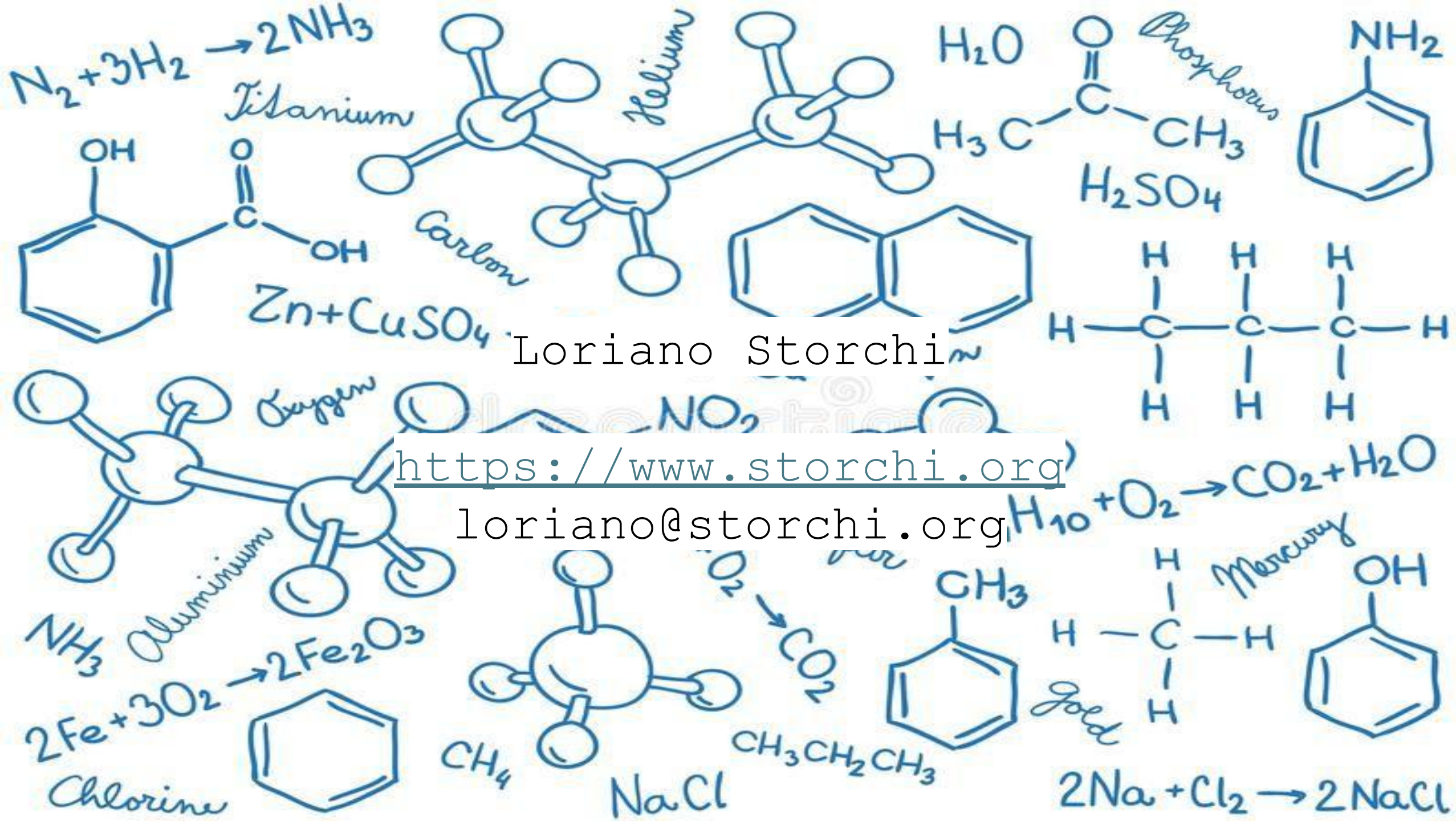




Meccanica quantistica

IL CONTESTO DEL NOVECENTO

I problemi di Hilbert, i risultati di Gödel sull'incompletezza e la teoria della relatività accompagnano la nascita della meccanica quantistica.

FENOMENI E CONCETTI

Dualismo onda-particella, principio di indeterminazione, sovrapposizione degli stati e ruolo della misura. Collasso della funzione d'onda e diverse interpretazioni.

SVILUPPI E APPLICAZIONI

Entanglement, effetto tunnel, computazione e crittografia quantistica. Fluttuazioni del vuoto e radiazione di Hawking dai buchi neri. Tentativi di unire relatività e meccanica quantistica, tra cui l'equazione di Dirac.

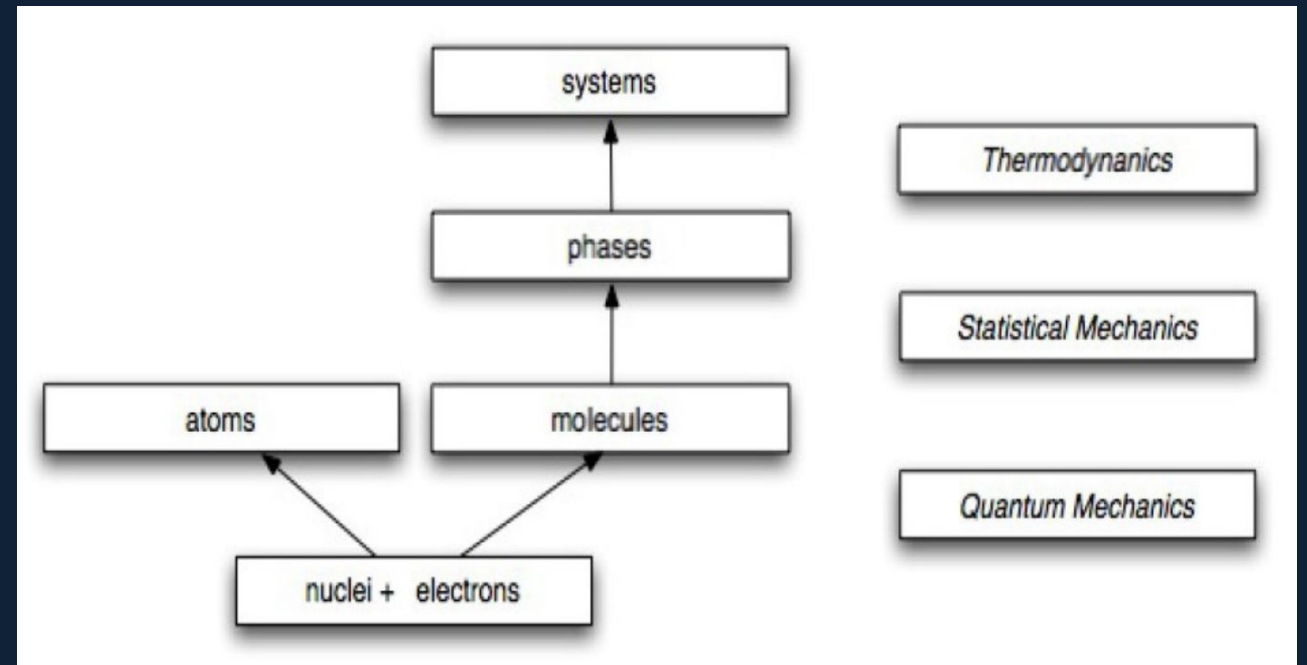
Organizzazione gerarchica della materia

LIVELLI DI DESCRIZIONE

Sistemi e fasi, atomi e molecole, nuclei elettronici. A scale diverse si collegano termodinamica, meccanica statistica e meccanica quantistica.

ESEMPIO: L'ACQUA

- Scala microscopica: struttura della molecola H_2O e interazioni fra molecole.
- Scala macroscopica: ghiaccio, acqua liquida e vapore.
- Collegamento: l'organizzazione e il movimento delle molecole spiegano le diverse proprietà delle fasi



Organizzazione gerarchica della materia

LIVELLI DI DESCRIZIONE

Sistemi e fasi, atomi e molecole, nuclei ed elettroni. A scale diverse si collegano i termini della termodinamica e della meccanica statistica.

ESEMPIO

- A ogni livello usiamo strumenti diversi: la meccanica quantistica descrive la struttura elettronica e i legami. La meccanica statistica collega il comportamento di moltissime particelle alle proprietà collettive. La termodinamica studia grandezze macroscopiche come temperatura, pressione ed energia.
- Il movimento delle molecole spiega le diverse proprietà delle fasi.

Carbonio e complessità biologica

TAVOLA PERIODICA E STRUTTURA

La posizione degli elementi nella tavola periodica offre il quadro fondamentale per studiare la struttura atomica e le proprietà chimiche.

6

C

Carbonio

COMPLESSITÀ BIOLOGICA

Elemento chiave della chimica organica, in grado di formare legami covalenti stabili e catene molecolari complesse alla base della vita.

Tavola Periodica degli Elementi

Nuovo Originale																		18	
																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	
1																		2	

Carbonio e complessità biologica

TAVOLA PERIODICA E STRUTTURA

- **Posizione nella tavola:** il carbonio appartiene al secondo periodo e al gruppo 14. Possiede quattro elettroni di valenza e può formare quattro legami covalenti.
- **Varietà delle strutture:** le piccole dimensioni atomiche favoriscono legami forti con altri atomi di carbonio. Si possono così costruire catene lunghe, ramificate e anelli, con legami singoli, doppi o tripli.
- **Complessità biologica:** queste strutture, combinate con elementi come H, O, N, S e P, permettono un'enorme varietà di molecole e macromolecole con funzioni diverse.

6

C

Carbonio

VERSATILITÀ CHIMICA

La versatilità chimica del carbonio permette di costruire strutture molecolari stabili e diversificate, che costituiscono una delle basi della complessità dei sistemi biologici.

Tavola Periodica degli Elementi

1 1A Nuovo Originale

Metalli alcalini
Metalli alcalino terrosi
Metalli del blocco d
Lantanidi

Attinidi
Metalli del blocco p
Nonmetalli
Gas nobili

C Solidi
Br Liquidi
H Gas
Tc Artificiali

18 VIIIA

1 H Idrogeno 1.00794
2 He Elio 4.002602
3 Li Litio 6.941
4 Be Berillio 9.012182
5 B Boro 10.811
6 C Carbonio 12.0107
7 N Azoto 14.00644
8 O Ossigeno 15.9994
9 F Fluoro 18.9984032
10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodio 22.989770
12 Mg Magnesio 24.3050
13 Al Alluminio 26.981538
14 Si Silicio 28.0855
15 P Fosforo 30.973761
16 S Zolfo 32.066
17 Cl Cloro 35.453
18 Ar Argon 39.648
19 K Potassio 39.0983
20 Ca Calcio 40.078
21 Sc Scandio 44.955910
22 Ti Titanio 47.867
23 V Vanadio 50.9415
24 Cr Cromo 51.9961
25 Mn Manganese 54.938049
26 Fe Ferro 55.8457
27 Co Cobalto 58.933200
28 Ni Nichel 58.6934
29 Cu Rame 63.546
30 Zn Zinco 65.409
31 Ga Gallio 69.723
32 Ge Germanio 72.64
33 As Arsenico 74.9216
34 Se Selenio 78.96
35 Br Bromo 79.904
36 Kr Kriptone 83.796
37 Rb Rubidio 85.4678
38 Sr Stronzio 87.62
39 Y Ittrio 88.90585
40 Zr Zirconio 91.224
41 Nb Niobio 92.90638
42 Mo Molibdeno 95.94
43 Tc Tecnezio (98)
44 Ru Rutenio 101.07
45 Rh Rodio 102.90550
46 Pd Palladio 106.42
47 Ag Argento 107.8682
48 Cd Cadmio 112.411
49 In Indio 114.818
50 Sn Stagno 118.710
51 Sb Antimonio 121.760
52 Te Tellurio 127.60
53 I Iodio 126.90447
54 Xe Xenone 131.293
55 Cs Cesio 132.90545
56 Ba Bario 137.327
57 La Lantanio 138.9055
58 Ce Cerio 140.116
59 Pr Praseodimio 140.90766
60 Nd Neodimio 144.24
61 Pm Promezio (145)
62 Sm Samario 150.36
63 Eu Europio 151.964
64 Gd Gadolinio 157.25
65 Tb Terbio 158.92534
66 Dy Disprosio 162.500
67 Ho Olio 164.93032
68 Er Erblio 167.259
69 Tm Termio 168.93421
70 Yb Itrbio 173.04
71 Lu Lutezio 174.967
72 Hf Hafnio 178.49
73 Ta Tantalio 180.9479
74 W Tungsteno 183.84
75 Re Renio 186.207
76 Os Osmio 190.23
77 Ir Iridio 192.217
78 Pt Platino 195.078
79 Au Oro 196.96655
80 Hg Mercurio 200.59
81 Tl Talio 204.3833
82 Pb Piombo 207.2
83 Bi Bismuto 208.98038
84 Po Polonio (209)
85 At Astatio (210)
86 Rn Radon (222)
87 Fr Francio (223)
88 Ra Radio (226)
89 Ac Attinio (227)
90 Th Torio 232.0381
91 Pa Protattinio 231.03689
92 U Uranio 238.02891
93 Np Neptunio (237)
94 Pu Plutonio (244)
95 Am Americio (243)
96 Cm Curio (247)
97 Bk Berkelio (247)
98 Cf Californio (251)
99 Es Einsteinio (252)
100 Fm Fermio (257)
101 Md Mendelevio (258)
102 No Nobelio (259)
103 Lr Laurencio (262)
104 Rf Rifornio (261)
105 Db Dubnio (265)
106 Sg Seaborgio (266)
107 Bh Bohrio (264)
108 Hs Hassio (265)
109 Mt Meitnerio (268)
110 Ds Darmstadtio (271)
111 Rg Roentgenio (272)
112 Uub Ununbio (285)
113 Uut Ununtrio (284)
114 Uuq Ununquadio (289)
115 Uup Ununpentio (288)
116 Uuh Ununhexio (282)
117 Uus Ununseptio (286)
118 Uuo Ununoctio (284)

Le masse atomiche tra sono quelle degli isotopi più stabili o più comuni.

Design Copyright © 1997 Michael Davis mrdavis@earthlink.net http://www.davis.com/periodic

Nota: il sotto gruppo dei numeri 1-18 è stato adottato nel 1984 dalla International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). I nomi degli elementi 112-118 sono gli equivalenti latini di quei nomi.

LA NASCITA DELLA TEORIA QUANTISTICA

Struttura atomica

01

IL LIMITE DELLA FISICA CLASSICA

All'inizio del Novecento, dopo la scoperta dell'elettrone, si tentò di descrivere il moto degli elettroni attorno al nucleo con le leggi di Newton. Numerosi risultati sperimentali non trovavano spiegazione.

02

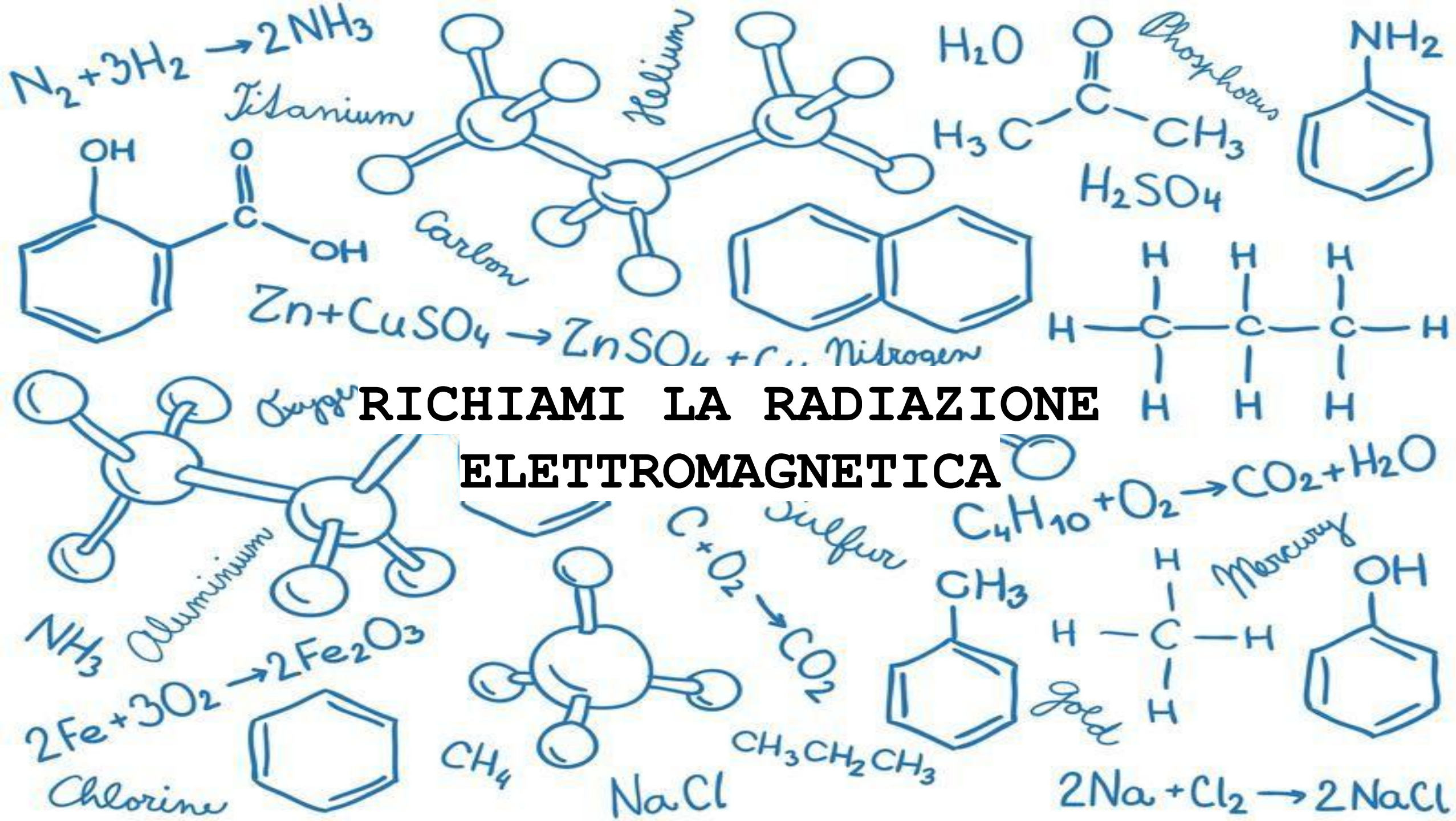
LA TEORIA QUANTISTICA

Nei primi 25 anni del Novecento nacque una teoria capace di spiegare i risultati già noti e i nuovi esperimenti.

03

PARTICELLE E ONDE

La scoperta delle proprietà ondulatorie delle particelle lega la struttura elettronica degli atomi alla natura della radiazione elettromagnetica, della luce e degli spettri atomici.



Natura ondulatoria della luce

RADIAZIONI ELETTROMAGNETICHE

Per descrivere la struttura elettronica degli atomi occorre considerare la natura della radiazione elettromagnetica.

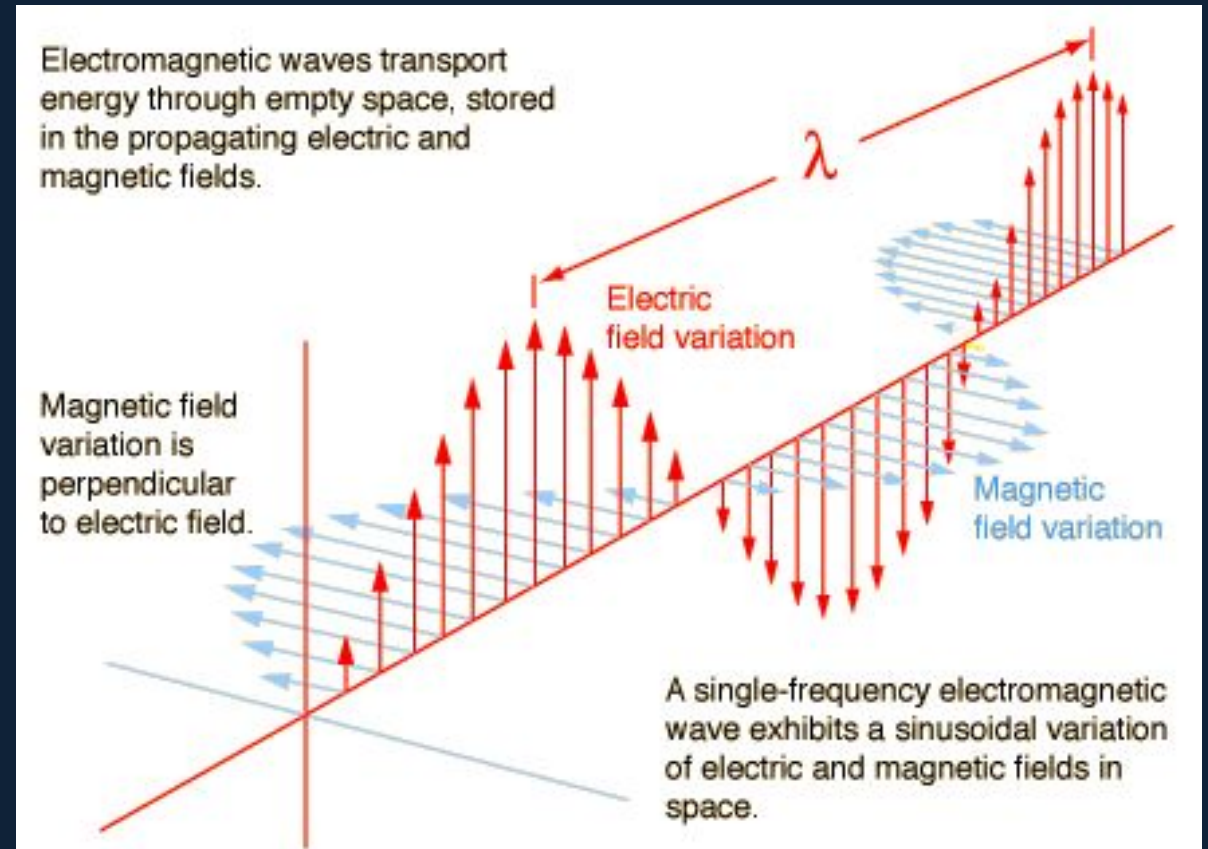
IL MODELLO DI MAXWELL

Per un'onda piana nel vuoto:

- il campo elettrico e quello magnetico sono perpendicolari fra loro;
- entrambi sono perpendicolari alla direzione di propagazione;
- oscillano alla stessa frequenza e si propagano alla velocità della luce.

L'onda può propagarsi anche nel vuoto, senza bisogno di un mezzo materiale. La luce visibile è un esempio di radiazione elettromagnetica.

Polarizzazione lineare: oscilla lungo una direzione fissa



Lunghezza d'onda e frequenza

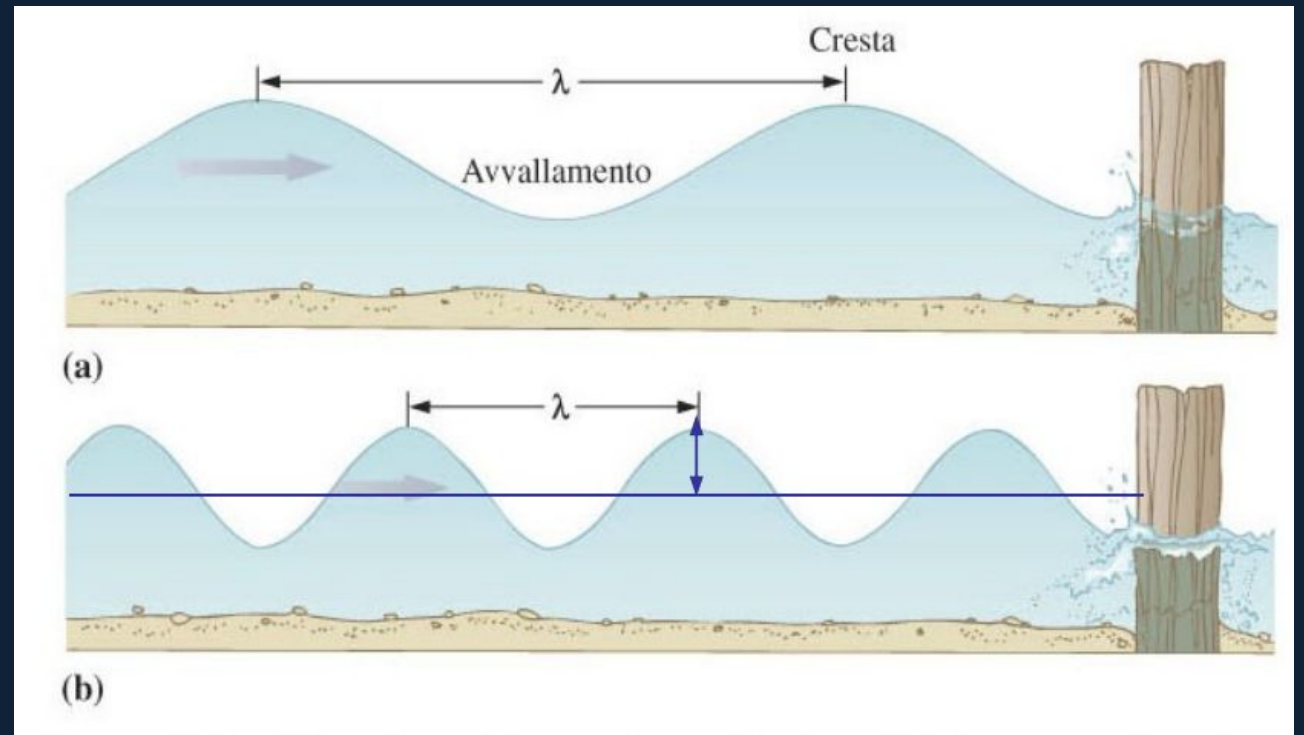
GRANDEZZE CARATTERISTICHE

La lunghezza d'onda λ è la distanza tra due massimi adiacenti. La frequenza ν è il numero di oscillazioni al secondo. L'ampiezza misura lo spostamento massimo.

UNITÀ E RELAZIONE FONDAMENTALE

λ si esprime in metri, nanometri o ångström. $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ e $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$. ν si misura in s^{-1} o hertz. Nel vuoto $c = 3,00 \times 10^8 \text{ m/s}$.

$$c = \lambda \nu$$



Esercizi su frequenza e lunghezza d'onda

1. CALCOLO DI λ

Una luce ha frequenza $\nu = 5,09 \times 10^{14}$ Hz.

$$\lambda = c/\nu = (3,00 \times 10^8)/(5,09 \times 10^{14})$$

$$\lambda = 5,89 \times 10^{-7} \text{ m} = 589 \text{ nm}$$

2. CALCOLO DI ν

Una luce ha lunghezza d'onda $\lambda = 408 \text{ nm} = 408 \times 10^{-9} \text{ m}$.

$$\nu = c/\lambda = (3,00 \times 10^8)/(408 \times 10^{-9})$$

$$\nu = 7,35 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

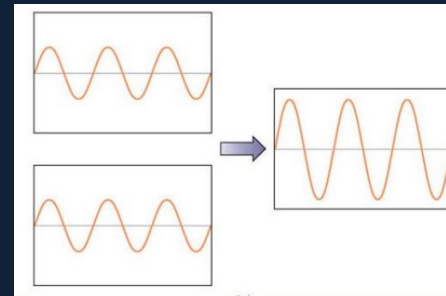
Interferenza, diffrazione e dispersione

COMBINAZIONE DELLE ONDE

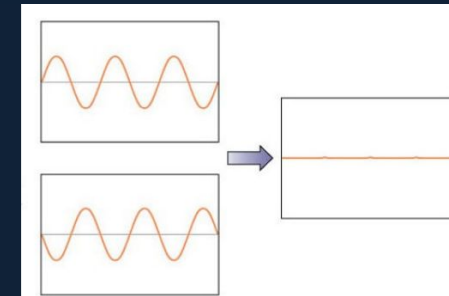
Onde in fase si combinano costruttivamente. Onde fuori fase possono interferire in modo distruttivo. Diffrazione e interferenza rivelano il comportamento ondulatorio.

LUCE BIANCA E PRISMA

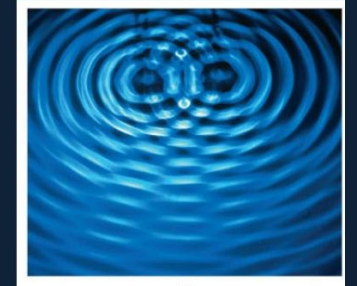
Un prisma scompone la luce solare nei diversi colori.



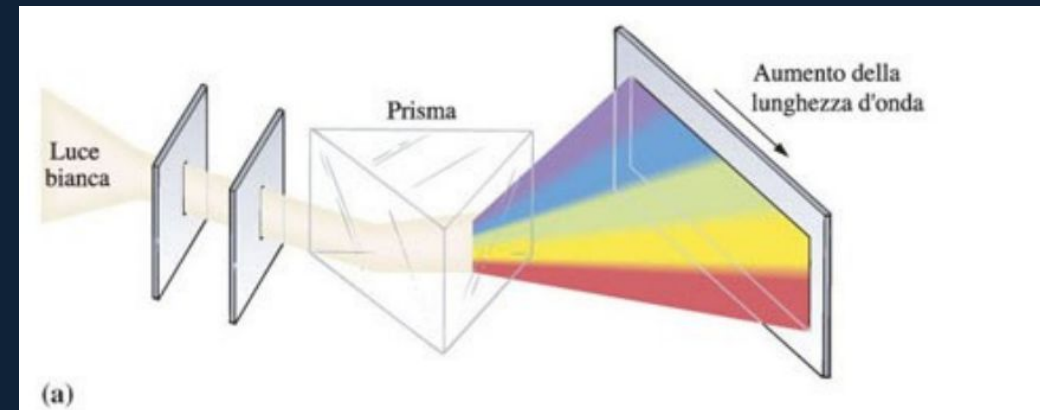
Onde in fase



Onde fuori fase



Onde in un liquido



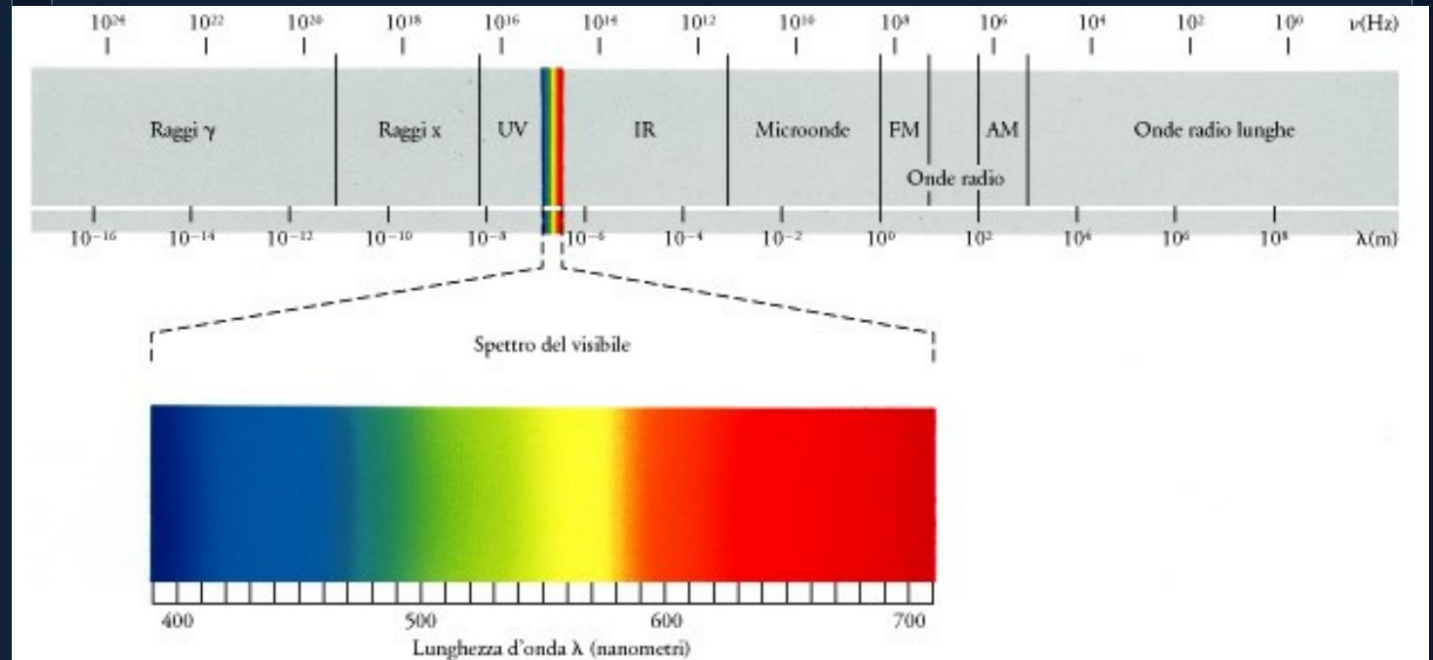
Lo spettro elettromagnetico

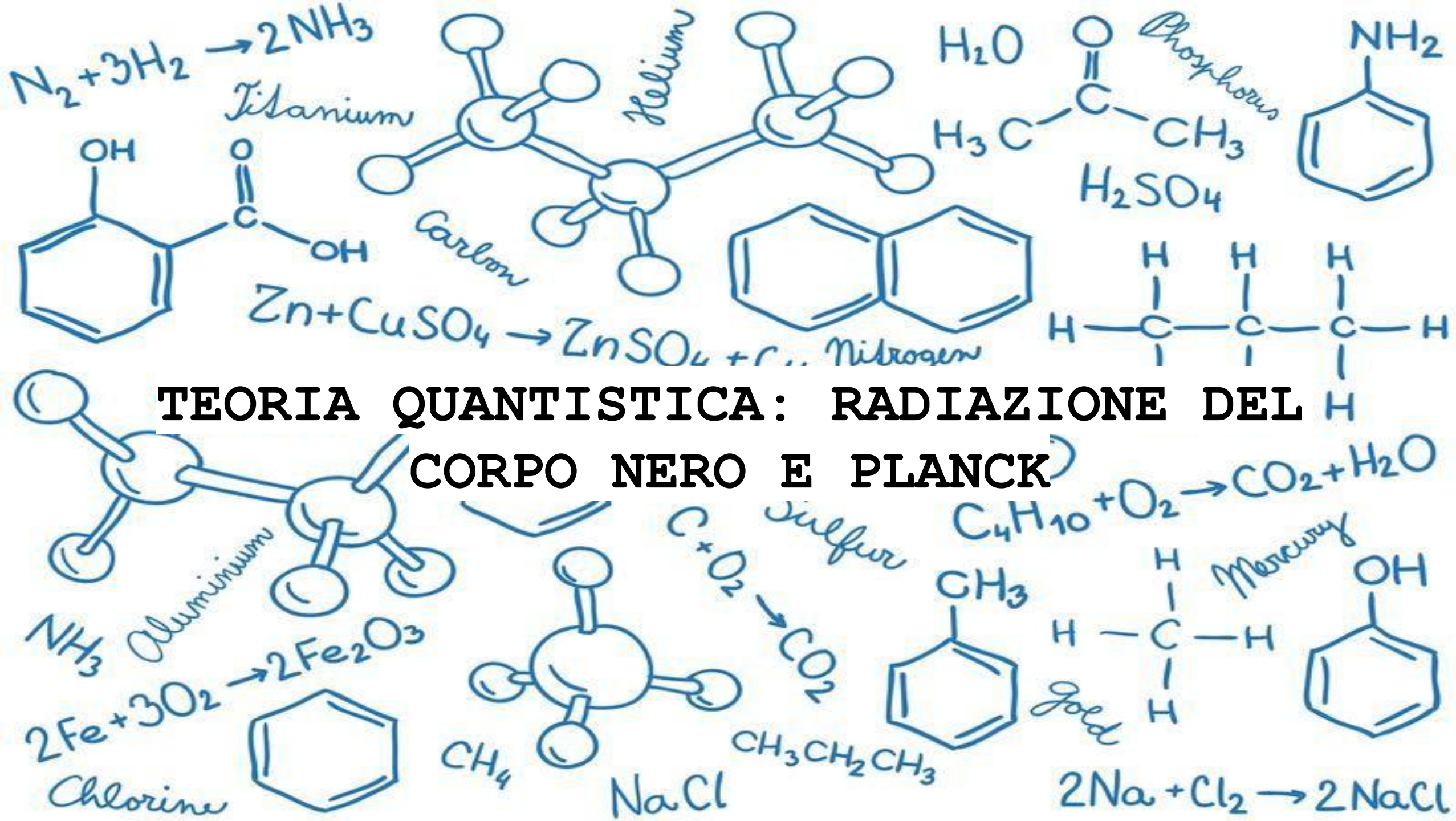
UN AMPIO INTERVALLO

Lo spettro elettromagnetico comprende tutte le lunghezze d'onda e frequenze, dalle onde radio, dell'ordine di 1–1000 m, ai raggi γ , dell'ordine di 10^{-11} – 10^{-13} m.

LA LUCE VISIBILE

La regione visibile occupa solo un piccolo intervallo dello spettro, da circa 4×10^{-7} m, violetto, a 7×10^{-7} m, rosso.





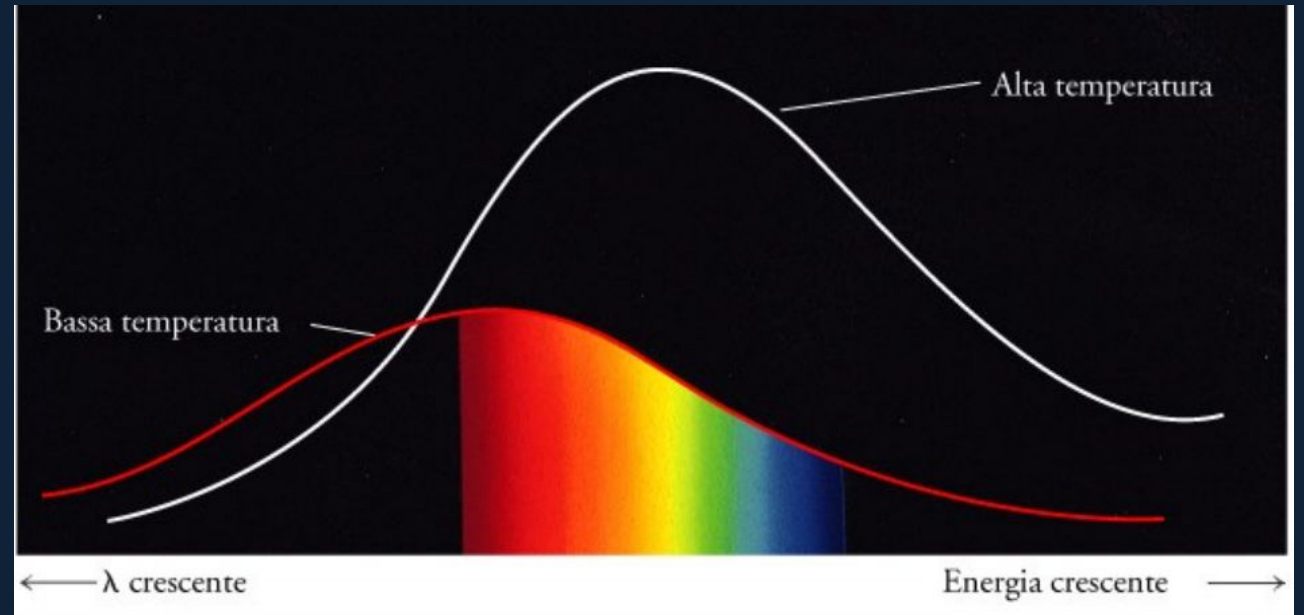
Effetti quantici e fotoni

OLTRE LA TEORIA ONDULATORIA

La teoria elettromagnetica spiega fenomeni ottici come la diffrazione. Alcuni esperimenti di fine Ottocento richiesero però una descrizione ulteriore.

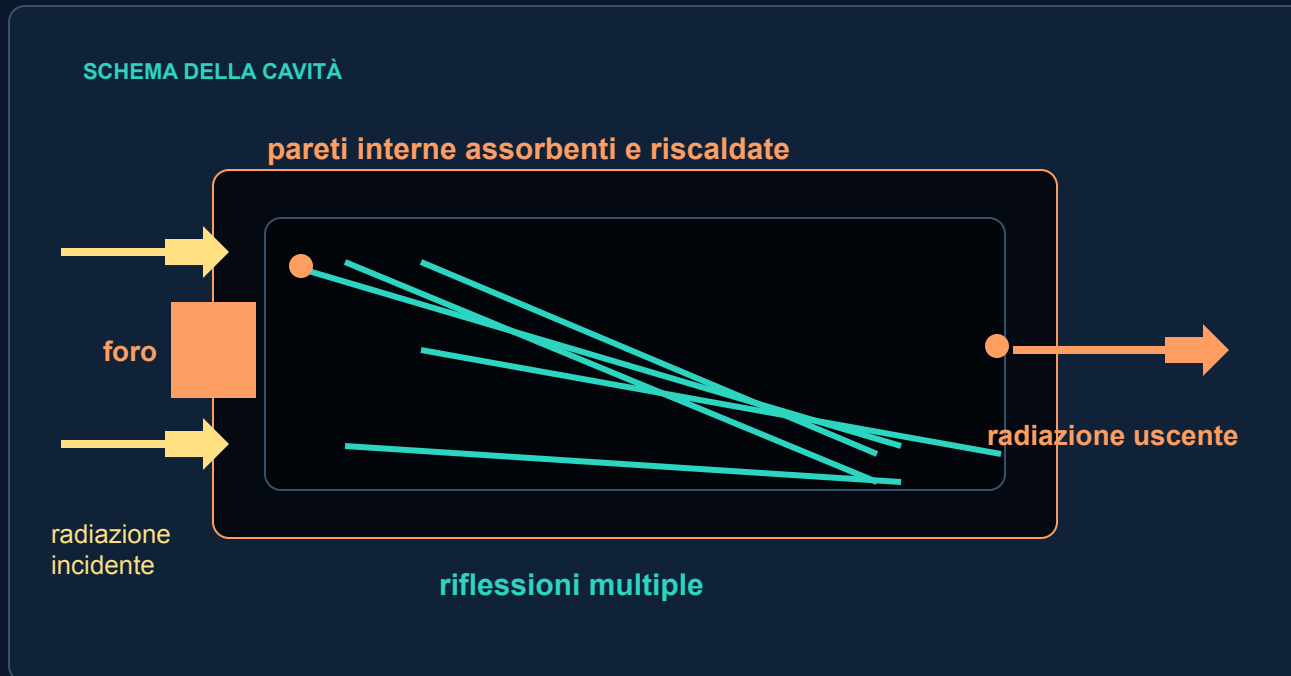
RADIAZIONE DEI SOLIDI CALDI

Un solido riscaldato ad alta temperatura diventa incandescente. A temperature maggiori la luce diventa più intensa e più bianca.



Come si realizza un corpo nero

Una cavità calda con una piccola apertura assorbe quasi tutta la radiazione incidente e si comporta come un corpo nero ideale.



Perché funziona

- 01 Il foro è piccolo rispetto alla cavità: la radiazione entrante rimbalza molte volte.
- 02 A ogni riflessione le pareti assorbono una parte dell'energia. La probabilità di uscita diventa molto bassa.
- 03 La radiazione che esce dal foro dipende soprattutto dalla temperatura della cavità, non dal materiale del rivestimento.

Il corpo nero ideale è un modello fisico.
La cavità con foro piccolo ne è una buona approssimazione.

La radiazione del corpo nero

IL PROBLEMA SPERIMENTALE

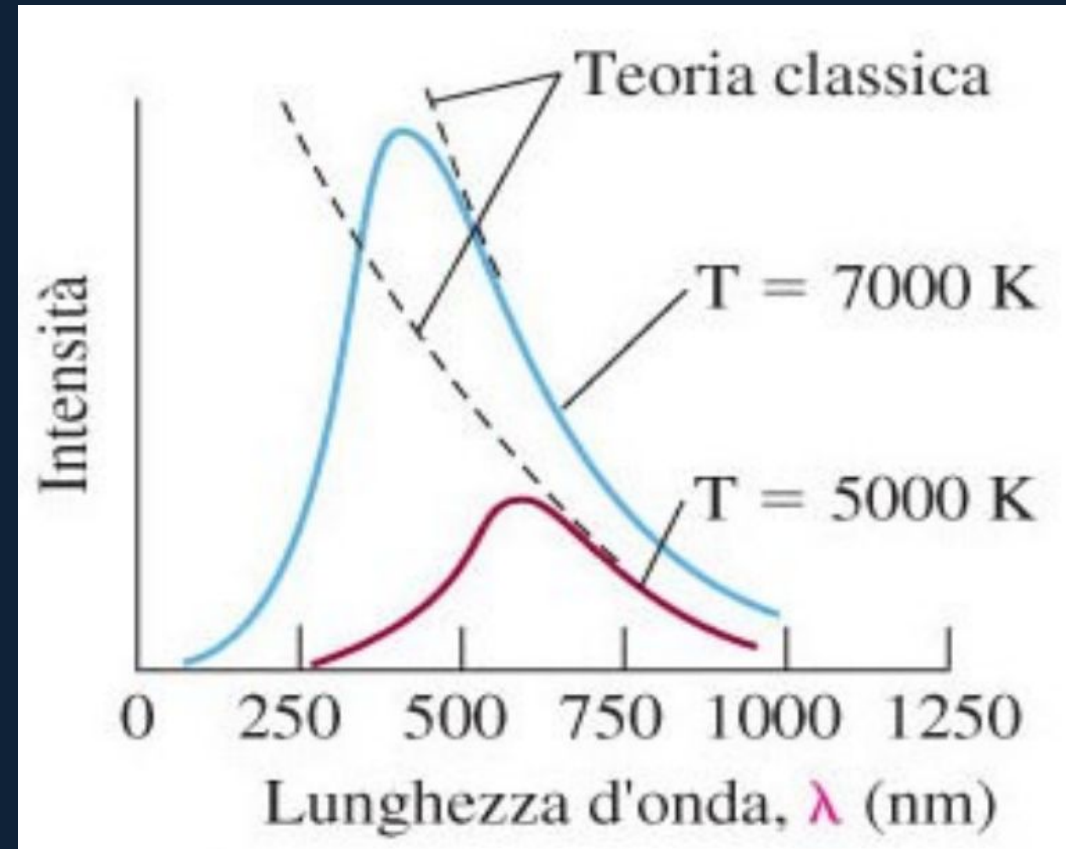
L'intensità della radiazione emessa dipende dalla lunghezza d'onda e dalla temperatura.

IL LIMITE CLASSICO

La fisica classica non riproduceva questa dipendenza. La descrizione ondulatoria classica **prevedeva un'intensità crescente senza limite al diminuire della lunghezza d'onda.**

La catastrofe dell'ultravioletto indica il fallimento della previsione classica sulla radiazione del corpo nero.

-



La quantizzazione di Planck

L'IPOTESI DEL 1900

Planck descrisse gli atomi del solido come oscillatori con frequenza ν . Ogni oscillatore può possedere solo valori discreti di energia.

$$E = nh\nu \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

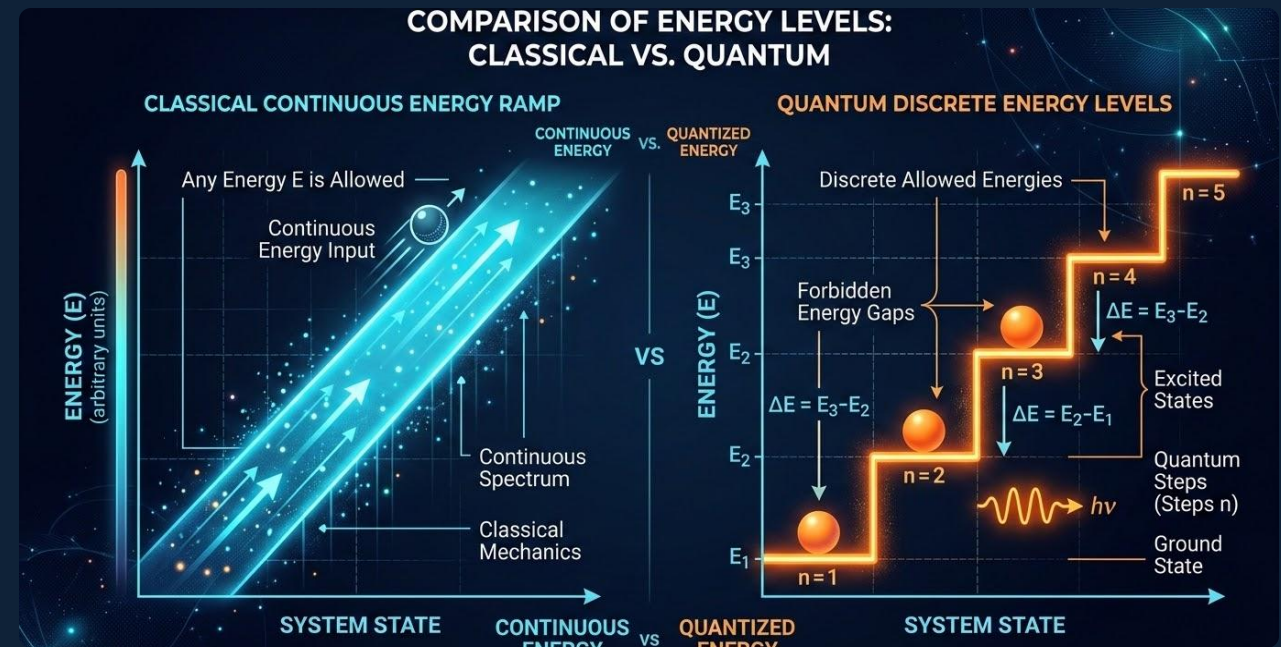
LA COSTANTE DI PLANCK

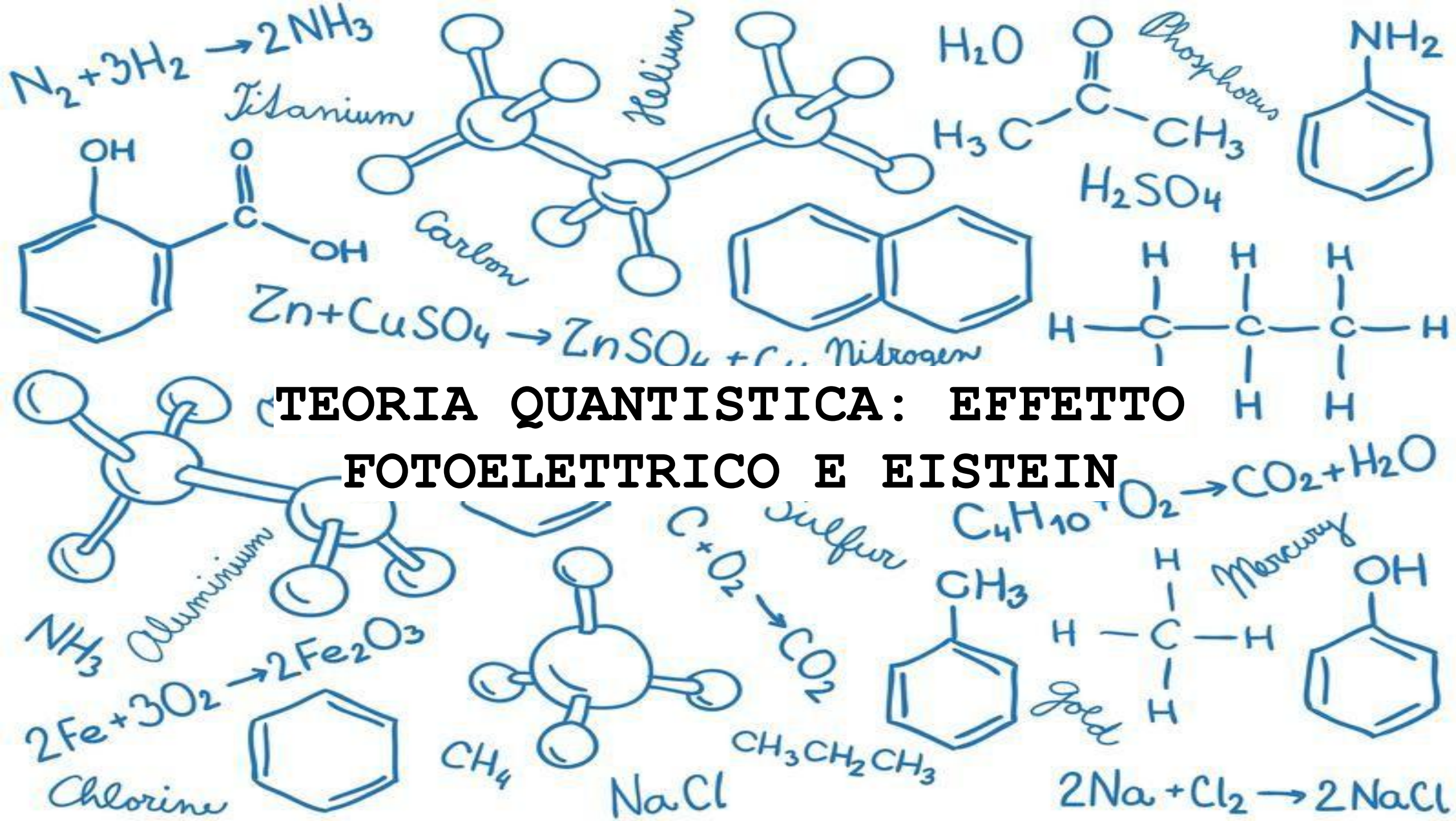
Le energie possono essere $h\nu$, $2h\nu$, $3h\nu$ e così via. Il numero intero n identifica i livelli permessi.

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

ENERGIA QUANTIZZATA

Nella descrizione classica l'energia cinetica $E = \frac{1}{2}mv^2$ varia in modo continuo. Nella descrizione quantistica sono permessi solo alcuni valori.





L'effetto fotoelettrico

EMISSIONE DI ELETTRONI

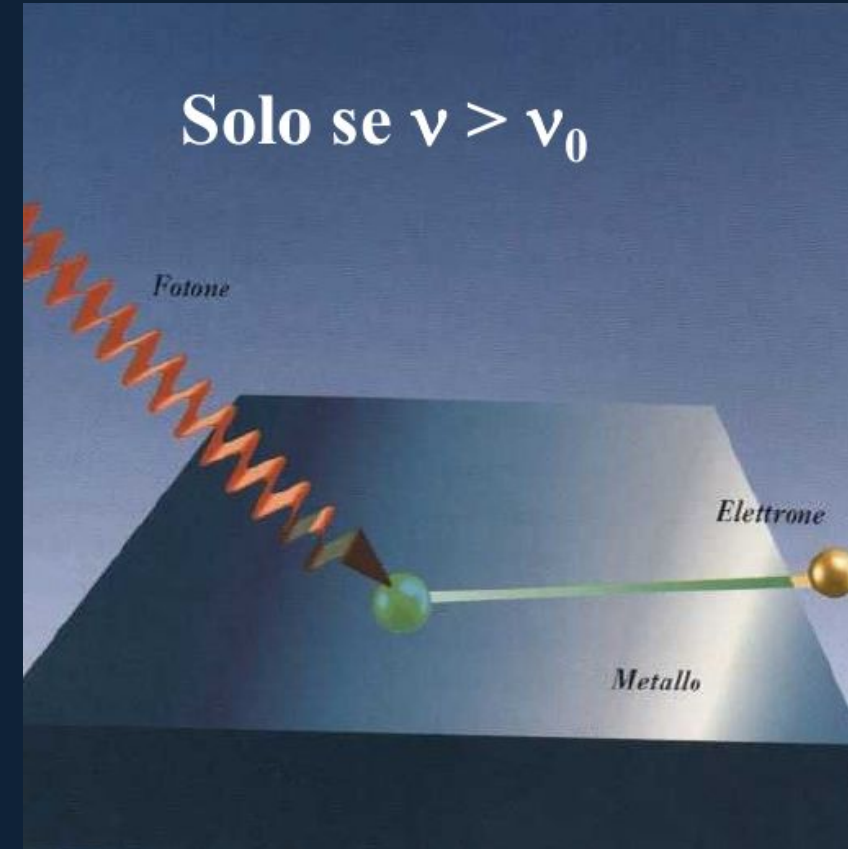
Una radiazione elettromagnetica può espellere elettroni dalla superficie di un metallo solo quando la frequenza supera una soglia ν_0 , caratteristica del materiale.

SOGLIA E INTENSITÀ

Sotto soglia non si osserva emissione, anche aumentando l'intensità. Sopra soglia, l'intensità influenza il numero di elettroni emessi.

IL LIMITE DEL MODELLO CLASSICO

Nella teoria ondulatoria classica l'energia trasportata cresce con l'intensità, proporzionale al quadrato dell'ampiezza.



Einstein e l'energia dei fotoni

L'IPOTESI DEL 1905

La luce consiste di fotoni, ciascuno con energia proporzionale alla frequenza.

$$E = h\nu$$

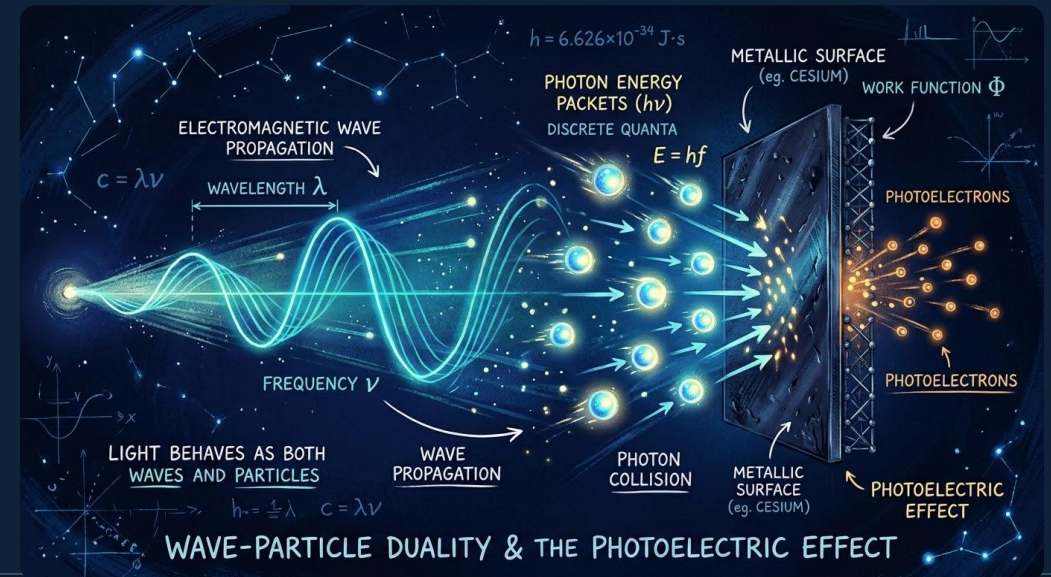
FUNZIONE LAVORO

Un fotone può espellere un elettrone se la sua energia supera il lavoro di estrazione E_0 . L'energia in eccesso diventa energia cinetica.

$$E_{\text{cin}} = h\nu - E_0$$

DUALISMO DELLA LUCE

La luce mostra proprietà ondulatorie nei fenomeni di interferenza e diffrazione e proprietà corpuscolari nell'interazione fotoelettrica con la materia.



EFFETTO FOTOELETTRICO

ENERGIA INCIDENTE
FOTONE

LAVORO DI ESTRAZIONE
SOGLIA

ENERGIA CINETICA
ELETTRONE LIBERATO

FOTONE (Luce)
Energia del fotone

ELETTRONE ESPULSO
Energia Cinetica Residua
($E_c = h\nu - W_0$)

Energia del fotone ($h\nu$)



VETRO = BARRIERA
(Lavoro di Estrazione W_0)
Energia necessaria a rompere il vetro

$$E_{\text{cinetica}} = E_{\text{fotone}} - W_{\text{estrazione}}$$

(La palla passa oltre solo se ha energia sufficiente a rompere il vetro)

Esercizio

Calcolare l'energia di un fotone di luce rossa con lunghezza d'onda 671 nm

DATI

Lunghezza d'onda $\lambda = 671$ nm. Velocità della luce $c = 3,00 \times 10^8$ m/s.

1. FREQUENZA

Convertiamo la lunghezza d'onda in metri.

$$v = c/\lambda$$

$$v = (3,00 \times 10^8)/(671 \times 10^{-9})$$

$$v = 4,47 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

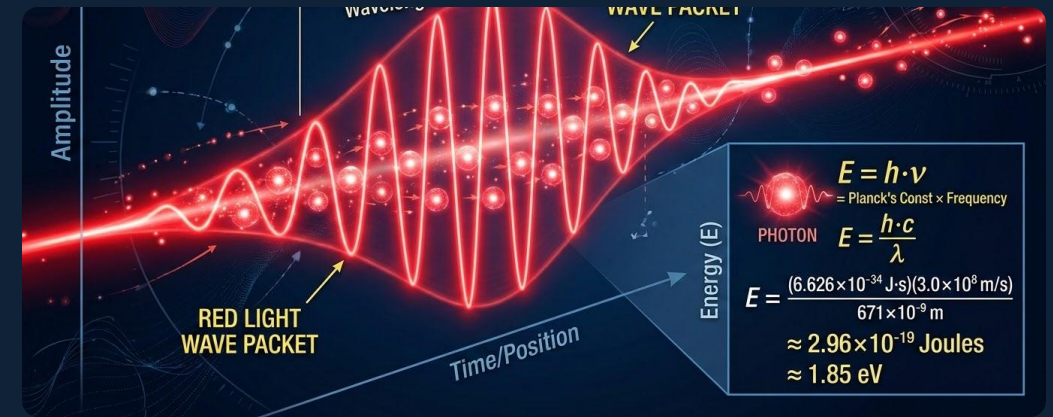
2. ENERGIA

Usiamo $h = 6,63 \times 10^{-34}$ J s.

$$E = h\nu$$

$$E = 6,63 \times 10^{-34} \times 4,47 \times 10^{14}$$

$$E = 2,96 \times 10^{-19} \text{ J}$$



Esercizio

Che lunghezza d'onda minima deve avere una luce per strappare elettroni a un metallo con funzione lavoro $1,0 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

DATI DEL QUESITO

Funzione lavoro $E_0 = 1,0 \times 10^{-19} \text{ J}$. La soglia corrisponde a $h\nu_0 = E_0$.

FREQUENZA MINIMA

La luce deve avere frequenza almeno pari a ν_0 .

$$\nu_0 = E_0/h$$

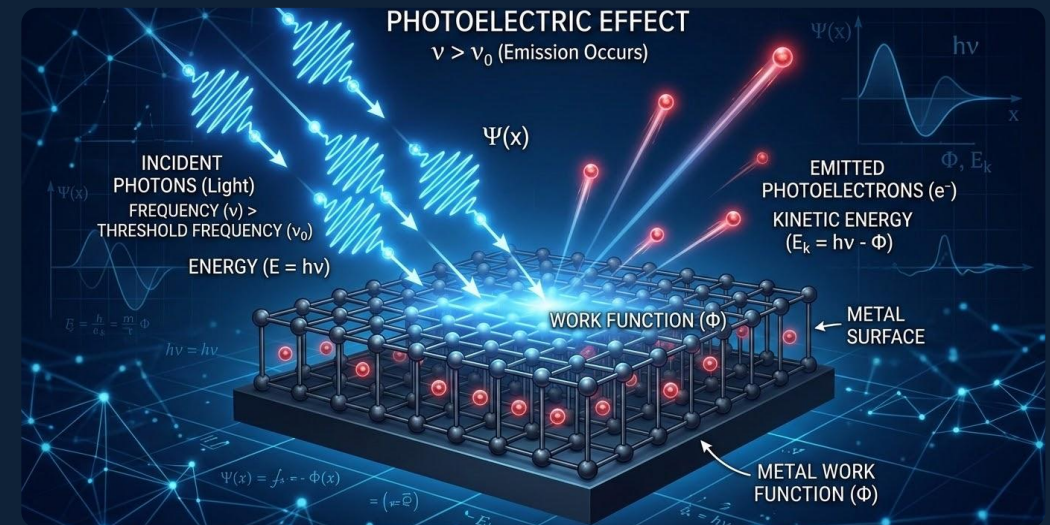
$$\nu_0 = 1,51 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

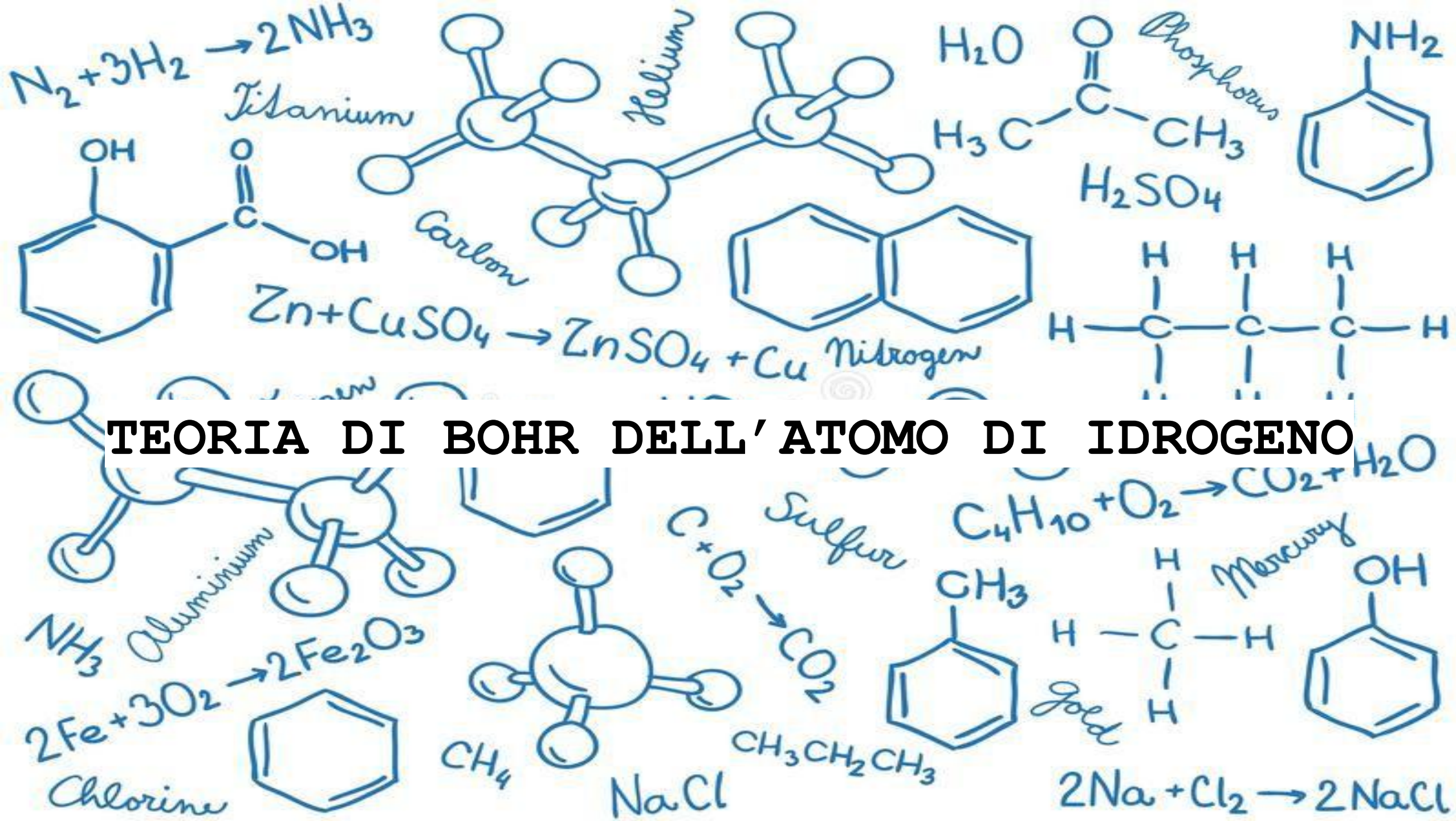
LUNGHEZZA D'ONDA MASSIMA

La condizione equivalente è $\lambda \leq \lambda_{\text{ax}}$.

$$\lambda_{\text{ax}} = hc/E_0$$

$$\lambda_{\text{ax}} = 1,99 \times 10^{-6} \text{ m} \approx 1990 \text{ nm}$$





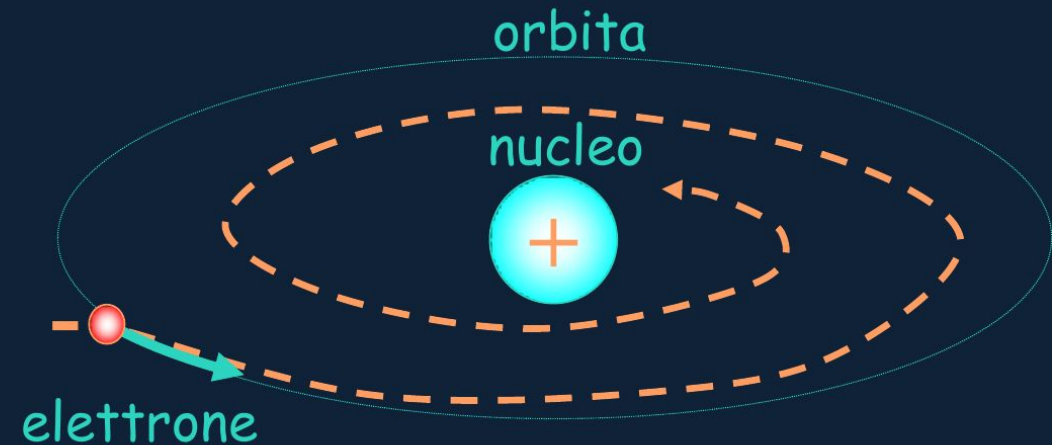
Il modello nucleare e la stabilità dell'atomo

IL MODELLO DI RUTHERFORD

Un nucleo positivo è circondato dagli elettroni. Nell'idrogeno un elettrone si muove attorno a un protone.

IL DILEMMA CLASSICO

Una carica in moto orbitale dovrebbe irradiare energia, perdere quota e seguire una spirale fino al nucleo. Il modello classico non spiega quindi la stabilità dell'atomo.



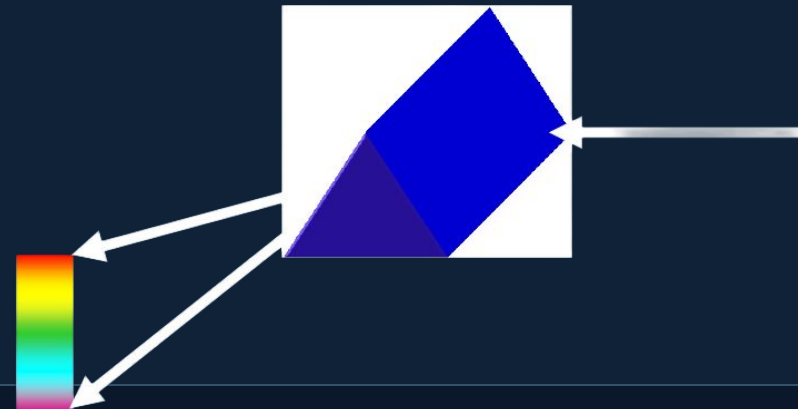
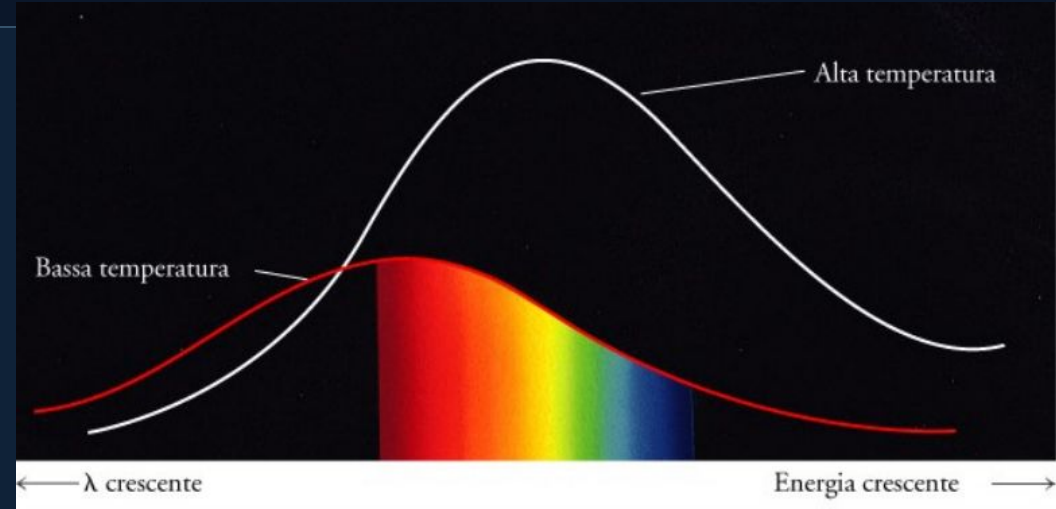
Spettri continui

L'EMISSIONE DI UN SOLIDO

Un solido riscaldato emette luce in un ampio intervallo di lunghezze d'onda. Lo spettro continuo contiene tutte le lunghezze d'onda, con intensità diverse.

LA SEPARAZIONE DELLA LUCE

Un prisma separa le componenti della luce bianca. Ogni teoria atomica deve spiegare anche gli spettri osservati.



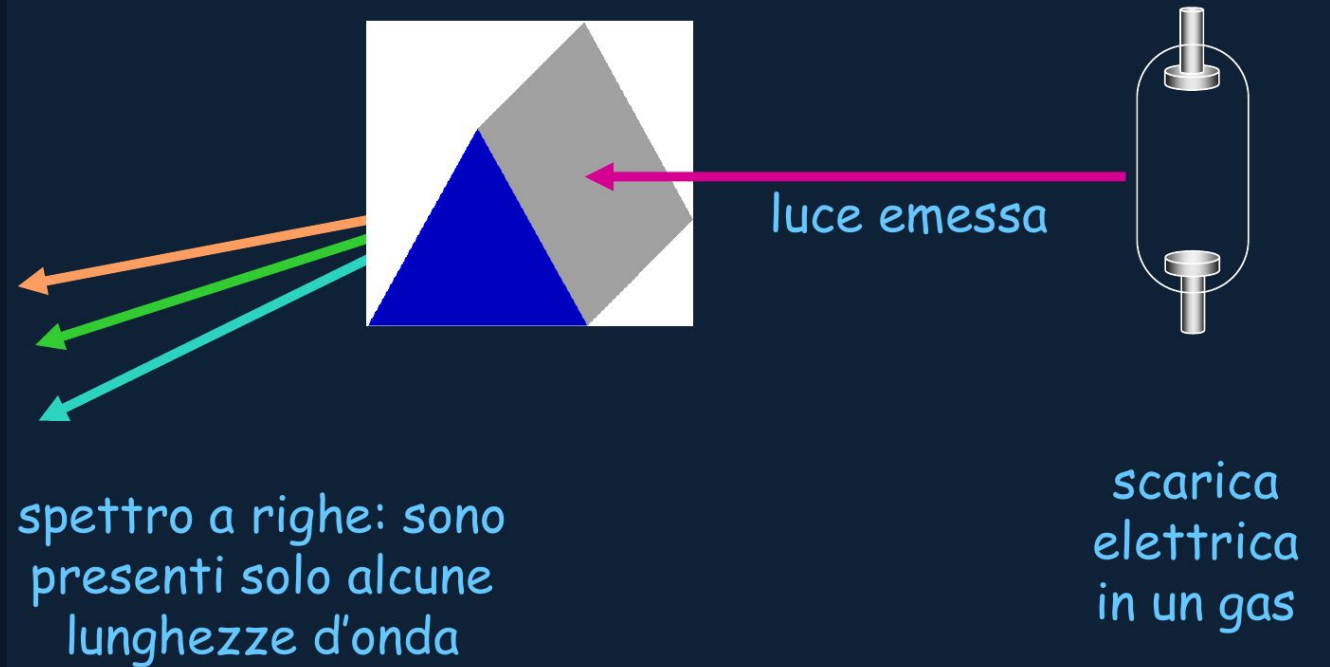
Spettri a righe

L'EMISSIONE DEI GAS

Alla fine dell'Ottocento si osservò che gas riscaldati o attraversati da una scarica elettrica emettono luce solo a determinate lunghezze d'onda.

FIRMA SPETTRALE

Dopo la separazione con un prisma, la luce del gas produce uno spettro a righe.



Lo spettro dell'idrogeno e la formula di Balmer

REGOLARITÀ DELLE RIGHE

Lo spettro dell'idrogeno è particolarmente semplice. Balmer ricavò una relazione empirica per le lunghezze d'onda della serie visibile.

$$\frac{1}{\lambda} = 1,097 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ m}^{-1}$$

$n = 3, 4, 5, \dots$

UN ESEMPIO DI CALCOLO

Sostituendo il primo valore intero $n = 3$ nella formula:

$$\lambda = 656 \text{ nm}$$

Corrisponde alla prima riga rossa visibile dello spettro

SPETTRO DI EMISSIONE DELL'IDROGENO

Righe discrete della serie di Balmer nella regione dello spettro visibile (da 400 nm a 700 nm).



Serie visibile di Balmer (transizioni a $n = 2$)

$n = 3 \rightarrow 2$: $\lambda = 656,3 \text{ nm}$ **Rosso (H- α)**

$n = 4 \rightarrow 2$: $\lambda = 486,1 \text{ nm}$ **Ciano (H- β)**

$n = 5 \rightarrow 2$: $\lambda = 434,0 \text{ nm}$ **Blu (H- γ)**

$n = 6 \rightarrow 2$: $\lambda = 410,2 \text{ nm}$ **Viola (H- δ)**

Il primo postulato di Bohr

LIVELLI ENERGETICI DISCRETI

Nel 1913 Bohr spiegò la stabilità e lo spettro a righe dell'idrogeno introducendo valori di energia permessi.

IL PRIMO POSTULATO

Un elettrone in un atomo può avere solo valori specifici dell'energia noti come livelli energetici. Tale idea è ripresa dalla quantizzazione dell'energia di Planck. Sulla base di considerazioni elettrostatiche egli derivò inoltre la seguente formula per i livelli energetici dell'elettrone nell'atomo di idrogeno

formula per i livelli energetici dell'elettrone nell'atomo di idrogeno

ENERGIA DELL'IDROGENO

Il numero quantico principale n può assumere solo valori interi positivi.

$$E_n = -R_H/n^2$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$R_H = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Costante di Rydberg (R_H):

$$R_H = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$$

- L'energia è negativa perché l'elettrone è legato al nucleo.
- Per $n = 1$ l'atomo si trova nello stato a minima energia.

Emissione di luce e transizioni

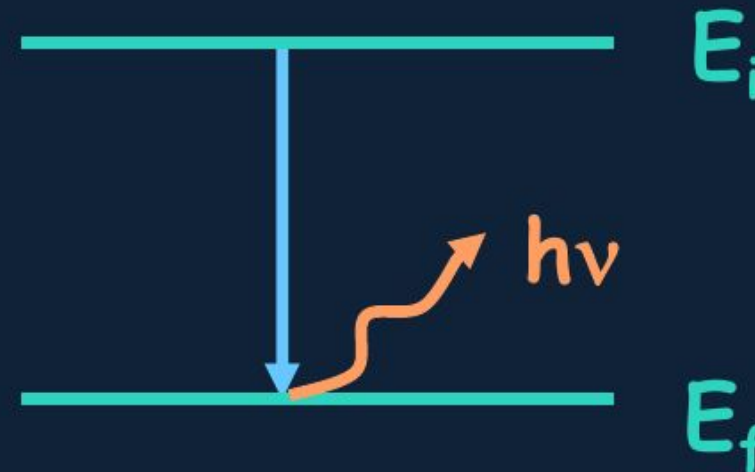
IL SECONDO POSTULATO

Un elettrone in un atomo può cambiare energia solo saltando da un livello energetico ad un altro, subendo quelle che sono note come transizioni. In seguito ad una transizione da un livello di energia dell'atomo più alto (E_i iniziale) ad uno più basso (E_f finale) si ha emissione di luce con una frequenza tale che il fotone emesso ha energia pari alla differenza fra i due livelli energetici.

CONSERVAZIONE DELL'ENERGIA

L'energia del fotone coincide con la differenza fra i livelli.

$$\begin{aligned}E_f + h\nu &= E_i \\h\nu &= E_i - E_f \\\nu &= (E_i - E_f)/h\end{aligned}$$



La formula di Balmer dal modello di Bohr

01

ENERGIE INIZIALE E FINALE

Livelli energetici per l'elettrone quantizzato nell'atomo:

$$E_i = -R_{\infty}/n_i^2$$

$$E_f = -R_{\infty}/n_f^2$$



02

DIFFERENZA DI ENERGIA

L'energia del fotone emesso corrisponde al salto quantico:

$$h\nu = R_{\infty} (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$$



03

LUNGHEZZA D'ONDA

Sostituendo $\nu = c/\lambda$ si ritrova la costante di Balmer:

$$1/\lambda = (R_{\infty}/hc) (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$$

COSTANTE DI BALMER

$$R_{\infty}/(hc) \approx 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Le serie spettrali dell'idrogeno

IL LIVELLO DI ARRIVO

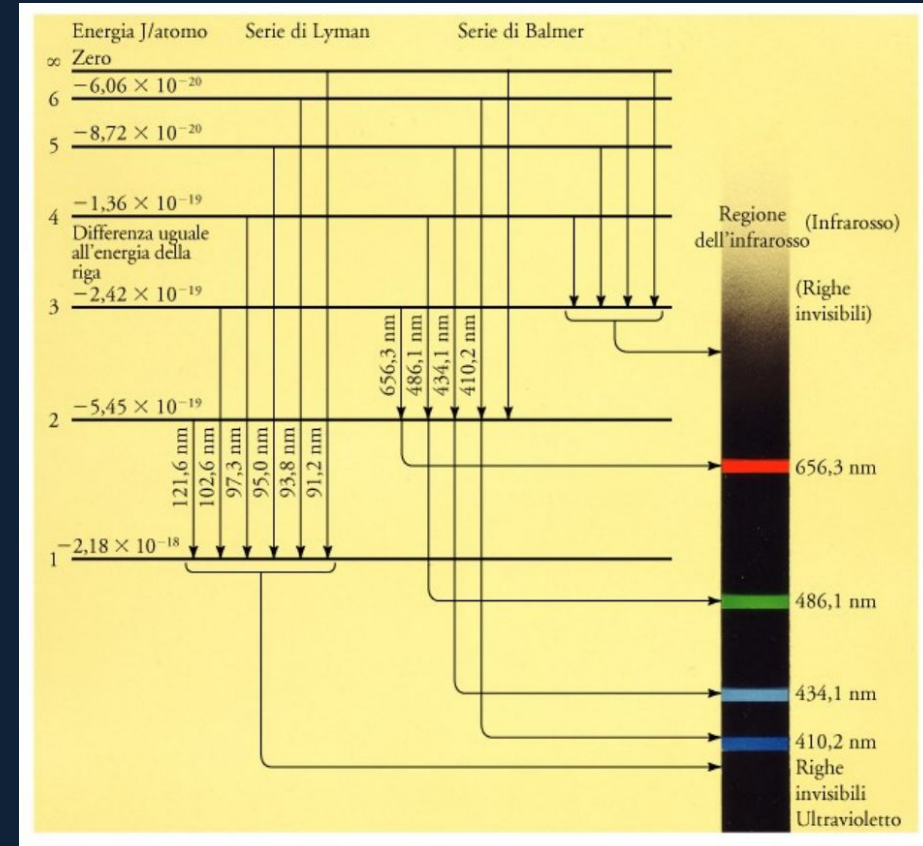
La serie di Balmer raccoglie le transizioni dai livelli $n_i > 2$ al livello $n_f = 2$. Altri livelli finali producono altre serie.

SERIE PRINCIPALI

Lyman: $n_f = 1$, ultravioletto.

Balmer: $n_f = 2$, visibile.

Paschen: $n_f = 3$, infrarosso.



Assorbimento e stati eccitati

ASSORBIMENTO DI UN FOTONE

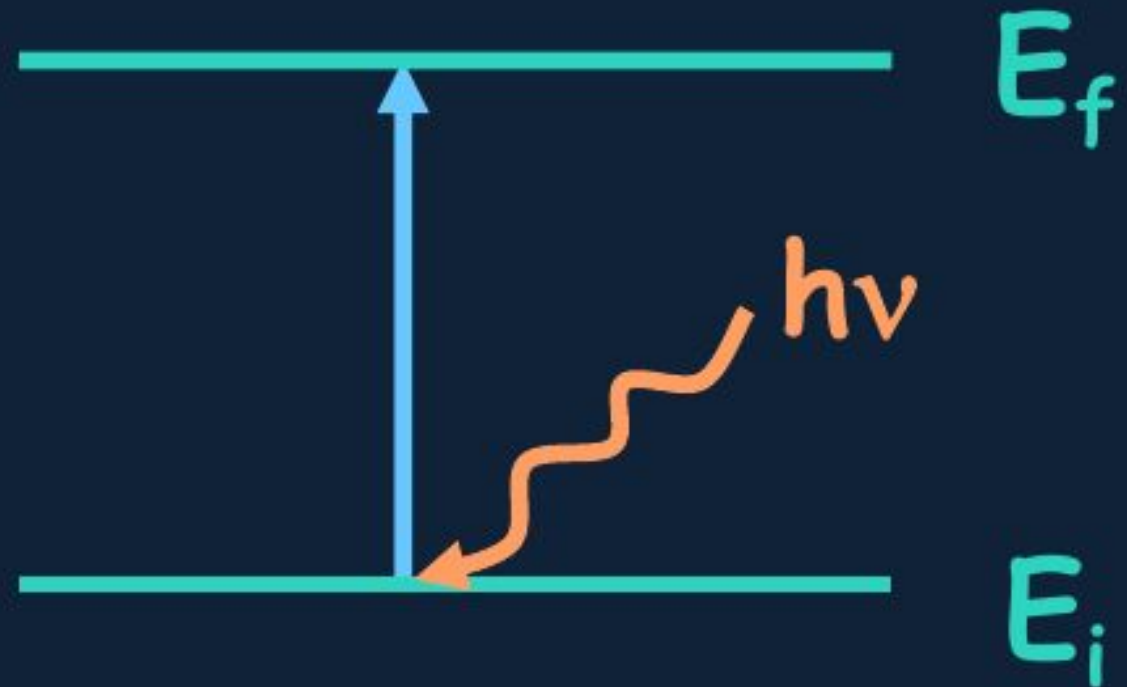
Un elettrone in un livello energetico più basso assorbe un fotone di energia appropriata e passa a un livello più alto.

$$E_i + h\nu = E_f$$

$$h\nu = E_f - E_i$$

STATO FONDAMENTALE ED ECCITATO

Nell'idrogeno il livello più basso è $n = 1$, detto stato fondamentale. I livelli di energia superiore sono stati eccitati.



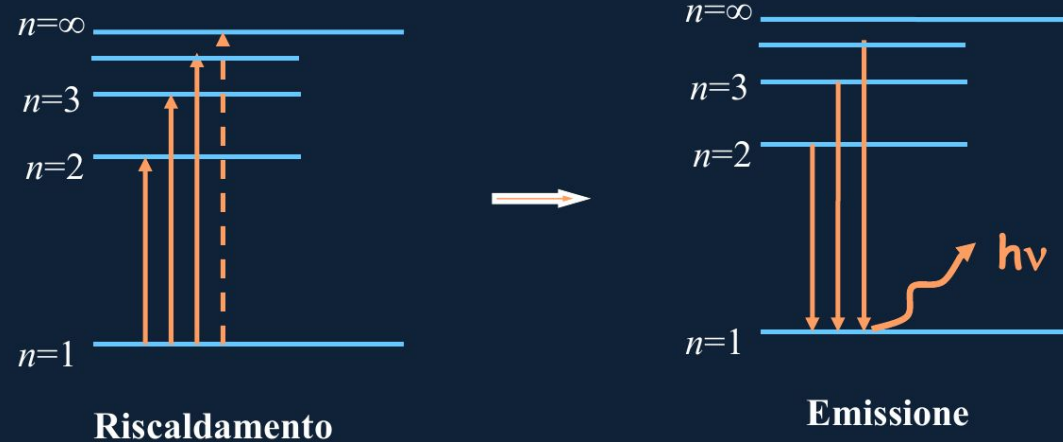
Eccitazione per riscaldamento

TRASFERIMENTO DI ENERGIA

Per raggiungere uno stato eccitato l'elettrone può assorbire un fotone con energia $h\nu$ appropriata.

URTI ED EMISSIONE

L'eccitazione può avvenire anche per assorbimento di energia cinetica durante gli urti fra atomi. Il ritorno a livelli inferiori permette di osservare la luce emessa dell'idrogeno caldo.



Le orbite quantizzate di Bohr

MODELLO ATOMICO

ORBITA ED ENERGIA

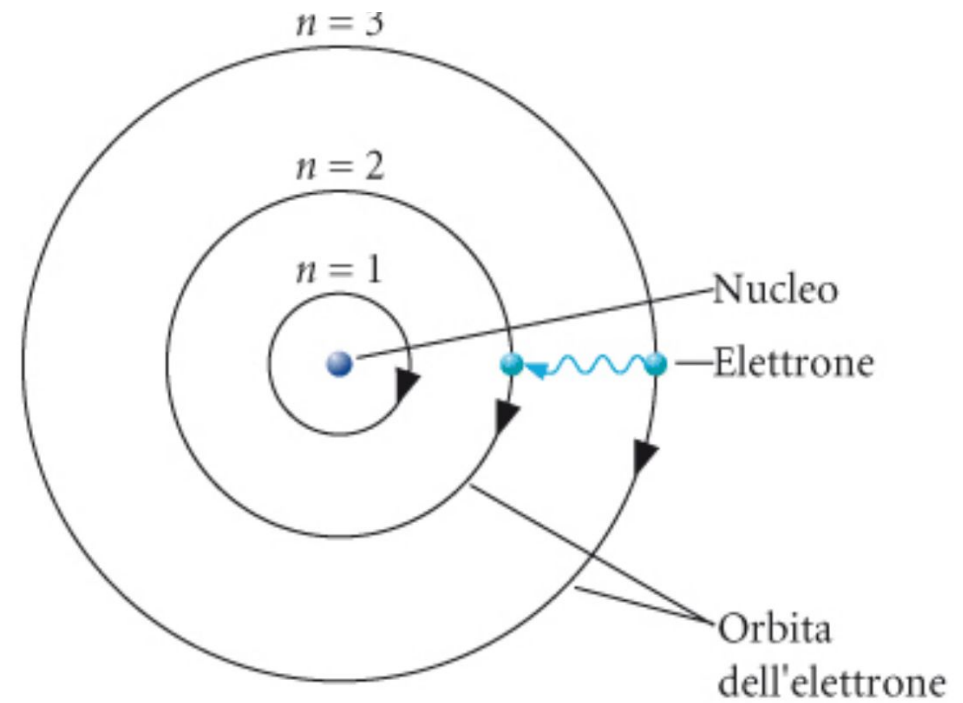
1. Orbite Permesse

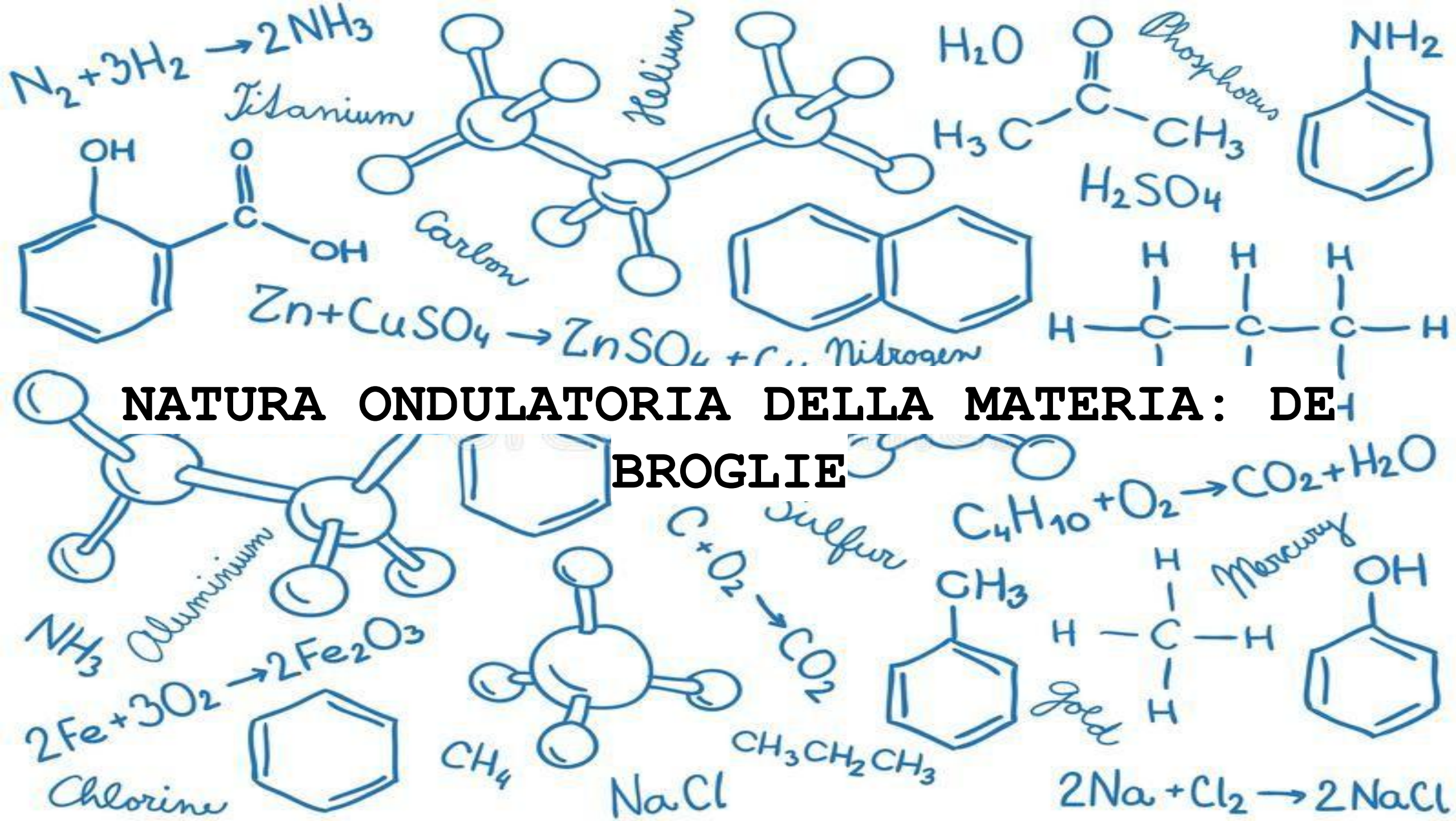
Nel modello di Bohr l'elettrone dell'idrogeno occupa solo specifiche orbite circolari stazionarie.

2. Numero Quantico Principale

Ogni orbita è associata a un valore discreto del numero quantico principale n ($n = 1, 2, 3...$).

SCHEMA DELL'ATOMO





Dal modello di Bohr alla meccanica quantistica

MODELLO DI BOHR

SUCCESSI E LIMITI

Orbita Circolare

Bohr attribuiva all'elettrone un'orbita circolare con un raggio calcolabile per ogni numero quantico n .

✓ Spiegazione Sperimentale

Il modello spiegava con successo vari aspetti sperimentali dell'atomo di idrogeno.

✗ Limite Fondamentale

Non si generalizzava agli atomi con più elettroni (sistemi polielettronici).



MECCANICA QUANTISTICA

UNA DESCRIZIONE ONDULATORIA

Nuova Teoria Atomica

La struttura atomica si descrive mediante le leggi della meccanica quantistica.

≈ Natura Ondulatoria

Tiene conto in modo fondamentale della natura ondulatoria delle particelle microscopiche.

★ Paradigma Moderno

Supera il concetto di traiettoria deterministica in favore di una descrizione probabilistica e ondulatoria.

La relazione di de Broglie

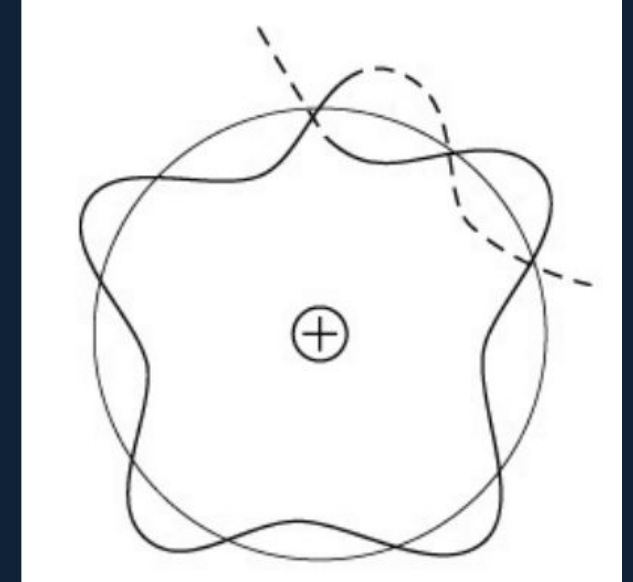
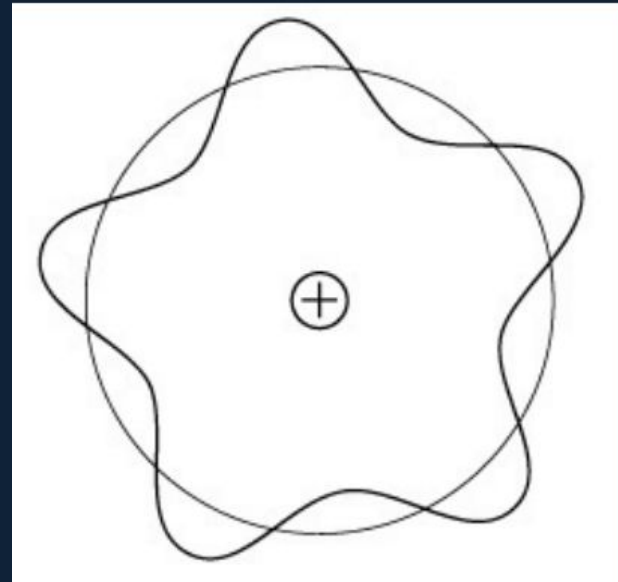
ONDE ASSOCIATE ALLA MATERIA

Nel 1923 de Broglie propose che anche le particelle materiali manifestino proprietà ondulatorie. Una particella di massa m e velocità v ha lunghezza d'onda associata λ .

$$\lambda = h/(mv)$$

SCALA MICROSCOPICA

Un'onda circolare attorno al nucleo contiene un numero intero di lunghezze d'onda. Per oggetti macroscopici λ è troppo piccola per osservare normalmente effetti ondulatori.



La relazione di de Broglie: il ragionamento

01 · IL PUNTO DI PARTENZA: IL FOTONE

Per un fotone valgono entrambe le relazioni:

$$E = h\nu \quad E = pc$$

Uguagliando le due espressioni dell'energia:

$$pc = h\nu \quad p = h\nu/c$$

Poiché $c = \lambda\nu$, si ottiene:

$$p = h/\lambda$$

p indica la quantità di moto del fotone.

02 · L'IPOTESI DI DE BROGLIE

De Broglie estende la relazione dei fotoni alle particelle materiali, associando loro un comportamento ondulatorio.

$$\lambda = h/p$$

03 · IL LIMITE NON RELATIVISTICO

Per $v \ll c$, la quantità di moto è $p \approx mv$:

$$\lambda \approx h/(mv)$$

h è la costante di Planck.

Lunghezza d'onda: oggetto ed elettrone

OGGETTO MACROSCOPICO

Per $m = 1,0 \text{ kg}$ e $v = 1 \text{ m/s}$ la lunghezza d'onda è trascurabile.

$$\lambda = (6,63 \times 10^{-34}) / (1,0 \times 1)$$

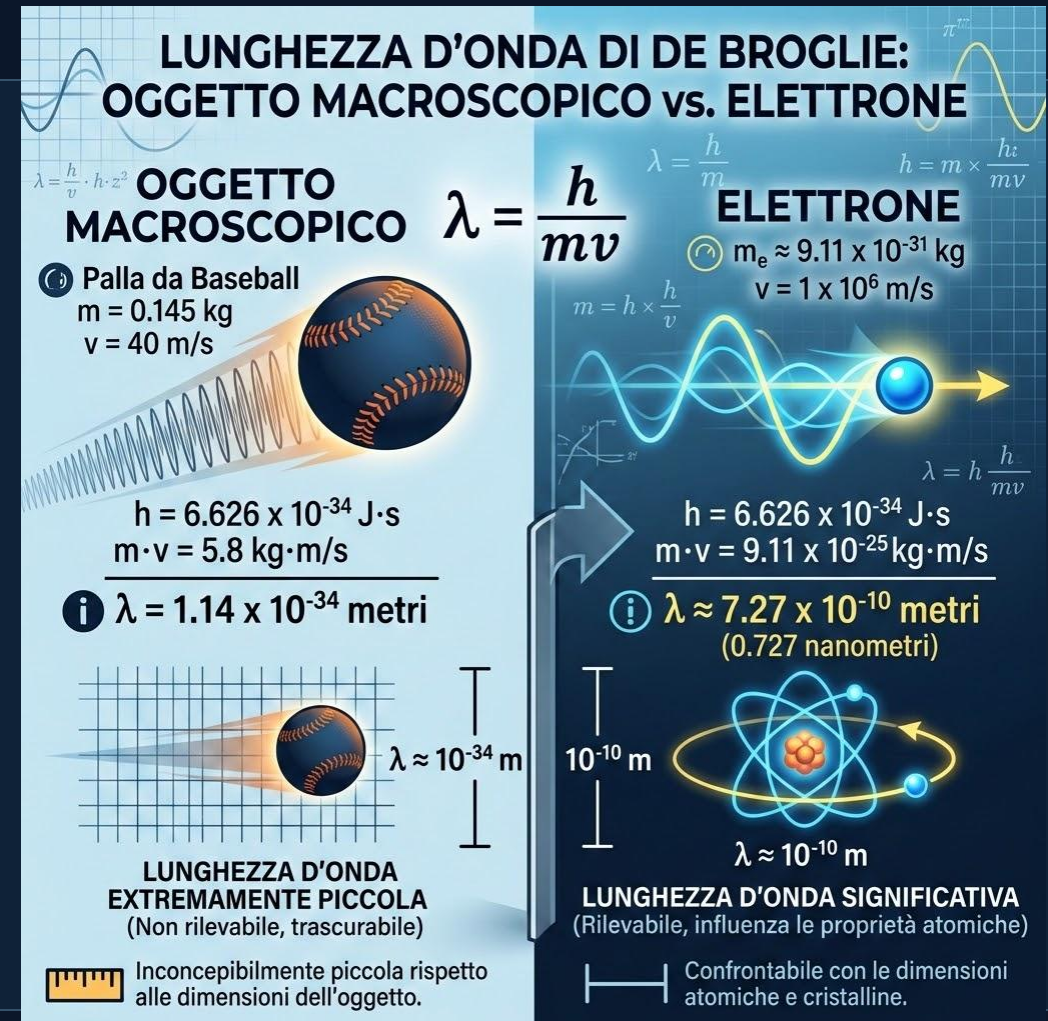
$$\lambda = 6,63 \times 10^{-34} \text{ m}$$

ELETTRONE

Per $m = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ e $v = 4,19 \times 10^6 \text{ m/s}$, corrispondente all'accelerazione con 50 V, λ è dell'ordine delle dimensioni atomiche.

$$\lambda = h / (mv)$$

$$\lambda = 1,74 \times 10^{-10} \text{ m} = 1,74 \text{ \AA}$$



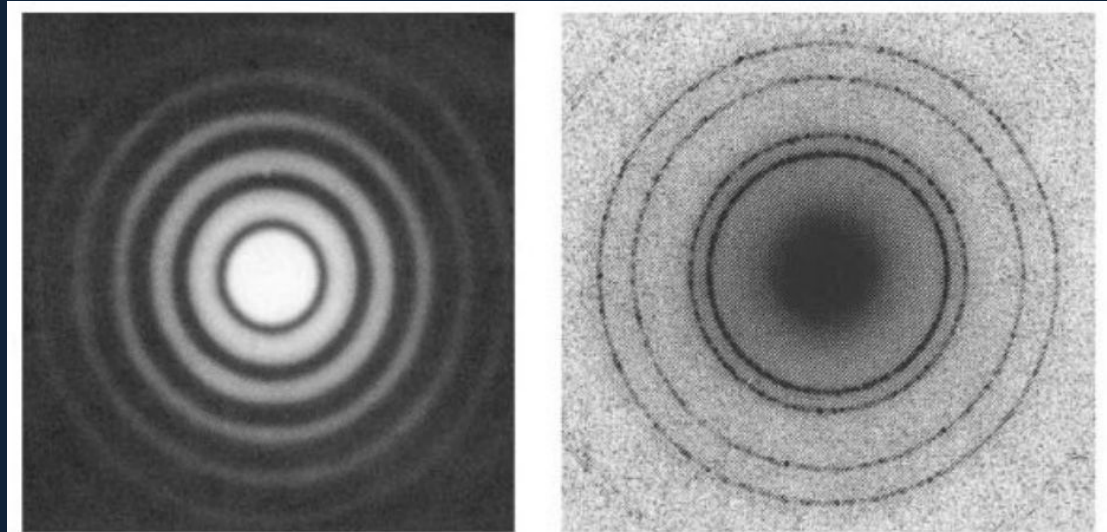
La diffrazione degli elettroni

EVIDENZA SPERIMENTALE

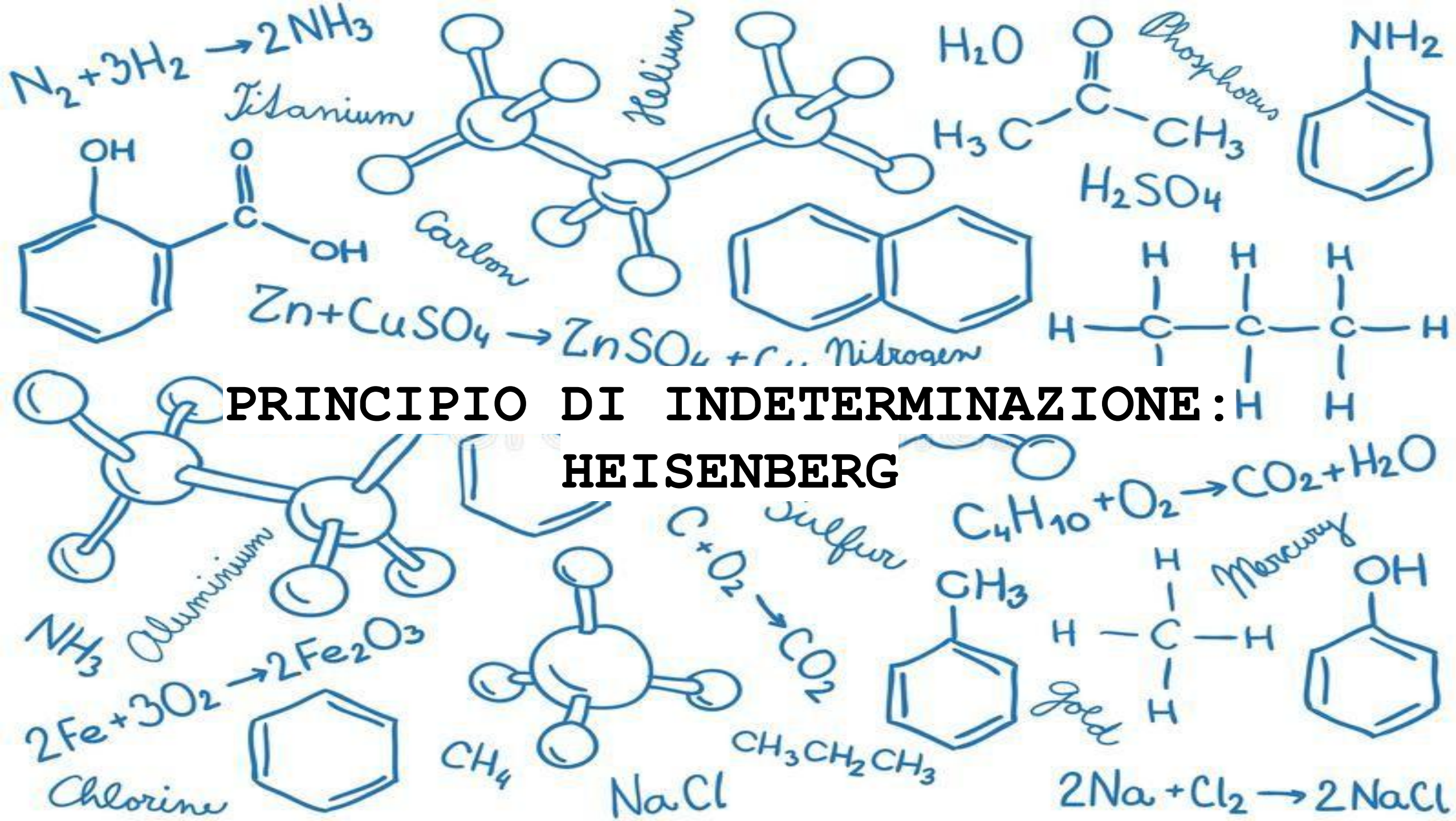
Un fascio di elettroni diffrange quando attraversa un cristallo, come accade ai raggi X con lunghezze d'onda dell'ordine dell'ångström.

ESPERIMENTI DEL 1927

Davisson e Germer e, indipendentemente, Thomson osservarono la diffrazione elettronica. Le figure confrontano diffrazione dei raggi X e degli elettroni.



(Sinistra) Diffrazione di raggi X da parte di un foglio di metallo. (Destra) Diffrazione di elettroni da parte di un foglio di metallo, che conferma le proprietà ondulatorie degli elettroni.



Il principio di indeterminazione

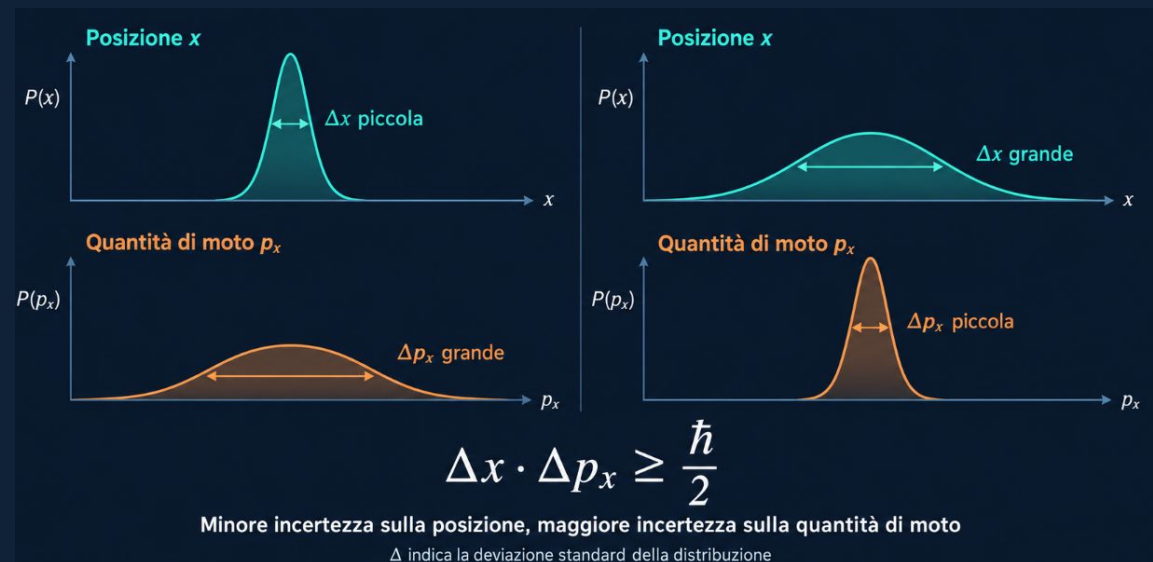
HEISENBERG, 1927

La posizione e la quantità di moto di una particella non possono avere entrambe incertezza arbitrariamente piccola.

RELAZIONE FONDAMENTALE

Δx è l'incertezza sulla posizione lungo x , Δv_x quella sulla velocità e m la massa.

$$\Delta x \cdot m\Delta v_x \geq h/(4\pi)$$



Indeterminazione e traiettoria

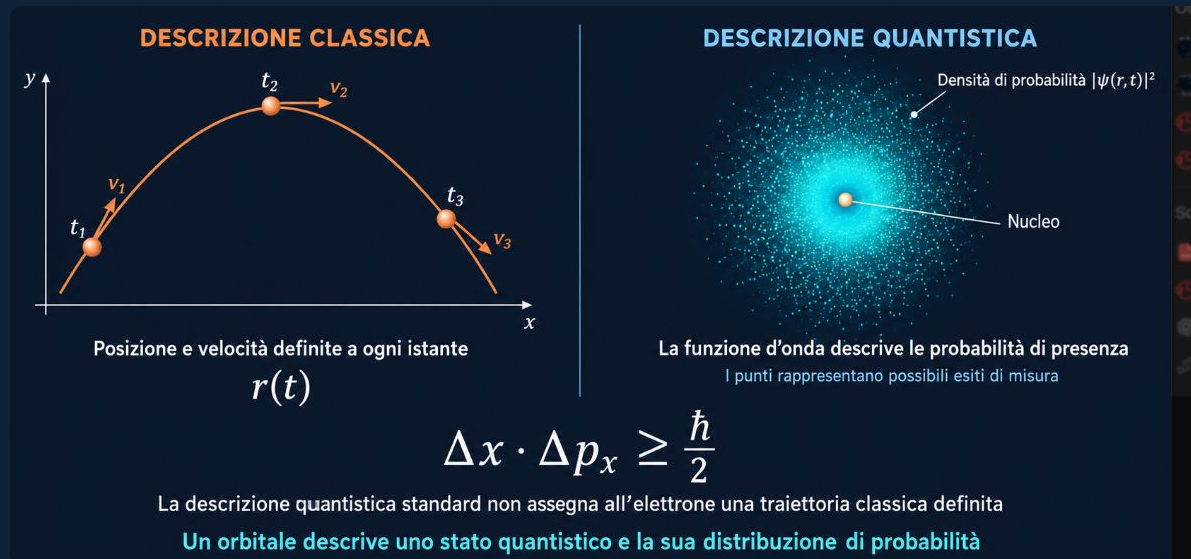
EFFETTI ALLE DIVERSE SCALE

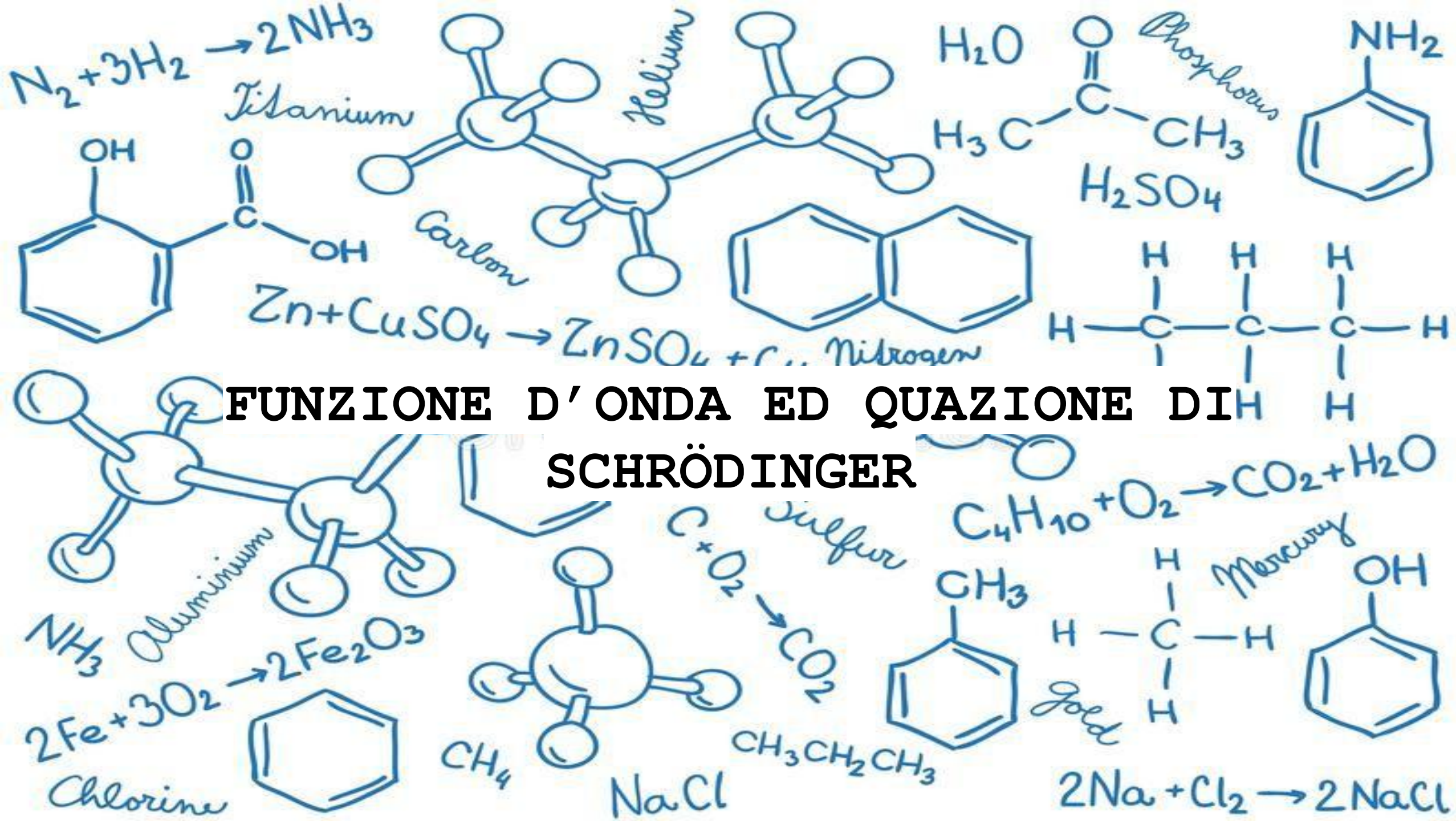
Per una massa macroscopica le incertezze sono normalmente trascurabili. Per un elettrone possono diventare confrontabili con le dimensioni dell'atomo.

IL CONCETTO DI TRAIETTORIA

Una traiettoria richiede le coordinate $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$ a ogni istante e quindi anche la velocità, per esempio $v_x = dx/dt$. Il principio limita la determinazione simultanea di queste grandezze.

$$\Delta x \cdot m\Delta v_x \geq h/(4\pi)$$





La materia mostra proprietà ondulatorie

L'IPOTESI DI DE BROGLIE

A una particella di quantità di moto p si associa una lunghezza d'onda:

$$\lambda = h/p$$

Diffrazione e interferenza degli elettroni mostrano che la sola traiettoria classica non basta a descrivere i fenomeni.

h è la costante di Planck.

LA MECCANICA ONDULATORIA

La funzione d'onda permette di descrivere interferenza e sovrapposizione degli stati.

$$\Psi(r,t)$$

Serve una legge che descriva l'evoluzione di questa funzione: l'equazione di Schrödinger.

Le misure dell'elettrone danno esiti localizzati.

Dalle equazioni di Newton all'equazione di Schrödinger

MECCANICA CLASSICA

Il modello descrive una particella materiale con posizione e velocità definite.

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}$$

Note le forze e le condizioni iniziali, le equazioni di Newton determinano la traiettoria della particella.

$$\mathbf{r}(t)$$

MECCANICA QUANTISTICA

L'elettrone mostra proprietà ondulatorie. La funzione d'onda Ψ descrive il suo stato.

$$i\hbar \partial\Psi/\partial t = \hat{H}\Psi$$

Dato lo stato iniziale, Schrödinger descrive come cambia Ψ nel tempo. Da Ψ si ricavano le probabilità di misura.

$$|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$$

L'equazione di Schrödinger e il suo significato

ENERGIA E DESCRIZIONE ONDULATORIA

Per una particella non relativistica:

$$E = p^2/(2m) + V$$

Nella rappresentazione delle posizioni, energia e quantità di moto agiscono su Ψ :

$$\hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$$

$$\hbar = h/(2\pi) \quad V = \text{energia potenziale}$$

L'EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

$$i\hbar \partial\Psi/\partial t = \hat{H}\Psi$$

In una dimensione:

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2m) \partial^2/\partial x^2 + V$$

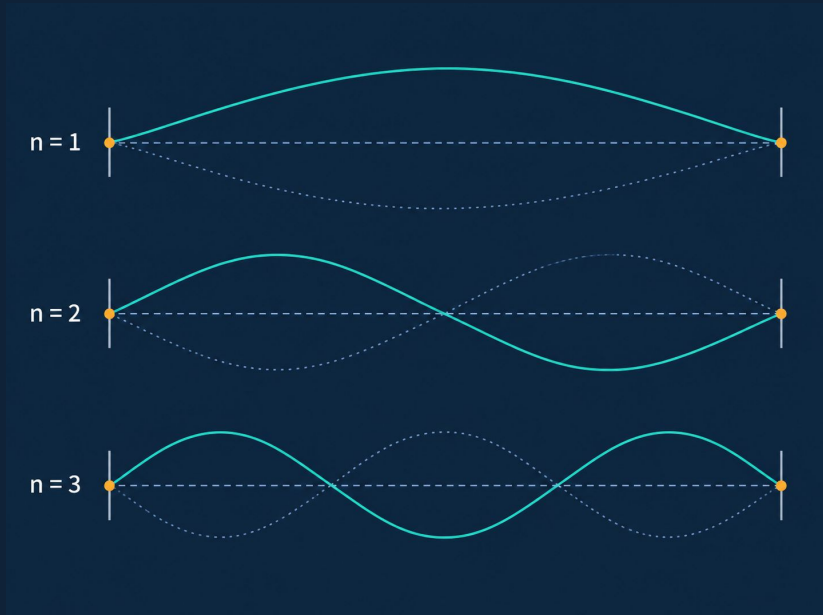
$\hat{H}$ rappresenta l'energia totale.
L'equazione determina come cambia la funzione d'onda nel tempo.

Schrödinger introduce una legge quantistica, motivata dai fenomeni e verificata sperimentalmente.

La quantizzazione nei modi di un'onda confinata

UNA CORDA CON ESTREMITÀ FISSE

I due estremi devono essere nodi:
lo spostamento resta sempre nullo.



I VINCOLI SELEZIONANO I MODI

Nella lunghezza L deve entrare
un numero intero di mezze lunghezze d'onda.

$$L = n \lambda / 2$$

$$\lambda = 2L/n$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

La discrezione dei modi emerge
in modo naturale dalle condizioni al contorno.

$$\text{Frequenze ammesse: } f = n v / (2L)$$

Nella corda classica sono discreti i modi e le loro frequenze. L'energia resta continua.

Il confinamento seleziona le energie ammesse

L'ELETTRONE IN UNA SCATOLA IDEALE

In un pozzo infinito di larghezza L ,
la funzione d'onda si annulla ai bordi:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

$$\lambda_n = 2L/n$$

$$E_n = n^2 h^2 / (8mL^2)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

m = massa dell'elettrone

STATI STAZIONARI ED ENERGIE

Con un potenziale indipendente dal tempo,
gli stati a energia definita soddisfano:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Il confinamento e le condizioni al contorno
selezionano i valori di energia ammessi.

Negli atomi, gli stati elettronici legati
hanno energie discrete. Gli orbitali
descrivono stati e distribuzioni di probabilità.

I modi ammessi dell'onda confinata spiegano perché l'energia può assumere valori discreti.

La funzione d'onda

SCHRÖDINGER, 1926

La meccanica ondulatoria descrive matematicamente le proprietà ondulatorie delle particelle microscopiche e, in particolare, dell'elettrone.

DESCRIZIONE PROBABILISTICA

All'elettrone si associa una funzione complessa $\Psi(x,y,z)$. Il suo modulo quadro descrive la densità di probabilità di presenza nello spazio.

Densità di probabilità = $|\Psi(x,y,z)|^2$

DALLA TRAIETTORIA ALLA PROBABILITÀ

Alla descrizione deterministica classica si affianca una descrizione statistica. Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger sono le funzioni d'onda.

INFORMAZIONI DALLE SOLUZIONI

Le soluzioni possono dipendere dal tempo. Gli stati stazionari hanno energie definite, che nei sistemi legati assumono valori discreti. Esistono regioni in cui la funzione d'onda è nulla.

IL LIMITE CLASSICO

La meccanica quantistica è più generale della meccanica classica e la contiene come limite.

ORBITALI ATOMICI E I NUMERI QUANTICI

Gli orbitali atomici

01 · DEFINIZIONE

La funzione d'onda che descrive un elettrone in un atomo si chiama **orbitale atomico**.

ESPRESSIONE MATEMATICA

$$\Psi(x, y, z)$$

02 · INTERPRETAZIONE FISICA

Il modulo quadro $|\Psi|^2$ descrive la **densità di probabilità** di trovare l'elettrone.

SIGNIFICATO SPAGIALE

Un orbitale si rappresenta spesso come una **regione dello spazio** con elevata probabilità di presenza.

I quattro numeri quantici

01 · L'ORBITALE

Tre numeri quantici identificano un orbitale atomico. I valori permessi derivano dalla soluzione dell'equazione di Schrödinger.

NUMERI QUANTICI DELL'ORBITALE

$$n, \ell, m_{\ell}$$

02 · L'ELETTRONE

Un quarto numero quantico, m_s , descrive lo spin dell'elettrone. La descrizione completa distingue quindi orbitale e stato di spin.

STATO COMPLETO DELL'ELETTRONE

$$n, \ell, m_{\ell}, m_s$$

Il numero quantico principale n

01 · VALORI ED ENERGIA

n assume valori interi positivi. Per sistemi monoelettronici (H , He^+ , Li^{2+}), l'energia dipende solo da n . Negli atomi polielettronici dipende anche da ℓ .

RELAZIONE ENERGETICA

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E \propto -1/n^2$$

02 · DIMENSIONE E GUSCI

A n maggiore corrispondono orbitali mediamente più estesi. Gli orbitali con lo stesso n appartengono allo stesso **strato elettronico** (guscio).

DENOMINAZIONE DEI GUSCI

$$K: n = 1 \quad L: n = 2$$

$$M: n = 3 \quad N: n = 4$$

Il numero quantico angolare ℓ

01 · FORMA DELL'ORBITALE

Il numero quantico angolare, o azimutale, distingue le forme degli orbitali con lo stesso n .

VALORI AMMESSI

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

02 · LETTERE DEI SOTTOSTRATI

Per $n = 3$ sono ammessi $\ell = 0, 1, 2$. Ogni valore corrisponde a una diversa distribuzione di probabilità.

CORRISPONDENZA VALORI E LETTERE

$$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$$

s, p, d, f, g

Notazione di orbitali e sottostrati

SIMBOLO DELL'ORBITALE

Si scrive il numero quantico principale n seguito dalla lettera associata a ℓ . Orbitali con gli stessi n e ℓ appartengono allo stesso sottostrato.

VALORI AMMESSI

Lo strato $n = 1$ comprende solo 1s. Il numero di tipi di sottostrato cresce con n .

n	ℓ ammessi	Sottostrati
1	0	1s
2	0, 1	2s, 2p
3	0, 1, 2	3s, 3p, 3d
4	0, 1, 2, 3	4s, 4p, 4d, 4f

Il numero quantico magnetico m_ℓ

ORIENTAZIONE SPAZIALE

A n e ℓ fissati, m_ℓ distingue l'orientazione dell'orbitale. Orbitali con uguale ℓ hanno la stessa forma.

$$m_\ell = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$$

NUMERO DI ORBITALI

Per ogni ℓ esistono $2\ell + 1$ orientazioni, quindi altrettanti orbitali.

Tipo	Valori di m_ℓ	Orbitali
s	0	1
p	-1, 0, +1	3
d	-2, -1, 0, +1, +2	5
f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7

Spin e numeri quantici permessi

DUE STATI DI SPIN

Il numero quantico m_s può assumere soltanto due valori.

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

VERIFICA DEI VINCOLI

$n \geq 1$. Per ogni n , $0 \leq \ell \leq n - 1$. Il valore m_ℓ è compreso fra $-\ell$ e $+\ell$. Solo una combinazione della tabella rispetta tutti i vincoli.

n	ℓ	m_ℓ	m_s	Valida
1	1	0	$+\frac{1}{2}$	No
3	1	-2	$-\frac{1}{2}$	No
2	1	0	$+\frac{1}{2}$	Sì
2	0	0	+1	No
0	1	0	$-\frac{1}{2}$	No
2	3	0	$-\frac{1}{2}$	No
3	2	2	0	No

ORBITALI ATOMICI E LA LORO FORMA

The image is a collage of hand-drawn chemical structures and reactions. The central text reads "ORBITALI ATOMICI E LA LORO FORMA". Surrounding it are various chemical diagrams including molecules like benzene, water, methane, and ammonia, as well as chemical equations such as $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$, $Zn + CuSO_4 \rightarrow ZnSO_4 + Cu$, and $2Fe + 3O_2 \rightarrow 2Fe_2O_3$. Labels for elements like Titanium, Helium, Carbon, Nitrogen, Aluminum, Sulfur, Gold, and Mercury are also present.

La forma degli orbitali s

SIMMETRIA SFERICA

Gli orbitali s hanno la stessa densità di probabilità in ogni direzione a uguale distanza dal nucleo.

L'ORBITALE 1s

La densità di probabilità è massima al nucleo e diminuisce con r . La distribuzione radiale include il volume dei gusci sferici.

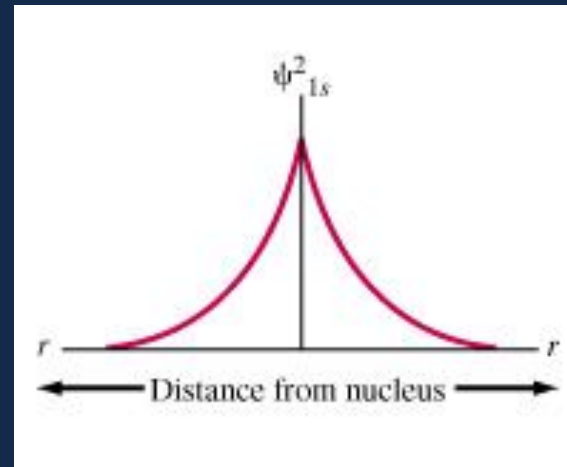
EQUAZIONE D'ONDA RADIALE

$$\Psi_{1s} = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0)$$

$$a_0 = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m}$$

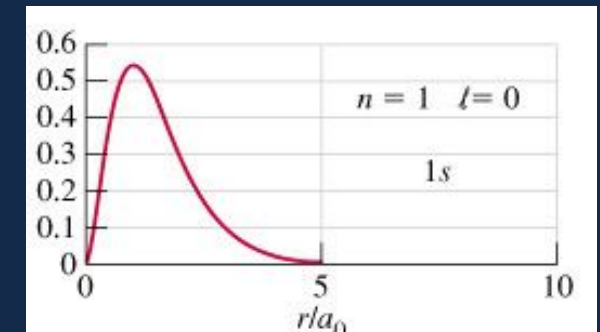
DENSITÀ DI PROBABILITÀ

Probabilità al punto (Ψ^2)



DISTRIBUZIONE RADIALE

Probabilità nei gusci ($4\pi r^2 \Psi^2$)



Per un orbitale s, la **funzione di distribuzione radiale** (indicata comunemente con $P(r)$ o $D(r)$) è definita come la probabilità di trovare l'elettrone all'interno di un guscio sferico di spessore infinitesimo dr a distanza r dal nucleo, integrando su tutte le direzioni angolari:

$$P(r) = 4\pi r^2 |\Psi(r)|^2 = r^2 [R_{n0}(r)]^2$$

Due rappresentazioni degli orbitali

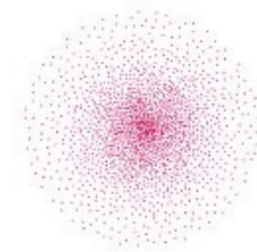
NUVOLA DI PROBABILITÀ

La punteggiatura è più fitta dove la probabilità di trovare l'elettrone è maggiore.

SUPERFICIE LIMITE

Una superficie racchiude una frazione scelta della probabilità complessiva, per esempio il 99%.

Nuvola di punti



Superficie 99%



(a) 1s

Gli orbitali 1s, 2s e 3s

STESSA SIMMETRIA

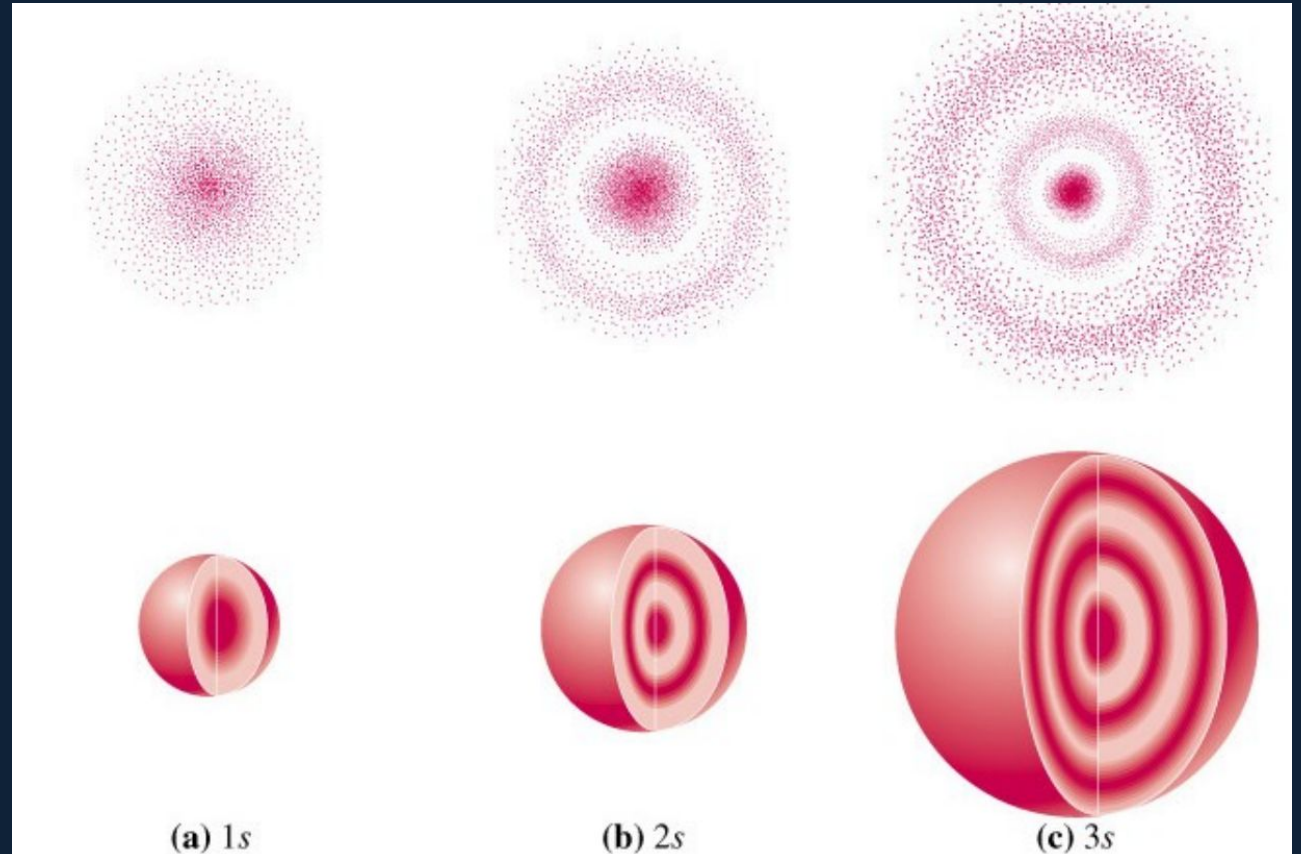
Gli orbitali 1s, 2s e 3s conservano la forma sferica.

Simmetria Sferica ($l = 0$)

DIMENSIONI CRESCENTI

Le dimensioni aumentano con il numero quantico principale n . Il 2s è più esteso dell'1s e il 3s è più esteso del 2s.

$1s < 2s < 3s$ ($r_1 < r_2 < r_3$)



Distribuzioni radiali di probabilità

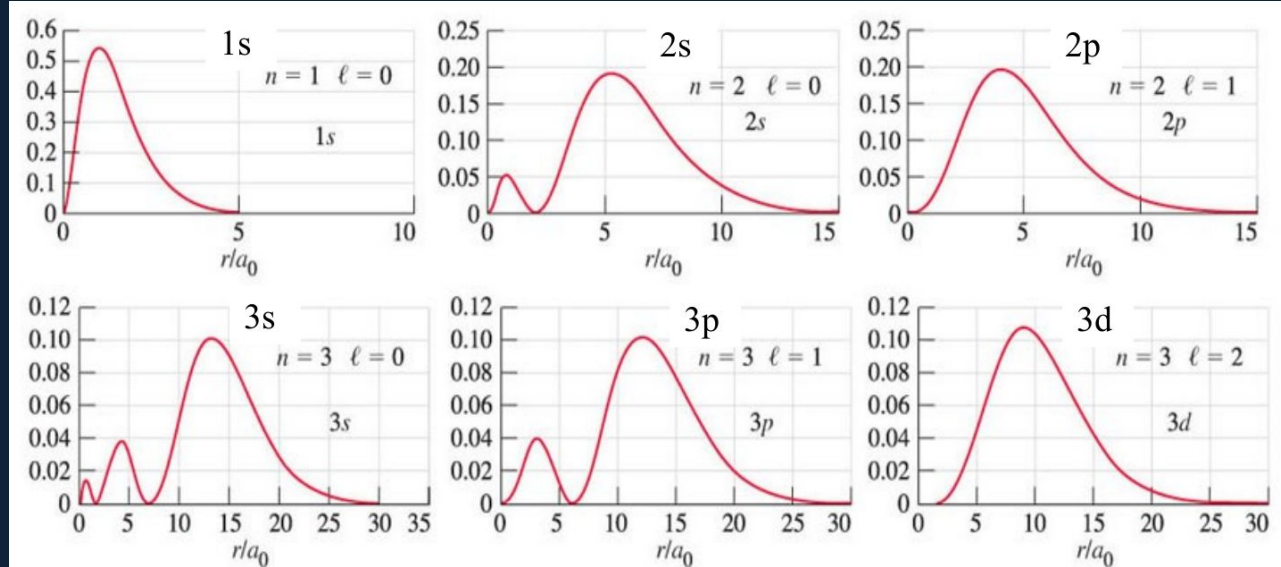
LETTURA DEI GRAFICI

Le distribuzioni radiali mostrano come varia con la distanza dal nucleo la probabilità di trovare l'elettrone in un guscio sferico.

CONFRONTO FRA ORBITALI

La posizione del massimo più esterno aiuta a confrontare le dimensioni. La figura riporta 1s, 2s, 2p, 3s, 3p e 3d.

1s · 2s · 2p · 3s · 3p · 3d



I tre orbitali p

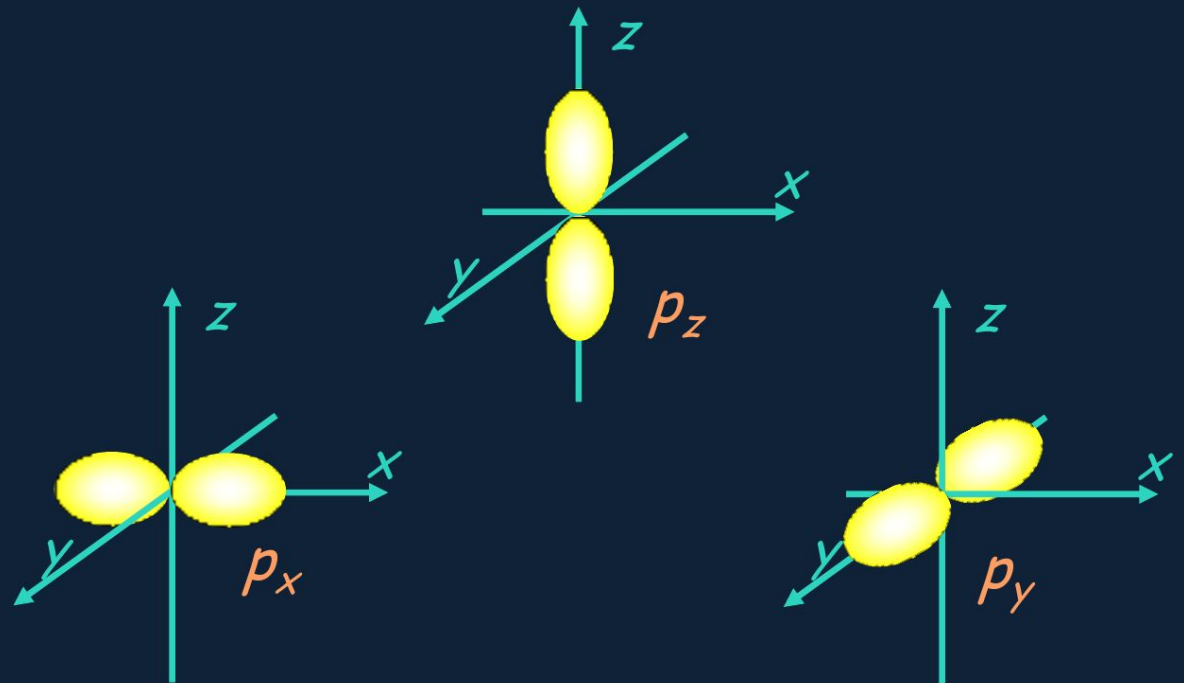
FORMA A DUE LOBI

I tre orbitali p hanno la stessa forma di base, con due lobi posti su lati opposti rispetto al nucleo.

ORIENTAZIONE

Si distinguono secondo la direzione degli assi cartesiani:

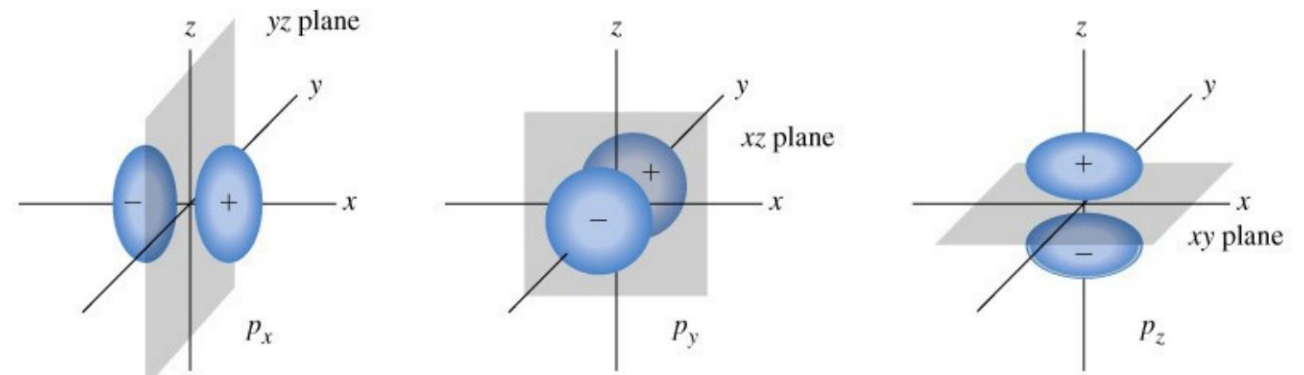
p_x p_y p_z



Forme degli orbitali p e d

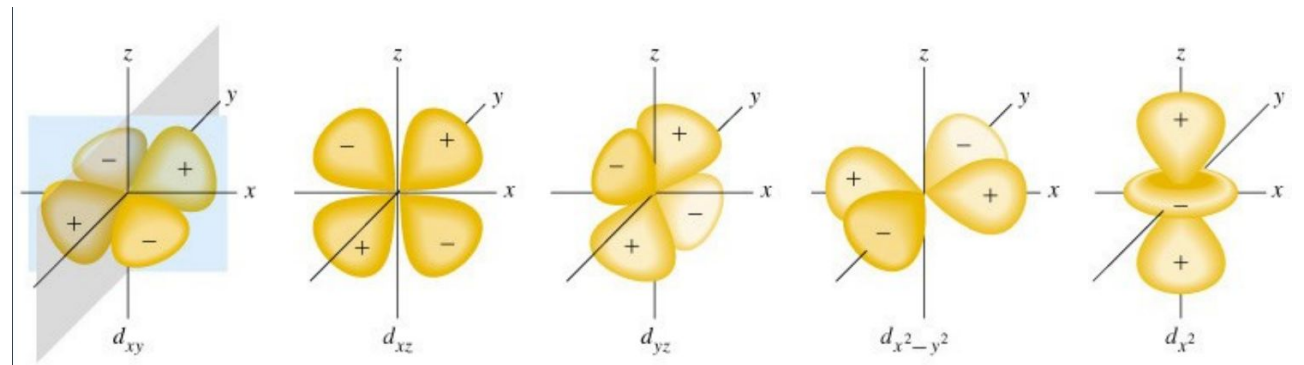
ORBITALI p

Le tre orientazioni spaziali corrispondono agli assi x, y e z.



ORBITALI d

Il sottostrato d comprende cinque orbitali con forme e orientazioni distinte.



Riepilogo delle forme orbitali

s, p, d, f

Il numero quantico angolare determina il tipo di forma.
Il numero quantico magnetico distingue le possibili orientazioni.

NUMERO DI ORBITALI

s

1 orbitale

p

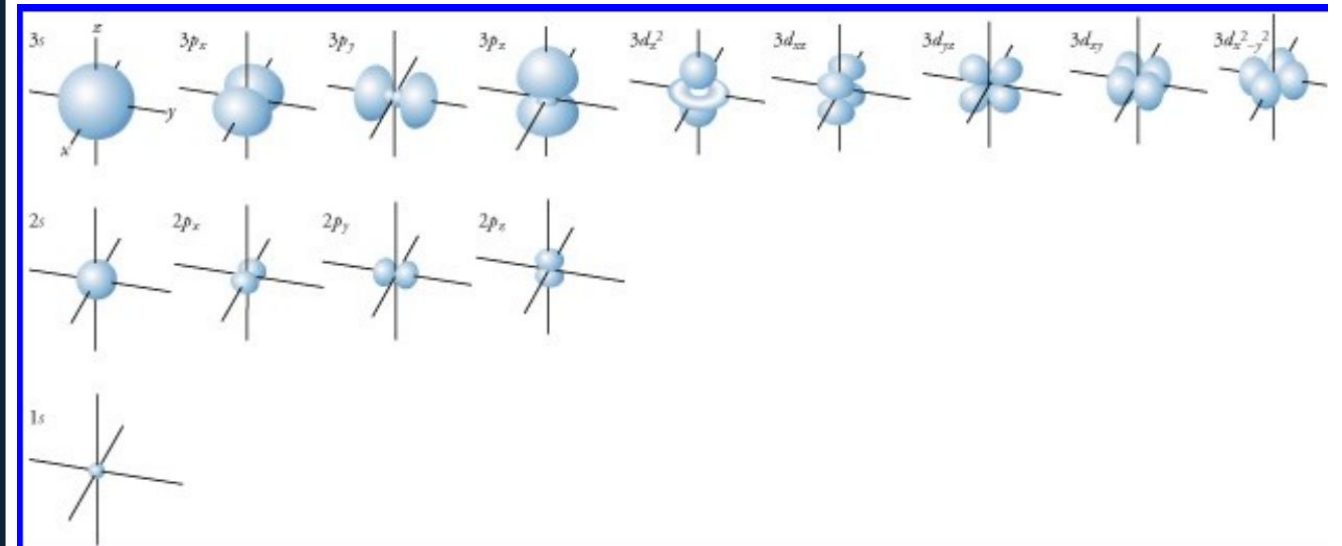
3 orbitali

d

5 orbitali

f

7 orbitali



Lo spin elettronico

MOMENTO MAGNETICO

Lo spin è una proprietà intrinseca dell'elettrone, associata a un momento magnetico. L'immagine del dipolo aiuta a rappresentarne gli effetti.

QUANTIZZAZIONE

Lungo una direzione di misura si osservano due stati, associati ai due valori del numero quantico di spin.

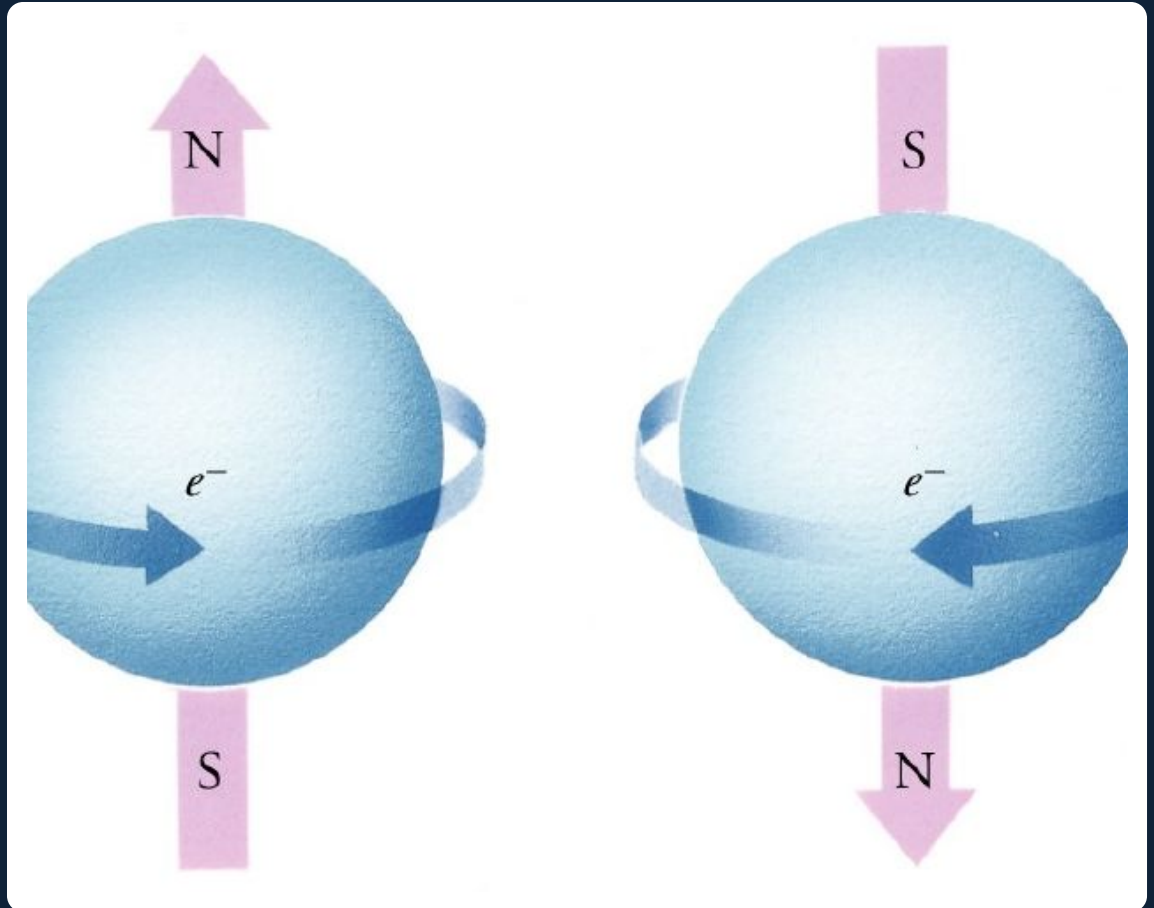
SPIN UP

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

SPIN DOWN

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

RAPPRESENTAZIONE DEL DIPOLO DI SPIN



L'esperimento di Stern e Gerlach

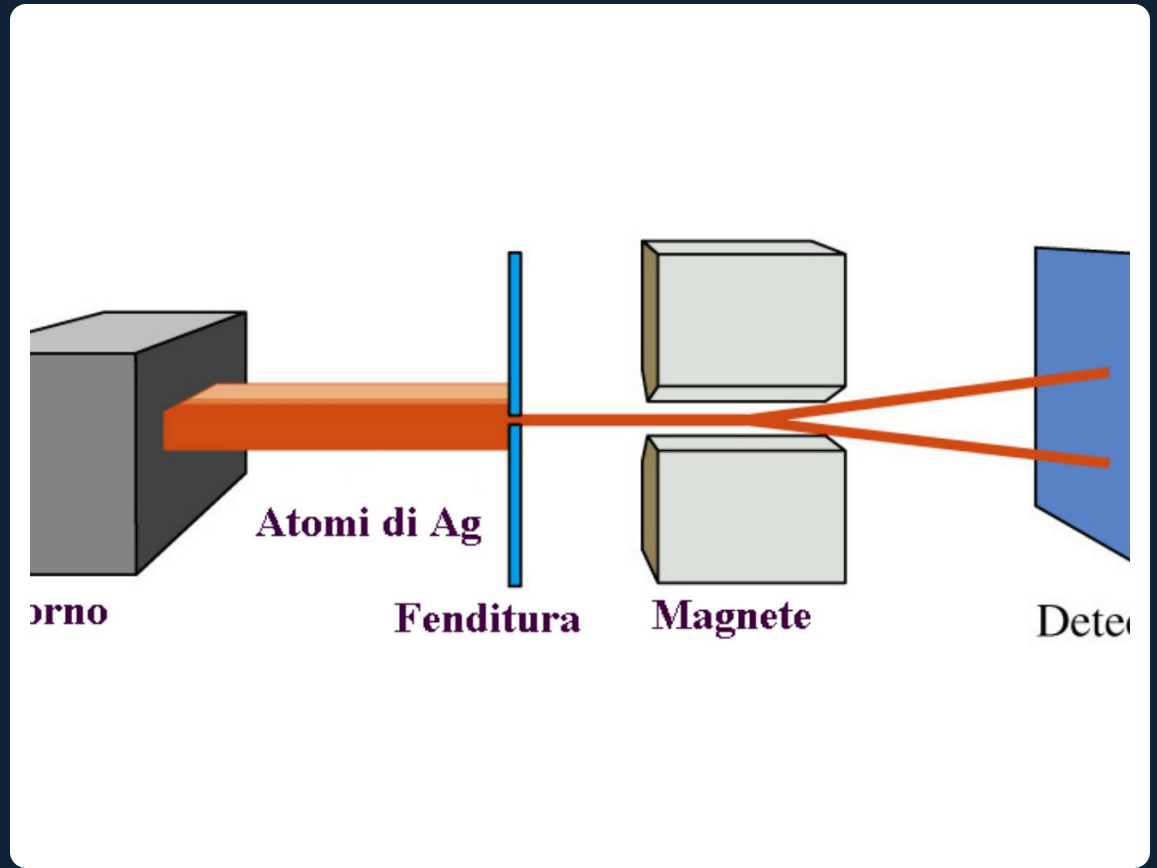
IL FASCIO DI ATOMI

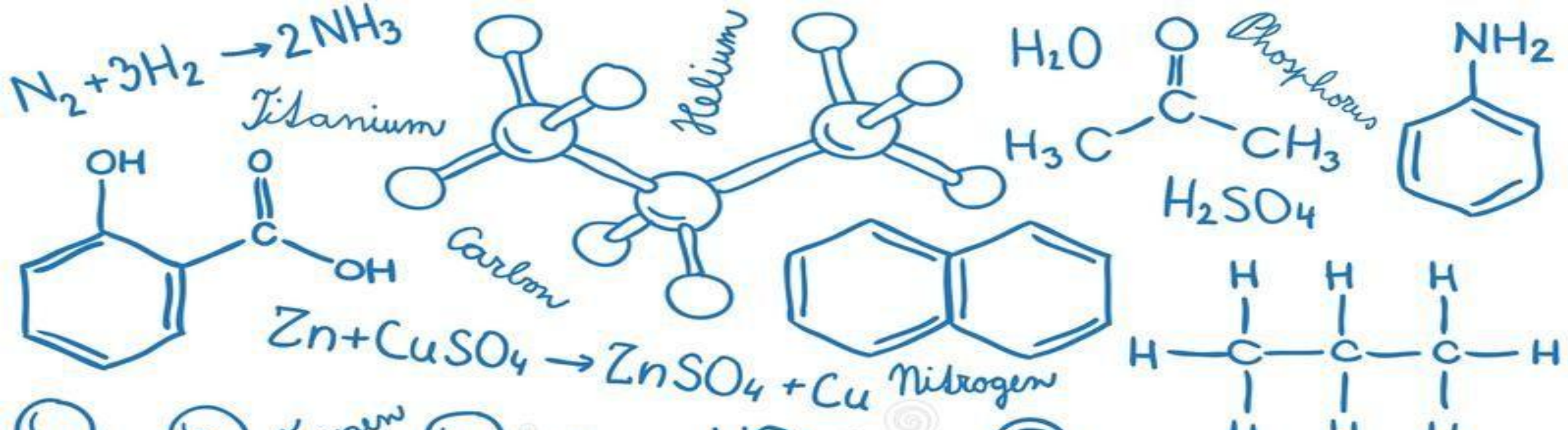
Un fascio di atomi di argento attraversa un campo magnetico non uniforme.
L'esperimento mostra due componenti separate.

DUE ORIENTAZIONI

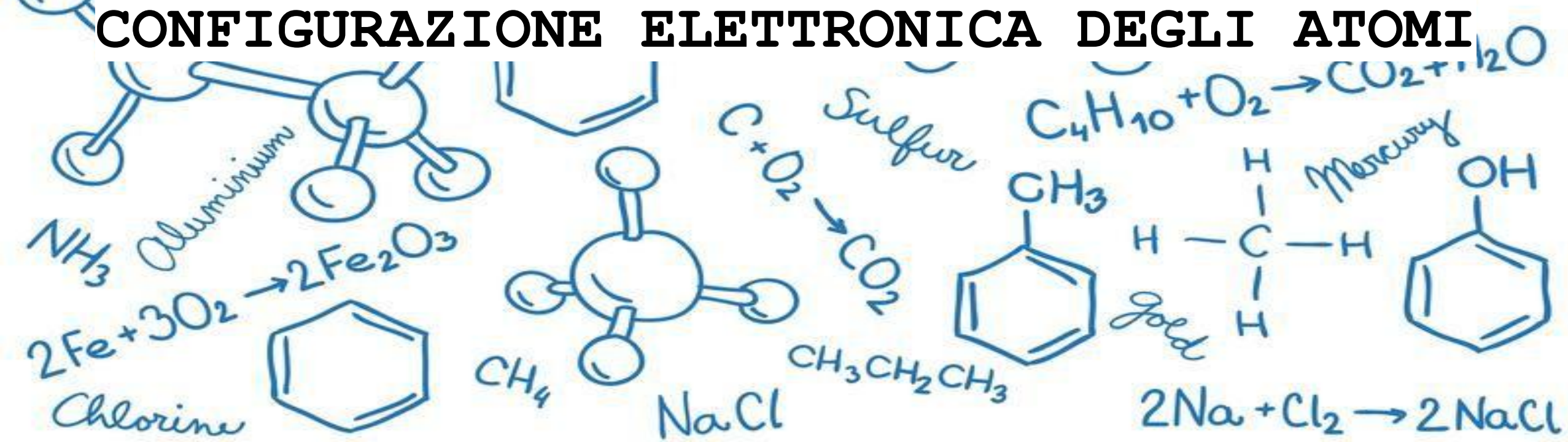
Le deviazioni corrispondono alle due possibili proiezioni del momento magnetico.
La separazione rivela il carattere quantizzato della misura.

SCHEMA DELL'ESPERIMENTO





CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DEGLI ATOMI



Energia degli orbitali monoelettronici

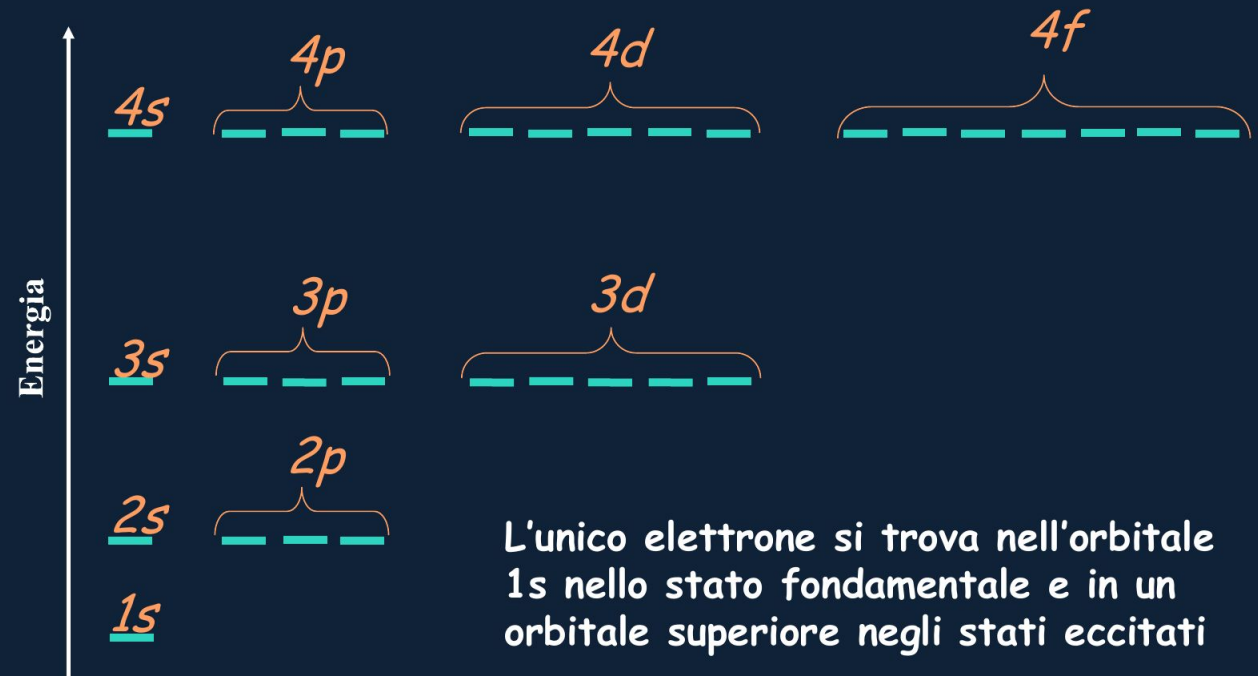
DIPENDENZA DA n

Nell'idrogeno e negli ioni monoelettronici l'energia dipende dal numero quantico principale. Gli orbitali con uguale n sono degeneri.

STATO FONDAMENTALE ED ECCITATO

Nello stato fondamentale l'elettrone occupa 1s. Negli stati eccitati occupa un livello superiore.

Per H: $E_n = -R_H/n^2$



Configurazioni elettroniche

DISTRIBUZIONE DEGLI ELETTRONI

Una configurazione elettronica indica quanti elettroni occupano i sottostrati.

L'esponente del simbolo indica il numero di elettroni.

ESEMPIO: LITIO ($Z = 3$)



LEGENDA NOTAZIONE:

1, 2 : Livello quantico principale (n)

s : Sottostrato / Tipo di orbitale ($\ell = 0$)

², ¹ : Numero di elettroni presenti

RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Le caselle rappresentano gli orbitali.

Le frecce indicano l'orientamento dello spin degli elettroni.

DIAGRAMMA AD ORBITALI PER IL LITIO ($1s^2 2s^1$):



Orbitale 1s
2 elettroni



Orbitale 2s
1 elettrone

↑ Spin $+\frac{1}{2}$ (verso l'alto)

↓ Spin $-\frac{1}{2}$ (verso il basso)

Configurazione elettronica del boro

BORO, Z = 5

I cinque elettroni occupano la configurazione indicata. La tabella riporta una possibile scelta dei loro numeri quantici.



OCCUPAZIONE DEGLI ORBITALI

Due elettroni occupano 1s, due occupano 2s e uno occupa un orbitale 2p.

Elettrone	n	ℓ	mℓ	m _s
1	1	0	0	+1/2
2	1	0	0	-1/2
3	2	0	0	+1/2
4	2	0	0	-1/2
5	2	1	-1	+1/2

Il principio di esclusione di Pauli

STATI DISTINTI

Due elettroni nello stesso atomo non possono avere tutti e quattro i numeri quantici uguali.

CAPACITÀ DI UN ORBITALE

In un orbitale n , ℓ e m_ℓ sono fissati. Restano solo due possibilità per m_s :

CONSEGUENZA FONDAMENTALE:

Un orbitale contiene al massimo **due elettroni**.

I due elettroni devono avere **spin opposto** (antiparallelo): $m_s = +\frac{1}{2}$ e $m_s = -\frac{1}{2}$.

ESEMPIO PRATICO: ORBITALE 1s

Per l'orbitale 1s si ha $n = 1$, $\ell = 0$, $m_\ell = 0$.



Orbitale 1s
Max 2 elettroni

Elettrone 1 (Spin UP ↑)

Numeri quantici: $(1, 0, 0, +\frac{1}{2})$
 $n=1, \ell=0, m_\ell=0, m_s=+\frac{1}{2}$

Elettrone 2 (Spin DOWN ↓)

Numeri quantici: $(1, 0, 0, -\frac{1}{2})$
 $n=1, \ell=0, m_\ell=0, m_s=-\frac{1}{2}$

Capacità dei sottostrati ed esercizi

CAPACITÀ MASSIMA

Un sottostrato contiene $2l + 1$ orbitali e ogni orbitale può ospitare due elettroni.

s: 2 p: 6 d: 10 f: 14

CONFIGURAZIONI POSSIBILI?

Valutare le configurazioni a destra applicando i limiti dei numeri quantici e la capacità di ciascun sottostrato.

Configurazione

$1s^3 2s^2 2p^1$

$1s^2 2s^2 2p^3$

$1s^2 2s^2 2p^7$

$1s^2 2s^4 2p^5$

$1s^2 2s^2 2p^6 2d^5 3s^1$

$1s^2 2s^2 2p^3 3s^2$

$1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^6 3d^{11}$

Capacità dei sottostrati ed esercizi

CAPACITÀ MASSIMA

Un sottostrato contiene $2\ell + 1$ orbitali e ogni orbitale può ospitare al massimo **due elettroni**.

s ($\ell = 0$, 1 orbitale) **max 2 e⁻**

p ($\ell = 1$, 3 orbitali) **max 6 e⁻**

d ($\ell = 2$, 5 orbitali) **max 10 e⁻**

f ($\ell = 3$, 7 orbitali) **max 14 e⁻**

CONFIGURAZIONI POSSIBILI?

Valutare le configurazioni a destra applicando i limiti dei numeri quantici e la capacità di ciascun sottostrato.

CONFIGURAZIONE ELETTRONICA STATO MOTIVAZIONE

$1s^3 2s^2 2p^1$ ❌ **Non valida** 1s contiene max 2 e⁻

$1s^2 2s^2 2p^3$ ✅ **Valida** Sottostrati nei limiti

$1s^2 2s^2 2p^7$ ❌ **Non valida** 2p contiene max 6 e⁻

$1s^2 2s^4 2p^5$ ❌ **Non valida** 2s contiene max 2 e⁻

$1s^2 2s^2 2p^6 2d^5 3s^1$ ❌ **Non valida** 2d non esiste ($n=2, \ell < 2$)

$1s^2 2s^2 2p^3 3s^2$ ✅ **Valida** Stato eccitato ammissibile

$1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^6 3d^{11}$ ❌ **Non valida** 3d contiene max 10 e⁻

Il principio di Aufbau

STATO FONDAMENTALE

Fra le possibili configurazioni elettroniche, quella a **energia più bassa** identifica lo **stato fondamentale**.

Le altre descrivono stati eccitati.

COSTRUZIONE SEQUENZIALE

Si riempiono gli orbitali in **ordine di energia crescente**, rispettando il principio di Pauli.

————— **Energia Crescente** ($1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \dots$) —————>

ESEMPIO PRATICO: LITIO (Li, $Z = 3$)

STATO FONDAMENTALE



Configurazione a energia minima (stabile). Gli elettroni occupano gli orbitali più vicini al nucleo.

ESEMPI DI STATI ECCITATI



Un elettrone assorbe energia e salta a un livello energetico superiore.

Aufbau nell'atomo di idrogeno

SCHEMA DEI LIVELLI

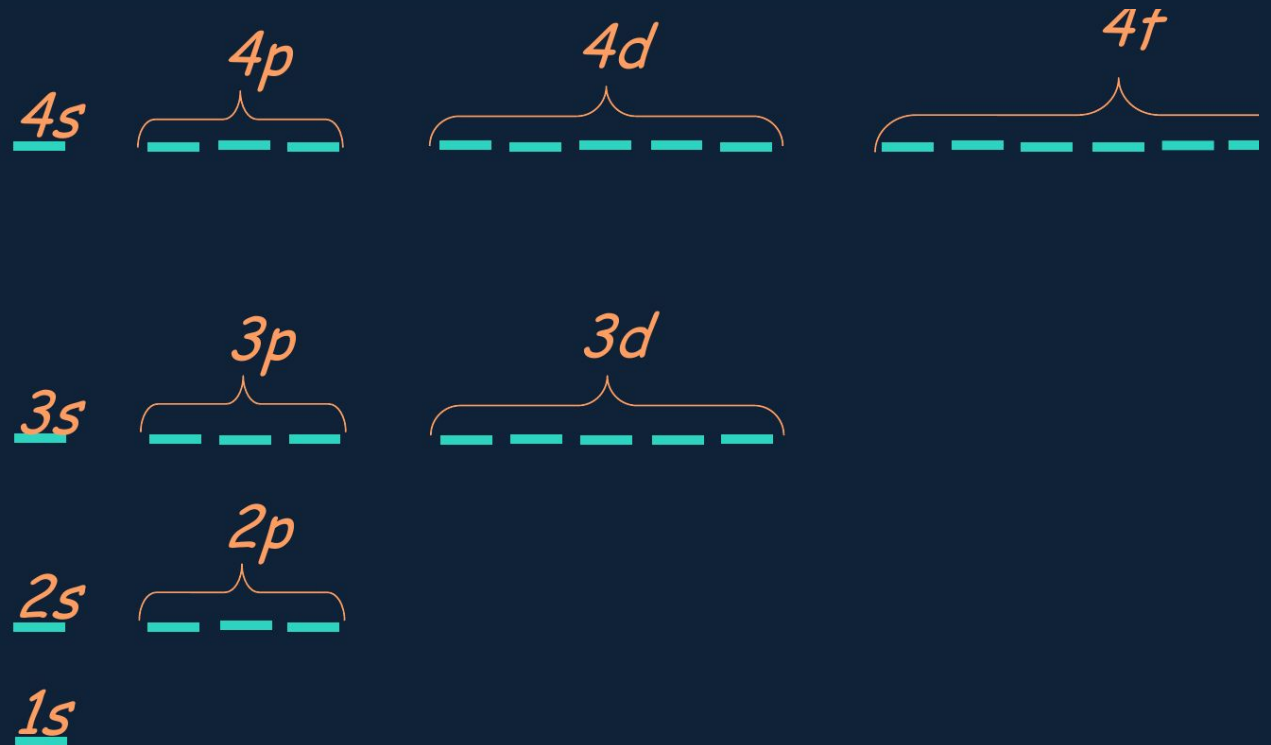
Il principio di Aufbau costruisce la configurazione fondamentale riempiendo prima gli stati a energia minore.

SISTEMA MONOELETTRONICO

Nell'idrogeno gli orbitali di uno stesso strato hanno uguale energia, perché essa dipende solo da **n**.

FORMULA DELL'ENERGIA

$$E_n = -R_H / n^2$$



Energia negli atomi polielettronici

DIPENDENZA DA n E ℓ

L'energia dipende anche dal tipo di sottostrato.

Orbitali con lo stesso n e diverso ℓ possono avere energie diverse.

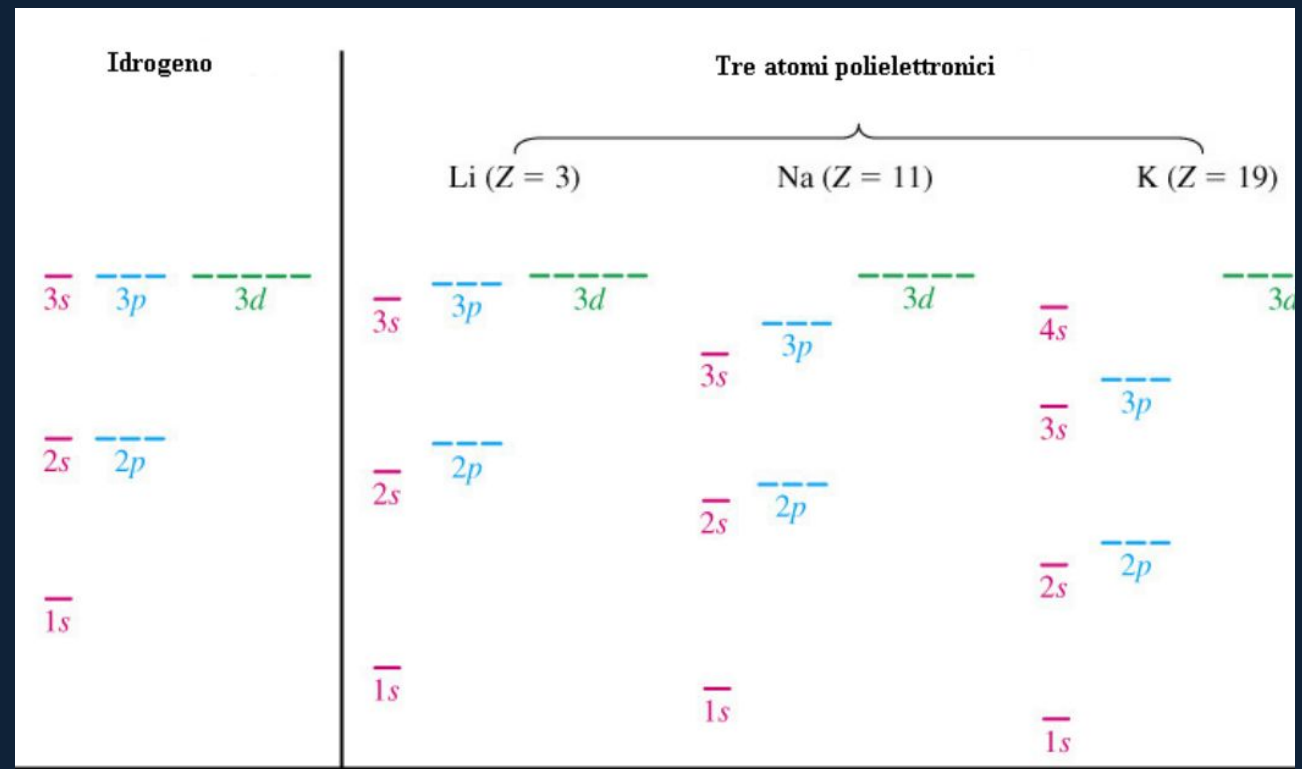
SOVRAPPOSIZIONE DEI LIVELLI

Un sottostrato di uno strato superiore può risultare più basso di uno dello strato inferiore.

L'energia totale include anche le interazioni elettroniche.

CONSEGUENZA PRATICA

Nel riempimento: $E(4s) < E(3d)$



Ordine di riempimento dei sottostrati

COSTRUZIONE DELLA CONFIGURAZIONE

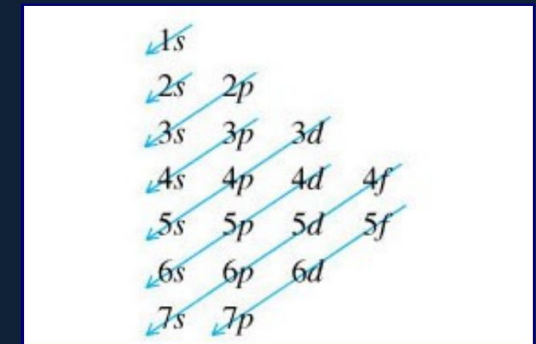
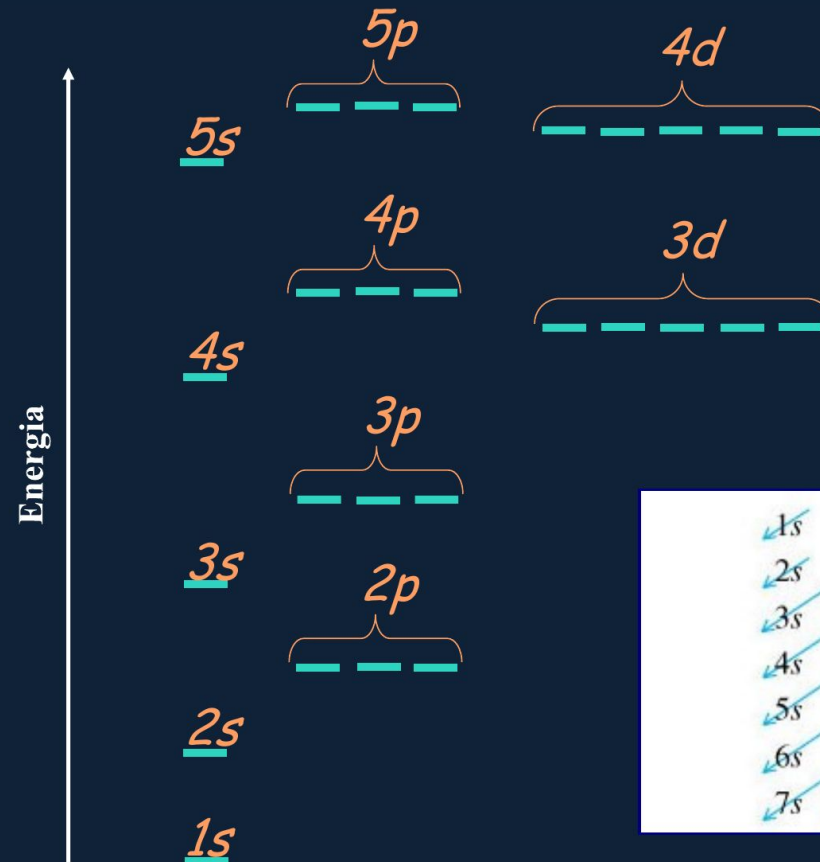
Lo schema rappresenta l'ordine energetico utilizzato per riempire i sottostrati negli atomi polielettronici.

PRIMA SEQUENZA DI RIEMPIMENTO

$1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p$

$4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p$

$5s \rightarrow 4d \rightarrow 5p$



I primi cinque elementi

ORDINE DI RIEMPIMENTO

La sequenza prosegue con 6s, 4f, 5d, 6p e 7s. Per sottostrati vicini l'ordine energetico può cambiare.

CONFIGURAZIONI FONDAMENTALI

Le prime configurazioni si ottengono aggiungendo gli elettroni agli stati disponibili a energia minore.

Elemento	Z	Configurazione
H	1	$1s^1$
He	2	$1s^2$
Li	3	$1s^2 2s^1$
Be	4	$1s^2 2s^2$
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$

La regola di Hund

IL CARBONIO, $Z = 6$

La configurazione è $1s^2 2s^2 2p^2$. I due elettroni 2p possono distribuirsi in modi diversi tra tre orbitali.

MINIMA ENERGIA

Negli orbitali degeneri di un sottostrato gli elettroni occupano prima orbitali distinti con spin paralleli. Solo successivamente avviene l'accoppiamento.



La regola di Hund

IL CARBONIO, $Z = 6$

La configurazione è $1s^2 2s^2 2p^2$. I due elettroni 2p possono distribuirsi in modi diversi tra tre orbitali.

MINIMA ENERGIA

Negli orbitali degeneri di un sottostrato gli elettroni occupano prima orbitali distinti con spin paralleli. Solo successivamente avviene l'accoppiamento.



La regola di Hund

IL CARBONIO, $Z = 6$

La configurazione è $1s^2 2s^2 2p^2$. I due elettroni 2p possono distribuirsi in modi diversi tra tre orbitali.

MINIMA ENERGIA

Negli orbitali degeneri di un sottostrato gli elettroni occupano prima orbitali distinti con spin paralleli. Solo successivamente avviene l'accoppiamento.



Dal carbonio al neon

RIEMPIMENTO DEL SOTTOSTRATO 2p

Nel secondo periodo si aggiungono progressivamente elettroni al sottostrato 2p, rispettando la regola di Hund e il principio di Pauli.

COMPLETAMENTO DEL GUSCIO

Con il neon, 2s e 2p risultano completamente occupati.

Elemento	Z	Configurazione
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$

Proprietà magnetiche

ELETTRONI ACCOPPIATI

Due elettroni con spin opposto hanno contributi magnetici di spin che si compensano.

Diamagnetismo: debole repulsione da un campo magnetico.

ELETTRONI SPAIATI

Elettroni che occupano singolarmente un orbitale producono paramagnetismo.

Paramagnetismo: debole attrazione dal campo magnetico.

FASE ATOMICA GASSOSA

Diamagnetici: Elio e neon.

Paramagnetici: Idrogeno e litio atomici.

Nota: Il comportamento di una molecola, come H_2 , può essere diverso.

Esempi di configurazione: Ossigeno e Neon

OSSIGENO (O, Z = 8)

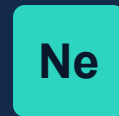


CONFIGURAZIONE
 $1s^2 2s^2 2p^4$

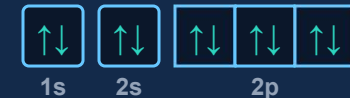


- **Elettroni spaiati:** Il sottostrato 2p contiene 4 elettroni; due orbitali sono occupati da un singolo elettrone con spin paralleli (Regola di Hund).
- **Proprietà magnetiche:** La presenza di elettroni spaiati rende l'ossigeno atomico **paramagnetico** (debole attrazione da un campo magnetico).
- **Notazione compatta:** $[\text{He}] 2s^2 2p^4$

NEON (Ne, Z = 10)



CONFIGURAZIONE
 $1s^2 2s^2 2p^6$



- **Guscio completo:** Tutti gli orbitali del secondo livello (2s e 2p) sono completamente occupati.
- **Elettroni tutti accoppiati:** Tutti i contributi magnetici di spin si compensano.
- **Proprietà magnetiche:** La completa assenza di elettroni spaiati rende il neon **diamagnetico** (debole repulsione).
- **Stabilità:** Configurazione da gas nobile ad elevata stabilità.

Configurazioni e notazione dei gas nobili

GUSCI COMPLETI

He e Ne possiedono rispettivamente gli strati $n = 1$ e $n = 2$ completi, associati a una configurazione particolarmente stabile.

HeELIO ($Z = 2$) $1s^2$ **Ne**NEON ($Z = 10$) $1s^2 2s^2 2p^6$

NOTAZIONE ABBREVIATA

La configurazione del gas nobile precedente si racchiude tra parentesi quadre.

ESTESA (COMPLETA)

C: $1s^2 2s^2 2p^2$

ABBREVIATA (SINTETICA)

C: $[\text{He}] 2s^2 2p^2$

Configurazioni elettroniche nella tavola periodica

LETTURA DELLA TAVOLA

La tavola associa agli elementi la loro configurazione elettronica e distingue i gruppi principali dalle serie di transizione.

NOTAZIONE COMPATTA

Il simbolo del gas nobile fra parentesi rappresenta la configurazione elettronica interna.

1																	18						
1s H	2																	2s He					
3 Li	4 Be																	13 B	14 C	15 N	16 O	17 F	18 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 La*	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 Ac†	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt															

Transition elements

d block

3d

4d

5d

6d

p block

2p

3p

4p

5p

6p

Inner-transition elements

f block

4f

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
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

*

Il terzo periodo: dal sodio all'argon

RIEMPIMENTO DI 3s E 3p

Na

SODIO (Z = 11)

[Ne] 3s¹**Mg**

MAGNESIO (Z = 12)

[Ne] 3s²**Al**

ALLUMINIO (Z = 13)

[Ne] 3s² 3p¹**Ar**

ARGON (Z = 18)

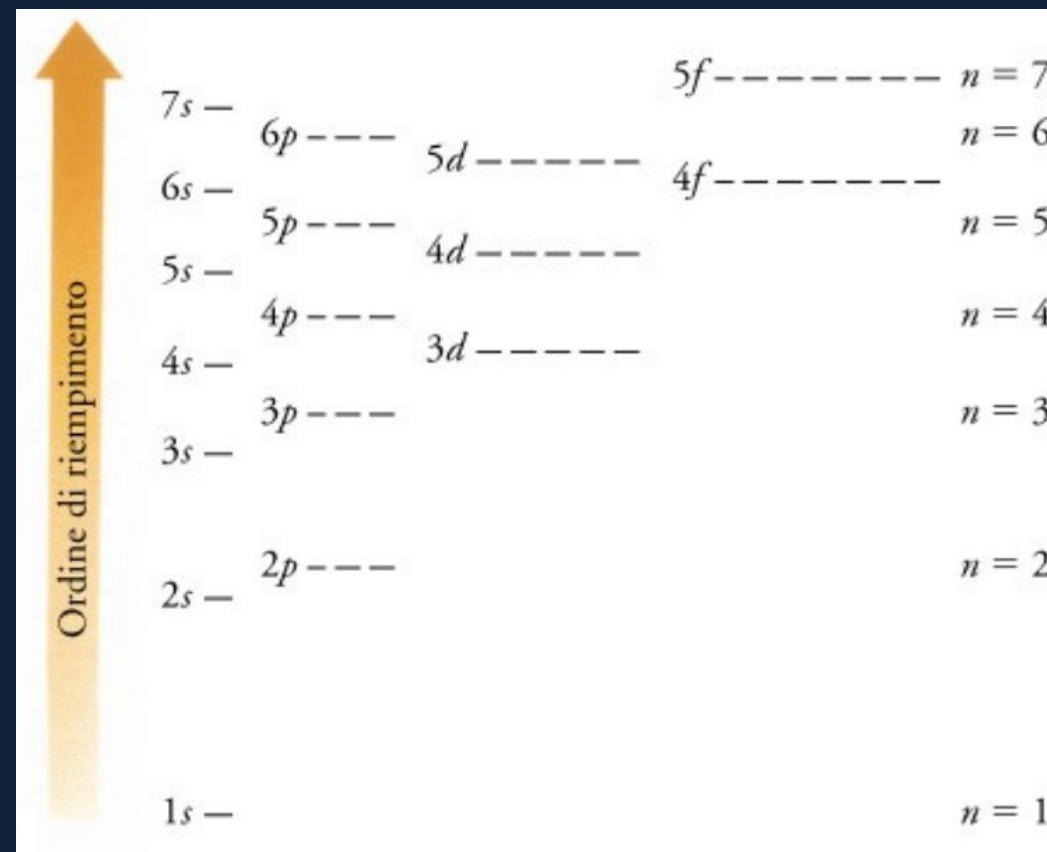
[Ne] 3s² 3p⁶

LA STABILITÀ DELL'ARGON

Il sottostrato 3d è più alto in energia del 3p e, nell'ordine di riempimento, anche del 4s.

CONFIGURAZIONE COMPLETA

La configurazione con **3p completo** è particolarmente stabile.



Il quarto periodo e l'inizio dei metalli di transizione

PRIMA IL SOTTOSTRATO 4s

K

POTASSIO (Z = 19)
[Ar] 4s¹

Ca

CALCIO (Z = 20)
[Ar] 4s²

POI IL SOTTOSTRATO 3d

Inizia il riempimento del 3d. I metalli della prima serie di transizione sono dieci perché i cinque orbitali d possono accogliere dieci elettroni.

CAPACITÀ DEL SOTTOSTRATO

5 orbitali d × 2 e⁻ = **10 elementi di transizione**

1s																			1s
2s																			
3s																			
4s						3d													
5s						4d													
6s						5d													
7s						6d													

La prima serie di transizione

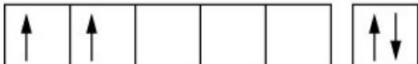
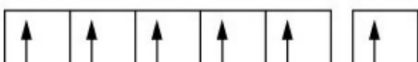
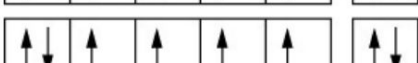
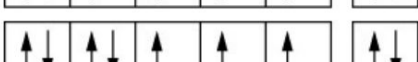
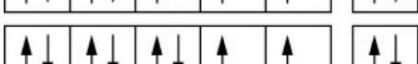
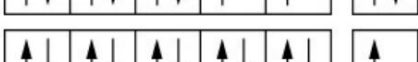
CONFIGURAZIONI ESEMPLARI

ScSCANDIO
[Ar] 4s² 3d¹**Ti**TITANIO
[Ar] 4s² 3d²**V**VANADIO
[Ar] 4s² 3d³**Zn**ZINCO
[Ar] 4s² 3d¹⁰

L'ECCEZIONE DEL CROMO

CrCROMO (Z = 24)
[Ar] 4s¹ 3d⁵ (anziché [Ar] 4s² 3d⁴)

Per Cr, Z = 24, la configurazione fondamentale è [Ar] 4s¹ 3d⁵, anziché [Ar] 4s² 3d⁴ per la maggiore stabilità del sottostrato 3d semipieno.

Sc:	[Ar]		[Ar] 3d ¹ 4s ²
Ti:	[Ar]		[Ar] 3d ² 4s ²
V:	[Ar]		[Ar] 3d ³ 4s ²
Cr:	[Ar]		[Ar] 3d ⁵ 4s ¹
Mn:	[Ar]		[Ar] 3d ⁵ 4s ²
Fe:	[Ar]		[Ar] 3d ⁶ 4s ²
Co:	[Ar]		[Ar] 3d ⁷ 4s ²
Ni:	[Ar]		[Ar] 3d ⁸ 4s ²
Cu:	[Ar]		[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹
Zn:	[Ar]		[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²
		3d 4s	

Schema dei livelli negli atomi polielettronici

RIEPILOGO DELL'ORDINE

Lo schema confronta l'energia dei sottostrati s, p e d durante la costruzione delle configurazioni elettroniche.

SOTTOSTRATI VICINI

Il **4s** precede il **3d** nel riempimento. Dopo il **3d** si completa il **4p**.



Il completamento del quarto periodo

RIEMPIMENTO DI 4p

Ga GALLIO (Z = 31)
[Ar] 4s² 3d¹⁰ 4p¹

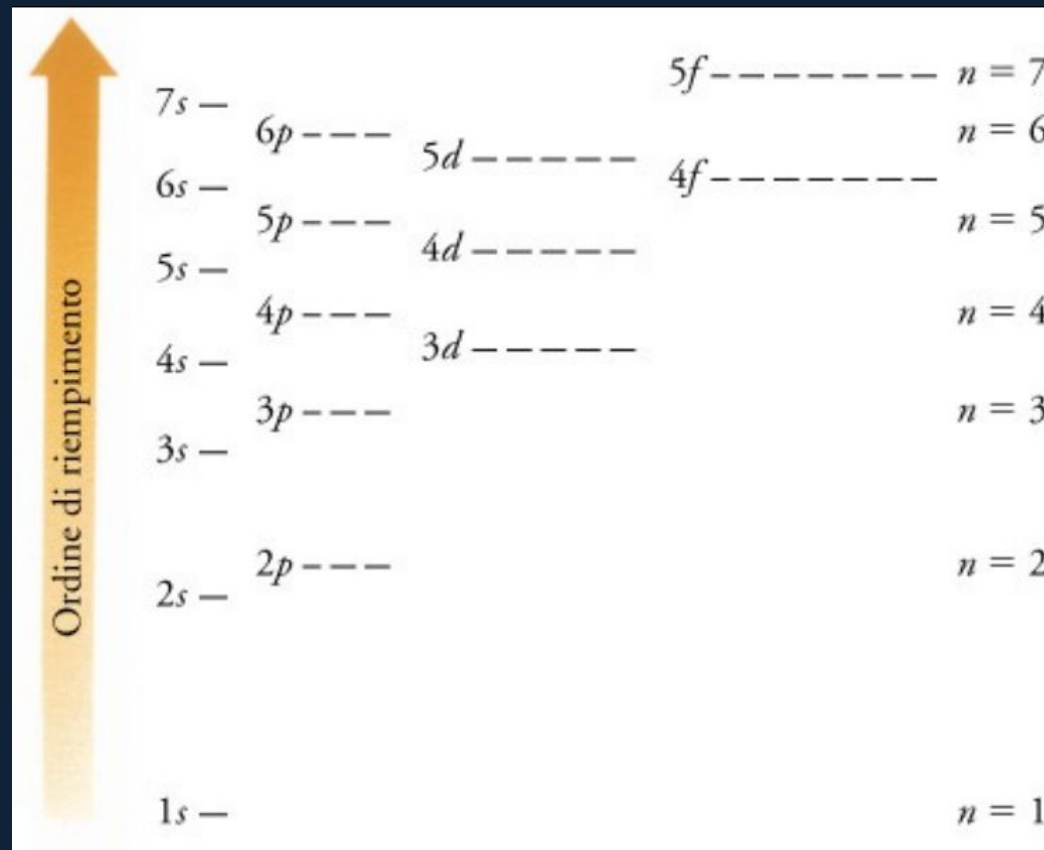
Ge GERMANIO (Z = 32)
[Ar] 4s² 3d¹⁰ 4p²

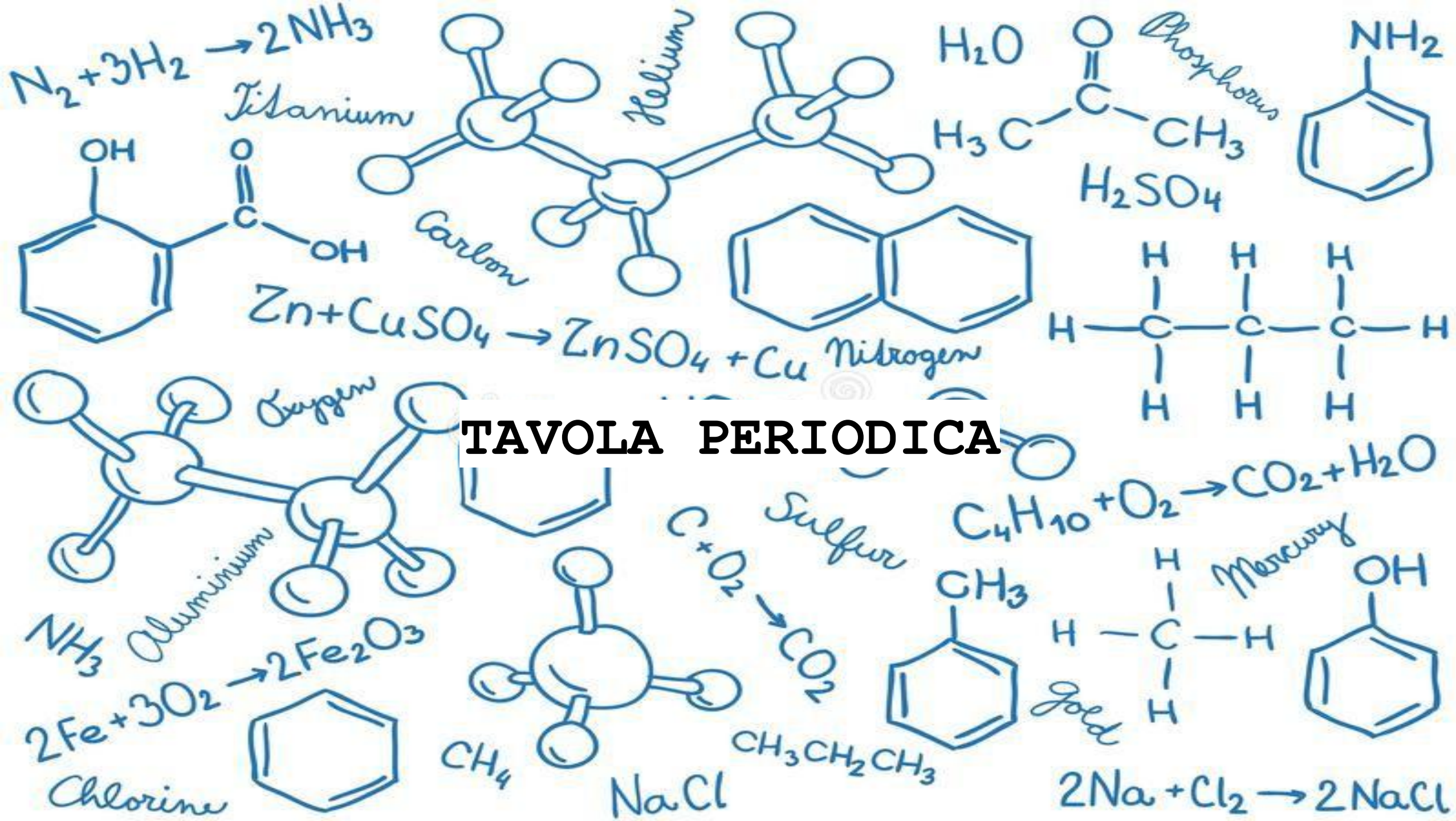
Kr KRIPTON (Z = 36)
[Ar] 4s² 3d¹⁰ 4p⁶

LA STABILITÀ DEL KRIPTON

Il completamento di **4p** conduce a una configurazione particolarmente stabile.

Il sottostrato **4d** è più alto in energia anche del **5s**.





Periodi e gruppi della tavola periodica

STRUTTURA ORIZZONTALE

SETTE PERIODI

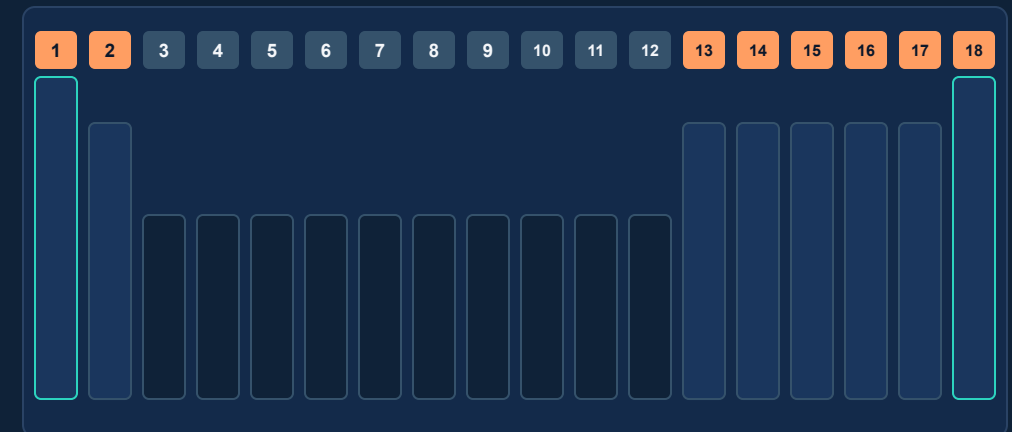
Le sette righe della tavola periodica sono i periodi.

1	1° Periodo
2	2° Periodo
3	3° Periodo
4	4° Periodo
5	5° Periodo
6	6° Periodo
7	7° Periodo

STRUTTURA VERTICALE

DICIOTTO GRUPPI

Le diciotto colonne sono i gruppi. Il riempimento degli orbitali spiega la struttura della tavola e le somiglianze fra elementi dello stesso gruppo.



I blocchi s, p, d e f

STRUTTURA ELETTRONICA

La tavola periodica si divide in blocchi secondo il sottostrato che si riempie.

COLLOCAZIONE DEI BLOCCHI

s, p

Gruppi principali

I blocchi s e p comprendono i gruppi principali.

d

Elementi di transizione

Il blocco d comprende gli elementi di transizione.

f

Serie interne

Il blocco f comprende le serie interne.

orbitali s

orbitali p

orbitali d

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	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Ra
Fr	Ra	Ac															

orbitali f

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Le configurazioni dei gas nobili

GUSCI ESTERNI COMPLETI

Gli elementi dell'ultimo gruppo hanno il sottostrato p completo, eccetto He che completa 1s. La loro configurazione è particolarmente stabile.

GRUPPO 18

I gas nobili, gruppo VIIIA nella nomenclatura tradizionale, hanno bassa reattività.

Un guscio di valenza chiuso presenta elettroni fortemente legati e orbitali vuoti di energia più elevata. Questa struttura rende energeticamente sfavorevoli molti processi di trasferimento elettronico e formazione di legami.

Gas nobile

Configurazione

He

$1s^2$

Ne

$[\text{He}] 2s^2 2p^6$

Ar

$[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$

Kr

$[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^6$

Elettroni di core e di valenza

01 · GUSCI E CORE

Gusci e Core

Gli orbitali con uguale n appartengono allo stesso guscio.

Gli elettroni interni, mediamente più vicini al nucleo e più fortemente legati, costituiscono il **core**.

02 · VALENZA

Elettroni di Valenza

Gli elettroni più esterni occupano la configurazione successiva a quella del gas nobile precedente.

Atomi dello stesso gruppo possiedono configurazioni di valenza analoghe.

03 · RAPPRESENTAZIONE

Notazione Contratta

La configurazione si può descrivere con un core a gas nobile seguito dagli elettroni di valenza.

STRUTTURA SCHEMATICA

[Gas Nobile] $ns^n np^m$

Il gruppo 1 e i metalli alcalini

01 · CONFIGURAZIONE ELETTRONICA

Configurazione ns^1

H: $1s^1$ — Caso particolare

Nonmetallo, idrogeno presenta un solo elettrone

Li: $[\text{He}] 2s^1$

Litio — Metallo alcalino (Periodo 2)

Na: $[\text{Ne}] 3s^1$

Sodio — Metallo alcalino (Periodo 3)

K: $[\text{Ar}] 4s^1$

Potassio — Metallo alcalino (Periodo 4)

02 · REATTIVITÀ E COMPORTAMENTO

Proprietà Chimiche Simili

Elettrone di Valenza

I metalli alcalini (escluso H) possiedono un singolo elettrone esterno nell'orbitale s.

Formazione di Cationi Monovalenti

Cedono molto facilmente l'elettrone di valenza per formare ioni positivi: Li^+ , Na^+ e K^+ .

Relazione Struttura-Reattività

La forte somiglianza della configurazione elettronica esterna spiega direttamente l'analogia nelle loro proprietà chimiche.

Il gruppo 2 e i metalli alcalino-terrosi

01 · CONFIGURAZIONE ELETTRONICA

Configurazione ns^2

Be: [He] $2s^2$

Berillio (Periodo 2)

Mg: [Ne] $3s^2$

Magnesio (Periodo 3)

Ca: [Ar] $4s^2$

Calcio (Periodo 4)

Sr: [Kr] $5s^2$

Stronzio (Periodo 5)

02 · ORIGINE DELLA PERIODICITÀ

Proprietà e Struttura

Configurazione di Valenza e Proprietà

Gli elementi dello stesso gruppo condividono la configurazione di valenza e molte proprietà chimiche.

Determinazione della Configurazione Esterna

Il numero del gruppo consente spesso di ricavare la configurazione esterna.

Comportamento Chimico Analoghe

La presenza di 2 elettroni di valenza (ns^2) ne determina la reattività tipica dei metalli alcalino-terrosi.

Periodi e numero quantico principale

01 · GRUPPI PRINCIPALI

Guscio di Valenza (n)

Il numero del periodo corrisponde al numero quantico principale n del guscio di valenza.

02 · ELEMENTI DI TRANSIZIONE

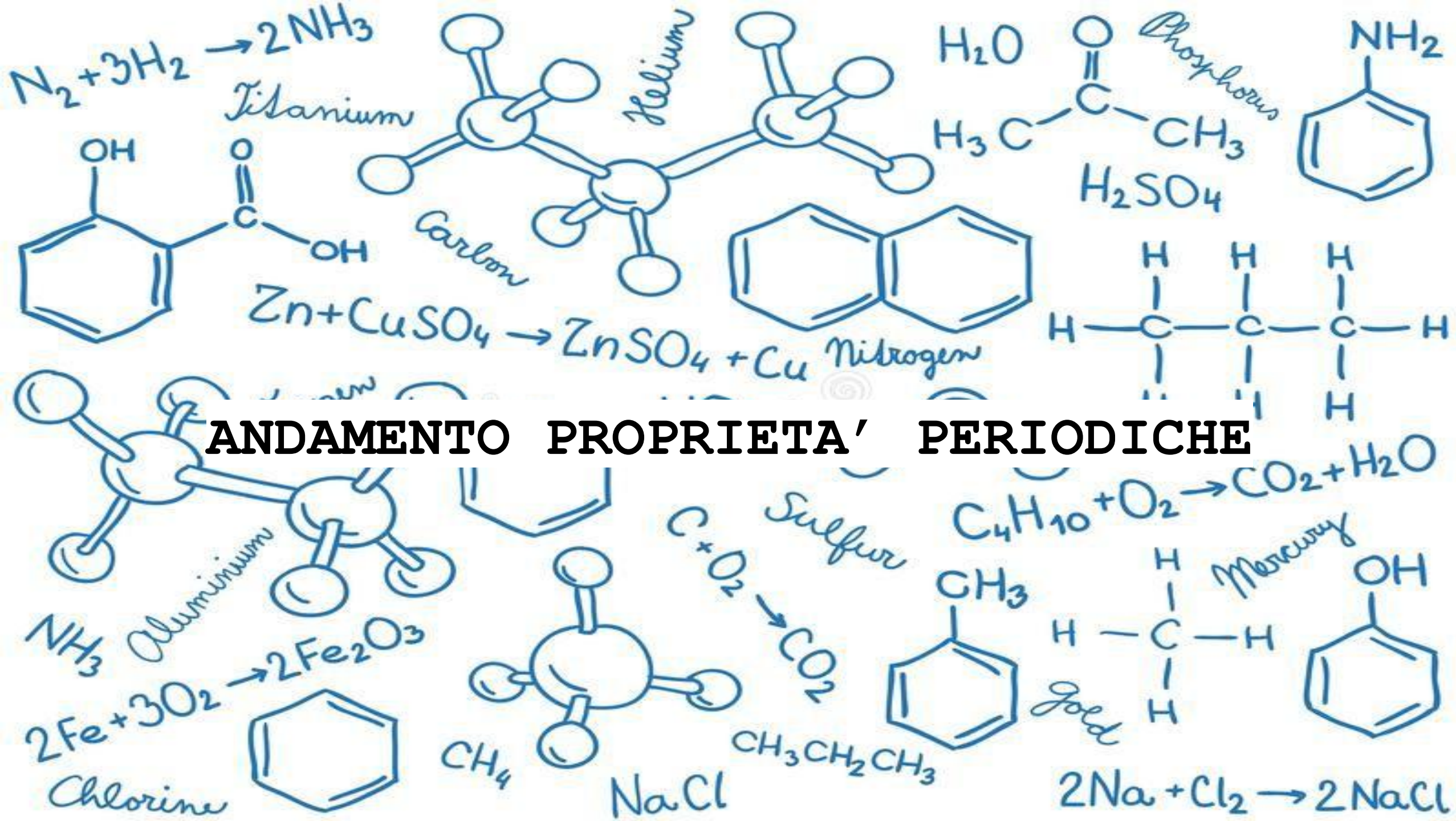
Sottostrato (n – 1)d

Nel periodo n il blocco d corrisponde al riempimento del sottostrato (n – 1)d.

03 · MAPPA DEI SOTTOSTRATI

Schema dei Blocchi Periodici

n																
1	1s															1s
2	2s															2p
3	3s															3p
4	4s															4p
5	5s															5p
6	6s															6p
7	7s															



Configurazioni e prima ionizzazione

01 · ANDAMENTO GENERALE

Trend di Ionizzazione

Lungo un periodo l'energia di prima ionizzazione tende ad aumentare. I metalli alcalini hanno valori bassi, i gas nobili valori elevati.

02 · INTERPRETAZIONE ELETTRONICA

Rimozione dell'Elettrone

L'elettrone esterno di un alcalino segue una configurazione di guscio completo e si rimuove facilmente. Togliere un elettrone da un guscio chiuso richiede più energia.

03 · MAPPA CONFIGURAZIONALI

Schema della Tabella Periodica

1 block																		p block										2 block	
1																		18											
1s																		1s											
H	2																	He	10										
3																		10											
Li	Be																	Ne	10										
11																		18											
Na	Mg																	Ar	18										
19																		36											
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr												
37																		54											
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe												
55																		86											
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn												
87																		112											
Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt																					

Transition elements

d block

3d

4d

5d

6d

Inner-transition elements

f block

4f

58														63														68														73																																																																																																																																																									
Ce														Pr														Nd														Pm														Sm														Eu														Gd														Tb														Dy														Ho														Er														Tm														Yb														Lu													
90														91														92														93														94														95														96														97														98														99														100														101														102														103													

Il raggio atomico

01 · CONCETTO FONDAMENTALE

Grandezza Convenzionale

La distribuzione elettronica diminuisce gradualmente con la distanza dal nucleo e non ha un confine netto. Esistono quindi diverse definizioni operative di raggio.

02 · DEFINIZIONE OPERATIVA

Raggio Covalente

Si ricava dalle distanze tra i nuclei in molecole come H_2 e Cl_2 .

03 · VARIAZIONE PERIODICA

Andamenti Periodici

LUNGO UN PERIODO (DA SINISTRA A DESTRA)

Il raggio tende a diminuire

Aumenta la carica nucleare efficace a pari livello di energia, attirando maggiormente gli elettroni verso il nucleo.

LUNGO UN GRUPPO (DALL'ALTO VERSO IL BASSO)

Il raggio tende ad aumentare

Aumenta il numero quantico principale (n) e si aggiungono nuovi gusci elettronici occupati più esterni.

Il raggio covalente

01 · DEFINIZIONE

Raggio Covalente

Per due atomi uguali legati covalentemente, il raggio covalente è metà della distanza fra i due nuclei.

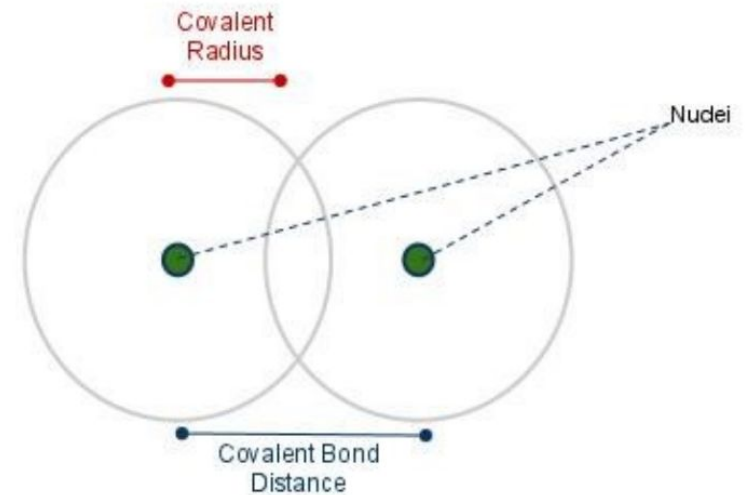
02 · MISURA DELLA DIMENSIONE ATOMICA

Distanza Internucleare

La definizione collega il raggio a una distanza misurabile in una molecola.

03 · RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Schema del Raggio Covalente



Note: Atoms must be homonuclear for Covalent Radius to apply

Il raggio di van der Waals

01 · DEFINIZIONE

Raggio di van der Waals

Per due atomi uguali non legati, il raggio di van der Waals si riferisce a metà della distanza di contatto tra i nuclei.

02 · CONTESTI DI MISURA

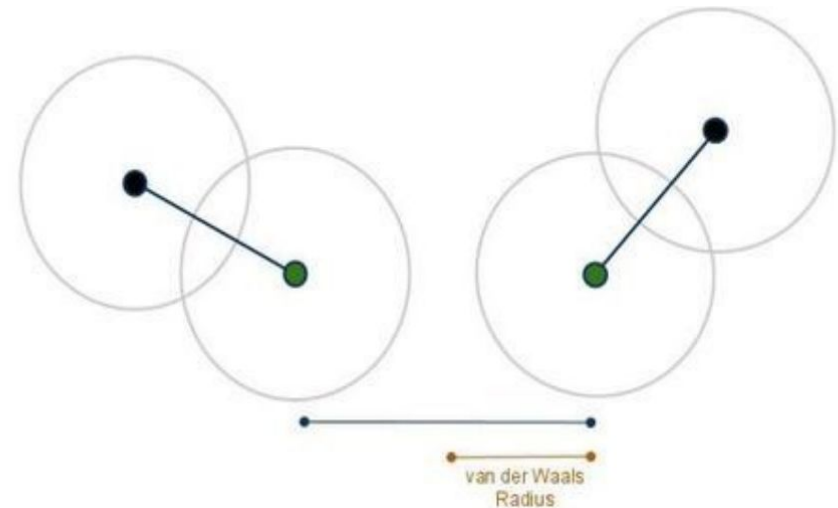
Confronto con Raggio Covalente

Il confronto con il raggio covalente dipende dalla presenza o dall'assenza di un legame fra gli atomi.

Raggio di van der Waals: riflette anch'esso l'estensione della nube elettronica, ma presenta andamenti meno regolari. Non segue una diminuzione o un aumento uniforme lungo tutta la tavola: contano anche la configurazione elettronica e il modo in cui si ricavano i raggi dai contatti tra atomi

03 · RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Schema del Raggio di van der Waals



Note: Approaching atoms must be the same element

Graphic by Andrew Cooley

Andamento dei raggi atomici

01 · LUNGO UN PERIODO

Diminuzione Progressiva

In generale le dimensioni diminuiscono procedendo da sinistra a destra.

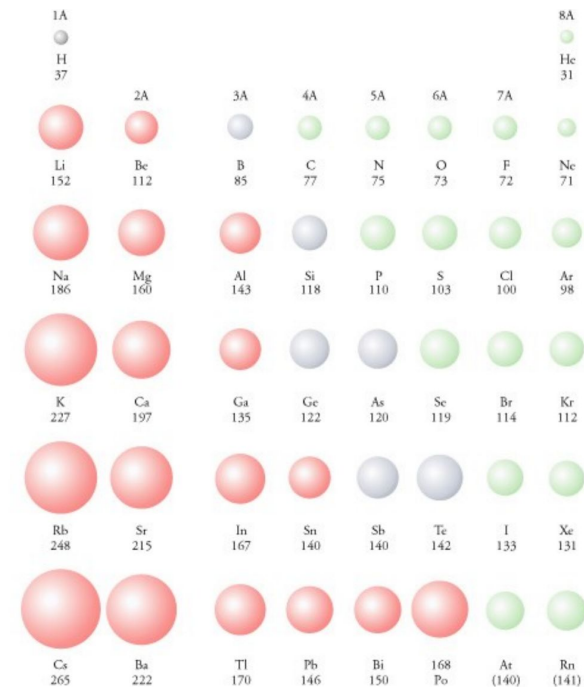
02 · LUNGO UN GRUPPO

Aumento Progressivo

In generale le dimensioni aumentano scendendo verso periodi con numero quantico principale maggiore.

03 · RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Tavola dei Raggi Atomici



La carica nucleare efficace

01 · DUE FATTORI

Estensione e Contrazione

Un numero quantico principale più alto estende l'orbitale. Una maggiore carica nucleare efficace lo contrae.

02 · EFFETTO DI SCHERMO

Carica Nucleare Efficace

La carica nucleare efficace è la carica positiva netta percepita da un elettrone, tenendo conto dello schermo degli elettroni interni.

03 · ESEMPIO SEMPLIFICATO

Caso di Studio: Litio (Li)

Li: $1s^2 2s^1$, $Z = 3$

Per l'elettrone 2s, una stima elementare dà:

$$Z_{\text{eff}} \approx 3 - 2 = 1$$

PROPRIETÀ PERIODICA

Lungo un periodo Z aumenta mentre il core resta lo stesso.

Lo schermo degli elettroni di core

01 · NUCLEO ED ELETTRONI INTERNI

Effetto Schermo

Gli elettroni interni schermano parte dell'attrazione del nucleo sugli elettroni di valenza.

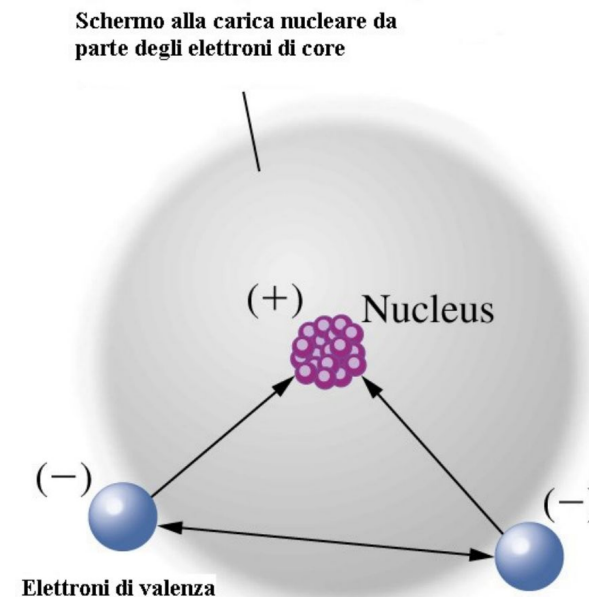
02 · CARICA EFFICACE

Attrazione Ridotta

L'elettrone più esterno risente di un'attrazione inferiore a quella corrispondente alla carica nucleare totale.

03 · RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Schermo degli Elettroni di Core



Costruzione incrementale degli atomi

01 · STRUTTURA ATOMICA

Aggiunta di Protoni ed Elettroni

La sequenza illustrata confronta l'aggiunta di elettroni ai gusci e l'aumento della carica del nucleo.

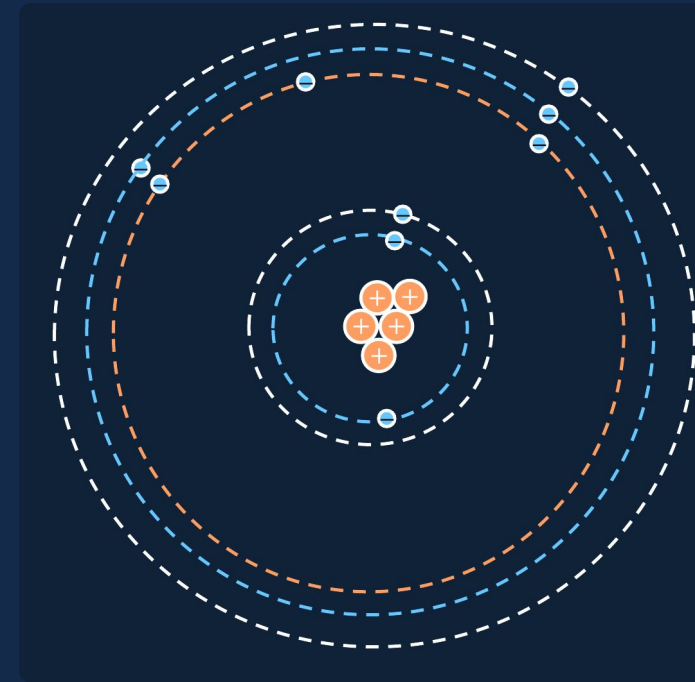
02 · DIMENSIONE E SCHERMO

Effetto sulla Dimensione Atomica

Il passaggio a un nuovo guscio e l'aumento della carica efficace agiscono in direzioni diverse sulla dimensione atomica.

03 · RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Modello a Gusci Concentrici



Energia di prima ionizzazione

01 · DEFINIZIONE

Energia Minima

È l'energia minima necessaria per rimuovere l'elettrone più esterno da un atomo neutro isolato allo stato gassoso.

02 · UNITÀ DI MISURA

kJ/mol ed Elettronvolt

Le energie si esprimono spesso in kJ/mol o in elettronvolt. Un eV è l'energia acquistata da un elettrone accelerato attraverso una differenza di potenziale di 1 V.

03 · ESEMPIO PRATICO

Ionizzazione del Litio (Li)

STATO INIZIALE (ATOMO NEUTRO)



+ ENERGIA DI IONIZZAZIONE →

STATO FINALE (CATIONE + ELETTRONE)



Configurazione Catione: Li^+ : $1s^2$

Ionizzazione lungo un periodo

01 · ANDAMENTO GENERALE

Aumento lungo il Periodo

L'energia di prima ionizzazione tende ad aumentare con il numero atomico lungo un periodo. I minimi si trovano nei metalli alcalini e i massimi nei gas nobili.

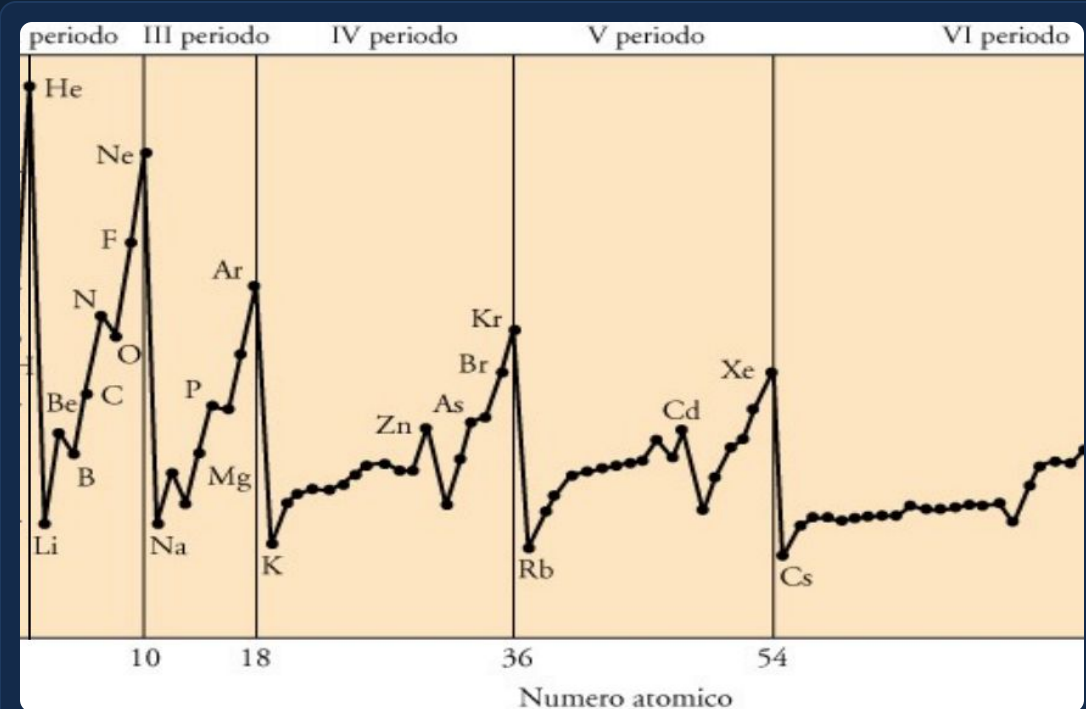
02 · CONFIGURAZIONE E STABILITÀ

Stabilità dei Gusci Chiusi

Rimuovere l'elettrone esterno di un alcalino è relativamente facile. Rimuovere un elettrone da un guscio chiuso richiede più energia.

03 · RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Andamento dell'Energia di Ionizzazione



Ionizzazione lungo un gruppo

01 · ANDAMENTO GENERALE

Diminuzione lungo il Gruppo

Nei gruppi principali l'energia di prima ionizzazione tende a diminuire scendendo lungo il gruppo.

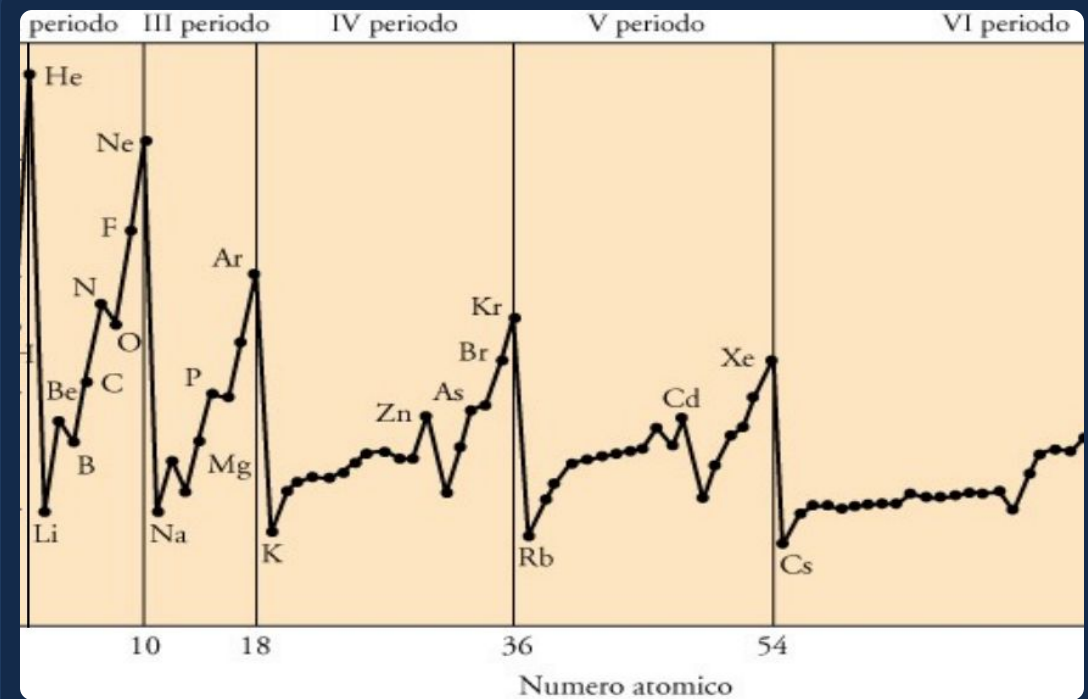
02 · DIMENSIONI ATOMICHE

Aumento Raggio Atomico

Scendendo aumenta la dimensione atomica. L'elettrone più esterno è mediamente più lontano dal nucleo e più facile da rimuovere.

03 · RAPPRESENTAZIONE GRAFICA

Andamento dell'Energia di Ionizzazione



Lettura della periodicità della ionizzazione

01 · CONFRONTO FRA FAMIGLIE

Configurazione Elettronica

Lo schema periodico collega la posizione degli elementi alla loro configurazione elettronica.

02 · DAL METALLO ALCALINO AL GAS NOBILE

Aumento dell'Energia

Nel complesso l'energia di prima ionizzazione cresce lungo un periodo, con valori particolarmente elevati per le configurazioni a guscio chiuso.

03 · SCHEMA PERIODICO

Tavola Periodica dei Blocchi

1 1s H	2 2s Li	3 3s Na	4 4s K	5 5s Rb	6 6s Cs	7 7s Fr	8 8s Ra	9 9s Ac ⁺	10 10s Rf	11 11s Db	12 12s Sg	13 13s B	14 14s C	15 15s N	16 16s O	17 17s F	18 18s Ne
19 3d K	20 4s Ca	21 3d Sc	22 4s Ti	23 3d V	24 3d Cr	25 3d Mn	26 3d Fe	27 3d Co	28 3d Ni	29 3d Cu	30 3d Zn	31 4p Ga	32 4p Ge	33 4p As	34 4p Se	35 4p Br	36 4p Kr
37 5s Rb	38 5s Sr	39 4d Y	40 4d Zr	41 4d Nb	42 4d Mo	43 4d Tc	44 4d Ru	45 4d Rh	46 4d Pd	47 4d Ag	48 4d Cd	49 5p In	50 5p Sn	51 5p Sb	52 5p Te	53 5p I	54 5p Xe
55 6s Cs	56 6s Ba	57 5d La*	58 5d Hf	59 5d Ta	60 5d W	61 5d Re	62 5d Os	63 5d Ir	64 5d Pt	65 5d Au	66 5d Hg	67 6p Tl	68 6p Pb	69 6p Bi	70 6p Po	71 6p At	72 6p Rn
87 7s Fr	88 7s Ra	89 6d Ac ⁺	90 6d Rf	91 6d Db	92 6d Sg	93 6d Bh	94 6d Hs	95 6d Mt	96 6d Ds	97 6d Rg	98 6d U	99 6d Np	100 6d Pu	101 6d Am	102 6d Cm	103 6d Bk	104 6d Cf
105 7f La*	106 7f Ce	107 7f Pr	108 7f Nd	109 7f Pm	110 7f Sm	111 7f Eu	112 7f Gd	113 7f Tb	114 7f Dy	115 7f Ho	116 7f Er	117 7f Tm	118 7f Yb	119 7f Lu	120 7f Hf	121 7f Ta	122 7f W

Ionizzazioni successive

IONIZZAZIONI SUCCESSIVE

$M \rightarrow M^+ \rightarrow M^{2+} \rightarrow M^{3+}$. Ogni passaggio rimuove un elettrone. Le energie aumentano e il salto maggiore compare alla prima rimozione dal core.

ELEMENTI DEL TERZO PERIODO

Energie in kJ/mol. I valori evidenziati corrispondono alla prima rimozione di un elettrone interno, dopo gli elettroni di valenza.

	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
I_1	495,8	737,7	577,6	786,5	1012	999,6	1251,1	1520,5
I_2	4562	1451	1817	1577	1903	2251	2297	2666
I_3		7733	2745	3232	2912	3361	3822	3931
I_4			11580	4356	4957	4564	5158	5771
I_5				16090	6274	7013	6542	7238
I_6					21270	8496	9362	8781
I_7						27110	11020	12000

Affinità elettronica

01 · DEFINIZIONE

Processo di Aggiunta

È la variazione di energia associata all'aggiunta di un elettrone a un atomo neutro gassoso per formare uno ione negativo.

EQUAZIONE CHIMICA



02 · CONVENZIONE DEL SEGNO

Rilascio di Energia

Con la convenzione qui adottata, valori negativi indicano un processo che libera energia.

EFFETTO DI STABILIZZAZIONE

Valori molto negativi corrispondono a una **maggiore stabilizzazione** dell'anione.

03 · UNITÀ DI MISURA

Espressione in kJ/mol

L'affinità elettronica si riporta normalmente in **kJ/mol**.

VALORI POSITIVI

Un valore positivo indica che l'aggiunta dell'elettrone **richiede energia**.

Affinità elettronica degli alogeni

GRUPPO 17, TRADIZIONALMENTE VIIA

Agli alogeni manca un solo elettrone per completare la configurazione di gas nobile. Le loro affinità elettroniche hanno valori fortemente negativi.

ESEMPIO: FLUORO



$$\Delta E = -328 \text{ kJ/mol}$$

PERIODICITÀ

La variazione dell'affinità elettronica è più complessa di quella della prima ionizzazione.

1							18
H -72.8							He --
	2	13	14	15	16	17	
Li -59.6	Be --	B -26.7	C -153.9	N -7	O -141.0	F -328.0	Ne --
Na -52.9	Mg --	Al -42.5	Si -133.6	P -72	S -200.4	Cl -349.0	Ar --
K -48.4	Ca --	Ga -28.9	Ge -119.0	As -78	Se -195.0	Br -324.6	Kr --
Rb -46.9	Sr --	In -28.9	Sn -107.3	Sb -103.2	Te -190.2	I -295.2	Xe --
Cs -45.5	Ba --	Tl -19.2	Pb -35.1	Bi -91.2	Po -186	At -270	Rn --

Affinità elettronica e irregolarità

GRUPPO 16, TRADIZIONALMENTE VIA

Anche diversi elementi di questo gruppo presentano valori negativi relativamente grandi.



$$\Delta E = -141 \text{ kJ/mol}$$

ANDAMENTO NON MONOTONO

Gli elementi più a sinistra hanno spesso valori bassi o positivi. L'affinità non cresce regolarmente lungo un periodo e non varia in modo monotono lungo un gruppo.

1							18
H -72.8							He --
	2	13	14	15	16	17	
Li -59.6	Be --	B -26.7	C -153.9	N -7	O -141.0	F -328.0	Ne --
Na -52.9	Mg --	Al -42.5	Si -133.6	P -72	S -200.4	Cl -349.0	Ar --
K -48.4	Ca --	Ga -28.9	Ge -119.0	As -78	Se -195.0	Br -324.6	Kr --
Rb -46.9	Sr --	In -28.9	Sn -107.3	Sb -103.2	Te -190.2	I -295.2	Xe --
Cs -45.5	Ba --	Tl -19.2	Pb -35.1	Bi -91.2	Po -186	At -270	Rn --

Configurazioni elettroniche dei cationi

METALLI DEI GRUPPI PRINCIPALI

Formazione dei Cationi

Molti metalli formano cationi perdendo elettroni di valenza. La carica si collega al numero di elettroni rimossi.

Carica del catione = N. elettroni rimossi

ELEMENTI PESANTI

Conservazione della Coppia ns^2

Nei gruppi 13–15 gli elementi più pesanti possono conservare la coppia ns^2 e formare cationi con carica inferiore di due unità rispetto al valore del gruppo tradizionale.

Effetto coppia inerte: Carica = (Gruppo - 2)

Tavola Periodica dei Cationi

Tendenza della carica cationica e stabilità della coppia ns^2 nei gruppi principali

1A		2A												3A	4A	5A	6A	7A	8A
H ⁺																		H ⁻	
Li ⁺															C ⁴⁻	N ³⁻	O ²⁻	F ⁻	
Na ⁺	Mg ²⁺			3B	4B	5B	6B	7B	8B	8B	8B	1B	2B	Al ³⁺		P ³⁻	S ²⁻	Cl ⁻	
K ⁺	Ca ²⁺		Ti ²⁺		Cr ²⁺ Cr ³⁺	Mn ²⁺	Fe ²⁺ Fe ³⁺	Co ²⁺ Co ³⁺		Ni ²⁺	Cu ⁺ Cu ²⁺	Zn ²⁺	Ga ³⁺				Se ²⁻	Br ⁻	
Rb ⁺	Sr ²⁺										Ag ⁺	Cd ²⁺	In ³⁺	Sn ⁴⁺			Te ²⁻	I ⁻	
Cs ⁺	Ba ²⁺											Hg ²⁺ Hg ²⁺	Ta ³⁺	Pb ⁴⁺	Bi ⁵⁺				

Effetto della Coppia Inerte (Inert Pair Effect)

L'arco rosso sulla tavola evidenzia la tendenza degli elementi più pesanti dei gruppi p (es. Tl, Pb, Bi) a stabilizzare la carica inferiore conservando gli elettroni di valenza s.

Cationi con configurazione a gas nobile

PERDITA DEGLI ELETTRONI ESTERNI

Rimozione degli elettroni di valenza fino alla configurazione ottetale:



ENERGIE DI IONIZZAZIONE

Le energie aumentano a ogni rimozione.

VARIAZIONE DI ENERGIA

Il salto diventa molto grande quando si comincia a togliere elettroni di core.

CARATTERE METALLICO

Nei gruppi 13–15 il carattere metallico aumenta scendendo lungo il gruppo,

TENDENZA DEI GRUPPI

favorendo la formazione di cationi negli elementi più pesanti.

La conservazione della coppia ns^2

CATIONI A CARICA INFERIORE

Effetto Coppia Inerte nei Gruppi 13–15

Negli elementi pesanti dei gruppi 13–15 la conservazione della coppia ns^2 favorisce stati di carica più bassi rispetto al massimo numero di ossidazione del gruppo.

CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE

Esempi di Cationi con Coppia ns^2 Mantenuta

In: $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^1$ (Atomo neutro)

In⁺: $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2$ (Perde $5p^1$)

Sn²⁺: $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2$ (Perde $5p^2$)

Sb³⁺: $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2$ (Perde $5p^3$)

ANALISI DETTAGLIATA

Due Possibilità per l'Indio (In)

L'indio può formare due differenti cationi a seconda del numero di elettroni rimossi:

1. Formazione di In⁺ (Rimozione di 1 elettrone)

La rimozione del solo elettrone $5p^1$ lascia intatta la coppia $5s^2$, mantenendo lo stato di carica più basso (+1).

Configurazione In⁺: $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2$

2. Formazione di In³⁺ (Rimozione di 3 elettroni)

La rimozione completa dei tre elettroni di valenza ($5s^2$ e $5p^1$) porta alla configurazione elettronica stabile del guscio d completo.

Configurazione In³⁺: $[\text{Kr}] 4d^{10}$

Anioni e configurazioni di gas nobile

OSSIGENO E FLUORO

Anioni O^{2-} e F^{-}

Formano anioni acquistando elettroni fino alla configurazione del gas nobile Neon.

Configurazioni



AZOTO E FOSFORO

Anioni con Carica -3

Possono formare anioni con carica -3 nei composti, raggiungendo una configurazione a gas nobile.

Configurazione



IL CASO DEL CARBONIO

Tetranione C^{4-}

Il formalismo ionico può attribuire al carbonio carica -4 in alcuni carburi. La formazione di un tetranione isolato è fortemente sfavorita.

Formazione Sfavorita



Raggi ionici dei cationi

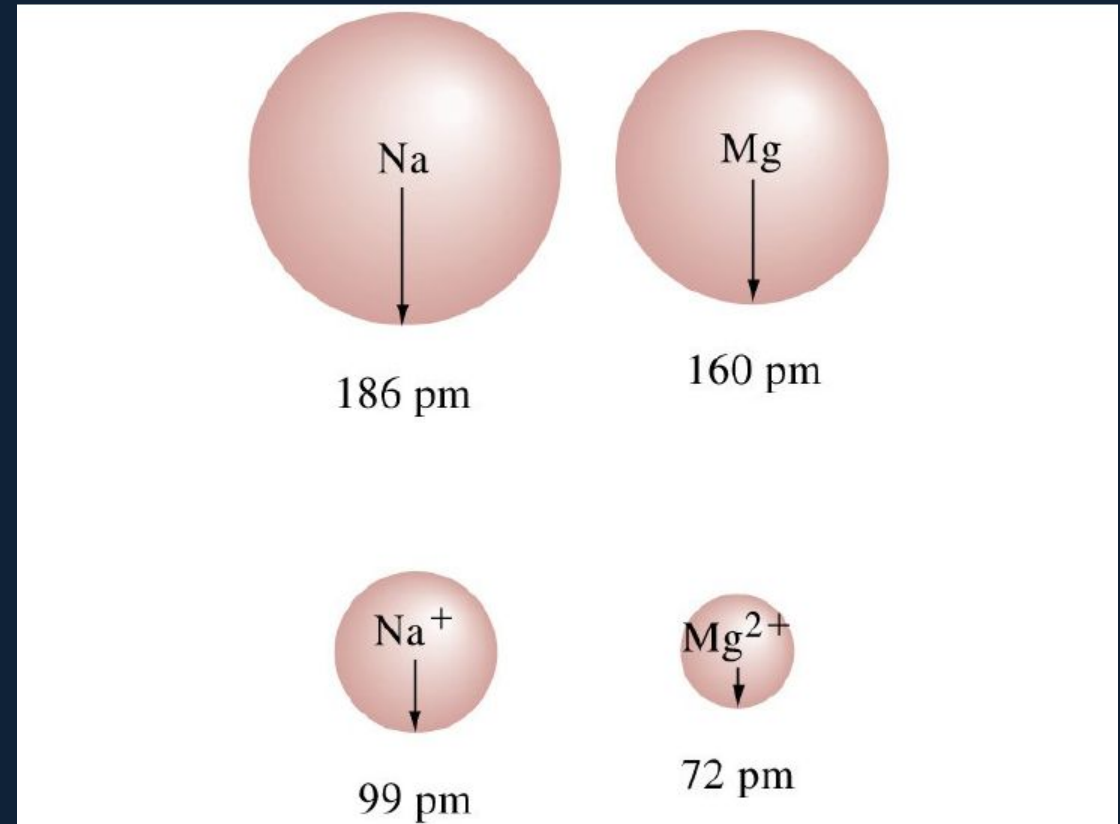
DEFINIZIONE OPERATIVA

Il raggio ionico descrive la dimensione attribuita allo ione. Si ricava, per esempio, dalle distanze tra nuclei nei cristalli misurate tramite diffrazione dei raggi X.

CONFRONTO CON L'ATOMO

Un catione è più piccolo dell'atomo neutro corrispondente, perché perde elettroni di valenza o parte di essi.

$$r(\text{catione}) < r(\text{atomo})$$



Raggi ionici degli anioni

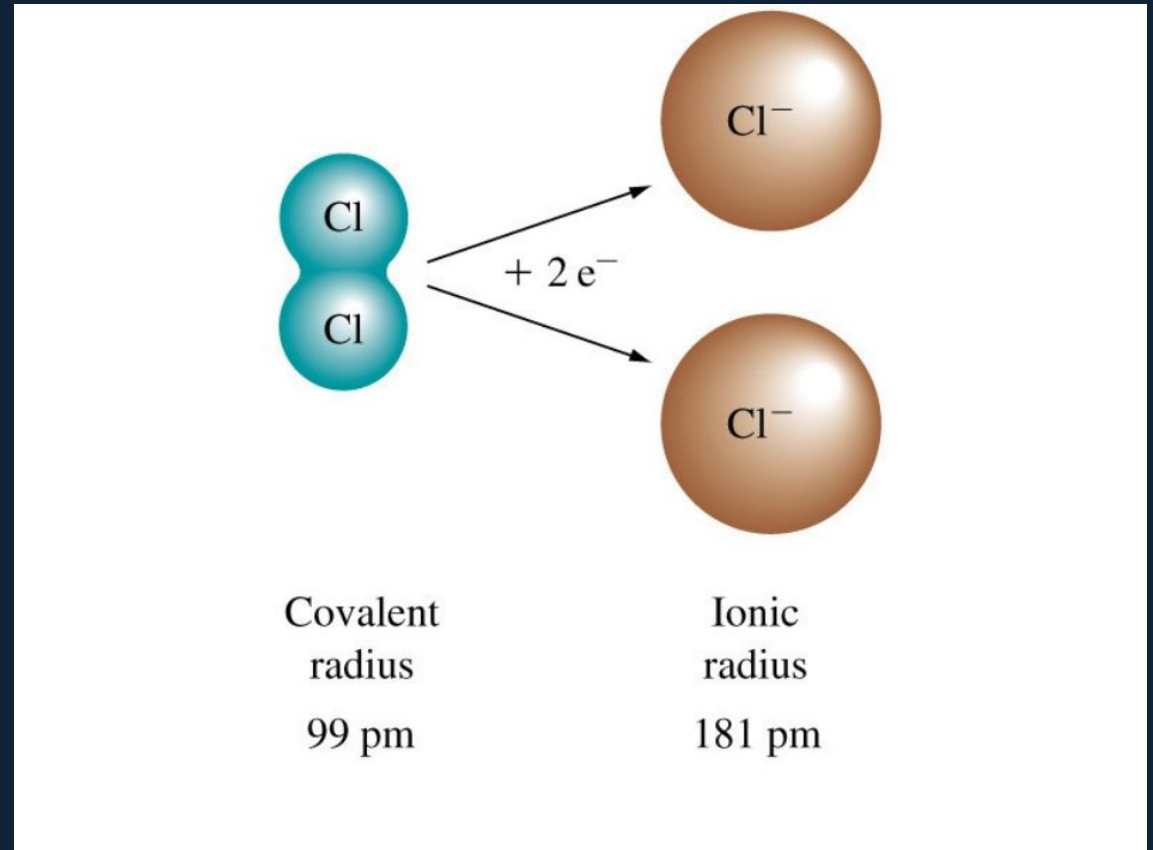
ACQUISTO DI ELETTRONI

Un anione è più grande dell'atomo neutro corrispondente, perché ha acquistato elettroni.

$$r(\text{anione}) > r(\text{atomo})$$

ESEMPIO: CLORO

La figura confronta il raggio covalente dell'atomo di cloro con il raggio dello ione cloruro.



Andamenti periodici dei raggi ionici

GRUPPI E SERIE ISOELETTRONICHE

I raggi aumentano scendendo lungo un gruppo. Nella stessa serie isoelettronica, una maggiore carica nucleare contrae lo ione. Cationi e anioni vanno confrontati separatamente.



Ione	Raggio (Å)	Isoelettronico con
Na ⁺	0,95	Ne
Mg ²⁺	0,65	Ne
Al ³⁺	0,50	Ne
S ²⁻	1,84	Ar
Cl ⁻	1,81	Ar

La granularità del mondo e la nostra scala

Di solito poi osserviamo il mondo a grandi scale, quindi non ne vediamo la granularità. Vediamo valori mediati fra tantissime piccole variabili. Non vediamo singole molecole: vediamo l'intero gatto. Quando ci sono tantissime variabili, le fluttuazioni diventano irrilevanti, la probabilità si avvicina alla certezza. I miliardi di variabili discontinue e punteggiate dell'agitato e fluttuante mondo dei quanti si riducono alle poche variabili continue e ben definite della nostra esperienza quotidiana. Alla nostra scala il mondo è come un oceano agitato dalle onde osservato dalla luna: una

— *piatta superficie di una biglia immobile.*
— Carlo Rovelli, *Helgoland*



«...una piatta superficie di una biglia immobile»