

Struttura elettronica degli atomi (1)

Natura discontinua dell'energia: numeri quantici

$$E = h\nu \quad (\text{equazione di Einstein})$$

$$h = 6.626076 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad (\text{costante di Planck})$$

Indeterminazione nella determinazione di posizione e quantità di moto di un particella: equazione d'onda. Densità di probabilità.

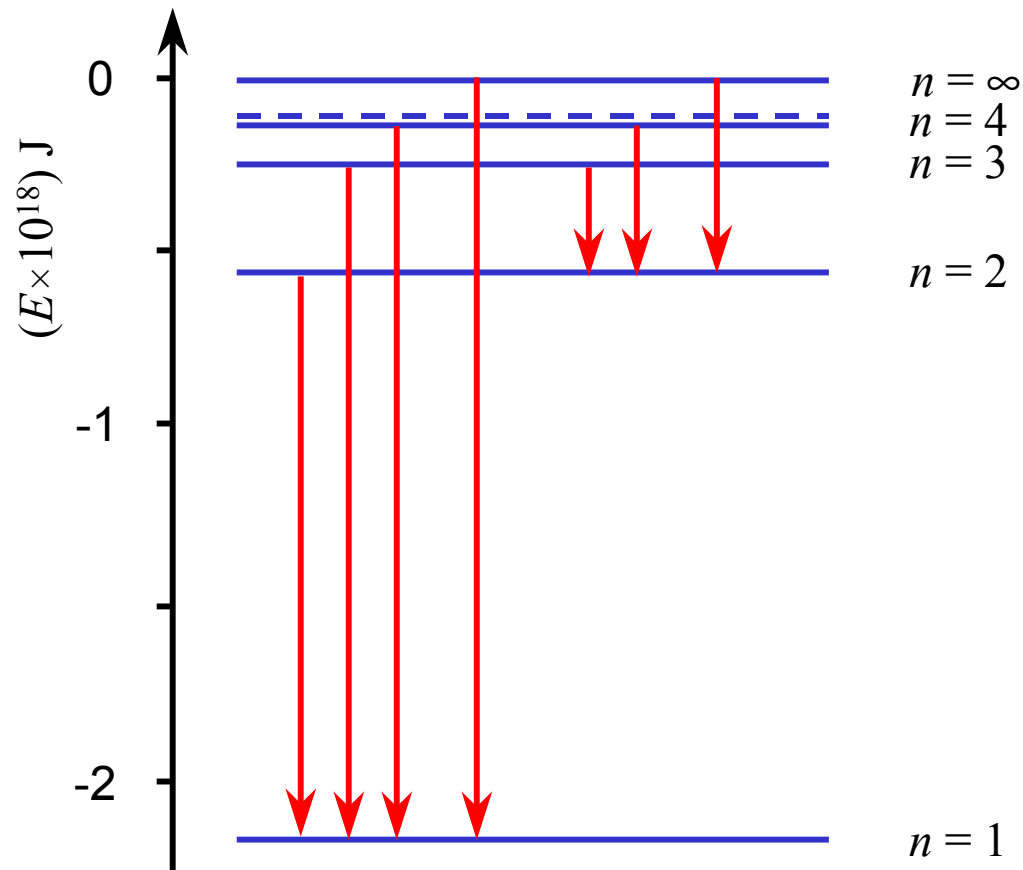
$$\psi = \frac{e^{-\frac{r}{a_0}}}{\sqrt{\pi a_0^3}} \quad [\text{\AA}^{-3/2}] \quad \psi^2 = \frac{e^{-\frac{2r}{a_0}}}{\pi a_0^3} \quad [\text{\AA}^{-3}]$$

$$a_0 = 0.529177 \text{ \AA} \quad (\text{raggio di Bohr})$$

Struttura elettronica degli atomi (2)

$$E = -\frac{1}{n^2} 2.17872 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$\Delta E = E_2 - E_1$$



Alcuni livelli energetici dell'atomo di idrogeno. Le frecce rosse indicano alcune delle possibili transizioni, corrispondenti ad emissioni di energia.

Struttura elettronica degli atomi (3)

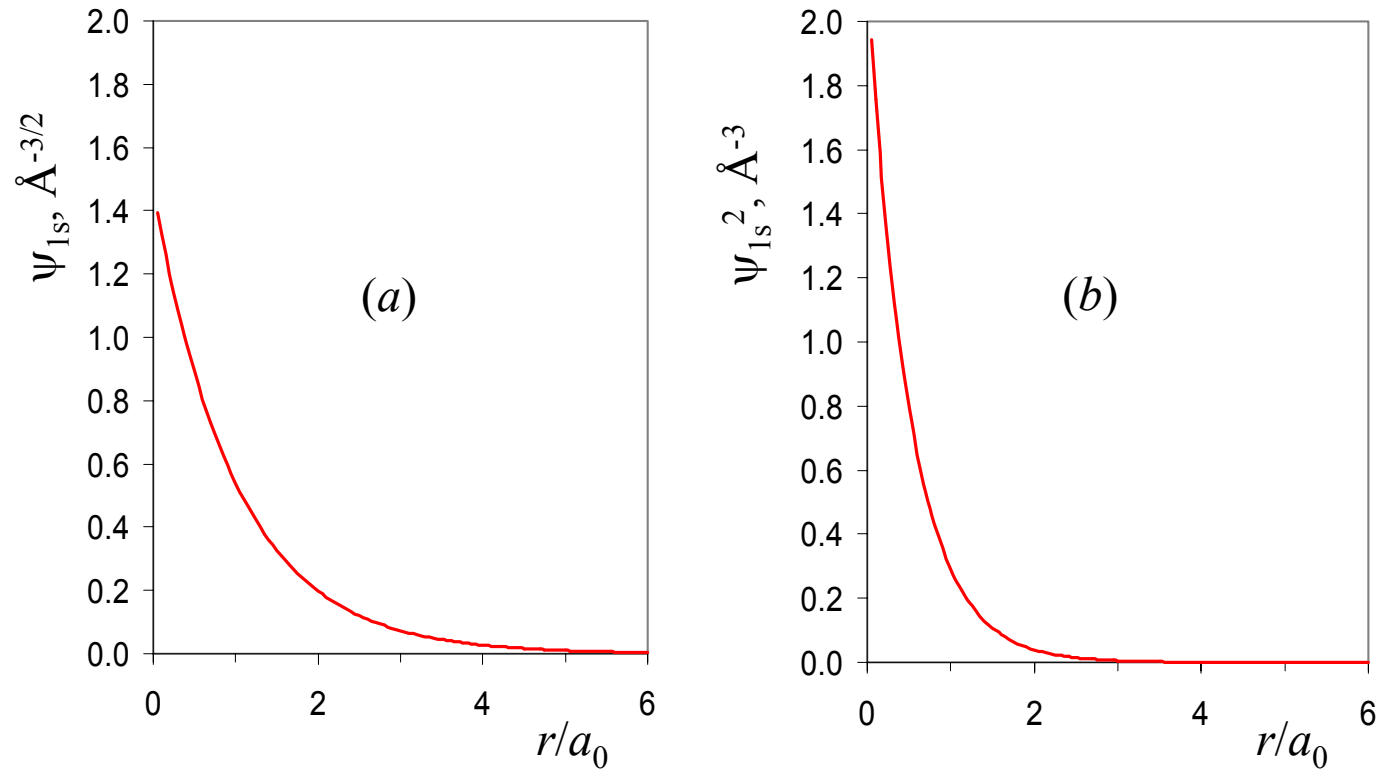
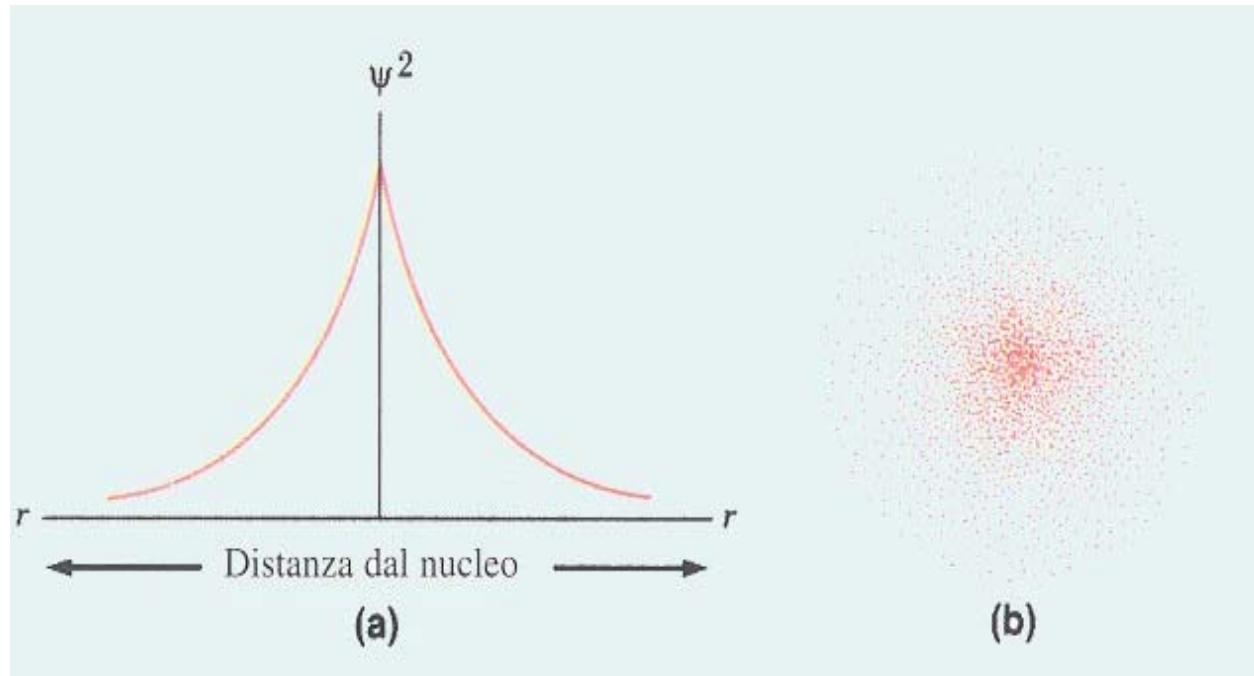


Grafico della funzione ψ_{1s} (a) e ψ_{1s}^2 (b) per l'atomo di idrogeno

Struttura elettronica degli atomi (4)



Due modi per rappresentare la densità elettronica per l'orbitale 1s: (a) la funzione ψ^2 riportata in funzione della distanza dal nucleo; (b) un insieme di punti rappresentante la distribuzione di probabilità in un piano con il nucleo al centro. Più i punti sono vicini e maggiore è la probabilità di trovare l'elettrone.

Struttura elettronica degli atomi (5)



Un modo ulteriore per rappresentare geometricamente la densità elettronica per l'orbitale 1s: Si tratta di una sfera (a) il cui centro corrisponde con il nucleo dell'atomo; (b) che contiene complessivamente il 90% della nuvola elettronica ; (c) i punti della cui superficie hanno valori di ψ^2 uguali fra loro. Orbitali p , d , f , ecc. danno luogo a rappresentazioni geometriche differenti.

Struttura elettronica degli atomi (6)

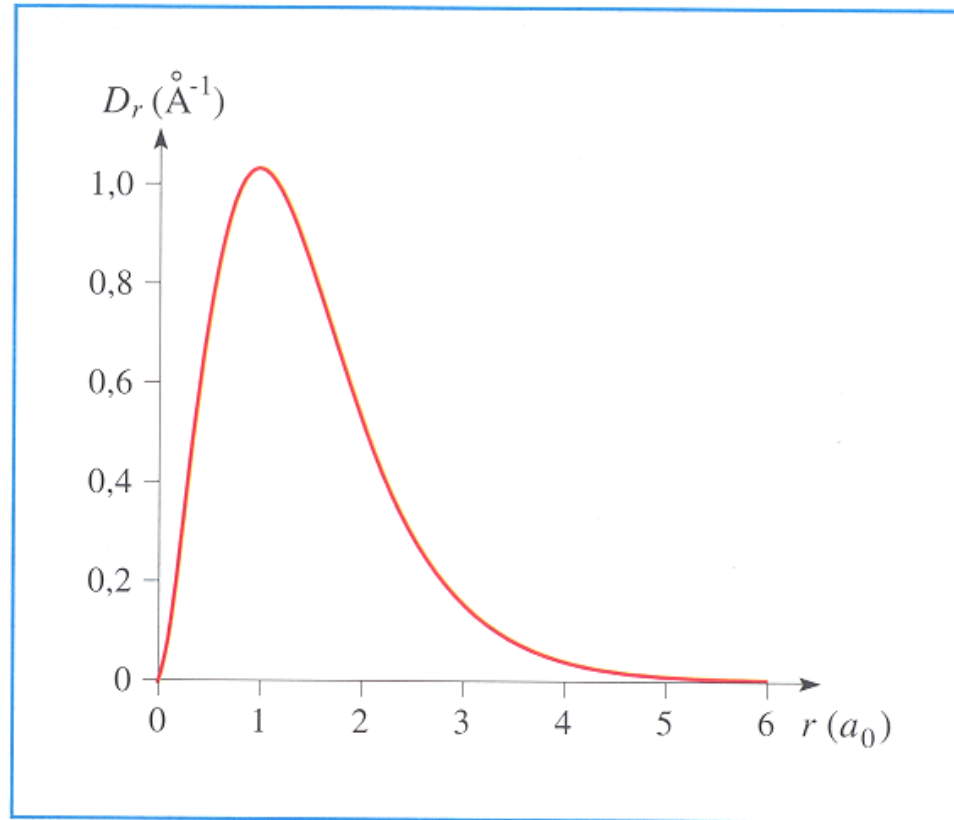


Figura A2.5 - Rappresentazione grafica della funzione D_r .

Struttura elettronica degli atomi (7)

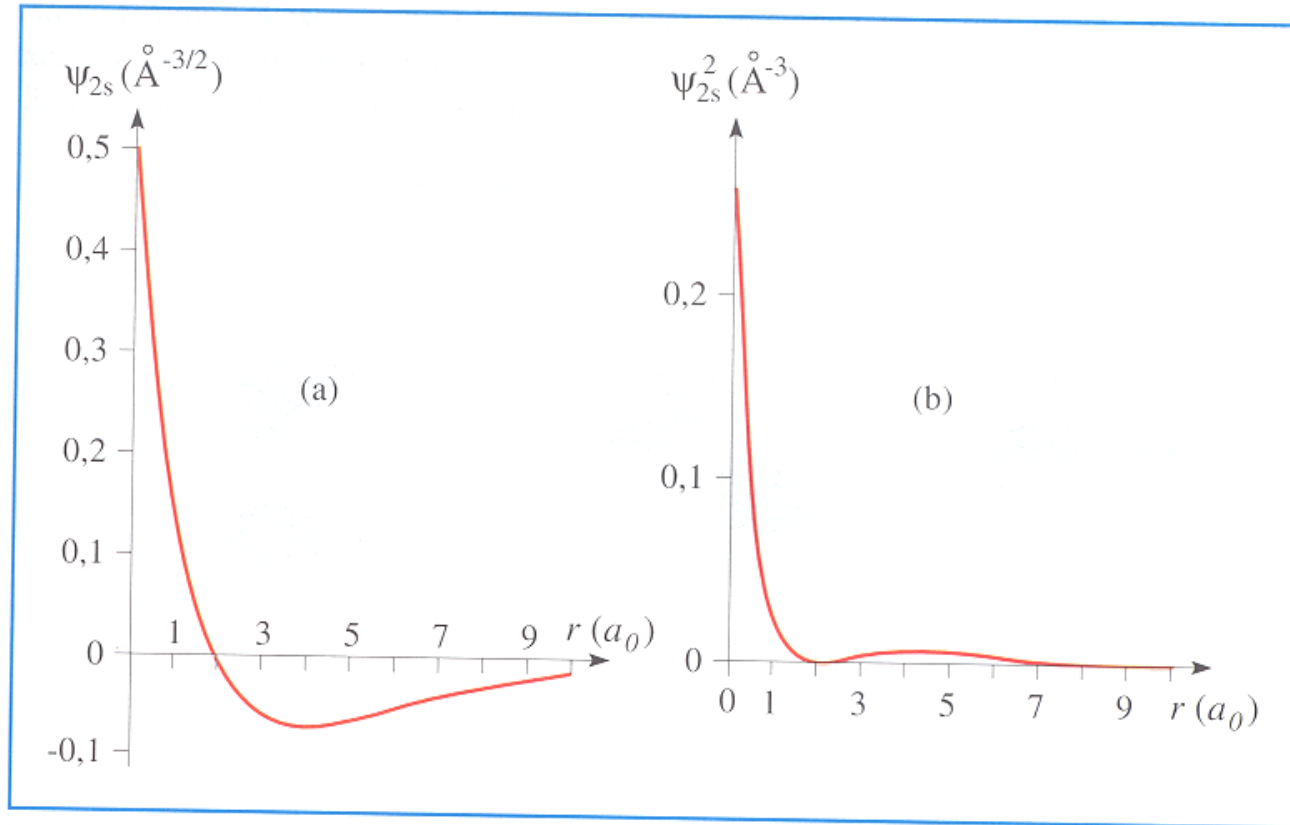


Figura A2.7 - Grafico della funzione d'onda ψ_{2s} (a) e di ψ_{2s}^2 (b).

Struttura elettronica degli atomi (8)

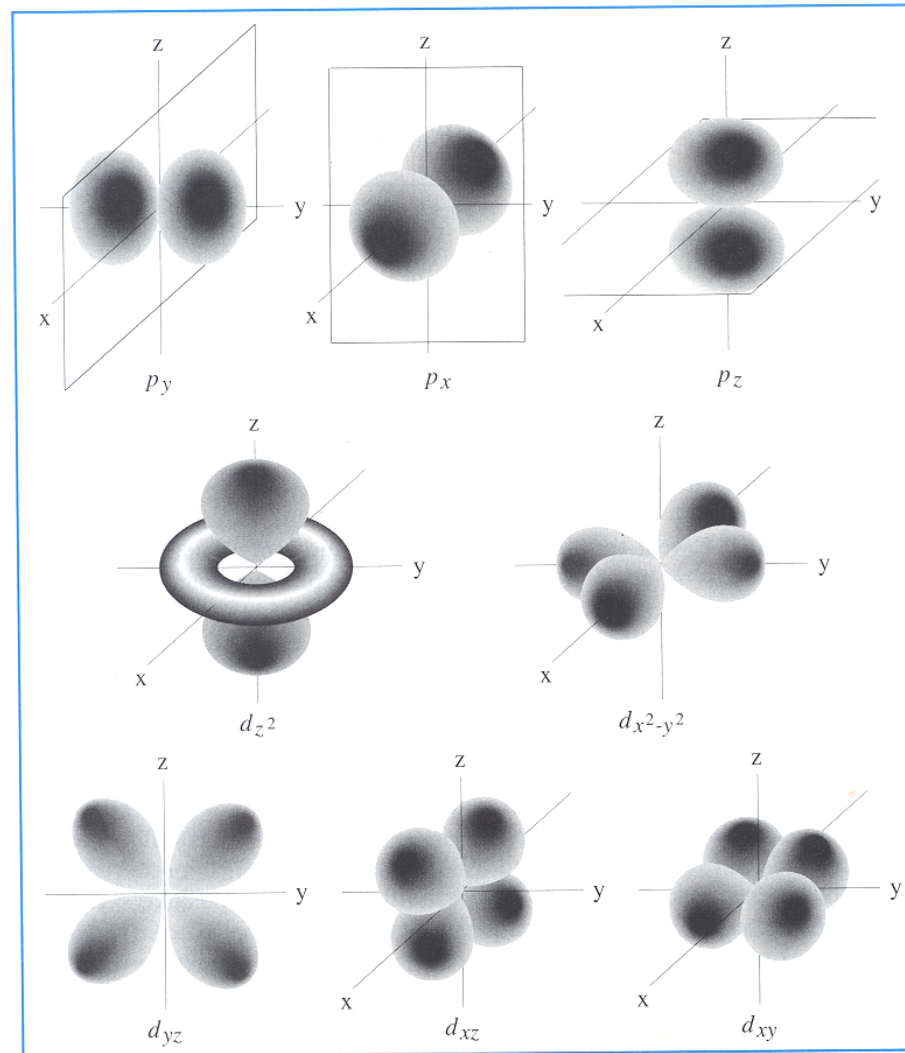


Figura A2.8 - Distribuzione spaziale della densità elettronica degli orbitali $2p$ e $3d$.

Struttura elettronica degli atomi (9)

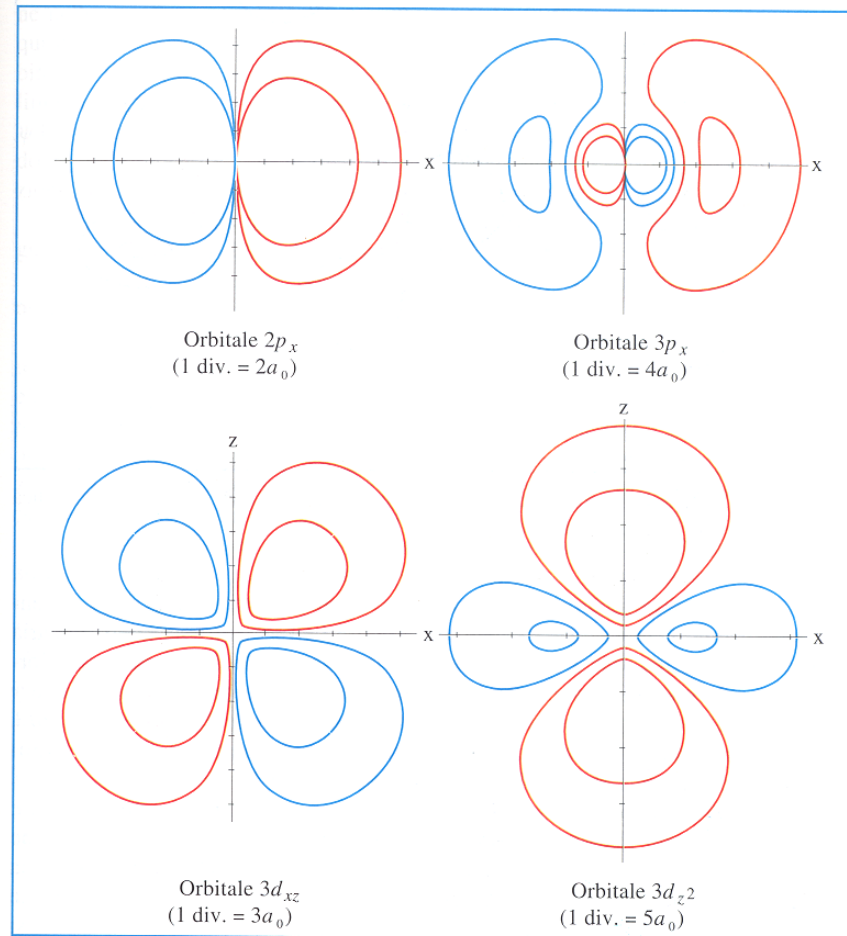


Figura A2.9 - Curve di livello per gli orbitali $2p_x$, $3p_x$, $3d_{xz}$ e $3d_{z^2}$ corrispondenti a valori di ψ^2 uguali a $0,001 \text{ \AA}^{-3}$ (curva piú interna) ed a $0,0001 \text{ \AA}^{-3}$ (curva piú esterna); il colore delle linee indica il segno della funzione ψ (rosso: positiva, blu: negativa).

Struttura elettronica degli atomi (10)

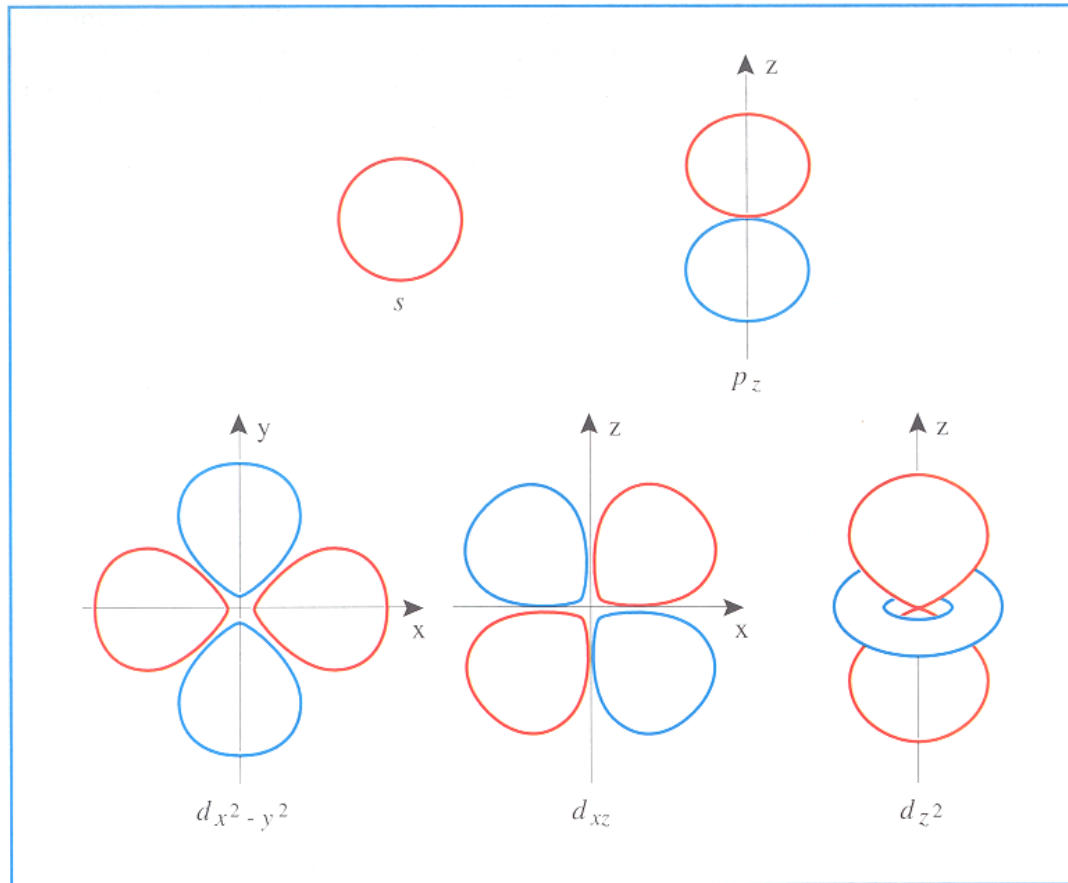


Figura A2.10 - Rappresentazione schematica degli orbitali s , p e d . Il colore rosso indica che la funzione ψ è positiva, il colore blu che è negativa.

Struttura elettronica degli atomi (11)

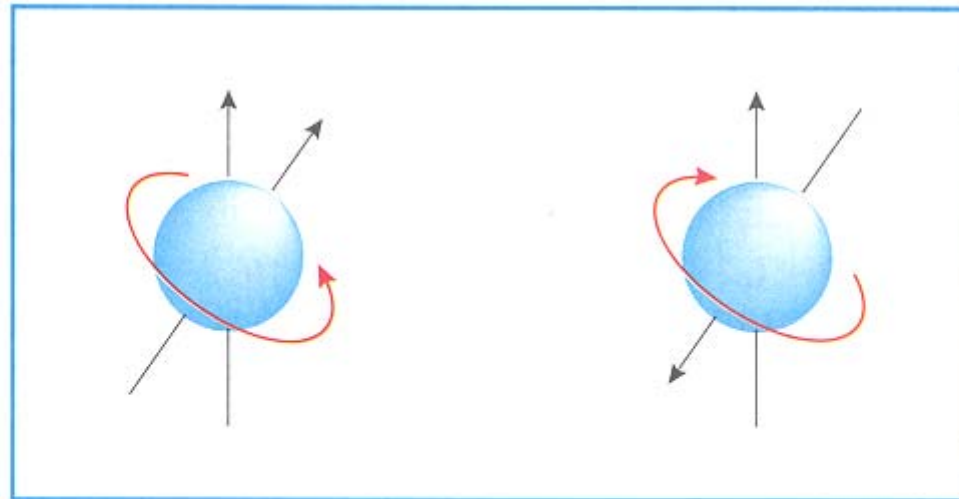


Figura A3.2 - L'asse di rotazione dell'elettrone può assumere, rispetto alla direzione di un campo magnetico (indicata dalla freccia verticale), solo due angolazioni. La prima viene detta *parallela* e la seconda *antiparallela*. L'asse di rotazione non ha una orientazione fissa ma descrive un moto di precessione attorno all'asse z (direzione del campo magnetico).

Struttura elettronica degli atomi (13)

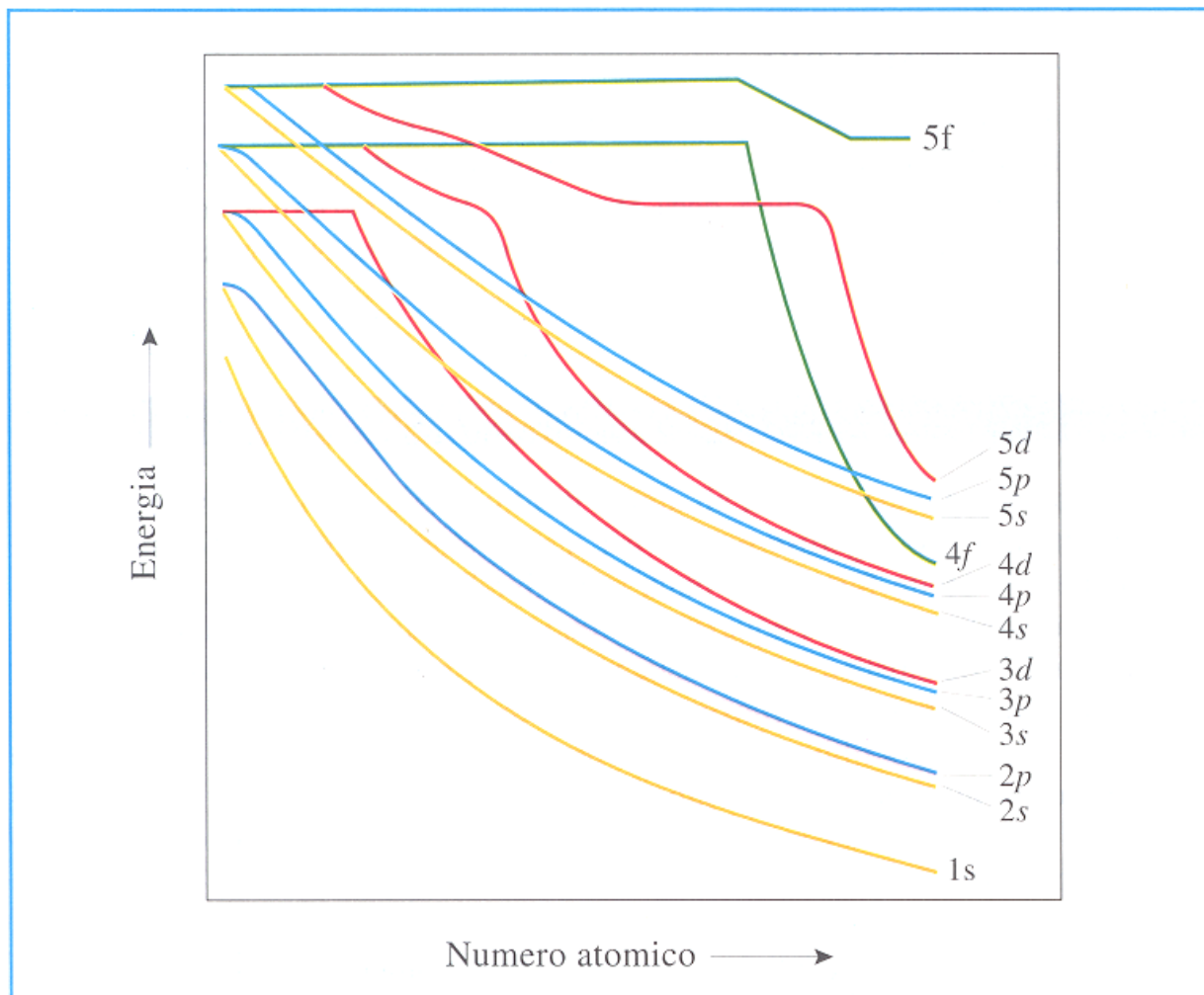


Figura A3.1 - Diagramma (approssimato) dell'energia degli orbitali atomici in funzione del numero atomico Z .

Struttura elettronica degli atomi (14)

AUFBAU: Costruzione di un sistema atomico

Diagramma orbitalico

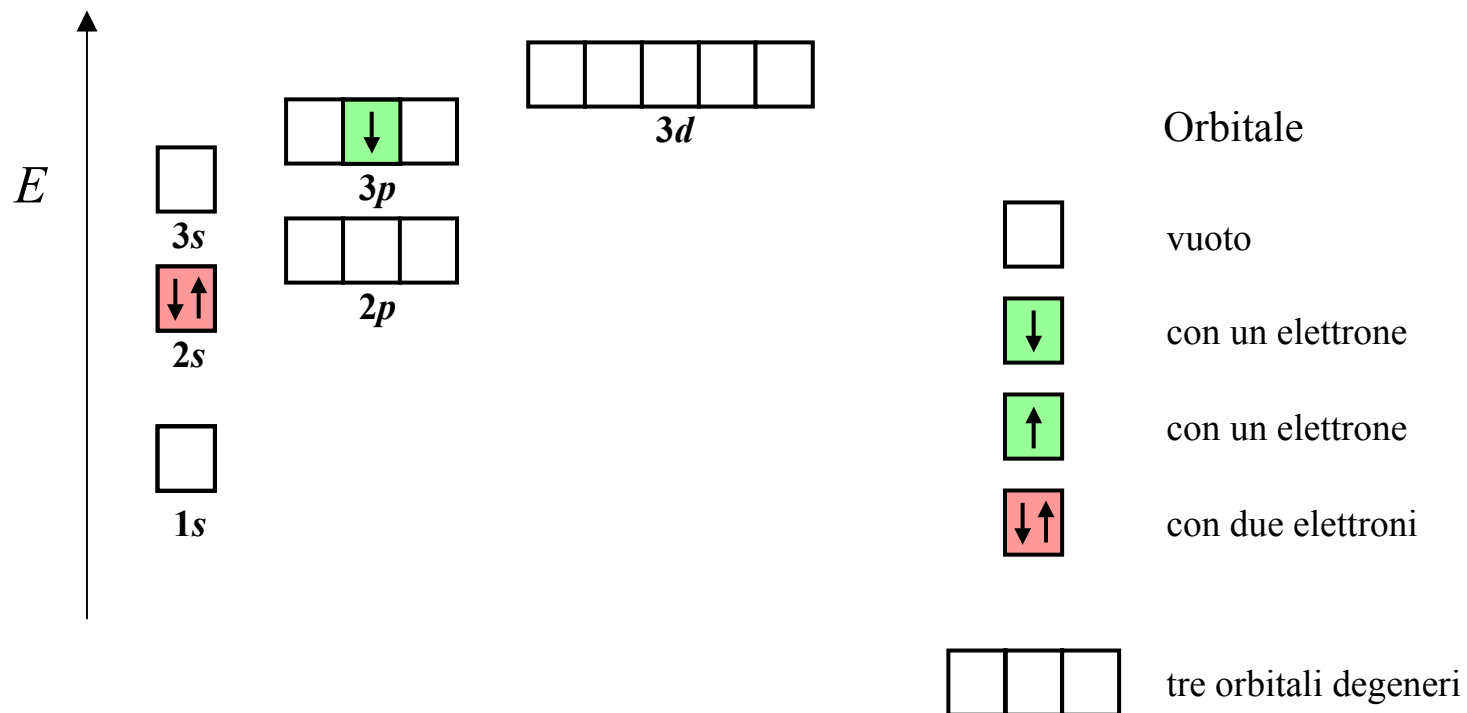
Regola della minima energia

Principio di esclusione di Pauli

Regola del massimo spin totale

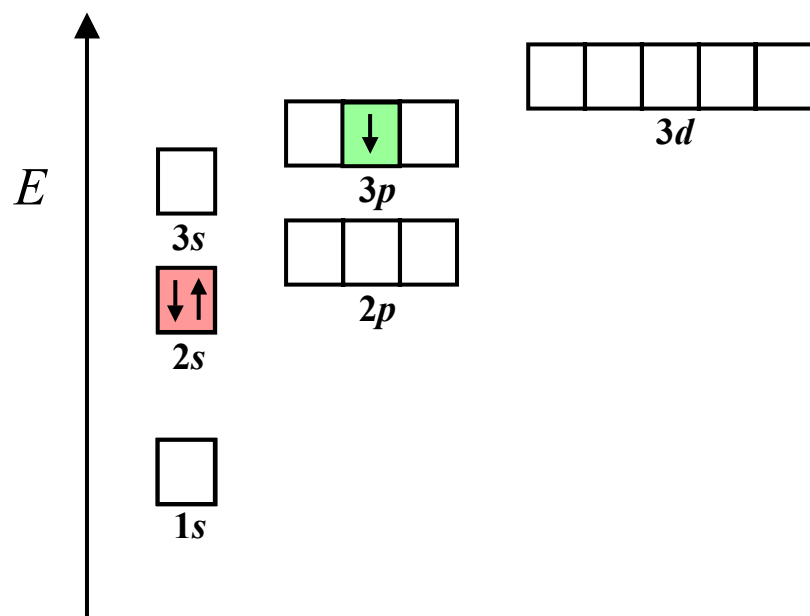
Struttura elettronica degli atomi (15)

Diagramma orbitalico

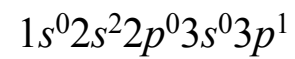


Struttura elettronica degli atomi (16)

Diagramma orbitalico

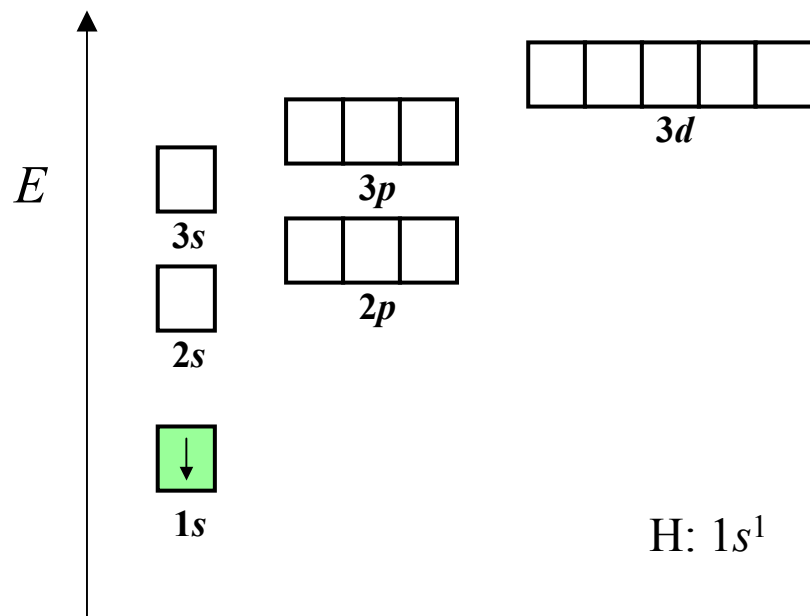


Configurazione elettronica



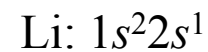
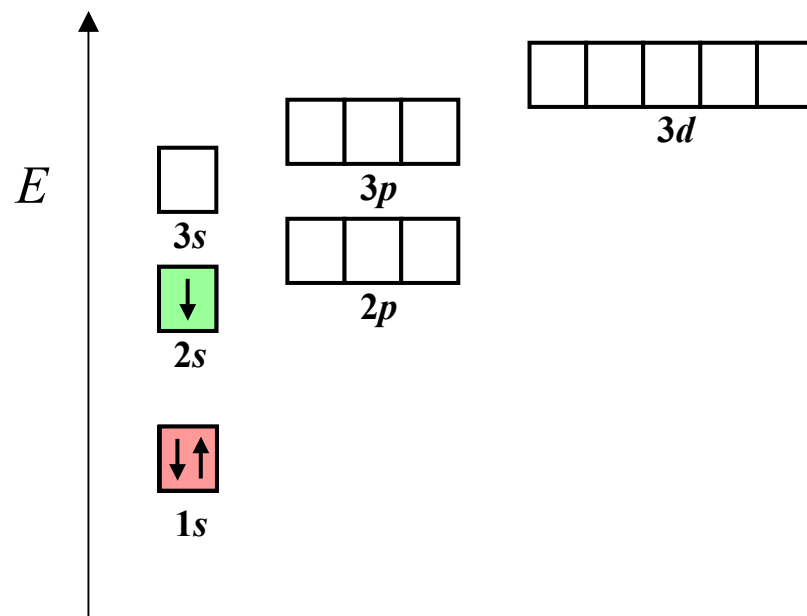
Struttura elettronica degli atomi (17)

Regola della minima energia



Struttura elettronica degli atomi (18)

Principio di esclusione di Pauli

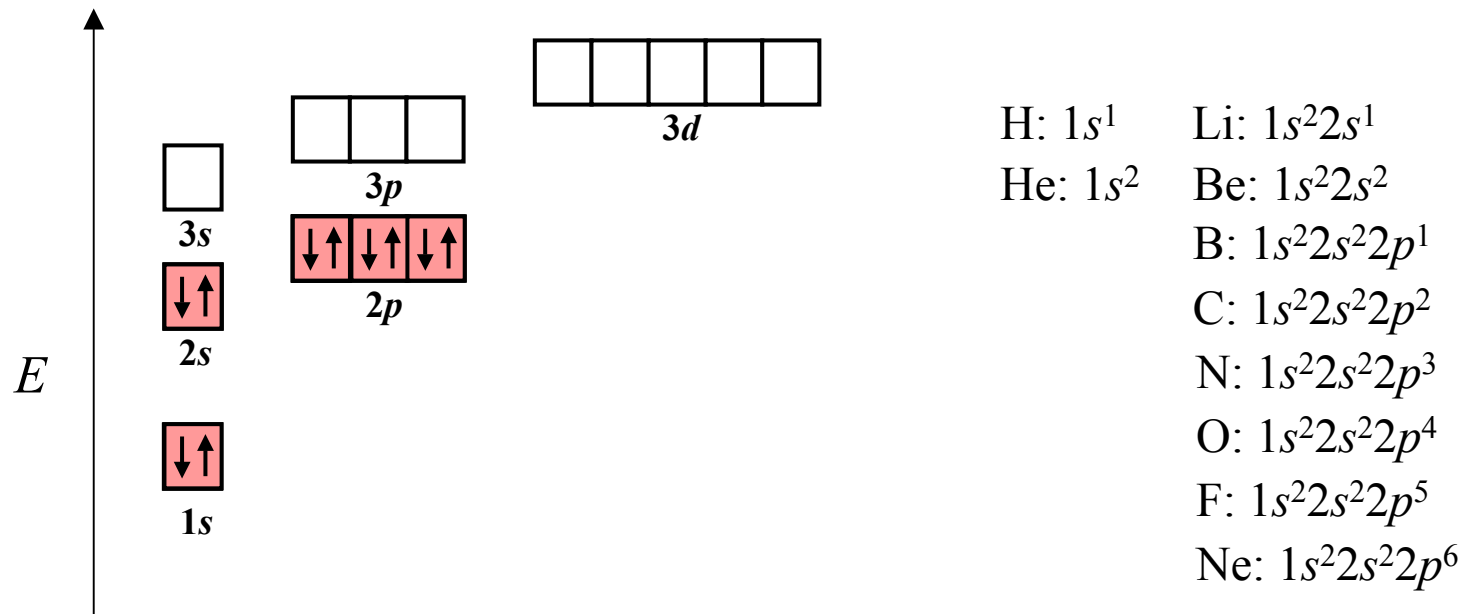


In uno stesso orbitale possono esistere al massimo due elettroni, purché abbiano spin opposto.

La disposizione $\boxed{\downarrow\downarrow}$ (o $\boxed{\uparrow\uparrow}$, che sarebbe indistinguibile dalla precedente) è proibita.

Struttura elettronica degli atomi (19)

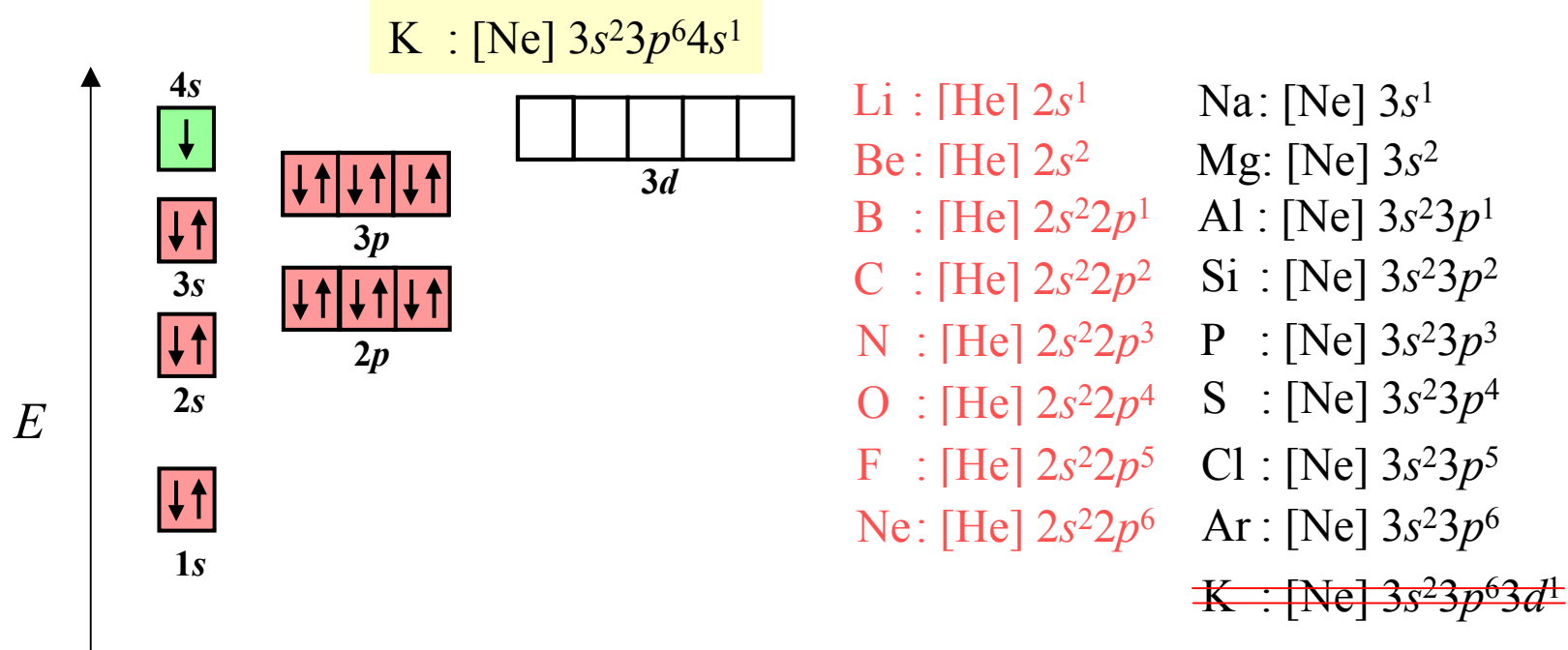
Primo e secondo periodo



Regola di Hund: quando sono disponibili orbitali degeneri, gli elettroni inizialmente occupano questi orbitali singolarmente con spin uguale.

Struttura elettronica degli atomi (20)

Terzo periodo

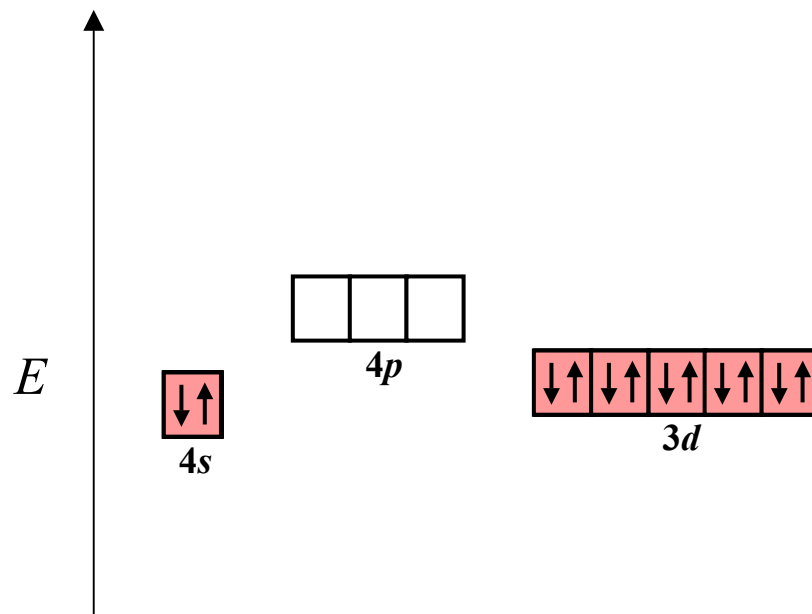


No!

L'elettrone esterno va a finire nel sottolivello $4s$, che possiede, in questa particolare situazione, minore energia rispetto al sottolivello $3d$. Non bisogna dimenticare che, in atomi polielettronici, anche il numero quantico secondario porta un suo contributo all'energia del sottolivello.

Struttura elettronica degli atomi (21)

Quarto periodo e prima serie di transizione



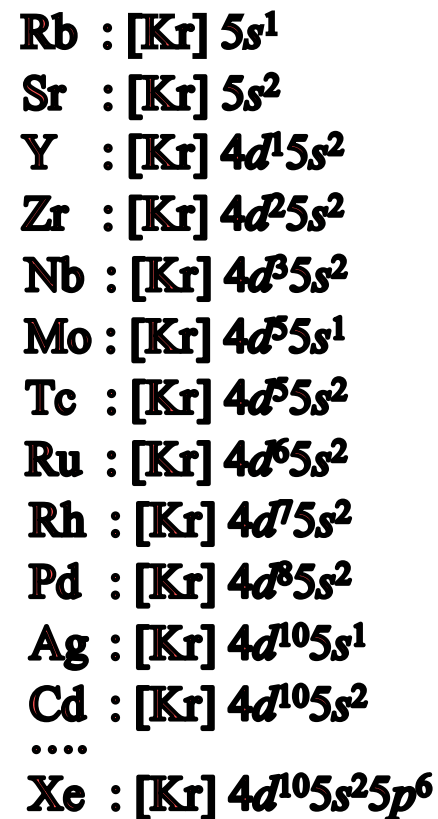
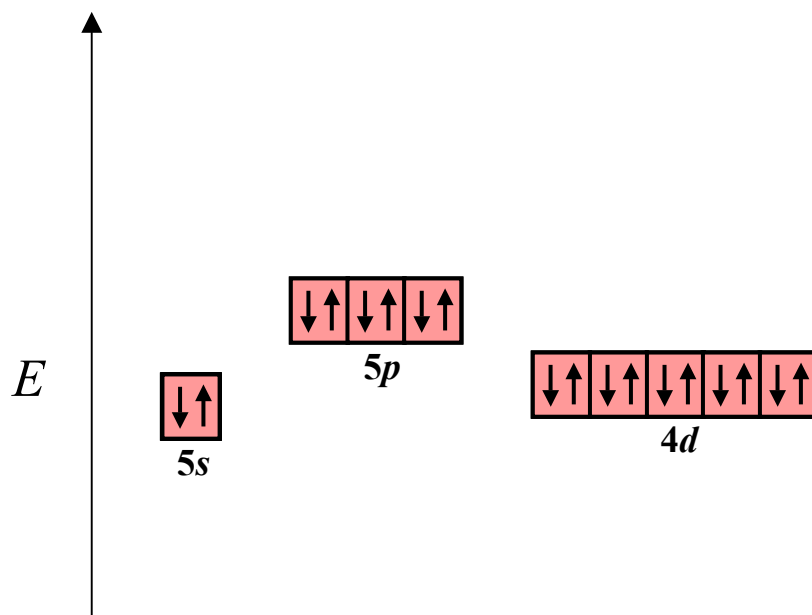
Struttura elettronica degli atomi (22)

Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca						

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

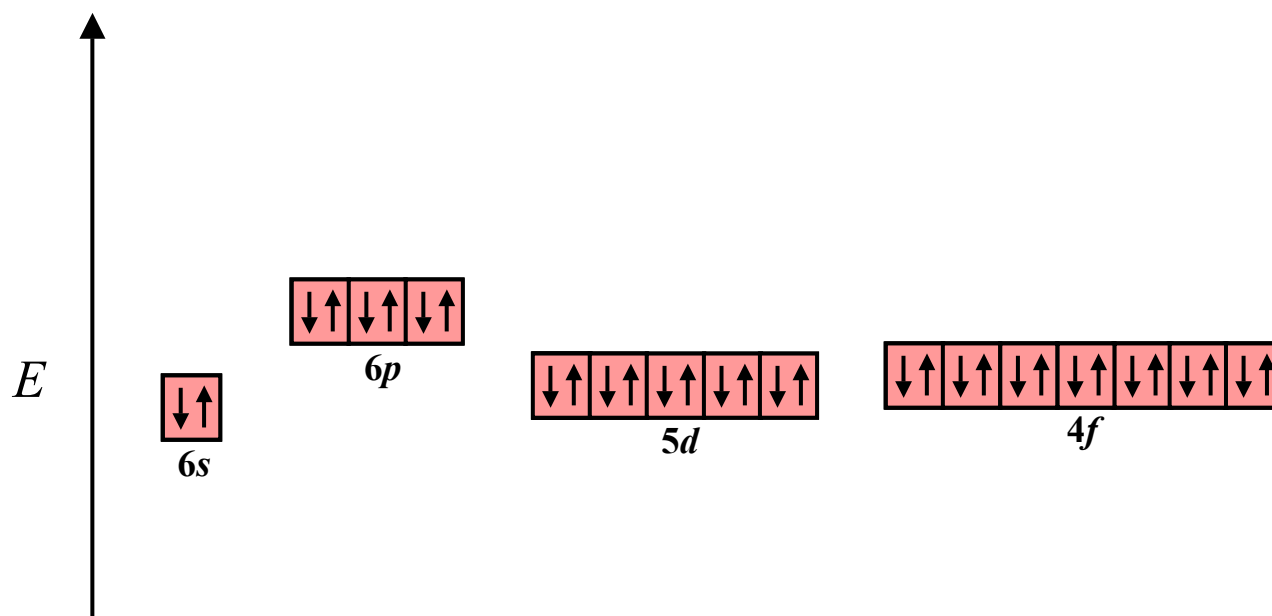
Struttura elettronica degli atomi (23)

Quinto periodo e seconda serie di transizione



Struttura elettronica degli atomi (24)

Sesto periodo: lantanidi e terza serie di transizione



....



....



....

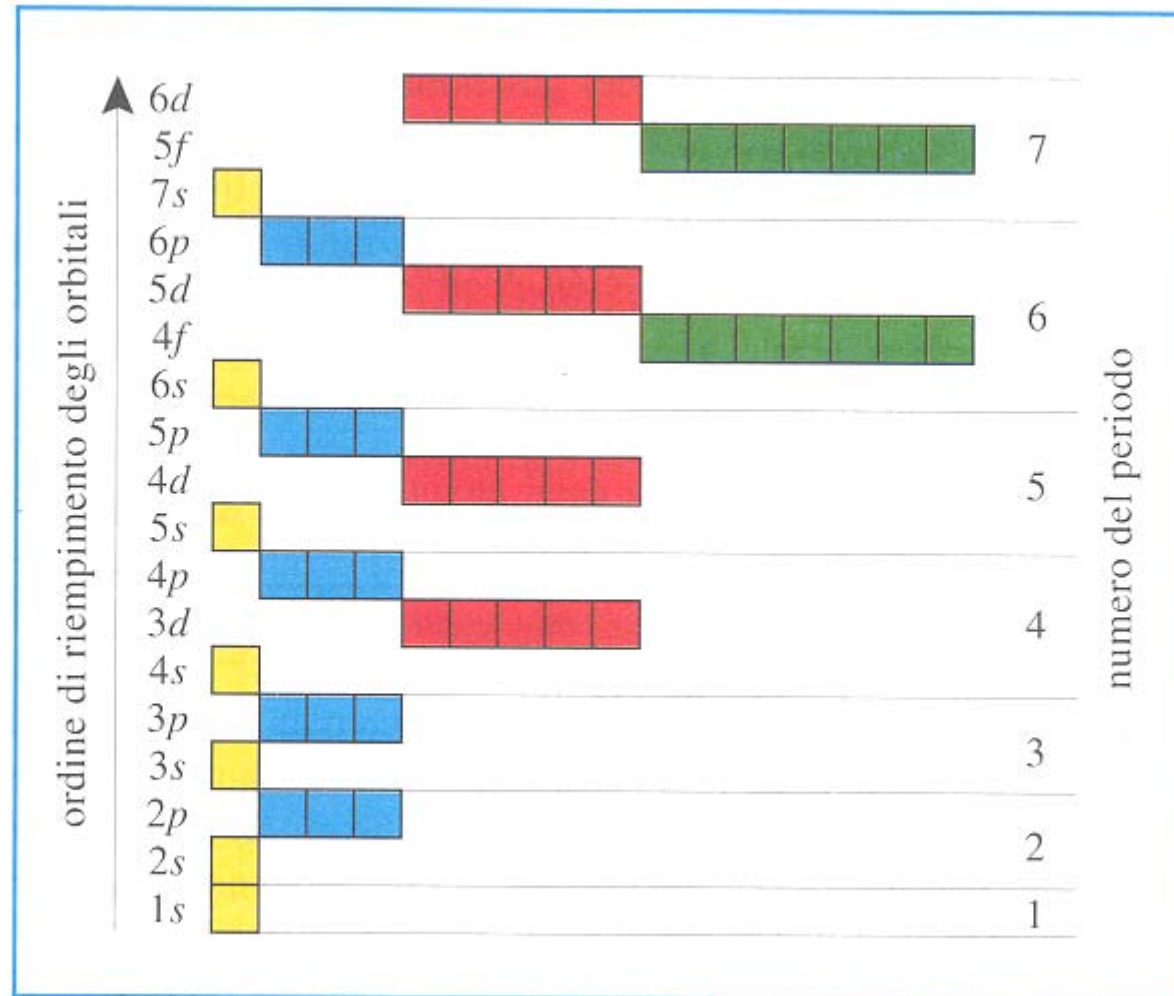


Struttura elettronica degli atomi (22)

H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca						

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	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd						

Struttura elettronica degli atomi (25)



Struttura elettronica degli atomi (26)

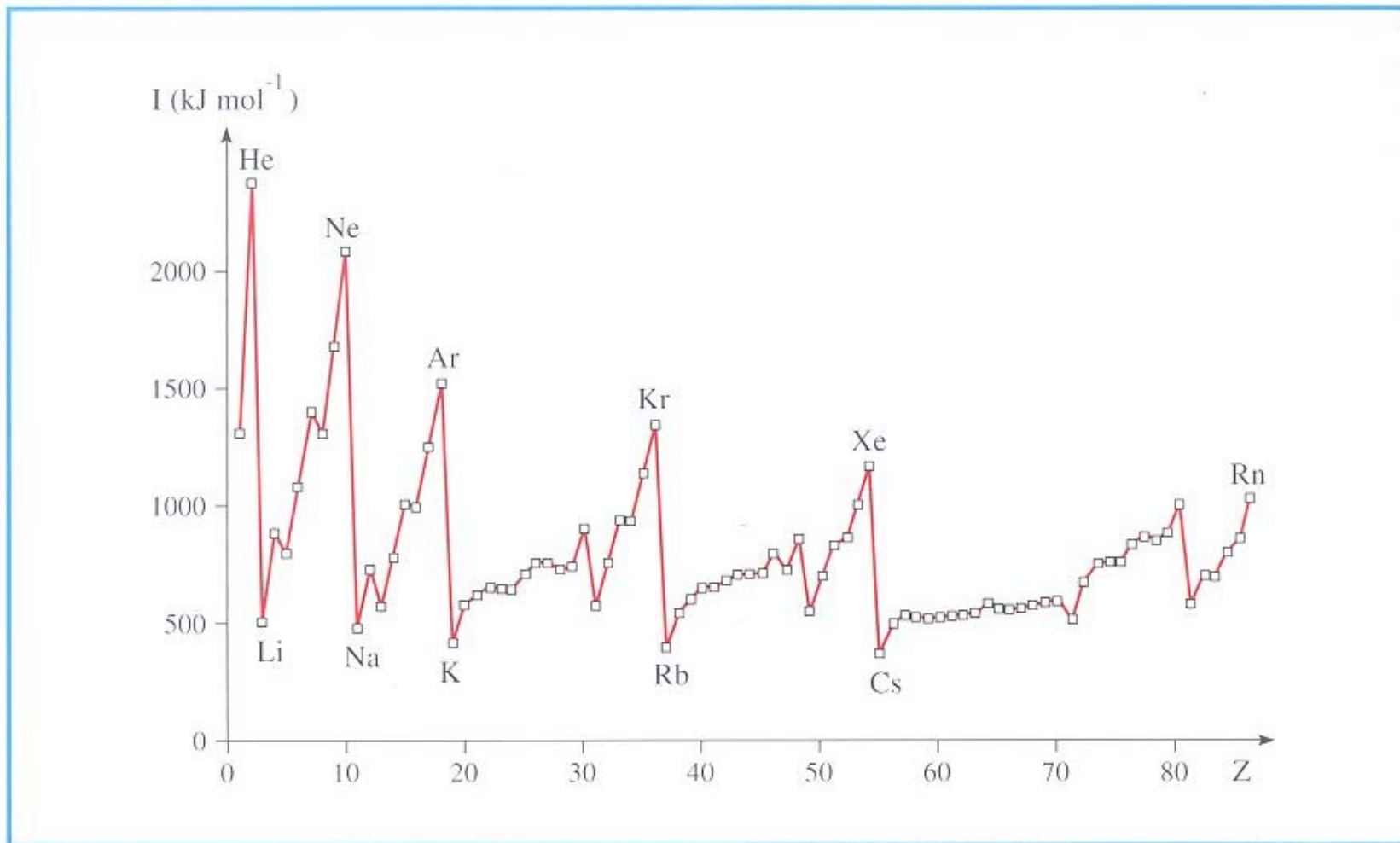
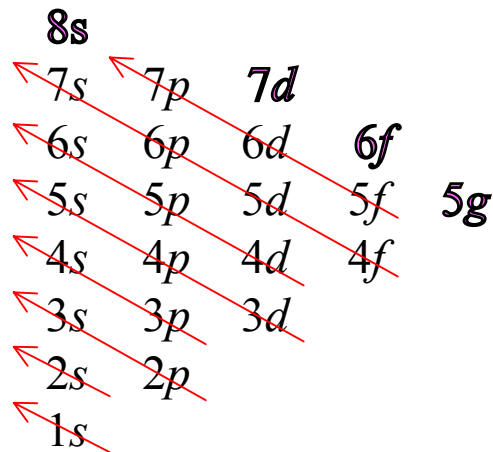


Figura 3.3 - Energia di prima ionizzazione I (kJ mol^{-1}) degli atomi degli elementi in funzione del numero atomico Z .

Struttura elettronica degli atomi (26)

Ordine di riempimento dei sottolivelli elettronici



Si seguano le frecce da destra in basso a sinistra in alto: l'ordine ottenuto riproduce quello che è stato descritto precedentemente. Si possono fare anche previsioni su futuri sviluppi dell'Aufbau.