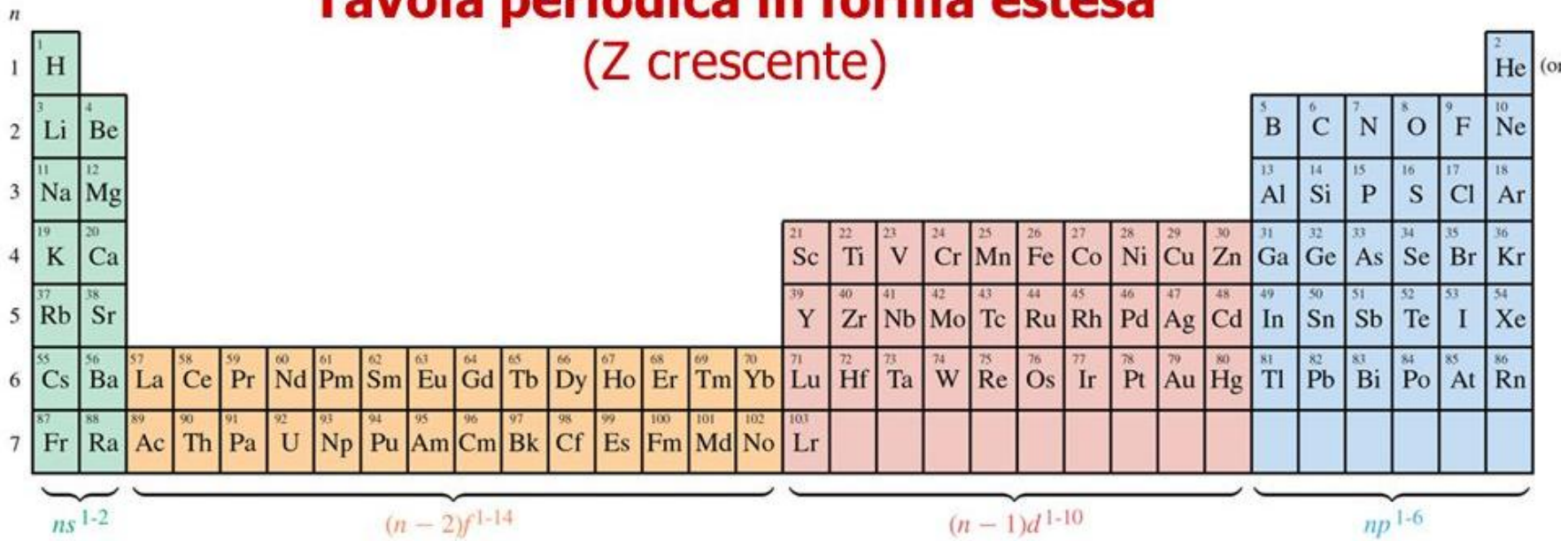
La tavola periodica compatta completa



Video: Periodic Table

Tavola periodica in forma estesa

(Z crescente)



Ad ogni periodo è associato un valore di n; il numero di elementi per periodo corrisponde al numero di elettroni che può essere ospitato nel set di orbitali con quel numero quantico n. Il primo periodo ha solo due elementi perchè l'orbitale 1s può allocare solo due elettroni; il secondo periodo ha 8 elementi perché l'orbitale 2s alloca 2 elettroni e gli orbitali 2p allocano fino a 6 elettroni; il terzo periodo ha 8 elementi, perché gli orbitali 3d si riempono solo successivamente ecc.

La tavola periodica compatta

TABELLA 4-5 *La tavola periodica*

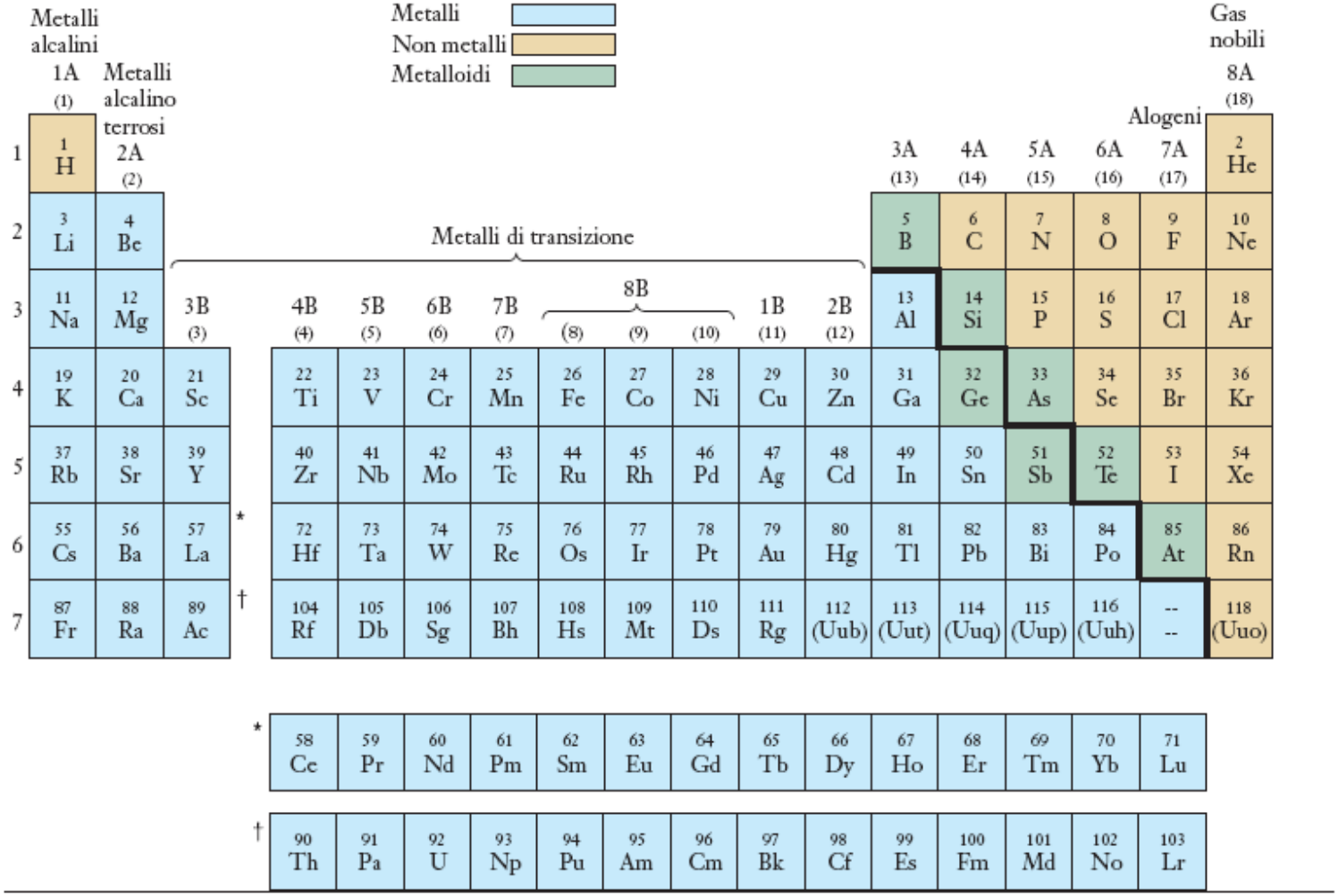


TABELLA 4-6 *Alcune proprietà fisiche dei metalli e non metalli*

Metalli	Non metalli
1. Elevata conducibilità elettrica, che diminuisce all'aumentare della temperatura	1. Bassa conducibilità elettrica (eccetto il carbonio nella forma della grafite)
2. Elevata conducibilità termica	2. Buoni isolanti termici (eccetto il carbonio)
3. Grigio metallici o lucentezza argentea*	3. Nessuna lucentezza metallica
4. Quasi tutti solidi†	4. Solidi, liquidi, o gas
5. Malleabili (possono essere ridotti in lamine)	5. Fragili allo stato solido
6. Duttili (possono essere ridotti in fili)	6. Non duttili

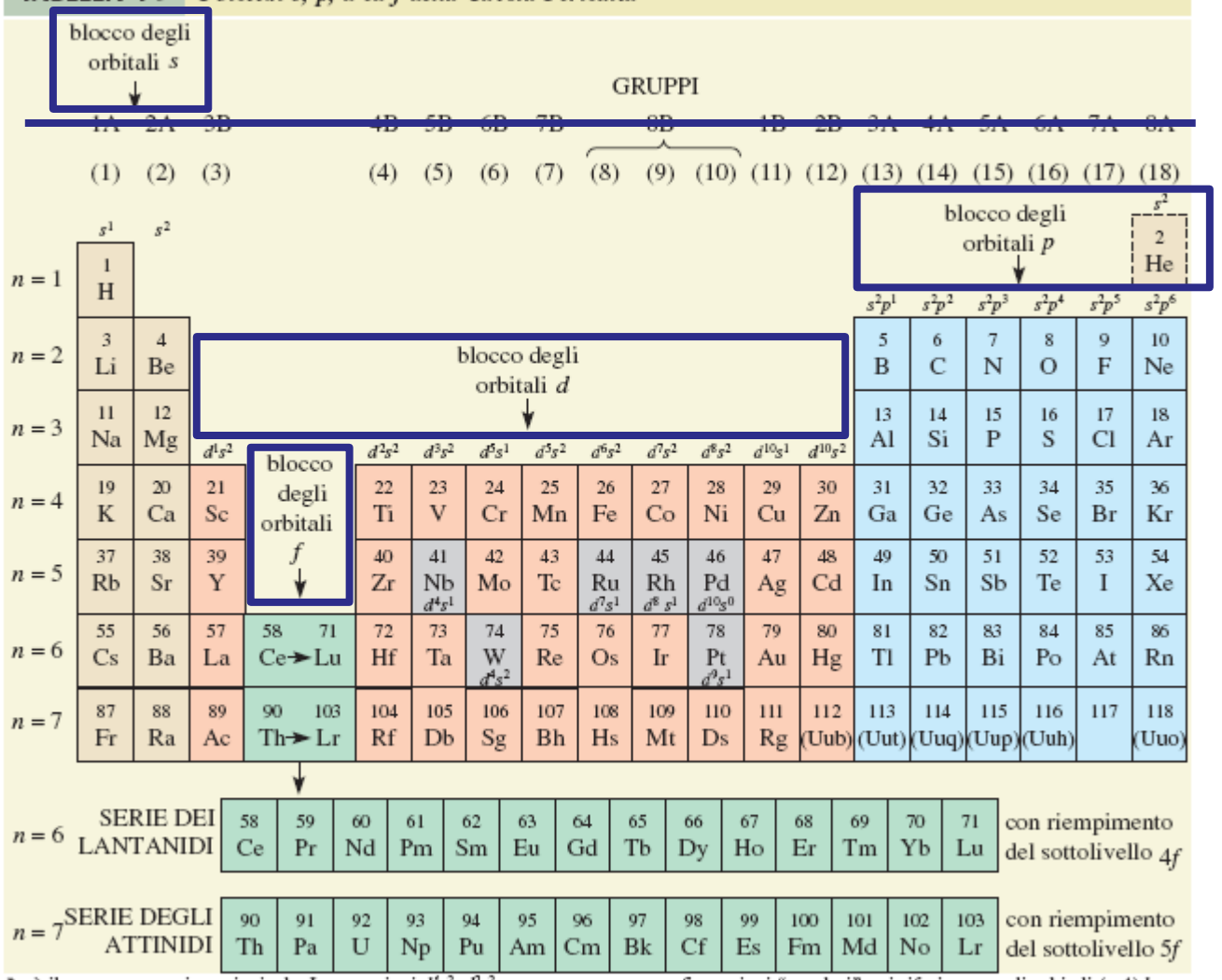
* Eccetto rame ed oro
† Eccetto il mercurio; cesio e gallio fondono con il calore della mano (opportunamente protetta).

TABELLA 4-7 *Alcune proprietà chimiche dei metalli e non metalli*

Metalli	Non metalli
1. I gusci esterni contengono pochi elettroni – generalmente tre o meno	1. I gusci esterni contengono quattro o più elettroni*
2. Formano cationi (ioni positivi) per perdita di elettroni	2. Formano anioni (ioni negativi) per acquisto di elettroni†
3. Formano composti ionici con i non metalli	3. Formano composti ionici con i metalli† e composti molecolari (covalenti) con i non metalli
4. Lo stato solido è caratterizzato dal legame metallico	4. Molecole legate covalentemente; i gas nobili sono monoatomici

* *Eccetto idrogeno ed elio.*
† *Eccetto i gas nobili*

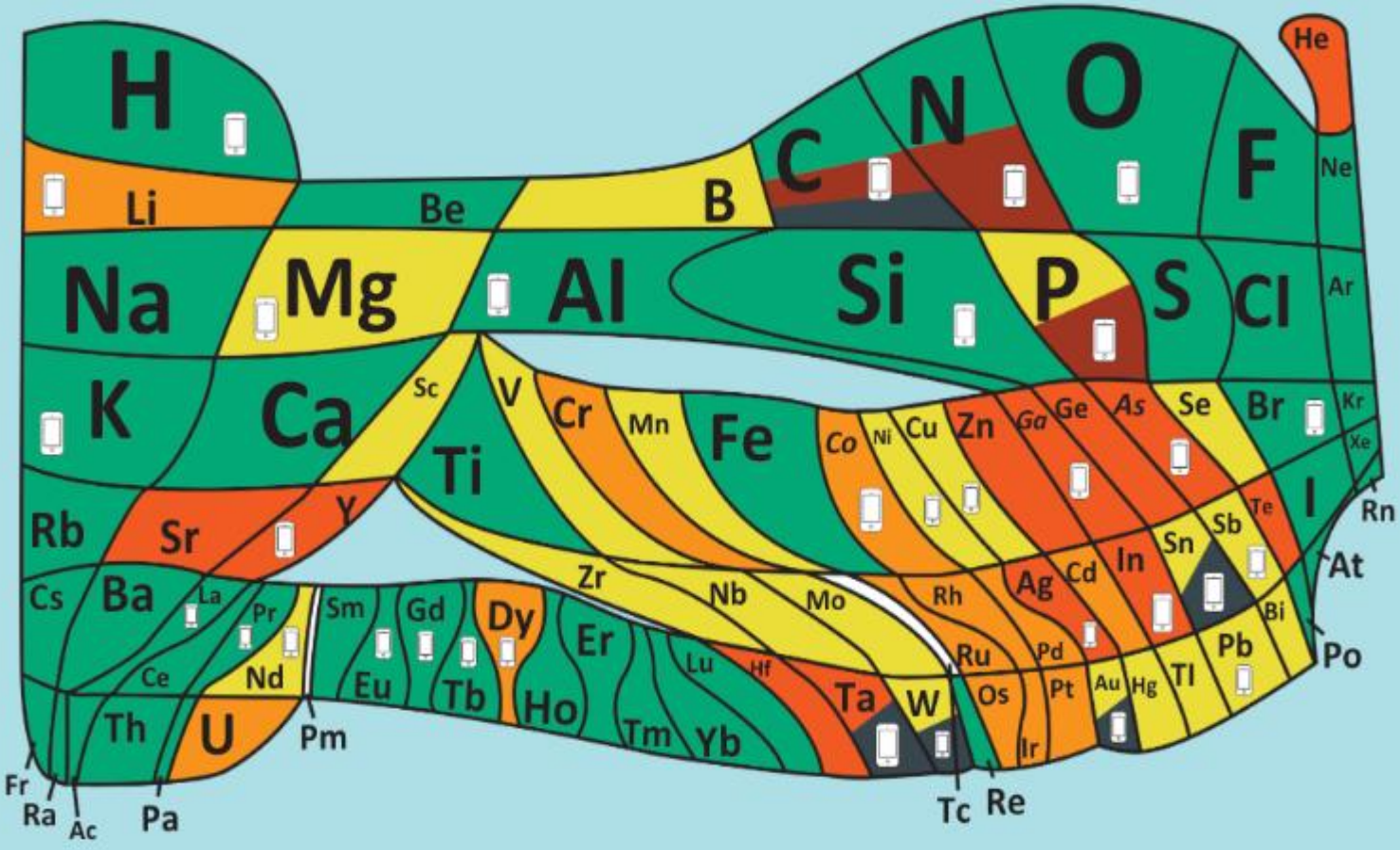
TABELLA 4-9 *I blocchi s, p, d ed f della Tavola Periodica**



* *n* è il numero quantico principale. Le notazioni d^1s^2, d^2s^2, ...rappresentano configurazioni "regolari" e si riferiscono agli orbitali $(n-1)d$ e ns. Diverse eccezioni alle configurazioni indicate sopra ogni gruppo sono evidenziate in grigio.

I 90 elementi naturali che compongono tutto.

Quanto abbiamo a disposizione? E' abbastanza? E' sostenibile?



Disponibilità

- A grave rischio entro i prossimi 100 anni.
- Rischio crecente dovuto all'aumento di impiego.
- Disponibilità limitata, a rischio in futuro.
- Piena disponibilità.
- Di sintesi

Sostenibilità

- Seri problemi globali a causa del largo uso.
- Risorse provenienti da zone di conflitto

- Elementi presenti nello smartphone.

Leggi di più e gioca al videogioco http://bit.ly/euchems-pt.

edizione 2.0 (2023)

Opera è rilasciata con licenza Creative Commons Attribution-NoDerivs CC-BY-ND

EuChemS
European Chemical Society

PROPRIETA' PERIODICHE DEGLI ELEMENTI

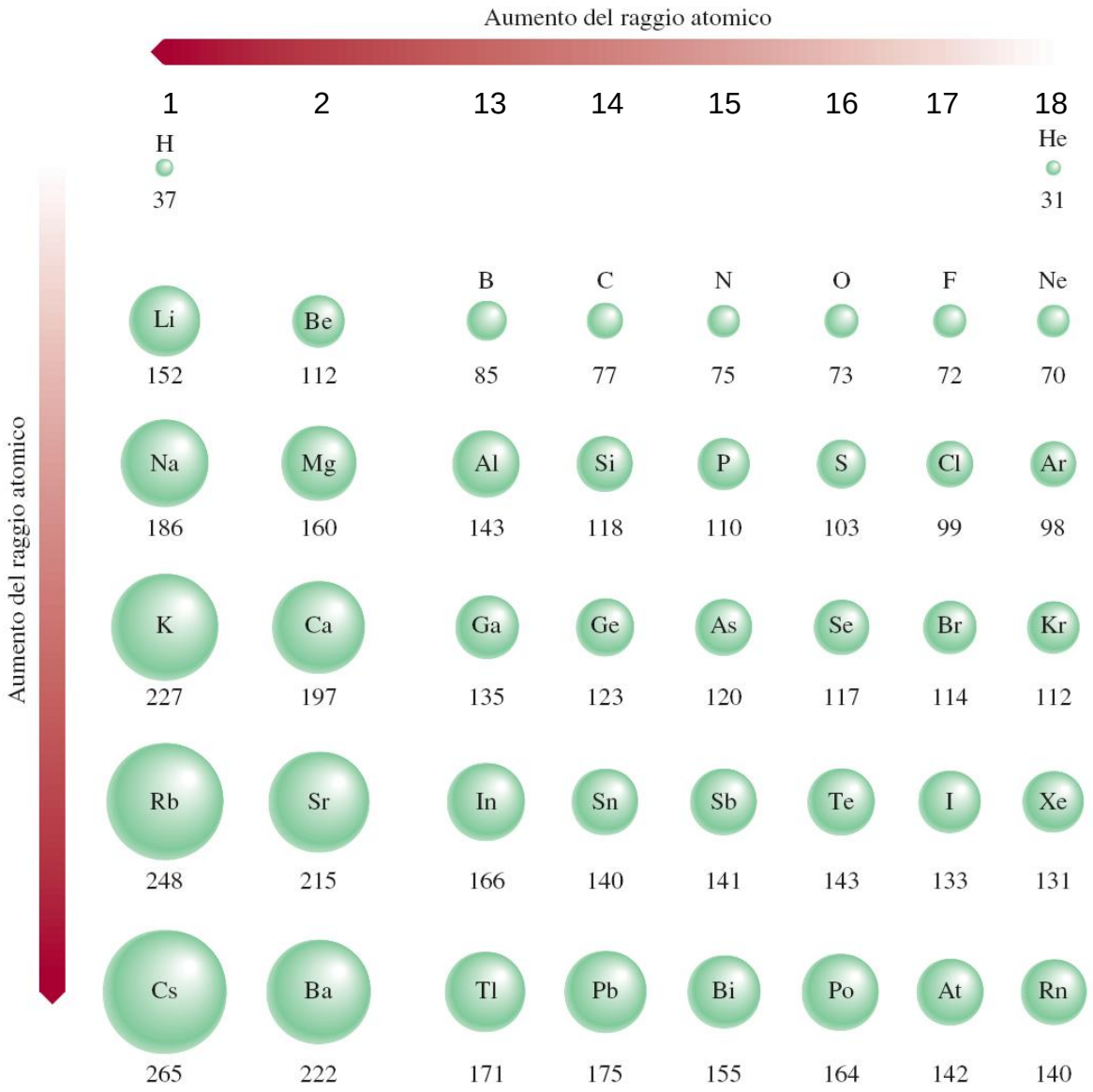
Le proprietà chimiche degli elementi dipendono essenzialmente dagli **elettroni di valenza** e cioè dagli elettroni dei gusci più esterni. Queste proprietà possono essere predette osservando la loro posizione all'interno della tavola periodica che ordina gli elementi secondo il numero atomico e quindi secondo il numero di elettroni.

Proprietà periodiche degli elementi

- Raggio atomico
- Raggio ionico
- Energia di ionizzazione (EI)
- Affinità elettronica (EA)
- Elettronegatività

RAGGIO ATOMICO

Misurato in pm

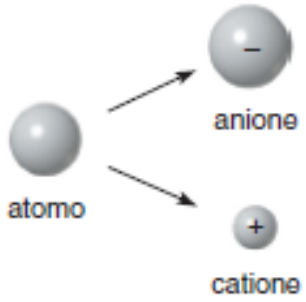


Video: Atom size

RAGGIO ATOMICO e RAGGIO IONICO

Misurato in Å

1	2	13	15	16	17
Li 1.52 / Li^+ 0.90	Be 1.12 / Be^{2+} 0.59		N 0.75 / N^{3-} 1.71	O 0.73 / O^{2-} 1.26	F 0.72 / F^- 1.19
Na 1.86 / Na^+ 1.16	Mg 1.60 / Mg^{2+} 0.85	Al 1.43 / Al^{3+} 0.68		S 1.03 / S^{2-} 1.70	Cl 1.00 / Cl^- 1.67
K 2.27 / K^+ 1.52	Ca 1.97 / Ca^{2+} 1.14	Ga 1.35 / Ga^{3+} 0.76		Se 1.19 / Se^{2-} 1.84	Br 1.14 / Br^- 1.82
Rb 2.48 / Rb^+ 1.66	Sr 2.15 / Sr^{2+} 1.32	In 1.67 / In^{3+} 0.94		Te 1.42 / Te^{2-} 2.07	I 1.33 / I^- 2.06
Cs 2.65 / Cs^+ 1.81	Ba 2.22 / Ba^{2+} 1.49	Tl 1.70 / Tl^{3+} 1.03			



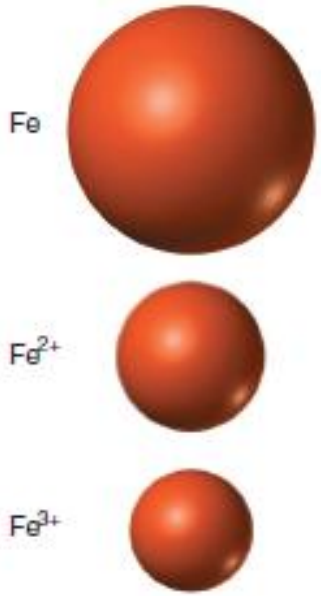
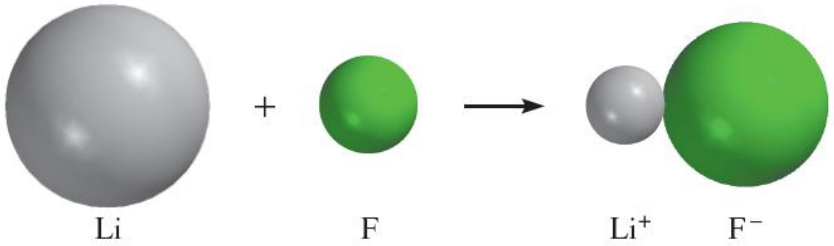


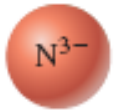
Figura 6.14
Dimensioni relative dell'atomo di ferro e dei suoi ioni.



1.52 Å **0.72 Å** **0.90 Å** **1.19 Å**

IONI ISOELETTRONICI

Una serie isoelettronica di ioni

						
Raggio ionico (Å)	1.71	1.26	1.19	1.16	0.85	0.68
Num. di elettroni	10	10	10	10	10	10
Carica nucleare	7+	8+	9+	11+	12+	13+

ENERGIA DI IONIZZAZIONE

Energia di prima ionizzazione (EI) = la minima quantità di energia necessaria a rimuovere l'elettrone più debolmente legato da un atomo gassoso isolato per formare uno ione con carica 1+

$$A_{(g)} \rightarrow A^{+}_{(g)} + e^{-}$$

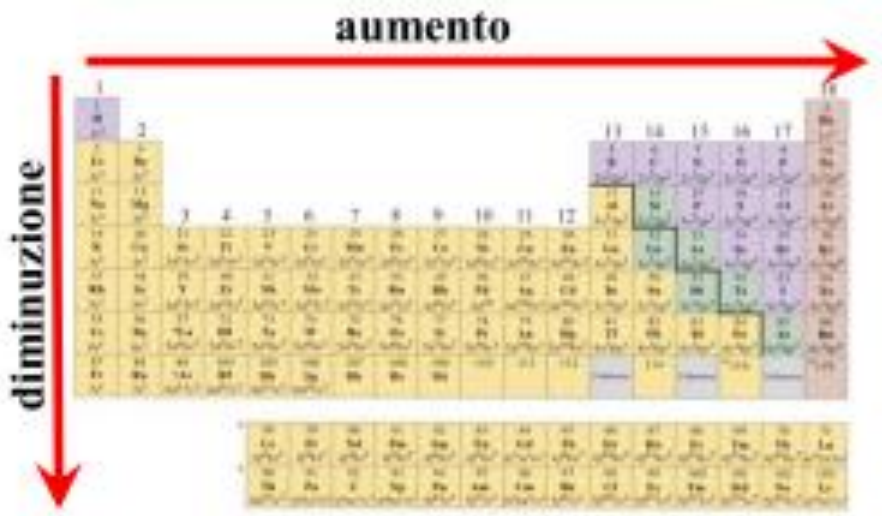
Energia di seconda ionizzazione (EI_2) = la minima quantità di energia necessaria a rimuovere l'elettrone più debolmente legato da un catione a carica unitaria per formare uno ione con carica 2+

$$A^{+}_{(g)} \rightarrow A^{2+}_{(g)} + e^{-}$$

$EI << EI_2$



ENERGIA DI IONIZZAZIONE



L'energia di prima ionizzazione diminuisce generalmente discendendo lungo un gruppo ed aumenta procedendo lungo un periodo da sinistra verso destra

L'energia di prima ionizzazione diminuisce discendendo lungo un gruppo perché gli elettroni occupano sempre gusci più esterni e sono di conseguenza sempre meno legati al nucleo.

L'energia di prima ionizzazione aumenta procedendo lungo un periodo da sinistra a destra perché la carica nucleare aumenta e gli elettroni occupando sempre uno stesso livello sono sempre più fortemente attratti dal nucleo.

ENERGIA DI IONIZZAZIONE

TABELLA 5-1 *Energie di prima ionizzazione (kJ/mole di atomi) di alcuni elementi*

H 1312																He 2372
Li 520	Be 899											B 801	C 1086	N 1402	O 1314	F 1681	Ne 2081
Na 496	Mg 738											Al 578	Si 786	P 1012	S 1000	Cl 1251	Ar 1521
K 419	Ca 599	Sc 631	Ti 658	V 650	Cr 652	Mn 717	Fe 759	Co 758	Ni 757	Cu 745	Zn 906	Ga 579	Ge 762	As 947	Se 941	Br 1140	Kr 1351
Rb 403	Sr 550	Y 617	Zr 661	Nb 664	Mo 685	Tc 702	Ru 711	Rh 720	Pd 804	Ag 731	Cd 868	In 558	Sn 709	Sb 834	Te 869	I 1008	Xe 1170
Cs 377	Ba 503	La 538	Hf 681	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 880	Pt 870	Au 890	Hg 1007	Tl 589	Pb 715	Bi 703	Po 812	At 890	Rn 1037

AFFINITA' ELETTRONICA

